Júlio César da Silva

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA
DO FLUXO BIFÁSICO E DO
TRANSPORTE MULTICOMPONENTE EM
MEIOS POROSOS COM INTERAÇÃO
TERMO-QUÍMICA**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil do Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil - Geotecnia.

Orientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Rio de Janeiro
Setembro de 2004

Júlio César da Silva

**Modelagem e simulação numérica do fluxo bifásico
e do transporte multicomponente em meios porosos
com interação termo-química**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Presidente/Orientador

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Prof. Olavo Barbosa Filho

Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia– PUC-Rio

Prof. Tácio Mauro P. de Campos

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Dra. Andrea Ferreira Borges

CENPES/Petrobras

Prof. Marcio Arab Murad

LNCC

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial
do Centro Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 27 de Setembro de 2004

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Júlio César da Silva

Graduou-se em Engenharia Civil na EM/UFOP (Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto) em 1996, defendeu sua dissertação de mestrado em Engenharia Civil (Geotecnia) na PUC-Rio (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro) em 1999 e, atualmente, trabalha como pesquisador pelo TecGraf/PUC-Rio.

Ficha Catalográfica

Silva, Júlio César da

Modelagem e simulação numérica do fluxo bifásico e do transporte multicomponente em meios porosos com interação termo-química/ Júlio César da Silva; orientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Engenharia Civil, 2004.

v., 123 f: il. ; 29,7 cm

1. Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Civil – Teses. 2. Fluxo bifásico. 3. Transporte multicomponente. 4. Acoplamento químico. 5. Acoplamento térmico. 6. Oxidação química. 7. Método dos elementos finitos. 8. Meios porosos não saturados. I. Vargas Jr., Eurípedes do Amaral. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. III. Título.

CDD: 624

À minha pequena grande família.

Agradecimentos

Ao professor Vargas, orientador deste trabalho, pelos grandes ensinamentos durante a discussão deste tema e pelo direcionamento do enfoque do mesmo.

Ao Ondra Sracek pelos ensinamentos na área de geoquímica e pelas discussões de alguns resultados obtidos neste trabalho.

A Andrea Borges pelas trocas de informações sobre a modelagem do fluxo bifásico e ao professor Olavo pelas discussões sobre a drenagem ácida de resíduos mineiros.

A minha pequena grande família (minha esposa Fabrícia e minha filhinha Lavínia) pelo amor, compreensão e incentivo nos momentos difíceis.

A meus pais (Geraldo e Consolada), meus irmãos (Fabinho, Claudinha, Lange e Cris), meus sobrinhos (Pedro, Yasmim e Gabriela), meus cunhados, a família de minha esposa (agora minha, também) e a todos meus parentes e amigos de Ouro Preto, que torceram por mais esta conquista.

A todos os integrantes da eterna família PS (atuais e "ex"), atualmente Paulinho, Eugênio, Leitinho e Alfredo.

A meus amigos de longas datas no Rio de Janeiro: Bodim, Eudes, Cleide, Cadu, Isabelle, Antonio Sérgio, Fred Leal, Vitor, Heber, Ataliba e Anna Paula.

Aos demais amigos do TecGraf, em especial, Ivan, Fred, Turco, Lula, Camilo, Anderson, Pasquetti, Ramires, Sandra, Herivelto e Claudinei.

A ANP pelo apoio financeiro.

A todos colegas da pós-graduação não mencionados aqui, professores e funcionários do Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio e do TecGraf, que contribuíram de forma direta ou indireta para realização deste trabalho.

Em especial, a DEUS.

