



MODELOS DE QUEBRA E COALESCÊNCIA DE GOTAS PARA O
ESCOAMENTO DE EMULSÕES

João Felipe Mitre de Araujo

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Rio de Janeiro
Novembro de 2010

MODELOS DE QUEBRA E COALESCÊNCIA DE GOTAS PARA O
ESCOAMENTO DE EMULSÕES

João Felipe Mitre de Araujo

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Márcio Nele de Souza, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof. Luca Roberto Augusto Moriconi, D.Sc.

Prof. Reinaldo Giudici, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

NOVEMBRO DE 2010

Araujo, João Felipe Mitre de

Modelos de quebra e coalescência de gotas para o escoamento de emulsões/João Felipe Mitre de Araujo. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2010.

XXXVI, 277 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2010.

Referências Bibliográficas: p. 221 – 237.

1. Balanço populacional. 2. Coalescência de gotas.
3. Quebra de gotas. 4. Modelagem e simulação. 5. Escoamento de emulsões. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

— *A Deus e a minha mãe* —

Agradecimentos

Agradeço a Deus, por ter me ensinado e guiado para chegar até esse momento.

Agradeço a minha família e amigos, que fizeram parte da minha formação como pessoa, sem o qual eu não chegaria a esse momento.

Agradeço ao meu orientador, Paulo Lage, primeiro por não ter desistido, segundo pela orientação fornecida no desenvolvimento dessa tese.

Agradeço a todos os meus colegas de laboratório (alunos e funcionários) pela ajuda moral e de fato na realização desse texto. Em especial ao Antônio, por ter ajudado na resolução dos problemas estruturais que surgiram ao longo da tese.

Agradeço a todo corpo profissional do Núcleo de Separadores Compactos da UNIFEI pela obtenção dos dados experimentais e permissão para uso dos mesmos na execução dessa tese.

Agradeço a PETROBRÁS, por ter autorizado a utilização dos dados experimentais que são usados nesse documento e pela autorização da divulgação das informações desenvolvidas nessa tese.

A banca de avaliação da tese, por terem utilizado de precioso tempo na avaliação desse longo documento.

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

MODELOS DE QUEBRA E COALESCÊNCIA DE GOTAS PARA O
ESCOAMENTO DE EMULSÕES

João Felipe Mitre de Araujo

Novembro/2010

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa: Engenharia Química

O escoamento multifásico líquido-líquido disperso está fortemente presente na indústria química, em especial no escoamento de emulsões da indústria do petróleo. A modelagem desse tipo de escoamento requer a aplicação da equação de conservação da distribuição de densidade numérica de partículas. Tal equação, demanda a utilização de modelos de quebra e coalescência adequados ao problema. Este trabalho utiliza os dados experimentais de distribuição de tamanho de gotas obtidos no NSC/UNIFEI para desenvolver um novo conjunto de modelos de quebra e coalescência que possam ser utilizados na modelagem da evolução da distribuição volumétrica de tamanho de gotas no escoamento de emulsões em regime turbulento. A avaliação dos modelos disponíveis na literatura e aplicáveis a esse tipo de escoamento e dos novos modelos desenvolvidos consistiu na determinação dos parâmetros de cada modelo utilizando o método da regressão da distância ortogonal. Os resultados permitem concluir que a modelagem desenvolvida é a que produz os melhores resultados dentre os avaliados. Os diâmetros característicos da população de gotas obtidos pelo modelo foram comparados favoravelmente com os valores experimentais.

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

BREAKAGE AND COALESCENCE MODELS FOR DROPS IN EMULSION
FLOWS

João Felipe Mitre de Araujo

November/2010

Advisor: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Department: Chemical Engineering

The dispersed liquid-liquid multiphase flow is very common in chemical industry, specially emulsions flows on the oil industry. The modeling of this type of flow requires the conservation of the particle distribution function number. This requires the use of breakage and coalescence models suited to this problem. This work used experimental data of droplet size distribution obtained in NSC/UNIFEI to develop a new set of models for breakage and coalescence which can be used to model the evolution of the volumetric distribution of droplet sizes. The models available in the literature and applicable to this flow and the new models were evaluated by determining their parameters using the orthogonal distance regression method. The results showed that the model developed in this work gave the best representation of the available experimental data. Comparisons were also performed between simulated and experimental data for the characteristic diameters of the particle population. Model predictions were good.

Sumário

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xxviii
Nomenclatura	xxix
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 escoamento multifásico	2
1.3 escoamento multifásico polidisperso	4
1.4 A agregação de partículas fluidas	4
1.5 A quebra de partículas fluidas	5
1.6 O contexto do estudo	5
1.7 O presente trabalho	7
1.8 Organização do documento	7
1.8.1 Convenção de notação	8
2 Modelagem do escoamento Multifásico	10
2.1 Introdução e equações básicas	10
2.2 Equações constitutivas	13
2.2.1 Modelagem das forças de interação entre fases	14
2.2.2 Modelagem da tensão	24
3 A Modelagem da Distribuição de Densidade Numérica das Partículas	29

3.1	Equação de balanço populacional	29
3.2	Metodologias numéricas para a solução da EBP	33
3.3	Acoplamento PB-CFD	40
4	A coalescência de partículas	42
4.1	Modelos de frequência de colisão	44
4.1.1	Modelos devido a interação com a hidrodinâmica do escoamento	46
4.1.2	Modelos devido à ação produzida por forças de campo	49
4.1.3	Modelos devido às interações partícula-partícula	50
4.1.4	Modelos devido à turbulência do meio contínuo	52
4.1.5	Considerações adicionais sobre os modelos de frequência de colisão	61
4.2	Modelos de eficiência de coalescência	62
4.2.1	Tempo de drenagem ou tempo de coalescência	67
4.2.2	Tempo de interação ou de contato	73
4.2.3	Considerações adicionais sobre os modelos de eficiência de coalescência	75
4.3	Comentários sobre os modelos de coalescência	81
5	A quebra de partículas fluidas	83
5.1	Modelagem da frequência de quebra	86
5.2	Modelos de quebra	98
5.3	Modelagem da distribuição de tamanhos das partículas filhas	121
5.3.1	Modelos estatísticos	123
5.3.2	Modelos híbridos	125
5.3.3	Modelos fenomenológicos baseados em colisão com vórtices	127
5.4	Considerações adicionais sobre mecanismos de quebra	134
5.5	Conclusões sobre os modelos de quebra	139
6	Metodologia Experimental	141
6.1	A seção de testes	141
6.2	O experimento e condições de operação	145

6.3	Metodologia de determinação dos valores experimentais	147
7	Modelagem Matemática	152
7.1	Método matemático	155
8	Resultados	159
8.1	Resultados experimentais	160
8.2	Modelagem básica da evolução da distribuição de densidade numérica de partículas	164
8.2.1	Modelagem recomendada da quebra e coalescência	165
8.2.2	Considerações adicionais sobre a estimação de parâmetros . . .	175
8.3	Análise e simulação da evolução da distribuição de densidade numérica de tamanho de gotas	176
8.4	Análise e simulação da evolução da distribuição da densidade volumétrica de tamanho de gotas	189
8.5	Predição dos diâmetros médios da distribuição de gotas	197
8.6	Outros modelos avaliados	203
8.6.1	Modelagem da frequência de colisão da coalescência	203
8.6.2	Modelagem da eficiência de coalescência	205
8.6.3	Modelagem da frequência de quebra	207
8.6.4	Modelagem da condição crítica de quebra	211
8.6.5	Modelagem da distribuição de tamanhos das partículas filhas .	212
9	Conclusão	218
	Referências Bibliográficas	221
A	Resultados das simulações da evolução da DTG	238

Lista de Figuras

2.1	Coeficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds (retirado de SCHLICHTING [40]).	16
2.2	Representação da força de sustentação e da força de arrasto (extraído de CLIFT <i>et al.</i> [37]). A ilustração apresenta uma partícula sólida em água.	18
2.3	Coeficiente de sustentação para uma esfera rígida e lisa em função do número de Reynolds. Linha sólida: solução analítica para escoamento invíscido; linhas pontilhadas: ajuste da curva para os resultados numéricos com $Sr = 0,02$ (●) e $Sr = 0,2$ (▲); linhas tracejadas: solução analítica para <i>creeping flow</i> com $Sr = 0,02$ e $Sr = 0,2$, com $Sr = \nabla U d/U_r$, com $U_r = U - U_d$ (retirado de LEGENDRE e MAGNAUDET [44]).	20
2.4	Coeficiente de massa virtual em função da fração volumétrica da fase dispersa, comparação entre os modelos de ISHII e MISHIMA [47], VAN WIJNGAARDEN [48] e PALADINO [30].	24
4.1	Etapas da agregação (extraído de KAMP <i>et al.</i> [71]). (a) situação física inicial (b) aproximação e contato realizado a uma velocidade $\bar{u}/2$ e (c) deformação e drenagem do filme após o contato	43

4.2	Modelos de eficiência de CHESTERS [5] para partículas com interface deformável e parcialmente móvel. Considerando o sistema líquido-líquido com $\mu_d = 0,001$ Pa.s, $\mu = 0,0115$ Pa.s, $\rho = 880$ Kg/m ³ , $\rho_d = 865$ Kg/m ³ e $\sigma = 0,0115$ N/m e considerando que $\epsilon = 140000$ m ² /s ³	77
4.3	Exemplos de colisão entre partículas. (a) colisão a baixa velocidade ocorrendo coalescência das partículas (b) coalescência instável, resultando apenas em uma fragmentação significativa das partículas envolvidas em muitas partículas de pequeno tamanho (c) coalescência instável resultando em quebra essencialmente binária com a fragmentação formando partículas filhas (retirado de HAGESAETHER [93]).	81
5.1	Freqüência de quebra do modelo de PRINCE e BLANCH [4], sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\mu = 0,001$ Pa.s $\rho = 1000$ kg/m ³ e $\epsilon = 1$ m ² /s ³	91
5.2	Freqüência de quebra adimensional em função do diâmetro, modelos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], KONNO <i>et al.</i> [116] e PRINCE e BLANCH [4], sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m ³ e $\epsilon = 1$ m ² /s ³	92
5.3	Análise da dependência do modelo de freqüência de quebra de TSOURIS e TAVLARIDES [91] com o valor de k_{\min} , sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m ³ e $\epsilon = 1$ m ² /s ³	100
5.4	Sensibilidade do modelo de LUO e SVENDSEN [112] a variação do limite superior de integração no tamanho dos vórtices, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m ³ e $\epsilon = 1$ m ² /s ³	105
5.5	Comportamento do modelo de freqüência de quebra de MARTÍNEZ-BAZÁN <i>et al.</i> [128] com o diâmetro da partícula mãe, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m e $\rho = 1000$ kg/m ³	120
5.6	Modelos estatísticos de distribuição de tamanho das filhas	126
5.7	Comportamento do modelo de distribuição de tamanhos das partículas filhas de LUO e SVENDSEN [112] com a energia de dissipação turbulenta, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m ³	129

5.8	Comportamento do modelo de distribuição de tamanhos das partículas filhas de LEHR <i>et al.</i> [126] com a energia de dissipação turbulenta, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m ³	130
5.9	Comportamento do modelo de distribuição de tamanhos das partículas filhas de MARTÍNEZ-BAZÁN <i>et al.</i> [129] com o diâmetro da partícula mãe, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m ³ e $\epsilon = 10$ m ² /s ³	133
5.10	Evolução temporal da quebra de duas gotas (A e B) mostrando um mecanismo de deformação com posterior quebra das gotas alongadas. Δt entre as imagens de 10^{-3} s (figura extraída de EASTWOOD <i>et al.</i> [110])	136
5.11	Resultados experimentais de MAAB <i>et al.</i> [138]. Sistema tolueno/água. Os números na figura representam o número do quadro (do frame do vídeo) de onde aquela visualização foi retirada para compor a figura. O tempo total de quebra é 16 ms.	138
6.1	Vista em corte da seção de testes com as gavetas parcialmente fechadas	143
6.2	Vista em perspectiva da seção de testes. Destaque para as gavetas móveis. Figura extraída de SILVA <i>et al.</i> [140].	143
6.3	Seção de testes utilizada nos experimentos. Figura extraída de SILVA <i>et al.</i> [140].	144
6.4	Detalhamento das dimensões do posicionamento das gavetas quando simulando uma válvula globo.	144
6.5	Fluxograma experimental básico. Figura extraída de SILVA <i>et al.</i> [140].	145
7.1	Volume de controle considerado para determinar o tempo de residência das partículas na região que produz a quebra e a coalescência. Sendo, $V1 = V3 = 1 \times 5 \times 5$ mm ³ , $V2 = 5 \times (Ab) \times 5$ mm ³ , onde Ab é a abertura de cada acidente, $V4 = 5 \times 2 \times 5$ mm ³ e $V5 = 3 \times 5 \times 5$ mm ³ . Volume de controle total, $V_c = 25(7 + Ab)$ mm ³	155

