

EVAPORAÇÃO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS
UTILIZANDO MODELOS DE REDES TRIDIMENSIONAIS

Júlio César Castelo Branco Reis Moreira

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA ESCOLA DE QUÍMICA DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR.

Aprovada por:

Prof. Krishnaswamy Rajagopal, Ph.D – Orientador.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

OUTUBRO DE 2006

Moreira, Júlio César Castelo Branco Reis.

Evaporação de Fluidos em Meios Porosos Utilizando Modelos de Redes Tridimensionais. Rio de Janeiro – 2006

XIII, 160 p. 29,7cm (Escola de Química/UFRJ, D.Sc., Engenharia Química, 2006)

Dissertação (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2006.

Orientador: Krishnaswamy Rajagopal

1. Evaporação em Meios Porosos
2. Modelos de Rede
3. Exploração de Petróleo

I. ESCOLA DE QUÍMICA/UFRJ II. Título (série).

AGRADECIMENTOS

A Deus, acima de todas as coisas.

A minha esposa e filhos pelo amor e incentivo.

Ao professor Krishnaswamy Rajagopal pela orientação e apoio no desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus pais.

Aos meus amigos de caminhada pelo carinho, atenção e amizade.

Ao Instituto Nacional da Propriedade Industrial – INPI pela oportunidade de crescimento profissional.

À Bete, ao Lucas e ao Caio

Resumo da Tese apresentada à ESCOLA DE QUÍMICA/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

EVAPORAÇÃO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO MODELOS DE REDES TRIDIMENSIONAIS

Júlio César Castelo Branco Reis Moreira

Outubro/2006

Orientador: Krishnaswamy Rajagopal

Programa: Engenharia Química

São apresentados os resultados dos estudos de simulação da evaporação de um fluido em um meio poroso capilar. Empregando um modelo de rede correlacionado do tipo sítio-ligação tridimensional para representar um meio poroso, o arenito de Clashac, diferentes aspectos da distribuição de fases devido à evaporação foram analisados em um fluido único no meio poroso.

Como uma consequência direta do meio poroso utilizado foi analisada a influência de meios porosos fortemente desordenados com uma ampla distribuição de tamanhos de poros e gargantas no processo de evaporação.

Dados experimentais juntamente com as distribuições de poros e gargantas foram usados na construção e ajuste do modelo de rede, permitindo a determinação da curva porosimétrica para o arenito de Clashac para diferentes graus de correlação. Também, o comprimento de correlação foi obtido da teoria da percolação.

No caso estudado o processo de evaporação foi insensível aos diferentes graus de correlação que poderiam ocorrer entre poros e gargantas. Em adição, foi observado que o padrão de evaporação foi o mesmo para todas as redes analisadas acima do comprimento de correlação.

Abstract of Thesis presented to ESCOLA DE QUÍMICA/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

**EVAPORATION OF FLUIDS IN POROUS MEDIA
USING 3-D NETWORK MODELS**

Júlio César Castelo Branco Reis Moreira

October/2006

Advisor: Krishnaswamy Rajagopal

Department: Chemical Engineering

We present the results from simulation studies of evaporation of a single fluid in a capillary porous medium. Employing a three-dimensional site-bond correlated network model to represent a porous medium, namely Clashac sandstone, we analyze different aspects of the phase distribution by evaporation of a single fluid in the porous medium.

As a direct consequence of the porous medium utilized we analyze the influence of a strongly disordered porous media with a broad range of pore and throat size distributions in the evaporation process.

Experimental data together with throat and pore size distributions were used to build and match the network model, allowing determining the porosimetric curve for the Clashac sandstone for different degrees of correlation. Also, the correlation length was obtained from the percolation theory.

In our case study the evaporation process modeled was insensitive to the different degrees of correlation that might occur between pores and throats. In addition, it was observed that the evaporation pattern was the same for all analyzed networks above the correlation length.

SIMBOLOGIA

c é a concentração total do sistema;

$C_{A,\infty}$ é a concentração da espécie A no gás circundando a rede gerada;

$C_{A,i}$ é a concentração da espécie A na interface líquido-gás;

d é o diâmetro da garganta aonde a evaporação acontece;

\bar{d} é a dimensão euclidiana do sistema;

D_{AB} é o coeficiente de difusão entre os componentes A e B;

D_f é a dimensão fractal do sistema;

ESP é o espaçamento da rede gerada;

g é a constante gravitacional;

h é uma altura qualquer no meio poroso no eixo de referência;

k_A é o coeficiente de transferência de massa convectivo em relação ao componente A;

M_A é a massa molar do componente A;

$N_{A,z}$ é o fluxo molar unidimensional na direção z do componente A através do componente B;

$N_{B,z}$ é o fluxo molar unidimensional na direção z do componente B através do componente A;

$n_{A,z}$ é o fluxo mássico unidimensional na direção z do componente A através do componente B;

P é a pressão do sistema;

p_{vap} é a pressão de vapor corrigida do componente líquido A no sistema;

p_{vap}^0 é a pressão de vapor do componente A considerando uma superfície lisa;

P_c é a pressão capilar;

$P_c(0)$ é a pressão capilar tomada na origem do eixo de referência;

$P_c(h)$ é a pressão capilar na altura especificada h ;

$p_{A,i}$ é a pressão parcial do componente A na interface líquido-gás;

$p_{A,\infty}$ é a pressão parcial de referência do componente A na fase gasosa;

$p_{A,2}$; $p_{A,1}$ são as pressões parciais do componente A no poro 1 e 2;

R é a constante universal dos gases;

r é o raio da garganta considerada;

T é a temperatura do sistema;

TAMPOROS é o tamanho de cada poro analisado dentro meio poroso;

V é o volume do sistema;

y_L é a fração molar do componente L na mistura binária;

Símbolos Gregos

β e ν expoentes críticos das leis de escala na teoria da percolação

ξ é o comprimento de correlação do sistema ζ

σ é a tensão superficial do líquido;

$\Delta\rho$ é a diferença entre as massas específicas do líquido e do gás e igual a $\rho_l - \rho_g$;

ρ_A é a massa específica do componente A na fase líquida;

ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Representação de um meio poroso utilizando uma modelagem discreta....	32
Figura 2 - Modelos de redes estruturadas.....	34
Figura 3 - Modelo de rede utilizado.....	35
Figura 4 - Redes 10 x 10 x 10. (4.1) rede não correlacionada, (4.2) parâmetro de correlação de 60%.....	38
Figura 5 – Percolação em rede quadrada.....	40
Figura 6 – Evaporação no modelo de rede.....	42
Figura 7 – Célula de difusão de Arnold.....	48
Figura 8 – Fluxograma do processo de evaporação.....	52
Figura 9 – Forma capilar da interface líquido-gás.....	53
Figura 10 – Distribuição de Gargantas e Poros.....	58
Figura 11 – Função de Distribuição Cumulativa de Gargantas e Poros.....	59
Figura 12 – Estatística de Distribuição de Tamanhos.....	60
Figura 13 – Curva Porosimétrica para o Arenito de Clashac.....	61

Figura 14 – Efeito da Correlação entre Tamanhos de Gargantas e Poros na Curva de Intrusão de Mercúrio.....	62
Figura 15 – Comprimento de correlação para o sistema analisado.....	64
Figura 16 – Arenito de Clashac Simulado.....	66
Figura 17 – (a.1) Início; (a.2) 66% dos poros evaporados antes do ar alcançar a base do meio poroso; (a.3) ar atinge a base do meio poroso; (a.4), (a.5) momentos posteriores; (a.6) final do processo	67
Figura 18 – Três Etapas Principais na Evaporação.....	69
Figura 19 – (b.1) Poros evaporados no DCP; (b.2) Poros restantes (não evaporados) no DCP; (b.3) Poros pertencendo ao “cluster” de líquido principal no DCP.....	70
Figura 20 – Diferentes graus de correlação entre poros e gargantas e sua influência na evaporação. (c.1) - 20%; (c.2) - 40%; (c.3) - 60% e (c.4) - 80% de interação.....	73
Figura 21 – Influência do tamanho de rede no processo de evaporação. (d.1) – rede 10x10x10; (d.2) – rede 15x15x15; (d.3) – rede 20x20x20.....	74
Figura 22 - Número de “Clusters” em Função da Distribuição de Tamanhos de Gargantas no Meio Poroso.....	76
Tabela 1 – Propriedades do Arenito de Clashac.....	54
Tabela 2 – Distribuição de “clusters” no Início do Processo de Evaporação.....	65

ANEXOS

ANEXO I - Programa Fonte para a Evaporação de Fluidos em Meios Porosos em Linguagem FORTRAN..... 88

ANEXO II - Programa para criar um arquivo em VRML para gerar o meio poroso analisado..... 154

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	01
1.1	Motivação	01
1.2	Objetivos	02
1.3	Organização da Tese	04
2	ESTUDO DA EVAPORAÇÃO EM MEIOS POROSOS	07
3	MODELO DE REDE UTILIZADO	31
3.1	Descrição do Modelo de Rede	31
3.2	Representação do Meio Poroso	32
3.3	Construção do Modelo de Rede	33
3.4	Modelo de Rede Estruturada e Correlacionada	34
3.5	Fractais e as Propriedades do Meio Poroso	38
3.6	Estrutura do Meio Poroso e a Teoria da Percolação	39
3.7	Equações Governantes da Evaporação no Meio Poroso	42
3.7.1	A Evaporação Devido aos Efeitos Capilares	42
3.7.2	O Efeito Kelvin-Thomson e Sua Influência no Padrão de Evaporação	50

4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	54
4.1	Linguagem Utilizada	54
4.2	Os Dados Experimentais e o Ajuste do Modelo	54
4.3	Determinação do Comprimento de Correlação	63
4.4	Evaporação na Rede	56
5	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	77
5.1	Conclusões	77
5.2	Recomendações	79
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	81

1. INTRODUÇÃO

Nas diferentes áreas do conhecimento os meios porosos são objetos de estudos intensivos visando à compreensão dos mecanismos que regem os processos a eles relacionados. Na medicina, agricultura, química, meio ambiente e em muitas outras áreas, os processos envolvendo a transferência de calor, transferência de massa, os processos relacionados ao fluxo de substâncias nesses meios porosos, a própria compreensão da sua morfologia têm levado ao desenvolvimento de trabalhos que procuram melhorar o entendimento dos fenômenos que ocorrem à nossa volta e assim facilitar a nossa vida. Uma área de nosso especial interesse diz respeito à evaporação de fluidos em meios porosos.

1.1. MOTIVAÇÃO

A evaporação de fluidos em meios porosos tem sido estudada como uma possível técnica de recuperação utilizada durante a exploração de reservatórios de petróleo [1,2,3,4]. Por exemplo, em reservatórios fraturados distingue-se uma porosidade associada às fissuras e uma porosidade associada à matriz ou bloco. Durante a etapa de produção primária, o petróleo produzido provém essencialmente das fissuras, regiões geralmente associadas a permeabilidades elevadas. Após a produção inicial desse óleo das fissuras, uma grande quantidade de óleo resta ainda presa nos blocos. Uma das técnicas de recuperação consiste na drenagem gravitacional, onde o óleo contido nos blocos escoar por efeito gravitacional para as fissuras, produzindo-se uma outra parte desse óleo restante. Existem casos onde o óleo retido nos blocos não escoar para as fissuras. Estes casos estão relacionados a blocos de baixa permeabilidade e de pequenas dimensões, onde as forças capilares são intensas o suficiente para evitar o escoamento gravitacional. Nestes sistemas, tem-se estudado que a injeção de um gás seco pode ser uma opção para se aumentar a recuperação de óleo do reservatório. Isto poderia ser feito, por exemplo, através da vaporização induzida dos componentes leves e/ou intermediários pela injeção de um gás [2,3,5]. Também, na produção de óleos pesados, durante a recuperação por mecanismo de gás em solução, tem-se que a evaporação exerce um papel importante e ainda pouco compreendido [1]. Este é o caso, por exemplo, de óleos pesados contendo bolhas de gás dispersas ou aprisionadas que são

produzidas junto com esses óleos. Para alguns reservatórios contendo óleos deste tipo têm-se observado taxas de produção maiores do que as esperadas, baixas razões gás-óleo e altos fatores de recuperação. Este comportamento diferente do esperado tem levado os pesquisadores a propor diferentes mecanismos de produção para justificar o observado.

A evaporação é, ainda, uma das opções para remediação de solos contaminados devido ao uso intensivo de pesticidas em plantações, ao descarte inapropriado de resíduos químicos em terrenos baldios ou vazamento de hidrocarbonetos em tanques de combustíveis [6-8]. Uma das técnicas de remediação de solos emprega, por exemplo, a extração de vapor do solo ou ventilação do solo através da injeção de ar ou de um gás específico para limpeza da região contaminada. Basicamente, nesta técnica ocorre a evaporação dos líquidos contaminantes do meio poroso em uma corrente de ar forçada, induzida por um sistema de bombas de vácuo posicionadas estrategicamente de forma a otimizar a recuperação.

A evaporação é ainda uma etapa de processo bastante útil na área farmacêutica para a preparação de medicamentos, na silagem de grãos na área de alimentos e nos processos de preparação de catalisadores utilizados na indústria química.

1.2. OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho é avaliar de forma adequada os coeficientes de transporte e as propriedades morfológicas, topológicas e dinâmicas desses meios porosos visando melhorar o projeto, operação e controle dos processos industriais onde ocorre evaporação. Para este fim será feita a simulação da evaporação de fluidos em meios porosos por métodos microscópicos, utilizando os conceitos de modelos de redes para uma representação idealizada do meio poroso, bem como os conceitos advindos da teoria da percolação. Dados experimentais reportados na literatura sobre a evaporação de fluidos em meios porosos serão utilizados no presente estudo para verificação do modelo.

Em um aspecto mais básico, sabe-se que meios porosos naturais apresentam correlações espaciais em suas estruturas [9-14]. Muitas vezes, essas correlações não são levadas em consideração nas formulações dos modelos apresentados na literatura. Este fato, por exemplo, é considerado como uma das principais limitações apresentadas pelos críticos na utilização de modelos de rede para representação de meios porosos. Eles observam que o excesso de aleatoriedade na construção das redes dá resultados que não podem ser comparados com testes em meios porosos reais.

Um outro objetivo deste trabalho é o de simular o meio poroso tridimensionalmente, ao invés da modelagem bidimensional mais utilizada na literatura. Embora os modelos bidimensionais possam ser comparados mais prontamente com medidas experimentais, sabe-se que algumas limitações existentes nos modelos bidimensionais não estão presentes ou são desprezíveis em modelos tridimensionais. É o caso, por exemplo, da formação de ilhas isoladas de um líquido que evapora em um meio poroso. Na nomenclatura usual da teoria da percolação essas ilhas são comumente denominadas de “clusters”. Ao longo deste trabalho as palavras “cluster” e “ilha” serão usadas como sinônimos, sem prejuízo do seu significado físico. Nos modelos bidimensionais os parâmetros de escala são diferentes se forem levados em conta a existência dessas ilhas isoladas. No caso tridimensional, por exemplo, a fração do fluido invasor presente no meio poroso, no ponto de percolação, é o mesmo independente da existência das ilhas de líquido formadas. Hoje, sabe-se que as diferenças apresentadas têm menos a ver com a dimensionalidade da rede gerada do que com a estrutura formada ser plana ou não planar [15]. De qualquer forma, modelos tridimensionais são mais genéricos e mais representativos de meios porosos reais e serão utilizados nesta tese.

Também, um objetivo é estudar a influência dos conceitos de modelos de redes e teoria da percolação para representar meios porosos. Sabe-se que uma grande limitação dos modelos apresentados na literatura é não considerar aspectos cruciais das redes geradas. É sabido, por exemplo, que uma propriedade existente em sistemas de percolação, o comprimento de correlação (ξ) [12,16] está relacionado com a escala de comprimento (L) acima da qual uma rede de percolação é macroscopicamente homogênea. Para que as propriedades macroscópicas do sistema analisado sejam independentes desta escala, é

necessária a determinação do comprimento de correlação do sistema, possibilitando-se então uma análise adequada do mesmo.

Um outro objetivo é analisar a secagem de um meio poroso quando da evaporação de um líquido puro. No caso da evaporação de um fluido em um meio poroso, Freitas e Prat [5] informam que o aparecimento de ilhas de líquido isoladas ocorre muito mais cedo em sistemas bidimensionais do que em três dimensões. Isto teria uma influência direta no processo de evaporação, uma vez que quando já não existe mais uma ilha isolada de líquido atravessando toda a rede, o processo de difusão na fase líquida seria limitado pelas ilhas de líquido localizadas próximas à interface do meio poroso.

Por fim, será verificada a influência da desordem no processo de evaporação de um fluido em meio poroso apresentando uma distribuição natural de poros e gargantas. Em um trabalho anterior [5], usou-se um meio poroso fracamente desordenado, com uma distribuição de tamanho de poros e gargantas na faixa de 0,1 μm a 1,0 μm para estudar os gradientes de tensão superficial em uma mistura líquida binária em um meio poroso. Em outro estudo [17], usou-se um modelo de rede tridimensional para levar em consideração aspectos específicos da secagem, com o comprimento das gargantas escolhidos na faixa de 100 μm a 700 μm para representar o meio poroso simulado. No presente estudo, foi utilizado um meio poroso real, especificamente o arenito de Clashac, que possui uma distribuição de tamanho de gargantas na faixa de 1 μm to 100 μm . Espera-se que com o uso de tais dados se possam obter resultados mais representativos do processo de evaporação em um meio poroso.

1.3. ORGANIZAÇÃO DA TESE

Uma revisão bibliográfica é feita no capítulo 2, tratando dos diferentes estudos na literatura sobre a evaporação em meios porosos. Tratando o meio poroso sob a teoria do contínuo, têm-se tentado verificar o comportamento de plumas de contaminação em solos. As plumas de contaminação referem-se a regiões do solo contendo bolsões de contaminantes. Estes contaminantes, por exemplo, podem ser pesticidas utilizados em plantações ou mesmo vazamento de tanques de combustíveis em uma indústria. As plumas podem se situar acima do lençol freático, quando os componentes que a

compõem são mais leves do que a água. Quando os componentes são mais pesados que a água, essa região do solo contendo os contaminantes situa-se abaixo do lençol freático. Com uma abordagem mais voltada aos parâmetros da teoria da percolação, a nucleação de bolhas dentro de um meio poroso saturado com um fluido tem sido analisada. Também, têm-se utilizado modelos de rede para representar um meio poroso contendo um fluido que evapora. Estes estudos procuram determinar quais os fatores governantes na evaporação de um fluido em um meio poroso e quais os parâmetros que devem ser levados em consideração com o objetivo de melhor entendermos os processos onde a evaporação ocorre. Da análise destes estudos na literatura, observa-se que nem sempre os resultados obtidos da simulação foram concordantes com o observado experimentalmente. Por exemplo, podem-se citar as diferenças observadas nas taxas de evaporação experimental e simulada. Usualmente esta última subestima os resultados obtidos experimentalmente.

O modelo de rede a ser construído é discutido no capítulo 3. São apresentadas as premissas para a representação do meio poroso, juntamente com uma breve descrição dos parâmetros a serem determinados utilizando-se para isso a teoria da percolação e a teoria dos fractais. Em adição, são apresentadas as equações governantes do processo de evaporação adotadas no presente trabalho, bem como as hipóteses assumidas e as limitações existentes na abordagem utilizada.

Os resultados da simulação efetuada para a construção do meio poroso são apresentados no capítulo 4, sendo feita uma comparação entre os resultados obtidos das propriedades da rede gerada e os dados experimentais disponíveis na literatura. Também, os resultados obtidos da simulação do processo de evaporação são apresentados neste capítulo, onde é analisado o efeito das correlações existentes entre gargantas e poros do meio poroso simulado, assim como a influência do tamanho da rede no processo de evaporação e o abaixamento da pressão de vapor causado pela variação dos tamanhos de poros e gargantas no meio poroso.

Os resultados obtidos da simulação são mostrados no capítulo 5, tanto no que se refere à construção do meio poroso quanto ao processo de evaporação que ocorre dentro do mesmo.

As conclusões do presente trabalho são apresentadas no capítulo 6 e são feitas recomendações para trabalhos futuros.

No Anexo I é apresentado o programa fonte em linguagem FORTRAN englobando tanto a construção do meio poroso quanto o processo de evaporação de um fluido dentro do mesmo.

No Anexo II, também em linguagem FORTRAN, é apresentado um arquivo que gera um outro arquivo de entrada para visualização tridimensional do meio poroso gerado. Esse arquivo de entrada é escrito em VRML (Virtual Reality Modeling Language).

2. ESTUDO DA EVAPORAÇÃO EM MEIOS POROSOS

Neste capítulo é apresentada a revisão bibliográfica sobre o assunto, tratando-se das diferentes abordagens utilizadas na literatura para representar a evaporação de fluidos em meios porosos. Em maior detalhe, as abordagens e hipóteses assumidas direta ou indiretamente associadas à construção numérica e/ou física de modelos de rede serão realçadas, será feita a análise microscópica do meio poroso e o uso da teoria de percolação para estimar parâmetros associados às propriedades das redes geradas e à análise dos resultados obtidos dos experimentos realizados.

Uma das abordagens utilizadas para o estudo da evaporação de fluidos em meios porosos, que será aqui apenas lembrada, consiste no uso de métodos que empregam a teoria cinética para a modelagem em meios porosos, tal como lattice-gas cellular automata ou métodos relacionados, tal como o método lattice-Boltzmann. De forma simplificada, os lattice-gas cellular automata são modelos discretos de fluidos, onde partículas idênticas saltam de um sítio a outro em uma rede regular, obedecendo regras de espalhamento simples quando essas partículas colidem. Esses modelos tem sido empregados não só no estudo da evaporação de fluidos em meios porosos, mas também para determinação de propriedades de meios porosos, tais como permeabilidade, molhabilidade e fluxo bifásico dentro desses meios [18-21].

Uma outra abordagem é utilizada no presente estudo, onde modelos de redes de percolação são usados para a construção de meios porosos e análise de um fenômeno físico de particular interesse, no caso a evaporação de fluidos em meios porosos onde forças capilares dominam o processo.

A utilização de modelos de redes de percolação para estudo da evaporação de fluidos em meios porosos é relativamente recente. Tradicionalmente a evaporação de fluidos em meios porosos tem sido tratada sob o enfoque do meio poroso como um contínuo [22]. Neste aspecto, é feita uma abordagem fenomenológica do meio poroso, aplicando-se as equações de transporte a um meio poroso contínuo fictício. As equações descrevendo o transporte de calor e massa são formuladas considerando-se um volume

elementar médio representativo do meio poroso em questão. As relações dos fluxos com seus gradientes são feitas através de coeficientes empíricos. Por exemplo, os coeficientes de transporte efetivos têm que ser determinados através de experimentos, uma vez que não existe um método geral para prever seus valores. Também, na abordagem do meio poroso como um contínuo, essencialmente não se levam em consideração os efeitos da sua micro-estrutura, perdendo-se com isso informação valiosa sobre aspectos quantitativos do processo.

Os primeiros trabalhos de simulação em modelos de redes em meios porosos, citados na literatura, que abordam aspectos relacionados à evaporação são os trabalhos de Daian & Saliba [23] e Nowicki et al [24].

Na tentativa de modelar a condensação de umidade em concreto, Daian & Saliba [23] propuseram representar a estrutura porosa de um corpo de prova por meio de uma rede cúbica simples utilizando os princípios da teoria de percolação. Em seu artigo, citam que os fenômenos fundamentais que interferem no comportamento da umidade dentro de um material poroso em condições moderadas, relacionadas à condensação de vapor dentro do meio, são a adsorção e a capilaridade, como um processo estático e a difusão do vapor e a migração viscosa da água, que estão relacionadas à dinâmica de migração. Realçaram a importância de se levar em consideração a estrutura do meio poroso microscópico como forma de se modelar adequadamente o fenômeno em estudo. Utilizando dados experimentais de porosimetria de mercúrio e isothermas de adsorção modelaram a migração isotérmica de umidade por difusão de vapor e movimentação de líquido dentro de condições de equilíbrio local. Relatam que obtiveram uma concordância excelente entre os coeficientes de transferência medidos e simulados relacionados à secagem do meio.

Em Nowicki et al [24] procurou-se estudar o comportamento de fluxo e distribuição de fases líquido-vapor em um meio poroso sujeito à secagem. O meio poroso sendo representado por uma rede regular tendo um número de coordenação equivalente ao meio poroso original. A rede utilizada sendo composta por uma distribuição de poros conectados por segmentos bicônicos representando as gargantas. Através de uma

aproximação local unidimensional descreveram a evaporação, a curvatura do menisco na interface líquido-vapor (efeito Kelvin), o movimento do vapor por difusão numa região distante da interface e o fluxo viscoso no meio poroso. Determinaram o comportamento dos parâmetros de transporte efetivos como função da saturação do líquido e do histórico da secagem.

A partir destes trabalhos, observa-se na literatura que o estudo da evaporação de fluidos em meios porosos vem sendo conduzido por grupos específicos, além de trabalhos pontuais vinculados a um determinado grupo [3,25,26].

Nos trabalhos realizados por Prat e colaboradores [2,5,17,27-35] a evaporação é analisada com o objetivo de se entender os mecanismos básicos e os principais padrões de fluxo observados durante a secagem de meios porosos. Basicamente, o estudo é voltado para a secagem lenta, onde os efeitos capilares são dominantes sobre os efeitos viscosos e a secagem apresenta um padrão de escoamento do tipo percolação de invasão [36,37] semelhante ao observado na drenagem lenta.

Em um dos trabalhos apresentados, Prat [33] fez uso da teoria da percolação para modelar a secagem de um fluido sob condições isotérmicas em um meio poroso. Criticando a utilização de modelos contínuos na simulação da secagem em meios porosos, afirma que um dos apelos para a utilização da modelagem discreta na área de secagem é a falta de um método geral para prever os coeficientes de transferência de massa interfacial na secagem convectiva. Considerou a secagem isotérmica de um meio poroso capilar inicialmente completamente saturado com líquido. Meio poroso capilar significando que os efeitos capilares são os principais mecanismos que governam o processo. Ainda, contrária aos materiais higroscópicos, a sorção do fluido foi desprezada. O modelo de rede foi compreendido como uma rede bidimensional de poros conectados a gargantas estreitas, de forma semelhante ao utilizado por Lenormand et al [38]. Afirma que o modelo proposto difere dos modelos de deslocamento padrão de dois fluidos porque leva em consideração a evaporação e a difusão do vapor na fase gasosa em adição aos mecanismos capilares. Afirma ainda que os efeitos gravitacionais não podem ser negligenciados por causa da grande diferença de densidade entre a fase

líquida e vapor. Esses efeitos podendo ser incorporados conforme o sugerido por Wilkinson [15]. Discorre sobre a percolação de invasão e compara com o processo de evaporação proposto. Cita como principal diferença o fato de que enquanto na percolação de invasão ocorre a formação de ilhas do fluido deslocado que não desaparecem com o tempo, na evaporação que ocorre durante o processo de secagem, embora ocorra a formação de ilhas de líquido, as mesmas desaparecem com o decorrer do processo.

Nos experimentos efetuados, o autor observou que as regiões de ilhas de líquido temporárias parecem não estar isoladas e sim conectadas através de uma fina camada de filme que está sobre a fase sólida. Em sua opinião, a função que o filme líquido exerce sobre o transporte não é clara, menosprezando, desta forma, o efeito do filme de líquido no processo. Também, observou que ocorre estabilidade da frente de invasão, citando que a estabilidade da frente é importante do ponto de vista da abordagem contínua ou macroscópica. Nas conclusões, o autor reforça que o modelo serve para simular a secagem em números capilares muito baixos e repousa em uma forma modificada da percolação de invasão. Cita que, contrário ao deslocamento imiscível convencional, em baixos números capilares, a secagem resulta na não ocorrência de ilhas isoladas permanentes do líquido. Observou que os efeitos gravitacionais limitaram o comprimento da frente de invasão na região contendo as ilhas de líquido temporariamente isoladas. A gravidade resultou na redução do número e tamanho das ilhas de líquido temporárias. Nas simulações o autor não considerou os efeitos térmicos, o fenômeno de adsorção e o efeito Kelvin.

Em trabalho subsequente, Prat [32] procurou estudar mais precisamente as principais similaridades e diferenças entre drenagem em baixos números capilares e secagem. Ainda uma vez mais, o processo foi restrito a um simulador bidimensional. Assinala que o fato do processo assumido ser isotérmico é uma aproximação, uma vez que a secagem não pode ocorrer sem transferência de energia. Fez algumas considerações sobre o modelo onde o processo de difusão é quase permanente. O equilíbrio termodinâmico local foi assumido para cada interface elementar gás-líquido. O efeito Kelvin foi desprezado. O filme de líquido através dos poros e gargantas ocupados pelo gás não foi

levado em consideração. O transporte unidimensional de difusão foi considerado em cada garganta ocupada pela fase gasosa. Estudou a influência da gravidade sobre o processo, observando que a força gravitacional tem um efeito estabilizante sobre a frente de secagem. Efeitos viscosos e gradientes de temperatura não foram levados em consideração no modelo.

No trabalho de Laurindo e Prat [28], o objetivo foi confirmar através de experimentos os achados anteriores em termos de distribuição de fase dos fluidos em meios porosos relacionada à evaporação. Utilizando um modelo bidimensional de rede quadrada, onde o comprimento de cada garganta foi escolhido randomicamente de acordo com uma dada lei de distribuição, assumiu-se que a rede estava inicialmente completamente saturada com líquido e o fluxo de massa ocorrendo somente por um lado da rede quadrada, os demais sendo impermeáveis ao fluxo. O líquido sendo a fase molhante e composto por um componente único. A fase gasosa sendo composta do vapor do líquido e de um inerte que serve como fluido de arraste. A transferência de calor não foi levada em consideração e a concentração de equilíbrio do líquido na interface foi assumida constante. O efeito Kelvin não foi considerado.

Sabe-se que sob circunstâncias normais o coeficiente de transferência de massa não é uma constante e varia espacialmente. Como os autores estavam interessados no fenômeno dentro do meio poroso e não na taxa de evaporação, foi assumido um coeficiente de transferência de massa constante. Sendo a evaporação um processo lento, assumiu-se que as forças viscosas são muito menores do que as forças capilares. O transporte difusivo do líquido na fase gasosa foi computado e o transporte convectivo foi desprezado. O transporte difusivo foi assumido como sendo unidimensional.

Também não se considerou o fluxo de filme. O líquido utilizado foi o n-Hexano. Os efeitos gravitacionais foram observados tomando-se diferentes ângulos para o meio poroso experimental e comparado com os resultados simulados. Pela primeira vez, considerou que para meios porosos, mesmo no caso de da evaporação se dar de forma lenta, os efeitos viscosos não devem ser desprezíveis. Para o estudo efetuado, fizeram uma comparação e afirmaram que para diâmetros do leito maiores que 10 microns os

efeitos viscosos seriam desprezíveis, enquanto que para diâmetros iguais ou menores que 1 micron não o seriam. Porém, afirmaram que os efeitos viscosos tornar-se-iam importantes na medida em que a fração de poros ocupados pelo líquido diminuísse.

Freitas e Prat [2], adotando o modelo numérico desenvolvido anteriormente por Prat e colaboradores [3,28,32,33], apresentaram um equacionamento matemático do problema existente na produção de petróleo em reservatórios fraturados através da injeção de um gás seco. Procurando explicar os resultados experimentais obtidos por Le Romancer et al [25] assumiram que os principais fenômenos a serem tratados seriam o transporte difusivo na fase gasosa, o transporte difusivo na fase líquida e o equilíbrio termodinâmico na interface líquido-vapor. Como principais hipóteses assumiram que a transferência de massa ocorria isotermicamente; os fenômenos de adsorção não foram levados em consideração nem os mecanismos de transferência que ocorrem em filmes de líquido. Os efeitos viscosos nas fases líquidas e gasosas não foram considerados; a evaporação foi assumida como um processo lento de forma a se empregar os conceitos da percolação de invasão; o efeito Kelvin não foi considerado, ou seja, os meniscos estão sempre planos; o coeficiente global de transferência de massa foi assumido como constante na fronteira aberta da rede porosa. Não foram apresentados resultados obtidos da simulação.

Apresentando um resumo dos trabalhos desenvolvidos, Prat [31] listou os diversos fenômenos relacionados à evaporação de um fluido no meio poroso. Discorreu genericamente sobre a simulação bidimensional e traçou alguns comentários sobre a utilização de um modelo tridimensional. Discorreu sobre trabalhos desenvolvidos na tentativa de se levar em consideração a transferência de calor nos processos associados à evaporação de fluidos em meios porosos. Citou a utilização de um evaporador capilar para realização de experimentos como forma de compreender melhor os mecanismos envolvidos no processo de evaporação.

Dando continuidade ao trabalho anterior, Laurindo e Prat [29] procuraram estudar a evolução da distribuição de fases durante a evaporação, ou seja, as taxas de secagem. Observaram a influência da gravidade no processo empregando-se três inclinações

diferentes ao meio poroso, com representação da gravidade nula, gravidade estabilizante e desestabilizante. Foi feita a comparação entre os resultados experimentais e numéricos. O modelo numérico foi o mesmo daquele utilizado em Laurindo e Prat [28]. Diferente do caso da distribuição de fases, as taxas de secagens não foram concordantes ao serem comparados os resultados experimentais com os numéricos. Os resultados mostraram que as simulações subestimaram as taxas de evaporação. A explicação para esta diferença foi dada pelos autores como sendo devido à influência do filme de líquido que se forma durante a etapa de secagem. As hipóteses assumidas levaram em consideração uma taxa de evaporação lenta, sem transferência de calor e um processo controlado pela transferência de massa. Além disso, o processo foi assumido como isotérmico. O líquido utilizado foi o n-Hexano como um líquido único. Uma vez mais, a fase vapor constituiu-se de vapor do líquido e de um componente inerte. Ao invés de utilizar um coeficiente de transferência de massa constante, assumiu-se um domínio formado pelos poros da rede e uma camada adjacente na qual a difusão do vapor ocorre e é o único mecanismo de transporte. Não forneceram detalhes do desenvolvimento matemático.

Prat e Bouleux [35] utilizaram um modelo de rede bidimensional para estudar aspectos relacionados às leis de escala aplicadas em secagem em meios porosos. De maneira bastante resumida, o trabalho desenvolvido analisou a influência da gravidade e viscosidade nas frentes de avanço da secagem.

Em um dos trabalhos mais relevantes para o presente estudo, Le Bray e Prat [17] apresentaram estudos relacionados à secagem de meios porosos em três dimensões. Citam que o trabalho desenvolvido foi o primeiro trabalho descrito na literatura em três dimensões sobre secagem de fluidos em meios porosos. Assinalaram que existem diferenças essenciais entre a secagem em duas dimensões e em três dimensões, que impedem a ocorrência de uma fase observada na secagem conhecida como período de taxa constante (“CRP - Constant Rate Period”). Em adição, observaram que a existência de ilhas de líquido aprisionadas no meio poroso é importante em duas dimensões, mas desprezível em três dimensões. O objetivo do trabalho foi a simulação da evaporação de um líquido único inicialmente em um estado saturado. O vapor do líquido escapa por

uma face, sendo as demais impermeáveis. Assumiram baixos valores de número capilar, de forma que somente os efeitos capilares fossem importantes. A fase gasosa sendo composta de um gás inerte e o vapor do líquido saturado. O efeito Kelvin foi desprezado. O efeito da gravidade não foi considerado. Devido ao esforço necessário apenas uma realização da rede (51x51x51) foi efetuada. Não foi explorado o efeito do tamanho da rede nas simulações. No trabalho desenvolvido a rede gerada não apresentou correlação na distribuição de gargantas e poros.

Em outro trabalho, Freitas e Prat [5] trataram da evaporação de um líquido multicomponente em um meio poroso. Um dos objetivos do trabalho foi modelar o observado experimentalmente, com o auxílio de um modelo de rede bidimensional, onde se observou o acúmulo de líquido próximo à superfície de saída do meio poroso [25]. Este acúmulo de líquido seria gerado por um gradiente de tensão superficial devido à evolução espacial da composição do líquido. Assim, listaram como o primeiro objetivo do trabalho desenvolver um modelo de rede bidimensional (2-D) de evaporação de um líquido binário. O segundo objetivo listado foi simular a variação da tensão interfacial com a composição. Como terceiro objetivo, analisar os resultados dentro da teoria da percolação, especialmente percolação de invasão sob um gradiente. Uma das hipóteses assumidas foi a de que a evaporação ocorre de forma lenta, onde os efeitos capilares dominam. Para um líquido puro, os autores informaram que trabalhos anteriores mostraram que o processo de evaporação leva a um padrão de percolação de invasão similar àqueles observados na drenagem em números capilares muito baixos de um fluido em meio poroso.

Para uma mistura binária evaporando em um gás como componente adicional, o limiar da pressão capilar de um dado canal depende não apenas do diâmetro do tubo, mas, também, do valor da tensão superficial local, já que a tensão superficial depende da composição da fase líquida. Dessa forma, o limiar da pressão capilar associada com cada canal depende da posição do canal dentro da rede através da composição local e também do tempo devido ao fato da composição ser tempo-dependente.

Observaram que, como um dos componentes da fase líquida é muito mais volátil do que o outro, a tensão superficial próximo à saída do meio poroso deve ser maior do que no meio dele. Com a evaporação preferencial de um dos fluidos do líquido próximo à interface, o processo de avanço da frente aconteceria mais no interior do meio poroso, devido ao gradiente na tensão interfacial.

Os principais mecanismos levados em consideração foram os efeitos capilares, usando o conceito de percolação de invasão; a difusão binária na fase líquida; a difusão ternária na fase gasosa e variação das condições termodinâmicas no menisco. Em adição, uma vez que ilhas de líquido são formadas durante o processo, essas ilhas têm que ser identificadas juntamente com os poros e gargantas pertencendo a cada ilha. A identificação das ilhas de líquido foi feita utilizando o algoritmo de Hoshen e Kopelman [39]. Na formulação do modelo, onde são descritas as etapas de simulação, foi observado que o filme de líquido ao longo das paredes dos poros deve ser um mecanismo de transporte significativo na secagem e deve ser levado em consideração na avaliação das taxas de secagem. Todavia, de acordo com os autores, os resultados mostraram que o filme de líquido pode ser ignorado, se o que se quer levar em consideração é apenas a estrutura da distribuição de fases. Observaram, no entanto, que o fluxo de líquido no filme é um mecanismo de transporte importante na fase líquida existente nas ilhas de líquido. Observaram que, negligenciar o filme de líquido pode levar a uma sub-estimativa da extensão da zona onde uma variação significativa da concentração no líquido pode ocorrer.

Os efeitos gravitacionais foram desprezados no trabalho. A influência da tensão superficial foi levada em consideração utilizando-se uma abordagem utilizada por Wilkinson [15] e pode-se observar que variações de pressão ocorrem na fase líquida devido aos efeitos viscosos. Este efeito não foi levado em consideração na derivação da equação utilizada. Os autores consideraram que o número capilar é muito pequeno, isto é, as variações de pressão devido aos efeitos viscosos foram assumidas completamente desprezíveis comparadas com as variações de pressão devido aos efeitos capilares e gravitacionais. Assim, na abordagem utilizada por eles, isto não afetaria o procedimento de seleção da garganta de menor potencial.

Foi simulada uma rede 50 X 50, com um comprimento de garganta obedecendo a uma distribuição uniforme, usando-se a diferença entre o comprimento máximo e mínimo como um indicador da desordem da rede. Apenas uma realização da rede foi efetuada. A simulação, para estudo do gradiente da tensão superficial, compreendeu inicialmente o estudo de um líquido puro para servir de comparação com a mistura estudada. Os padrões de invasão observados não foram considerados como particularmente característicos de percolação de invasão. Este é um fato a ser analisado uma vez que a premissa básica assumida foi a de que os efeitos capilares são dominantes, o que invariavelmente levaria a um padrão do tipo percolação de invasão. Os resultados da simulação, de acordo com os autores, foram consistentes, observando-se o efeito esperado dos gradientes da tensão superficial.

Como nos experimentos efetuados por Le Romancer et al [25], eles observaram que as gargantas localizadas perto da saída da rede são menos invadidas do que aquelas situadas mais no interior, formando um acúmulo de líquido na região perto da borda. A evaporação preferencial do componente mais volátil induziu significativamente maior tensão superficial na região próxima à borda aberta da rede. De acordo com eles, os resultados foram consistentes com a percolação de invasão em um gradiente. Citam que podem ser distinguidos dois padrões globais diferentes de escoamento, dependendo se a invasão se dá em um gradiente estabilizante ou não. Para a situação estudada eles afirmaram que a variação da tensão superficial com a altura do meio poroso é positiva, indicando que a variação da pressão com a altura também o é, sinalizando que o processo é do tipo percolação de invasão em um campo gravitacional desestabilizante.

Observaram que em 2-D o aparecimento de ilhas de líquido deva ocorrer muito mais cedo do que em sistemas 3-D. Como resultado, a fase líquida tornar-se-ia fragmentada em ilhas desconectadas muito mais cedo nos sistemas 2-D do que em sistemas 3-D. Naturalmente, quando não existe mais uma rede de líquido atravessando toda a rede, o processo de difusão da fase líquida, que induz variações da fração molar dentro do sistema, seria limitado às ilhas de líquido isoladas localizadas próximas à interface. De acordo com os autores, isto limitaria seriamente a extensão da camada na qual variações

composicionais significantes poderiam ocorrer. Ainda, que o efeito ocorreria mais rapidamente com redes de tamanho pequeno.

Quanto à influência da desordem na rede, eles observaram que o gradiente a ser formado depende não só das variações da tensão superficial, mas também da desordem da rede. Afirmam que os efeitos do gradiente da tensão superficial são significantes apenas quando a desordem não é muito grande. Citam dois artigos onde o meio poroso foi caracterizado por ter uma distribuição de tamanhos de poros estreita (tamanhos de poros na faixa de 0,1 a 1 μ m, com a maioria dos poros na faixa de 0,1 a 0,6 μ m). Assim, inferiram que materiais porosos caracterizados por uma distribuição ampla de tamanho de poros os efeitos dos gradientes de tensão superficial podem ser desprezíveis. Com relação à influência dos efeitos viscosos, os autores citaram que o transporte por convecção é levado em consideração no líquido, enquanto que a influência dos gradientes de pressão no líquido, no procedimento de seleção da garganta, foi ignorada. Citaram que isto pode ser questionável. Ainda, que os efeitos viscosos são esperados mitigar o efeito composicional tratado no artigo. O mesmo esperando-se para os efeitos gravitacionais quando eles são estabilizantes.