Resumo

Silva, Júlio César da; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral. **Modelagem e simulação numérica do fluxo bifásico e do transporte multicomponente em meios porosos com interação termo-química**. Rio de Janeiro, 2004. 123p. Tese de Doutorado — Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Este trabalho apresenta o estágio atual do desenvolvimento de uma ferramenta numérica para simulação e análise do fluxo bifásico e do transporte multicomponente e de calor em meios porosos com interação química em duas dimensões. O programa desenvolvido foi baseado no UNSATCHEM_2D escrito em linguagem Fortran. A discretização das equações diferenciais parciais é feita em elementos finitos no espaço e em diferenças finitas no tempo. Uma interface gráfica foi criada em linguagem Lua para a entrada dos dados e visualização dos resultados. Esta interface foi baseada no programa Mtool do TecGraf. O objetivo do trabalho foi implementar uma ferramenta que acoplasse diferentes processos em meios porosos: fluxo bifásico, transporte de solutos, processos químicos e temperatura. A ferramenta desenvolvida deverá ser útil em análises de problemas ambientais. Em particular, o enfoque deste trabalho é no acoplamento de processos químicos. Para isto, uma rotina de especiação química foi acoplada à cinética química com relevância na oxidação mineral. Para resolver o problema da especiação química, o programa Phreeqc foi utilizado. O trabalho apresenta detalhes dos processos de análise, de suas equações relevantes e da implementação numérica. No estágio atual de desenvolvimento, o programa é capaz de avaliar o transporte de metais e, em particular, a simulação da drenagem ácida em barragens de rejeito e pilhas de estéril sob condições complexas. Exemplos de validação e ilustrativos são mostrados e discutidos. São sugeridas algumas possibilidades de futuros acoplamentos à ferramenta numérica desenvolvida.

Palavras-chave

fluxo bifásico; transporte multicomponente; acoplamento químico; acoplamento térmico; oxidação química; método dos elementos finitos; meios porosos não saturados.

Abstract

Silva, Júlio César da; Vargas Jr., Eurípedes do Amaral. **Modelling and numerical simulation of the two phases flux and transport multi-component in the porous medium with no isothermic-chemical interaction.** Rio de Janeiro, 2004. 123p. D.Sc. Thesis — Departament of Civil Engineering, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This work presents the present stage of development of a numerical platform for simulation and analysis of two-phase flow and of, non isothermic, multicomponent transport in porous media with chemical interaction in two dimensions. The developed computer code is based on the UNSATCHEM_2D code written in Fortran language. The discretization of the partial differential equations is done by finite elements at the space and in finite difference at the time. A graphical interface was created in language Lua for the input of the data and result visualization. This interface was based on the program TecGraf's Mtool. The purpose of the work was to construct a numerical tool that couples different processes in porous media: flow (two-phase), transport of solutes, chemical processes and temperature. The developed tool should be useful in the analysis of environmental problems. In particular, the work focused on the coupling of chemical processes. For this, a chemical speciation routine was coupled to chemical kinetics with relevance to mineral oxidation. In order to solve the chemical speciation problem, the program Phreeqc was used. The work presents details of the analyzed processes, their relevant equations and of the numerical implementation. At the present stage of development, the computer program is able to evaluate the transport of metals and, at particular, the simulation of the acid mine drainage at tailings discharge and waste rock piles under complex conditions. Validation and illustrative examples are shown and discussed. Possibilities of future additions to the developed tool are suggested.

Keywords

flux two-phases; multicomponent transport; chemical interaction; non isothermic interaction; chemical oxidation; finite elements methods; unsaturated porous media.

Sumário

1	Introdução	19
2	Fluxo em meios porosos	21
2.1	Fluxo monofásico	21
2.2	Fluxo bifásico	22
3	Acoplamentos	28
3.1	Transporte de contaminantes em meios porosos	28
3.2	Acoplamento químico	35
3.3	Acoplamento térmico	43
3.4	Acoplamento biológico	47
3.5	Dissolução	50
4	Modelagem numérica	53
4.1	Métodos numéricos	53
4.2	Métodos iterativos	56
4.3	Modelagem em elementos finitos e diferenças finitas	59
5	Descrição da ferramenta numérica	72
5.1	Trabalho implementado	72
5.2	Descrição do programa de análise	74
5.3	Interface gráfica	76
5.4	Relevância	78
5.5	Aplicações	78
6	Exemplos	84
6.1	Exemplo de validação	84
6.2	Exemplos ilustrativos	96
7	Conclusões e sugestões	112
7.1	Conclusões	112
7.2	Sugestões para trabalhos futuros	113
	Referências Bibliográficas	115