8.1	Distribuição numérica de tamanho de gotas, na entrada do acidente com a condição de vazão média e concentração alta.	176
8.2	Réplicas da distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada nos pontos (a) 3 e (b) 9. Condição de vazão média.	177
8.3	Distribuições numéricas de tamanho de gotas na entrada (escala a direita) e na saída (escala a esquerda) associadas a análise do ponto experimental pt2g4.	180
8.4	Distribuições numéricas de tamanho de gotas na entrada (eixo a esquerda) e na saída (eixo a direito) do ponto experimental pt2g4 após a análise dos dados em “cruz”.	181
8.5	Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo MARTÍNEZ-BAZÁN <i>et al.</i> [128, 129] e assumindo que o número de Weber crítico é um parâmetro do sistema. Pontos experimentais (a) pt5g8 e (b) pt2g7. A otimização dos parâmetros considera apenas a vazão baixa, concentração alta. Os parâmetros determinados são $(1,4 \pm 0,2) \times 10^{-3}$ para o parâmetro multiplicativo da frequência de quebra e $(5,9 \pm 1,4) \times 10^{-3}$ para o número de Weber crítico.	185
8.6	Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo recomendado considerando a distribuição numérica de tamanho de partículas. Pontos experimentais (a) pt2g2 e (b) pt4g4. Os parâmetros não possuem significado estatístico. Simulação considera apenas vazão alta, concentração alta.	186
8.7	Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo recomendado considerando a distribuição numérica de tamanho de partículas. Pontos experimentais (a) pt2g2 e (b) pt4g4. Aproximação em torno do resultado simulado na saída.	187
8.8	Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo recomendado considerando a distribuição numérica de tamanho de partículas utilizando um valor de parâmetro longe do ponto que minimiza a função objetivo. Pontos experimentais (a) pt2g2 e (b) pt4g4.	188

8.9	Resultados de estimação de parâmetros utilizando o modelo recomendado, a distribuição volumétrica de tamanho de gotas determinada pelo “método em cruz” sem considerar os erros nas variáveis explanatórias e usando todos os pontos experimentais disponíveis para essa análise. Pontos experimentais (a) pt2g4, (b) pt2g13, (c) pt7g4 e (d)pt8g13. Parâmetros determinados, $C_{fc} = (2,8 \pm 1,4) \times 10^{-3}$, $C_{b1} = (9,2 \pm 5,2) \times 10^{-3}$ e $\zeta = 52 \pm 30$	190
8.10	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão baixa, concentração baixa, ponto experimental, pt6g7.	195
8.11	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão média, concentração alta, ponto experimental, pt4g13.	196
8.12	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão alta, concentração baixa, ponto experimental, pt7g2.	198
8.13	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão alta, concentração baixa, ponto experimental, pt9g15.	199
8.14	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão alta, concentração alta, ponto experimental, pt2g4.	200

8.15	Simulação considerando o modelo de frequência de quebra dado pela equação 8.49, com $C_{fc} = 0$ e considerando todos os dados experimentais. Nota-se que as maiores partículas não sofreram quebra em quantidade suficiente para modificar a condição inicial.	208
8.16	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas com (a) modelagem recomendada para distribuição de tamanho de partículas filhas e (b) distribuição de tamanho de partículas filhas uniforme. Consideram-se os erros nas variáveis explanatórias. Condição de vazão baixa, concentração alta, ponto experimental, pt4g8.	213
8.17	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas com modelo distribuição de tamanho de partículas filhas de HSIA e TAVLARIDES [117] Os erros nas variáveis explanatórias não foram considerados. Condição de vazão baixa, concentração alta, ponto experimental, pt8g13.	215
8.18	Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas com distribuição de tamanho de partículas filhas prevendo partículas com igual volume sendo (a) considerando número de partículas filhas um parâmetro empírico e (b) considerando quebra binária. Não foram considerados os erros nas variáveis explanatórias. Condição de vazão alta, concentração alta, ponto experimental, pt4g11.	217
A.1	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g2 (vazão alta, concentração alta).	239
A.2	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g3 (vazão alta, concentração alta).	239

A.3	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g4 (vazão alta, concentração alta).	240
A.4	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g5 (vazão alta, concentração alta).	240
A.5	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g7 (vazão baixa, concentração alta).	241
A.6	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g8 (vazão baixa, concentração alta).	241
A.7	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g9 (vazão baixa, concentração alta).	242
A.8	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g11 (vazão média, concentração alta).	242
A.9	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g12 (vazão média, concentração alta).	243

A.10	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g13 (vazão média, concentração alta).	243
A.11	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g14 (vazão média, concentração alta).	244
A.12	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g15 (vazão média, concentração alta).	244
A.13	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g3 (vazão alta, concentração alta).	245
A.14	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g4 (vazão alta, concentração alta).	245
A.15	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g5 (vazão alta, concentração alta).	246
A.16	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g7 (vazão baixa, concentração alta).	246

A.17	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g8 (vazão baixa, concentração alta).	247
A.18	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g9 (vazão baixa, concentração alta).	247
A.19	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g11 (vazão média, concentração alta).	248
A.20	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g12 (vazão média, concentração alta).	248
A.21	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g13 (vazão média, concentração alta).	249
A.22	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g14 (vazão média, concentração alta).	249
A.23	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g15 (vazão média, concentração alta).	250

A.24	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g3 (vazão alta, concentração alta).	250
A.25	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g4 (vazão alta, concentração alta).	251
A.26	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g5 (vazão alta, concentração alta).	251
A.27	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g7 (vazão baixa, concentração alta).	252
A.28	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g8 (vazão baixa, concentração alta).	252
A.29	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g9 (vazão baixa, concentração alta).	253
A.30	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g11 (vazão média, concentração alta).	253

A.31	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g13 (vazão média, concentração alta).	254
A.32	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g14 (vazão média, concentração alta).	254
A.33	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g7 (vazão baixa, concentração alta).	255
A.34	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g8 (vazão baixa, concentração alta).	255
A.35	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g9 (vazão baixa, concentração alta).	256
A.36	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g11 (vazão média, concentração alta).	256
A.37	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g12 (vazão média, concentração alta).	257

A.38	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g14 (vazão média, concentração alta).	257
A.39	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g15 (vazão média, concentração alta).	258
A.40	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g2 (vazão alta, concentração baixa).	258
A.41	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g4 (vazão alta, concentração baixa).	259
A.42	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g5 (vazão alta, concentração baixa).	259
A.43	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g7 (vazão baixa, concentração baixa).	260
A.44	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g9 (vazão baixa, concentração baixa).	260

A.45	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g11 (vazão média, concentração baixa).	261
A.46	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g12 (vazão média, concentração baixa).	261
A.47	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g13 (vazão média, concentração baixa).	262
A.48	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g15 (vazão média, concentração baixa).	262
A.49	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g2 (vazão alta, concentração baixa).	263
A.50	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g3 (vazão alta, concentração baixa).	263
A.51	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g4 (vazão alta, concentração baixa).	264

A.52	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g5 (vazão alta, concentração baixa).	264
A.53	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g7 (vazão baixa, concentração baixa).	265
A.54	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g10 (vazão baixa, concentração baixa).	265
A.55	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g11 (vazão média, concentração baixa).	266
A.56	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g12 (vazão média, concentração baixa).	266
A.57	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g15 (vazão média, concentração baixa).	267
A.58	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g2 (vazão alta, concentração baixa).	267

A.59	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g3 (vazão alta, concentração baixa).	268
A.60	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g4 (vazão alta, concentração baixa).	268
A.61	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g7 (vazão baixa, concentração baixa).	269
A.62	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g9 (vazão baixa, concentração baixa).	269
A.63	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g10 (vazão baixa, concentração baixa).	270
A.64	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g11 (vazão média, concentração baixa).	270
A.65	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g13 (vazão média, concentração baixa).	271

A.66	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g14 (vazão média, concentração baixa).	271
A.67	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g15 (vazão média, concentração baixa).	272
A.68	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g2 (vazão alta, concentração baixa).	272
A.69	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g3 (vazão alta, concentração baixa).	273
A.70	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g4 (vazão alta, concentração baixa).	273
A.71	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g5 (vazão alta, concentração baixa).	274
A.72	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g7 (vazão baixa, concentração baixa).	274

A.73	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g9 (vazão baixa, concentração baixa).	275
A.74	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g10 (vazão baixa, concentração baixa).	275
A.75	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g11 (vazão média, concentração baixa).	276
A.76	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g12 (vazão média, concentração baixa).	276
A.77	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g13 (vazão média, concentração baixa).	277
A.78	Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g15 (vazão média, concentração baixa).	277

Lista de Tabelas

4.1	Principais modelos de frequência de colisão	63
4.2	Modelos de CHESTERS [5] para partículas menores que a escala de Kolmogorov, $d < \eta$	78
4.3	Modelos de CHESTERS [5] para partículas maiores que a escala de Kolmogorov e menores que a escala integral, $\eta < d < L$	79
4.4	Outros modelos relevantes para partículas maiores que a escala de Kolmogorov e menores que a escala integral, $\eta < d < L$	80
6.1	Esquema de nomenclatura dos dados experimentais em relação as condições de estudo	147
8.1	Concentração percentual mássica de água na emulsão	161
8.2	Diferencial de pressão (em kgf/cm ²) entre a entrada e a saída do corpo de prova.	162
8.3	Temperatura (em C) do fluido durante a operação.	162
8.4	Vazão mássica (em kg/min) do escoamento.	163
8.5	Exemplificação da caracterização em “cruz” da distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada e na saída do ponto 2, réplica 4 (pt2g4).178	
8.6	Escala de Kolmogorov e volume esférico equivalente do vórtice.	183
8.7	Parâmetros estimados considerando o modelo recomendado.	192
8.8	Análise dos diâmetros característicos D_{pq} após o acidente.	202
8.9	Análise dos diâmetros característicos d_{pq} após o acidente.	203

Nomenclatura

A_r	aceleração relativa entre duas fases
a	freqüência de agregação
A_p	área projetada normal ao escoamento
B	termo de nascimento de partículas:
b	freqüência de quebra
C	constante empírica
C_D	coeficiente de arrasto
C_L	coeficiente de sustentação
C_μ	constante do modelo $\kappa - \epsilon$
C_{DT}	coeficiente de dispersão turbulenta
C_{MV}	coeficiente de massa virtual
Ca	número Capilar
C_c	coeficiente de interação fluidodinâmica
C_t	coeficiente que correlaciona a diferença de velocidade entre duas fases
D	coeficiente de difusão anisotrópico
\mathcal{D}	tensor deformação

\mathcal{D}'	tensor taxa de deformação
D	termo de morte de partículas
d	diâmetro
$E(k)$	espectro de energia associado ao comprimento de onda k
E	energia cinética
E_s	energia da superfície
F	distribuição de densidade volumétrica de partículas
f	distribuição de densidade numérica de partículas
F_c	força de interação ou colisão
f_V	fração de volume da menor partícula filha, $f_V = (d_1/d)^3$
\mathbf{g}	aceleração gravitacional
h	espessura do filme formado entre duas partículas durante uma colisão na coalescência
h_f	espessura do final filme formado entre duas partículas durante uma colisão na coalescência
h_i	espessura do inicial filme formado entre duas partículas durante uma colisão na coalescência
k	número ou comprimento de onda associado à turbulência
k_{mv}	coeficiente que corrige a velocidade de aproximação de duas partículas devido ao C_{mv}
L, M e N	parâmetros na equação 4.55
\mathbf{L}	comprimento característico
L	escala integral da turbulência