Em trabalho recente, Prat [34] fez uma revisão dos avanços obtidos na área de secagem, utilizando modelos de rede. Atêm-se exclusivamente aos trabalhos desenvolvidos por ele e por colaboradores. Fez um breve resumo sobre a secagem analisada como um sistema contínuo utilizando-se do conceito de volume elementar representativo. Prat [34] também fez um apanhado geral sobre os diferentes aspectos levados em consideração em seus estudos relacionados à secagem utilizando modelos de redes, tais como, taxa de secagem, diagrama de fase, evaporação de uma mistura no meio poroso, algoritmo de secagem, dentre outros. De importante, neste trabalho, foram as observações feitas quanto a aspectos não considerados na simulação. De acordo com ele, a influência do filme de líquido, o efeito Kelvin, a região de validade do padrão do tipo percolação de invasão na representação do fluxo de fluido, a estrutura de rede porosa formada são aspectos que devem ser analisados.

Mais recentemente, Plourde e Prat [30], realizaram um estudo em um modelo de rede bidimensional aplicado ao estudo da variação da tensão superficial induzida por um gradiente térmico na distribuição de fase dentro de um meio poroso capilar. Como em estudos anteriores, os efeitos gravitacionais e viscosos não foram considerados. O mesmo sendo feito para o filme de líquido existente no meio poroso e o efeito Kelvin. Ainda, o meio poroso simulado consistiu de um meio poroso fracamente desordenado. O processo simulado consistiu em um meio poroso saturado contendo um líquido único e uma fase gasosa consistindo do vapor do líquido e ar.

Os resultados obtidos na utilização do modelo, de acordo com os autores, foram consistentes com o esperado. Dependendo do sinal do gradiente térmico, um padrão do tipo percolação de invasão em gradiente estabilizante (IPSG) ou desestabilizante (IPDG) pode ser esperado. Citam que um aumento na desordem do meio poroso tem um efeito que é equivalente ao aumento na capilaridade. Para meios porosos fracamente desordenados estes dois padrões puderam ser observados. Apresentaram um diagrama de fases relacionado aos padrões de fluxo na presença de gradientes térmicos e na ausência de efeitos gravitacionais e viscosos.

Dentro da mesma linha de estudo, Yortsos e colaboradores [26,37,40-47] realizaram estudos visando compreender os principais mecanismos da nucleação e crescimento de bolhas observados quando do abaixamento da pressão em meios porosos durante a produção de petróleo utilizando-se o mecanismo de gás em solução. Eles observaram que o crescimento das bolhas dentro de meios porosos experimentais se dá como ilhas ramificadas isoladas de gás, apresentando aspectos que são similares a um processo de percolação. No caso específico, ao processo de drenagem de fluidos em meios porosos. Em adição, realizaram estudos utilizando-se da teoria de escala empregada nos processos de percolação, tanto na área de drenagem quanto na área de secagem, na tentativa de obter parâmetros universais que pudessem representar os processos estudados.

Em um dos primeiros trabalhos Yortsos et al [47] estudaram a mudança de fase líquido-vapor em um meio poroso causada pelo abaixamento de pressão. Os processos de

nucleação e crescimento de bolha foram analisados, onde a nucleação heterogênea foi assumida como mecanismo de formação da bolha. Foram estudadas as condições nas quais a estabilidade do equilíbrio mecânico da bolha formada é alcançada. A ocupação de um poro ocorreria a uma supersaturação específica, sendo correlacionada ao tamanho desse poro. Supersaturação significando a diferença entre a pressão de bolha do sistema (P_b) e uma pressão abaixo desta (P_∞). No processo de crescimento de bolha, foi assumido que o crescimento se dá em um sistema composto de uma bolha apenas. Citam que o processo de crescimento é controlado por forças inerciais, viscosas, de superfície e pressão. De acordo com eles, a supersaturação do meio controla o processo de crescimento, enquanto a geometria do meio poroso controla o padrão de crescimento obtido. No trabalho, foram analisados os regimes de crescimento de bolha, onde eles definem um regime de baixa ($\Delta P \ll P_\infty$), média e alta supersaturação. Limitaram o estudo ao regime de baixa supersaturação. Esse regime é observado, por exemplo, quando da ocorrência de taxas de declínio baixas em reservatórios de petróleo. Afirmam que nestas condições a ocupação do gás é controlada pelas propriedades capilares do meio poroso, recorrendo à teoria da percolação para simular o processo. Utilizaram a rede de Bethe como modelo de rede para representação do meio poroso. Citam que ao invés da abordagem utilizada por eles, uma modificação da teoria da percolação comum aplicada a processos de desorção capilar, a percolação de invasão seria mais apropriada, uma vez que ela leva em consideração a compressibilidade finita das ilhas de líquido formadas.

Terminaram concluindo que para processos que possam ser descritos pela abordagem utilizada os eventos de nucleação provavelmente devam primeiro ocorrer nos poros maiores e que a supersaturação necessária para o aparecimento da primeira bolha de gás deve ser fortemente independente de aspectos não relacionados à natureza do meio poroso, tal como a taxa de declínio da pressão.

Dando continuidade ao estudo dos processos de nucleação e crescimento de bolhas em meios porosos, Li e Yortsos [41] ampliaram o modelo utilizado para descrever o processo utilizando uma abordagem semelhante à utilizada por Lenormand et al [38].

Utilizando um modelo de rede bidimensional, atribuíram uma distribuição de poros e gargantas ao meio poroso simulado. Assumiram como premissa condições isotérmicas do processo, desprezando efeitos inerciais e gravitacionais. A fase vapor foi assumida isotérmica e invíscida, obedecendo à lei dos gases ideais. O processo de crescimento da fase vapor ocorrendo de acordo com a regra de “uma ligação invadida em cada etapa simulada”, o que foi estabelecido no trabalho de Wilkinson e Willemsen [36], perfil característico da percolação de invasão. Conforme citado anteriormente, uma condição necessária para isso é que no processo em questão a taxa de declínio da pressão tem que ser baixa o suficiente para que os efeitos capilares sejam dominantes.

Dos experimentos eles novamente observaram que o início do crescimento se dá em vários sítios de nucleação ativados em diferentes etapas do processo e que a fase gasosa cresce de maneira ramificada e não compacta. Observaram ainda que a nucleação ocorria nas paredes dos poros, com o subsequente deslocamento da bolha formada em direção ao centro do poro.

No modelo proposto não foram utilizados parâmetros de regressão, embora dados de posição e tempo dos eventos de nucleação tenham sido usados como dados de entrada para o modelo. Dos resultados experimentais e simulados concluíram que a concordância foi excelente na faixa de valores observados. Porém, em estágios avançados de crescimento foram observadas discrepâncias entre o resultado experimental e o simulado. Creditaram o fato ao conhecimento incompleto da estrutura geométrica do modelo experimental, resultante das etapas de fabricação do mesmo.

Numa série subsequente de artigos [40,42,43], Yortsos e colaboradores realizaram novos experimentos em um meio poroso efetivo, célula Hele-Shaw, e em micro-modelo como forma de compreender melhor o fenômeno do crescimento de bolha em um meio poroso. Trataram da quantidade S_{gc} (saturação crítica de gás) que é relacionada ao início no qual a fase gasosa começa a fluir pelo meio poroso. O modelo numérico utilizado é o mesmo do trabalho anterior [41]. O modelo incluiu nucleação, equilíbrio de fase, transferência de massa, efeitos capilares e viscosos. Do mesmo modo, o estudo foi

limitado a baixas supersaturações onde os efeitos de difusão são dominantes no processo de crescimento da bolha e os efeitos convectivos são desprezíveis.

Ambos, crescimento simples e múltiplo de bolhas foram considerados em termos do padrão de crescimento e taxas de crescimento. Para uma bolha única observou-se que o padrão é do tipo percolação de invasão a partir de uma fonte única para tamanhos suficientemente pequenos da bolha, baixos números capilares e baixas supersaturações, mas torna-se um padrão de “fingering” viscoso para tamanhos maiores. O termo “fingering” refere-se ao fenômeno que descreve caminhos preferenciais de um fluido dentro de meios porosos, seja devido às forças viscosas ou devido às forças capilares.

Realizaram estudos para determinar o momento no qual o regime deixa de ser do tipo percolação de invasão e passa a ser do tipo “fingering” viscoso, regime representado matematicamente por um padrão do tipo agregação limitada pela difusão (DLA). Utilizaram argumentos de escala na realização deste estudo. Observaram que, desde que a razão de densidade entre as fases líquida e gasosa seja suficientemente alta, ocorre a formação de ilhas de líquido isoladas no meio poroso.

Satik e Yortsos [44] consideraram pela primeira vez a influência da transferência de calor no processo de crescimento de bolha em meios porosos utilizando modelos de redes. No caso particular, o crescimento de uma bolha única no meio poroso. No modelo utilizado os autores simularam uma rede para o fluido e outra para a matriz sólida para levar em consideração as transferências de calor. Apresentaram limitações do modelo e consideraram dois casos na simulação. No primeiro, a bolha nasce no meio de uma rede bidimensional contendo um líquido superaquecido. No outro, um fluxo de calor é imposto em um lado da rede. Verificou-se a influência da variação do número capilar, que relaciona os efeitos capilares aos efeitos viscosos, e do número de Jacob, que é uma medida do superaquecimento imposto. Nos resultados obtidos da simulação observaram a mudança do padrão de percolação de invasão para outro não definido. No segundo caso, observaram que ocorreu o crescimento rápido da bolha e diversos poros mostraram-se parcialmente ocupados, indicando um padrão diferente da percolação de invasão. Dos resultados, concluíram que inicialmente o crescimento da bolha segue o

padrão de percolação de invasão com um poro a cada tempo sendo invadido, mudando para múltiplas penetrações de gargantas em um mesmo tempo, diferente da percolação de invasão. Os resultados foram numéricos e não experimentais. De acordo com os autores o comportamento observado durante a transferência de calor foi o mesmo observado quando do processo limitado pela transferência de massa.

Utilizando os conceitos da teoria da percolação, através das leis de escala, Yortsos et al [46] procuraram detalhar o diagrama de fase obtido por Lenormand et al [38]. No estudo, procuraram determinar a transição que ocorre no padrão de fluxo analisando a mudança de sinal do gradiente da probabilidade de percolação, de um gradiente estabilizante para um gradiente desestabilizante.

Tsimpanogiannis et al [45] observaram que, em experimentos realizados em secagem, as forças viscosas atuantes no sistema não são desprezíveis, sendo necessárias para explicar a formação de um comprimento de frente (separando a fase líquida contínua da fase gás) de tamanho finito. Em outras palavras, o objetivo específico dos autores foi compreender a estrutura dos padrões de secagem, particularmente na região frontal. Procuraram mostrar, usando argumentos de escala, que a secagem é descrita como um processo de percolação de invasão em gradiente estabilizante (IPSG). Inferiram que o comprimento da frente apresenta uma lei de escala como função dos parâmetros de secagem. Tentaram mostrar que as equações desenvolvidas são consistentes com os experimentos de Shaw [48]. Mostraram que o efeito de bombeamento capilar é uma consequência dos termos capilares e viscosos no processo. Concluíram que os resultados obtidos não são conclusivos ao se levar em consideração os experimentos realizados por Shaw [48].

Numa abordagem experimental, embora utilizando um modelo matemático tratando o meio poroso como um contínuo, os estudos efetuados por Ho e Udell [6-8] são fundamentais para a compreensão dos mecanismos de evaporação voltados para a remediação de solos contaminados. Os resultados obtidos trazem informações importantes tais como o desenvolvimento do perfil da pluma de contaminação, a evaporação durante a remediação do solo em um processo limitado pela transferência de

massa e as condições que levam à seletividade ou não em termos da volatilidade de um componente. Embora não utilizando modelos de rede para representação do meio poroso, mas um modelo suportado pela teoria do contínuo, os trabalhos de Ho e Udell [6-8] merecem atenção uma vez fornecem informações experimentais valiosas sobre a evaporação de fluidos em meios porosos.

Os autores investigaram um processo de remediação do solo conhecido como ventilação do solo, que consiste na extração de uma fração líquida de um meio poroso através da injeção de um gás nesse meio. Desenvolveram um modelo matemático, sem levar em consideração aspectos morfológicos do meio poroso estudado. Realizaram testes experimentais para comparar com os resultados obtidos pelo simulador. Utilizaram como mistura binária o tolueno/o-xileno; benzeno/o-xileno e tolueno/octano. Foram determinadas as concentrações dos componentes na fase de arraste gasosa; a posição da frente de evaporação; a razão entre as massas dos componentes no efluente gasoso e a fração molar do líquido com relação à profundidade do meio poroso. Os autores concluíram que o modo de transporte dominante na região molhada para os compostos usados no estudo parece ser a difusão na fase gasosa. Concluíram, também que a evaporação limitada pela difusão é não-seletiva em termos de remoção do componente de mais alta volatilidade durante a secagem convectiva externa do meio poroso contendo uma mistura binária. Por seletividade deve-se entender a remoção preferencial de um componente do meio poroso, sendo definida como a diferença entre o fluxo de evaporação relativo do componente mais volátil e a fração molar desse componente na fase líquida [49,50].

Em outra série de experimentos realizada, foram analisados dois casos distintos. No primeiro caso, a região contaminada foi assumida homogênea com ar fluindo através da mesma. Foram simuladas situações onde o meio poroso continha um componente simples e também uma mistura binária. Foi assumida uma condição de equilíbrio entre o ar sendo soprado através da zona de contaminação, tornando-se saturado. No segundo tipo, a região foi assumida heterogênea, consistindo de duas camadas de permeabilidades diferentes. O contaminante estando na zona de mais baixa permeabilidade enquanto o ar circula preferencialmente pela região de mais alta

permeabilidade. Os mesmos componentes do teste anterior foram considerados. Foram analisados a frente de avanço e o comportamento da pluma de contaminação com o tempo, bem como foi analisada a composição do efluente gasoso. Foi observado que para razões de permeabilidade entre as camadas do meio poroso de 10:1 a evaporação foi dominada pelo fluxo volumétrico de ar através da pluma. Para razões da ordem de 100:1 as taxas de remoção foram limitadas pela difusão na fase vapor da região contaminada de baixa permeabilidade para a região de alta permeabilidade onde ocorria o fluxo de ar. Contudo, a difusão ocorria não somente na direção vertical da pluma, mas também na direção lateral. Nas razões de permeabilidade de 100:1 o processo de ventilação do solo foi limitado pela difusão.

Foi analisada a formação da camada limite de concentração acima da interface entre as duas camadas nos sistemas heterogêneos. Eles observaram que para os experimentos considerados a altura da camada limite foi da ordem de diversos milímetros, a qual é muito menor que as demais dimensões, tanto da pluma quanto do experimento. Assim, observaram que para uma modelagem acurada é necessária uma simulação na escala da pluma e menor. Observaram ainda, que diversos modelos numéricos e analíticos têm sido empregados para prever os níveis de concentração durante a ventilação de um componente simples e multicomponente baseado na partição de equilíbrio de fase em sistema homogêneos. Os estudos mostraram que, se a região contaminada for suficientemente comprida na direção do fluxo de ar para as condições de equilíbrio serem alcançadas, então esses modelos seriam apropriados. Todavia, como a ventilação causa um retrocesso na pluma de contaminação a partir da borda de entrada, eventualmente o comprimento horizontal da pluma tornar-se-ia muito curta, não permitindo as condições de equilíbrio de ocorrerem. Notaram, todavia, que o comprimento da região contaminada para ocorrer o equilíbrio é pequena. Assim, muito do contaminante teria evaporado antes das condições de equilíbrio terem sido violadas.

Em muitos experimentos com o meio heterogêneo observaram que a ação capilar empurrou o líquido através da interface das regiões de alta e baixa permeabilidades no início do processo. O ar passando sobre a zona de baixa permeabilidade causou a evaporação dos contaminantes, aumentando a pressão capilar. Qualquer líquido livre se

moveria então das regiões interiores devido ao gradiente de pressão formado. Esse fenômeno foi chamado sucção capilar, sendo caracterizado como um mecanismo potencial adicional no processo de ventilação do solo.

Por fim, como uma das conclusões do trabalho, observou-se que para mistura binárias no sistema heterogêneo com razões de permeabilidade maiores do que 100:1, existe um período onde a razão das taxas de remoção de massa dos dois componentes foi constante. Esse valor foi aproximadamente o mesmo do que a razão inicial do líquido colocado na pluma.

Em mais uma série de experimentos, estudou-se o caso onde a pluma de contaminação ocupava apenas uma fração do meio poroso total, ou seja, uma saturação menor do que 1. A geometria do meio poroso não sendo importante no modelo matemático. Foram realizados seis experimentos com tomadas de tempo crescentes e foram determinadas as concentrações de líquido ao longo da coluna de teste nos vários tempos estipulados. Uma vez mais, a mistura utilizada consistiu de Tolueno, Benzeno e o-Xileno. Observaram que a velocidade da frente de evaporação de cada composto na mistura líquida foi aparentemente dependente da volatilidade do composto, mas a composição da mistura líquida parece também afetar a velocidade dessas frentes de evaporação. Foi observada, também, a condensação de compostos menos voláteis. Nas frentes de evaporação do componente mais volátil (benzeno), observou-se um aumento das concentrações dos outros dois compostos (tolueno e o-xileno). Postularam um mecanismo relacionado ao abaixamento da pressão de vapor entre aquela do componente puro e a pressão parcial de equilíbrio observada quando o componente vaporizado encontra a mistura completa em seu caminho. Na medida em que o tempo avançou observou-se que os componentes menos voláteis foram evaporados e então condensados a jusante do fluxo, continuamente, até que todos os componentes de mais alta volatilidade fossem completamente removidos. Afirmaram que em situações reais de extração por vapor de uma região contaminada, a condição de fluxo através da pluma produziria concentrações de efluente constante, com as frações mássicas no gás extraído correspondendo às razões de equilíbrio saturado para a mistura contaminante líquida inicial. Eles concluíram afirmando que durante o processo de ventilação, a evaporação

seletiva dos compostos com volatilidades mais altas conduz à propagação de múltiplas frentes de evaporação, que correspondem ao local de volatilização de cada componente. A velocidade da frente de evaporação depende da volatilidade efetiva do composto na mistura. Em cada frente de evaporação, ocorre a condensação de componentes de baixa volatilidade, ocorrendo o acúmulo contínuo dos compostos de baixa volatilidade nas posições a jusante da frente. Durante o processo de ventilação, no qual o equilíbrio químico local existe, a concentração do efluente gasoso exhibe razões constantes de massa.

Realizando experimentos unidimensionais em um meio poroso saturado com metano e pentano tendo como fluido de arraste metano ou nitrogênio, Le Romancer et al [25] estudaram o mecanismo de recuperação de óleo por difusão de gás em reservatórios fraturados em presença de água. De nosso interesse, observaram, quando o fluido injetado foi o nitrogênio, um perfil de saturação apresentando um forte efeito de extremidade, levando ao acúmulo de líquido próximo à região fraturada. Apontaram que o mecanismo de recuperação por difusão pode ser visto como um problema de fluxo bifásico com mudança de fase no meio poroso, onde cálculos da difusão na fase líquida e fase vapor são efetuados, em combinação com a transferência de massa que ocorre entre o meio poroso e a região fraturada. Nas suas conclusões relataram que o processo de recuperação de óleo por injeção de um gás seco é um processo envolvendo efeitos difusivos e capilares. O líquido é transportado da extremidade dos poros pequenos enquanto evapora, mantendo a pressão capilar no seu menor valor possível. Observaram que durante os processos de difusão, a fase deslocada pode formar ilhas isoladas no meio poroso, isto ocorrendo quando o gás fragmenta a fase líquida contínua. De acordo com eles, quando o líquido é desconectado o mecanismo de transporte para as fraturas se dá por difusão gasosa dos componentes. No caso da injeção de nitrogênio, relataram que foi formado um gradiente de tensão interfacial a partir da região fraturada em direção à face isolada do meio poroso, contribuindo para manter a taxa de produção constante por um período maior de tempo.

Jaffrennou [3] estudou a evaporação de uma mistura líquida em um meio poroso bidimensional, numa tentativa de representar numericamente o observado nos casos de

produção de petróleo pela injeção de um gás seco. O estudo consistiu na realização de experimentos e modelagem numérica do processo. Utilizando dois modelos físicos para representar meios porosos, um de alta e outro de mais baixa porosidade, verificou-se o processo de evaporação dois fluidos no meio poroso. Na modelagem do processo assumiu-se que essencialmente dois mecanismos elementares dominam o fluxo. O primeiro sendo o processo de evaporação em uma interface líquido-gás e o segundo sendo o bombeamento capilar existente em um conjunto capilar consistindo de um canal maior conectado a um canal menor. O processo foi simulado desprezando-se efeitos gravitacionais. Também, a interface líquido-gás foi assumida plana, de forma que o efeito Kelvin foi nulo. A transferência de massa ocorrendo por difusão do líquido vaporizado na fase gasosa e pela evaporação que tem lugar na interface líquido/vapor. Observou que os resultados apresentados pelas duas redes simuladas, uma de alta e outra de mais baixa porosidade mostraram um comportamento bem diferente em termos da estabilidade da frente de invasão. O meio poroso de menor porosidade apresentou uma frente estável, contrário ao observado para o meio poroso de porosidade maior. De acordo com ele, a presença de uma fração que não vaporiza da mistura líquida utilizada pareceu não influenciar a estabilidade da frente de invasão.

Iniciando um estudo previamente delineado em Prat [31], Figus et al [27] realizaram um estudo de transferência de calor e massa em um meio poroso parcialmente aquecido. O estudo foi realizado na análise de um evaporador de bombeamento capilar. Os autores fizeram uma comparação entre os resultados obtidos utilizando-se um modelo contínuo, isto é, empregando-se a lei de Darcy, e um modelo discreto de rede de poros. Obtiveram resultados onde, na medida em que se aumenta a distribuição de poros e gargantas, o modelo contínuo não prevê adequadamente o que seria esperado, o mesmo não acontecendo com o modelo de rede empregado. Em determinado ponto, conforme assinalado por Yortsos [40,42,43], observaram que o padrão de fluxo segue o de percolação de invasão e que em dado momento as forças viscosas tornam-se importantes, afetando o regime de fluxo levando a um padrão não mais do tipo percolação de invasão e sim do tipo DLA. Levantaram um questionamento onde explicam ser interessante a utilização de um modelo tridimensional de rede, uma vez que a partir de estudos de deslocamentos imiscíveis sabe-se que as distribuições de fase

em três dimensões são diferentes daquelas observadas em duas dimensões. Também, com relação ao estudo efetuado, os autores citam que nas simulações tridimensionais seria esperado um superaquecimento significativamente menor da aleta do que aquele observado em duas dimensões.

Recentemente, Yiotis et al [26] propuseram um modelo de rede bidimensional para simular o processo de secagem de um componente líquido em um meio poroso. O processo se desenvolve através da passagem de um fluxo gasoso sobre o meio poroso contendo um líquido. Considerando um processo isotérmico, desprezando os efeitos gravitacionais, os autores propuseram um modelo que leva em consideração a transferência de massa por difusão e advecção na fase gasosa, fluxo viscoso nas fases líquida e gasosa e os efeitos capilares na interface líquido-vapor presente nos meniscos nas gargantas dos poros. A temperatura do sistema sendo bastante distinta do ponto de ebulição do líquido, de forma que as taxas de evaporação são controladas pela difusão e a mistura binária na fase gasosa pode ser assumida diluída. Observaram que durante o processo de evaporação quatro regiões distintas podem ser identificadas. A primeira delas consistindo do líquido inicial, formando uma fase contínua. A segunda, onde o líquido e o gás estão conectados macroscopicamente. A terceira, consistindo de ilhas isoladas de líquido de tamanhos variáveis envolvidas pela fase gasosa. A quarta, e última, uma região conectada da fase gasosa, com a fase líquida na forma de anéis pendulares, filme nos cantos ou filmes finos nas paredes da superfície sólida. Citam Tsimpanogiannis et al [45], para mostrar que os efeitos viscosos fazem da secagem um processo equivalente à percolação de invasão em um gradiente estabilizante. Ainda, que o fluxo de líquido no meio poroso é governado por gradientes de pressão capilar, processo conhecido como bombeamento capilar. Especularam que a presença do fluxo de filme de líquido pode ser um elemento essencial na teoria desenvolvida, todavia não levaram em consideração este efeito. Também, citaram como importante a utilização de apenas um componente líquido no meio poroso. Informaram que a presença de uma mistura contendo um componente não volátil causaria um efeito no qual as ilhas de líquido não desapareciam do meio, afetando negativamente as taxas de transferência de massa. A utilização de uma mistura líquida devendo também ser analisada. Consideraram, na análise efetuada, padrões de fluxo em condições diferentes,

dependentes do número capilar (Ca), que leva em consideração o balanço entre as forças capilares e viscosas, e do número de Peclet (Pe), expressando a razão entre a advecção e a difusão na fase gasosa. A razão M das viscosidades entre os fluidos, que seria um outro parâmetro a ser considerado na análise, foi considerada constante.

Para as situações analisadas, os autores afirmaram que para valores fixos dos parâmetros, a frente de secagem não obedece em geral as regras de percolação de invasão. Todavia, à medida que o processo de secagem progride, e dependendo da magnitude relativa dos números capilar e de Peclet, pode ocorrer uma transição para um regime controlado pela percolação.

Da revisão bibliográfica pode-se observar que, embora os estudos efetuados na área de evaporação de fluidos em meios porosos tenham sido abrangentes sobre vários aspectos, diferentes hipóteses foram assumidas nos diferentes estudos como forma de se analisar um comportamento particular de interesse. Em maior ou menor grau, essas hipóteses levaram a simplificações que inevitavelmente limitaram as informações que puderam ser obtidas desses estudos.

Assim, regra geral assumiu-se que a secagem é lenta, de modo que as taxas de secagem são baixas. Apenas os efeitos capilares foram importantes. Também, a transferência de massa dentro do meio poroso ocorreu apenas por difusão, representada pela lei de Fick. Não se teve gradientes de temperatura dentro dos materiais analisados. Os efeitos viscosos foram considerados desprezíveis e com raras exceções os efeitos gravitacionais não foram levados em consideração.

Em adição, nestes estudos, aspectos cruciais das redes geradas não foram levados em consideração. Estes aspectos estando relacionados, dentre outros parâmetros, ao tamanho da rede gerada e às correlações espaciais existentes entre os elementos que a compõem. O efeito do abaixamento da pressão de vapor, conhecido como efeito Kelvin, não foi considerado. O fluxo de filme na fase líquida não foi simulado. As redes geradas trataram de meios porosos fracamente desordenados. Ainda, a fase gasosa se comportou como um gás ideal. O coeficiente de transferência de massa interfacial foi assumido

constante. Somente uma realização da rede foi efetuada. Por fim, apenas um fluido foi simulado. A exceção foi o trabalho de Freitas e Prat [5], que considerou dois líquidos dentro do meio poroso e um terceiro como fluido de arraste.

Sob um aspecto particular de interesse, procuraremos analisar situações não consideradas nos trabalhos relacionados à produção de petróleo de Freitas e Prat [2], Jaffrennou [3] e Le Romancer et al [25]. Utilizaremos um modelo de rede tridimensional, correlacionado espacialmente, apresentando distribuições independentes de poros e gargantas, fortemente desordenado, onde o padrão de evaporação de fluidos em meios porosos será analisado. Os conceitos da teoria da percolação serão empregados para avaliar os coeficientes de transporte e as propriedades do meio poroso, bem como para determinar as condições nas quais o sistema estudado é homogêneo, podendo-se então falar em propriedades médias do sistema. Através da utilização de dados experimentais da literatura o modelo será testado e o comportamento dos fluidos dentro do meio poroso será analisado. Convém observar que os resultados obtidos podem ser facilmente incorporados aos estudos, por exemplo, da remediação do solo e águas subterrâneas, sem perda da generalidade.

3. MODELO DE REDE UTILIZADO

3.1. DESCRIÇÃO DO MODELO DE REDE

Para a simulação de um dado processo em um meio poroso é preciso primeiro definir o tipo de abordagem a ser utilizada. Sahimi [12] classifica os modelos existentes para descrever os fenômenos de transporte e fluxo em meios porosos como modelos contínuos e modelos discretos.

Os modelos contínuos representam as aproximações formuladas pela engenharia clássica para descrever materiais de geometria complexa e irregular, caracterizada por diversas escalas de comprimento. Neste caso, o meio poroso é modelado macroscopicamente como uma mistura homogênea, sendo o processo descrito pelas equações clássicas de transporte. As propriedades do meio poroso são definidas como médias macroscópicas num volume elementar, sendo obtido um sistema de equações com coeficientes que levam em consideração as propriedades do fluido, da rocha e das interações rocha-fluido. Nessa abordagem pode-se usar a lei de Darcy para o fluxo ou a lei de Fick para a difusão no meio poroso.

Os modelos discretos são utilizados para a abordagem em nível microscópico, descrevendo os processos de transporte ao nível de cada poro. Também, eles têm sido estendidos para descrever fenômenos em nível macroscópicos e mesmo megascópicos. O principal empecilho no uso destes modelos é o grande esforço computacional necessário nos cálculos. Eles são particularmente úteis quando a interconectividade ou correlações de longo alcance são importantes no sistema [11,13].

Na Figura 1 é mostrado um esquema representando um dado processo ocorrendo em uma rede bidimensional, em uma modelagem discreta, dado um meio poroso hipotético. A figura no canto superior à esquerda apresenta um processo ocorrendo dentro do meio poroso, onde cada ponto marcado representa a ocorrência do dito processo em uma localização específica dentro desse meio poroso. A figura superior à direita representa uma superposição de uma malha quadrada para representação do processo em cada ponto particular. Obviamente esta superposição resulta numa simplificação do processo

ocorrendo no meio poroso. A figura no canto esquerdo e inferior representa um ajuste do processo ocorrendo no meio poroso hipotético ao sistema de malha imposto. Aqui, embora cada ponto em particular tenha sido ajustado na rede quadrada imposta, não estão sendo representadas as ligações existentes no processo entre um dado ponto e o seu vizinho. Ou seja, até este momento o processo ocorrendo em um dado ponto se passa de forma independente dos processos ocorrendo em seus vizinhos. Na figura inferior à direita, por fim, representa um esquema onde, além do processo estar ajustado à malha quadrada, as interações existentes entre os diferentes pontos no meio poroso estão sendo levadas em consideração.

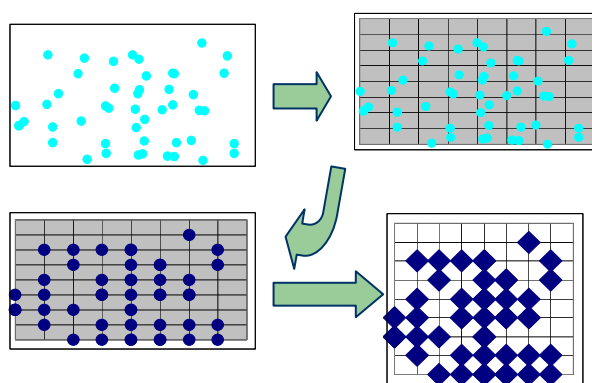


Figura 1 - Representação de um processo em um meio poroso utilizando uma modelagem discreta

A motivação para o uso de modelos discretos no presente trabalho pode ser encontrada na limitação que os modelos contínuos apresentam quando parâmetros topológicos e morfológicos são importantes no sistema.

Nos modelos contínuos, as simulações efetuadas levam em consideração que as propriedades da rocha ao longo do reservatório não variam com o tempo e que as interações rocha-fluido são invariantes no tempo e no espaço. Em especial, na evaporação de fluidos em meios porosos, os modelos contínuos são limitados uma vez que não existe um método geral para previsão dos coeficientes de transferência de massa interfacial durante o processo de secagem desses meios [28].

3.2. REPRESENTAÇÃO DO MEIO POROSO

Definido o tipo de modelo a ser utilizado, é necessário também se definir como o meio poroso deverá ser representado. Uma representação adequada de um dado meio poroso deverá levar em conta uma descrição detalhada da sua estrutura. Esta tarefa não é fácil,

sendo mesmo inviável se levarmos em consideração os recursos computacionais disponíveis atualmente. Esta limitação leva invariavelmente a simplificações que, se por um aspecto causam perda de informação sobre a morfologia do meio poroso, simplificam substancialmente o problema a ser tratado. Essas simplificações, se bem escolhidas, preservam os aspectos essenciais do meio poroso, enquanto permitem a modelagem dos fenômenos de interesse com um razoável esforço computacional.

Os modelos para representação de meios porosos devem possibilitar a avaliação adequada dos coeficientes de transporte e das propriedades morfológicas, topológicas e dinâmicas desses meios. Em adição, devem fornecer informações úteis sobre o processo a ser estudado. Assim, qualquer modelo proposto deve ter como premissa a avaliação correta das propriedades do meio poroso tais como porosidade, tortuosidade, permeabilidade e condutividade elétrica.

Uma boa descrição dos modelos utilizados na literatura para representar meios porosos pode ser encontrada em Sahimi [12]. De nosso interesse, os modelos de rede são apresentados como tendo um forte apelo intuitivo, uma vez que os caminhos percorridos pelo fluido dentro do meio poroso podem se ramificar em um dado momento ou convergir para um mesmo ponto em outro. De imediato, pode-se pensar nas ligações apresentadas nos modelos de redes como sendo as gargantas dos poros e os sítios como sendo os próprios poros do meio poroso.

3.3. CONSTRUÇÃO DO MODELO DE REDE

Os modelos de rede propostos são classificados como modelos de rede matemáticos e modelos de rede físicos. Os primeiros são abstrações geradas em programas de computadores, os demais são redes construídas fisicamente para o estudo do fluxo de fluidos, em particular em deslocamentos de um fluido por outro dentro do meio em questão. Neste trabalho os modelos de rede utilizados serão modelos matemáticos.

Tendo em conta esse aspecto, duas abordagens podem ser utilizadas na construção da rede. A primeira delas utiliza uma aproximação geo-estatística, onde imagens do meio poroso, por exemplo, imagens obtidas por tomografia computadorizada, são conjugadas

com algoritmos estocásticos para reconstrução bi ou tridimensional do meio poroso [53-55]. A outra abordagem, que será empregada nas simulações devido à sua simplicidade, consiste em se utilizar redes estruturadas [13,56,57]. Essas redes adotam elementos de geometria definida para representar os meios porosos. A construção da rede é complementada pela associação com experimentos para determinação de algumas propriedades específicas do meio poroso [58-62]. A Figura 2 apresenta três exemplos de modelos de redes estruturadas encontradas na literatura. Um aspecto relevante no uso destes modelos de rede é atribuir dados da estrutura porosa do meio onde os sítios podem representar os poros e as ligações podem representar as gargantas. O modo como o meio poroso é representado, isto é, a escolha do modelo de rede a ser empregado nas simulações, é importante, por exemplo, na determinação da forma como os poros e gargantas do meio estão conectados entre si, dentre outros fatores. Na Figura 2, as redes de Bethe e a rede triangular representam estruturas bidimensionais, enquanto a rede cúbica representa uma rede tridimensional.

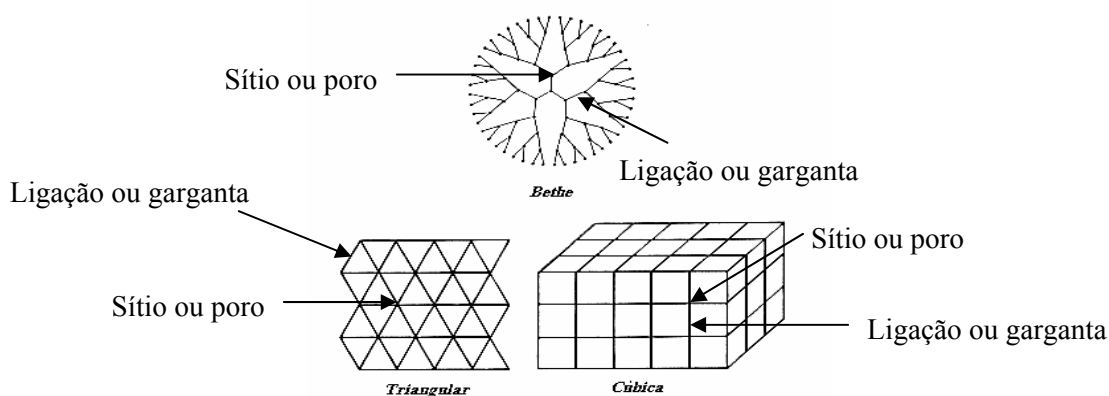


Figura 2 - Modelos de redes estruturadas

3.4. MODELO DE REDE ESTRUTURADA E CORRELACIONADA

Dentre os modelos de redes estruturadas apresentados na literatura, será empregado no presente estudo o modelo de rede cúbica simples. Assim como o modelo de rede cúbica simples, qualquer outro modelo tridimensional poderia ter sido utilizado no presente estudo, sem perda da generalidade. O aspecto fundamental não reside no tipo de modelo utilizado, mas em se representar o meio poroso tridimensionalmente.

No modelo de rede cúbica simples cada sítio ou poro está localizado no centro de cada cubo elementar que compõe a rede. Cada poro individualmente possui um volume associado, e para cada um deles poderão estar ligadas no máximo até seis ligações ou gargantas que se conectarão a outros sítios ou poros vizinhos. A Figura 3 apresenta o modelo de rede utilizado, onde cada cubo representa um poro específico e de cada poro saem gargantas que estão representadas por cilindros. O número de gargantas que sai de cada poro está relacionado com a conectividade do meio poroso, podendo ser determinada experimentalmente.

Por fim, sabe-se que meios porosos naturais possuem correlações espaciais em suas propriedades e usualmente estas correlações estão presentes em todas as escalas de comprimento [10,11,13,14].

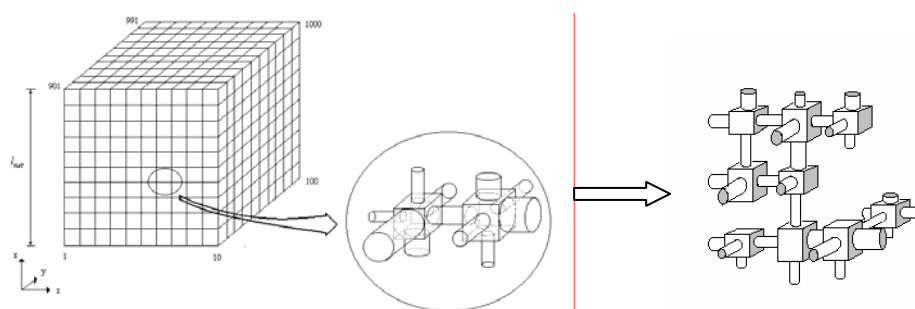


Figura 3 - Modelo de rede utilizado

A idéia de que as heterogeneidades de uma região do sistema são aleatórias e não correlacionadas é uma forma de simplificar o problema. Essas heterogeneidades estão associadas, por exemplo, à estratificação diferenciada do meio poroso ou às regiões no meio poroso com alargamento de canais devido a fatores quaisquer. A hipótese usual de que as heterogeneidades ocorrem em escalas de comprimento muito menores do que o sistema é também uma simplificação do problema. Assim, com o objetivo de representar diferentes estruturas porosas e modelar adequadamente o processo a ser estudado, correlações espaciais têm que ser levadas em consideração.

De maneira bastante resumida, utilizando-se como modelo a rede estruturada apresentada na Figura 3, são assumidas duas funções de distribuição de tamanho,

distintas para poros e gargantas, e atribuída uma função de correlação que correlaciona espacialmente poros e gargantas do modelo de rede gerado [14,51,63-70].

Dois princípios de construção para a rede gerada devem ser satisfeitos de forma a que se possa obter um resultado consistente no modelo gerado, isto é, para garantir que o diâmetro de qualquer garganta ligada a um poro qualquer dentro da rede tenha sempre o diâmetro menor ou no máximo igual a esse poro ao qual ela está conectada. Dois princípios de auto-consistência garantem essa condição. O primeiro princípio estabelece que a função de distribuição cumulativa, ou melhor, a probabilidade cumulativa da distribuição de tamanhos das gargantas é sempre maior do que aquela dos poros. Isto garante que as gargantas sejam pequenas o suficiente de forma a que possam ser acomodadas junto com os poros pertencendo a uma dada distribuição. O segundo princípio é de natureza local e expressa o fato de que o diâmetro de qualquer garganta não pode ser maior do que os diâmetros dos poros aos quais ela está conectada. A forma como poros e gargantas estão conectados é dada por uma função de densidade de probabilidade conjunta.

Neste tipo de aproximação, o modelo de rede gerado passa a apresentar uma correlação espacial entre os elementos da rede. De início, a correlação apresentada é de curto alcance, mas de acordo com Kornhauser et al [63] correlações de longo alcance podem ocorrer como consequência do processo de auto-organização crítica forçada pelo ordenamento de curto alcance.

Após uma distribuição inicial de poros e gargantas determinadas por uma função de distribuição de tamanhos independentes entre si, existem poros onde o princípio de construção da rede não é obedecido, ou seja, existem poros cujos diâmetros são menores que pelo menos um dos diâmetros das gargantas conectadas a ele. Incorporando transformadas Markovianas ao modelo de rede, conforme mostrado em Riccardo et al [71], o algoritmo foi implementado de tal forma que a partir da distribuição inicial obtida, chega-se após diversas etapas de trocas aleatórias entre poros ou gargantas da rede, a uma condição de equilíbrio. Nessa condição de equilíbrio as duas condições iniciais impostas são satisfeitas. Como é de se esperar, na medida em que aumenta a

interação entre os elementos da rede, maior o tempo para se alcançar a condição de equilíbrio.

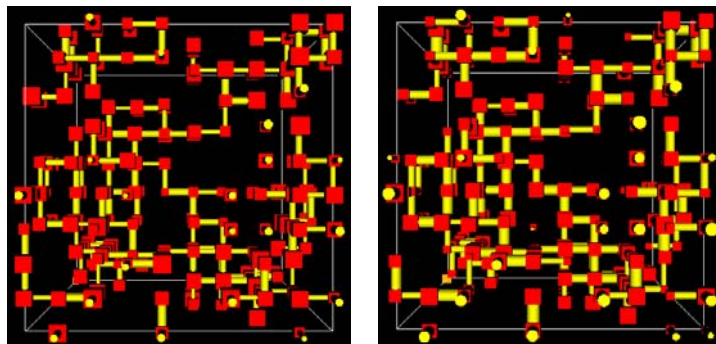
Neste trabalho, diferentes distribuições de tamanho para poros e gargantas foram assumidas na tentativa de se ajustar os dados obtidos da modelagem com os dados experimentais existentes. Esses dados experimentais referem-se à distribuição de gargantas e poros, à conectividade, porosidade, tortuosidade, diâmetro característico e curva porosimétrica. Estes resultados estão mostrados no capítulo Resultados da Simulação.