Lista de Figuras

2.1	Relação entre B_l (para fase NAPL= B_o), B_g e R_s com a pressão (modificado de Huyakorn e Pinder, 1983 [14]). O ponto onde o valor da pressão é igual à pressão de formação de bolhas $P = 22700kPa$ está indicado com um triângulo (Borges, 2002 [81]).	25
3.1	Acoplamentos para transporte multicomponente em diversas fases.	31
3.2	Diferentes tipos de comportamento de partículas sólidas em reação (Levenspiel, 1974 [8]).	39
3.3	Modelo de núcleo não reagido (Levenspiel, 1974 [8]).	40
4.1	Ilustração gráfica do método iterativo de Picard em uma variável (Huyakorn e Pinder, 1983 [14]).	57
4.2	Ilustração gráfica do método iterativo de Newton-Raphson (Huyakorn e Pinder, 1983 [14]).	59
4.3	Ilustração do acoplamento termo-hidráulico.	67
5.1	Visão geral dos acoplamentos (os acoplamentos realizados neste trabalho estão em vermelho e itálico).	73
5.2	Fluxograma reduzido do programa TRANSBEQC (esta Tese).	75
5.3	Interface do TRANSBEQC.	76
5.4	Malha de elementos finitos.	77
5.5	Visualização dos resultados.	77
5.6	Ilustração dos cenários.	80
5.7	Modelo conceitual (adaptado por Sturm e Morgan, 1981).	81
5.8	Modelo conceitual (adaptado por Sturm e Morgan, 1981).	81
5.9	Grupo dos NAPL's.	82
5.10	Modelo Conceitual do DNAPL (Bedient et al., 1994 [52]).	83
5.11	Modelo Conceitual do LNAPL (Bedient et al., 1994 [52]).	83
6.1	Ilustração do cenário simulado no programa MINTRAN e TRANSBEQC.	85
6.2	Malha com o resultado do pH num dado passo de tempo.	86
6.3	Período de simulação = 1 ano	87

6.4	Período de simulação = 10 anos	87
6.5	Período de simulação = 24 anos	87
6.6	Escala de cores	87
6.7	Comparação entre os valores de pH obtidos pelo MIN-TRAN e desta Tese.	87
6.8	Comparação entre os valores de concentração de Fe (II) obtidos pelo MINTRAN e TRANSBEQC.	88
6.9	Ilustração do problema de difusão 1-D.	90
6.10	Malha de elementos finitos do problema de difusão 1-D.	90
6.11	Comparação entre os valores normalizados de concentração de O_2 obtidos pelo MINTOX e esta TESE.	90
6.12	Valores de variação do raio mineral ao longo dos anos.	91
6.13	Ilustração de uma coluna com infiltração de água na superfície e aquecimento na base.	92
6.14	Malha do ensaio de uma coluna com infiltração de água na superfície e aquecimento na base.	93
6.15	Variação do fluxo de ar decorrente da Temperatura no contorno (fluxo isotérmico).	93
6.16	Variação do fluxo de ar decorrente da Temperatura no contorno (fluxo não isotérmico).	93
6.17	Variação da temperatura com a profundidade.	94
6.18	Ilustração do ensaio de injeção de água (embebição) e injeção de ar (secagem).	95
6.19	Malha do ensaio de injeção de água (embebição) e injeção de ar (secagem).	95
6.20	Curva característica do solo (Curvas de embebição e secagem).	95
6.21	Dados da coluna.	97
6.22	Malha referente à coluna do exemplo.	97
6.23	Variação da concentração de cálcio ao longo da coluna com o tempo.	98
6.24	Variação da concentração de ferro (II) ao longo da coluna com o tempo.	98
6.25	Variação da concentração de sulfato ao longo da coluna com o tempo.	99
6.26	Variação do pH ao longo da coluna com o tempo.	99
6.27	Formação do gesso numa coluna.	100
6.28	Isoterma de adsorção do Zinco para vários valores de pH.	101