$\mathbf{M}_{I,\alpha}$	termo de troca de quantidade de movimento pela interface da fase α
m	representa a massa como variável interna
N	momento seccional ou momento de ordem zero, μ_0
Oh	número Ohnesorge
P	distribuição de probabilidade das propriedades internas nas partículas filhas oriundas de quebra
p	pressão
r	raio de uma certa partícula, $d/2$
Re	número de Reynolds
r_{eq}	raio equivalente associado ao tempo de drenagem de duas partículas com diâmetro diferentes
\mathbf{S}_α^n	termo fonte da equação 2.2
S	área superficial
S_{ij}	área da seção reta de colisão entre as partículas i e j
Sr	taxa adimensional de cisalhamento
St	número de Stokes
$\hat{\mathbf{T}}$	tensão viscosa
\mathbf{T}	tensor tensão (representação genérica)
\mathbf{T}^{eff}	tensão efetiva, $\mathbf{T}^{eff} = \hat{\mathbf{T}} + \mathbf{T}^{turb}$
\mathbf{T}^{turb}	tensão turbulenta
t	tempo
t_b	tempo de quebra

t_{coal}	tempo de coalescência entre duas partículas
t_{int}	tempo de contato entre duas partículas que colidiram
t_{res}	tempo de residência das partículas no volume de controle
\mathbf{u}'	vetor da flutuação da velocidade, desvio padrão instantâneo da velocidade
\mathbf{U}	vetor velocidade média
$\overline{u^2(d_i)}$	média do quadrado das flutuações de velocidade associadas aos vórtices de tamanho d_i que é igual a média da flutuações de velocidade de duas partículas de mesmo tamanho a uma distância d
U	velocidade
U_r	velocidade característica ou relativa
\mathbf{v}	vetor das variáveis internas
V	volume
v	representa uma única variável interna relativa ao tamanho, ou seja, massa ou volume
V_c	volume de controle
We	número de Weber
w_e	densidade de energia cinética
w_s	densidade de energia superficial
x_k	pivô da classe k
x, y e z	coordenadas espaciais cartesianas
\mathbf{y}	vetor de variáveis da fase contínua que interferem nos processos de quebra e agregação
\mathbf{z}	vetor das variáveis externas ou vetor do espaço físico, $\mathbf{z} = \mathbf{z}(x, y, z)$

Letras Gregas

β	parâmetro empírico do modelo de KUBOI <i>et al.</i> [90]
Δ	operador de diferença
ϵ	taxa específica de dissipação de energia cinética turbulenta
η	microescala de Kolmogorov
$\dot{\gamma}$	taxa de cisalhamento
Γ_α	termo fonte referente a troca de massa entre a fase α e outras fases
κ	energia cinética turbulenta por unidade de massa
μ	viscosidade dinâmica
μ_k	momento de ordem k
λ	eficiência de coalescência
ν	viscosidade cinemática, $\nu = \mu/\rho$
ν^t	viscosidade cinemática turbulenta, $\nu^t = \mu^t/\rho$
π	número π
ρ	massa específica
σ	tensão superficial
ς	número de filhas produzidas na quebra de uma partícula
θ	freqüência de colisão ou freqüência de interação
τ_c	tempo de relaxação do fluido
τ_p	tempo característico da partícula
ϕ_α	fração volumétrica

Ω taxa específica de quebra de uma partícula para gerar partículas com propriedades internas definidas

Ω velocidade rotacional

Subescritos

α referente a uma fase genérica

B referente à quebra

C referente à coalescência

c referente à fase contínua

$crit$ referente a valor crítico

d referente à fase dispersa

e referente a vórtices

eq referente a valor equivalente

I referência genérica aos tipos de força que compõem o termo $\mathbf{M}_{I,\alpha}$

i, j e k índices genéricos ou referente a partículas ou referente a classes ou referente a ordem de momentos

max referente a valor máximo

min referente a valor mínimo

p refere-se a uma partícula

\mathbf{v} referente às variáveis internas

\mathbf{z} referente às variáveis externas

Sobrescritos

a referente ao arrasto

DT referente à dispersão turbulenta

H termo fonte da equação de balanço populacional

l referente a sustentação

m referente a massa virtual

s referente à superfície

T referente a tensor transposto

$turb$ referente à turbulência

Operações Matemáticas

\mathbf{ab} produto diádico, sendo \mathbf{a} e \mathbf{b} vetores

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ produto escalar, sendo \mathbf{a} e \mathbf{b} vetores

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ produto triplo, sendo \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} vetores

$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ produto vetorial, sendo \mathbf{a} e \mathbf{b} vetores

$\nabla \cdot \mathbf{F}$ divergente de \mathbf{F} , sendo \mathbf{F} campo vetorial ou tensorial

$\nabla \mathbf{F}$ gradiente de \mathbf{F} , sendo \mathbf{F} campo escalar ou vetorial

$\nabla \times \mathbf{F}$ rotacional de \mathbf{F} , sendo \mathbf{F} campo vetorial ou tensorial

$\nabla^2 \mathbf{F}$ laplaciano de \mathbf{F} , sendo \mathbf{F} campo escalar ou vetorial

$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t}$ derivada parcial de \mathbf{F} de forma relativa ao tempo, t

$\frac{D\mathbf{F}}{Dt}$ derivada substantiva de \mathbf{F} , $\frac{D\mathbf{F}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{F}$

$\Delta \mathbf{F}$ variação do valor de \mathbf{F}

$\langle \mathbf{F} \rangle$ valor médio de \mathbf{F} , $\frac{\sum_i \mathbf{F}_i}{\sum_i 1_i}$

Siglas

CFD fluidodinâmica computacional, em inglês *Computational Fluid Dynamics*

DQMOM *Direct Quadrature Method Of Moments*

DTP distribuição de tamanhos das partículas

EPB equação de balanço populacional, em inglês *Population Balance Equation*

PPDC *Parallel Parent and Daughter Classes*

QMOM *Quadrature Method of Moments*

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Escoamentos multifásicos podem ser encontrados em diversos processos da indústria química, como na evaporação por contato direto, em colunas de bolhas, na areação de sistemas biológicos, na destilação, etc. A utilização desses processos estende-se da indústria farmacêutica à petrolífera. Sendo assim, seu entendimento e modelagem é de grande importância para o desenvolvimento tecnológico de diversas especialidades.

Estudos prévios e da literatura mostravam que os modelos de quebra e agregação de partículas são incompletos ou limitados a uma curta faixa de aplicações em relação a grande variedade de problemas existentes. Porém, esses modelos são necessários à modelagem adequada de boa parte dos escoamentos multifásicos de interesse prático.

A motivação principal desse trabalho originou-se da necessidade de modelar a quebra e a coalescência de gotas de água emulsionada em petróleo ao escoar por uma válvula de mistura. Em termos práticos, é necessário conhecer as características do escoamento após essa válvula de mistura para o adequado dimensionamento da dessalgadora (equipamento posterior a válvula de mistura na linha de operação).

1.2 Escoamento multifásico

Segundo à Termodinâmica, *fase* é uma região homogênea da matéria [1]. Um gás ou uma mistura de gases, um líquido ou uma mistura de líquidos solúveis são exemplos de fase. Dessa forma, para a Termodinâmica, uma fase é delimitada por interfaces, como por exemplo, um gás disperso em um líquido (como ar em água) ou um líquido disperso na forma gotas em um outro líquido no qual é imiscível (como em sistemas óleo e água). Esses dois exemplos são os principais exemplos de escoamentos multifásicos encontrados na literatura. Porém, a definição de fase de acordo com o estudo dos processos multifásicos é menos restritiva do que sua definição de acordo com a Termodinâmica.

Sejam manufaturados ou naturais, muitos materiais não são homogêneos. Um exemplo é o sangue, no qual partículas (glóbulos vermelhos e brancos, plaquetas, etc) estão suspensas em um fluido. Entretanto, ao modelar o escoamento do sangue em tubulações que possuam tamanho muito grande frente ao tamanho das partículas que estão suspensas no fluido sanguíneo, permite-se aproximar o sangue como uma substância monofásica [2]. A rigor, quando a fase dispersa é muito pequena e a velocidade desta é igual a velocidade da fase contínua, permite-se a aproximação de sistema monofásico. Observa-se, então, uma generalização do conceito de fase. Para a mecânica dos fluidos a fase não é independente do contexto onde o fluido está situado.

Sendo assim, um sistema multifásico é um sistema composto por duas ou mais fases, onde a definição de fase pode ser modificada conforme o problema tratado. Os sistemas bifásicos, líquido-líquido, líquido-sólido, líquido-gás e gás-sólido, e os trifásicos, líquido-líquido-gás e sólido-líquido-gás, são os exemplos mais usuais de sistemas multifásicos. Neste estudo, os sistemas envolvendo a fase sólida não serão mencionados.

Pode-se definir o escoamento multifásico como o escoamento de sistemas com-

postos de mais de uma fase. O escoamento multifásico é classificado de acordo com a distribuição espaço-temporal observada entre as fases, o que define **padrões** ou **regimes de escoamento**. Estes são melhor definidos em sistemas bifásicos. Essas classificações não representam uma unanimidade de conceitos, nem no número de regimes, nem no nome utilizado para descrever cada regime, nem ao menos na tradução dos nomes dos regimes e os critérios que definem as fronteiras dessas classificações são nebulosos.

Apesar de todas as particularidades que podem ser observadas em cada caso, pode-se generalizar as configurações básicas em quatro regimes distintos, sendo:

- Disperso, onde uma fase encontra-se dispersa em outra na forma de pequenas bolhas ou gotas. Estas podem ser uniformemente dispersas (com propriedades, tamanho inclusive, iguais entre si) ou polidispersas (quando as partículas podem apresentar diferentes valores de suas propriedades).
- Estratificado, onde existe uma caracterização bem definida das interfaces.
- Anular, que ocorre quando há a formação de uma camada de fluido na parede interna do tubo e a maior parte da outra fase encontra-se no centro. Nas duas regiões, existe a presença dispersa da outra fase.
- Intermitente ou complexo, que inclui todos os escoamentos diferentes dos que foram mencionados anteriormente. Em geral, apresenta partículas de grande tamanho (da ordem de tamanho do duto) podendo ou não apresentar características caóticas.

É importante realizar essa divisão, pois muitos modelos usam essas classificações como seus limites de aplicações.

O interesse dessa tese foi o escoamento disperso líquido-líquido e toda a revisão da literatura focou o escoamento disperso, mesmo que em alguns casos tenha sido possível realizar generalizações.

1.3 escoamento multifásico polidisperso

O escoamento polidisperso é um escoamento multifásico disperso onde os elementos da fase dispersa tem propriedades que os diferenciam entre si, as quais são caracterizadas por diferentes valores das chamadas *variáveis internas*. Assim, as variáveis internas são propriedades intrínsecas de uma partícula, por exemplo, sua massa, seu tamanho, sua energia interna, sua idade, etc [3].

Uma boa parte dos escoamentos multifásicos de interesse são escoamentos polidispersos. Para estes processos, em geral, a principal propriedade de interesse é o tamanho das partículas dispersas na fase contínua, cuja função distribuição de densidade numérica deve ser obtida. Para tal, é necessário modelar os processos de interação entre as fases que afetam a distribuição de tamanho das partículas, como os processos de quebra e agregação. Assim, é possível obter a evolução da distribuição numérica de tamanhos de partículas através da sua equação de conservação, conhecida como a *equação de balanço populacional* (EBP ou, do inglês, *population balance equation*) [3].

1.4 A agregação de partículas fluidas

A coalescência de partículas é a agregação de partículas fluidas. Entende-se o processo de coalescência como a união de pelo menos duas partículas formando uma nova partícula com a perda de identidade das partículas que agregaram. O fenômeno de coalescência é subdividido em três processos: *a colisão das partículas fluidas*, *a drenagem do filme fluido formado entre as partículas* e *a ruptura do filme líquido*. Portanto, a coalescência é observada em um escoamento polidisperso onde os três processos descritos possam ocorrer em seqüência [4–6].

Para a coalescência é necessário saber com que freqüência duas partículas de tipos determinados irão colidir e qual a probabilidade condicional de coalescência

uma vez que ocorra a colisão, ou seja, qual a probabilidade de ocorrer o fenômeno de drenagem e subsequente ruptura do filme fluido formado entre as partículas após a colisão das mesmas.

1.5 A quebra de partículas fluidas

Entende-se por fenômeno de quebra a ruptura de uma partícula, denominada partícula mãe, em pelo menos duas outras partículas, denominadas partículas filhas.