Essas diferentes distribuições foram escolhidas dentre as distribuições uniformes, linear crescente, linear decrescente, exponencial crescente e decrescente. O par escolhido referente às distribuições dos tamanhos de garganta e tamanhos de poros é aquele que fornecer o melhor ajuste com relação à curva porosimétrica experimental para um dado meio poroso.

A princípio, qualquer função de distribuição pode ser utilizada sem maiores problemas. Estas funções estão correlacionadas por um único parâmetro que representa a intersecção existente entre as duas funções. O parâmetro em questão pode apresentar diferentes valores entre 0 e 1.

No extremo inferior, quando o parâmetro é nulo, têm-se redes completamente aleatórias, ou seja, redes não correlacionadas. No extremo superior, quando o parâmetro é unitário formam-se redes altamente correlacionadas, de estruturas segregadas, apresentando regiões onde poros grandes estão associados com gargantas grandes e poros pequenos com gargantas pequenas. A Figura 4 apresenta um exemplo representativo de um meio poroso hipotético. É mostrada uma vista de topo, mostrando as gargantas do meio poroso com interface com o fluxo de ar que passa pela fronteira aberta da rede conforme esquema que está apresentado na Figura 6. Na Figura 4, os dois modelos de rede foram gerados com as mesmas variáveis de entrada no programa, com a exceção de que no exemplo (4.1) não existe correlação espacial entre poros e gargantas, isto é, a rede gerada é completamente aleatória, enquanto que no exemplo (4.2) o parâmetro de

correlação que representa o grau de correlação do sistema é de 60%. Como pode ser visto nas figuras, poros (cubos) grandes estão conectados a gargantas (cilindros) grandes e poros pequenos a gargantas pequenas.



(4.1)

(4.2)

Figura 4 – Redes 10 x 10 x 10. (4.1) rede não correlacionada, (4.2) parâmetro de correlação de 60%.

3.5. FRACTAIS E AS PROPRIEDADES DO MEIO POROSO

Os conceitos de fractais [72] têm uma importância fundamental na caracterização da morfologia de meios porosos bem como fluxo e transporte dentro deles.

Um objeto fractal é aquele que é construído de forma recursiva ou que apresenta auto-similaridade. Isto significa que a forma do referido objeto aparece similar em todas as escalas de comprimento. Assim, qualquer parte de um objeto fractal é semelhante ao todo. Muitos objetos que possuem uma estrutura desordenada possuem uma simetria de escala, de tal forma que eles parecem similares em diferentes escalas de comprimento.

Um objeto fractal é aquele que apresenta alguns dos seguintes aspectos: é uma estrutura muito irregular para ser representada pela geometria Euclidiana; é uma estrutura auto-similar; tem a dimensão fractal ou dimensão de Hausdorff maior do que sua dimensão topológica. A dimensão fractal ou dimensão de Hausdorff é um número real não negativo que nos informa o quão densamente o conjunto ocupa o espaço métrico onde ele se encontra.

As estruturas fractais podem ser classificadas de acordo com a auto-similaridade. Assim, podemos falar de fractais auto-similares exatos ou fractais geométricos. Nos fractais geométricos uma parte do sistema é remanescente do todo. Desta forma, uma

parte do sistema parece similar ao sistema como um todo qualquer que seja a escala de comprimento.

Um outro tipo de fractal geométrico é conhecido como auto-similar estatisticamente. Esses sistemas são auto-similares e fractais apenas em um senso de média. Sistemas auto-similares estatisticamente significam que uma fotografia tirada do sistema não mostra auto-similaridade em várias escalas de comprimento. Todavia, levando em consideração muitas realizações e através da superposição, através da média das realizações, o sistema então parecerá auto-similar.

Também, muitas propriedades dinâmicas de sistemas desordenados e a suas médias são relacionadas aos processos por leis de potência com expoentes fracionários. Tais sistemas são conhecidos como fractais dinâmicos.

3.6. ESTRUTURA DO MEIO POROSO E A TEORIA DA PERCOLAÇÃO

Outra importante ferramenta na caracterização do fluxo e do transporte em sistemas porosos é dada pela teoria da percolação.

A teoria da percolação foi desenvolvida para matematicamente tratar meios desordenados, na qual a desordem é definida em função de uma variação aleatória no grau de conectividade do sistema. Assim, a teoria da percolação tem muito a ver com estatística, levando em consideração a morfologia e a condutividade de estruturas aleatórias.

De maneira ampla, a teoria da percolação está relacionada com a probabilidade de determinado evento ocorrer em um sistema e das propriedades do sistema a partir deste estudo. A teoria da percolação possibilita o estudo da interconectividade de várias regiões de um sistema ou meio poroso. A percolação nos diz como a interconectividade de várias regiões de um sistema afeta suas propriedades globais. Diz-nos também que se a fração volumétrica de regiões permeáveis de um sistema está abaixo de certo valor crítico (**pc**), chamado de limiar de percolação, o espaço poroso não é permeável e a permeabilidade global do sistema é zero.

Dependendo do estado de percolação do sistema e de quão longe ele está do seu ponto crítico, um processo de percolação pode levar a objetos fractais. A Figura 5 apresenta um sistema de percolação em rede quadrada.

Cada sítio no sistema é ocupado de forma aleatória, com uma probabilidade de ocupação (p), independente da ocupação dos sítios vizinhos. A teoria da percolação trata dos grupos de sítios vizinhos que estão ocupados, as ilhas ou “clusters”. Na Figura 5, p representa a probabilidade de ocupação e s o tamanho do “cluster” formado. Para a percolação em rede quadrada o limiar de percolação foi determinado como sendo de aproximadamente 0,59. Acima desse valor, existe pelo menos um “cluster” formado que atravessa, ou percola, a rede em todas as direções.

Os conceitos relacionados à teoria da percolação são muitos e o nosso objetivo neste estudo consiste na utilização de alguns desses conceitos para simular a evaporação de fluidos em meios porosos. Para maiores informações sobre a teoria da percolação existem livros que tratam do assunto [12,73].

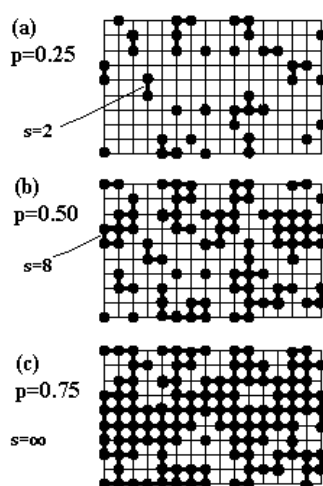


Figura 5 – Percolação em rede quadrada

Cinco quantidades obtidas da teoria da percolação são particularmente interessantes ao nosso estudo. Na caracterização de sistemas ou redes de percolação essas quantidades servem para definir as propriedades de transporte do sistema. São elas:

O número de coordenação (z) – que é o número de elementos conectados a cada elemento da rede.

O comprimento de correlação (ξ) – que é o raio típico de um “cluster” de percolação quando $p < p_c$, e a escala de comprimento acima da qual uma rede de percolação é macroscopicamente homogênea ($p > p_c$). Em qualquer simulação de Monte Carlo dos processos de percolação o comprimento linear L da rede deve ser maior do que o comprimento de correlação ξ para que os resultados sejam independentes de L .

A condutividade efetiva (G) – que é a condutividade da rede na qual as ligações ocupadas são condutoras e as vazias são isolantes.

A difusividade efetiva (D) e a permeabilidade hidrodinâmica (K) – se as ligações ocupadas representam poros através dos quais o fluxo ou difusão pode ocorrer, e as ligações vazias estão fechadas ao fluxo ou difusão, então uma difusividade efetiva e uma permeabilidade efetiva podem ser definidas.

O entendimento de um dado fenômeno em um meio poroso depende das diversas escalas de comprimento nas quais o sistema pode ser ou não homogêneo. Por homogêneo entende-se um sistema cujas propriedades são independentes do seu comprimento linear. Quando ocorrem heterogeneidades que persistem em diferentes escalas de comprimento, o comportamento global do sistema é dependente das propriedades de transporte, tais como difusão, convecção e condução, a forma como os fluidos se distribuem no meio poroso e a morfologia do sistema.

Conforme dito anteriormente, o comprimento de correlação tem o significado físico de que para escalas de comprimento L maiores do que ξ o sistema é macroscopicamente homogêneo. Todavia, para escalas de comprimento L menores do que ξ o sistema não é homogêneo, e as propriedades macroscópicas do sistema dependem de L . Neste caso, o “cluster” formado é estatisticamente auto-similar em todas as escalas de comprimento menores do que ξ . As propriedades que são dependentes da escala são uma assinatura de sistemas fractais. Uma vez estabelecido que um sistema é fractal, muito das leis da

física clássica tem que ser modificadas para representar corretamente o sistema. Por exemplo, a lei de Fick da difusão, com uma difusividade constante, não descreve apropriadamente os processos de difusão em sistemas fractais. O coeficiente de difusão é chamado de anômalo ou fractal uma vez que é dependente do tempo e do comprimento do sistema.

3.7. EQUAÇÕES GOVERNANTES DA EVAPORAÇÃO NO MEIO POROSO

Uma vez definido como o meio poroso será representado, a etapa seguinte consiste em se determinar como equacionar a evaporação do fluido no meio poroso.

No início do processo, o meio poroso está completamente saturado com o fluido a ser evaporado. No presente estudo, o fluido evaporado foi limitado ao n-Hexano. Todas as faces do cubo representando o meio poroso são impermeáveis ao fluxo, com exceção da face superior, por onde ocorre a evaporação do fluido. Uma corrente de gás, no presente estudo, o ar, passa continuamente pela fronteira aberta do meio poroso, conforme apresentado na Figura 6.

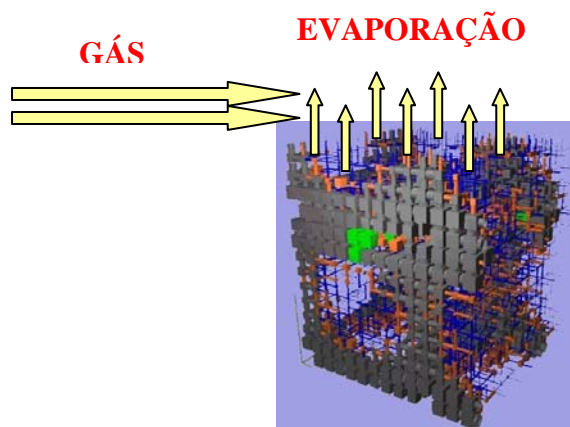


Figura 6 – Evaporação no modelo de rede.

3.7.1 A Evaporação Devido aos Efeitos Capilares

A evaporação é assumida como um processo lento, de tal forma que os efeitos capilares dominam o processo. Também, não se tem gradientes de temperatura significativos dentro do meio poroso, ou seja, o processo se desenvolve isotermicamente. A adsorção

que pode ocorrer entre alguns líquidos e a matriz sólida do meio poroso não é levada em consideração. O fluido presente no meio poroso inicialmente evapora devido à transferência de massa entre a interface elementar líquido-gás na fronteira aberta da rede e o gás que passa através do topo do meio poroso. Isto causa um retrocesso no menisco líquido-gás em uma das gargantas dos poros localizados na superfície do meio poroso.

A princípio, a dinâmica do processo se dá de acordo com a dinâmica da percolação de invasão, ou seja, apenas um par garganta/poro é invadido em cada tempo simulado. O fluido que estava contido no par garganta/poro escolhido perde massa devido à evaporação sendo subsequente invadido pelo gás. O processo é repetido inúmeras vezes e assim o gás progressivamente invade o meio poroso anteriormente saturado com o fluido. Na medida em que a fase líquida evapora no meio poroso, ocorre a formação das ilhas de líquido isoladas, que são subsequente invadidas.

Assim, os principais mecanismos que devem ser incorporados no modelo de rede são: o processo de transferência de massa entre a fronteira aberta da rede e o gás circundante; o processo de difusão que ocorre na fase gasosa; as variações do equilíbrio termodinâmico local na interface líquido-gás; os efeitos capilares, modelados de acordo com a percolação de invasão e; o processo de formação, identificação e evaporação das ilhas de líquido formadas.

Inicialmente o processo ocorre com a transferência de massa convectiva na fronteira aberta da rede. O fluxo molar de líquido que evapora na fronteira aberta da rede é modelado por meio de um mecanismo de transferência de massa em estado estacionário entre fases, de acordo com a teoria das duas resistências. A transferência de massa, por unidade de área, para um componente **A** líquido, é definida como uma função da diferença de concentração entre a superfície líquida e o gás circundante, e um coeficiente de transferência de massa convectivo, k_A , de acordo com a Equação (1).

$$N_{A,z} = k_A (C_{A,i} - C_{A,\infty}) \quad (1)$$

Na Equação (1), $N_{A,z}$ é o fluxo molar unidimensional na direção z do componente **A** através do componente **B**; k_A é o coeficiente de transferência de massa convectiva em

relação ao componente A; $C_{A,i}$ é a concentração da espécie A na interface líquido-gás e $C_{A,\infty}$ é a concentração da espécie A no gás circundando a rede gerada.

A expressão (1) pode ser re-escrita levando-se em conta o fluxo de massa do componente A que atravessa a área de um cilindro ou garganta do meio poroso, área essa dada por $\pi d^2/4$. Também, quando se trata da fase gasosa, as concentrações são freqüentemente expressas em termos de pressões parciais. Sob condições nas quais a lei do gás perfeito se aplica, $p_A V = n_A RT$, a concentração do componente A é dada por:

$$C_A = \frac{n_A}{V} = \frac{P_A}{RT} \quad (2)$$

Ainda, se a resistência à transferência de massa na interface for nula, a pressão parcial do componente A na interface i, $p_{A,i}$, é a pressão parcial no equilíbrio. No presente trabalho a pressão parcial no equilíbrio é assumida ser a pressão de vapor do líquido no equilíbrio na interface, p_{vap}^0 .

Ainda, sabendo-se que o fluxo molar, $N_{A,z}$, se relaciona com o fluxo mássico, $n_{A,z}$, através da massa molar, M_A , do componente A do sistema analisado, tem-se, para uma área transversal cilíndrica, incorporada pelas gargantas do meio poroso:

$$n_{A,z} = k_A \frac{M_A}{RT} \frac{\pi d^2}{4} (p_{A,i} - p_{A,\infty}) \quad (3)$$

Na Equação (3) a variável d é o diâmetro de uma garganta qualquer no modelo de rede gerado, enquanto $p_{A,\infty}$ é a pressão parcial do componente A no gás circundando a rede. O valor dessa pressão parcial é desconhecido, já que não se conhece o padrão de escoamento do gás na fronteira aberta da rede. Neste trabalho, a pressão parcial do componente A no gás circundando a rede será definida como uma pressão parcial de referência do líquido A na fase gasosa.

Sob circunstâncias normais o coeficiente de transferência de massa convectiva não é constante e varia espacialmente. Em geral, este coeficiente é uma função da geometria do sistema, das propriedades do fluido e do fluxo e da diferença de concentração. Como a geometria na fronteira aberta da rede é variável, isto causará também uma variação no fluxo da corrente de ar que passa pelo topo da rede, modificando espacialmente o valor

do coeficiente de transferência de massa. No presente trabalho um valor constante para esta variável será assumido, de acordo com a abordagem utilizada por Laurindo e Prat [28]. Uma vez que não estamos interessados na cinética do processo, mas na distribuição de fases dentro do meio poroso, esta hipótese não invalida o estudo efetuado.

Finalmente, a pressão parcial de referência foi assumida como tendo um valor de tal forma que o fluxo de massa difusivo que ocorre dentro do meio poroso da rede gerada é aproximadamente 10 vezes menor do que o fluxo de massa convectivo que ocorre na fronteira aberta da rede. Esta é uma aproximação que tem como objetivo facilitar os cálculos efetuados. Isto porque se deseja evitar variações muito grandes entre o fluxo de massa convectivo que ocorre na fronteira aberta da rede e o fluxo de massa difusivo que ocorre no interior da mesma, causando problemas de capacidade de memória na utilização do programa. É sabido que a transferência de massa, devido à convecção entre dois fluidos relativamente imiscíveis em movimento relativo, depende tanto das propriedades de transporte como das características dinâmicas do fluido que está em movimento.

Também, o valor assumido para o coeficiente de transferência de massa convectivo foi tal que essa relação entre o fluxo de massa difusivo e convectivo fosse mantida. Isto foi feito assumindo que $k_A = D_{AB}/\delta$ sendo $\delta = \text{ESP}/10$, onde ESP é o espaçamento da rede gerada. Este espaçamento refere-se à distância entre o centro de dois poros quaisquer dentro do meio poroso gerado.

Esta relação entre o coeficiente de massa convectivo e o coeficiente de massa difusivo é obtida a partir da utilização da teoria de filme. Esta teoria é baseada na presença de um filme de fluido fictício que estaria em fluxo laminar próximo à fronteira do sistema. Este filme por definição ofereceria a mesma resistência à transferência de massa que efetivamente existe no fluido escoando como um todo. A relação entre os dois coeficientes é feita, de acordo com a teoria, através do parâmetro δ , que é a espessura do filme de líquido fictício. Uma vez que tal filme de líquido em fluxo laminar efetivamente não existe, o parâmetro δ não pode ser calculado.

Como já dito, uma vez que estamos interessados no padrão de evaporação do fluido dentro do meio poroso e não na cinética de evaporação, estas aproximações não invalidam o presente estudo. Assim:

$$n_{A,z} = \frac{M_A}{RT} \frac{10D_{AB}}{ESP} \frac{\pi d^2}{4} (P_{vap}^0 - p_{A,\infty}) \quad (4)$$

Para saber qual garganta localizada na fronteira aberta da rede e/ou dentro do meio poroso será invadida, em cada passo da simulação, cada “cluster” existente na rede é identificado. Cada “cluster” presente terá uma garganta específica que eventualmente será drenada naquele passo. Para cada “cluster”, a escolha dessa garganta será feita levando-se em conta a determinação da garganta de menor potencial de invasão, ou seja, de maior diâmetro, de acordo com a equação de Young-Laplace, Equação (5). A garganta que apresentar o menor potencial de invasão é aquela que será preferencialmente invadida. Quanto maior for o diâmetro de uma dada garganta, menor será o potencial de invasão associado àquela garganta.

$$P_c = \frac{4\sigma}{d} \cos \theta \quad (5)$$

Na Equação (5) P_c é a pressão capilar de uma dada garganta; d é o diâmetro da referida garganta e σ é a tensão interfacial entre o líquido preenchendo a rede e o gás que a circunda. Desta forma, cada uma das gargantas pertencentes a cada um dos diferentes “clusters” existentes no meio poroso terá a pressão capilar calculada.

Assim, determina-se o número de “clusters” presentes na rede e quais as gargantas de cada um dos “clusters” que poderão ser drenadas. A escolha da garganta que perderá massa por evaporação será feita através do cômputo do fluxo mássico de líquido que evapora para cada “cluster” existente. Este fluxo mássico totalizado de cada garganta de um “cluster” específico será atribuído à garganta de menor potencial daquele “cluster”. Assim, o “cluster” que perderá massa devido à evaporação será aquele que levar menor tempo. A escolha da garganta que perderá massa por evaporação ocorre, como foi dito, de acordo com a teoria da invasão de percolação, com somente um par garganta/poro sendo invadido a cada tempo simulado.

No cálculo da pressão capilar em cada garganta do meio poroso é assumido que a fase líquida é perfeitamente molhante, ou seja, tem-se $\cos \theta = 1$.

Uma vez definidas as etapas iniciais do processo de evaporação, restam ainda a determinação dos processos de difusão na fase gasosa e a condição de equilíbrio existente na interface dentro do meio poroso.

Considerando-se a transferência de massa unidimensional, independente de reação química, em regime estacionário para um sistema binário, pode-se mostrar que o fluxo molar do componente **A**, $N_{A,z}$, com relação a um sistema de coordenadas espaciais fixas, definido em termos da concentração total do sistema, c , e da sua fração molar y_A , é dado por [74]:

$$N_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A (N_{A,z} + N_{B,z}) \quad (6)$$

Na Equação (6) D_{AB} é o coeficiente de difusão entre os componentes **A** e **B**; $N_{B,z}$ é o fluxo molar do componente **B**. Nessa equação pode-se observar que o primeiro termo no lado direito da Equação (6) refere-se ao fluxo molar resultante do gradiente de concentração. Este termo é referido como a contribuição do gradiente de concentração. O segundo termo refere-se ao fluxo molar resultante quando o componente **A** é carregado no fluxo que ocorre no seio do fluido. Este termo é referido como a contribuição devida ao movimento médio.

No esquema de evaporação proposto conforme apresentado na Figura 6, assumiu-se que cada garganta preenchida com líquido em contato com o ar circundante na superfície aberta da rede e que cada garganta preenchida com líquido em contato com o ar dentro do meio poroso pode ser aproximado por um sistema como aquele proposto para uma célula de difusão de Arnold. Neste sistema a difusão de um componente ocorre através de um filme de gás estagnado [74]. Um esquema da célula de difusão de Arnold está mostrado na Figura 7.

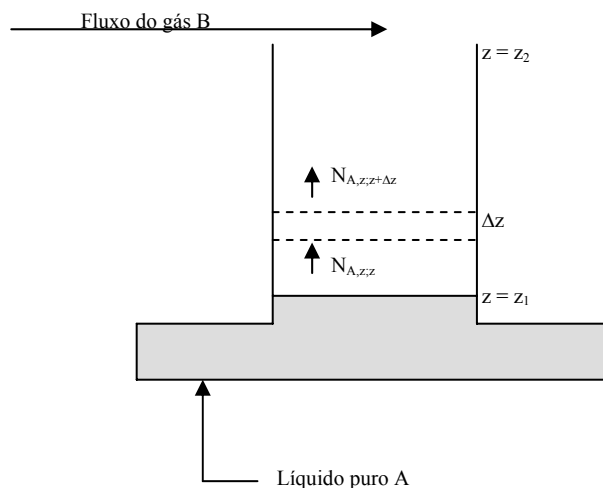


Figura 7 – Célula de difusão de Arnold

No sistema proposto, o tubo estreito que está parcialmente preenchido com o líquido puro **L**, composto por um componente único **A**, é mantido à temperatura e pressão constantes. O gás **B** que flui através da extremidade aberta do tubo tem uma solubilidade desprezível no componente líquido **A**. Também o gás **B** é quimicamente inerte em relação ao componente **A**.

A Equação (6) pode ser reduzida à Equação (7) ao se considerar apenas o plano z_1 e a restrição de que o gás **B** é insolúvel no componente **A** na fase líquida. Então, $N_{B,z}$ é zero na posição z_1 , levando à conclusão de que o fluxo líquido de **B** é zero através de todo o caminho de difusão, ou seja, **B** é um gás estagnado. Assim:

$$N_{A,z} = -\frac{cD_{AB}}{1-y_A} \frac{dy_A}{dz} \quad (7)$$

A Equação (7) pode ser integrada entre as duas condições de contorno: em $z = z_1 \Rightarrow y_A = y_{A,1}$ e em $z = z_2 \Rightarrow y_A = y_{A,2}$. Assumindo-se que o coeficiente de difusão é independente da concentração e sendo $N_{A,z}$ constante ao longo do caminho de difusão, o componente **A** evapora e se difunde na fase gasosa a uma taxa de evaporação que pode ser matematicamente expressa em termos do fluxo molar, dado pela Equação (8).

$$N_{A,z} = \frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)} \ln \frac{(1 - y_{A,2})}{(1 - y_{A,1})} \quad (8)$$

Na derivação da Equação (8) foi assumido um sistema binário **A+B**, em regime estacionário, sem reação química, em um processo de difusão unimolecular e unidimensional na direção z apenas.

A Equação (8) pode ser empregada no cálculo do fluxo difusivo entre dois poros de gás existentes dentro da rede. Assume-se que a fase gasosa se comporta como um gás ideal. A distância ($z_2 - z_1$) é, em nosso sistema, o espaçamento ESP do meio poroso, sendo a distância entre o centro de dois poros quaisquer. Expressando a taxa de difusão do componente **A** em termos mássicos e levando-se em conta o fluxo mássico que atravessa a área de um cilindro ou garganta do meio poroso, chega-se a:

$$n_{A,z} = P \frac{M_A}{RT} \frac{\pi d^2}{4} \frac{D_{AB}}{ESP} \ln \frac{(P - p_{A,2})}{(P - p_{A,1})} \quad (9)$$

A Equação (8) pode também ser aplicada para um poro de líquido conectado a um poro de gás adjacente. Neste caso, como foi assumido que cada cilindro do meio poroso encontra-se sempre cheio ou completamente drenado, a distância ($z_2 - z_1$) não é mais o espaçamento do meio poroso, sendo na verdade a distância entre o centro de um poro e a sua extremidade, incorporada na Equação (10) através da variável TAMPOROS. Assim:

$$n_{A,z} = P \frac{PM_A}{RT} \frac{\pi d^2}{4} \frac{D_{AB}}{TAMPOROS/2} \ln \frac{(P - P_{A,2})}{(P - P_{vap}^0)} \quad (10)$$

Em cada etapa do processo, na medida em que o fluido evapora e o ar começa a invadir o meio poroso, é necessário o conhecimento do campo de pressão parcial dentro de cada poro da rede que já está ocupado pela fase gás para ser possível o cálculo dos fluxos evaporativos. Isto é conseguido efetuando-se o balanço de massa em cada nó da rede. Utilizando a lei das malhas de Kirchoff, obtêm-se um sistema linear de equações com tantas equações quantos forem os poros evaporados da rede. Em cada etapa do processo o campo de pressão parcial é atualizado e a evaporação do meio poroso prossegue até que todo líquido presente tenha evaporado. Na presente simulação, o processo de evaporação tem lugar até que o ar atinja a base do meio poroso.

No equacionamento global do processo, resta ainda modelar o aparecimento das ilhas de líquido no meio poroso. Conforme dito anteriormente, a identificação destes “clusters”

será efetuada de acordo com um algoritmo específico. O algoritmo gerado é uma modificação efetuada em relação ao algoritmo original de Hoshen e Kopelman [39]. Essa modificação leva em consideração o fato de que não basta somente o poro (ou garganta) vizinho ao poro analisado estar ocupado por uma dada partícula, mas que também exista pela menos uma garganta ligando o referido poro a um outro poro vizinho que esteja ocupado.

As condições de contorno para a fase gás são dadas pela concentração conhecida do gás passando pela fronteira aberta da rede, o equilíbrio termodinâmico na interface com o líquido e as fronteiras impermeáveis nas laterais do meio poroso.

Para a fase líquida tem-se que inicialmente ela é limitada pelas fronteiras impermeáveis das laterais e do fundo do meio poroso, onde na medida em que a evaporação vai ocorrendo ocorre a formação das ilhas de líquido. Assim, para a fase líquida contínua existente no meio poroso, o que exclui as ilhas de líquido formadas durante a evolução do processo, as condições de contorno são as fronteiras impermeáveis nas laterais e no fundo do meio poroso e o equilíbrio termodinâmico na interface com o vapor. Para as ilhas formadas pelo processo de evaporação assume-se apenas o equilíbrio termodinâmico com o vapor em todas as ligações.

O diagrama de fluxo de todo o processo está mostrado na Figura 8. Ele mostra o uso da teoria da percolação na representação do meio poroso e das equações acima para cálculo do processo de evaporação no modelo de rede gerado.

3.7.2 O Efeito Kelvin-Thomson e Sua Influência no Padrão de Evaporação

Além dos efeitos capilares, foi analisado também o efeito Kelvin-Thomson e sua influência no perfil da distribuição de fases dentro do meio poroso.

Em seu trabalho relacionado com a evaporação de um líquido em um meio poroso, Laurindo e Prat [28,29] mostraram que o processo de evaporação pode ser diretamente relacionado com um processo de drenagem na percolação de invasão. A drenagem é

definida como um processo onde um fluido molhante preenchendo o meio poroso é deslocado por um fluido não molhante.

A molhabilidade descreve a preferência relativa da rocha de ser coberta por certa fase. Uma rocha é definida ser molhável à água se ela tem mais afinidade pela água do que pelo óleo. De maneira oposta, a rocha é dita ser molhável ao óleo. Usualmente, arenitos encontrados em rochas reservatórios de petróleo apresentam um caráter intermediário de molhabilidade. Molhabilidade intermediária significa um comportamento híbrido, com alguns poros sendo molháveis pela água e outros sendo molháveis pelo óleo. Para sistemas líquido-gás é possível seguramente se assumir que a fase gás é sempre a fase não molhante.

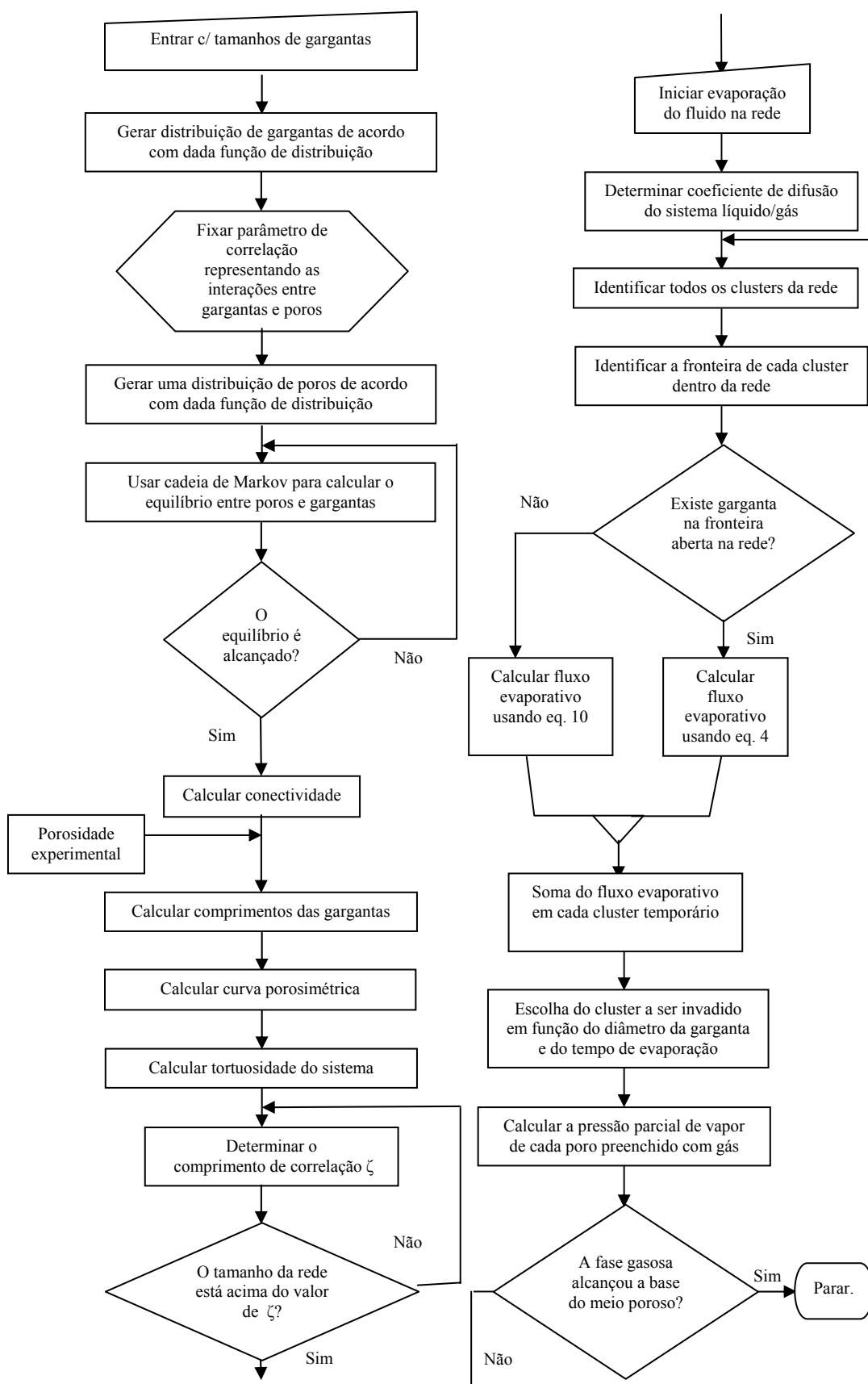


Figura 8 – Fluxograma do processo de evaporação

No presente trabalho, a fase líquida, isto é, n-Hexano, é assumida ser a fase molhante, enquanto o vapor de n-Hexano mais o ar constituem a fase não molhante. Desta maneira, a forma de cada interface líquido-gás em cada garganta do meio poroso pode ser dada conforme o esquema apresentado na Figura 9.

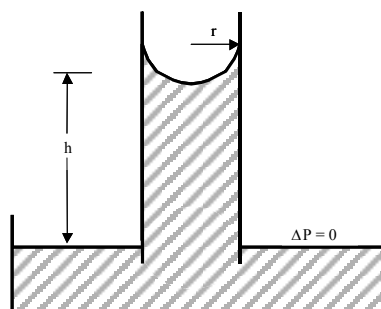


Figura 9 – Forma capilar da interface líquido-gás

A diferença de pressão através da interface é dada, como descrito anteriormente, pela equação de Young-Laplace. O seu sinal é tal que a pressão na fase líquida é menor do que a pressão na fase gasosa. Extrapolando este fato para o cálculo da pressão de vapor de um líquido em uma superfície curva, como mostrado na Figura 9, observa-se que a pressão de vapor sobre uma superfície curva é menor que a pressão de vapor para uma superfície lisa equivalente. O comportamento oposto se mantém para um fluido não molhante. Para água, com raio r menor do que aproximadamente $0,05 \mu\text{m}$, a pressão de vapor de saturação dividida pela pressão de vapor de saturação sobre uma superfície lisa é significativamente menor do que 1. Para um raio maior do que $0,05 \mu\text{m}$, o efeito Kelvin-Thomson não é importante. Todavia, se o sistema tratado compreende um material de alta massa molar, isto é, compostos orgânicos, o efeito Kelvin-Thomson é importante mesmo para gargantas maiores. O efeito Kelvin-Thomson é matematicamente expresso pelo uso da Equação (11) [34].

$$p_{vap} = p_{vap}^0 \exp\left(-\frac{4\sigma PM_A}{RT\rho_A d}\right) \quad (11)$$

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. LINGUAGEM UTILIZADA

A linguagem utilizada no presente trabalho para a construção do código do programa é a FORTRAN 90. Nos diversos textos sobre linguagens de programação existentes, pode-se encontrar uma série de razões que justificam o uso de um ou outro tipo de linguagem, como, por exemplo, a linguagem de programação FORTRAN ou C⁺⁺. Não nos interessa este tipo de abordagem no presente trabalho. Estamos interessados apenas em construir um código computacional que possa ser empregado nas nossas simulações. O emprego da linguagem de programação FORTRAN é justificado apenas pela familiaridade que temos no seu emprego em simulações matemáticas. No anexo I é mostrado o programa fonte do processo de evaporação de acordo com o apresentado no presente trabalho. No anexo II é mostrado um outro programa em FORTRAN cuja função é criar um arquivo de entrada para gerar as figuras tridimensionais do meio poroso estudado. Esta linguagem utilizada para a exibição do meio poroso chama-se VRML (Virtual Reality Modelling Language).

4.2. OS DADOS EXPERIMENTAIS E O AJUSTE DO MODELO

Na construção do meio poroso foram utilizados os dados experimentais para o arenito de Clashac [58-61] disponíveis na literatura. Estes dados foram utilizados para ajuste do modelo e previsão de algumas de suas propriedades. A Tabela 1 apresenta uma comparação entre alguns dos resultados experimentais e simulados.

Tabela 1 – Propriedades do Arenito de Clashac

	Conectividade	Porosidade (%)	Diâmetro de Garganta Característico (µm)	Espaçamento entre camadas da rede (µm)	Tortuosidade
Experimental	3.0 – 3.5	11.3	22.0	144 – 250*	2.4 – 2.8
Simulado	2.8	11.3	20.0	310	3.2

*Resultado obtido de simulação [59]

Alguns dos dados experimentais, tais como a porosidade, distribuição de tamanhos de gargantas e área superficial foram determinados utilizando-se o método da intrusão de mercúrio. Nesse método o mercúrio é forçado a invadir as gargantas de um meio poroso qualquer quando um gradiente de pressão é aplicado. O mercúrio é um fluido não molhante, isto é, um fluido que apresenta um ângulo de contato com a rocha do meio poroso menor que 90° . Sendo não molhante, é necessária a aplicação de uma força crescente para que o mercúrio penetre o espaço poroso do material na medida em que o tamanho das gargantas do meio poroso diminui. Inicialmente, como esperado, as gargantas maiores vão sendo inicialmente invadidas. O volume de mercúrio injetado é registrado como uma função da pressão e então, usando a porosidade e o volume da amostra, o volume de mercúrio pode ser convertido em porcentagem de espaço poroso ocupado.

Na comparação entre os resultados experimentais e simulados para o arenito de Clashac, a porosidade de 11,3% do meio poroso, determinada experimentalmente, foi utilizada como parâmetro de ajuste do modelo numérico. O espaçamento da rede foi estabelecido em função da distância mínima necessária para fornecer a porosidade desejada. A conectividade do sistema, bem como o diâmetro característico e sua tortuosidade foram obtidos através da previsão fornecida pelo modelo.

O espaçamento da rede é a distância entre o centro de dois poros quaisquer dentro da rede gerada. De forma inversa à modelagem efetuada por Matthews et al [58-61] na determinação das propriedades de arenitos e outros meios porosos, o aumento no espaçamento do meio poroso no presente modelo causa um aumento da porosidade devido ao aumento no comprimento das gargantas.

O valor do espaçamento da rede foi comparado com outros resultados obtidos de simulação para o mesmo arenito de Clashac [59,61]. O valor simulado foi da ordem de três vezes maior que o obtido pelo outro modelo. Isto não é de se estranhar, uma vez que o modelo da literatura representa um caso específico do presente modelo. Naquele caso o tamanho de cada poro do sistema é igual ao tamanho da maior garganta a ele conectado. Esta particularidade pode ser representada pelo presente modelo ao se

admitir uma interação entre poros e gargantas de 100%. Além disso, ter-se-ia que arbitrar, o que não é possível de ser feito no modelo atual, que cada poro tivesse o mesmo diâmetro que a maior garganta a ele conectada. Isto obviamente leva a um menor espaçamento na rede gerada uma vez que a porosidade do sistema será em grande parte fornecida pelo aumento forçado no tamanho dos poros.

Convém observar que a conectividade do sistema, como mostrada na tabela 1, é dada pela média aritmética do número de coordenação de cada poro. O número de coordenação refere-se ao número de gargantas ligadas a cada poro individualmente dentro do meio poroso. Esse número pode variar, no presente modelo, de 0 a 6 gargantas ou cilindros ligados a cada poro ou cubo em particular. A conectividade para o arenito de Clashac, para uso na simulação, foi estabelecida como tendo um valor inicial igual a 3, sendo este um valor típico para arenitos [59].

Na determinação da conectividade do sistema o valor simulado final obtido como resultado das diferentes realizações do modelo situou-se um pouco abaixo em relação aos valores experimentais sugeridos para o arenito de Clashac. O erro relativo máximo obtido foi 20%. Uma explicação para isso pode ser dada porque o modelo utilizado leva em consideração o fato de que existe uma relação direta entre a conectividade do sistema e a curva de intrusão de mercúrio. A diminuição da conectividade do meio poroso causa um deslocamento do ponto de inflexão da curva de intrusão de mercúrio na direção dos diâmetros de gargantas menores. Isto ocorre devido ao fato de que poros maiores estão mais inacessíveis dentro do meio poroso, sendo necessário que uma garganta de diâmetro menor seja preenchida antes destes poros serem alcançados. Intuitivamente, pode-se esperar que quanto maior a conectividade entre os elementos do meio poroso mais rapidamente este meio poroso seja saturado com mercúrio. De fato, ao se aumentar o valor inicial da conectividade a ser usada pelo modelo observa-se um aumento direto na inclinação da curva de intrusão de mercúrio. Também, deve ser levado em consideração que quanto maior a conectividade do sistema analisado, maior deve ser o valor de tortuosidade obtido. Este comportamento já foi analisado anteriormente por Spearing e Matthews [61].

Com relação ao diâmetro característico do meio poroso, como mostrado na Tabela 1, observa-se uma boa concordância entre o valor simulado e o valor experimental. O diâmetro característico, refere-se ao ponto de inflexão na curva de intrusão de mercúrio. Este valor está relacionado ao momento em que o mercúrio percorre o meio poroso do topo até a base da amostra no teste de intrusão, correspondendo ao menor tamanho de poro que se encontra preenchido pelo mercúrio no momento citado. Também, o diâmetro característico é associado ao tamanho mais freqüente de garganta ou tamanho característico que ocorre dentro do meio poroso analisado.

A tortuosidade é uma das características mais importantes do fluxo de fluidos dentro de meios porosos. As definições atuais da tortuosidade são empíricas e não existe uma forma direta e independente de sua medida. A tortuosidade é fisicamente definida como o quadrado da razão do comprimento efetivo das gargantas de um meio poroso, através dos quais o fluxo de fluidos e a corrente elétrica ocorrem, e o comprimento linear paralelo à direção global das gargantas desse meio porosos. Ela reflete variações no fluxo de fluidos e corrente elétrica devido à variações no seu valor quando da variação da litologia, pressão e propriedades petrofísicas do meio poroso.

De acordo com a abordagem utilizada em Spearing e Matthews [61], a determinação numérica da tortuosidade é baseada na hipótese de que o meio poroso está sob influência de um campo potencial, seja ele elétrico ou devido a um gradiente de concentração. A tortuosidade é simulada então através do uso de um passeador aleatório ponderado. O caminho seguido pelo passeador aleatório é ponderado usando-se valores determinados de medidas de condutividade do meio fornecida pelos íons que o atravessam. Desta forma, a tortuosidade do meio poroso pode ser determinada.