6.29 Variação da Concentração do Zinco adsorvido e em solução para diferentes valores de pH.	101
6.30 Ilustração do problema para avaliar a variação da temperatura na fonte em função das reações exotérmicas.	102
6.31 Malha de elementos finitos do problema para avaliar a variação da temperatura na fonte em função das reações exotérmicas.	103
6.32 Variação da temperatura na fonte em função das reações exotérmicas, logo abaixo da fonte (superfície do terreno).	103
6.33 Isotermas para o caso de existência de reações exotérmicas na fonte.	104
6.34 Comparação entre a variação do fluxo de calor para os casos com e sem reações exotérmicas na fonte.	104
6.35 Coluna usada no ensaio para verificação da influência da temperatura no fluxo bifásico.	105
6.36 Malha da coluna usada no ensaio para verificação da influência da temperatura no fluxo bifásico.	105
6.37 Variação da saturação decorrente da variação de temperatura no contorno.	106
6.38 Planta da Mina de Doyon (Sracek, 2004 [86]).	107
6.39 Modelo conceitual dos processos de transporte da mina de Doyon (Sracek, 2004 [86]).	107
6.40 Dados de entrada e condições de contorno da simulação da pilha.	108
6.41 Malha de elementos finitos usada na simulação da pilha.	108
6.42 Período de simulação = 12 meses	109
6.43 Período de simulação = 60 meses	109
6.44 Período de simulação = 162 meses	109
6.45 Escala de cores	109
6.46 Variação da temperatura na pilha.	110
6.47 Comparação da variação da temperatura na pilha ao longo de uma seção longitudinal (Tese x TOUGH2).	110
6.48 Vetores referentes ao fluxo de vapor no talude da pilha de estéril.	110
6.49 Comparação da variação da saturação na pilha ao longo de uma seção transversal (Tese x TOUGH2).	111

Lista de Tabelas

3.1	Alguns programas e os respectivos modelos de biodegradação.	50
5.1	Tarefas realizadas.	72
5.2	Principais características de alguns programas de transporte de contaminantes disponíveis na literatura.	79
5.3	Características do cenário da barragem de rejeito e da pilha de estéril.	80
6.1	Concentração na fonte dos componentes na fase líquida.	86
6.2	Concentrações da fase mineral inicial.	86
6.3	Parâmetros de difusão para simulação 1-D.	89
6.4	Dados para construção da curva característica.	96

Lista de Símbolos

- $[B]$ - matriz de derivadas das funções de interpolação
 B_f - fator volume de formação da fase f
 B_i - termo convectivo na equação de transporte (velocidade)
 b_m - taxa de decaimento microbial
 C_{ae} - concentração do acceptor de elétrons na solução
 C_f - concentração de soluto na fase f
 C_{fk} - concentração do componente em cada fase
 C_k^{int} - valor intermediário de concentração
 C_k^{phys} - concentração no final do passo físico
 C_l - concentração de um constituinte na fase líquida
 C_o - concentração de um constituinte na fase NAPL
 C_{oc} - concentração de carbono orgânico natural
 C_{pa} - capacidade de calor específico do ar seco do solo
 C_{pl} - capacidade de calor específico da água do solo
 C_{ps} - capacidade de calor específico dos sólidos no solo
 C_{pv} - capacidade de calor específico do vapor do solo
 C_N - concentração da substância no NAPL
 C_s - concentração de contaminante na fase sólida
 C_{sf}^m - grau de solubilidade do constituinte m na água
 C_v - concentração de um constituinte na fase gasosa
 C_w - concentração da substância na água
 c_w - capacidade térmica volumétrica da fase líquida
 $c(\theta)$ - capacidade térmica volumétrica do meio poroso
 D - coeficiente de difusão da substância
 D_{atm} - difusividade molecular para o vapor através do ar
 $D1(x)$ - coeficiente de difusão do meio poroso
 D_f - coeficiente de difusão molecular aparente
 D_h - Difusividade isotérmica
 D_{ij} - Tensor do coeficiente de difusão efetivo da matriz de solo do O_2 na fase gasosa
 D_{ijf} - tensor de coeficientes de dispersão hidrodinâmica na fase f

D_{ijl} - tensor de coeficientes de dispersão hidrodinâmica na fase líquida

D_{ijo} - tensor de coeficientes de dispersão hidrodinâmica na fase líquida do

NAPL

D_{ijv} - tensor de coeficientes de dispersão hidrodinâmica na fase gasosa

$[DT]$ - matriz de difusividades térmicas no ar e no vapor

D_{Ta} - Difusividade térmica de “molhagem”