O fenômeno de quebra de partículas fluidas tem a sua origem na interação da partícula com campos cisalhantes, turbulência ou mesmo devido ao impacto contra superfícies sólidas ou outras partículas. A quebra ocasionada devido à turbulência do meio contínuo é observada em todo escoamento polidisperso fluido-fluido onde exista turbulência com intensidade suficiente para promovê-la. Existem diversos modelos que tentam explicar a quebra por interação com a turbulência que, resumidamente, se apóiam em uma de duas teorias básicas: *colisão entre partículas e vórtices* ou *ruptura devido à deformação sofrida pelas partículas por interação com o meio contínuo* [7, 8].

Para modelar a quebra é preciso conhecer, para cada partícula, a frequência com que o fenômeno ocorre, o número de partículas resultantes na quebra (partículas filhas) e como as propriedades expressas pelas variáveis internas se distribuem pelas partículas filhas.

1.6 O contexto do estudo

O estudo dos modelos de quebra e coalescência constitui uma etapa crucial ao entendimento dos escoamentos multifásicos polidispersos.

Até o ano de 2010, vários trabalhos realizados no laboratório de Termofluidodinâmica (LTFD) do Programa de Engenharia Química da Coordenação de Programas de Pós-Graduação em Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro avaliaram o problema do escoamento em colunas de bolhas [9, 10] e evaporadores por contato direto [11–14]. Além disso, utilizou-se a fluidodinâmica computacional para avaliar os processos de esgotamento de voláteis [15–17].

Na maioria destes trabalhos, a polidispersão das bolhas ou gotas foi desconsiderada ou considerada de forma simplificada. Outros trabalhos procuraram mensurar de forma adequada a intensidade da quebra/coalescência, sempre encontrando dificuldades em realizar esse tipo de trabalho frente a qualidade dos dados experimentais possíveis de serem obtidos com os equipamentos e métodos experimentais disponíveis [10, 14, 18]. Novas metodologias experimentais estão em desenvolvimento para contornar esse tipo de limitação [19].

Em paralelo, também foram desenvolvidas metodologias numéricas que possibilitam a simulação do escoamento multifásico polidisperso (e também da solução da equação de balanço populacional) uma vez que os modelos de fechamento estejam adequadamente definidos [9, 12, 20–27].

O LTFD atualmente conta com três linhas de pesquisa que possuem o objetivo de fornecer metodologias numéricas para a simulação do escoamento multifásico polidisperso multivariado. E existe também uma linha de pesquisa que agregará a possibilidade de analisar o escoamento de sistemas com misturas contínuas, como frações de petróleo, através do método de caracterização adaptativa de misturas contínuas [28, 29]. Dessa forma, desenvolve-se a metodologia numérica para simular o escoamento multifásico multicomponente de misturas contínuas.

Esse trabalho constitui parte do esforço em desenvolver conhecimento referente aos modelos de fechamento, mais precisamente os modelos de quebra e coalescência de gotas, necessários para a modelagem adequada do problema de escoamentos multifásicos polidispersos.

1.7 O presente trabalho

Este trabalho de tese propõe estudar a quebra e a coalescência de gotas de emulsão de água em petróleo ao escoar por um acidente na tubulação. Esse tipo de acidente simula a válvula de mistura anterior à dessalgadora (equipamento que separa a água salgada do óleo).

Dados experimentais da distribuição de tamanho de gotas antes e depois de uma seção de testes com acidente de tamanho variável foram obtidos no Núcleo de Separadores Compactos da UNIFEI (Universidade Federal de Itajubá).

O presente trabalho analisou esses dados experimentais, propôs a utilização de um modelo de coalescência existente na literatura, desenvolveu um novo modelo de quebra e determinou os melhores parâmetros para esses modelos.

1.8 Organização do documento

Nessa seção, será apresentada a estrutura do documento e a definição de algumas convenções que serão utilizadas ao longo do texto.

O capítulo 2 apresenta resumidamente o modelo Euleriano-Euleriano e algumas das equações constitutivas que compõem o problema para situar a necessidade do desenvolvimento efetuado nessa tese.

A modelagem do problema de escoamento multifásico polidisperso será concluída no capítulo 3. Nesse capítulo, é apresentado a equação de balanço populacional e seus principais métodos de solução.

Os capítulos 4 e 5 apresentam uma revisão da literatura dos modelos de coalescência e de quebra, respectivamente.

O capítulo 6 apresenta o experimento realizado no Núcleo de Separadores Compactos da UNIFEI, com os respectivos equipamentos utilizados, seus materiais e condições operacionais. O capítulo 7 apresenta o modelo matemático utilizado para a análise dos dados experimentais e dos modelos de quebra e coalescência.

Todos os resultados são apresentados no capítulo 8, incluindo a análise crítica dos dados experimentais e os resultados das estimações de parâmetros realizadas. A conclusão é descrita no capítulo 9.

Por fim, o anexo A apresenta todos os gráficos das distribuições volumétricas de tamanho de gotas, tanto experimentais quanto simulados após a estimação de parâmetro pela regressão da distância ortogonal. Embora sejam os resultados principais da tese, essas informações foram colocadas no anexo para melhorar a fluência do texto.

1.8.1 Convenção de notação

Antes de iniciar o texto propriamente dito, é importante destacar algumas convenções que serão utilizadas ao escrever o texto.

A variável C representa um parâmetro empírico. De forma geral, os parâmetros empíricos serão referidos com esse símbolo e serão diferenciados, se necessário para o seu entendimento, pelo subscrito.

No texto, o subscrito α representa uma fase *qualquer* do sistema. A princípio $\alpha = 1 \dots n$ onde n é o número máximo de fases. Após a introdução do sistema multifásico, o sistema será considerado sempre bifásico e poderá ser caracterizado por uma fase contínua e outra dispersa, cada fase será sempre representada por um subscrito c ou d , respectivamente. As propriedades termodinâmicas assumem valores diferentes para cada fase. Sendo assim, ρ_α representa a densidade da fase α , ρ_c a densidade da fase contínua e ρ_d a densidade da fase dispersa. Por vezes,

a propriedade que pode ser definida em duas fases diferentes, pode aparecer sem um subscrito, tal como ρ . Esse recurso será utilizado para simplificar a notação em algumas equações, e subentende-se que a propriedade refere-se à fase contínua. A **única exceção a essa regra** será a fração volumétrica, ϕ , do qual fica acordado que quando não houver subscrito nela, ela refere-se a fase dispersa. O subscrito p refere-se a uma partícula específica.

Subscritos numéricos podem ter várias conotações. Eles foram, preferencialmente, utilizados para fazer referência a partículas em tamanho ordenado, ou seja, d_1 , refere-se à partícula de menor tamanho, d_2 refere-se à segunda partícula de menor tamanho, e assim sucessivamente. Entretanto, números também apareceram na definição de outras funções, tal como o momento de segunda ordem, μ_2 . Em algumas passagens da dedução multifásica, o número também representará a fase. Entretanto, as diferentes conotações que os subscritos numéricos possuem não devem introduzir maiores questionamentos devido ao contexto no qual está inserido.

É necessário observar o contexto no qual a variável μ é empregada. Ela tanto pode referenciar o momento quanto a viscosidade. No geral, é simples perceber a diferença, pois o momento sempre vem acompanhado de um número que caracteriza sua ordem. Por exemplo, μ_0 , momento de primeira ordem. Em princípio, o contexto distinto, a aplicação distinta e mesmo a ordem do texto não deve permitir qualquer tipo de questionamento quanto ao significado desta variável.

Por fim, uma atenção especial às diversas utilizações dos subscritos i , j e k . Em princípio, são índices genéricos. Exemplo, d_i refere-se ao diâmetro de uma partícula i e d_j refere-se ao diâmetro de uma partícula j , por outro lado, μ_k refere-se ao momento de ordem k .

Capítulo 2

Modelagem do Escoamento Multifásico

2.1 Introdução e equações básicas

A modelagem de escoamentos multifásicos possui diversas abordagens, sendo possível dividir essas abordagens em dois grandes grupos: modelos com escorregamento entre as fases e modelos sem escorregamento entre as fases.

Os modelos sem escorregamento entre as fases utilizam um único campo de velocidade para as duas fases e, por isso, possui aplicações (como a modelagem de Superfície Livre) que não interessam neste trabalho. Dentre os modelos com escorregamento entre as fases, ou seja, com mais de um campo de velocidade, podemos subdividir os grupos de modelos novamente em dois: Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangeano.

As duas abordagens resolvem um sistema de equações de conservação (quantidade de movimento, massa, calor, etc) para a fase contínua. A diferença entre as abordagens está na modelagem das demais fases do sistema.

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana após a determinação do campo de velocidade da fase contínua são calculadas as forças exercidas sobre as partículas. Então, as equações dinâmicas de um certo conjunto de partículas são resolvidas, gerando as suas trajetórias. Para ocorrer convergência estatística do efeito da população é necessário que exista uma grande número de partículas nesta abordagem. Portanto, a mesma não permite modelar os escoamentos estratificados, anulares ou intermitentes.

Há duas grande limitações na abordagem Euleriana-Lagrangeana. A primeira é que a partícula é tratada como sendo pontual, ou seja, possui volume zero, e, portanto, a partícula deve ser pequena para que essa aproximação seja válida. Mas a principal limitação é que é necessário obter a dinâmica de cada partícula do sistema (embora seja possível tratar grupos de partículas através de uma única dinâmica). Como as partículas deve ser pequenas, mesmo pequenas frações de volume da fase dispersa produzem um alto número de partículas [2, 30, 31]. Atualmente, o custo computacional inviabiliza a maior parte das simulações de interesse. Note que novas tecnologias computacionais, como a GPU, despontam possibilidades para amenizar essa limitação, que ainda é atual.

A metodologia Euleriana-Euleriana é a mais utilizada na solução de escoamentos multifásicos e é a mais adequada para escoamentos onde as fases estão misturadas [2, 31, 32]. A principal hipótese assumida por esse modelo é de que ambas as fases são tratadas como fases contínuas (mesmo quando uma das fases é a dispersa). Sendo assim, a hipótese de contínuo deve ser respeitada em ambas as fases e não há interfaces separando as fases. Em cada ponto material pode coexistir tantas fases quanto forem consideradas e a quantidade relativa de cada fase é dada pelo valor da fração volumétrica nesse ponto. É possível realizar essas caracterizações com raras exceções [2, 31, 32].

Neste trabalho não será vista a dedução das **equações médias para os escoamentos multifásicos**. Existe mais de um procedimento para se deduzir as

mencionadas equações, que podem ser encontrados em várias fontes da literatura [2, 31–35].

Para sistemas multifásicos isotérmicos as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento **médias** são dadas por:

$$\frac{\partial(\phi_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \Gamma_\alpha \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) &= \nabla \cdot (\phi_\alpha \mathbf{T}_\alpha^{eff}) \\ + \mathbf{M}_{I,\alpha} + \Gamma_\alpha \mathbf{U}_{I,\alpha} + \phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{S}_\alpha^n & \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde ρ_α é a densidade média, \mathbf{U}_α é a velocidade média, $\Gamma_\alpha \mathbf{U}_{I,\alpha}$, é o aumento da quantidade de movimento associado à transferência de massa entre as fases, $\mathbf{U}_{I,\alpha}$ é a velocidade média da massa transferida através da interface, Γ_α é o termo fonte referente à massa trocada entre a fase α e as outras fases, \mathbf{S}_α^n é um termo fonte referente a existência de qualquer força que não seja oriunda da força da gravidade, ϕ_α é a fração da fase α e \mathbf{T}_α^{eff} é o tensor efetivo da fase α . Ele é formado pela combinação das tensões médias viscosa, $\hat{\mathbf{T}}_\alpha$, e turbulenta, \mathbf{T}_α^{turb} , da fase α (ou seja, $\mathbf{T}_\alpha^{eff} = \hat{\mathbf{T}}_\alpha + \mathbf{T}_\alpha^{turb}$) e $\mathbf{M}_{I,\alpha}$ é o termo de troca de quantidade de movimento pela interface da fase α .

A formulação do termo referente à taxa de troca de massa entre fases, Γ_α , varia muito com o caso estudado e não será discutido neste trabalho. Portanto, assume-se que $\Gamma_\alpha = 0$.