É válido se observar que os cálculos da tortuosidade do sistema não foram usados como um parâmetro de ajuste no presente modelo. O objetivo inicial era se utilizar essa propriedade na determinação do comprimento de correlação do sistema analisado. Todavia, os resultados obtidos mostraram que o valor da tortuosidade foi observado ser uma função do tamanho da rede. Aumentando-se o tamanho da rede observou-se um aumento no valor de tortuosidade. Era esperado que o valor da tortuosidade atingisse

um patamar definido após um tamanho específico de rede gerada, representando a homogeneidade do sistema analisado, permitindo então o cálculo do comprimento de correlação do sistema. Este fato sugere que o método proposto na literatura por Spearing e Matthews [61] pode não ser apropriado. Além disso, o seu cálculo foi também utilizado para verificar se o modelo era capaz de prever com boa aproximação alguns valores experimentais.

Os dados da Tabela 1 foram decorrentes de um ajuste específico efetuado no modelo de rede gerado. Diferentes distribuições de poros e gargantas foram utilizadas para representar o meio poroso escolhido. O melhor ajuste foi obtido quando foi arbitrada uma distribuição exponencial decrescente com um fator de 0,5 para o diâmetro das gargantas do meio poroso e uma distribuição uniforme para os poros. Em adição, utilizou-se uma superposição de tamanhos entre gargantas e poros de 20%. A Figura 10 apresenta a distribuição de poros e gargantas de acordo com distribuições arbitradas para tamanho de garganta e tamanho de poro.

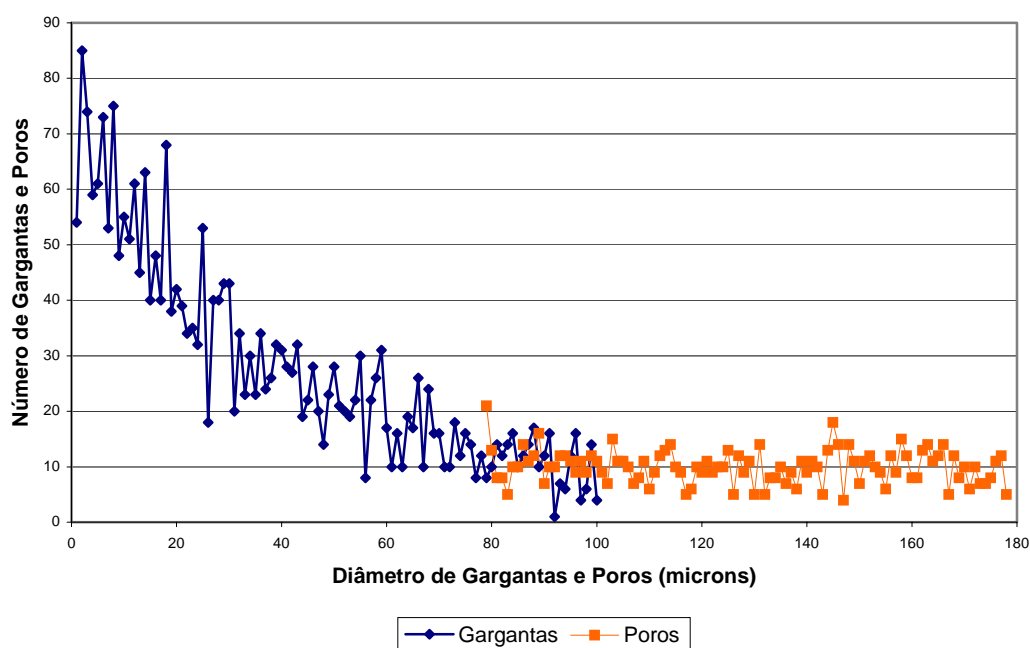


Figura 10 – Distribuição de Gargantas e Poros.

Já a Figura 11 apresenta a função de distribuição cumulativa de poros e gargantas, onde se mostra que a distribuição cumulativa de poros é maior do que a função cumulativa de

gargantas na rede gerada de acordo com o princípio de construção estabelecido para o modelo de rede.

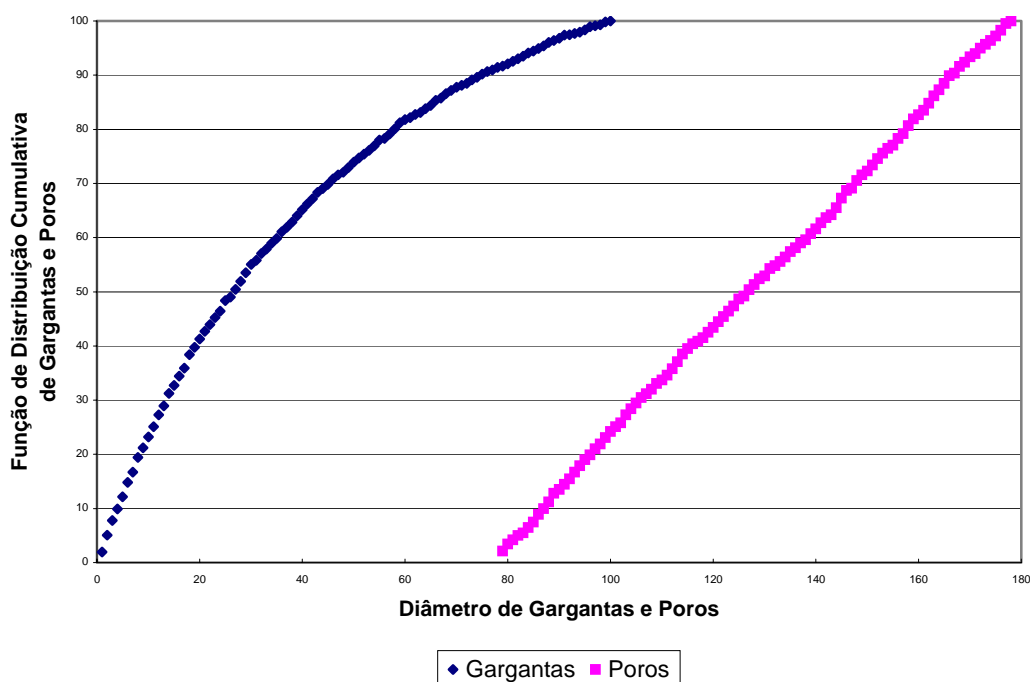


Figura 11 – Função de Distribuição Cumulativa de Gargantas e Poros.

A Figura 12 serve para mostrar as diferenças nas distribuições de poros e gargantas no meio poroso entre o presente modelo e o modelo de Matthews et al [59]. Na Figura 12 estão mostradas as estatísticas de distribuição de tamanhos de gargantas e poros para o arenito de Clashac, onde o modelo da literatura apresenta uma variação muito maior na estatística de distribuição do que o presente modelo.

As comparações dos resultados apresentados na Figura 12 mostram que o presente modelo apresenta uma variação muito menor de valores na distribuição de tamanhos de poros e gargantas. Este comportamento poderia ser o esperado uma vez que o arenito de Clashac é um arenito limpo, bem distribuído e com inclusões mínimas de argila [59,60].

Do ajuste efetuado com o presente modelo obteve-se a curva porosimétrica para o arenito de Clashac conforme apresentado na Figura 13. A porosimetria de mercúrio é provavelmente um dos métodos mais usados para a determinação de tamanho de poros, ou mais precisamente gargantas, de meios porosos.

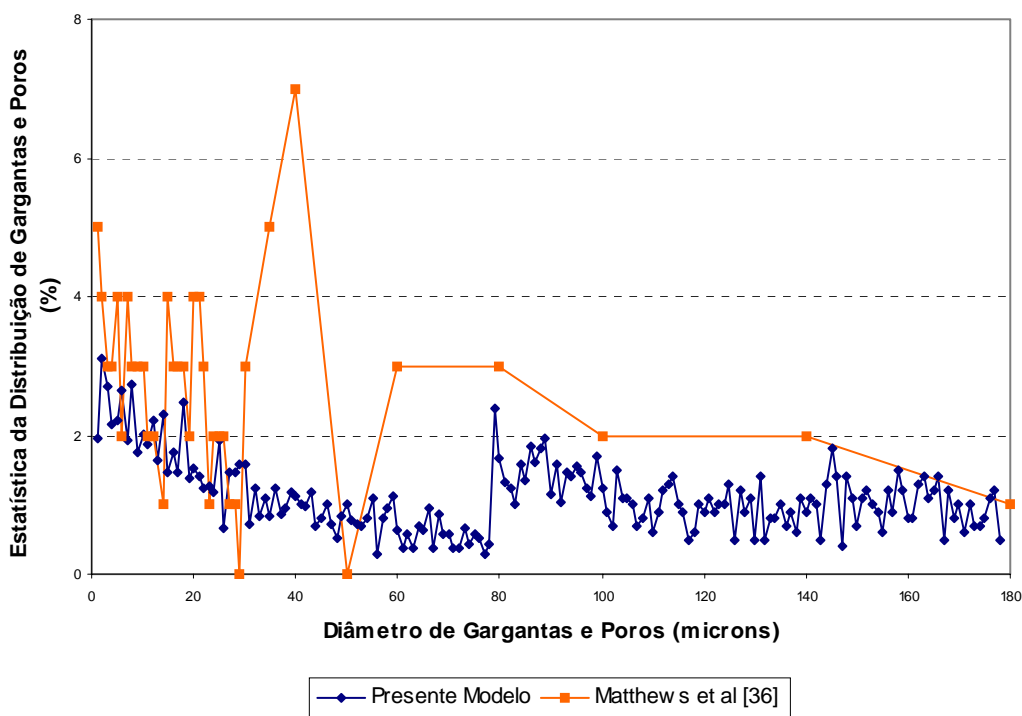


Figura 12 – Estatística de Distribuição de Tamanhos.

Matthews et al [59,60] descrevem diferentes modelos utilizados na literatura para representar a curva de intrusão e extrusão de mercúrio utilizando modelos de redes. Analisando os diferentes aspectos concluem que o modelo proposto por eles pode representar precisamente a curva de intrusão de mercúrio utilizando somente a distribuição de tamanho de gargantas, a correlação existente entre gargantas e poros e a conectividade. Convém lembrar que o modelo proposto pelos autores representa um aspecto particular do presente modelo utilizado. Para o presente modelo, observa-se uma boa concordância entre o resultado experimental e o simulado para a curva de intrusão de mercúrio, conforme Figura 13. A razão para simular a curva porosimétrica é garantir que o modelo tenha uma distribuição correta de tamanhos de poros e gargantas com a devida interconectividade.

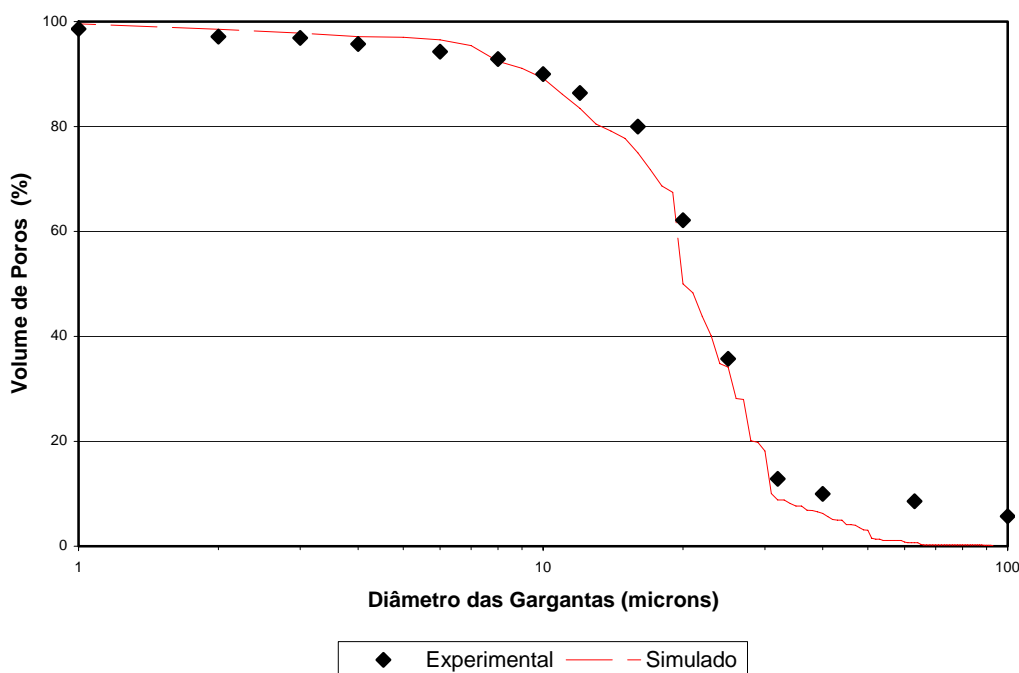


Figura 13 – Curva Porosimétrica para o Arenito de Clashac.

O efeito da correlação existente entre poros e gargantas apresentado pelo presente modelo é mostrado na Figura 14. A curva de intrusão de mercúrio experimental é comparada com graus de correlação crescentes entre esses elementos.

O resultado mostrado na Figura 14 para a curva de intrusão de mercúrio devido ao aumento da correlação existente entre os elementos da rede está em concordância com os estudos apresentados na literatura. De acordo com Tsakiroglou et al [55,62] uma correlação do tipo poro/garganta sem correlação do tipo poro/poro no sentido de formação de ilhas de poros de tamanhos similares tem pouco efeito na curva de intrusão de mercúrio. Eles afirmam que a existência daquele tipo de correlação torna a curva de intrusão de mercúrio de alguma forma mais larga, estendendo-se em ambas as direções de alta e baixa pressão. Ainda, a saturação residual de mercúrio é levemente menor do que aquela saturação residual para redes não correlacionadas.

Também, com o aumento da correlação existente entre poros e gargantas não se observou um aumento significativo da tortuosidade do sistema. Para cada interação estabelecida foram efetuadas 100 realizações da rede e o resultado da tortuosidade

média para cada sistema isolado e da média obtida dos sistemas situou-se em torno do valor de 3,4. O mesmo comportamento não foi observado quando o tamanho da rede foi aumentado de 10 para 50. Para a rede correlacionada com 20% de interação entre poros e gargantas a tortuosidade aumenta de 3,2 para a rede de tamanho 10, aumentando para um valor de 5,0 para uma rede de tamanho 50, sendo mantida a interação entre poros e gargantas. O aumento no valor da tortuosidade quando se aumenta o tamanho da rede significa que o valor da tortuosidade calculado utilizando a rotina proposta na literatura [61] é observado ser uma função do tamanho da rede. Este comportamento não era esperado, uma vez que os modelos gerados se encontram acima do comprimento de correlação do sistema e sabe-se que a tortuosidade é uma propriedade macroscópica do sistema. Este fato sugere que a rotina de cálculo proposta para a determinação numérica da tortuosidade pode não ser adequada.

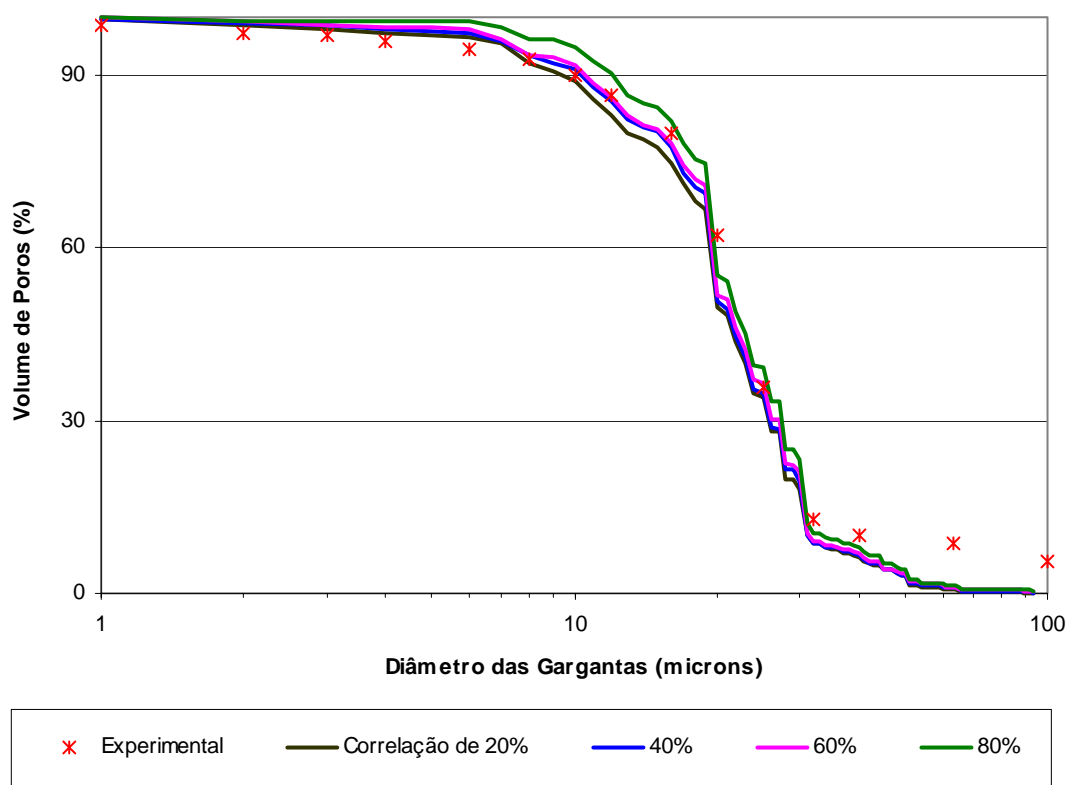


Figura 14 – Efeito da Correlação entre Tamanhos de Gargantas e Poros na Curva de Intrusão de Mercúrio.

4.3. DETERMINAÇÃO DO COMPRIMENTO DE CORRELAÇÃO

O primeiro passo na simulação, após a construção, ajuste e determinação de algumas das propriedades da rede, foi a determinação do comprimento de correlação (ξ) do sistema. Conforme explicado, o comprimento de correlação está relacionado com a escala de comprimento L acima da qual uma rede de percolação é macroscopicamente homogênea. Para valores abaixo de ξ os sistemas analisados são essencialmente sistemas fractais, levando a modificações importantes nas formulações das equações que representam o fenômeno.

A Figura 15 apresenta a determinação do comprimento de correlação para o arenito de Clashac. Observa-se que para tamanho de rede acima de 5 o sistema é macroscopicamente homogêneo. A curva na Figura 15 foi construída usando o método de contagem por caixas (“box-counting method”). Do gráfico gerado determinou-se a inclinação da linha reta mais a esquerda, cujo valor é de $-0,4629$.

A dimensão fractal está presente em regiões abaixo do comprimento de correlação e seu cálculo se efetua de acordo com o considerado por Kapitulnik et al [16]. Isto é feito de acordo com a relação dada por $D_f = \bar{d} - \beta/\nu$.

Na relação mostrada D_f é a dimensão fractal do sistema analisado, \bar{d} é a dimensão euclidiana desse sistema e $-\beta/\nu$ é dado pela inclinação da reta mostrada na Figura 15. Assim, o valor determinado na literatura para a dimensão fractal para sistemas em três dimensões ($D_f = 2,523$) é confirmado no presente estudo. Usando o valor de $-0,4629$ pode-se determinar a dimensão fractal do sistema, apresentando um valor de $D_f = 3 - 0,4629$, ou seja, $D_f = 2,5271$, valor muito próximo daquele apresentado.

Na determinação do comprimento de correlação foram utilizados tamanhos de rede de $60 \times 60 \times 60$. Contudo, por economia de tempo e esforço computacional, no estudo da evaporação do fluido dentro do meio poroso, foram analisadas redes com tamanhos menores que 60. Mais apropriadamente, redes de tamanho $10 \times 10 \times 10$, uma vez que para

este tamanho a rede já se apresenta macroscopicamente homogênea para o sistema estudado.

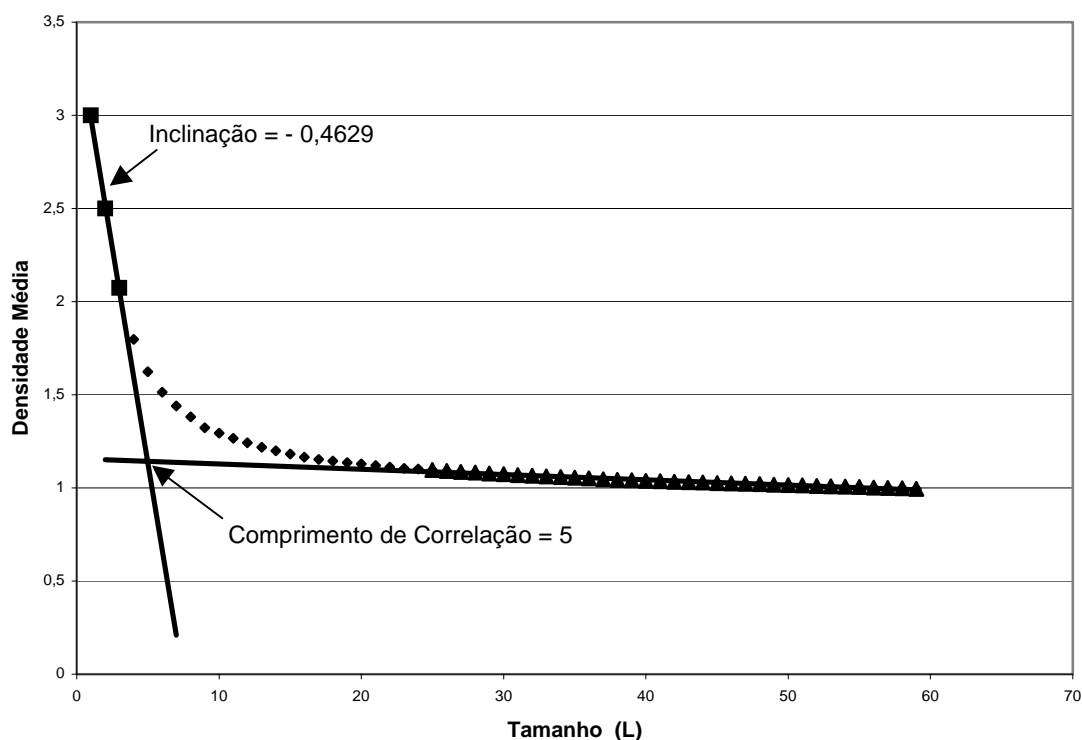


Figura 15– Comprimento de correlação para o sistema analisado.

Duas observações podem ser feitas com relação à determinação do comprimento de correlação. A primeira delas é que no modelo utilizado, na medida em que se aumenta o tamanho da rede analisada, mais próximo do valor reportado na literatura para a dimensão fractal de sistemas tridimensionais é o resultado encontrado. Isto se deve ao fato de que se aumentando o tamanho da rede, os efeitos de borda tornam-se menos importantes, permitindo-se a determinação de um valor mais próximo do esperado. Outra observação importante é a de que à medida em o sistema de percolação se afasta do ponto crítico (p_c) menor será o valor do comprimento de correlação do sistema. No presente estudo o “cluster” infinito ocupa praticamente toda a rede gerada, levando-nos a esperar um valor pequeno para o comprimento de correlação. Nos estudos efetuados por Kapitulnik et al [16] em redes quadradas de tamanho 180×180 , para $(p - p_c) = 0,022$ o valor de ξ é de aproximadamente 22, enquanto que ao se aumentar essa diferença para 0,035 esse valor diminui para um valor aproximado de 10.

4.4. EVAPORAÇÃO NA REDE

No início do processo de evaporação a rede encontra-se completamente saturada com um fluido único. Para o sistema estudado o n-Hexano foi escolhido, uma vez que permite uma comparação com os estudos efetuados na literatura [17,26,29,31,33,34]. A temperatura arbitrada foi de 20°C e a pressão de 1bar.

Durante todo o processo de evaporação existem “clusters” na rede que podem ser identificados como “clusters” permanentes ou temporários e o “cluster” principal. Os “clusters” permanentes estão associados a grupos de poros conectados entre si, mas que estão isolados do restante do sistema. Estes “clusters” usualmente permanecem no meio poroso durante todas as etapas da evaporação. Os “clusters” temporários aparecerão na medida em que o ar invade o meio poroso e desaparecerão na medida em que o sistema perde massa de n-Hexano para o ambiente. O “cluster” principal refere-se ao maior “cluster” presente na rede, também chamado de “cluster” infinito e é por onde o processo de evaporação principalmente irá ocorrer. A tabela 2 apresenta a distribuição inicial de “clusters” dentro da rede no início do processo.

Tabela 2 – Distribuição dos “Clusters” no Início do Processo de Evaporação

Nº “cluster”*	Rótulo do “cluster”	Tamanho do “cluster”	Nº “cluster”	Rótulo do “cluster”	Tamanho do “cluster”	Nº “cluster”	Rótulo do “cluster”	Tamanho do “cluster”
1	1	959	12	54	1	23	114	1
2	4	1	13	58	1	24	116	1
3	13	1	14	60	1	25	125	1
4	18	1	15	69	1	26	132	8
5	25	1	16	70	1	27	136	1
6	29	1	17	83	1	28	143	2
7	31	1	18	85	1	29	151	1
8	32	1	19	86	1	30	152	1
9	43	1	20	102	1	31	153	2
10	45	1	21	107	1	32	154	1
11	47	1	22	113	1	33	155	1
*Número de “clusters” na rede = 33								

Conforme explicado anteriormente as gargantas do meio poroso estão representadas por cilindros no modelo de rede gerado. Estes cilindros possuem um diâmetro variável entre 1 μm e 100 μm e um comprimento que dependerá dos tamanhos dos poros a eles conectados. Ainda, os poros estão representados por cubos. Uma vez que a superposição da distribuição de tamanhos das gargantas e da distribuição de tamanhos de poros foi determinada ser de 20%, os poros possuem uma variação de diâmetro que vai de 80 μm e 180 μm .

Na Tabela 2 observa-se que o “cluster” principal, denominado de “cluster” número 1, ocupa praticamente toda a rede do meio poroso gerado. Vê-se que aproximadamente 96% dos poros ocupados pertencem a esse “cluster” e que o número de “clusters” presente no início do processo de evaporação é de 33. Na medida em que a evaporação do fluido no meio poroso vai acontecendo o número de “cluster” inicial aumenta gradativamente devido ao aparecimento das ilhas isoladas de líquido, estabilizando em um valor de 67. Este é o número de “clusters” presente na rede quando o ar atinge a base do meio poroso. Na medida em que o meio poroso continua a perder massa de líquido devido a evaporação, o número de “clusters” presentes diminui, até que ao final do processo restem apenas os “clusters” permanentes existentes inicialmente na rede gerada.

A figura 16 apresenta uma realização da rede quando o modelo empregado utiliza os parâmetros ajustados e previstos para o arenito de Clashac.

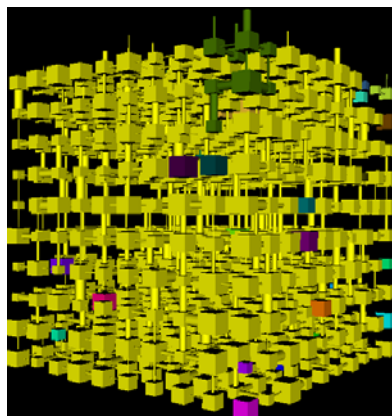


Figura 16– Arenito de Clashac Simulado.

Nas figuras subsequentes o poro isolado localizado no canto inferior, numa cor mais clara, representa o poro localizado na origem do sistema do eixo de coordenadas.

A Figura 17(a.1) até 17(a.6) apresenta diferentes momentos da evaporação do meio poroso mostrado na Figura 16. Para facilitar a visualização, os cubos e gargantas mostrados representam os poros e gargantas que perderam líquido devido ao processo de evaporação.

O processo se inicia com a evaporação da primeira garganta e do poro a ela associado e termina quando o ar penetra em todo o meio poroso. Na Figura 17(a.1) estão mostrados cerca de 33% do total de poros que perderam massa por evaporação até o momento em que o ar atinge a base do meio poroso. Na Figura 17(a.2) este número é de 66%, enquanto a Figura 17(a.3) mostra o momento em que o ar atinge a base do meio poroso. As demais figuras representam instantes posteriores nos quais o ar penetra no sistema de uma maneira uniforme até a completa evaporação do líquido.

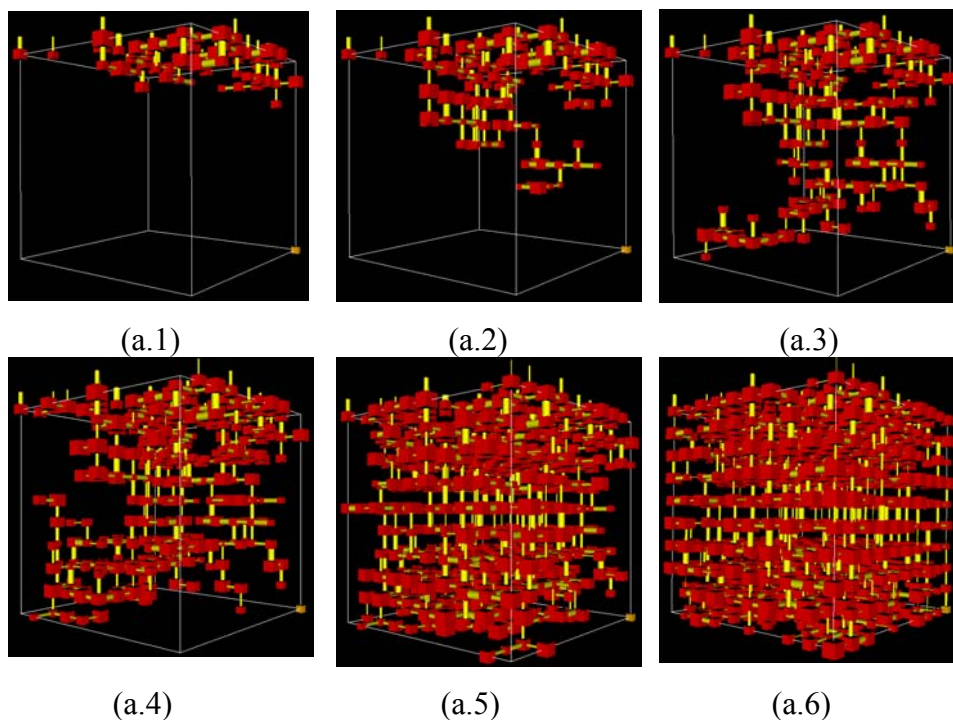


Figura 17 – (a.1) Início; (a.2) 66% dos poros evaporados antes do ar alcançar a base do meio poroso; (a.3) ar atinge a base do meio poroso; (a.4), (a.5) momentos posteriores; (a.6) final do processo.

Os resultados apresentados na Figura 17 são consistentes com os resultados apresentados na literatura para redes tridimensionais [17,36]. O comportamento observado na evaporação do líquido obedece a um padrão no qual em um primeiro estágio o gás invade a região do meio poroso próximo à sua superfície aberta. São observadas estruturas ramificadas de um padrão semelhante a estruturas fractais típicas da percolação por invasão [36]. Para todos os casos analisados, onde o tamanho da rede foi maior do que o comprimento de correlação, após a invasão inicial dos poros superficiais, ocorre a formação de canais preferenciais de invasão do gás no meio poroso, que pode ser associado à formação de um “fingering” capilar principal, que se perpetua pela rede até o momento em que o fluido invasor atinge a base do meio poroso. Este resultado foi confirmado nas simulações efetuadas com tamanhos de rede maiores e mostradas na Figura 20. A partir deste momento, um segundo bloco de evaporação cresce a partir da base do meio poroso até o momento em que o bloco evaporado próximo à superfície aberta do meio poroso se liga a este bloco formando um bloco único de evaporação. A partir deste ponto até o final, o processo de evaporação parece acontecer de forma essencialmente homogênea, com o meio poroso sendo progressivamente seco.

Em um dado momento no processo de evaporação simulado o “cluster” inicial de líquido que atravessava toda a rede é fragmentado em duas porções principais. Isto ocorre quando o poro de número 144 perde massa por evaporação. Este ponto é correspondente ao poro (5,2,8), quando o número de “clusters” presentes na rede é de 61. A partir deste ponto o “cluster” principal que inicialmente preenchia toda a rede se divide em duas porções principais. Este parece ser o início da fragmentação do “cluster” de líquido que preenche o meio poroso. O processo de secagem continua, passando pelo “breakthrough”, momento em que o ar atinge a base do meio poroso. Após este momento, ocorre a desconexão do “cluster” de líquido principal (DCP), conforme explicado parcialmente por Le Bray e Prat [17], terminando com a evaporação total do meio poroso. Ainda, na figura 17(a.5) o processo de evaporação parece estar completamente homogêneo dentro do meio poroso. Este ponto pode ser associado ao período de evaporação constante, denominado CRP – “Constant Rate Period”, citado por aqueles autores.

Por sua vez, a Figura 18 apresenta três etapas características observadas durante o processo de evaporação. Estas etapas servem para mostrar a evolução da estrutura da fase líquida dentro do meio poroso simulado durante a etapa de secagem, ou evaporação. Também, serve para a análise da fragmentação da fase líquida em “clusters” isolados dentro do meio poroso. Estas etapas têm uma importância fundamental nos estudos relacionados à compreensão dos vários períodos de secagem observados em meios porosos na literatura [17].

O primeiro momento refere-se ao instante no qual o “cluster” de líquido começa a se fragmentar (FCL); o segundo momento refere-se ao instante no qual o ar atinge a base do meio poroso, chamado de “breakthrough” (BT), e finalmente o terceiro momento refere-se ao instante onde não existe mais um “cluster” de líquido atravessando toda a rede em todas as direções, conhecido como desconexão do “cluster” principal de líquido (DCP).

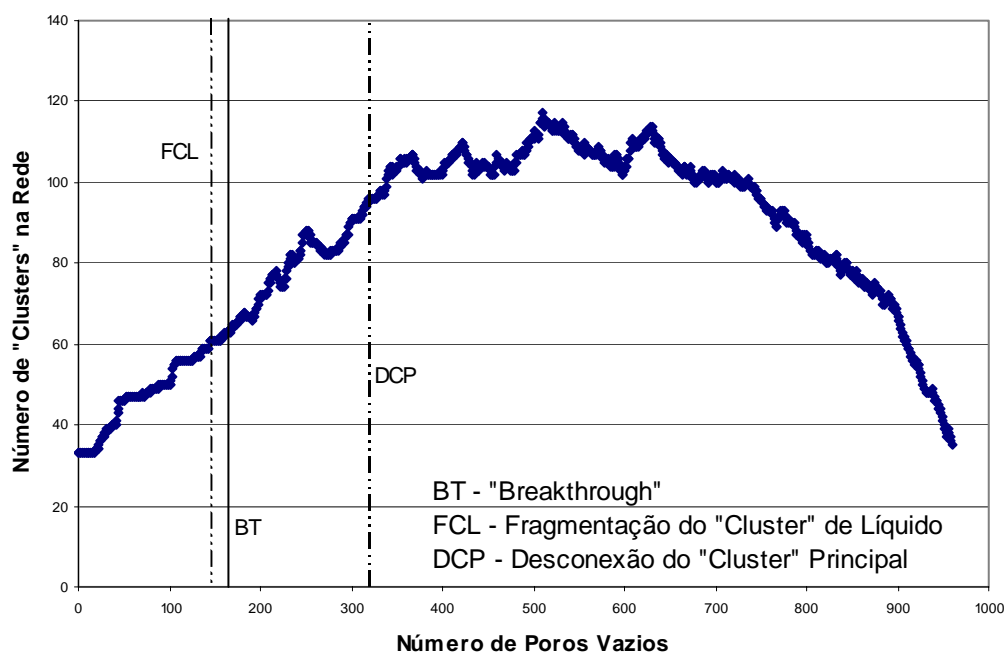
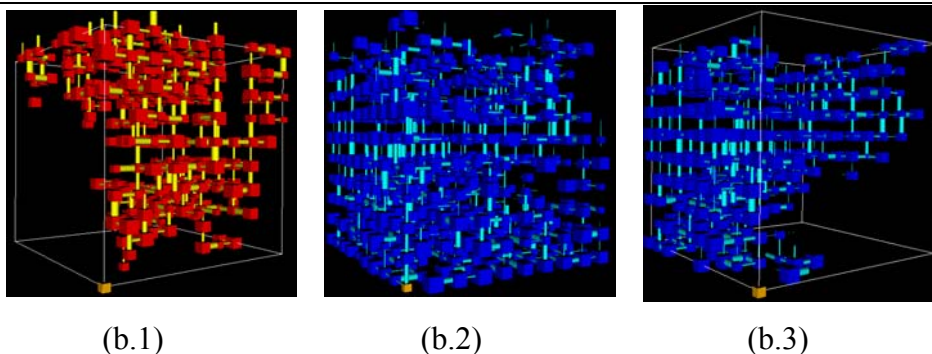


Figura 18 – Três Etapas Principais na Evaporação.

A desconexão do “cluster” de líquido principal é mais bem mostrada através da análise das imagens apresentadas nas Figuras 19(b.1), 19(b.2) e 19(b.3).



(b.1) (b.2) (b.3)
Figura 19 – (b.1) Poros evaporados no DCP; (b.2) Poros restantes (não evaporados) no DCP; (b.3) Poros pertencendo ao “cluster” de líquido principal no DCP.

O padrão global apresentado pelo presente modelo é o mesmo daquele observado na literatura [17], com os resultados obtidos para a evolução do “cluster” de líquido essencialmente idênticos. No nosso sistema, primeiro ocorre a fragmentação do “cluster” de líquido (FCL), após isso ocorre o “breakthrough” (BT) e finalmente ocorre a desconexão do “cluster” principal de líquido (DCP). No trabalho de Le Bray e Prat [17], nenhuma referência é feita ao início da fragmentação do “cluster” principal de líquido. Ainda, de acordo com os mesmos autores, a o período de evaporação constante (CRP) estaria situado, de acordo com os resultados da simulação, entre o “breakthrough” e a desconexão do “cluster” de líquido principal, o DCP.

Estudos adicionais devem ser realizados com o objetivo de se verificar onde, de acordo com o presente modelo, ocorre o período de evaporação constante. Seria esperado que ele ocorresse em algum ponto após o DCP, se estendendo até um ponto localizado pouco após a ocorrência do número máximo de “clusters” presente no sistema. Ainda, estudos com outros meios porosos devem ser também realizados para verificar a influência da fragmentação do “cluster” de líquido no processo de secagem de meios porosos. Pode-se supor, por exemplo, que quanto mais cedo ocorrer a fragmentação do “cluster” de líquido maior deva ser o número máximo de “clusters” presente no sistema. Isto poderia afetar o período de evaporação constante, fazendo com o que o mesmo se estenda por mais tempo em um meio poroso onde a fragmentação do “cluster” de líquido principal ocorra em um estágio mais cedo do processo. Uma outra análise que poderia ser feita é que ao antecipar a fragmentação do “cluster” de líquido principal no meio poroso, o processo possa ser acelerado, diminuindo assim o tempo necessário para secagem do meio.

Aqui, é necessária uma explicação com relação a um dos termos adotados por Le Bray e Prat [17] em seus resultados. Os autores definem que uma etapa crítica no processo de secagem, a desconexão do “cluster” de líquido principal, é o momento onde pela primeira vez não existe um “cluster” de líquido atravessando toda a rede. Isto, de acordo com eles, seria relacionado ao ponto onde não existiria mais um “cluster” de líquido conectando a fronteira aberta do meio poroso e sua base. Ainda de acordo com os mesmos autores, no DCP, o maior “cluster” de líquido, denominado “cluster” principal, não estaria mais conectado à face aberta da rede. Esta etapa sendo correspondente a uma transição na percolação do sistema.

Na verdade, os autores estão certos em afirmar que a etapa crítica na teoria da percolação é associada ao ponto no qual pela primeira vez não existe um “cluster” de líquido atravessando toda a rede. Todavia nos estudos efetuados com modelos de rede 3-D, este momento não é diretamente relacionado ao ponto no qual não existe um “cluster” de líquido ligado o topo e a base do meio poroso. Este momento está relacionado ao momento no qual o “cluster” de líquido principal não conecta qualquer um dos lados do sistema analisado. Em nossos estudos, foi verificado que a desconexão do “cluster” de líquido principal ocorre antes do momento no qual este mesmo cluster não conecta o topo e a base do meio poroso analisado. Esta inferência por parte dos autores pode ser na maioria das vezes válidas para sistemas bidimensionais, mas não para sistemas tridimensionais como o aqui apresentado neste estudo.

Uma outra observação a ser feita é que o padrão de evaporação no estudo efetuado na literatura é mais homogêneo que no nosso caso. Uma possível explicação pode ser atribuída ao fato de que no sistema proposto pelos autores [17] as gargantas são dutos retangulares tendo comprimentos fixos de 1 mm. Este comprimento sendo também o espaçamento da rede gerada. Como no presente trabalho, o fluxo molar também foi modelado como sendo um processo de difusão ocorrendo em uma célula de difusão de Arnold. De acordo com a Equação (10), este fluxo é inversamente proporcional ao caminho a ser percorrido pelo vapor do líquido no processo de difusão. Como o caminho é fixado em 1 mm, ocorre uma competição maior pela evaporação entre as gargantas do meio poroso, tornando a evaporação um processo mais homogêneo.

Também, nenhuma informação sobre a construção do meio poroso é dada pelos autores, além da afirmativa de que as larguras das gargantas são limitadas a sete classes de tamanho apenas (de 100 a 700 μm). Nada é dito sobre a distribuição de poros. Pode-se inferir que a simulação efetuada trata da percolação de ligação. Como a pressão capilar dita o processo de percolação de invasão calculado através do fluxo molar em cada garganta, o qual está diretamente relacionado ao diâmetro desta garganta, é obtido um perfil de invasão sem caminho preferencial a ser seguido na evaporação do líquido. O único diferencial sendo as larguras das gargantas, as quais são, como mostrado, distribuídas uniformemente dentro do meio poroso. Não existe qualquer relação restritiva com relação à morfologia do meio poroso, onde o mesmo apresenta uma maior aleatoriedade do que no presente modelo. Isto poderia causar uma evaporação mais uniforme, relacionada a um avanço mais homogêneo da frente de secagem.