D_{Tv} - Difusividade térmica de vapor

E_{ii} - termo dispersivo na equação de transporte (dispersividade)

F - razão entre o consumo de elétron acceptor e o do contaminante

FR - fator de retardamento

FS - fluxo de massa de soluto por unidade de área por unidade de tempo

g - aceleração da gravidade

h - umidade relativa

H_c - capacidade de calor específico do solo

h_n - coeficientes desconhecidos representando a solução da equação nos

pontos nodais

j - nível de tempo anterior

$j + 1$ - nível de tempo corrente em que a solução está sendo considerada

J_{ca_i} - fluxo de O_2 causado pela convecção na fase gasosa

J_{da_i} - fluxo de O_2 causado pela difusão na fase gasosa

J_{cw_i} - fluxo de O_2 causado pela convecção na fase dissolvida

J_{dw_i} - fluxo de O_2 causado pela difusão na fase dissolvida

K - permeabilidade

$[K]$ - tensor de permeabilidades absolutas com influência dos coeficientes

térmicos (D_h , D_{TV} e D_{Ta})

k_{oc} - taxa de decaimento de 1ª ordem do carbono orgânico natural

K_{ae} - constante de meia saturação do acceptor de elétrons

K_c - constante de meia saturação do contaminante

K_d - coeficiente de distribuição

K_D - coeficiente de partição solo-água

K_f - função que descreve a sorção do soluto no solo (isoterma de sorção)

K_H - constante da lei de Henry

K_{ij} - tensor de permeabilidades absolutas do solo

K_L - coeficiente de partição água óleo

k_{rf} - permeabilidade relativa do solo para a fase f

k_{rw} - permeabilidade relativa do solo para água

K_t - coeficiente de transferência de massa

L - calor latente de vaporização da água do solo

LL - operador diferencial espacial

- M_t - concentração microbiana total
 $[N]$ - matriz das funções de interpolação
 n - porosidade
 n_{ar} - porosidade preenchida pelo ar
 N_c - número de componentes presentes em cada fase
 ND - ganho de massa por dissolução
 $n_{saturada}$ - porosidade saturada com água
 $NumPN$ - número total de pontos nodais
 O_a - concentração volumétrica de O_2 na fase gasosa
 O_T - concentração volumétrica total de O_2
 P - Produção de O_2
 p_f - pressão da fase f
 $p_{n/w}$ - pressão capilar entre as duas fases
 p_v - pressão parcial de vapor no meio poroso
 $\{p_w^{t+\Delta t}\}$ - vetor nodal da pressão da fase molhante no passo atual
 Q - fluxo total de calor
 q - remoção ou consumo de O_2 dissolvido do solo pela oxidação biológica (ação de bactérias) ou oxidação química
 Q_f - fonte da fase f
 $[Q]_{j+\epsilon}$ - matriz de coeficientes
 $\{q_n\}$ - vetor nodal da vazão prescrita da fase não molhante
 $\{q_w\}$ - vetor nodal da vazão prescrita da fase molhante
 Q_w - fonte
 $q(x, t)$ - termo de armazenamento devido consumo de oxigênio pelas partículas
 R - constante específica do gás
 r - taxa de destruição da pirita em mol/m^2s
 R_k^{equil} - massa relativa (M/M) gerada ou consumida instantaneamente no equilíbrio do sistema no tempo $t + \Delta t^{equil}$
 R_s - razão de solubilidade do gás no líquido
 rr - contador de iteração com valor inicial igual a 1
 $\frac{r}{v_c}$ - inclinação da linha formada em um gráfico monolog da concentração de contaminante versus o gradiente de distância ao longo da trajetória de fluxo
 s e $s + 1$ - níveis de tempo anterior e atual, respectivamente
 S_f - grau de saturação da fase f
 S_w - grau de saturação da água
 $\{S_w^t\}$ - vetor nodal do grau de saturação da fase molhante no passo anterior
 $\{S_w^{t+\Delta t}\}$ - vetor nodal do grau de saturação da fase molhante no passo atual
 T - temperatura