As equações 2.1 e 2.2 são, em princípio, aplicáveis em qualquer padrão de escoamento ou até mesmo na transição entre diferentes regimes. As limitações são as equações constitutivas, no caso, compostas pelo termo de troca de quantidade de movimento pela interface da fase α , $\mathbf{M}_{I,\alpha}$, e a tensão turbulenta, \mathbf{T}_α^{eff} , que devem ser adequadamente modelados. Infelizmente não existe um modelo geral que possa ser considerado absoluto para resolver qualquer problema posto.

Uma vez que as equações constitutivas, as condições de contorno e as condições iniciais estejam estabelecidas, o problema estará pronto para ser resolvido. Na seqüência é feita uma breve revisão da modelagem dos termos de troca de quantidade de movimento entre fases e da tensão turbulenta em escoamentos multifásicos.

2.2 Equações constitutivas

Como dito anteriormente, modelar as equações constitutivas são de vital importância para uma modelagem adequada do problema. A capacidade preditiva das equações 2.1 e 2.2 dependem fortemente das equações constitutivas que compõem o termo de troca de quantidade de movimento pela interface da fase α , $\mathbf{M}_{I,\alpha}$ e de tensão efetiva \mathbf{T}_α^{eff} . Várias fontes da literatura revisaram esse assunto [2, 30–36].

As equações constitutivas ou equações de fechamento devem sempre satisfazer os seguintes princípios:

- Equi-presença, que determina que qualquer equação de fechamento deve ser função de, no máximo, todas as outras variáveis do problema (com a limitação de separação das variáveis das fases [2]).
- Permitir solução bem-posta, que significa que existe solução e ela é única.
- Indiferença ao referencial, o que significa que o comportamento é o mesmo independente do observador.
- Determinismo, que é a capacidade de previsão.
- Respeito à segunda lei da Termodinâmica. As conservações de massa, energia e quantidade de movimento estão asseguradas pela formulação das equações médias do escoamento. Porém, a segunda lei da Termodinâmica pode não ser atendida se uma equação constitutiva for mal formulada. Um bom modelo não pode violar a segunda lei da termodinâmica.

Todos os princípios são de igual importância, mas as provas matemáticas possuem diferentes níveis de dificuldade. Nesse trabalho não será feita nenhuma dedução adicional sobre essa questão. Informações adicionais podem ser encontradas na literatura [2, 30, 31]

2.2.1 Modelagem das forças de interação entre fases

A interação da partícula com o fluido é uma ação que gera uma força resultante. Para efeitos de modelagem no sistema Euleriano-Euleriano, essa força resultante da interação entre as fases pode ser decomposta em vários tipos de forças interfaciais diferenciadas na origem fenomenológica.

As principais forças agindo em escoamentos dispersos são devido ao arrasto, à sustentação e à massa virtual. Existem outros efeitos, como as forças oriundas da tensão superficial, de dispersão turbulenta, da lubrificação da parede e do desenvolvimento da camada limite hidrodinâmica (força de Basset). Estas forças são, nesse tipo de modelagem, desconsideradas na maior parte das aplicações práticas, especialmente porque a sua influência é menor do que o erro associado a modelagem das principais forças [2, 30–32, 35].

Tradicionalmente, considera-se uma simples relação linear entre as forças, ou seja, a força total é a soma de todas as forças, mas essa hipótese não é verdadeira. Entretanto não se conhece adequadamente nem os termos principais, quanto mais os pequenos desvios associados à não linearidade do termo [2, 25, 31, 32, 35], ou seja, esse desvios, sejam quais forem, são menos significativos que os erros associados à modelagem de cada termo principal. Portanto, a relação linear entre as forças é a forma utilizada.

Para simplificar as formulações neste estudo, considere um sistema bifásico

monodisperso. Com essa simplificação, obtém-se a seguinte equação

$$\mathbf{M}_{I,1} = \mathbf{M}_{I,12}^a + \mathbf{M}_{I,12}^l + \mathbf{M}_{I,12}^{mv} \quad (2.3)$$

onde \mathbf{M}^a , \mathbf{M}^l e \mathbf{M}^{mv} representam respectivamente as forças devido ao arrasto, sustentação e massa virtual. Sem aproximações adicionais $\mathbf{M}_{I,1} = -\mathbf{M}_{I,2}$, pois, de forma obrigatória, $\sum_{\alpha=1}^n \mathbf{M}_{I,\alpha} = 0$. Todas as forças de interação entre fases que são apresentadas nas subseções seguintes consideram a equação 2.3.

As forças de interface devem ser expressas por um termo de força por unidade de volume e não como uma força sobre uma determinada partícula, pois a fase dispersa é tratada como contínua na abordagem euleriana-euleriana.

Força de arraste

A força de arraste (“*drag*”) possui papel fundamental no escoamento disperso. Ela é usualmente a mais importante das forças nesses sistemas, sendo comumente modelada como [2, 31, 32, 37, 38]:

$$F_c^a = \frac{1}{2} C_D \rho A_p |\mathbf{U}_d - \mathbf{U}| (\mathbf{U}_d - \mathbf{U}) \quad (2.4)$$

onde C_D é o coeficiente de arrasto e A_p é a área **projetada** cuja a normal tem a direção do escoamento. No caso de uma partícula esférica, $A_p = \pi d_p^2/4$. A forma da força de arraste (equação 2.4) é uma generalização da solução de Stokes [39] para a queda livre (movimento retilíneo) de uma esfera sólida em um líquido estagnado em regime estacionário. Toda a incerteza derivada do uso da equação 2.4 para uma partícula fluida em um escoamento *qualquer* fica implícita ao coeficiente de arrasto, C_D .

Considerando a abordagem Euleriana-Euleriana, a equação 2.4 deve ser convertida por $M_i^a = N F_i^a$, onde considera-se que a partícula é esférica de forma que

$N = 6\phi/(\pi d_p^3)$, obtendo:

$$M_c^a = \frac{3}{4} C_D \rho \frac{\phi}{d_p} |\mathbf{U}_d - \mathbf{U}| (\mathbf{U}_d - \mathbf{U}) \quad (2.5)$$

A figura 2.1 representa o comportamento do coeficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds da partícula, $\mathcal{R}e_p = Ud/\nu$.

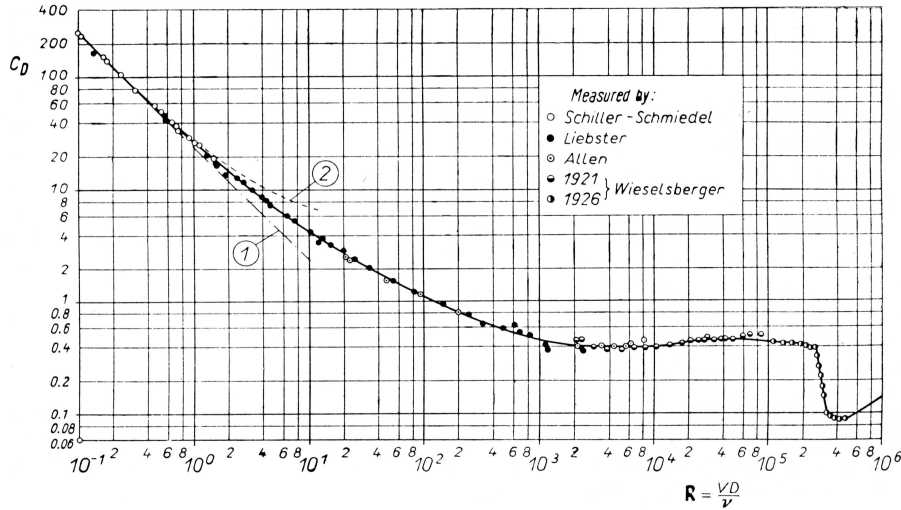


Figura 2.1: Coeficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds (retirado de SCHLICHTING [40]).

Na figura 2.1 é possível perceber quatro regiões bem distintas.

1. Quando o número de Reynolds da partícula é baixo ($\mathcal{R}e_p < 1$), temos o regime de Stokes [39]. Nele é possível escrever o coeficiente como:

$$C_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_p} \quad (2.6)$$

Essa equação foi obtida analiticamente por STOKES [39].

2. Após o regime de Stokes e antes da estabilização da curva em uma reta ($1 < \mathcal{R}e_p < 1000$), temos a região de transição ou região viscosa. Apesar de existirem inúmeras equações para o coeficiente de arrasto, **parece** ser um consenso da literatura [2, 30, 31, 33–38] a utilização da correlação de SCHILLER e

NAUMANN [41] para representar essa faixa de aplicação, no caso de partículas esféricas não deformáveis.

$$C_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_p} (1 + 0,15\mathcal{R}e_p^{0,687}) \quad (2.7)$$

3. Após a faixa de transição, observa-se a uma reta horizontal. Essa região é conhecida com região inercial ou de Newton. Caracteriza-se por um número de Reynolds da partícula elevado $1000 < \mathcal{R}e_p < 200000$ e por quase não haver uma modificação no valor do coeficiente de arrasto com o número de Reynolds. Usualmente, considera-se [30, 31, 35, 36]

$$C_D = 0,44 \quad (2.8)$$

4. A quarta e última fase é observada quando o Reynolds da partícula é extremamente elevado ($\mathcal{R}e_p > 200000$). Observa-se que o valor do coeficiente de arrasto cai abruptamente (de 0,44 para menos de 0,1) devido a transição da camada limite para o regime turbulento. Desse ponto em diante, tem-se a região supercrítica, para o qual CLIFT *et al.* [37] recomenda:

$$C_D = 0,1 \log \mathcal{R}e_p - 0,49 \quad (2.9)$$

Na prática, enquanto a partícula fluida puder ser aproximada por uma esfera, ela o será, e C_D será estimado feito de acordo com os modelos supracitados. Sendo assim, o modelo de STOKES [39] e o modelo de SCHILLER e NAUMANN [41] ainda são bem utilizados na modelagem de partículas fluidas pequenas e não deformáveis.

Contudo, quando o número de Reynolds da partícula aumenta, raramente uma partícula fluida consegue manter a forma esférica [37, 38]. Por exemplo, uma bolha com $\mathcal{R}e_p > 150$ pode apresentar a forma de semi-esfera, o último estágio da deformação de uma bolha [37].

Uma das abordagens mais freqüentes é a utilização do conceito de velocidade

terminal para a modelagem do coeficiente de arrasto (algo muito preciso, no caso de partículas sólidas [37]). Na prática, isso transfere a modelagem do termo para a velocidade terminal. Dessa abordagem resulta a formulação:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{gd}{u_T^2} \frac{\Delta g}{\rho_c} \quad (2.10)$$

onde a velocidade terminal é modelada de acordo com as características do sistema. Existe uma vasta literatura sobre o assunto. Somente em CLIFT *et al.* [37] existem mais de 170 modelos registrados [36] e ainda existem um número expressivo de modelos publicados após a publicação desse livro.

Força de sustentação

A força de sustentação (“*lift*”) é observada devido a uma distribuição assimétrica de pressão em torno de uma partícula, gerando uma força que será transversal à direção do escoamento (figura 2.2). Uma das origens dessa distribuição assimétrica de pressão é a existência de um campo não uniforme de velocidade da fase contínua ou a presença de partícula com forma assimétrica. Contudo, pode haver outras origens [2, 31, 32, 37, 38].

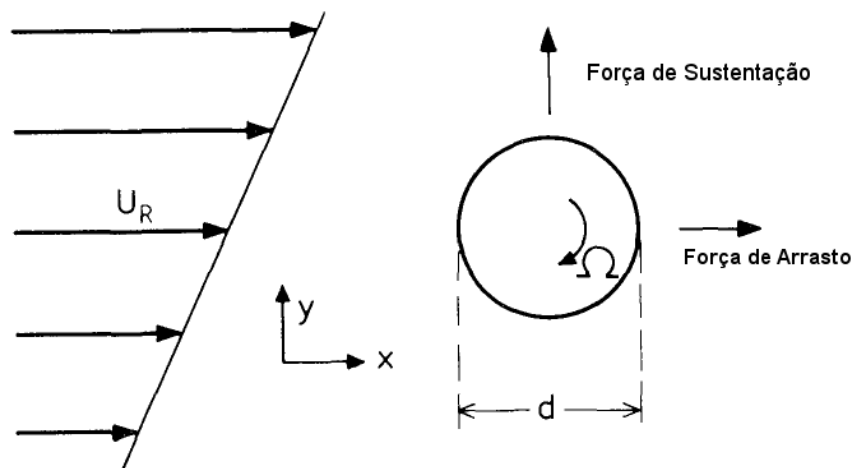


Figura 2.2: Representação da força de sustentação e da força de arrasto (extraído de CLIFT *et al.* [37]). A ilustração apresenta uma partícula sólida em água.