Para suportar esta afirmativa, observa-se que de acordo com Laurindo e Prat [28] o processo de evaporação pode ser diretamente correlacionado com um processo de drenagem na percolação de invasão. A drenagem sendo definida como um processo no qual um fluido molhante preenchendo o meio poroso é deslocado por um fluido não molhante. Eles realizaram experimentos e simulações em uma rede bidimensional e acharam boa concordância entre os resultados experimentais e os simulados. Nas suas conclusões eles inferem que a frente de evaporação e a frente de drenagem são os mesmos objetos fractais, mesmo em três dimensões. Kornhauser et al [63] e Vidales et al [75] efetuaram algumas simulações em uma rede quadrada de tamanho 150 e obtiveram o resultado de que o “cluster” do fluido invasor no “breakthrough” apresenta uma maior direcionalidade para correlações intermediárias do que para correlações fortes ou fracas.

O efeito da correlação que pode existir em um dado meio poroso e sua influência no processo de evaporação foi analisado ao se aumentar gradativamente a interação entre poros e gargantas. Inicialmente, a interação entre gargantas e poros foi estabelecida em 20%, visto na Figura 20(c.1). A interação aumenta gradativamente passando a 40%, na Figura 20(c.2), depois 60%, na Figura 20(c.3) e por fim 80%, conforme mostrado na Figura 20(c.4). As imagens mostradas nas Figuras 20(c.1) a 20(c.4) representam o

mesmo momento da evaporação, qual seja, o momento em que o ar atinge a base do meio poroso.

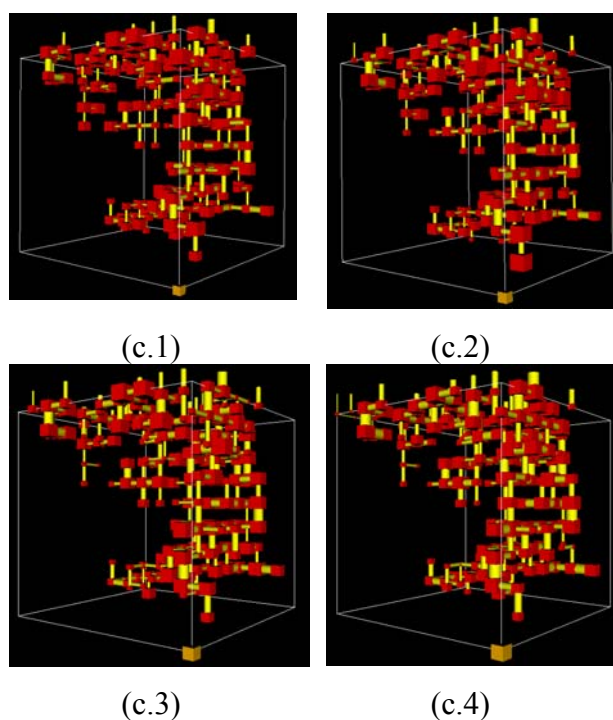
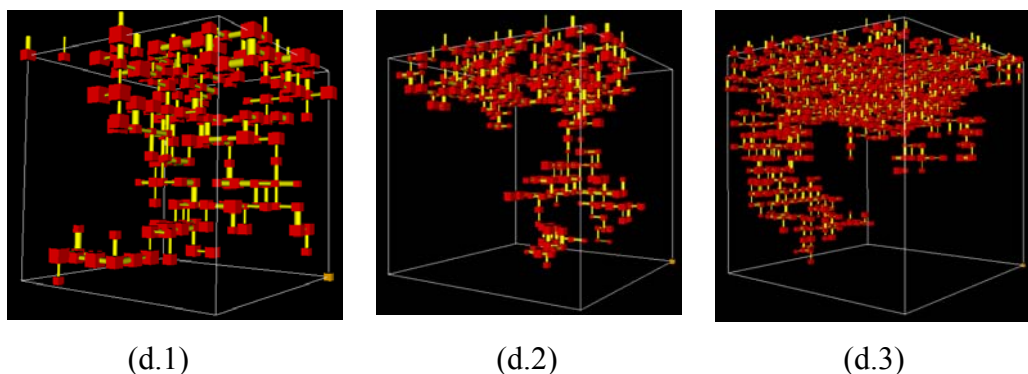


Figura 20 – Diferentes graus de correlação entre poros e gargantas e sua influência na evaporação. (c.1) - 20%; (c.2) - 40%; (c.3) - 60% e (c.4) - 80% de interação.

Um resultado interessante encontrado pode ser observado nas Figuras 20(c.1) a 20(c.4). Para diferentes graus de correlação existentes entre a distribuição de tamanho de poro:distribuição de tamanho de garganta, não se observou influência no padrão de evaporação do líquido dentro meio poroso. Embora possa se notar a existência de “clusters” preferenciais dentro do meio poroso, onde poros grandes se ligam a gargantas grandes e poros pequenos a gargantas pequenas, esta geometria forçada não foi suficientemente importante para modificar o padrão de evaporação. Na verdade, para os diferentes graus de correlação analisados, o padrão de evaporação foi essencialmente o mesmo. Isto não era esperado uma vez que o aumento na correlação entre os elementos da rede, levando a estruturas segregadas, deveria mudar o padrão de evaporação. Na medida em que o número de “clusters” presentes na rede aumenta, seria de se esperar o aparecimento de “clusters” diferentes com maior semelhança estrutural entre si, o que levaria a uma maior competição destes “clusters” pela evaporação. Das simulações efetuadas parece que quanto menor o tamanho da rede maior é a influência da

correlação existente, podendo, em alguns casos, alterar a padrão de evaporação do líquido dentro do meio poroso.

Para se verificar a influência do tamanho da rede no processo de evaporação três tamanhos de redes foram utilizados, mantendo-se os mesmos todos os parâmetros iniciais para cada rede simulada. O resultado está apresentado nas Figuras 21(d.1) a 21(d.3).



(d.1) (d.2) (d.3)
Figura 21 –Tamanho da rede no processo de evaporação. (d.1) – rede 10x10x10; (d.2) – rede 15x15x15; (d.3) – rede 20x20x20.

Os resultados obtidos mostrados nas Figuras 21(d.1), 21(d.2) e 21(d.3) parecem mostrar o mesmo padrão de evaporação. Isto era de se esperar uma vez que para os sistemas analisados os tamanhos das redes geradas eram maiores que o comprimento de correlação do sistema.

Na análise do efeito Kelvin-Thomson diferentes redes foram analisadas. Essas redes referem-se a diferentes realizações para o arenito de Clashac. A diferença entre a rede gerada mostrada na Figura 16 e as demais realizações consiste apenas nas sementes iniciais de números aleatórios utilizados para a construção de uma realização da rede em particular.

Os diferentes casos simulados, considerando-se aquela distribuição de gargantas experimental para o arenito de Clashac, não mostraram qualquer variação no padrão de evaporação do n-Hexano dentro da rede devido ao efeito Kelvin-Thomson. Seja quando falamos das simulações efetuadas com o arenito de Clashac, possuindo uma distribuição de gargantas na faixa de 1 – 100 μm , seja quando foram consideradas as situações

hipotéticas nas quais o meio poroso apresentou uma faixa estreita de distribuição de tamanhos de gargantas, estando esta distribuição situada numa região de poros e gargantas muito pequenos. Poder-se-ia esperar um aumento do número de poros evaporados dentro do meio poroso, com o conseqüente aumento do número de “clusters” presentes ao se comparar os resultados da simulação ao se levar em conta o efeito Kelvin-Thomson em relação à mesma situação sem o efeito Kelvin-Thomson presente. A presença deste efeito tem como uma conseqüência direta, para o caso analisado, num aumento no fluxo evaporativo. Poderia ocorrer uma situação dentro do meio poroso onde seria de se esperar a ocorrência de “clusters” de tamanhos semelhantes, mas possuindo diferentes distribuições de gargantas entre si, levando desta forma a uma mudança no padrão de evaporação do fluido. Contudo, isto não foi observado. Certamente este fato merece uma análise mais detalhada utilizando meios porosos naturais com diferentes distribuições de gargantas e poros. De preferência meios porosos apresentando uma distribuição estreita de tamanhos de poros e gargantas e com poros e gargantas de tamanhos pequenos em alguns casos, e em outros casos com poros e gargantas de tamanhos intermediários.

Em adição, duas situações adicionais de distribuição de gargantas e poros foram analisadas para se determinar se a presença do efeito Kelvin-Thomson poderia de alguma forma alterar o padrão de evaporação de um fluido dentro do meio poroso.

O primeiro caso analisado considerou uma distribuição de tamanhos de gargantas na faixa de 0,1 μm a 0,6 μm . Numa situação mais extrema de distribuição de tamanhos de poros, o segundo caso analisado considerou uma distribuição de tamanhos de gargantas de 0,01 μm a 0,05 μm .

Os resultados obtidos mostraram que mesmo em uma condição muito mais limitada de distribuição de tamanhos de gargantas, e em conseqüência também de poros, dentro da rede gerada, também não se observou qualquer alteração no padrão de evaporação do n-Hexano dentro do meio poroso simulado. Na verdade, o único efeito sensível foi a presença de um maior número de “clusters” nas simulações apresentando uma menor distribuição de tamanhos de poros e gargantas no modelo de rede em comparação com a

distribuição natural do arenito de Clashac. A Figura 22 mostra uma pequena variação no número de “clusters” presentes quando os processos estão próximos do “breakthrough” do gás.

A distribuição de números de “clusters” referentes à distribuição de tamanhos de gargantas de 0,01 μm a 0,05 μm não está representada porque os resultados da simulação mostraram que essa distribuição foi idêntica à distribuição de gargantas assumida de 0,1 μm a 0,6 μm .

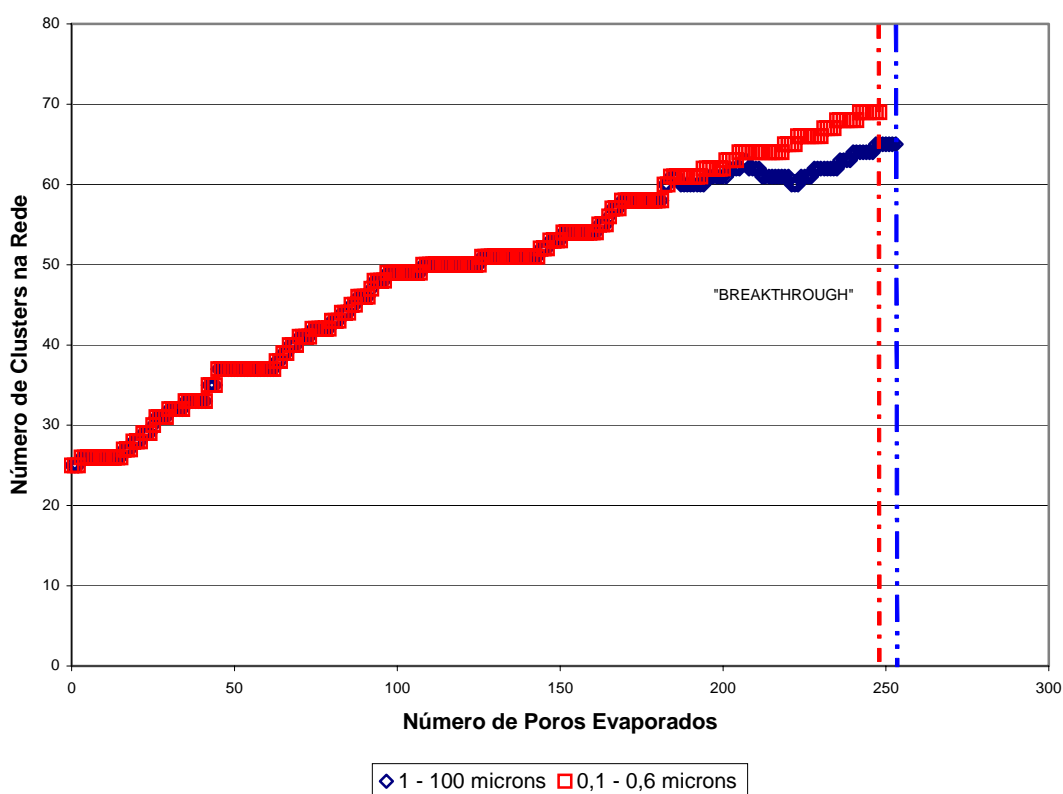


Figura 22 – Número de “Clusters” em Função da Distribuição de Tamanhos de Gargantas no Meio Poroso.

5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O modelo de rede desenvolvido foi aplicado com sucesso no estudo da evaporação de um fluido simples em um meio poroso sob a influência de um processo onde as forças capilares são preponderantes.

Para alcançar este objetivo um modelo de rede tridimensional apresentando uma correlação entre tamanho de gargantas e de poros foi utilizado. Este modelo serviu não apenas para observar o padrão de evaporação dentro do meio poroso, mas também para verificar a influência do parâmetro de correlação e do tamanho da rede no processo de evaporação. Além disso, foi observado o efeito do abaixamento da pressão de vapor que ocorre em pequenos capilares.

O comprimento de correlação para o sistema analisado foi determinado. Isto permitiu a utilização da lei de Fick da difusão para representar um processo aonde a evaporação ocorre devido à transferência de massa. A transferência de massa ocorrendo entre o gás passando sobre a fronteira aberta da rede gerada, seguida pela intrusão do gás nesse meio, e um líquido único que inicialmente preenche completamente o modelo de rede gerado.

5.1. CONCLUSÕES

O modelo de rede foi capaz de prever com razoável concordância dados experimentais de um meio poroso natural, o arenito de Clashac. Para o ajuste efetuado a curva de intrusão de mercúrio foi simulada e os resultados obtidos são bastante satisfatórios.

Nos estudos relacionados ao cálculo da tortuosidade os resultados mostraram que o aumento na correlação entre gargantas e poros do meio poroso simulado não afetou os valores de tortuosidade obtidos. O valor da tortuosidade foi observado ser uma função do tamanho da rede. Aumentando-se o tamanho da rede observou-se um aumento no valor de tortuosidade. Isto não era de se esperar uma vez que os estudos realizados foram efetuados para tamanhos de rede acima do comprimento de correlação, ou seja, para redes macroscopicamente homogêneas, com suas propriedades sendo

independentes do tamanho da rede gerada. Este fato sugere que o método proposto na literatura por Spearing e Matthews [61], para calcular a tortuosidade do sistema pode não ser apropriado.

De acordo com os resultados obtidos das simulações, a fragmentação do “cluster” de líquido se inicia muito mais cedo do que aquele momento no qual a desconexão do “cluster” de líquido principal ocorre. De fato, de acordo com os resultados obtidos, ela acontece antes mesmo do que o “breakthrough” do fluido invasor. Este resultado pode ter conseqüências nos processos de secagem de meios porosos, certamente merecendo um estudo mais detalhado.

O padrão de evaporação é sempre o mesmo em todos os casos simulados. Inicialmente, os poros próximos à fronteira aberta da rede preferencialmente perdem massa devido à evaporação. Após este momento, existe a formação de um “fingering” capilar principal que atravessa a rede do topo à base. Ao final, após o ar ter alcançado a face de baixo da rede gerada, dois “clusters” principais de poros evaporados são formados, estes “clusters” sendo conectados apenas pelo “fingering” capilar formado. Após algum tempo ambos os “clusters” se juntam formando um bloco único e o processo de evaporação acontece de uma forma bastante homogênea, com o “cluster” de ar preenchendo a rede gerada quase que completamente.

Outra importante conclusão obtida das simulações é o fato de que o processo de evaporação modelado se mostrou insensível aos diferentes níveis de correlação que podem ocorrer entre os elementos da rede gerada. Este resultado é bastante surpreendente uma vez que aumentando a correlação existente entre gargantas e poros seria de se esperar uma distribuição mais homogênea do “cluster” de gás formado. Esta suposição está suportada no fato de que ao se aumentar a correlação entre os elementos da rede, regiões de gargantas grandes são conectadas com regiões de poros grandes e regiões de gargantas pequenas formam grupos com regiões de poros pequenos.

O padrão de evaporação do líquido é globalmente o mesmo para todos os tamanhos de rede analisados. Este resultado está de acordo com o fato de que para qualquer tamanho

analisado o sistema encontrava-se acima do seu comprimento de correlação, sendo macroscopicamente homogêneo.

Um outro resultado inesperado foi o de que com relação ao efeito Kelvin-Thomson não se observou qualquer mudança no padrão de evaporação do fluido dentro do meio poroso analisado. Embora para o arenito de Clashac, com uma distribuição de poros e gargantas como a apresentada, este efeito pudesse ser minimizado ou mesmo considerado desprezível, ao considerarmos as situações hipotéticas nas quais o meio poroso apresentou uma faixa estreita de distribuição de tamanhos de gargantas, estando esta distribuição situada numa região de poros e gargantas muito pequenos, este efeito deveria ter sido mensurável. Poderia ocorrer uma situação dentro do meio poroso onde seria de se esperar a ocorrência de “clusters” de tamanhos semelhantes, mas possuindo diferentes distribuições de gargantas entre si, levando desta forma a uma mudança no padrão de evaporação do fluido.

5.2. RECOMENDAÇÕES

Um uso do presente modelo pode ser feito no cálculo do estudo da evaporação de uma mistura líquida binária em um meio poroso. O efeito da variação da tensão interfacial no processo de evaporação como sugerido por Freitas and Prat [2] certamente merece uma análise mais detalhada.

Também o modelo pode ser expandido para levar em consideração aspectos relacionados à interação rocha-fluido, tal como a ocorrência de adsorção do fluido presente às paredes do meio poroso.

Uma vez verificado o comportamento do sistema sob efeitos capilares e sob a influência do efeito Kelvin-Thomson, pode-se também analisar o comportamento do sistema sob a influência da gravidade. Wilkinson [15] propôs levar as forças gravitacionais em consideração assumindo que em qualquer instante o sistema está em equilíbrio vertical, de maneira que a pressão capilar seja linearmente dependente da altura h do meio poroso, de acordo com a Equação (12).

$$P_c(h) - P_c(0) = \Delta\rho gh \quad (12)$$

Dado o campo de pressão capilar como descrito na Equação (9), define-se um potencial de invasão de cada poro, dado pela Equação (10). Aplicado ao presente estudo o poro a ser invadido seria aquele que possui o menor potencial de invasão (P_{inv}), ao invés daquele com menor pressão capilar.

$$P_{inv} = \frac{2\gamma}{R} + \Delta\rho gh + cte \quad (13)$$

Será interessante verificar se a escolha do poro possuindo o menor potencial de invasão pode ser afetada pela presença de mais de um fluido no meio poroso, uma vez que isto acarreta alterações na tensão interfacial e na massa específica da mistura, já que o processo multi-componentes ocorreria com a perda preferencial do componente mais leve.

A incorporação de um coeficiente de massa variável na fronteira aberta do meio poroso, juntamente com a influência do filme de líquido no processo de evaporação é de grande importância. Isto poderá possibilitar a avaliação da taxa de evaporação de um fluido ou mistura dentro do meio poroso, permitindo uma modelagem mais completa do processo em questão.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. AKIN, S.; KOVSCEK, A.R. **Heavy-Oil Solution Gas Drive: A Laboratory Study**, Journal of Petroleum Science and Engineering, v.35, p. 33-48, 2002.
 2. FREITAS, D.S.; PRAT, M. **Modelo de Redes para a Evaporação de Óleos Leves em Meios Porosos**, Relatório de Pós-Doutorado, Institut Français du Pétrole, 1997.
 3. JAFFRENNOU, C. **Étude de L'Évaporation D'Une Huile en Milieu Poreux Bidimensionnel**, Rapport de Stage, DEA – Dynamique des Fluides et des Transferts, Paris XI – Paris VI – École Polytechnique, Division Gisements, Institut Français du Pétrole, 1995.
 4. MOREL, D.D.; BOURBIAUX, B.; LATIL, M. **Diffusion Effects in Gas-Flooded Light Oil Fractured Reservoirs**, SPE 20516, p. 433-446, 1990.
 5. FREITAS, D.S.; PRAT, M. **Pore Network Simulation of Evaporation of a Binary Liquid from a Capillary Porous Medium**, Transport in Porous Media, v. 40, p. 1-25, 2000.
 6. HO, C.K.; LIU, S-W.; UDELL, K.S. **Propagation of Evaporation and Condensation Fronts During Multicomponent Soil Vapor Extraction**, Journal of Contaminant Hydrology, v. 16, p. 381-401, 1994.
 7. HO, C.K.; UDELL, K.S. **An Experimental Investigation of Air Venting of Volatile Liquid Hydrocarbon Mixtures from Homogeneous and Heterogeneous Porous Media**, Journal of Contaminant Hydrology, v. 11, p. 291-316, 1992.
 8. HO, C.K.; UDELL, K.S. **Mass Transfer Limited Drying of Porous Media Containing an Immobile Binary Liquid Mixture**, International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 38, n. 2, p. 339-350, 1995.
 9. LÓPEZ, R.H.; VIDALES, A.M.; ZGRABLICH, G. et al **Determination of Pore Size Distributions Using the Dual Site-Bond Model: Experimental Evidence**, Colloids and Surface A: Physicochemical and Engineering Aspects, v. 206, p. 393-400, 2002.
 10. MAYAGOITIA, V. et al **Fluid-Phase Morphologies Induced by Capillary Processes in Porous Media**, Characterization of Porous Solids III, Studies in Surface and Catalysis, v. 87, p. 141-150, 1994.
-

-
11. SAHIMI, M. **Effect of Long-Range Correlations on Transport Phenomena in Disordered Media**, *AIChE Journal*, v. 41, n. 2, p. 229-240, 1995.
 12. SAHIMI, M. **Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock, From Classical Methods to Modern Approaches**, Weinheim; New York; Basel; Tokyo: VCH, 1995.
 13. SAHIMI, M. **Long-Range Correlated Percolation and Flow and Transport in Heterogeneous Porous Media**, *Journal de Physique I, France*, v. 4, p. 1263-1268, 1994.
 14. ZGRABLICH, G.; MENDORIOZ, S.; DAZA, L. et al **Effect of Porous Structure on the Determination of Pore Size Distribution by Mercury Porosimetry and Nitrogen Sorption**, *Langmuir*, v. 7, p. 779-785, 1991.
 15. WILKINSON, D. **Percolation Model of Immiscible Displacement in the Presence of Buoyancy Forces**, *Physical Review A*, v. 30, n. 1, p. 520-531, 1984.
 16. KAPITULNIK, A.; AHARONY, A.; DEUTSCHER, G. et al **Self Similarity and Correlations in Percolation**, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 16, p. L269-L274, Letter to the Editor, 1983.
 17. LE BRAY, Y.; PRAT, M. **Three-Dimensional Pore Network Simulation of Drying in Capillary Porous Media**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 42, p. 4207-4224, 1999.
 18. KRYUKOV, A.P.; LEVASHOV, V.YU.; SHISHKOVA, I.N. **Numerical Analysis of Strong Evaporation-Condensation Through the Porous Matter**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 44, p. 4119-4125, 2001.
 19. KÜNTZ, M.; MIER, J.V.; LAVALLÉE, P. **A Lattice Gas Automaton Simulation of the Nonlinear Diffusion Equation: A Model for Moisture Flow in Unsaturated Porous Media**, *Transport in Porous Media*, v. 43, p. 289-307, 2001.
 20. PICO, C.E.; SANTOS, L.O.E.; PHILIPPI, P.C. **Lattice-Boltzmann Simulation of Two-Phase Fluid Flow Through Porous Media**, 18th International Congress of Mechanical Engineering, November 6-11, Ouro Preto, MG, 2005.
 21. POT, V.; APPERT, C.; MELAYAH, A. et al., **Interacting Lattice Gas Automaton Study of Liquid-Gas Properties in Porous Media**, *Journal de Physique II France*, v. 6, p. 1517-1534, 1996.
-

-
22. WHITAKER, S. **Simultaneous Heat, Mass, and Momentum Transfer in Porous Media: A Theory of Drying**, *Advances in Heat Transfer*, v. 13, p. 119-203, 1977.
 23. DAIAN, J-F.; SALIBA, J. **Determination d'un Réseau Aleatoire de Pores pour Modéliser la Sorption et la Migration d'Humidité dans un Mortier de Ciment**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 34, n. 8, p. 2081-2096, 1991.
 24. NOWICKI, S.C.; DAVIS, H.T.; SCRIVEN, L.E. **Microscopic Determination of Transport Parameters in Drying Porous Media**, *Drying Technology*, vol. 10, n. 4, p. 925-946, 1992.
 25. LE ROMANCER, J-F.X.; DEFIVES, D.F.; FERNANDES, G. **Mechanism of Oil Recovery by Gas Diffusion in Fractured Reservoir in Presence of Water**, SPE/DOE 27746, p. 99-111, 1994.
 26. YOTIS, A.G.; STUBOS, A.K.; BOUDOUVIS, A.G. et al **A 2-D Pore-Network Model of the Drying of Single-Component Liquids in Porous Media**, *Advances in Water Resources*, v. 24, p. 439-460, 2001.
 27. FIGUS, C.; LE BRAY, Y.; BORIES, S. et al **Heat and Mass Transfer with Phase Change in a Porous Structure Partially Heated: Continuous Model and Pore Network Simulations**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 42, p. 2557-2569, 1999.
 28. LAURINDO, J.B.; PRAT, M. **Numerical and Experimental Network Study of Evaporation in Capillary Porous Media. Phase Distributions**, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 23, p. 5171-5185, 1996.
 29. LAURINDO, J.B.; PRAT, M. **Numerical and Experimental Network Study of Evaporation in Capillary Porous Media. Drying Rates**, *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 12, p. 2257-2269, 1998.
 30. PLOURDE, F.; PRAT, M. **Pore Network Simulations of Drying of Capillary Porous Media. Influence of Thermal Gradients**, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, p. 1293-1307, 2003.
 31. PRAT, M. **Discrete Models of Liquid-Vapor Phase Change Phenomena in Porous Media**, *Revue Générale de Thermique*, v. 37, p.954-961,1998.
 32. PRAT, M. **Isothermal Drying of Non-Hygroscopic Capillary-Porous Materials as an Invasion Percolation Process**, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 21, n. 5, p. 875-892, 1995.
-

-
33. PRAT, M. **Percolation Model of Drying Under Isothermal Conditions in Porous Media**, International Journal of Multiphase Flow, v. 19, n. 4, p. 691-704, 1993.
 34. PRAT, M. **Recent Advances in Pore-Scale Models for Drying of Porous Media**, Chemical Engineering Journal, v. 86, p. 153-164, 2002.
 35. PRAT, M.; BOULEUX, F. **Drying in Capillary Porous Media with a Stabilized Front in Two Dimensions**, Physical Review E- Statistical, Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics, Third Series, v. 60, n. 5, part B, p. 5647-5656, 1999.
 36. WILKINSON, D.; WILLEMSSEN, J.F. **Invasion Percolation: A New Form of Percolation Theory**, Journal of Physics A: Mathematical and General, v. 16, p. 3365-3376, 1983.
 37. XU, B.; YORTSOS, Y.C.; SALIN, D. **Invasion Percolation with Viscous Forces**, Physical Review E, v. 57, n. 1, p. 739-751, 1999.
 38. LENORMAND, R.; TOUBOUL, E.; ZARCONE, C. **Numerical Models and Experiments on Immiscible Displacements in Porous Media**, Journal of Fluid Mechanics, v. 189, p. 165-187, 1988.
 39. HOSHEN, J.; KOPELMAN, R. **Percolation and Cluster Distribution. I. Cluster Multiple Labeling Technique and Critical Concentration Algorithm**, Physical Review B, v. 14, n. 8, p. 3438-3445, 1976.
 40. LI, X.; YORTSOS, Y.C. **Theory of Multiple Bubble Growth in Porous Media by Solute Diffusion**, Chemical Engineering Science, v. 50, n. 8, p. 1247-1271, 1995.
 41. LI, X.; YORTSOS, Y.C. **Visualization and Numerical Studies of Bubble Growth During Pressure Depletion**, SPE 22589, p. 1-12, 1991.
 42. LI, X.; YORTSOS, Y.C. **Visualization and Simulation of Bubble Growth in Pore Networks**, AIChE Journal, v. 41, n. 2, p. 214-222, 1995.
 43. SATIK, C.; LI, X.; YORTSOS, Y.C. **Scaling of Single-Bubble Growth in a Porous Medium**, Physical Review E, v. 51, n. 4, p. 3286-3297, 1995.
 44. SATIK, C.; YORTSOS, Y.C. **A Pore-Network Study of Bubble Growth in Porous Media Driven by Heat Transfer**, Journal of Heat Transfer, Transactions of the ASME, v. 118, p. 455-462, 1996.
 45. TSIMPANOIANNIS, I.N.; YORTSOS, Y.C.; POULOU, S. et al **Scaling Theory of Drying in Porous Media**, Physical Review E, v. 59, n. 4, p. 4353-4365, 1999.
-

-
46. YORTSOS, Y.C.; PARLAR, M. **Phase Change in Binary Systems in Porous Media: Application to Solution-Gas Drive**, SPE 19697, p. 1-16, 1989.
 47. YORTSOS, Y.C.; XU, B.; SALIN, D. **Phase Diagram of Fully Developed Drainage in Porous Media**, Physical Review Letters, v. 79, n. 23, 1997.
 48. SHAW, T.M. **Drying as an Immiscible Displacement Process with Fluid Counterflow**, Physical Review Letters, v. 59, n. 15, p. 1671-1675, 1987.
 49. HEIMANN, F.; THURNER, F.; SCHLÜNDER, E.U. **Intermittent Drying of Porous Materials Containing Binary Mixtures**, Chemical Engineering Processing, v. 20, p. 167-174, 1986.
 50. THURNER, F.; SCHLÜNDER, E.U. **Progress Towards Understanding the Drying of Porous Materials Wetted with Binary Mixtures**, Chemical Engineering Processing, v. 20, p. 9-25, 1986.
 51. CRUZ, M.J.; MAYAGOITIA, V.; ROJAS, F. **Mechanistic Studies of Capillary Processes in Porous Media, Part 2. – Construction of Porous Networks by Monte-Carlo Methods**, Journal of Chemical Society, Faraday Transactions, I, v. 85, n. 8, p.2079-2086, 1989.
 52. FERNANDES. C.P.; **Caracterização Morfotológica de Espaços Porosos: Reconstituição Multiescala e Simulação de Processos de Invasão de Fluidos Não Molhantes**, D. Sc. Thesis, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, Brazil (1994).
 53. IOANNIDIS, M.A.; KWIECIEN, M.J.; CHATZIS, I. **Statistical Analysis of the Porous Microstructure as a Method for Estimating Reservoir Permeability**, Journal of Petroleum Science and Engineering, v. 16, p. 251-261, 1996.
 54. LINDQUIST, W.B.; VENKATARANGAN, A. **Investigating 3D Geometry of Porous Media from High Resolution Images**, Physics and Chemistry of the Earth, Part A: Solid Earth and Geodesy, v. 24, n. 7, p. 593-599, 1999.
 55. TSAKIROGLOU, C.D.; PAYATAKES, A.C. **Characterization of the Pore Structure of Reservoir Rocks with the Aid of Serial Sectioning Analysis, Mercury Porosimetry and Network Simulation**, Advances in Water Resources, v. 23, p. 773-789, 2000.
-

-
56. ANDRADE Jr., J.S., **Modelos de Rede para a Simulação de Processos Químicos em Meios Porosos**, D. Sc. Thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil (1992).
 57. MONTEAGUDO, J.E.P.; **Simulação do Escoamento de Petróleo em Meios Porosos sob Precipitação de Sólidos**, D. Sc. Thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil (2001).
 58. MATTHEWS, G.P.; MOSS, A.K.; RIDGWAY, C.J. **The Effects of Correlated Networks on Mercury Intrusion Simulations and Permeabilities of Sandstone and Other Porous Media**, Powder Technology, v. 83, p. 61-77, 1995.
 59. MATTHEWS, G.P.; MOSS, A.K.; SPEARING, M.C. et al **Network Calculation of Mercury Intrusion and Absolute Permeability in Sandstone and Other Porous Media**, Powder Technology, v. 76, p. 95-107, 1993.
 60. MATTHEWS, G.P.; RIDGWAY, C.J.; SPEARING, M.C. **Void Space Modeling of Mercury Intrusion Hysteresis in Sandstone, Paper Coating, and Other Porous Media**, Journal of Colloid and Interface Science, v. 171, p. 8-27, 1995.
 61. SPEARING, M.; MATTHEWS, G.P. **Modelling Characteristic Properties of Sandstones**, Transport in Porous Media, v. 6, p. 71-90, 1991.
 62. TSAKIROGLOU, C.D.; PAYATAKES, A.C. **A New Simulator of Mercury Porosimetry for the Characterization of Porous Materials**, Journal of Colloid and Interface Science, v. 137, n. 2, p. 315-339, 1990.
 63. KORNHAUSER, I.; ROJAS, F.; FACCIO, R.J. et al **Structure Characterization of Disordered Porous Media – A Memorial Review Dedicated to Vicente Mayagoitia**, Fractals, v. 5, n. 3, p. 355-377, 1997.
 64. LÓPEZ, R.H.; VIDALES, A.M.; ZGRABLICH, G. **Correlated Site-Bond Ensembles: Statistical Equilibrium and Finite Size Effects**, Langmuir, v. 16, p. 3441-3445, 2000.
 65. MAYAGOITIA, V.; ROJAS, F.; KORNHAUSER, I. et al **Fluid-Phase Morphologies Induced by Capillary Processes in Porous Media**, Characterization of Porous Solids III, Studies in Surface and Catalysis, v. 87, p. 141-150, 1994.
 66. MAYAGOITIA, V.; CRUZ, M.J.; ROJAS, F. **Mechanistic Studies of Capillary Processes in Porous Media, Part 1. – Probabilistic Description of Porous**
-

-
- Media**, Journal of Chemical Society, Faraday Transactions, I, v. 85, n. 8, p.2071-2078, 1989.
67. MAYAGOITIA, V.; GILOT, B.; ROJAS, F. et al **Domain Complexions in Capillary Condensation, Part 2 – Descending Boundary Curve and Scanning**, Journal of Chemical Society, Faraday Transactions, I, v. 84, n. 3, p.801-813, 1988.
68. MAYAGOITIA, V.; ROJAS, F.; KORNHAUSER, I. **Pore Network Interactions in Ascending Processes Relative to Capillary Condensation**, Journal of Chemical Society, Faraday Transactions, I, v. 81, p.2931-2940, 1985.
69. MAYAGOITIA, V.; ROJAS, F.; RICARDO, J.L. et al **Dual Site-Bond Description of Heterogeneous Surfaces**, Physical Review B, v. 41, n. 10, p. 7150-7155, 1990.
70. VIDALES, A.M.; FACCIO, R.J.; RICCARDO, J. et al **Correlated Site-Bond Percolation on a Square Lattice**, Physica A, v. 218, p. 19-28, 1995.
71. RICCARDO, J.L.; STEELE, W.A.; CUESTA, A.J.R. et al **Pure Monte Carlo Simulation of Model Heterogeneous Substrates: From Random Surfaces to Many-Site Correlations**, Langmuir, v. 13, p. 1064-1072, 1997.
72. MANDELBROT, B.B. **The Fractal Geometry of Nature**, W.H. Freeman and Company, New York, 1977.
73. STAUFFER, D.; AHARONY, A. **Introduction to Percolation Theory**, London, Washington, DC: Taylor & Francis, 2^a ed., 1992.
74. WELTY, J.R.; WICKS, C.E.; WILSON, R.E. **Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer**, John Wiley and Sons, p. 524, 1984.
75. VIDALES, A.M.; MIRANDA, E.; NAZZARRO, M. et al **Invasion Percolation in Correlated Porous Media**, Europhysics Letters, v. 36, n. 4, p. 259-264, 1996.
-

 ANEXO I

 Programa Fonte para a Evaporação de Fluidos em Meios Porosos em Linguagem
 FORTRAN.

```

! *****
! UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
! ESCOLA DE QUÍMICA - DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA.
! CURSO DE TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS
! TESE DE DOUTORADO.
! ORIENTADOR: PROF. KRISHINASWAMY RAJAGOPAL
! ALUNO: JULIO CESAR CASTELO BRANCO REIS MOREIRA.
! *****
! SIMULACAO DA EVAPORACAO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO MODELOS DE REDE.
! *****

PROGRAM INICIAL
COMMON IX,IY,IZ
COMMON /POROS/ N,POREXP,VOLUMEVAZIO,ESPA
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::TAMPOROS
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::DIAMGARGANTAS
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::COMPGARGANTAS
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::GARGANTAS
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::VOLPOROS
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::VOLGARGANTAS
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::PESO
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::AUXPESO
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::RHO
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::GARGCLUSTER
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::COMPCLUSTER
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VOLEVAP
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::RMASSAEVAP
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::TOTALNAZ
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::TEMPOEVAP
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::PPARCIAL
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::MATRIZA
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VETORB
REAL, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VETORX
REAL, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::PVAPOR
INTEGER, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::MARCADORPOROS
INTEGER, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::MARCADORGARGANTAS
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::LABEL
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::LL
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::MARCLABEL
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::KONTLABEL
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VETORI
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VETORJ
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VETORK
INTEGER, DIMENSION(,;),ALLOCATABLE::VG
INTEGER, DIMENSION(,;,),ALLOCATABLE::LINHA

```

```

INTEGER, DIMENSION(:),ALLOCATABLE::POSITI
INTEGER, DIMENSION(:),ALLOCATABLE::POSITJ
INTEGER, DIMENSION(:),ALLOCATABLE::POSITK
INTEGER, DIMENSION(:),ALLOCATABLE::POSITL
REAL, DIMENSION(0:300)::ESTATGARG = 0.0 !Assumido diâmetro máximo de gargantas POSSÍVEL de 300µm
REAL, DIMENSION(0:300)::ESTATPOR = 0.0
REAL, DIMENSION(1:30000)::ESTATTORT = 0.0
REAL, DIMENSION(0:300)::PERCENTG = 0.0
REAL, DIMENSION(0:300)::PERCENTP = 0.0
REAL, DIMENSION(1:5)::AUX2PESO = 0.0
REAL, DIMENSION(1:30000)::ROTA = 0.0
REAL, DIMENSION(1:5000)::CAMINHO = 0.0
REAL, DIMENSION(1:5000)::STEP = 0.0
REAL, DIMENSION(1:5000)::PROB = 0.0
INTEGER, DIMENSION(1:5000)::NUMI1
INTEGER, DIMENSION(1:5000)::NUMJ1
INTEGER, DIMENSION(1:30000)::FREQ = 1
REAL CONECT,CONECTCALC,DIAMMAX,DMING,AUXDIAM,AUXPOR,ESP,ESPMIN, &
ESPMAX,POROSIDADE,MAIORDIAM,PORCALC,POREXP,A,B,X,FA,FB,DIF,FX,TOLER, &
TOLER2,VOLUMEVAZIO,AUX2POR,FUNCAO,ESPAC,OMEGA,PIP,PIG,DI,PF,PF,DELTA,EME, &
RANDNOVO,LAMBDA,AUX1,SOMA1,SOMA2,SOMA3,NPOROS,TAM,DIFTAM,HGSIZE,POROCHEIO, &
GARGANTACHEIA,VOLUMEHG,AUX1PESO,GARGESCOLHIDA,COMPESCOLHIDO,AUX2,AUX3, &
AUX4,AUX5,AUXPROB1,AUXPROB2,AUXPROB3,PROBELEMENTO,PASSO,TORTUOSIDADE,CONT, &
TORTSOMA,AUXROTA,STEPTOTAL,TORTMEDIA,SOMAFREQ,SOMAFREQTORT,RFLAG,P,T, &
RMASSA,VOL,DENS,R,SIGMALAR,TKE,EKLAR,DIFUSAO,DMINP,DMAXP,PVAP,NAZ,TC,PC, &
TEMPOMIN,TEMPOTOTAL,PVINP,PML,SIGMAL,TENSAO,Ek,PMLAR,VALORTORT,OMEGAL,AUXTROCA INTEGER
IX,IY,IZ,IJ,K,Z,N,IDIST,ITER,ITEMAX,M1,M2,M3,M4,M5,M6,IJK,NTFILL,NUFILL,I1,I2,J1,J2, &
IFLAG,ISOMA,M,CMDREDE,KONT,MARCADOR,DIR,BLOCK,NC,NRW,NRWVAL,MARCTORT,MARC, &
NEWCONT,INDEX,KL,INDAUX,CLUSTERMAX,LABELMAX,KLX,KLY,KLZ,KLJ,ML,NUMCLUSTERS, &
NPOROSVAZIOS,IPP,IEVAP,KELVIN,JFIM,NTORT,LABELPP,LABELPG,DIFFUSION
LOGICAL L1,L2,L3,L4
OPEN(1500,FILE='TAMANHO_DE_POROS.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(1600,FILE='POROSIMETRIA.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(1700,FILE='DSBMARKOV.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(1800,FILE='EST_GARGANTAS_E_POROS.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(1900,FILE='TORTUOSIDADE.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2000,FILE='CLUSTER.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2500,FILE='PIVO.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2600,FILE='EVAPORACAO.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2700,FILE='OCTAGA.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2800,FILE='OCTAGALIQ.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2900,FILE='OCTAGAPRINCIPAL.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(3000,FILE='MATRIZ.TXT',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(8000,FILE='TESTE.TXT',STATUS='UNKNOWN') !Somente para verificar a taxa de evaporação
! -----
! AS VARIÁVEIS DO PROGRAMA ESTÃO DEFINIDAS NO ARQUIVO DEFINIÇÃO DE VARIÁVEIS EM ANEXO
! -----
! PROGRAMA PRINCIPAL
! -----