T_0 - temperatura de referência

$temp$ - temperatura em Kelvin

t_c - tempo a partir do qual a pressão de ar se iguala a $102kPa$ no topo

$\{T_t\}$ - vetor nodal de temperaturas determinado pela solução da equação de calor

U_A^* - concentração de oxigênio no meio poroso, o asterisco indica que a variável é dimensional

v_c - velocidade do contaminante retardada na direção x

V_{dgs} - volume de gás medido nas condições padrão (V_f), dissolvido nas condições de pressão em questão

V_f - volume da fase f medido nas condições de pressão em questão

$|\bar{v}_f|$ - valor absoluto da velocidade de percolação

V_{fs} - volume medido nas condições padrão (atmosféricas)

v_{if} - velocidade do fluxo da fase f na direção i , calculada pela lei de Darcy

$\bar{v}_{if}$ - velocidade de percolação

v_{ig} - velocidade na direção i das fases gasosa

v_{il} - velocidade do fluxo da fase líquida na direção i , calculada pela lei de Darcy

v_{io} - velocidade do fluxo da fase líquida do NAPL na direção i , calculada pela lei de Darcy

v_{iv} - velocidade do fluxo da fase gasosa na direção i , calculada pela lei de Darcy

V_{ls} - volume unitário de líquido contido no solo (V_f)

X - parâmetro qualquer

$x_1, x_2, \dots, x_n$ - variáveis desconhecidas

Y - coeficiente de produção microbiana

z - coordenada vertical

α - fator de ponderação no tempo ($\alpha \in [0, 1]$)

α_{lf} - coeficientes de mistura mecânica longitudinal

α_{tf} - coeficientes de mistura mecânica transversal

α_x - dispersividade

δ_{ij} - delta de Kronecker

Δt - incremento de tempo

$\delta(t + \frac{\Delta t}{2})$ - função delta de Dirac ($1/T$)

Δx_i - comprimento característico de um elemento finito

Δx_j^{r+1} - vetor deslocamento

Δt_j - variação do tempo

ε - tolerância prescrita para valores de x

η - teor volumétrico de vapor

Γ_e - segmento do contorno do elemento e

γ_l - densidade do líquido

λ - coeficiente de condutividade térmica do solo

λ_b - taxa de decaimento biológico de 1ª ordem

λ_d - taxa de decaimento de 1ª ordem na unidade de t^{-1}

λ_{ij} - coeficiente de condutividade termal aparente do solo

λ^m - coeficiente de transferência de massa do constituinte m que incorpora

a área interfacial

μ_f - viscosidade cinemática da fase f

μ_l - constante de 1ª ordem para degradação na fase líquida

μ_{max} - taxa de utilização máxima da concentração por unidade de massa

de microorganismos

μ_o - constante de 1ª ordem para degradação na fase NAPL

μ_s - taxa constante de 1ª ordem para degradação na fase sólida

μ_v - constante de 1ª ordem para degradação na fase gasosa

μ_w - viscosidade cinemática da água

ν_v - fator de fluxo de massa

Ω_e - domínio ocupado pelo elemento e

ω_s - índice de performance

Φ - teor de calor do solo

ϕ - potencial hidráulico

ϕ_f - potencial hidráulico da fase f

ϕ_g - função potencial da fase gasosa

ϕ_l - função potencial da fase líquida

ϕ_N - teor volumétrico de NAPL

ϕ_n - funções lineares básicas que satisfazem a condição $\phi_n(x_m, z_m) = \delta_{mn}$

Ψ - carga de pressão

ρ - densidade da fase sólida

ρ_0 - massa específica do vapor d'água saturado

ρ_d - massa específica seca do solo

ρ_f - massa específica da fase f

ρ_s - densidade dos sólidos do solo

τ_v - fator de tortuosidade para difusão de gases nos solos

θ - umidade volumétrica

θ_a - umidade volumétrica do ar

θ_g - umidade volumétrica do ar no solo

subscritos:

f - fase do fluido

g - fase gasosa

l - fase líquida

m - constituinte químico

N - fase NAPL

n - fase mineral

o - matéria orgânica

w - fase líquida (água)