Em escoamentos dispersos em dutos, a força de sustentação é responsável por levar as bolhas para as paredes, induzindo uma distribuição transversal de fração volumétrica de gás [30, 31, 37, 42]. Matematicamente, a única formulação encontrada na literatura para a força de sustentação é expressa como [2, 31, 32, 37, 38]:

$$M_c^l = \rho\phi C_L (\mathbf{U}_d - \mathbf{U}) \times \nabla \times \mathbf{U} \quad (2.11)$$

O modelo em si é muito simples, pois considera a força proporcional ao produto vetorial da diferença de velocidade entre as fases e a velocidade rotacional induzida pela fase contínua. Novamente toda ignorância a respeito da modelagem foi colocada em um coeficiente, no caso, o coeficiente de sustentação, C_L . Assim como o modelo de força de arrasto, esse modelo é comumente utilizado por todas as referências encontradas na literatura [2, 31, 32, 37, 38].

Esse modelo sozinho **não é independente do referencial**, ou seja, a força de sustentação não pode ser considerada a única força existente em um sistema [2, 43]. É mandatório que pelo menos a força de massa virtual também seja levada em consideração, embora não se recomende que seja a única [2]. Para simplificar o estudo, considere que apenas as forças de sustentação e massa virtual sejam levadas em consideração

Dessa forma, o modelo coeficiente de sustentação provém da necessidade de assegurar que a força de sustentação e de massa virtual sejam, em conjunto, indiferentes ao referencial (caso considere-se outras forças, esse equilíbrio também deve envolvê-las). No caso específico do modelo tratado nesse texto, é necessário que o coeficiente de massa virtual, C_{MV} , seja tal que, $C_{MV} = C_L$ [2, 43]. Logo, do momento que se definiu um modelo de coeficiente, o modelo está automaticamente determinado.

AUTON *et al.* [43] e outros autores apresentam uma solução analítica do escoamento invíscido em torno de uma esfera rígida e lisa, obtendo $C_L = 0,5$ e considerando apenas o coeficiente de massa virtual e de sustentação. Resultados exper-

imentais de LEGENDRE e MAGNAUDET [44] reproduziram a mesma informação para bolhas esféricas em $\mathcal{R}e_p > 1000$.

A figura 2.3 mostra o comportamento do coeficiente de sustentação para uma partícula esférica rígida e lisa em função do número de Reynolds. Percebe-se que quando o $\mathcal{R}e_p > 500$ a solução analítica para escoamento invíscido é extremamente precisa. A solução analítica, inclusive, é uma boa aproximação para quando $\mathcal{R}e_p > 100$.

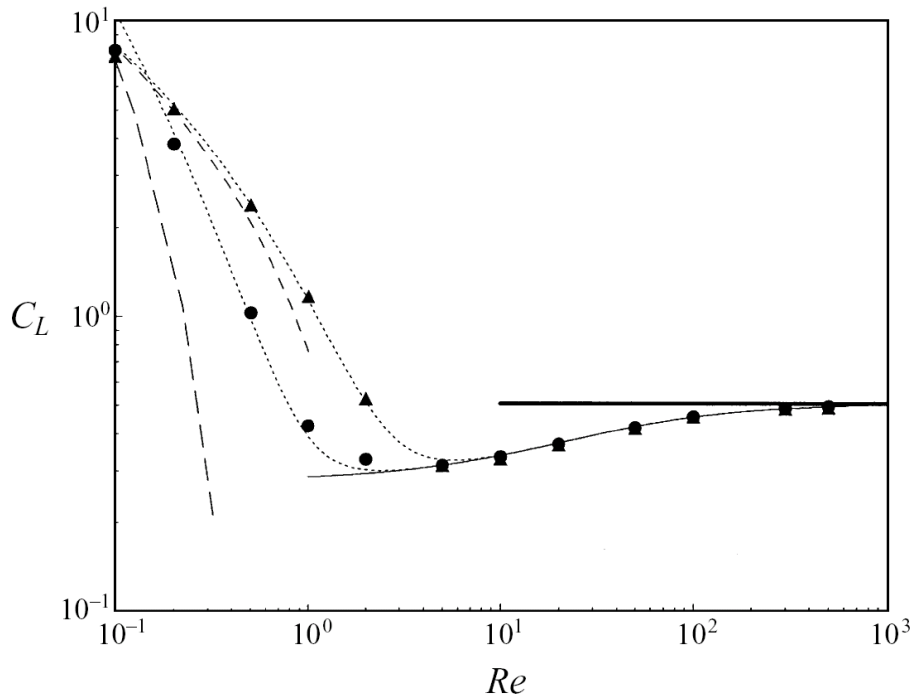


Figura 2.3: Coeficiente de sustentação para uma esfera rígida e lisa em função do número de Reynolds. Linha sólida: solução analítica para escoamento invíscido; linhas pontilhadas: ajuste da curva para os resultados numéricos com $\mathcal{S}r = 0,02$ (●) e $\mathcal{S}r = 0,2$ (▲); linhas tracejadas: solução analítica para *creeping flow* com $\mathcal{S}r = 0,02$ e $\mathcal{S}r = 0,2$, com $\mathcal{S}r = |\nabla U|d/U_r$, com $U_r = U - U_d$ (retirado de LEGENDRE e MAGNAUDET [44]).

CROWE *et al.* [38] e RUSCHE [36] compararam alguns modelos de coeficiente de sustentação. Eles afirmam que o valor para o coeficiente de sustentação para quando $1 < \mathcal{R}e_p < 1000$ ainda é um problema em aberto. Nenhum modelo avaliado por eles apresentaram um comportamento completamente físico dentro dessa faixa de número de Reynolds.

Note que considerar $C_L = 0,5$ considerando $C_L = C_{MV}$ é uma aproximação completamente razoável em um sistema onde o $\mathcal{Re}_p > 100$ e $\phi < 0,3$ com as partículas pouco deformadas. Sendo extremamente preciso quando $\phi < 0,2$ e $\mathcal{Re}_p > 1000$ e as partículas do sistema sejam esféricas. Note, também, que os modelos de coeficiente de sustentação e de massa virtual são, no geral, bem diferentes. Enquanto o primeiro depende preferencialmente da taxa de cisalhamento, o segundo depende preferencialmente da fração volumétrica da fase contínua.

Força de massa virtual

A força de massa virtual é definida como a força necessária para acelerar uma porção da fase contínua na movimentação de uma partícula. Esse fenômeno também pode ser visto como se a partícula “virtualmente” aumentasse sua massa. Esse termo é mais importante quanto maior for a diferença de densidade entre as fases e mais abrangentes forem as regiões de aceleração do escoamento [38, 43].

Essa força é conceitualmente muito simples, pois é a massa virtual multiplicada pela aceleração relativa. Expressando o termo diretamente na sua forma Euleriana, ou seja, NF_c^{MV} temos:

$$M_c^a = \rho\phi C_{MV} \mathbf{A}_r \quad (2.12)$$

onde C_{MV} é o coeficiente de massa virtual e \mathbf{A}_r é a aceleração relativa entre as fases.

Existe mais de uma forma funcional para a aceleração relativa entre as fases, DREW *et al.* [45] apresentaram uma forma considerando que sua forma vetorial deve ser, sozinha, independente do sistema referencial, obtendo:

$$\mathbf{A}_r = \frac{\partial \mathbf{U}_d}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U}_d - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} - \mathbf{U}_d \cdot \nabla \mathbf{U} + (1 - \lambda) (\mathbf{U}_d - \mathbf{U}) \cdot \nabla (\mathbf{U} - \mathbf{U}_d) \quad (2.13)$$

A formulação dada pela equação 2.13 introduziu um fator não físico λ , que pode ser determinado experimentalmente. Segundo os autores esse parâmetro varia de 0 a 2, considerando altas e baixas frações volumétricas de gás, respectivamente. Mesmo

assim, essa formulação foi idealizada para um sistema monodisperso gás-líquido, no qual as partículas não interagem entre elas. Esse cenário é incompatível com altas frações de gás. Posteriormente, DREW [46] sugere a utilização da equação 2.13 com o valor de $\lambda = 1$, reduzindo a expressão.

AUTON *et al.* [43] analisou o caso onde existe uma força atuando sobre um corpo submerso em um escoamento de fluido não viscoso que varia no tempo e no espaço. Dessa proposta, podemos identificar a aceleração relativa entre as fases como sendo:

$$\mathbf{A}_r = \frac{\partial \mathbf{U}_d}{\partial t} + \mathbf{U}_d \cdot \nabla \mathbf{U}_d - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \quad (2.14)$$

É muito importante que fique claro que o modelo de AUTON *et al.* [43] consiste na soma da equação de massa virtual (equação 2.12) com A_r definido pela equação 2.14 com a equação da força de sustentação (equação 2.11). Ignorar a força de sustentação equivale a considerar que as linhas da função fluxo são uniformes no espaço, ou seja, que não existirá rotação induzida pela diferença do perfil de velocidades. Entretanto, ignorar a força de sustentação é conceitualmente um erro, embora possa-se construir sistemas onde a força de sustentação seja numericamente desprezível frente à força de massa virtual [43].

A forma apresentada na equação 2.14 é a mais utilizada na literatura e é a que está implementada em vários softwares CFD como o OpenFOAM, CFX e o Fluent [2, 30, 35, 36].

Na equação 2.12, $\rho\phi C_{MV}$ é a massa virtual propriamente dita. O coeficiente virtual de massa, C_{MV} , representa a razão entre a massa de fluido da fase contínua que foi deslocado e a massa da partícula. Observe que se o coeficiente de massa virtual for 1, o volume de massa deslocada será igual ao volume da partícula.

O coeficiente de massa virtual representa a razão entre o volume de fluido da fase contínua que foi deslocado e o volume da partícula. CLIFT *et al.* [37] apresenta a solução analítica exata para esse problema considerando uma esfera rígida em meio

infinito e fluido ideal. Por essa solução, afirma-se que $C_{MV} = 0,5$.

ISHII e MISHIMA [47] consideraram a seguinte modelagem para um escoamento disperso

$$C_{MV} = \frac{1}{2} \frac{1 + 2\phi}{1 - \phi} \quad (2.15)$$

VAN WIJNGAARDEN [48] sugeriu o seguinte modelo

$$C_{MV} = \frac{1}{2} + \frac{3}{2}\phi \quad (2.16)$$

o modelo VAN WIJNGAARDEN [48] é o recomendado por DREW e PASSMAN [2]

PALADINO [30] sugere o seguinte modelo

$$C_{MV} = \frac{1}{2} + \phi \quad (2.17)$$

Todos os modelos supracitados são empíricos. Todos partem da solução analítica e tentam ajustar o efeito do coeficiente virtual de massa em função da fração volumétrica da fase dispersa. A figura 2.4 compara os três modelos mencionados. Percebe-se claramente que eles não são concordantes. É quase impossível, entretanto, afirmar que um desses modelos esteja errado sem dados experimentais. .

É comum que as simulações sejam feitas com o coeficiente virtual de massa igual a 0,5 [2, 25, 30, 42]. Vários autores [30, 47–51] citam que essa aproximação é eficaz em sistemas onde a fração volumétrica da fase dispersa é menor que 0,3, ($\phi < 0,3$).

Outros modelos são apresentados por WATANABE e KUKITA [51] alguns desses, inclusive levam em consideração a densidade das fases envolvidas.