```

```
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ALGORITMO PARA GERACAO DE UM MODELO DE REDE'
WRITE(*,*)'A SER EMPREGADO NO CALCULO DA EVAPORACAO DE'
WRITE(*,*)'UM FLUIDO CONTIDO EM UM MEIO POROSO QUALQUER'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR DA 1a SEMENTE (1-30000):'
WRITE(*,*)
1 READ*,IX
IF (IX.LT.1.OR.IX.GT.30000) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO. ENTRE COM NOVO VALOR.'
WRITE(*,*)
GOTO 1
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR DA 2a SEMENTE (1-30000):'
WRITE(*,*)
2 READ*,IY
IF (IY.LT.1.OR.IY.GT.30000) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO. ENTRE COM NOVO VALOR.'
WRITE(*,*)
GOTO 2
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR DA 3a SEMENTE (1-30000):'
WRITE(*,*)
3 READ*,IZ
IF (IZ.LT.1.OR.IZ.GT.30000) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO. ENTRE COM NOVO VALOR.'
WRITE(*,*)
GOTO 3
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR PARA A CONECTIVIDADE (1-6):'
WRITE(*,*)'conectividade usual para arenitos = 3.5'
WRITE(*,*)
4 READ*,CONNECT
IF (CONNECT.LT.1.0.OR.CONNECT.GT.6.0) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO. ENTRE COM NOVO VALOR.'
WRITE(*,*)
GOTO 4
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR PARA O DIAMETRO DA MENOR GARGANTA DE PORO'
WRITE(*,*)'diametro minimo usual para arenitos = 1.00 micrometro.'
WRITE(*,*)'o diametro minimo tem que ser maior do que zero.'
```

```
WRITE(*,*)
READ*,DMING
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR PARA O DIAMETRO DA MAIOR GARGANTA DE PORO'
WRITE(*,*)'diametro maximo usual para arenitos = 100.00 micrometros.'
WRITE(*,*)
READ*,DIAMMAX
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESCOLHA O TIPO DE DISTRIBUICAO PARA DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS'
WRITE(*,*)'INICIALMENTE ESCOLHA A DISTRIBUICAO UNIFORME'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'1 - DISTRIBUICAO UNIFORME'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'2 - DISTRIBUICAO LINEAR DECRESCENTE'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'3 - DISTRIBUICAO LINEAR CRESCENTE'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'4 - DISTRIBUICAO EXPONENCIAL DECRESCENTE'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'5 - DISTRIBUICAO EXPONENCIAL CRESCENTE'
WRITE(*,*)
5 READ*,IDIST
IF (IDIST.LT.1.OR.IDIST.GT.5) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO.'
WRITE(*,*)'ENTRE COM UM NUMERO ADEQUADO'
WRITE(*,*)
GOTO 5
ENDIF
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR PARA A SUPERPOSICAO DE TAMANHOS ENTRE GARGANTAS E POROS'
WRITE(*,*)'esse valor varia entre 0 e 1, significando nenhuma ou total superposicao'
6 READ*,OMEGA
IF (OMEGA.LT.0.0.OR.OMEGA.GT.1.0) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO. ENTRE COM NOVO VALOR.'
WRITE(*,*)
GOTO 6
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DIGITE O VALOR DA POROSIDADE EXPERIMENTAL DA AMOSTRA'
WRITE(*,*)'Este valor deve se situar entre um numero maior do que 0 e menor do que 100. '
WRITE(*,*)' Ele serah usado para o calculo do comprimento das gargantas.'
WRITE(*,*)
READ*,POREXP
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESCOLHA O TIPO DE DISTRIBUICAO PARA DETERMINACAO DOS DIAMETROS DOS POROS'
WRITE(*,*)'INICIALMENTE ESCOLHA A DISTRIBUICAO UNIFORME'
WRITE(*,*)
```

```
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'1 - DISTRIBUICAO UNIFORME'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'2 - DISTRIBUICAO LINEAR DECRESCENTE'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'3 - DISTRIBUICAO LINEAR CRESCENTE'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'4 - DISTRIBUICAO EXPONENCIAL DECRESCENTE'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'5 - DISTRIBUICAO EXPONENCIAL CRESCENTE'
WRITE(*,*)
7 READ*,IDISTP
IF (IDISTP.LT.1.OR.IDISTP.GT.5) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE VALOR NAO EH VALIDO. ENTRE COM NOVO VALOR.'
WRITE(*,*)
GOTO 7
ENDIF
WRITE(*,*)'DIGITE O TAMANHO DA REDE A SER GERADA'
WRITE(*,*)'esse valor sera usado para dimensionamento da matriz do meio poroso'
WRITE(*,*)'por exemplo: uma matriz 10 x 10 x 10 tem um tamanho de rede igual a 10'
WRITE(*,*)
READ*,N
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ABAIXAMENTO NA PRESSAO DE VAPOR DEVIDO AA'
WRITE(*,*)'CURVATURA DO MENISCO NA INTERFACE LIQUIDO-GAS'
WRITE(*,*)'PARA CALCULO DA EVAPORACAO DO FLUIDO NO MEIO POROSO'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'*** EFEITO KELVIN ***'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'0 = NAO CONSIDERA O EFEITO KELVIN'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'1 = CONSIDERA O EFEITO KELVIN'
8 READ*,KELVIN
IF (KELVIN.LT.0.OR.KELVIN.GT.1) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ESTE NUMERO NAO E VALIDO. ESCOLHA ENTRE 0 E 1.'
WRITE(*,*)
GO TO 8
END IF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'DETERMINACAO DA DIFUSIVIDADE DO SISTEMA BINARIO AR + LIQUIDO'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'1 = EQUACAO DE CHAPMANN AND ENSKOG (PARA O N-HEXANO)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'2 = CORRELACAO EMPIRICA DE WILKE AND LEE (PARA O HEXADECANO)'
11 READ*,DIFFUSION
IF (DIFFUSION.LT.1.OR.DIFFUSION.GT.2) THEN
WRITE(*,*)
```

```
WRITE(*,*)'ESTE NUMERO NAO E VALIDO. ESCOLHA ENTRE 1 E 2.'
WRITE(*,*)
GO TO 11
END IF
! VERIFICAR SEMPRE O TIPO DE LIQUIDO QUE SE QUER SIMULAR!!!
IF (DIFFUSION.EQ.1) THEN
! DADOS PARA O N-HEXANO
P = 1.0
T = 293.15
DENS = 659.0
PML = 86.178
PC = 30.1
TC = 507.50
TENSAO = 20.44
SIGMAL = 5.949
Ek = 399.3
ELSE
! DADOS PARA O N-HEXADECANO
P = 1.0
T = 293.15
DENS = 773.0
PML = 226.448
PC = 14.1
TC = 722.0
TENSAO = 27.47
SIGMAL = 8.41
Ek = 644.0
END IF
ALLOCATE(DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6))
ALLOCATE(COMPGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6))
ALLOCATE(VOLGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6))
ALLOCATE(MARCADORGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6))
ALLOCATE(TAMPOROS(1:N,1:N,1:N))
ALLOCATE(GARGANTAS(1:N,1:N,1:N))
ALLOCATE(VOLPOROS(1:N,1:N,1:N))
ALLOCATE(MARCADORPOROS(1:N,1:N,1:N))
ALLOCATE(PESO(1:N,1:N,1:N,1:6))
ALLOCATE(AUXPEO(1:N,1:N))
ALLOCATE(LABEL(1:N*N*N))
ALLOCATE(LL(1:N*N*N))
ALLOCATE(MARCLABEL(1:N*N*N))
ALLOCATE(KONTLABEL(1:N*N*N))
ALLOCATE(RHO(1:N-1))
ALLOCATE(GARGCLUSTER(1:N*N*N))
ALLOCATE(COMPCLUSTER(1:N*N*N))
ALLOCATE(VOLEVAP(1:N*N*N))
ALLOCATE(RMASSAEVAP(1:N*N*N))
ALLOCATE(TOTALNAZ(1:N*N*N))
ALLOCATE(TEMPOEVAP(1:N*N*N))
```

```

ALLOCATE(VETORI(1:N*N*N))
ALLOCATE(VETORJ(1:N*N*N))
ALLOCATE(VETORK(1:N*N*N))
ALLOCATE(VG(1:N*N*N))
ALLOCATE(PPARCIAL(1:N,1:N,1:N))
ALLOCATE(MATRIZA(1:N*N*N,1:N*N*N))
ALLOCATE(VETORB(1:N*N*N))
ALLOCATE(VETORX(1:N*N*N))
ALLOCATE(LINHA(1:N,1:N,1:N))
ALLOCATE(POSITI(1:N*N*N))
ALLOCATE(POSITJ(1:N*N*N))
ALLOCATE(POSITK(1:N*N*N))
ALLOCATE(POSITL(1:N*N*N))
ALLOCATE(PVAPOR(1:N,1:N,1:N))
! -----
! INICIALIZACAO DO PROGRAMA
! -----

do nr=1,1
  indaux = 0.0
  if (ix.lt.1.or.ix.gt.30000) ix = 30000*aleat()
  if (iy.lt.1.or.iy.gt.30000) iy = 30000*aleat()
  if (iz.lt.1.or.iz.gt.30000) iz = 30000*aleat()
  ! DEPOIS DESMARCAR PARA CALCULO DAS PROPRIEDADES MEDIAS DA REDE !!!!!!!!!!!!!!!
  !write(*,*)ix,iy,iz
  NTORT = 1
  VALORTORT = 0.0
  LABELPG = 0
  LABELPP = 0
  9 CONTINUE
  DO 10 I=1,N
  DO 10 J=1,N
  DO 10 K=1,N
  TAMPOROS(I,J,K) = 0.0
  GARGANTAS(I,J,K) = 0.0
  VOLPOROS(I,J,K) = 0.0
  DO 10 L=1,6
  DIAMGARGANTAS(I,J,K,L) = 0.0
  COMPGARGANTAS(I,J,K,L) = 0.0
  VOLGARGANTAS(I,J,K,L) = 0.0
  10 CONTINUE
  SELECT CASE(IDIST)
  CASE(1)
  ! -----
  ! DISTRIBUICAO UNIFORME DE GARGANTAS - 1%. UTILIZA UM NUMERO PSEUDO-RANDOMICO
  ! RETANGULARMENTE DISTRIBUIDO ENTRE 0 E 1 PARA CALCULO DA DISTRIBUICAO.
  ! -----
  ! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO X
  ! -----
  DO 20 I=1,N-1

```

```
DO 20 J=1,N
DO 20 K=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*ALEAT() + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,2) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I+1,J,K,4) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)
20 CONTINUE
! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y
! -----
DO 30 J=1,N-1
DO 30 I=1,N
DO 30 K=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*ALEAT() + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,3) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I,J+1,K,1) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)
30 CONTINUE
! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Z
! -----
DO 40 K=1,N
DO 40 I=1,N
DO 40 J=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*ALEAT() + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,6) = AUXDIAM
IF (K+1.LE.N) THEN
DIAMGARGANTAS(I,J,K+1,5) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
ENDIF
40 CONTINUE
```

```

CASE(2)
! -----
! DISTRIBUICAO LINEAR DECRESCENTE DE GARGANTAS.
! P(Y) = -M*Y + B PARA DM>=Y>=DI.
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO LINEAR DECRESCENTE, SENDO
! FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS E MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2º ED., THE ART OF SCIENTIFIC COMPUTING,
! W.H.PRESS, W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS
! -----
! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
! -----
IF (LABELPG.EQ.0) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'OS VALORES A SEGUIR SAO SUGESTOES A SEREM USADAS'
WRITE(*,*)'PARA A DISTRIBUICAO MINIMA E MAXIMA DE GARGANTAS'
WRITE(*,*)'EM % UMA VEZ QUE NAO SE TENHA VALORES EXPERIMENTAIS'
WRITE(*,*)'DA CURVA DE INTRUSAO DE MERCURIO.'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)(VALOR MAXIMO - VALOR MINIMO)%'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)(2% - 0%)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)(1.55% - 0.45%)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)(1.1% - 0.9%)'
WRITE(*,*)
! -----
! VEJA G.P.MATTHEWS, A.K.MOSS, M.C.SPEARING, F.VOLAND,
! POWDER TECHNOLOGY, 76 (1993) 95-107.
! -----
WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MAXIMO DA DISTRIBUICAO EM %'
WRITE(*,*)
READ*,PFG
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MINIMO DA DISTRIBUICAO EM %'
WRITE(*,*)
READ*,PIG
WRITE(*,*)
LABELPG = 1
PIG = PIG/100.0
PFG = PFG/100.0
END IF
! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO X
! -----
DO 50 I=1,N-1
DO 50 J=1,N
DO 50 K=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN

```

```

EME = (PFG - PIG)/(DIAMMAX - DMING)
DELTA = PIG**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIG + SQRT(DELTA))/EME
AUXDIAM = ABS((DIAMMAX - DMING)*(RANDNOVO/100.0) + DMING - DIAMMAX)
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,2) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I+1,J,K,4) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)
50 CONTINUE
! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y
! -----
DO 60 J=1,N-1
DO 60 I=1,N
DO 60 K=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
EME = (PFG - PIG)/(DIAMMAX - DMING)
DELTA = PIG**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIG + SQRT(DELTA))/EME
AUXDIAM = ABS((DIAMMAX - DMING)*(RANDNOVO/100.0) + DMING - DIAMMAX)
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,3) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I,J+1,K,1) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)
60 CONTINUE
! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Z
! -----
DO 70 K=1,N
DO 70 I=1,N
DO 70 J=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
EME = (PFG - PIG)/(DIAMMAX - DMING)
DELTA = PIG**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIG + SQRT(DELTA))/EME
AUXDIAM = ABS((DIAMMAX - DMING)*(RANDNOVO/100.0) + DMING - DIAMMAX)
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0

```

```

ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,6) = AUXDIAM
IF (K+1.LE.N) THEN
DIAMGARGANTAS(I,J,K+1,5) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
ENDIF
70 CONTINUE
CASE(3)
! -----
! DISTRIBUICAO LINEAR CRESCENTE DE GARGANTAS.
! P(Y) = M*Y + B PARA DM>=Y>=DI.
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO LINEAR CRESCENTE, SENDO
! FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS E MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2º ED., THE ART OF SCIENTIFIC COMPUTING, W.H.PRESS,
! W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY, B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS
! -----
! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
! -----
IF (LABELPG.EQ.0) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'OS VALORES A SEGUIR SAO SUGESTOES A SEREM USADAS'
WRITE(*,*)'PARA A DISTRIBUICAO MINIMA E MAXIMA DE GARGANTAS'
WRITE(*,*)'EM % UMA VEZ QUE NAO SE TENHA VALORES EXPERIMENTAIS'
WRITE(*,*)'DA CURVA DE INTRUSAO DE MERCURIO.'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(VALOR MINIMO - VALOR MAXIMO)%'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(0% - 2%)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(0.45% - 1.55%)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(0.9% - 1.1%)'
WRITE(*,*)
! -----
! VEJA G.P.MATTHEWS, A.K.MOSS, M.C.SPEARING, F.VOLAND,
! POWDER TECHNOLOGY, 76 (1993) 95-107.
! -----
WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MINIMO DA DISTRIBUICAO EM %'
WRITE(*,*)
READ*,PIG
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MAXIMO DA DISTRIBUICAO EM %'
WRITE(*,*)
READ*,PFG
WRITE(*,*)
PIG = PIG/100.0
PFG = PFG/100.0
LABELPG = 1
END IF
! -----

```

! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO X

! -----
DO 75 I=1,N-1
DO 75 J=1,N
DO 75 K=1,N
IF (ALEAT()).LE.CONECT/6.0) THEN
EME = (PFG - PIG)/(DIAMMAX - DMING)
DELTA = PIG**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIG + SQRT(DELTA))/EME
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*(RANDNOVO/100.0) + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,2) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I+1,J,K,4) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)
75 CONTINUE

! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y

! -----
DO 76 J=1,N-1
DO 76 I=1,N
DO 76 K=1,N
IF (ALEAT()).LE.CONECT/6.0) THEN
EME = (PFG - PIG)/(DIAMMAX - DMING)
DELTA = PIG**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIG + SQRT(DELTA))/EME
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*(RANDNOVO/100.0) + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,3) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I,J+1,K,1) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)
76 CONTINUE

! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Z

! -----
DO 77 K=1,N
DO 77 I=1,N
DO 77 J=1,N
IF (ALEAT()).LE.CONECT/6.0) THEN
EME = (PFG - PIG)/(DIAMMAX - DMING)
DELTA = PIG**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIG + SQRT(DELTA))/EME

```

AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*(RANDNOVO/100.0) + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,6) = AUXDIAM
IF (K+1.LE.N) THEN
DIAMGARGANTAS(I,J,K+1,5) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
ENDIF
77 CONTINUE
CASE(4)
! -----
! DISTRIBUICAO EXPONENCIAL DECRESCENTE DE GARGANTAS.
! P(Y) = (1.0/LAMBDA)*EXP(-Y/LAMBDA)
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO ! EXPONENCIAL DECRESCENTE,
! SENDO FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS E MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2° ED., THE ART OF SCIENTIFIC COMPUTING,
! W.H.PRESS, W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY, B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS
! -----
! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
! -----
LAMBDA = 0.5
! Assumir valor de lambda inicialmente igual a 1.0 para gerar números
! pseudo-aleatorios exponencialmente distribuídos de
! forma crescente entre 0 e 1.
! -----
! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO X
! -----
DO 90 I=1,N-1
DO 90 J=1,N
DO 90 K=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
80   AUX1 = ALEAT()
IF(AUX1.EQ.1.0) GO TO 80
RANDNOVO = - (LAMBDA*LOG(1.0 - AUX1))
IF(RANDNOVO.GE.1.0.OR.RANDNOVO.LT.0.0) GO TO 80
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*RANDNOVO + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,2) = AUXDIAM
DIAMGARGANTAS(I+1,J,K,4) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)
90 CONTINUE
! -----

```

! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y

! -----

DO 110 J=1,N-1

DO 110 I=1,N

DO 110 K=1,N

IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN

100 AUX1 = ALEAT()

IF(AUX1.EQ.1.0) GO TO 100

RANDNOVO = - (LAMBDA*LOG(1.0 - AUX1))

IF(RANDNOVO.GE.1.0.OR.RANDNOVO.LT.0.0) GO TO 100

AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*RANDNOVO + DMING

IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN

AUXDIAM = DIAMMAX

ENDIF

ELSE

AUXDIAM = 0.0

ENDIF

DIAMGARGANTAS(I,J,K,3) = AUXDIAM

DIAMGARGANTAS(I,J+1,K,1) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)

110 CONTINUE

! -----

! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Z

! -----

DO 130 K=1,N

DO 130 I=1,N

DO 130 J=1,N

IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN

120 AUX1 = ALEAT()

IF(AUX1.EQ.1.0) GO TO 120

RANDNOVO = - (LAMBDA*LOG(1.0 - AUX1))

IF(RANDNOVO.GE.1.0.OR.RANDNOVO.LT.0.0) GO TO 120

AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*RANDNOVO + DMING

IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN

AUXDIAM = DIAMMAX

ENDIF

ELSE

AUXDIAM = 0.0

ENDIF

DIAMGARGANTAS(I,J,K,6) = AUXDIAM

IF (K+1.LE.N) THEN

DIAMGARGANTAS(I,J,K+1,5) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)

ENDIF

130 CONTINUE

CASE(5)

! -----

! DISTRIBUICAO EXPONENCIAL CRESCENTE DE GARGANTAS.

! $P(Y) = (1.0/LAMBDA)*EXP(Y/LAMBDA)$

! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO EXPONENCIAL CRESCENTE, SENDO

! FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS E MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.

! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2º ED., THE ART OF SCIENTIFIC COMPUTING, W.H.PRESS,
! W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY, B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS

! -----

! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS

! -----

LAMBDA = 1.44

! valor de lambda assumido igual a 1.44 para gerar números pseudo-randomicos exponencialmente distribuidos de forma crescente
! entre 0 e 1.

! -----

! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO X

! -----

DO 140 I=1,N-1

DO 140 J=1,N

DO 140 K=1,N

IF (ALEAT()).LE.CONECT/6.0) THEN

RANDNOVO = LAMBDA*LOG(1.0 + ALEAT())

AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*RANDNOVO + DMING

IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN

AUXDIAM = DIAMMAX

ENDIF

ELSE

AUXDIAM = 0.0

ENDIF

DIAMGARGANTAS(I,J,K,2) = AUXDIAM

DIAMGARGANTAS(I+1,J,K,4) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)

140 CONTINUE

! -----

! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y

! -----

DO 150 J=1,N-1

DO 150 I=1,N

DO 150 K=1,N

IF (ALEAT()).LE.CONECT/6.0) THEN

RANDNOVO = LAMBDA*LOG(1.0 + ALEAT())

AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*RANDNOVO + DMING

IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN

AUXDIAM = DIAMMAX

ENDIF

ELSE

AUXDIAM = 0.0

ENDIF

DIAMGARGANTAS(I,J,K,3) = AUXDIAM

DIAMGARGANTAS(I,J+1,K,1) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)

150 CONTINUE

! -----

! DETERMINACAO DOS DIAMETROS DAS GARGANTAS NA DIRECAO Z

! -----

DO 160 K=1,N

DO 160 I=1,N

```

DO 160 J=1,N
IF (ALEAT().LE.CONECT/6.0) THEN
RANDNOVO = LAMBDA*LOG(1.0 + ALEAT())
AUXDIAM = (DIAMMAX - DMING)*RANDNOVO + DMING
IF (AUXDIAM.GT.DIAMMAX) THEN
AUXDIAM = DIAMMAX
ENDIF
ELSE
AUXDIAM = 0.0
ENDIF
DIAMGARGANTAS(I,J,K,6) = AUXDIAM
IF (K+1.LE.N) THEN
DIAMGARGANTAS(I,J,K+1,5) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
ENDIF
160 CONTINUE
END SELECT
! -----
! DETERMINACAO DE TAMANHO DE PORO.
! -----
DMINP = (1.0 - OMEGA)*DIAMMAX + OMEGA*DMING
IF (OMEGA.EQ.1.0) THEN
DMINP = DMING
DMAXP = DIAMMAX
ELSE
DMAXP = DMINP + (DIAMMAX - DMING)
END IF
SELECT CASE(IDISTP)
CASE(1)
! -----
! DISTRIBUICAO UNIFORME DE TAMANHO DE POROS - 1%.
! UTILIZA UM NUMERO PSEUDO-RANDOMICO RETANGULARMENTE
! DISTRIBUIDO ENTRE 0 E 1 PARA CALCULO DA DISTRIBUICAO.
! -----
DO 170 I=1,N
DO 170 J=1,N
DO 170 K=1,N
AUX2POR = ALEAT()
AUXPOR = DMINP + (DMAXP - DMINP)*AUX2POR
TAMPOROS(I,J,K) = AUXPOR
WRITE(*,*)I,J,K,TAMPOROS(I,J,K)
170 CONTINUE
CASE(2)
! -----
! DISTRIBUICAO LINEAR DECRESCENTE DE POROS.
!  $P(Y) = -M*Y + B$  PARA  $DM \geq Y \geq DI$ .
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO
! LINEAR DECRESCENTE, SENDO FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS E
! MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2° ED., THE ART

```

! OF SCIENTIFIC COMPUTING, W.H.PRESS, W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY

! B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS

! -----

! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS

! -----

IF (LABELPP.EQ.0) THEN

WRITE(*,*)

WRITE(*,*)'OS VALORES A SEGUIR SAO SUGESTOES A SEREM USADAS'

WRITE(*,*)'PARA A DISTRIBUICAO MINIMA E MAXIMA DE POROS'

WRITE(*,*)'EM % UMA VEZ QUE NAO SE TENHA VALORES EXPERIMENTAIS'

WRITE(*,*)'DA CURVA DE INTRUSAO DE MERCURIO.'

WRITE(*,*)

WRITE(*,*)'(VALOR MAXIMO - VALOR MINIMO)%'

WRITE(*,*)

WRITE(*,*)'(2% - 0%)'

WRITE(*,*)

WRITE(*,*)'(1.55% - 0.45%)'

WRITE(*,*)

WRITE(*,*)'(1.1% - 0.9%)'

WRITE(*,*)

! -----

! VEJA G.P.MATTHEWS, A.K.MOSS, M.C.SPEARING, F.VOLAND,

! POWDER TECHNOLOGY, 76 (1993) 95-107.

! -----

WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MAXIMO DA DISTRIBUICAO EM %'

WRITE(*,*)

READ*,PFP

WRITE(*,*)

WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MINIMO DA DISTRIBUICAO EM %'

WRITE(*,*)

READ*,PIP

WRITE(*,*)

PIP = PIP/100.0

PFP = PFP/100.0

LABELPP = 1

END IF

! -----

! DETERMINACAO DOS TAMANHOS DOS POROS

! -----

EME = (PFP - PIP)/(DMAXP - DMINP)

DO 172 I=1,N

DO 172 J=1,N

DO 172 K=1,N

DELTA = PIP**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()

RANDNOVO = (- PIP + SQRT(DELTA))/EME

AUXPOR = ABS((DMAXP - DMINP)*(RANDNOVO/100.0) + DMINP - DMAXP)

IF (AUXPOR.GT.DMAXP) THEN

AUXPOR = DMAXP

ENDIF

```

TAMPOROS(I,J,K) = AUXPOR
WRITE(*,*)I,J,K,TAMPOROS(I,J,K)
172 CONTINUE
CASE(3)
! -----
! DISTRIBUICAO LINEAR CRESCENTE DE POROS.
!  $P(Y) = M*Y + B$  PARA  $DM \geq Y \geq DI$ .
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO
! LINEAR CRESCENTE, SENDO FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS E
! MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2° ED., THE ART
! OF SCIENTIFIC COMPUTING, W.H.PRESS, W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY
! B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS
! -----
! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
! -----
IF (LABELPP.EQ.0) THEN
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'OS VALORES A SEGUIR SAO SUGESTOES A SEREM USADAS'
WRITE(*,*)'PARA A DISTRIBUICAO MINIMA E MAXIMA DE GARGANTAS'
WRITE(*,*)'EM % UMA VEZ QUE NAO SE TENHA VALORES EXPERIMENTAIS'
WRITE(*,*)'DA CURVA DE INTRUSAO DE MERCURIO.'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(VALOR MINIMO - VALOR MAXIMO)%'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(0% - 2%)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(0.45% - 1.55%)'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'(0.9% - 1.1%)'
WRITE(*,*)
! -----
! VEJA G.P.MATTHEWS, A.K.MOSS, M.C.SPEARING, F.VOLAND,
! POWDER TECHNOLOGY, 76 (1993) 95-107.
! -----
WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MINIMO DA DISTRIBUICAO EM %'
WRITE(*,*)
READ*,PIP
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ENTRE COM O VALOR MAXIMO DA DISTRIBUICAO EM %'
WRITE(*,*)
READ*,PFP
WRITE(*,*)
PIP = PIP/100.0
PFP = PFP/100.0
LABELPP = 1
END IF
! -----
! DETERMINACAO DOS TAMANHOS DOS POROS

```

```

! -----
EME = (PFP - PIP)/(DMAXP - DMINP)
DO 174 I=1,N
DO 174 J=1,N
DO 174 K=1,N
DELTA = PIP**2.0 + 2.0*EME*ALEAT()
RANDNOVO = (- PIP + SQRT(DELTA))/EME
AUXPOR = (DMAXP - DMINP)*(RANDNOVO/100.0) + DMINP
IF (AUXPOR.GT.DMAXP) THEN
AUXPOR = DMAXP
ENDIF
TAMPOROS(I,J,K) = AUXPOR
174 CONTINUE
CASE(4)
! -----
! DISTRIBUICAO EXPONENCIAL DECRESCENTE DE POROS.
! P(Y) = (1.0/LAMBDA)*EXP(-Y/LAMBDA)
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO
! EXPONENCIAL DECRESCENTE, SENDO FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS
! E MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2° ED., THE ART
! OF SCIENTIFIC COMPUTING, W.H.PRESS, W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY
! B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS
! -----
! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
! -----
      LAMBDA = 0.5
! Assumir valor de lambda inicialmente igual a 1.0 para gerar
! números pseudo-aleatórios exponencialmente distribuídos de
! forma crescente entre 0 e 1.
! -----
! DETERMINACAO DOS TAMANHOS DE POROS
! -----
DO 176 I=1,N
DO 176 J=1,N
DO 176 K=1,N
175   AUX1 = ALEAT()
IF (AUX1.EQ.1.0) GO TO 175
RANDNOVO = - (LAMBDA*LOG(1.0 - AUX1))
IF(RANDNOVO.GE.1.0.OR.RANDNOVO.LT.0.0) GO TO 175
AUXPOR = (DMAXP - DMINP)*RANDNOVO + DMINP
IF (AUXPOR.GT.DMAXP) THEN
AUXPOR = DMAXP
ENDIF
TAMPOROS(I,J,K) = AUXPOR
176 CONTINUE
CASE(5)
! -----
! DISTRIBUICAO EXPONENCIAL CRESCENTE DE POROS.

```

```

! P(Y) = (1.0/LAMBDA)*EXP(Y/LAMBDA)
! A PARTIR DA DISTRIBUICAO UNIFORME EH GERADA UMA DISTRIBUICAO
! EXPONENCIAL CRESCENTE, SENDO FORNECIDOS OS VALORES MINIMOS
! E MAXIMOS DA NOVA DISTRIBUICAO.
! RETIRADO DO NUMERICAL RECIPES IN FORTRAN 77, 2º ED., THE ART
! OF SCIENTIFIC COMPUTING, W.H.PRESS, W.T.VETTERLING, S.A.TEUKOLSKY
! B.P.FLANNERY, CHAPTER 7 - RANDOM NUMBERS
! -----
! INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
! -----
LAMBDA = 1.44
! valor de lambda assumido igual a 1.44 para gerar números
! pseudo-aleatorios exponencialmente distribuídos de forma
! crescente entre 0 e 1.
! -----
! DETERMINACAO DOS TAMANHOS DOS POROS
! -----
DO 178 I=1,N
DO 178 J=1,N
DO 178 K=1,N
RANDNOVO = LAMBDA*LOG(1.0 + ALEAT())
AUXPOR = (DMAXP - DMINP)*RANDNOVO + DMINP
IF (AUXPOR.GT.DMAXP) THEN
AUXPOR = DMAXP
ENDIF
TAMPOROS(I,J,K) = AUXPOR
178 CONTINUE
END SELECT
! -----
! CALCULO DO EQUILIBRIO ENTRE GARGANTAS E POROS ATRAVES DA GERACAO DE UMA CADEIA DE
! MARKOV, VALIDANDO O PRINCIPIO DA CONSTRUCAO E DA FUNCAO DE CORRELACAO.
! -----
180 KONT = 0
DO 190 I=1,N
DO 190 J=1,N
DO 190 K=1,N
MARCADOR = 0
DO 190 M=1,6
IF (MARCADOR.EQ.0) THEN
IF (TAMPOROS(I,J,K).LT.DIAMGARGANTAS(I,J,K,M)) THEN
MARCADOR = 1
KONT = KONT + 1
ENDIF
ENDIF
190 CONTINUE
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)KONT
IF (KONT.GT.0) THEN
M1 = ALEAT()*N + 1

```

```

IF (M1.EQ.(N+1)) M1 = N
M2 = ALEAT()*N + 1
IF (M2.EQ.(N+1)) M2 = N
M3 = ALEAT()*N + 1
IF (M3.EQ.(N+1)) M3 = N
M4 = ALEAT()*N + 1
IF (M4.EQ.(N+1)) M4 = N
M5 = ALEAT()*N + 1
IF (M5.EQ.(N+1)) M5 = N
M6 = ALEAT()*N + 1
IF (M6.EQ.(N+1)) M6 = N
IF (M1.EQ.M4.AND.M2.EQ.M5.AND.M3.EQ.M6) GO TO 180
AUXTROCA = TAMPOROS(M1,M2,M3)
TAMPOROS(M1,M2,M3) = TAMPOROS(M4,M5,M6)
TAMPOROS(M4,M5,M6) = AUXTROCA
DO 200 M=1,6
IF (TAMPOROS(M1,M2,M3).GT.DIAMGARGANTAS(M1,M2,M3,M).AND. &
TAMPOROS(M4,M5,M6).GT.DIAMGARGANTAS(M4,M5,M6,M)) GO TO 200
AUXTROCA = TAMPOROS(M4,M5,M6)
TAMPOROS(M4,M5,M6) = TAMPOROS(M1,M2,M3)
TAMPOROS(M1,M2,M3) = AUXTROCA
GO TO 180
200 CONTINUE
GO TO 180
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'CADEIA DE MARKOV GERADA COM SUCESSO'
! -----
! DETERMINACAO DA CONECTIVIDADE DA REDE GERADA
! -----
DO 210 I=1,N
DO 210 J=1,N
DO 210 K=1,N
DO 210 Z=1,6
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z).NE.0.0) THEN
GARGANTAS(I,J,K) = GARGANTAS(I,J,K) + 1.0
ENDIF
210 CONTINUE
SOMA3 = 0.0
NPOROS = N*N*N
DO 220 I=1,N
DO 220 J=1,N
DO 220 K=1,N
SOMA3 = SOMA3 + GARGANTAS(I,J,K)
220 CONTINUE
CONNECTCALC = SOMA3/NPOROS
! -----
! DETERMINACAO DO COMPRIMENTO DAS GARGANTAS UTILIZANDO
! A POROSIDADE DETERMINADA EXPERIMENTALMENTE E O METODO

```

```

! PEGASO PARA AJUSTE DA POROSIDADE CALCULADA.
! -----
ESPMIN = DIAMMAX
ESPMAX = 3000.0
ESP = ESPMIN + DMING
CALL COMPGARG(N,ESP,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,COMPGARGANTAS)
! -----
! CALCULO INICIAL DA POROSIDADE USANDO O ESPACAMENTO
! MINIMO POSSIVEL, FORNECENDO O MAIOR VALOR DE PORO-
! SIDADE POSSIVEL DA REDE.
! -----
CALL VOLUMEPOROS(N,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,VOLPOROS)
CALL VOLUMEGARGANTAS(N,DIAMGARGANTAS,COMPGARGANTAS,VOLGARGANTAS)
CALL VOLVAZIOTOTAL(N,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,VOLUMEVAZIO)
PORCALC = (100.0*VOLUMEVAZIO)/(N*(N-1)*(N-1)*ESP*ESP*ESP)
IF (PORCALC.LT.POREXP) THEN
WRITE(*,*)'O VALOR DE POROSIDADE CALCULADO PARA ESTA REDE &
EH O VALOR MAXIMO. NO ENTANTO, ELE EH MENOR QUE O VALOR EXPERIMENTAL.'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'ALGUM VALOR EXPERIMENTAL PODE TER SIDO DETERMINADO &
INCORRETAMENTE. OS CALCULOS CONTINUARAO UTILIZANDO O VALOR MAXIMO OBTIDO!'
GO TO 280
ENDIF
! -----
! AJUSTE DO VALOR DA POROSIDADE CALCULADA E EXPERIMENTAL.
! METODO PEGASO, FORNECENDO O ESPACAMENTO ENTRE AS CAMADAS DO MODELO DE REDE GERADO.
! -----
TOLER = 1.0D-3
ITEMAX = 100
ITER = 0
TOLER2 = TOLER**2
A = ESP
ESPAC = A
FA = FUNCAO()
230 B = ESPMAX
ESPAC = B
CALL COMPGARG(N,B,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,COMPGARGANTAS)
CALL VOLUMEPOROS(N,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,VOLPOROS)
CALL VOLUMEGARGANTAS(N,DIAMGARGANTAS,COMPGARGANTAS,VOLGARGANTAS)
CALL VOLVAZIOTOTAL(N,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,VOLUMEVAZIO)
FB = FUNCAO()
IF (FA*FB.LT.0.0) THEN
X = B
240 CONTINUE
DIF = FB*(B - A)/(FB - FA)
X = X - DIF
ESPAC = X
CALL COMPGARG(N,X,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,COMPGARGANTAS)
CALL VOLUMEPOROS(N,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,VOLPOROS)

```

```

CALL VOLUMEGARGANTAS(N,DIAMGARGANTAS,COMPARGANTAS,VOLGARGANTAS)
CALL VOLVAZIOTOTAL(N,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,VOLUMEVAZIO)
FX = FUNCAO()
IF (FX*FB.GE.0.0) GO TO 250
A = B
FA = FB
GO TO 260
250 CONTINUE
FA = FA*FB/(FB + FX)
260 CONTINUE
B = X
FB = FX
ITER = ITER + 1
L1 = ABS(DIF).GT.TOLER
L2 = ITER.LT.ITEMAX
L3 = ABS(FA).GT.TOLER2
L4 = ABS(FB).GT.TOLER2
! -----
! QUANDO PELO MENOS UMA DAS EXPRESSOES LOGICAS ACIMA
! FOR FALSA O CICLO TERMINARAH!
! -----
IF (L1.AND.L2.AND.L3.AND.L4) GO TO 240
IF (L2) GO TO 270
WRITE(*,940)ITEMAX
PORCALC = 0.0
GO TO 280
270 CONTINUE
ESP = X
PORCALC = (100.0*VOLUMEVAZIO)/(N*(N-1)*(N-1)*ESP*ESP*ESP)
ELSE
WRITE(*,*)'NAO EXISTE ZEROS NO INTERVALO DE ESPACAMENTO CONSIDERADO.'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'AUMENTE O VALOR INICIAL DO ESPACAMENTO MAXIMO (ESPMAX = 1000.0).'


---



```

```

DO 310 I=1,N
DO 310 J=1,N
DO 310 K=1,N
MARCADORPOROS(I,J,K) = 0      !INICIALIZA MARCADOR DE POROS
DO 310 Z=1,6
MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z) = 0  !INICIALIZA MARCADOR DE GARGANTAS
310 CONTINUE
DO 320 I=1,N
DO 320 J=1,N
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,N,6).GE.HGSIZE) THEN !FAZ VARREDURA NA CAMADA SUPERIOR
MARCADORGARGANTAS(I,J,N,6) = 1
NTFILL = NTFILL + 1
ENDIF
320 CONTINUE
330 IF (NTFILL.EQ.0) GO TO 380
DO 340 I=N,1,-1
DO 340 J=N,1,-1
DO 340 K=N,1,-1
DO 340 Z=6,1,-1
IF (MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z).EQ.1.AND.MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.0) THEN
IF (K.EQ.N) MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
! -----
! PREENCHIMENTO DOS POROS INFERIORES AA CAMADA SUPERIOR INICIAL NA DIRECAO Z, Y e X
! -----
IF (Z.EQ.6.AND.K.LT.N) THEN
MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
MARCADORPOROS(I,J,K+1) = MARCADORPOROS(I,J,K)
ENDIF
IF (Z.EQ.5.AND.K.GT.1) THEN
MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
MARCADORPOROS(I,J,K-1) = MARCADORPOROS(I,J,K)
ENDIF
IF (Z.EQ.3.AND.J.LT.N) THEN
MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
MARCADORPOROS(I,J+1,K) = MARCADORPOROS(I,J,K)
ENDIF
IF (Z.EQ.1.AND.J.GT.1) THEN
MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
MARCADORPOROS(I,J-1,K) = MARCADORPOROS(I,J,K)
ENDIF
IF (Z.EQ.2.AND.I.LT.N) THEN
MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
MARCADORPOROS(I+1,J,K) = MARCADORPOROS(I,J,K)
ENDIF
IF (Z.EQ.4.AND.I.GT.1) THEN
MARCADORPOROS(I,J,K) = 1
MARCADORPOROS(I-1,J,K) = MARCADORPOROS(I,J,K)
ENDIF
ENDIF
ENDIF

```

```

340 CONTINUE
NUFILL = NTFILL
DO 350 I=N,1,-1
DO 350 J=N,1,-1
DO 350 K=N,1,-1
DO 350 Z=6,1,-1
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.1.AND.MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z).EQ.0 &
AND.DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z).GE.HGSIZE) THEN
MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z) = 1
IF (Z.EQ.6.AND.K.LT.N) THEN
MARCADORGARGANTAS(I,J,K+1,5) = MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
IF (Z.EQ.5.AND.K.GT.1) THEN
MARCADORGARGANTAS(I,J,K-1,6) = MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
IF (Z.EQ.3.AND.J.LT.N) THEN
MARCADORGARGANTAS(I,J+1,K,1) = MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
IF (Z.EQ.1.AND.J.GT.1) THEN
MARCADORGARGANTAS(I,J-1,K,3) = MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
IF (Z.EQ.2.AND.I.LT.N) THEN
MARCADORGARGANTAS(I+1,J,K,4) = MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
IF (Z.EQ.4.AND.I.GT.1) THEN
MARCADORGARGANTAS(I-1,J,K,2) = MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
NUFILL = NUFILL + 1
ENDIF
350 CONTINUE
IF (NUFILL.NE.NTFILL) THEN
NTFILL = NUFILL
GO TO 330
ENDIF
POROCHEIO = 0.0
GARGANTACHEIA = 0.0
DO 360 I=N,1,-1
DO 360 J=N,1,-1
DO 360 K=N,1,-1
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.1) POROCHEIO = (TAMPOROS(I,J,K)**3) + POROCHEIO
DO 360 Z=6,1,-1
IF (Z.EQ.6.OR.Z.EQ.3.OR.Z.EQ.2) THEN
IF (MARCADORGARGANTAS(I,J,K,Z).EQ.1) GARGANTACHEIA = ((3.14159*DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z)**2.0)/4.0)* &
COMPARGANTAS(I,J,K,Z) + GARGANTACHEIA
ENDIF
360 CONTINUE
VOLUMEHG = ((POROCHEIO + GARGANTACHEIA)/VOLUMEVAZIO)*100.0
WRITE(1600,370)HGSIZE,VOLUMEHG
370 FORMAT(5X,F7.4,25X,F9.4)

```

```

380 IF (HGSIZE.GT.DMING) THEN
HGSIZE = HGSIZE - DMING
GO TO 300
ENDIF
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'CURVA POROSIMETRICA GERADA COM SUCESSO'
! -----
! FAZ A ESTATÍSTICA DA DISTRIBUIÇÃO DAS GARGANTAS E DE POROS
! DA REDE GERADA DE ACORDO COM A DISTRIBUIÇÃO ESCOLHIDA
! -----
DO 390 I=1,N
DO 390 J=1,N
DO 390 K=1,N
ESTATPOR(TAMPOROS(I,J,K)) = ESTATPOR(TAMPOROS(I,J,K)) + 1
DO 390 Z=1,6
ESTATGARG(DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z)) = ESTATGARG(DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z)) + 1
390 CONTINUE
SOMA1 = 0.0
SOMA2 = 0.0
DO 400 I=DMING,DIAMMAX
SOMA1 = SOMA1 + ESTATGARG(I)
400 CONTINUE
DO 410 I=DMINP,DMAXP
SOMA2 = SOMA2 + ESTATPOR(I)
410 CONTINUE
DO 420 J=1,DIAMMAX
PERCENTG(J) = (ESTATGARG(J)/SOMA1)*100.0
420 CONTINUE
DO 430 J=DMINP,DMAXP
PERCENTP(J) = (ESTATPOR(J)/SOMA2)*100.0
430 CONTINUE
! -----
! DETERMINACAO DA TORTUOSIDADE DA REDE GERADA
! -----
435 NRW = 50          !NUMERO MAXIMO DE ROTAS NRW = 30.000
DO 760 L=1,NRW      !NRW EH O NUMERO DE PASSEADORES ALEATORIOS
STEPTOTAL = 0.0
! -----
! VARRENDO AS GARGANTAS SUPERIORES PARA INICIAR A ROTA DE CADA PASSEADOR ALEATORIO
! -----
440 IFLAG = 0
DO 450 I=1,N
DO 450 J=1,N
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,N,6).NE.0.0) THEN
AUX1PESO = ALEAT()
PESO(I,J,N,6) = AUX1PESO*((DIAMGARGANTAS(I,J,N,6)**2.0)/(4.0*COMPGARGANTAS(I,J,N,6)))
IF (IFLAG.EQ.0) THEN
GARGESCOLHIDA = PESO(I,J,N,6)
II = I