Lembrando que ao utilizar o modelo de AUTON *et al.* [43] o coeficiente de massa virtual está matematicamente relacionado com o coeficiente de sustentação,

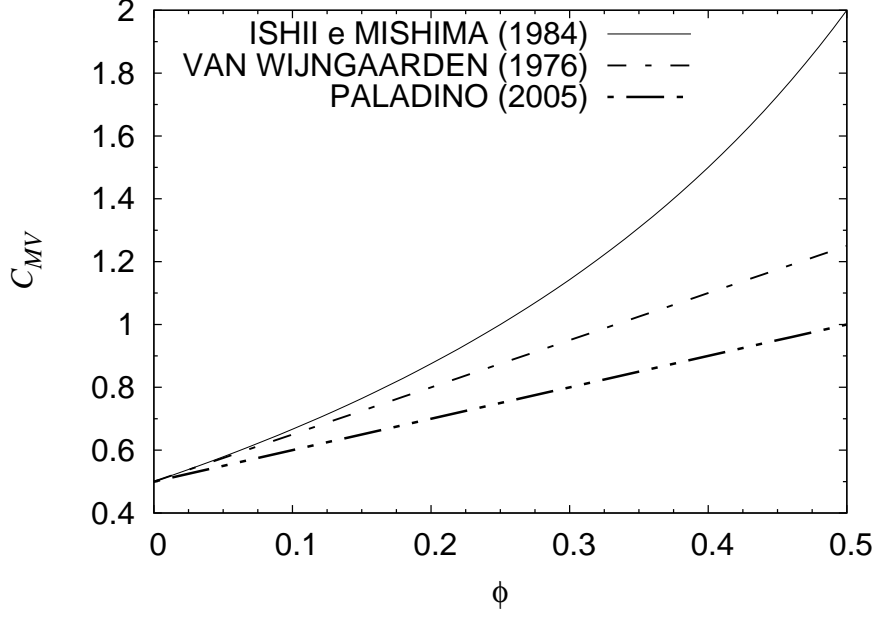


Figura 2.4: Coeficiente de massa virtual em função da fração volumétrica da fase dispersa, comparação entre os modelos de ISHII e MISHIMA [47], VAN WIJNGAARDEN [48] e PALADINO [30].

$C_{MV} + C_L = 1$, sendo $C_{MV} = C_L = 0,5$ é a aproximação mais comum na literatura [2, 25, 30, 31, 42, 47–51].

2.2.2 Modelagem da tensão

O tensor efetivo da fase α , \mathbf{T}_α^{eff} , é formado pela combinação das tensões médias viscosa, $\hat{\mathbf{T}}_\alpha$, e turbulenta, \mathbf{T}_α^{turb} , da fase α (ou seja, $\mathbf{T}_\alpha^{eff} = \hat{\mathbf{T}}_\alpha + \mathbf{T}_\alpha^{turb}$). Dessa forma, a sua modelagem consiste em duas modelagens independentes. Considerando sistemas bifásicos, a forma usual para a modelagem tensão viscosa da fase contínua é expressa na equação 2.18.

$$\hat{\mathbf{T}} = \left[\left(k - \frac{2}{3}\mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{U}) - p \right] \mathbf{I} + 2\mu \mathcal{D} \quad (2.18)$$

onde o tensor deformação, \mathcal{D} , é dado por

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) \quad (2.19)$$

A definição do tensor turbulento é dada por:

$$\mathbf{T}^{turb} = -\rho \langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle \quad (2.20)$$

onde $\langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle$ é a média do tensor da função de correlação da flutuação da velocidade. Tal que $\mathbf{u}' = \mathbf{u} - \mathbf{U}$, onde \mathbf{u} é a velocidade instantânea e \mathbf{U} a velocidade média da fase contínua ($\mathbf{U} = \langle \mathbf{u} \rangle$).

Os termos da diagonal principal desse tensor $\langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle$ representam as tensões normais e os elementos fora da diagonal principal representam as tensões cisalhantes [52].

Assim, a tensão efetiva pode ser escrita como

$$\mathbf{T}^{eff} = \left[\left(k - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{U}) - p_\alpha \right] \mathbf{I} + 2\mu_\alpha \mathcal{D} - \rho \langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle \quad (2.21)$$

Os modelos de turbulência para as tensões turbulentas podem ser classificados em quatro categorias:

- Modelos algébricos de viscosidade turbulenta,
- Modelos diferenciais lineares de viscosidade turbulenta,
- Modelos de tensões de Reynolds e
- Modelos não-lineares de viscosidade turbulenta em conjunto com modelos algébricos de tensões de Reynolds

Três dessas categorias são modelos para a viscosidade turbulenta, μ^t . O conceito de viscosidade turbulenta relaciona as tensões turbulentas como proporcionais ao gradiente da velocidade média do escoamento. Portanto, a viscosidade turbulenta é uma propriedade que depende apenas da turbulência local. Essa relação é conhecida como a teoria de Boussinesq [53, 54]. Dessa forma o modelo para escoamento

turbulento tridimensional fornece:

$$\mathbf{T}^{turb} = -\rho\langle\mathbf{u}'\mathbf{u}'\rangle = -\frac{2}{3}\rho k\mathbf{I} + 2\mu^t\mathcal{D} + \mathbf{T}^{add} \quad (2.22)$$

onde o primeiro termo representa as tensões normais, o segundo as tensões cisalhantes e \mathbf{T}^{add} é uma *fonte de tensão*. Ele é um termo que torna possível incluir termos que não foram idealmente considerados nesse modelo. Por exemplo, a tensão de Sato.

SATO e SEKOUGUCHI [55] propõem a introdução de uma fonte de tensão que modela o aumento da turbulência devido a existência de uma partícula maior que as escalas da turbulência em escoamentos gás-líquido.

$$\mathbf{T}^{sato} = -2C_\mu\rho\phi d_p|\mathbf{U}_d - \mathbf{U}|\mathcal{D} \quad (2.23)$$

onde C_μ é uma constante originária do modelo $k - \epsilon$, cujo valor usual é 0,09.

O modelo $\kappa - \epsilon$ é um modelo de duas equações para viscosidade turbulenta. Certamente é o modelo mais difundido dentre os modelos de turbulência, embora não resolva a turbulência perto da parede. A equação exata para κ pode ser obtida diretamente da equação de Navier-Stokes (multiplicando a mesma pela flutuação da velocidade e tomando a média temporal dos termos da equação) [54, 56]. A equação da energia de dissipação turbulenta, ϵ , surge de um modelo que correlacionada a κ e ϵ com a viscosidade turbulenta utilizando-se da teoria de Boussinesq [53, 54].

O modelo κ - ϵ composto pelas seguintes equações:

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\kappa) = \nabla \cdot \left[\mu + \frac{\mu^t}{\sigma_k} \right] \nabla\kappa + \tilde{P}_k - \rho\epsilon \quad (2.24)$$

e

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\epsilon) = \nabla \cdot \left[\mu + \frac{\mu^t}{\sigma_\epsilon} \right] \nabla\epsilon + \frac{\epsilon}{\kappa} \left(C_{\epsilon 1}\tilde{P}_k - C_{\epsilon 2}\rho\epsilon \right) \quad (2.25)$$

onde \tilde{P}_k é dado por

$$\tilde{P}_k = \nabla \mathbf{U} : \mathcal{D} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{U} (3\mu^t \nabla \cdot \mathbf{U} + \rho\kappa) \tilde{P}_{kb} \quad (2.26)$$

onde

$$\tilde{P}_{kb} = -\frac{\mu^t}{\rho\sigma_\rho} \mathbf{g} \cdot \nabla \rho \quad (2.27)$$

E, finalmente, a viscosidade turbulenta é dada por:

$$\mu^t = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (2.28)$$

As constantes desse modelo são: $C_\mu = 0,09$, $C_{\epsilon 1} = 1,44$, $C_{\epsilon 2} = 1,92$, $\sigma_k = 1$ e $\sigma_\epsilon = 1,3$.

Essa tese não executa simulações CFD, portanto, não há motivos para detalhar outros modelos de turbulência da fase contínua.

Para a modelagem da turbulência da fase dispersa é possível utilizar mais de uma abordagem. A primeira possibilidade é desprezar a turbulência da fase dispersa. Isso significa que a turbulência da fase contínua não afeta a movimentação das partículas. Essa aproximação é razoável apenas para partículas com muita inércia.

Outra abordagem consiste em utilizar a equação 2.21 e a teoria de Boussinesq tal qual mencionado [46]. Porém, modificando a forma de obter a viscosidade turbulenta. Ao invés de obter a viscosidade turbulenta de um modelo de turbulência, ele é obtido através de uma relação com a viscosidade turbulenta da fase contínua, dada por:

$$\mu_d^{turb} = \mu^{turb} \frac{\rho_d}{\rho} \quad (2.29)$$

Observe que a viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido, mas uma definição obtida através de modelo. Modelos esses que, em uma forma mais

completa, são função do gradiente de velocidade. Essa abordagem é válida para partículas que possuem tempos de resposta pequeno (partículas pequenas).

PALADINO [30] mostrou que considerar o modelo dado pela equação 2.29 e desprezar completamente a existência de turbulência do meio disperso produzem quase o mesmo resultado considerando escoamento de bolhas de ar em água. Pequenas diferenças da fração de vazio perto da parede são as únicas alterações observadas.

Capítulo 3

A Modelagem da Distribuição de Densidade Numérica das Partículas

3.1 Equação de balanço populacional

A modelagem da evolução no espaço e no tempo da distribuição de densidade numérica das partículas é necessária para modelar os escoamentos polidispersos. Para isso, deve-se modelar a interação existente entre as partículas. Esta modelagem é realizada através da chamada *equação de balanço populacional* (EBP) [9, 18, 25, 57].

As partículas da fase dispersa podem estar distribuídas segundo diversas características, como tamanho, composição, energia térmica, idade, etc., que são as chamadas *variáveis internas*, \mathbf{v} . Por outro lado, as coordenadas espaciais, \mathbf{z} , são denominadas *variáveis externas*. O número de partículas por unidade de volume com determinadas propriedades e por unidade destas propriedades internas é a chamada função de distribuição de densidade numérica de partícula, $f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)$, onde o índice α representa a respectiva fase.

A equação de balanço populacional é obtida pela integração da equação de Boltz-

mann aplicada ao problema de muitos corpos. Fornecendo a conservação da função de distribuição de densidade numérica de partículas, $f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)$, em um processo que inclui as interações possíveis entre as mesmas. A equação de balanço populacional é dada por [57]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} = & -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \left[\dot{\mathbf{Z}} f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t) \right] + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \left[D_z \cdot (\nabla_{\mathbf{z}} \cdot D_z^T f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)) \right] \\ & -\nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left[\dot{\mathbf{V}} f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t) \right] + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left[D_v \cdot (\nabla_{\mathbf{v}} \cdot D_v^T f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)) \right] \\ & + H(\{f_\alpha\}; \mathbf{z}, \mathbf{v}, t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Para facilitar a notação, chamaremos $f_\alpha(\mathbf{z}, \mathbf{v}, t)$ de f_α , sem explicitar a dependência, exceto nos casos onde essa dependência for importante para o entendimento do equacionamento. Na equação 3.1, $\partial f_\alpha / \partial t$ é a variação da função de distribuição de tamanhos de partículas com o tempo, t . O termo

$$-\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \left[\dot{\mathbf{Z}} f_\alpha \right] + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \left[D_z \cdot (\nabla_{\mathbf{z}} \cdot D_z^T f_\alpha) \right]$$

refere-se a movimentação da partícula no espaço físico. A primeira parte do termo considera o deslocamento da partícula devido a efeitos determinísticos, onde $\dot{\mathbf{Z}}$ é a taxa de variação da variável externa (note que variação da posição é velocidade). O segundo termo refere-se ao deslocamento da partícula devido a efeitos estocásticos, onde $D_z \cdot D_z^T$ é o coeficiente de difusão anisotrópico de f_α . O termo

$$-\nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left[\dot{\mathbf{V}} f_\alpha \right] + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left[D_v \cdot (\nabla_{\mathbf{v}} \cdot D_v^T f_\alpha) \right]$$

refere-se a variação da variável interna no sistema, por efeitos determinísticos e estocásticos. Nos problemas associados a escoamentos polidispersos, pelo menos uma das variáveis internas, se não for uma única, está quase sempre relacionada com o tamanho da partícula (massa, volume ou diâmetro). Sendo assim, este termo representa para essa variável o crescimento da partícula [9, 18, 25, 35, 57].