```

```
J1 = J
IFLAG = 1
ENDIF
ENDIF
450 CONTINUE
DO 460 I=1,N
DO 460 J=1,N
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,N,6).NE.0.0) THEN
IF (I.EQ.I1.AND.J.EQ.J1) GO TO 460
IF (GARGESCOLHIDA.LT.PESO(I,J,N,6)) THEN
GARGESCOLHIDA = PESO(I,J,N,6)
I1 = I
J1 = J
ENDIF
ENDIF
460 CONTINUE
470 ISOMA = 0
DO 480 I=1,N
DO 480 J=1,N
AUXPESO(I,J) = 0.0
480 CONTINUE
DO 490 I=1,N
DO 490 J=1,N
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,N,6).NE.0.0) THEN
IF (I.EQ.I1.AND.J.EQ.J1) GO TO 490
IF (GARGESCOLHIDA.EQ.PESO(I,J,N,6)) THEN
ISOMA = ISOMA + 1
AUXPESO(I,J) = PESO(I,J,N,6)
ENDIF
ENDIF
490 CONTINUE
IF (ISOMA.EQ.0) GO TO 530
AUX2 = ALEAT()
AUXPESO(I1,J1) = AUX2
DO 500 I=1,N
DO 500 J=1,N
IF (I.NE.I1.AND.J.NE.J1.AND.AUXPESO(I,J).NE.0.0) THEN
AUX3 = ALEAT()
AUXPESO(I,J) = AUX3
ENDIF
500 CONTINUE
GARGESCOLHIDA = AUXPESO(I1,J1)
DO 510 I=1,N
DO 510 J=1,N
IF (AUXPESO(I,J).NE.0.0) THEN
IF (GARGESCOLHIDA.LT.AUXPESO(I,J)) THEN
GARGESCOLHIDA = AUXPESO(I,J)
I1 = I
J1 = J
```

```

ENDIF
ENDIF
510 CONTINUE
DO 520 I=1,N
DO 520 J=1,N
IF (AUXPESO(I,J).NE.0.0) THEN
PESO(I,J,N,6) = AUXPESO(I,J)
ELSE
PESO(I,J,N,6) = 0.0
ENDIF
520 CONTINUE
GO TO 470
530 CONTINUE
!UMA VEZ ESCOLHIDA A GARGANTA DE ENTRADA NA REDE, MOVER O PASSEADOR
!ALEATORIO ATRAVÉS DO CANAL ALCANCANDO O PORO RESPECTIVO
! -----
! VERIFICANDO SE O PORO RESPECTIVO TEM GARGANTAS NAO NULAS
! -----
IFLAG = 0
DO 540 M=1,5
IF (DIAMGARGANTAS(I1,J1,N,M).NE.0.0) IFLAG = 1
540 CONTINUE
IF (IFLAG.EQ.0) GO TO 440 !PASSEIO ABORTADO. NAO EXISTE SAIDA NESTE CASO.
! -----
! INICIA A CONSTRUCAO DA ROTA
! -----
CMDREDE = N          !TEM QUE TER ELEMENTO, CAMINHO E ROTA
CONT = 1.0
550 IFLAG = 0
DIR = 1
BLOCK = 0
I2 = I1
J2 = J1
NC = 10              !NUMERO MAXIMO DE CAMINHOS NC = 5.000
RFLAG = N           !NUMERO DE CAMINHOS SEGUIDOS PELO
DO 660 I=1,NC       !PASSEADOR ALEATORIO P/ ALCANCAR A CAMADA
560 IF (CONT.GT.RFLAG) THEN  !IMEDIAT. INFERIOR.
CAMINHO(I) = 0.0
! WRITE(*,*)I,CAMINHO(I)  !PARA ABORTAR PASSEIO, O CONTADOR TEM QUE
CONT = 0.0            !SER MAIOR DO QUE A DIMENSAO DA REDE N.
GO TO 660
ENDIF
DO 570 M=1,5
IF (DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,M).NE.0.0.AND.M.NE.BLOCK) THEN
AUX1PESO = ALEAT()
PESO(I1,J1,CMDREDE,M) = AUX1PESO*((DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,M)**2.0)/
(4.0*COMPGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,M)))
IF (IFLAG.EQ.0) THEN
GARGESCOLHIDA = PESO(I1,J1,CMDREDE,M)

```

```
DIR = M
IFLAG = 1
ENDIF
ELSE
PESO(I1,J1,CMDREDE,M) = 0.0
END IF
570 CONTINUE
IF (IFLAG.EQ.0) THEN  !NAO EXISTEM GARGANTAS DE SAIDA PARA ESTE PORO.
CAMINHO(I) = 0.0  !ABORTAR PASSEIO!
CONT = 1.0
I1 = I2
J1 = J2
IFLAG = 0
BLOCK = 0
GO TO 660
END IF
DO 580 M=1,5
IF (DIR.EQ.M) GO TO 580
IF (GARGESCOLHIDA.LT.PESO(I1,J1,CMDREDE,M)) THEN
GARGESCOLHIDA = PESO(I1,J1,CMDREDE,M)
DIR = M
ENDIF
580 CONTINUE
590 ISOMA = 0
DO 600 M=1,5
IF (M.EQ.DIR) GO TO 600
IF (GARGESCOLHIDA.EQ.PESO(I1,J1,CMDREDE,M)) THEN
ISOMA = ISOMA + 1
AUX2PESO(M) = PESO(I1,J1,CMDREDE,M)
ENDIF
600 CONTINUE
IF (ISOMA.EQ.0) GO TO 650
AUX2 = ALEAT()
AUX2PESO(DIR) = AUX2
DO 610 M=1,5
IF (DIR.NE.M.AND.AUX2PESO(M).NE.0.0) THEN
AUX3 = ALEAT()
AUX2PESO(M) = AUX3
ENDIF
610 CONTINUE
GARGESCOLHIDA = AUX2PESO(DIR)
DO 620 M=1,5
IF (AUX2PESO(M).NE.0.0) THEN
IF (GARGESCOLHIDA.LT.AUX2PESO(DIR)) THEN
GARGESCOLHIDA = AUX2PESO(M)
DIR = M
ENDIF
ENDIF
620 CONTINUE
```

```
DO 630 M=1,5
IF (AUX2PESO(M).NE.0.0) THEN
PESO(I1,J1,CMDREDE,M) = AUX2PESO(M)
ELSE
PESO(I1,J1,CMDREDE,M) = 0.0
ENDIF
630 CONTINUE
DO 640 M=1,5
AUX2PESO(M) = 0.0
640 CONTINUE
GO TO 590
650 CONTINUE
! -----
! CALCULO DA CONDUTANCIA DO ELEMENTO NAS DIRECOES DO ESCOAMENTO
! -----
IF (DIR.EQ.5) THEN          !SE A DIRECAO DE FLUXO FOR 5 SIGNIFICA
AUXPROB1 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1,CMDREDE))!DIZER QUE O PASSEADOR MUDOU DE CAMADA DE REDE.
AUXPROB2 = (4.0*COMPARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,5))/(3.1416/DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,5)**2.0)
AUXPERM3 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1,CMDREDE - 1))
ENDIF
IF (DIR.EQ.4) THEN
AUXPROB1 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1,CMDREDE))
AUXPROB2 = (4.0*COMPARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,4))/(3.1416/DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,4)**2.0)
AUXPROB3 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1 - 1,J1,CMDREDE))
CONT = CONT + 1.0
I1 = I1 - 1
BLOCK = 2
IFLAG = 0
ENDIF
IF (DIR.EQ.3) THEN
AUXPROB1 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1,CMDREDE))
AUXPROB2 = (4.0*COMPARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,3))/(3.1416/DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,3)**2.0)
AUXPROB3 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1 + 1,CMDREDE))
CONT = CONT + 1.0
J1 = J1 + 1
BLOCK = 1
IFLAG = 0
ENDIF
IF (DIR.EQ.2) THEN
AUXPROB1 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1,CMDREDE))
AUXPROB2 = (4.0*COMPARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,2))/(3.1416/DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,2)**2.0)
AUXPROB3 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1 + 1,J1,CMDREDE))
CONT = CONT + 1.0
I1 = I1 + 1
BLOCK = 4
IFLAG = 0
ENDIF
IF (DIR.EQ.1) THEN
AUXPROB1 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1,CMDREDE))
```

```

AUXPROB2 = (4.0*COMPARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,1))/(3.1416/DIAMGARGANTAS(I1,J1,CMDREDE,1)**2.0)
AUXPROB3 = 1.0/(2.0*TAMPOROS(I1,J1 - 1,CMDREDE))
CONT = CONT + 1.0
J1 = J1 - 1
BLOCK = 3
IFLAG = 0
ENDIF
PROBELEMENTO = (1.0/(AUXPROB1 + AUXPROB2 + AUXPROB3))
CAMINHO(I) = CAMINHO(I) + PROBELEMENTO
STEP(I) = CONT
IF (DIR.EQ.5) THEN
CONT = 1.0
NUMI1(I) = I1
NUMJ1(I) = J1
I1 = I2
J1 = J2
IFLAG = 0
BLOCK = 0
GO TO 660
ENDIF
GO TO 560
660 CONTINUE
!APOS TER OS CAMINHOS DEFINIDOS, ESCOLHER O DE MAIOR CONDUTANCIA, DIMINUIR
!UMA CAMADA NA CAMADA DE REDE E CALCULAR OS CAMINHOS PARA PROXIMAS CAMADAS.
!FAZER ATEH CAMADAREDE SER IGUAL A 1, OU SEJA, SER IGUAL AA PRIMEIRA CAMADA
!SE TODOS OS CAMINHOS FOREM DESCARTADOS A ROTA EH TAMBEM DESCARTADA.
IFLAG = 0
DO 680 I=1,NC
IF (CAMINHO(I).NE.0.0) IFLAG = 1
680 CONTINUE
IF (IFLAG.EQ.0) THEN      !PARAR O CALCULO DA ROTA E DESCARTAR A ROTA ATUAL
ROTA(L) = 0.0
GO TO 760
ENDIF
AUX2 = ALEAT()
PROB(1) = CAMINHO(1)*AUX2
I1 = NUMI1(1)
J1 = NUMJ1(1)
MARC = 1
PASSO = PROB(1)
DO 690 I=2,NC
AUX2 = ALEAT()
PROB(I) = CAMINHO(I)*AUX2
IF (PASSO.LT.PROB(I)) THEN
PASSO = PROB(I)
MARC = I
I1 = NUMI1(I)
J1 = NUMJ1(I)
ENDIF

```

```
690 CONTINUE
700 ISOMA = 0
  DO 710 I=1,NC
    IF (MARC.NE.I) THEN
      IF (PASSO.EQ.PROB(I)) THEN
        ISOMA = ISOMA + 1
        AUX2 = ALEAT()
        PROB(I) = CAMINHO(I)*AUX2
      ELSE
        PROB(I) = 0.0
      END IF
    END IF
710 CONTINUE
IF (ISOMA.EQ.0) GO TO 730
AUX2 = ALEAT()
PROB(MARC) = CAMINHO(MARC)*AUX2
PASSO = PROB(MARC)
DO 720 I=1,NC
  IF (MARC.NE.I) THEN
    IF (PASSO.LT.PROB(I)) THEN
      PASSO = PROB(I)
      MARC = I
      I1 = NUMI1(I)
      J1 = NUMJ1(I)
    ENDIF
  END IF
720 CONTINUE
GO TO 700
730 CMDREDE = CMDREDE - 1
STEPTOTAL = STEPTOTAL + STEP(MARC)
DO 750 J=1,NC
  CAMINHO(J) = 0.0
750 CONTINUE
IF (CMDREDE.EQ.1) THEN
  ROTA(L) = STEPTOTAL/N
  GO TO 760
ELSE
  GO TO 550
END IF
760 CONTINUE
! -----
! CALCULO DA TORTUOSIDADE UTILIZANDO A MEDIA PONDERADA PELO HISTOGRAMA OBTIDO DAS NRW
! SIMULAÇÕES
! -----
770 MARCTORT = 0
IF (NRW.EQ.1) GO TO 800
DO 780 L=1,NRW-1
  IF (ROTA(L).GT.ROTA(L+1)) THEN
    AUXROTA = ROTA(L)
```

```
ROTA(L) = ROTA(L+1)
ROTA(L+1) = AUXROTA
MARCTORT = 1
END IF
780 CONTINUE
IF (MARCTORT.EQ.1) GO TO 770
AUXROTA = ROTA(1)
KONT = 1
NEWCONT = 1
FREQ(NEWCONT) = KONT
ESTATTORT(NEWCONT) = AUXROTA
DO 790 I=2,NRW
IF (AUXROTA.NE.ROTA(I)) THEN
KONT = 1
AUXROTA = ROTA(I)
NEWCONT = NEWCONT + 1
FREQ(NEWCONT) = KONT
ESTATTORT(NEWCONT) = AUXROTA
ELSE
KONT = KONT + 1
FREQ(NEWCONT) = KONT
ESTATTORT(NEWCONT) = AUXROTA
END IF
790 CONTINUE
800 IF (NEWCONT.EQ.1) THEN
ESTATTORT(NEWCONT) = ROTA(NEWCONT)
TORTMEDIA = ESTATTORT(NEWCONT)
IF (ROTA(NEWCONT).EQ.0.0) THEN
! COMO COMENTARIO SOMENTE PARA CALCULO PARA CALCULO DAS PROPO MEDIAS DA REDE
! WRITE(*,*)
! WRITE(*,*)'TODAS AS ROTAS FORAM NULAS. AUMENTAR NUMERO DE PASSEADORES ALEATORIOS'
TORTMEDIA = 0.0
END IF
GO TO 820
END IF
IF (ESTATTORT(1).EQ.0.0) THEN
DO 810 I=1,NEWCONT-1
ESTATTORT(I) = ESTATTORT(I+1)
FREQ(I) = FREQ(I+1)
810 CONTINUE
NEWCONT = NEWCONT - 1
END IF
SOMAFREQ = 0.0
SOMAFREQTORT = 0.0
DO 815 I=1,NEWCONT
SOMAFREQ = SOMAFREQ + FREQ(I)
SOMAFREQTORT = SOMAFREQTORT + FREQ(I)*ESTATTORT(I)
815 CONTINUE
TORTMEDIA = SOMAFREQTORT/SOMAFREQ
```

```

820 TORTUOSIDADE = TORTMEDIA
IF (NTORT.LE.100) THEN
VALORTORT = TORTUOSIDADE + VALORTORT
END IF
IF (NTORT.NE.1) THEN
IF (NTORT.LT.100) THEN
NTORT = NTORT + 1
GO TO 435
ELSE
TORTUOSIDADE = VALORTORT/NTORT
! WRITE(*,*)TORTUOSIDADE
GO TO 2340
END IF
END IF
! WRITE(*,*)
! WRITE(*,*)TORTUOSIDADE CALCULADA COM SUCESSO'
!      WRITE(*,*)
! -----
! DETERMINACAO DO COMPRIMENTO DE CORRELACAO ONDE PARA VALORES ! ACIMA DO QUAL AS
! PROPRIEDADES INDEPENDEM DO TAMANHO LINEAR ! DA REDE, OU SEJA, AS PROPRIEDADES DA REDE
! SAO HOMOGENEAS
! -----
CALL CLUSTERPERCOL(N,DIAMGARGANTAS,INDAUX,LABEL,LL,MARCLABEL,KONTLABEL)
! DEPOIS DESMARCAR PARA CALCULO DAS PROPRIEDADES MEDIAS DA REDE !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
write(*,*)indaux-1
CLUSTERMAX = KONTLABEL(1)
LABELMAX = MARCLABEL(1)
DO 833 KLJ=2,INDAUX - 1
IF (CLUSTERMAX.LT.KONTLABEL(KLJ)) THEN
LABELMAX = MARCLABEL(KLJ)
CLUSTERMAX = KONTLABEL(KLJ)
END IF
833 CONTINUE
! -----
! CALCULO DO NUMERO DE NOS DA REDE PERTECENDO AO CLUSTER INFINITO
! EM CADA AREA ESPECIFICADA
! -----
DO 837 KLJ=2,N
KLX = 1
KLY = 1
KLZ = 1
ML = 0
DO 836 K=1,KLJ
KLZ = KLZ + (N*N)
DO 835 J=1,KLJ
KLY = KLX + 1
DO 834 I=1,KLJ
IF (I.EQ.1.AND.J.EQ.1.AND.K.EQ.1) THEN
IF (LABEL(I).EQ.LABELMAX) THEN

```

```

ML = ML + 1
KLX = KLX + N
GO TO 834
END IF
END IF
IF (LABEL(KLX).EQ.LABELMAX) THEN
ML = ML + 1
KLX = KLX + N
ELSE
KLX = KLX + N
END IF
834 CONTINUE
KLX = KLY
835 CONTINUE
KLX = KLZ
KLY = 0
836 CONTINUE
! -----
! CALCULO DE RHO PARA UMA AREA ESPECIFICADA
! -----
      RMASSA = ML
          VOL = KLJ - 1
      RHO(KLJ - 1) = RMASSA/(VOL*VOL*VOL)
837 CONTINUE
! -----
! GRAVA A MORFOLOGIA DA REDE NO ARQUIVO DSBMARKOV.TXT
! GRAVA A ESTATISTICA DA DISTRIBUICAO DE TAMANHO DAS
! GARGANTAS E DOS POROS DA REDE GERADA NO ARQUIVO
! EST_GARGANTAS_E_POROS.TXT
! GRAVA O TAMANHO DE PORO E O TAMANHO DA MAIOR GARGANTA
! LIGADA A ESTE PORO NO ARQUIVO TAMANHO_POROS.TXT
! GRAVA O HISTOGRAMA DA TORTUOSIDADE DA REDE PARA 50 REALIZACOES
! DIFERENTES NO ARQUIVO TORTUOSIDADE.TXT
! GRAVA A DISTRIBUIÇÃO DE CLUSTERS E SEUS TAMANHOS NA REDE NO
! ARQUIVO CLUSTER.TXT
! -----
if (nr.eq.1) then
WRITE(1500,870)
WRITE(1700,880)
WRITE(1900,890)
WRITE(2000,895)N
IJK = 0
DO 840 I=1,N
DO 840 J=1,N
DO 840 K=1,N
WRITE(1700,900)I,J,K,TAMPOROS(I,J,K)
WRITE(1700,910)
TAM = DIAMGARGANTAS(I,J,K,1)
DO 830 Z=1,6

```

```

WRITE(1700,920)Z,DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z),COMPGARGANTAS(I,J,K,Z)
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z).GT.TAM) THEN
TAM = DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z)
ENDIF
830 CONTINUE
WRITE(1700,930)
DIFTAM = TAMPOROS(I,J,K) - TAM
IF (TAMPOROS(I,J,K).LE.DIAMMAX.AND.DIFTAM.LE.5.0) THEN
IJK = IJK + 1
WRITE(1500,940)IJK,TAMPOROS(I,J,K),TAM
ENDIF
840 CONTINUE
WRITE(1700,950)N,ESP,CONECTCALC,PORCALC
WRITE(1800,970)
DO 850 I=DMING,DMAXP
WRITE(1800,980)I,ESTATGARG(I),PERCENTG(I),ESTATPOR(I),PERCENTP(I)
850 CONTINUE
DO 860 I=1,NEWCONT
WRITE(1900,990)I,FREQ(I),ESTATTORT(I)
860 CONTINUE
WRITE(1900,1000)TORTUOSIDADE
DO 865 I=1,INDAUX - 1
WRITE(2000,1100)I,MARCLABEL(I),KONTLABEL(I)
865 CONTINUE
WRITE(2000,1200)INDAUX - 1
WRITE(2000,1300)
DO 866 I=1,VOL
WRITE(2000,1400)I,RHO(I)
866 CONTINUE
870 FORMAT(5X,'***VERIFICACAO DA CADEIA DE MARKOV***',/,6X,'PORO',3X,'DIAMETRO DO PORO',&
3X,'DIAMETRO DA MAIOR GARGANTA',/)
880 FORMAT('***ESTRUTURA DE POROS E GARGANTAS***',/)
890 FORMAT(5X,'***HISTOGRAMA DA TORTUOSIDADE***',/, &
3X,'ROTA',5X,'FREQUENCIA',5X,'TORTUOSIDADE',/, &
13X,'DA ROTA',9X,'DA ROTA',/)
895 FORMAT(5X,'***DISTRIBUICAO DE CLUSTERS DA REDE***',/,10X,'TAMANHO DA REDE: ',I3,/,5X, &
'Nº CLUSTER',3X,'LABEL DO CLUSTER',4X,'TAMANHO DO CLUSTER',/)
900 FORMAT('PORO(',I2,',',I2,',',I2,')',2X,'- DIAMETRO DO PORO =',2X,F7.3,/)
910 FORMAT(13X,'DIAMETRO DA',3X,'COMPRIMENTO.'/14X,'GARGANTA',5X,'DA GARGANTA')
920 FORMAT('GARGANTA(',I1,')=>',2X,F7.3,9X,F7.3)
930 FORMAT(/)
940 FORMAT(18,10X,F6.4,20X,F6.4)
950 FORMAT(1X,'TAMANHO DA REDE =',1X,I3,/,1X,'ESPACAMENTO =',1X,F7.2,5X,&
'CONECTIVIDADE =',1X,F5.2,5X,'POROSIDADE =',1X,F7.2)
960 FORMAT(1X,'NAO CONVERGIU APOS',I3,'ITERACOES.ERRO!!!')
970 FORMAT('***ESTATISTICA DA DISTRIBUICAO DE TAMANHO***',/,&
'***DAS GARGANTAS E DE POROS DA REDE GERADA***',/,&
'DIAMETRO',5X,'GARGANTAS',7X,'GARGANTAS %',7X,'POROS',8X,'POROS %',/)
980 FORMAT(1X,I3,10X,F5.2,10X,F7.2,10X,F5.2,7X,F7.2)

```

```

990 FORMAT(2X,I4,7X,I5,10X,F7.3,/)
1000 FORMAT('TORTUOSIDADE MEDIA DA REDE = ',F5.2)
1100 FORMAT(1X,I10,5X,I10,10X,I10)
1200 FORMAT(/,1X,'NUMERO DE CLUSTERS NA REDE =',2X,I10)
1300 FORMAT(/,1X,'*** CALCULO DO COMPRIMENTO DE CORRELACAO ***',/,1X,'TAMANHO DA REDE',5X, &
'DENSIDADE DA REDE',/)
1400 FORMAT(5X,I4,15X,F6.4,/)
CLOSE(1500)
CLOSE(1600)
CLOSE(1700)
CLOSE(1800)
CLOSE(2000)
endif
! -----
! ALGORITMO PARA CALCULO DA EVAPORACAO DE UM LIQUIDO EM AR EMPREGANDO O MODELO DE REDE
! GERADO.
! INICIO DO PROCESSO DE EVAPORACAO NA REDE.
! INICIALMENTE TODA A REDE ESTAH PREENCHIDA COM LIQUIDO E UMA CORRENTE DE AR PASSA PELA
! FRONTEIRA ABERTA (TOPO) DA REDE.
! -----
! IDENTIFICACAO DE CADA CLUSTER TEMPORAHRIO (TC) DENTRO DA REDE GERADA DE TAMANHO N.
! 1 - SIGNIFICA PORO PREENCHIDO COM LIQUIDO
! 0 - SIGNIFICA PORO PREENCHIDO COM GAS
! -----
! INICIALMENTE TODA REDE ESTAH PREENCHIDA COM LIQUIDO.
! -----
DO 2050 K=1,N
DO 2050 I=1,N
DO 2050 J=1,N
PPARCIAL(I,J,K) = 0.0
MARCADORPOROS(I,J,K) = -1
LINHA(I,J,K) = 0
PVAPOR(I,J,K) = 0.0
2050 CONTINUE
! -----
! CALCULO DO COEFICIENTE DE DIFUSAO DO SISTEMA LIQUIDO + AR.
! -----
! PESO MOLECULAR DO AR = 29.0
PMLAR = 2./((1./PML) + (1./29.0))
! COMPRIMENTO CARACTERISTICO DO N-HEXANO SIGMAC6 = 5.949 [ANGSTRONS]
! COMPRIMENTO CARACTERISTICO DO HEXADECANO SIGMAC16 = 8.41 [ANGSTRONS]
! COMPRIMENTO CARACTERISTICO DO AR = 3.711 [ANGSTRONS]
SIGMALAR = (SIGMAL + 3.711)/2.
CALL OMEGAGERAL(T,Ek,OMEGAL)
SELECT CASE(DIFFUSION)
CASE(1)
AUX1 = 0.00266*(T**(1.5))
AUX2 = PMLAR**(0.5)
AUX3 = SIGMALAR**2.0

```

```

CASE(2)
AUX1 = (3.03 - (0.98/(PML**0.5)))*1.D-03*(T**(1.5))
AUX2 = PMLAR**0.5
AUX3 = SIGMALAR**2.0
END SELECT
DIFUSAO = AUX1/(P*AUX2*AUX3*OMEGAL)  ![CM2/SEG]
SELECT CASE(DIFFUSION)
CASE(1)
CALL PRESSAOVAPOR(T,PC,TC,PVAP)
CASE(2)
CALL PRESSAOVAPORII(T,P,PVAP)
END SELECT
! -----
! CALCULO DA DISTRIBUICAO DE CLUSTERS DENTRO DA REDE GERADA AA
! MEDIDA EM QUE O MEIO POROSO VAI EVAPORANDO.
! -----
TEMPOTOTAL = 0.0
IEVAP = 1
JFIM = 0
TAG = 1
NPOROSVAZIOS = 0
! NAO SE DEVE ESQUECER QUE AO MUDAR O TIPO DE FLUIDO, A TEMPERATURA OU PRESSAO DO SISTEMA
! DEVE-SE AJUSTAR A PRESSAO PARCIAL DO LIQUIDO DO SISTEMA NO GAS AMBIENTE - PVINF.
PVINF = 0.0 !verificar ao assumir o valor de 0.1614937 ou 0.16149 ou 0.0
2055 CALL CLUSTERS(N,DIAMGARGANTAS,MARCADORPOROS,INDAUX,LABEL,LL,MARCLABEL,KONTLABEL)
NUMCLUSTERS = INDAUX - 1
! -----
! IMPRESSAO DOS RESULTADOS PARA COMPARACAO. DELETAR DEPOIS!!!
WRITE(*,2056)N
2056 FORMAT(//,5X,'***DISTRIBUICAO DE CLUSTERS DA REDE***',//,10X,'TAMANHO DA REDE: ',I3,//,5X, &
'N CLUSTER',3X,'LABEL DO CLUSTER',4X,'TAMANHO DO CLUSTER',//)
DO 2058 I=1,NUMCLUSTERS
WRITE(*,2057)I,MARCLABEL(I),KONTLABEL(I)
2057  FORMAT(1X,I10,5X,I10,10X,I10)
2058 CONTINUE
WRITE(*,2059)NUMCLUSTERS
2059 FORMAT(//,1X,'NUMERO DE CLUSTERS NA REDE =',2X,I4)
WRITE(2500,2060)NPOROSVAZIOS,NUMCLUSTERS
2060 FORMAT(1X,I4,5X,I4)
IF (JFIM.EQ.1) GO TO 2300
! IMPRESSAO DOS RESULTADOS PARA COMPARACAO. DELETAR DEPOIS!!!
! -----
! INICIALIZACAO DOS VETORES DE CADA NOH DA REDE PARA CALCULO DA EVAPORACAO
! -----
DO 2061 I=1,N*N*N
GARGCLUSTER(I) = 0.0
COMPCLUSTER(I) = 0.0
VOLEVAP(I) = 0.0
RMASSAEVAP(I) = 0.0

```

```

TOTALNAZ(I) = 0.0
TEMPOEVAP(I) = 0.0
VETORI(I) = 0
VETORJ(I) = 0
VETORK(I) = 0
VETORB(I) = 0.0
VETORX(I) = 0.0
DO 2061 J=1,N*N*N
MATRIZA(I,J) = 0.0
2061 CONTINUE
! -----
! IDENTIFICACAO DAS FRONTEIRAS ABERTAS DE CADA CLUSTER
! EXISTENTE NA REDE GERADA PARA CALCULO DO FLUXO DE
! EVAPORACAO EM CADA UM DOS CLUSTERS.
! -----
NAZFLAG = 0
MARC = 0
DO 2080 K=1,N
DO 2080 I=1,N
DO 2080 J=1,N
MARC = MARC + 1
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.-1) THEN
DO 2070 JC=1,NUMCLUSTERS
IF (LABEL(MARC).EQ.MARCLABEL(JC)) THEN
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J-1,K).EQ.0) THEN
! -----
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO
! CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,1)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,1)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 1
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,1).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,1)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,1)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K

```

```

VG(MARCLABEL(JC)) = 1
END IF
END IF
END IF
! -----
! CALCULAR A EVAPORACAO NESTA GARGANTA DO CLUSTER JC
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX2 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,1)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J-1,K))/(P - PVAP)
WRITE(*,*)AUX4,1,K
ELSE
L = 1
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J-1,K))/(P - PVAPOR(I,J,K))
WRITE(*,*)AUX4,1,K
END IF
NAZ = 3.1D9*AUX1*AUX2*AUX3*LOG(AUX4) ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,2).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I+1,J,K).EQ.0) THEN
! -----
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO
! CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,2).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,2)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 2
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,2).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,2).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,2)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 2

```

```

END IF
END IF
END IF
! -----
! CALCULAR A EVAPORACAO NESTA GARGANTA DO CLUSTER JC
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T)  !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX2 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = (P - PPARCIAL(I+1,J,K))/(P - PVAP)
WRITE(*,*)AUX4,2,K
ELSE
L = 2
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = (P - PPARCIAL(I+1,J,K))/(P - PVAPOR(I,J,K))
WRITE(*,*)AUX4,2,K
END IF
NAZ = 3.1D9*AUX1*AUX2*AUX3*LOG(AUX4)  ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,3).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J+1,K).EQ.0) THEN
! -----
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO
! CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,3).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,3)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 3
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,3).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,3).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,3)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 3
END IF
END IF

```

```

END IF
END IF
! -----
! CALCULAR A EVAPORACAO NESTA GARGANTA DO CLUSTER JC
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T)      !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX2 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J+1,K))/(P - PVAP)
WRITE(*,*)AUX4,3,K
ELSE
L = 3
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J+1,K))/(P - PVAPOR(I,J,K))
WRITE(*,*)AUX4,3,K
END IF
NAZ = 3.1D9*AUX1*AUX2*AUX3*LOG(AUX4)  ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I-1,J,K).EQ.0) THEN
! -----
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO
! CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,4)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,4)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 4
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,4).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,4)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,4)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 4
END IF
END IF

```

```

END IF
! -----
! CALCULAR A EVAPORACAO NESTA GARGANTA DO CLUSTER JC
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T)      !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX2 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,4)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = (P - PPARCIAL(I-1,J,K))/(P - PVAP)
WRITE(*,*)AUX4,4,K
ELSE
L = 4
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = (P - PPARCIAL(I-1,J,K))/(P - PVAPOR(I,J,K))
WRITE(*,*)AUX4,4,K
END IF
NAZ = 3.1D9*AUX1*AUX2*AUX3*LOG(AUX4) ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J,K-1).EQ.0) THEN
! -----
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO
! CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,5)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,5)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 5
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,5).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,5)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,5)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 5
END IF
END IF
END IF

```

```

! -----
! CALCULAR A EVAPORACAO NESTA GARGANTA DO CLUSTER JC
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T)  !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX2 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,5)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J,K-1))/(P - PVAP)
WRITE(*,*)AUX4,5,K
ELSE
L = 5
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J,K-1))/(P - PVAPOR(I,J,K))
WRITE(*,*)AUX4,5,K
END IF
NAZ = 3.1D9*AUX1*AUX2*AUX3*LOG(AUX4)  ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).NE.0.0) THEN
IF (K.EQ.N) THEN
! -----
! PORO ENCONTRA-SE NA FRONTEIRA ABERTA DA REDE
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,6)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 6
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,6).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,6)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 6
END IF
END IF
END IF
! -----

```

```

! CALCULO DO FLUXO DE MASSA QUE EVAPORA NA FRONTEIRA ABERTA DA REDE.
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T)  !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX2 = (10.*DIFUSAO)/ESP
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = PVAP - PVINF
WRITE(*,*)AUX4,6,K
ELSE
L = 6
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = PVAPOR(I,J,K) - PVINF
WRITE(*,*)AUX4,6,K
END IF
NAZ = 3.1D15*AUX1*AUX2*AUX3*AUX4  ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
ELSE
IF (MARCADORPOROS(I,J,K+1).EQ.0) THEN
! -----
! ESCOLHA DA GARGANTA QUE SERA INICIALMENTE INVADIDA.
! DETERMINACAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO DA REDE
! NESTE CASO, SISTEMA N-HEXANO + AR, A MENOR PRESSAO
! CAPILAR, O QUE SIGNIFICA O MAIOR DIAMETRO.
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).GT.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,6)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 6
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).EQ.GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC))) THEN
IF (COMPGARGANTAS(I,J,K,6).GE.COMPCLUSTER(JC)) THEN
GARGCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)
COMPCLUSTER(MARCLABEL(JC)) = COMPGARGANTAS(I,J,K,6)
CALL GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL,DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
VETORI(MARCLABEL(JC)) = I
VETORJ(MARCLABEL(JC)) = J
VETORK(MARCLABEL(JC)) = K
VG(MARCLABEL(JC)) = 6
END IF
END IF
END IF
! -----
! CALCULAR A EVAPORACAO NESTA GARGANTA DO CLUSTER JC
! -----
AUX1 = PML/(83.144*T)  !R = [BAR*CM3/MOL*K]

```

```

AUX2 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX3 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)**2)/4.0
IF (KELVIN.EQ.0) THEN
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J,K+1))/(P - PVAP)
WRITE(*,*)AUX4,6,K
ELSE
L = 6
CALL CORRPVAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
AUX4 = (P - PPARCIAL(I,J,K+1))/(P - PVAPOR(I,J,K))
WRITE(*,*)AUX4,6,K
END IF
NAZ = 3.1D9*AUX1*AUX2*AUX3*LOG(AUX4) ![PICOGRAMA/ANO]
TOTALNAZ(MARCLABEL(JC)) = NAZ + TOTALNAZ(MARCLABEL(JC))
END IF
END IF
END IF
END IF
2070 CONTINUE
END IF
2080 CONTINUE
! -----
! ESCOLHA DO CLUSTER A SER INVADIDO EM FUNCAO DO MENOR POTENCIAL DE INVASAO E DO MENOR
! TEMPO DE EVAPORACAO.
! -----
TEMPOMIN = 1.D+20
IFLAG = 0
DO 2090 JC=1,N*N*N
IF (TOTALNAZ(JC).GT.0.0) THEN
TEMPOEVAP(JC) = RMASSAEVAP(JC)/TOTALNAZ(JC)
IF (TEMPOEVAP(JC).GT.1.D+20) NAZFLAG = 1
! write(8000,*)NUMCLUSTERS,mporosvazios+1,jc,rmassaevap(jc),totalnaz(jc)
! write(*,*)NUMCLUSTERS,mporosvazios+1,jc,rmassaevap(jc),totalnaz(jc)
END IF
2090 CONTINUE
IF (NAZFLAG.EQ.1) THEN
DO 2089 JC=1,N*N*N
TEMPOEVAP(JC) = TEMPOEVAP(JC)/1.D+30
2089 CONTINUE
END IF
DO 2088 JC=1,N*N*N
IF (TOTALNAZ(JC).GT.0.0) THEN
IF (TEMPOEVAP(JC).LT.TEMPOMIN) THEN
TEMPOMIN = TEMPOEVAP(JC)
I1 = VETORI(JC)
I2 = VETORJ(JC)
J1 = VETORK(JC)
J2 = VG(JC)
MARC = JC
IFLAG = 1

```

```

END IF
END IF
2088 CONTINUE
!SE NAO EXISTIR CLUSTER EVAPORANDO (TOTALNAZ > 0) PARAR O PROGRAMA E INFORMAR O QUE ESTAH
! OCORRENDO
WRITE(8000,*)
IF (IFLAG.EQ.0) GO TO 2360
! DEPOIS MARCAR PARA CALCULO DAS PROPRIEDADES MEDIAS DAS REDES !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
WRITE(*,*)
WRITE(*,2091)I1,I2,J1,MARC
WRITE(*,*)
2091 FORMAT('O PORO EVAPORADO EH O PORO ('1X,I2,1X,I2,1X,I2,1X,')',2X,'PERTENCENTE AO CLUSTER',I6)
MARCADORPOROS(I1,I2,J1) = 0
POSITI(IEVAP) = I1
POSITJ(IEVAP) = I2
POSITK(IEVAP) = J1
POSITL(IEVAP) = J2
IEVAP = IEVAP + 1
NPOROSVAZIOS = 0
KONT = 0
DO 2092 I=1,N
DO 2092 J=1,N
DO 2092 K=1,N
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.0) THEN
NPOROSVAZIOS = NPOROSVAZIOS + 1
KONT = KONT + 1
LINHA(I,J,K) = KONT
END IF
2092 CONTINUE
! DEPOIS MARCAR COMO COMENTARIO !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
WRITE(*,*)
WRITE(*,2093)NPOROSVAZIOS
2093 FORMAT('NUMERO DE POROS VAZIOS = ',I5)
WRITE(*,*)
JFIM = J1
IF (JFIM.EQ.1) GO TO 2055
! -----
! CALCULO DO CAMPO DE PRESSAO PARCIAL DENTRO DA REDE GERADA NOS POROS INVADIDOS PELO GAS.
! -----
DO 2100 K=1,N
DO 2100 I=1,N
DO 2100 J=1,N
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.0) THEN
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J-1,K).EQ.-1) THEN
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,1)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3

```

```
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
VETORB(IPP) = AUX4*PVAP + VETORB(IPP)
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,1)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
KONT = LINHA(I,J-1,K)
MATRIZA(IPP,KONT) = - AUX4 + MATRIZA(IPP,KONT)
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,2).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I+1,J,K).EQ.-1) THEN
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
VETORB(IPP) = AUX4*PVAP + VETORB(IPP)
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
KONT = LINHA(I+1,J,K)
MATRIZA(IPP,KONT) = - AUX4 + MATRIZA(IPP,KONT)
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,3).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J+1,K).EQ.-1) THEN
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
VETORB(IPP) = AUX4*PVAP + VETORB(IPP)
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
```

```

MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
KONT = LINHA(I,J+1,K)
MATRIZA(IPP,KONT) = - AUX4 + MATRIZA(IPP,KONT)
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I-1,J,K).EQ.-1) THEN
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,4)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
VETORB(IPP) = AUX4*PVAP + VETORB(IPP)
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,4)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
KONT = LINHA(I-1,J,K)
MATRIZA(IPP,KONT) = - AUX4 + MATRIZA(IPP,KONT)
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J,K-1).EQ.-1) THEN
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,5)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
VETORB(IPP) = AUX4*PVAP + VETORB(IPP)
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,5)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
KONT = LINHA(I,J,K-1)
MATRIZA(IPP,KONT) = - AUX4 + MATRIZA(IPP,KONT)
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).NE.0.0) THEN
IF (K.NE.N) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J,K+1).EQ.-1) THEN
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)**2)/4.0

```

```

AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 2.0*DIFUSAO/TAMPOROS(I,J,K)
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
VETORB(IPP) = AUX4*PVAP + VETORB(IPP)
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
KONT = LINHA(I,J,K+1)
MATRIZA(IPP,KONT) = - AUX4 + MATRIZA(IPP,KONT)
END IF
ELSE
AUX1 = 3.1415916*(DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)**2)/4.0
AUX2 = PML/(83.144*T) !R = [BAR*CM3/MOL*K]
AUX3 = 10.*DIFUSAO/ESP
AUX4 = AUX1*AUX2*AUX3
IPP = LINHA(I,J,K)
MATRIZA(IPP,IPP) = AUX4 + MATRIZA(IPP,IPP)
END IF
END IF
END IF
2100 CONTINUE
CALL PIVOT(N,NPOROSVAZIOS,MATRIZA,VETORB,VETORX)
L = 1
DO 2200 K=1,N
DO 2200 I=1,N
DO 2200 J=1,N
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.0) THEN
PPARCIAL(I,J,K) = VETORX(L)
L = L + 1
END IF
2200 CONTINUE
GO TO 2055
2300 WRITE(2700,*)NPOROSVAZIOS,ESP*(N-1),ESP
WRITE(2600,2310)
2310 FORMAT(5X, '*****',/,5X, &
'*SEQUENCIA DE POROS EVAPORADOS NO MODELO DE REDE GERADO*',/)
DO 2330 L=1,IEVAP-1
WRITE(2600,2320)L,POSITI(L),POSITJ(L),POSITK(L)
2320 FORMAT(5X,'PORO',2X,I4,2X,'=',2X,'(',1X,I2,1X,I2,1X,I2,1X,')',/)
APOSIT1 = (POSITI(L) - 1)*ESP
APOSIT2 = (POSITJ(L) - 1)*ESP
APOSIT3 = (POSITK(L) - 1)*ESP
WRITE(2700,*)APOSIT1,APOSIT2,APOSIT3

```

```

WRITE(2700,*)DIAMGARGANTAS(POSITI(L),POSITJ(L),POSITK(L),POSITL(L)),COMPARGANTAS(POSITI(L),POSITJ(L),POSITK(L),POSITL(L)),POSITL(L))
WRITE(2700,*)TAMPOROS(POSITI(L),POSITJ(L),POSITK(L))
2330 CONTINUE
WRITE(2800,*)N*N*N - IEVAP,ESP*(N-1)
DO 2335 IK=1,N
DO 2335 II=1,N
DO 2335 IJ=1,N
IF (MARCADORPOROS(II,IJ,IK).NE.0) THEN
APOSIT1 = (II - 1)*ESP
APOSIT2 = (IJ - 1)*ESP
APOSIT3 = (IK - 1)*ESP
WRITE(2800,*)APOSIT1,APOSIT2,APOSIT3
WRITE(2800,*)TAMPOROS(II,IJ,IK)
WRITE(2800,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,1),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,1)
WRITE(2800,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,2),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,2)
WRITE(2800,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,3),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,3)
WRITE(2800,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,4),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,4)
WRITE(2800,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,5),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,5)
WRITE(2800,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,6),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,6)
END IF
2335 CONTINUE
ITAG = 1
ITAGKONT = 1
!ESTA PARTE EXISTE SOMENTE PARA CONTAR O NUMERO DE POROS PERTENCENTES AO CLUSTER INFINITO
KONTLABELMAX = KONTLABEL(1)
LABELMAX = MARCLABEL(1)
DO 2336 IN=2,NUMCLUSTERS
IF (KONTLABEL(IN).GT.KONTLABELMAX) THEN
KONTLABELMAX = KONTLABEL(IN)
LABELMAX = MARCLABEL(IN)
END IF
2336 CONTINUE
DO 2337 KITAG=1,N
DO 2337 IITAG=1,N
DO 2337 JITAG=1,N
IF (LABEL(ITAGKONT).EQ.LABELMAX) THEN
ITAG = ITAG + 1
ITAGKONT = ITAGKONT + 1
ELSE
ITAGKONT = ITAGKONT + 1
END IF
2337 CONTINUE
IFAG = 1
WRITE(2900,*)ITAG-1,ESP*(N-1)
DO 2338 IK=1,N
DO 2338 II=1,N
DO 2338 IJ=1,N
IF (LABEL(IFAG).EQ.LABELMAX) THEN

```

```

APOSIT1 = (II - 1)*ESP
APOSIT2 = (IJ - 1)*ESP
APOSIT3 = (IK - 1)*ESP
WRITE(2900,*)APOSIT1,APOSIT2,APOSIT3
WRITE(2900,*)TAMPOROS(II,IJ,IK)
WRITE(2900,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,1),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,1)
WRITE(2900,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,2),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,2)
WRITE(2900,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,3),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,3)
WRITE(2900,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,4),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,4)
WRITE(2900,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,5),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,5)
WRITE(2900,*)DIAMGARGANTAS(II,IJ,IK,6),COMPARGANTAS(II,IJ,IK,6)
END IF
IFAG = IFAG + 1
2338 CONTINUE
CLOSE (2500)
CLOSE (2600)
CLOSE (2700)
CLOSE (2800)
CLOSE (2900)
CLOSE (3000)
NTORT = NTORT + 1
2340 IF (NTORT.LT.100) GO TO 9
WRITE(1900,2350)NTORT,TORTUOSIDADE
2350 FORMAT(//,'APOS',1X,14,1X,'REALIZACOES DA REDE A TORTUOSIDADE MEDIA EH DE:',1X,F5.3)
CLOSE(1900)
CLOSE(8000)
! DEPOIS DESMARCAR PARA CALCULO DE VARIAS REDES
write(*,*)conectcalc,tortuosidade,nporosvazios
enddo
GO TO 2370
2360 WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'MEIO POROSO NAO APRESENTA CLUSTERS EVAPORANDO.'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'PROGRAMA TERMINADO PELO USUARIO.'
2370 STOP
END PROGRAM INICIAL
! -----
! ALGORITMO PARA CALCULO DE UM NUMERO PSEUDO-RANDOMICO
! RETANGULARMENTE DISTRIBUIDO ENTRE 0 E 1.
! RETIRADO DO 183 APPL. STATIST.(1982), vol.31, No.2
! IX, IY, IZ DEVEM SER DEFINIDOS ENTRE OS VALORES 1 E
! 30000 ANTES DA PRIMEIRA ENTRADA.
! INTEIRO ARITMETICO ATE O MAXIMO DE 30323 EH REQUERIDO
! -----
REAL FUNCTION ALEAT()
COMMON IX,IY,IZ
IX = 171*MOD(IX,177) - 2*(IX/177)
IY = 172*MOD(IY,176) - 35*(IY/176)
IZ = 170*MOD(IZ,178) - 63*(IZ/178)

```

```

IF (IX.LT.0)IX = IX + 30269
IF (IY.LT.0)IY = IY + 30307
IF (IZ.LT.0)IZ = 30323
ALEAT = AMOD(FLOAT(IX)/30269.0 + FLOAT(IY)/30307.0 + FLOAT(IZ)/30323.0,1.0)
RETURN
END FUNCTION ALEAT
! -----
! SUBROTINA PARA CALCULO DO COMPRIMENTO DAS GARGANTAS
! -----
SUBROUTINE COMPGARG(N,ESP,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,COMPARGANTAS)
REAL ESP, DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL TAMPOROS(1:N,1:N,1:N)
REAL COMPARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
INTEGER I,J,K,N
! -----
! CALCULA O COMPRIMENTO DAS GARGANTAS NA DIRECAO X
! -----
DO 10 J=1,N
DO 10 K=1,N
DO 10 I=1,N-1
COMPARGANTAS(I,J,K,2) = ESP - (TAMPOROS(I+1,J,K) + TAMPOROS(I,J,K))/2.0
COMPARGANTAS(I+1,J,K,4) = COMPARGANTAS(I,J,K,2)
10 CONTINUE
! -----
! CALCULA O COMPRIMENTO DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y
! -----
DO 20 I=1,N
DO 20 K=1,N
DO 20 J=1,N-1
COMPARGANTAS(I,J,K,3) = ESP - (TAMPOROS(I,J+1,K) + TAMPOROS(I,J,K))/2.0
COMPARGANTAS(I,J+1,K,1) = COMPARGANTAS(I,J,K,3)
20 CONTINUE
! -----
! CALCULA O COMPRIMENTO DAS GARGANTAS DA CAMADA
! SUPERIOR (K=N) E QUE ESTAO PARA FORA DA CELULA
! UNITARIA (Z=6). O COMPRIMENTO EH CALCULADO
! COM BASE NOS TAMANHOS DE POROS EM K=N E K=1.
! -----
DO 30 I=1,N
DO 30 J=1,N
DO 30 K=1,N-1
COMPARGANTAS(I,J,N,6) = ESP - (TAMPOROS(I,J,N) + TAMPOROS(I,J,1))/2.0
! -----
! CALCULA O COMPRIMENTO DAS GARGANTAS NA DIRECAO Z
! -----
COMPARGANTAS(I,J,K,6) = ESP - (TAMPOROS(I,J,K+1) + TAMPOROS(I,J,K))/2.0
COMPARGANTAS(I,J,K+1,5) = COMPARGANTAS(I,J,K,6)
30 CONTINUE
RETURN

```

```

END SUBROUTINE COMPGARG
! -----
! FUNCAO PARA CALCULO DA POROSIDADE - F(ESPAC)
! -----
REAL FUNCTION FUNCAO()
COMMON /POROS/ N,POREXP,VOLUMEVAZIO,ESPAC
FUNCAO = ((100.0*VOLUMEVAZIO)/(N*(N-1)*(N-1)*ESPAC*ESPAC*ESPAC)) - POREXP
RETURN
END FUNCTION FUNCAO
! -----
! DETERMINACAO DO VOLUME DE POROS DA REDE GERADA.
! -----
SUBROUTINE VOLUMEPOROS(N,DIAMGARGANTAS,TAMPOROS,VOLPOROS)
REAL DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL TAMPOROS(1:N,1:N,1:N)
REAL VOLPOROS(1:N,1:N,1:N)
INTEGER I,J,K,N
DO 10 I=1,N
DO 10 J=1,N
DO 10 K=1,N
DO 10 Z=1,6
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,Z).EQ.0.0) GO TO 10
VOLPOROS(I,J,K) = TAMPOROS(I,J,K)**3
10 CONTINUE
RETURN
END SUBROUTINE VOLUMEPOROS
! -----
! DETERMINACAO DO VOLUME DE GARGANTAS DA REDE GERADA.
! -----
SUBROUTINE VOLUMEGARGANTAS(N,DIAMGARGANTAS,COMPGARGANTAS,VOLGARGANTAS)
REAL DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL COMPGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL VOLGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
INTEGER I,J,K,N
! -----
! CALCULO DA VOLUME DAS GARGANTAS NA DIRECAO X
! -----
DO 10 J=1,N
DO 10 K=1,N
DO 10 I=1,N-1
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,2).NE.0.0) THEN
VOLGARGANTAS(I,J,K,2) = ((3.14159*DIAMGARGANTAS(I,J,K,2)**2.0)/4.0)*COMPGARGANTAS(I,J,K,2)
VOLGARGANTAS(I+1,J,K,4) = VOLGARGANTAS(I,J,K,2)
ELSE
VOLGARGANTAS(I,J,K,2) = 0.0
VOLGARGANTAS(I+1,J,K,4) = VOLGARGANTAS(I,J,K,2)
ENDIF
10 CONTINUE
! -----

```

```

! CALCULO DO VOLUME DAS GARGANTAS NA DIRECAO Y
! -----
DO 20 I=1,N
DO 20 K=1,N
DO 20 J=1,N-1
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,3).NE.0.0) THEN
VOLGARGANTAS(I,J,K,3) = ((3.14159*DIAMGARGANTAS(I,J,K,3)**2.0)/4.0)*COMPARGANTAS(I,J,K,3)
VOLGARGANTAS(I,J+1,K,1) = VOLGARGANTAS(I,J,K,3)
ELSE
VOLGARGANTAS(I,J,K,3) = 0.0
VOLGARGANTAS(I,J+1,K,1) = VOLGARGANTAS(I,J,K,3)
ENDIF
20 CONTINUE
! -----
! CALCULO DO VOLUME DAS GARGANTAS DA CAMADA SUPERIOR
! (Z=N) E QUE ESTÃO PARA FORA DA CÉLULA UNITÁRIA (Z=6).
! -----
DO 30 I=1,N
DO 30 J=1,N
DO 30 K=1,N-1
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,N,6).NE.0.0) THEN
VOLGARGANTAS(I,J,N,6) = ((3.14159*DIAMGARGANTAS(I,J,N,6)**2)/4.0)*COMPARGANTAS(I,J,N,6)
ELSE
VOLGARGANTAS(I,J,N,6) = 0.0
ENDIF
! -----
! CALCULO DO VOLUME DAS GARGANTAS NA DIREÇÃO Z
! -----
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,6).NE.0.0) THEN
VOLGARGANTAS(I,J,K,6) = ((3.14159*DIAMGARGANTAS(I,J,K,6)**2)/4.0)*COMPARGANTAS(I,J,K,6)
VOLGARGANTAS(I,J,K+1,5) = VOLGARGANTAS(I,J,K,6)
ELSE
VOLGARGANTAS(I,J,K,6) = 0.0
VOLGARGANTAS(I,J,K+1,5) = VOLGARGANTAS(I,J,K,6)
ENDIF
30 CONTINUE
RETURN
END SUBROUTINE VOLUMEGARGANTAS
! -----
! DETERMINACAO DO VOLUME DE VAZIO TOTAL DA REDE GERADA.
! O VOLUME DE VAZIO TOTAL EH IGUAL AA SOMA DOS VOLUMES DOS POROS E DAS GARGANTAS DA REDE.
! EH EQUIVALENTE AO VOLUME DE POROS UTILIZADO NO CALCULO DA POROSIDADE NA
! ENGENHARIA DE PETROLEO.
! -----
SUBROUTINE VOLVAZIOTOTAL(N,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,VOLUMEVAZIO)
REAL VOLPOROS(1:N,1:N,1:N)
REAL VOLGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL SOMAX,SOMAY,SOMAZ,SOMAGARG,SOMAPOROS,VOLUMEVAZIO
INTEGER I,J,K,N

```

```
! -----
! CALCULO DO VOLUME TOTAL DAS GARGANTAS
! -----
! CALCULO NA DIRECAO X
! -----
SOMAX = 0.0
DO 10 I=1,N-1
DO 10 J=1,N
DO 10 K=1,N
SOMAX = SOMAX + VOLGARGANTAS(I,J,K,2)
10 CONTINUE
! -----
! CALCULO NA DIRECAO Y
! -----
SOMAY = 0.0
DO 20 J=1,N-1
DO 20 I=1,N
DO 20 K=1,N
SOMAY = SOMAY + VOLGARGANTAS(I,J,K,3)
20 CONTINUE
! -----
! CALCULO NA DIRECAO Z
! -----
SOMAZ = 0.0
DO 30 K=1,N
DO 30 I=1,N
DO 30 J=1,N
SOMAZ = SOMAZ + VOLGARGANTAS(I,J,K,6)
30 CONTINUE
! -----
! TOTALIZACAO DAS GARGANTAS
! -----
SOMAGARG = SOMAX + SOMAY + SOMAZ
! -----
! CALCULO DA VOLUME TOTAL DOS POROS
! -----
SOMAPOROS = 0.0
DO 40 I=1,N
DO 40 J=1,N
DO 40 K=1,N
SOMAPOROS = SOMAPOROS + VOLPOROS(I,J,K)
40 CONTINUE
! -----
! VOLUME TOTAL DE POROS E GARGANTAS
! -----
VOLUMEVAZIO = SOMAPOROS + SOMAGARG
RETURN
END SUBROUTINE VOLVAZIOTOTAL
! -----
```

```

! DETERMINACAO DA DISTRIBUICAO DE CLUSTERS DENTRO DA
! REDE PARA CALCULO DO COMPRIMENTO DE CORRELACAO.
! -----
SUBROUTINE CLUSTERPERCOL(N,DIAMGARGANTAS,INDAUX,LABEL,LL,MARCLABEL,KONTLABEL)
REAL DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
INTEGER LABEL(1:N*N*N)
INTEGER LL(1:N*N*N)
INTEGER MARCLABEL(1:N*N*N)
INTEGER KONTLABEL(1:N*N*N)
INTEGER N,INDEX,KL,INDAUX
DO 10 I=1,N*N*N
LABEL(I) = 0
LL(I) = 0
10 CONTINUE
INDEX = 1
KL = 0
DO 20 K=1,N
DO 20 I=1,N
DO 20 J=1,N
KL = KL + 1
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).EQ.0.0.AND.DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).EQ.0.0.AND. &
DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).EQ.0.0) THEN
LABEL(KL) = INDEX
LL(INDEX) = INDEX
INDEX = INDEX + 1
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) LABEL(KL) = LABEL(KL - 1)
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).NE.0.0) THEN
IF (LABEL(KL).EQ.0) THEN
LABEL(KL) = LABEL(KL - N)
ELSE
IF (LABEL(KL).EQ.LABEL(KL - N)) GO TO 11
IF (LABEL(KL).GT.LABEL(KL - N)) THEN
INDAUX = LABEL(KL)
LL(INDAUX) = LABEL(KL - N)
LABEL(KL) = LABEL(KL - N)
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
LABEL(KL - 1) = LABEL(KL)
END IF
ELSE
INDAUX = LABEL(KL - N)
LL(INDAUX) = LABEL(KL)
IF (LABEL(KL).LT.LABEL(KL - N)) THEN
LABEL(KL - N) = LABEL(KL)
END IF
END IF
END IF
END IF
11 IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).NE.0.0) THEN

```

```
IF (LABEL(KL).EQ.0) THEN
LABEL(KL) = LABEL(KL - N*N)
ELSE
IF (LABEL(KL).EQ.LABEL(KL - N*N)) GO TO 20
IF (LABEL(KL).GT.LABEL(KL - N*N)) THEN
INDAUX = LABEL(KL)
LL(INDAUX) = LABEL(KL - N*N)
LABEL(KL) = LABEL(KL - N*N)
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
LABEL(KL - 1) = LABEL(KL)
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).NE.0.0) THEN
LABEL(KL - N) = LABEL(KL)
END IF
ELSE
INDAUX = LABEL(KL - N*N)
LL(INDAUX) = LABEL(KL)
IF (LABEL(KL).LT.LABEL(KL - N*N)) THEN
LABEL(KL - N*N) = LABEL(KL)
END IF
END IF
END IF
END IF
END IF
20 CONTINUE
DO 15 KL=1,INDEX - 1
IF (LL(KL).NE.KL) THEN
16          INDAUX = LL(KL)
IF (LL(INDAUX).EQ.INDAUX) GO TO 15
LL(KL) = LL(INDAUX)
GO TO 16
END IF
15 CONTINUE
DO 30 KL=1,N*N*N
MARCLABEL(KL) = 0
KONTLABEL(KL) = 0
IF (LL(LABEL(KL)).EQ.LABEL(KL)) GO TO 30
INDAUX = LL(LABEL(KL))
25  IF (LL(INDAUX).EQ.INDAUX) THEN
LABEL(KL) = INDAUX
LL(LABEL(KL)) = LL(INDAUX)
GO TO 30
ELSE
INDAUX = LL(INDAUX)
LL(LABEL(KL)) = INDAUX
GO TO 25
END IF
30 CONTINUE
INDAUX = 1
```

```

DO 35 KL=1,INDEX - 1
IF (LL(KL).EQ.KL) THEN
MARCLABEL(INDAUX) = LL(KL)
INDAUX = INDAUX + 1
END IF
35 CONTINUE
DO 45 KL=1,N*N*N
DO 40 KLJ=1,INDAUX - 1
IF (LABEL(KL).EQ.MARCLABEL(KLJ)) THEN
KONTLABEL(KLJ) = KONTLABEL(KLJ) + 1
GO TO 45
END IF
40 CONTINUE
45 CONTINUE
RETURN
END SUBROUTINE CLUSTERPERCOL
! -----
! DISTRIBUICAO DE CLUSTERS AA MEDIDA EM QUE O N-HEXANO EVAPORA NA REDE GERADA.
! -----
SUBROUTINE CLUSTERS(N,DIAMGARGANTAS,MARCADORPOROS,INDAUX,LABEL,LL,MARCLABEL,KONTLABEL)
REAL DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
INTEGER MARCADORPOROS(1:N,1:N,1:N)
INTEGER LABEL(1:N*N*N)
INTEGER LL(1:N*N*N)
INTEGER MARCLABEL(1:N*N*N)
INTEGER KONTLABEL(1:N*N*N)
INTEGER N,INDEX,KL,INDAUX
DO 10 I=1,N*N*N
LABEL(I) = 0
LL(I) = 0
10 CONTINUE
INDEX = 1
KL = 0
MARC = 0
DO 20 K=1,N
DO 20 I=1,N
DO 20 J=1,N
KL = KL + 1
IF (MARCADORPOROS(I,J,K).EQ.-1) THEN
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).EQ.0.0.AND. &
DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).EQ.0.0.AND.DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).EQ.0.0) THEN
LABEL(KL) = INDEX
LL(INDEX) = INDEX
INDEX = INDEX + 1
ELSE
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J-1,K).EQ.-1) THEN
LABEL(KL) = LABEL(KL - 1)
ELSE

```

```
LABEL(KL) = INDEX
LL(INDEX) = INDEX
INDEX = INDEX + 1
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I-1,J,K).EQ.-1) THEN
IF (LABEL(KL).EQ.0) THEN
LABEL(KL) = LABEL(KL - N)
ELSE
IF (LABEL(KL).EQ.LABEL(KL - N)) GO TO 11
IF (LABEL(KL).GT.LABEL(KL - N)) THEN
INDAUX = LABEL(KL)
LL(INDAUX) = LABEL(KL - N)
LABEL(KL) = LABEL(KL - N)
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J-1,K).EQ.-1) THEN
LABEL(KL - 1) = LABEL(KL)
END IF
END IF
ELSE
INDAUX = LABEL(KL - N)
LL(INDAUX) = LABEL(KL)
IF (LABEL(KL).LT.LABEL(KL - N)) THEN
LABEL(KL - N) = LABEL(KL)
END IF
END IF
END IF
ELSE
IF (LABEL(KL).EQ.0) THEN
LABEL(KL) = INDEX
LL(INDEX) = INDEX
INDEX = INDEX + 1
END IF
END IF
END IF
11      IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,5).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J,K-1).EQ.-1) THEN
IF (LABEL(KL).EQ.0) THEN
LABEL(KL) = LABEL(KL - N*N)
ELSE
IF (LABEL(KL).EQ.LABEL(KL - N*N)) GO TO 20
IF (LABEL(KL).GT.LABEL(KL - N*N)) THEN
INDAUX = LABEL(KL)
LL(INDAUX) = LABEL(KL - N*N)
LABEL(KL) = LABEL(KL - N*N)
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,1).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I,J-1,K).EQ.-1) THEN
LABEL(KL - 1) = LABEL(KL)
```

```
END IF
END IF
IF (DIAMGARGANTAS(I,J,K,4).NE.0.0) THEN
IF (MARCADORPOROS(I-1,J,K).EQ.-1) THEN
LABEL(KL - N) = LABEL(KL)
END IF
END IF
ELSE
INDAUX = LABEL(KL - N*N)
LL(INDAUX) = LABEL(KL)
IF (LABEL(KL).LT.LABEL(KL - N*N)) THEN
LABEL(KL - N*N) = LABEL(KL)
END IF
END IF
END IF
ELSE
IF (LABEL(KL).EQ.0) THEN
LABEL(KL) = INDEX
LL(INDEX) = INDEX
INDEX = INDEX + 1
END IF
END IF
END IF
END IF
END IF
20 CONTINUE
DO 15 KL=1,INDEX - 1
IF (LL(KL).NE.KL) THEN
16          INDAUX = LL(KL)
IF (LL(INDAUX).EQ.INDAUX) GO TO 15
LL(KL) = LL(INDAUX)
GO TO 16
END IF
15 CONTINUE
DO 30 KL=1,N*N*N
MARCLABEL(KL) = 0
KONTLABEL(KL) = 0
IF (LABEL(KL).EQ.0) GO TO 30
IF (LL(LABEL(KL)).EQ.LABEL(KL)) GO TO 30
INDAUX = LL(LABEL(KL))
25  IF (LL(INDAUX).EQ.INDAUX) THEN
LABEL(KL) = INDAUX
GO TO 30
ELSE
INDAUX = LL(INDAUX)
LL(LABEL(KL)) = INDAUX
GO TO 25
END IF
30 CONTINUE
```

```

INDAUX = 1
DO 35 KL=1,INDEX - 1
IF (LL(KL).EQ.KL) THEN
MARCLABEL(INDAUX) = LL(KL)
INDAUX = INDAUX + 1
END IF
35 CONTINUE
DO 45 KL=1,N*N*N
DO 40 KLJ=1,INDAUX - 1
IF (LABEL(KL).EQ.MARCLABEL(KLJ)) THEN
KONTLABEL(KLJ) = KONTLABEL(KLJ) + 1
GO TO 45
END IF
40 CONTINUE
45 CONTINUE
RETURN
END SUBROUTINE CLUSTERS

! -----
! DETERMINACAO DA INTEGRAL DE COLISAO PARA A DIFUSAO.
! -----
SUBROUTINE OMEGAGERAL(T,Ek,OMEGAL)
REAL T,Ek,EkLAR,TKE,AUX1,AUX2,AUX3,AUX4,OMEGAL
! ENERGIA DE LENNARD-JONES PARA O N-HEXANO EC6/k = 399,3 KELVIN
! ENERGIA DE LENNARD-JONES PARA O HEXADECANO EC16/k = 644,0 KELVIN
! ENERGIA DE LENNARD-JONES PARA O AR EAR/k = 78,6 KELVIN
EkLAR = (Ek*78.6)**0.5
TKE = T/EkLAR
AUX1 = 1.06036/(TKE**0.15610)
AUX2 = 0.193/(EXP(0.47635*TKE))
AUX3 = 1.03587/(EXP(1.52996*TKE))
AUX4 = 1.76474/(EXP(3.89411*TKE))
OMEGAL = AUX1 + AUX2 + AUX3 + AUX4
RETURN
END SUBROUTINE OMEGAGERAL

! -----
! DETERMINACAO DA PRESSAO DE VAPOR NO EQUILIBRO, OU SEJA, INTERFACE LIQUIDO/GAS &
! METODO I (N-HEXANO).
! -----
SUBROUTINE PRESSAOVAPOR(T,PC,TC,PVAP)
REAL T,PC,TC,AUX1,AUX2,AUX3,AUX4,AUX5,PVAP
AUX1 = 1. - (T/TC)
AUX2 = -7.46765*AUX1
AUX3 = 1.44211*(AUX1**1.5)
AUX4 = - 3.28222*(AUX1**3.)
AUX5 = - 2.50941*(AUX1**6)
PVAP = PC*EXP((TC/T)*(AUX2 + AUX3 + AUX4 + AUX5))
RETURN
END SUBROUTINE PRESSAOVAPOR

! -----

```

```

! DETERMINACAO DA PRESSAO DE VAPOR NO EQUILIBRO, OU SEJA,
! INTERFACE LIQUIDO/GAS - METODO II (N-HEXADECANO).
! -----
SUBROUTINE PRESSAOVAPORII(T,P,PVAP)
REAL T,P,A,B,PVP,PVAP
REAL PVAPII(1:300)
INTEGER NPVAP
TOL = 1.D-3
A = 89.060 - 12411.3/T - 10.58*LOG(T)
B = 15200./(T*T)
NPVAP = 300
PVAPII(1) = P
DO 10 I = 1, NPVAP
PVP = LOG(PVAPII(I)) - B*PVAPII(I) - A
DERPVP = (LOG(PVAPII(I))/PVAPII(I)) - B
PVAPII(I+1) = PVAPII(I) - PVP/DERPVP
DIF = ABS(PVP/DERPVP)
IF (DIF.LE.TOL) GO TO 20
10 CONTINUE
20 PVAP = PVAPII(I+1)
RETURN
END SUBROUTINE PRESSAOVAPORII
! -----
! CALCULO DA MASSA DE LIQUIDO CONTIDA NA GARGANTA
! ESCOLHIDA E NO PORO A ELA ASSOCIADA
! -----
SUBROUTINE GARGINVADIDA(N,I,J,K,JC,VOLPOROS,VOLGARGANTAS,MARCLABEL, &
DENS,VOLEVAP,RMASSAEVAP)
REAL VOLPOROS(1:N,1:N,1:N)
REAL VOLGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL VOLEVAP(1:N*N*N)
REAL RMASSAEVAP(1:N*N*N)
REAL DENS
INTEGER MARCLABEL(1:N*N*N)
INTEGER I,J,K,JC
VOLEVAP(MARCLABEL(JC)) = VOLGARGANTAS(I,J,K,6) + VOLPOROS(I,J,K)
VOLEVAP(MARCLABEL(JC)) = VOLEVAP(MARCLABEL(JC))*(1.E-18) !O volume que inicialmente eh dado em µm
RMASSAEVAP(MARCLABEL(JC)) = DENS*VOLEVAP(MARCLABEL(JC)) !cubicos eh transformado para metros cubicos.
RMASSAEVAP(MARCLABEL(JC)) = RMASSAEVAP(MARCLABEL(JC))*(1.E+9) !Transforma a massa contida na garganta e
RETURN !poro associado de Kg para µg.
END SUBROUTINE GARGINVADIDA
! -----
! CORRECAO DA PRESSAO DE VAPOR NA INTERFACE LIQUIDO GAS EM CADA INSTANTE DEVIDO
! AO ABAIXAMENTO DA PRESSAO DE VAPOR NA SATURACAO OU EFEITO KELVIN
! -----
SUBROUTINE CORRVPAP(N,I,J,K,L,PVAP,DIAMGARGANTAS,DENS,T,PVAPOR)
REAL DIAMGARGANTAS(1:N,1:N,1:N,1:6)
REAL PVAPOR(1:N,1:N,1:N)
REAL PVAP,DENS,T,AUXPI

```

```

INTEGER I,J,K
AUXP1 = 4.*20.44*86.178
AUXP2 = 83.144*T*DENS*DIAMGARGANTAS(I,J,K,L)
AUXP3 = 10.*(AUXP1/AUXP2)
PVAP = PVAP*EXP(-AUXP3)
PVAPOR(I,J,K) = PVAP
RETURN
END SUBROUTINE CORRVPAP
! -----
! CALCULO DAS PRESSOES PARCIAIS NOS POROS DE GAS DA REDE UTILIZANDO
! O METODO DA ELIMINACAO GAUSSIANA COM PIVOTEAMENTO
! -----
! NPOROSVAZIOS : ORDEM DA MATRIZ QUADRADA ORIGINAL
! A(*,*): COEFICIENTES DAS INCOGNITAS DO SISTEMA DE NPOROSVAZIOS
! DAS EQUACOES LINEARES QUE COMPOEM A MATRIZ QUADRADA CORRESPONDENTE
! C(*,*): ELEMENTOS DA MATRIZ AUXILIAR QUE PERMITEM TROCA DE LINHAS NA MATRIZ EM ESTUDO
! FM: FATOR DE MULTIPLICACAO PARA OBTENCAO DA MATRIZ TRIANGULAR
! B(*): ELEMENTOS DO VETOR COMPOSTO PELOS TERMOS INDEPENDENTES DO SISTEMA DE EQUACOES
! X(*): ELEMENTOS DO VETOR SOLUCAO DE NOSSO SISTEMA TRIANGULAR
! -----
SUBROUTINE PIVOT(N,NPOROSVAZIOS,MATRIZA,VETORB,VETORX)
REAL MATRIZA(1:N*N*N,1:N*N*N)
REAL VETORB(1:N*N*N)
REAL VETORX(1:N*N*N)
REAL BIG,AUXA,AUXB,FM,AMATRIZ,SOMA,RMULT
INTEGER N,NPOROSVAZIOS,NLINH,KONT,M,NA,NB,KD,KI,L
! -----
! METODO DE ELIMINACAO GAUSSIANA - ESTE METODO TRANSFORMA UMA
! MATRIZ QUALQUER NUMA MATRIZ TRIANGULAR SUPERIOR.
! -----
NLINH = 1
KONT = 1
40 BIG = ABS(MATRIZA(KONT,KONT))
DO 10 I=KONT+1,NPOROSVAZIOS
AMOD = ABS(MATRIZA(I,KONT))
IF (BIG.GE.AMOD) GO TO 10
NLINH=I
BIG=AMOD
10 CONTINUE
IF (NLINH.NE.KONT) THEN
DO 20 L=1,NPOROSVAZIOS
AUXA = MATRIZA(KONT,L)
MATRIZA(KONT,L) = MATRIZA(NLINH,L)
MATRIZA(NLINH,L) = AUXA
20 CONTINUE
AUXB = VETORB(KONT)
VETORB(KONT) = VETORB(NLINH)
VETORB(NLINH) = AUXB
END IF

```

```

DO 30 J1=KONT+1,NPOROSVAZIOS
FM = MATRIZA(J1,KONT)/MATRIZA(KONT,KONT)
MATRIZA(J1,KONT) = 0.
VETORB(J1) = VETORB(J1) - FM * VETORB(KONT)
DO 30 J2=KONT+1,NPOROSVAZIOS
MATRIZA(J1,J2) = MATRIZA(J1,J2) - FM * MATRIZA(KONT,J2)
30 CONTINUE
KONT=KONT + 1
NLINH=KONT
IF (KONT.LT.NPOROSVAZIOS) GO TO 40
M = NPOROSVAZIOS + 1
DO 50 NB=1,NPOROSVAZIOS
MATRIZA(NB,M) = VETORB(NB)
50 CONTINUE
WRITE(3000,3)
3 FORMAT(/10X,'MATRIZ TRIANGULAR SUPERIOR COM',10X,'TERMOS INDEPENDENTES')
DO 60 NA=1,NPOROSVAZIOS
WRITE(3000,5)(MATRIZA(NA,NB),NB=1,N+1)
5 FORMAT(/10X,20(E8.2,2X))
60 CONTINUE
KD=1
80 IF (KD.GT.NPOROSVAZIOS) GO TO 70
AMATRIZ = ABS(MATRIZA(KD,KD))
IF (AMATRIZ.LT.1.E-7)THEN
WRITE(3000,6)
6 FORMAT(/'O SISTEMA TRIANGULAR ACIMA ADMITE INFINITAS'/SOLUCOES OU NAO ADMITE SOLUCAO')
GO TO 120
ELSE
KD = KD + 1
GO TO 80
END IF
70 CONTINUE
!-----
! RESOLUCAO DO SISTEMA TRIANGULAR - ESTA PARTE DO PROGRAMA
! UTILIZA A MATRIZ TRIANGULAR SUPERIOR OBTIDA ACIMA, ACHANDO
! A SOLUCAO DO SISTEMA CORRESPONDENTE.
!-----
VETORX(NPOROSVAZIOS) = VETORB(NPOROSVAZIOS)/MATRIZA(NPOROSVAZIOS,NPOROSVAZIOS)
DO 90 KI=NPOROSVAZIOS-1,1,-1
SOMA = 0.
DO 100 J=KI+1,NPOROSVAZIOS
RMULT = MATRIZA(KI,J)*VETORX(J)
SOMA = RMULT + SOMA
100 CONTINUE
VETORX(KI) = (VETORB(KI) - SOMA)/MATRIZA(KI,KI)
90 CONTINUE
WRITE(3000,7)
7 FORMAT(/10X,'VALOR DAS INCOGNITAS DO SISTEMA')
DO 110 L=1,NPOROSVAZIOS

```

```
WRITE(3000,8)L,VETORX(L)
8  FORMAT(//10X,'X(',I6,')=' ,2X,E10.4)
110 CONTINUE
120 RETURN
END SUBROUTINE PIVOT
```

 ANEXO II

Programa para criar um arquivo em VRML para gerar o meio poroso analisado.

```

program cluster
real DL,a,b,espac
real,dimension(:),allocatable :: XM,YM,ZM,SMG,aresta,dgarg,cgarg
integer,dimension(:),allocatable :: direct
integer R,G,BL,n,i
open(10,file='output.txt',status='unknown')
open(20,file='input.txt',status='unknown')
open(21,file='parametros.txt',status='unknown')
read(20,*)n,DL,espac
allocate(XM(n),YM(n),ZM(n),SMG(n),aresta(n),dgarg(n),cgarg(n),direct(n))
do i=1,n
  read(20,*)XM(i),YM(i),ZM(i)
  XM(i) = XM(i)-DL/2
  YM(i) = YM(i)-DL/2
  ZM(i) = ZM(i)-DL/2
  read(20,*)dgarg(i),cgarg(i),direct(i)
  read(20,*)aresta(i)
enddo
read(21,*)R,G,BL
write(10,*)#VRML V2.0 utf8'
write(10,*)Group {'
write(10,*)  children ['
write(10,*)      Transform {'
write(10,2)      translation',-DL/2,-DL/2,-DL/2
write(10,*)      children ['
write(10,*)        Shape {'
write(10,*)          appearance Appearance {'
write(10,*)            material Material {'
!gerar figuras em preto e branco
!write(10,2)      diffuseColor',1.0,0.7,0.0
write(10,2)      diffuseColor',0.8,0.8,0.8
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      geometry Box {'
! no caso de nanoporos utilizar um diametro do Box igual ao diametro minimo ao inves de 100 micrometros.
write(10,2)      size',100.0,100.0,100.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }',''
write(10,*)      Transform {'
write(10,2)      translation',XM(1),YM(1),ZM(1)
write(10,*)      children ['
write(10,*)        Shape {'
write(10,*)          appearance Appearance {'
write(10,*)            material Material {'

```

```

write(10,2)          diffuseColor',dble(R),dble(G),dble(BL)
write(10,3)          transparency',0.0
write(10,*)          }'
write(10,*)          }'
write(10,*)          geometry Box {'
a = aresta(1)
write(10,2)          size',dble(a),dble(a),dble(a)
write(10,*)          }'
write(10,*)          }'
write(10,*)          ]'
write(10,*)          }';'
! translação da garganta 6
SMG(1) = ZM(1) + (a/2. + cgarg(1)/2.)
write(10,*)          Transform {'
write(10,4)          rotation',1.0,0.0,0.0,1.571
write(10,2)          translation',XM(1),YM(1),SMG(1)
write(10,*)          children ['
write(10,*)          Shape {'
write(10,*)          appearance Appearance {'
write(10,*)          material Material {'
!write(10,2)          diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)          diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)          }'
write(10,*)          }'
a = dgarg(1)/2.
b = cgarg(1)
write(10,*)          geometry Cylinder {'
write(10,3)          radius',dble(a)
write(10,3)          height',dble(b)
write(10,*)          }'
write(10,*)          }'
write(10,*)          ]'
write(10,*)          }';'
write(10,*)# proximos segmentos'
if (j.eq.144) then
write(10,*)# fragmentacao do cluster de liquido'
endif
do j= 2,n-1
if (j.eq.n/3) then
write(10,*)# etapa inicial'
endif
if (j.eq.2*n/3) then
write(10,*)#etapa do meio'
endif
write(10,*)          Transform {'
write(10,2)          translation',XM(j),YM(j),ZM(j)
write(10,*)          children ['
write(10,*)          Shape {'

```

```

write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
write(10,2)      diffuseColor',dble(R),dble(G),dble(BL)
write(10,3)      transparency',0.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      geometry Box {'
a = aresta(j)
write(10,2)      size',dble(a),dble(a),dble(a)
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }',,'
if (direct(j).eq.1) then
SMG(j) = YM(j) - (a/2. + cgarg(j)/2.)
write(10,*)      Transform {'
write(10,2)      translation',XM(j),SMG(j),ZM(j)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)     diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)     diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)     }'
write(10,*)     }'
a = dgarg(j)/2.
b = cgarg(j)
write(10,*)     geometry Cylinder {'
write(10,3)     radius',dble(a)
write(10,3)     height',dble(b)
write(10,*)     }'
write(10,*)     }'
write(10,*)     ]'
write(10,*)     }',,'
end if
if (direct(j).eq.3) then
SMG(j) = YM(j) + (a/2. + cgarg(j)/2.)
write(10,*)      Transform {'
write(10,2)      translation',XM(j),SMG(j),ZM(j)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)     diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)     diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)     }'
write(10,*)     }'
a = dgarg(j)/2.
b = cgarg(j)

```

```

write(10,*)      geometry Cylinder {'
write(10,3)      radius',dble(a)
write(10,3)      height',dble(b)
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }';'
end if
if (direct(j).eq.2) then
SMG(j) = XM(j) + (a/2. + cgarg(j)/2.)
!SMG(j) = XM(j) + espac/2
write(10,*)      Transform {'
write(10,4)      rotation',0.0,0.0,1.0,1.571
write(10,2)      translation',SMG(j),YM(j),ZM(j)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
a = dgarg(j)/2.
b = cgarg(j)
write(10,*)      geometry Cylinder {'
write(10,3)      radius',dble(a)
write(10,3)      height',dble(b)
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }';'
end if
if (direct(j).eq.4) then
SMG(j) = XM(j) - (a/2. + cgarg(j)/2.)
!SMG(j) = XM(j) - espac/2
write(10,*)      Transform {'
write(10,4)      rotation',0.0,0.0,1.0,1.571
write(10,2)      translation',SMG(j),YM(j),ZM(j)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
a = dgarg(j)/2.
b = cgarg(j)

```

```

write(10,*)      geometry Cylinder {'
write(10,3)      radius',dble(a)
write(10,3)      height',dble(b)
write(10,*)
    }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }';'
end if
if (direct(j).eq.5) then
SMG(j) = ZM(j) - (a/2. + cgarg(j)/2.)
!SMG(j) = ZM(j) - espac/2
write(10,*)      Transform {'
write(10,4)      rotation',1.0,0.0,0.0,1.571
write(10,2)      translation',XM(j),YM(j),SMG(j)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
a = dgarg(j)/2
b = cgarg(j)
write(10,*)      geometry Cylinder {'
write(10,3)      radius',dble(a)
write(10,3)      height',dble(b)
write(10,*)
    }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }';'
end if
if (direct(j).eq.6) then
SMG(j) = ZM(j) + (a/2. + cgarg(j)/2.)
write(10,*)      Transform {'
write(10,4)      rotation',1.0,0.0,0.0,1.571
write(10,2)      translation',XM(j),YM(j),SMG(j)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
a = dgarg(j)/2.
b = cgarg(j)

```

```

write(10,*)      geometry Cylinder {'
write(10,3)      radius',dble(a)
write(10,3)      height',dble(b)
write(10,*)
    }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }';'
end if
enddo
write(10,*)# ultimo segmento'
write(10,*)      Transform {'
write(10,2)      translation',XM(n),YM(n),ZM(n)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
write(10,2)      diffuseColor',dble(R),dble(G),dble(BL)
write(10,3)      transparency',0.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      geometry Box {'
a = aresta(n)
write(10,2)      size',dble(a),dble(a),dble(a)
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }';'
! translação da garganta 6
SMG(n) = ZM(n) + (a/2. + cgarg(n)/2.)
write(10,*)      Transform {'
write(10,4)      rotation',1.0,0.0,0.0,1.571
write(10,2)      translation',XM(n),YM(n),SMG(n)
write(10,*)      children ['
write(10,*)      Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
!write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,0.0
write(10,2)      diffuseColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
a = dgarg(n)/2.
b = cgarg(n)
write(10,*)      geometry Cylinder {'
write(10,3)      radius',dble(a)
write(10,3)      height',dble(b)
write(10,*)
    }'
write(10,*)      }'

```

```

write(10,*)      ]'
write(10,*)      }',,'
write(10,*)      Transform {'
write(10,*)      children Shape {'
write(10,*)      appearance Appearance {'
write(10,*)      material Material {'
write(10,2)      emissiveColor',1.0,1.0,1.0
write(10,*)      }'
write(10,*)      }'
write(10,*)      geometry IndexedLineSet {'
write(10,*)      coord Coordinate {'
write(10,*)      point ['
! coordenadas do topo
write(10,*)-DL/2.0,DL/2.0,DL/2.0,'
write(10,*)DL/2.0,DL/2.0,DL/2.0,'
write(10,*)DL/2.0,DL/2.0,-DL/2.0,'
write(10,*)-DL/2.0,DL/2.0,-DL/2.0,'
! coordenadas do fundo
write(10,*)-DL/2.0,-DL/2.0,DL/2.0,'
write(10,*)DL/2.0,-DL/2.0,DL/2.0,'
write(10,*)DL/2.0,-DL/2.0,-DL/2.0,'
write(10,*)-DL/2.0,-DL/2.0,-DL/2.0
write(10,*)      ]'
write(10,*)      }'
write(10,*)      coordIndex ['
! top
write(10,*)0,,1,,2,,3,,0,,-1,'
!fundo
write(10,*)4,,5,,6,,7,,4,,-1,'
! linhas dos lados
write(10,*) 0,,4,,-1,'
write(10,*) 1,,5,,-1,'
write(10,*) 2,,6,,-1,'
write(10,*)3,,7
write(10,*)      ]'
write(10,*) }'
write(10,*)}'
write(10,*)}'
write(10,*) ]'
write(10,*)}'
2 format(a,3(2x,f10.4))
3 format(a,2x,f10.4)
4 format(a,4(2x,f10.4))
close (20)
close (21)

```