Por fim, o termo $H(\{f_\alpha\}; \mathbf{z}, \mathbf{v}, t)$ é o termo fonte da equação de balanço popula-

cional, e daqui por diante será representado apenas por H . Este termo modela todos os efeitos que não foram considerados pelos outros termos da equação 3.1, como a nucleação, a agregação e a quebra de partículas. Neste texto, o termo de fonte será responsável apenas pelos efeitos de quebra e agregação de partículas, sendo dado por:

$$H = B_B - D_B + B_C - D_C \quad (3.2)$$

onde B_B , D_B , B_C e D_C são os termos de nascimento, B , e morte, D , de partículas por quebra e agregação, respectivamente. Para o caso de uma distribuição monovariada, ou seja, uma única variável interna da partícula, $\mathbf{v} = [v]$, onde v é uma variável aditiva que define tamanho, como massa ou volume, estes termos são expressos por [57]:

$$B_C(t, v, \mathbf{z}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \int_0^v f_\alpha(t, v - v', \mathbf{z}) f_\alpha(t, v', \mathbf{z}) a(v - v', v', \mathbf{y}) dv' \quad (3.3)$$

$$D_C(t, v, \mathbf{z}, \mathbf{y}) = \int_0^\infty f_\alpha(t, v, \mathbf{z}) f_\alpha(t, v', \mathbf{z}) a(v, v', \mathbf{y}) dv' \quad (3.4)$$

$$B_B(t, v, z, \mathbf{y}) = \int_{v'}^\infty \varsigma(v', \mathbf{y}) P(v|v', \mathbf{y}) b(v', \mathbf{y}) f_\alpha(t, v', \mathbf{z}) dv' \quad (3.5)$$

$$D_B(t, v, \mathbf{z}, \mathbf{y}) = b(v, \mathbf{y}) f_\alpha(t, v, \mathbf{z}) \quad (3.6)$$

onde o vetor $\mathbf{y} = \mathbf{y}(t, \mathbf{z})$ representa as variáveis da fase contínua que interferem nos processos de quebra e agregação, $a(v, v', \mathbf{y})$ é a freqüência de agregação local das partículas de propriedades v e v' , $b(v', \mathbf{y})$ é a freqüência de quebra da partícula de propriedade v' , $\varsigma(v', \mathbf{y})$ é o número de filhas produzidas na quebra da partícula de propriedade v' e $P(v|v', \mathbf{y})$ é a probabilidade condicional de uma partícula de propriedade v ser gerada quando da quebra de uma partícula de propriedade v' . Nestas equações, assumiu-se a hipótese de que a quebra e a coalescência são fenômenos locais. Dessa forma as funções de quebra e coalescência (a , b , ς , P) somente dependem de (t, \mathbf{z}) através das variáveis da fase contínua.

No caso de uma propriedade não aditiva ou quando é necessário considerar mais de uma propriedade interna na distribuição de partículas, é necessário incluir o jacobiano das variáveis internas no termo de nascimento por coalescência (equação 3.3). Mais detalhes podem ser encontrados em RAMKRISHNA [57] ou SILVA [25].

Se v for massa, ou volume no caso da partícula ser incompressível, a função $P(v|v', \mathbf{y})$ tem as seguintes propriedades [57]:

1. nenhuma partícula-filha tem massa maior que a partícula-mãe:

$$P(v|v', \mathbf{y}) = 0, \quad \forall v > v' \quad (3.7)$$

2. a probabilidade total de serem geradas partículas-filhas com massa menor ou igual a massa da partícula-mãe é unitária:

$$\int_0^{v'} P(v|v', \mathbf{y}) dv = 1 \quad (3.8)$$

3. a massa se conserva na quebra, de forma que a massa de todas as partículas-filhas é igual a massa da partícula-mãe:

$$\varsigma(v') \int_0^{v'} v P(v|v', \mathbf{y}) dv = v' \quad (3.9)$$

Os modelos de quebra de partículas precisam modelar as funções $b(v', \mathbf{y})$, $\varsigma(v', \mathbf{y})$ e $P(v|v', \mathbf{y})$. Em muitos dos modelos de quebra de partículas, a função básica que é modelada é

$$\Omega(v|v', \mathbf{y}) \equiv \varsigma(v', \mathbf{y}) P(v|v', \mathbf{y}) b(v', \mathbf{y}) \quad (3.10)$$

que é a taxa específica de quebra de partícula de propriedade v' gerando partículas filhas com massa entre v e $v + dv$. Note que a propriedade dada pela equação 3.8 permite escrever que

$$b(v', \mathbf{y}) = \frac{1}{\varsigma(v', \mathbf{y})} \int_0^{v'} \Omega(v|v', \mathbf{y}) dv' \quad (3.11)$$

e

$$P(v|v', \mathbf{y}) = \frac{\Omega(v|v', \mathbf{y})}{\int_0^{v'} \Omega(v|v', \mathbf{y}) dv'} \quad (3.12)$$

A modelagem da agregação é a modelagem da frequência de agregação, $a(v, v', \mathbf{y})$, que representa a fração dos pares de partículas de massa v e v' que estão em uma certa *vizinhança* do ponto \mathbf{z} .

O produto $a(v, v', \mathbf{y}) f_\alpha(t, v', \mathbf{z}) f_\alpha(t, v, \mathbf{z}) dv dv'$ fornece a taxa de coalescência de pares de partículas de massa v e v' no ponto \mathbf{z} por unidade de volume físico. Uma integração dupla em todo o domínio de v e v' fornece a taxa global de coalescência por unidade de volume físico que ocorre em torno do ponto \mathbf{z} que originou a função $a(v, v', \mathbf{y})$.

3.2 Metodologias numéricas para a solução da EBP

A equação de balanço populacional é uma equação integro-diferencial quando inclui os termos de quebra e agregação de partículas. Isso significa que existe um número muito pequeno de soluções analíticas para esse problema [20, 58–60], sendo necessária a utilização de métodos numéricos.

Dentre os métodos numéricos existentes para a solução da EBPs destacam-se duas categorias: o *método dos momentos* e o *método das classes*. Existem outras técnicas, como as baseadas em métodos estocásticos e resíduos ponderados, mas o custo computacional de técnicas semelhantes frente ao ganho da qualidade dos resultados torna a utilização desses métodos algo extremamente desfavorável [25, 57].

O método das classes [9, 27, 57, 61, 62] consiste em assumir que a população de bolhas encontra-se distribuída entre valores característicos da propriedade de interesse, sendo representadas em cada classe pelos pivôs, x_k . Assim, definindo n classes de partículas, N_k é o momento seccional (ou restrito à classe) de ordem zero

da distribuição numérica de partículas, sendo k o índice que representa as classes. N_k inclui todas as partículas com propriedades entre m_k e m_{k+1} ($m_k < x_k < m_{k+1}$).

De forma que:

$$N_k = \int_{m_k}^{m_{k+1}} f(m, \mathbf{z}) dm \quad (3.13)$$

onde N_k é o número médio de partículas com propriedade m em torno de x_k .

Considere a EBP (equação 3.1) onde a convecção e a difusão em relação às variáveis internas e todas as dependências em relação as variáveis externas possam ser desprezadas e assumindo que $\mathbf{v} = m$, obtemos:

$$\frac{df(m, t)}{dt} = H(m, t) \quad (3.14)$$

Seguindo as instruções de KUMAR e RAMKRISHNA [61], aplicando o método das classes na equação 3.14 e expandindo o termo fonte para considerar apenas a quebra e a agregação de partículas, a EBP transforma-se em um sistema definido para N_k com $k = 1 \dots n$ dada por:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \sum_{\substack{j \geq k \\ \xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1}}} [1 - \frac{1}{2} \delta'_{j,k}] \lambda_i a(\xi_j, \xi_k) N_j N_k \\ & - N_i \sum_k a(\xi_i, \xi_k) N_k + \sum_{k \geq i} \varsigma(\xi_k) \psi_{i,k} b(\xi_k) N_k - b(\xi_i) N_i \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde

$$\lambda_i = \begin{cases} \frac{\xi_{i+1} - (\xi_j + \xi_k)}{\xi_{i+1} - \xi_i}, & \xi_i \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1} \\ \frac{(\xi_j + \xi_k) - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}}, & \xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_i \end{cases} \quad (3.16)$$

e

$$\psi_{i,k} = \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{\xi_{i+1} - v}{\xi_{i+1} - \xi_i} P(v | \xi_k) dv + \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} \frac{v - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}} P(v | \xi_k) dv \quad (3.17)$$

O principal problema do método das classes de pivô fixo é que para grandes

modificações na distribuição de tamanhos é necessário um número muito alto de classes para permitir a boa representação da distribuição. O problema é que quando o número de classes aumenta muito, o número de partículas contido nele diminuí e isso prejudica a acurácia da solução [62].

KUMAR e RAMKRISHNA [62] propuseram o método das classes de pivô móvel. Essa técnica permite que os pivôs se modifiquem conforme a necessidade para compensar erros nos termos de nascimento de partículas, sendo possível resolver o mesmo problema (considerando apenas os momentos conservados) com um número menor de pivôs em relação ao método das classes de pivô fixo. Entretanto, a acurácia não é mais alta na representação dos momentos que não são conservados na formulação. E também possui um alto custo computacional, quando a variação da distribuição no espaço físico é considerada [63, 64].

Outro método semelhante ao método das classes é o PPDC (*Parallel parent and daughter classes method*), desenvolvido por BOVE *et al.* [65]. Esse método utiliza uma decomposição de operadores e várias malhas distintas para as partículas nascidas no domínio, separando os efeitos de quebra e coalescência em diferentes malhas. BOVE *et al.* [65] utilizaram funções de Dirac para decompor a função de distribuição numérica de partículas e uma discretização temporal utilizando Euler explícito para obter o segundo conjunto de equações. Considerando o problema originalmente enunciado na equação 3.14, obtém-se o seguinte sistema:

$$\frac{N_i(t^{n+1}) - N_i(t^n)}{\Delta t} = -N_i(t^n) \sum_{j=1}^M a(\xi_i, \xi_j) N_j(t^n) - b(\xi_i) N_i(t^n), \quad (3.18)$$

$$i = 1, \dots, M$$

$$\frac{A_{ij}(t^{n+1}) - A_{ij}(t^n)}{\Delta t} = \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{ij}\right) a(\xi_i, \xi_j) N_i(t^n), \quad (3.19)$$

$$i, j = 1, \dots, M, j \geq i$$

$$\frac{B_k^{(i)}(t^{n+1}) - B_k^{(i)}(t^n)}{\Delta t} = \varsigma_i b(\xi_i) N_i(t^n) \int_{m_k^{(i)}}^{m_{k+1}^{(i)}} P(m|\xi_i) dm, \quad (3.20)$$

$$i = 1, \dots, M, k = 1, \dots, NB^{(i)}$$

Após resolver o sistemas das equações 3.18, 3.19 e 3.20, pode-se calcular a distribuição numérica de partículas utilizando a versão expandida em funções de Dirac, f_e definida por

$$f_e(m, t^{n+1}) = \sum_{i=1}^M N_i(t^{n+1}) \delta(m - \xi_i) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M A_{ij}(t^{n+1}) \delta(m - y_{ij}) \quad (3.21)$$

$$+ \sum_{i=1}^M \sum_{k=1}^{NB^{(i)}} B_k(t^{n+1}) \delta(m - \lambda_k^{(i)} \xi_i)$$

onde, $y_{ij} = \xi_i + \xi_j$ e $\lambda_k^{(i)}$, tal que

$$\lambda_k^{(i)} = 1 - \lambda_{NB^{(i)}+1-k}^{(i)} \quad (3.22)$$

$$0 \leq \lambda_k^{(i)} \leq 1$$

são as abscissas nas malha de agregação e quebra, respectivamente.

Nesse método, a cada iteração no tempo é necessário calcular a função de distribuição utilizando a equação 3.21, resultando em um sistema de equações não lineares no momento seccional e nos pivôs. Embora consiga expressar a distribuições de densidade numérica das partículas com um número menor de pivôs que o necessário para a mesma acurácia utilizando o método das classes original, esse método não permitiu a resolução dos problemas multivariados. Detalhes adicionais podem ser encontrados na literatura [27, 65]

O método dos momentos [57, 66, 67] consiste em operar a EBP com a integral

de definição de momento de ordem k :

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{+\infty} v^k f(\mathbf{z}, v, t) dv \quad (3.23)$$

Entretanto, com raras exceções, essa técnica apresenta um problema de fechamento no número de equações quando a quebra e a agregação são consideradas. Para resolver o problema para os primeiros $2n$ momentos é necessário modelar o comportamento de momentos de ordem superior.

Para contornar esse problema, MCGRAW [68] propôs o QMOM (*Quadrature Method of Moments*). O QMOM é baseado no método dos momentos, mas não possui o mencionado problema de fechamento, pois ele utiliza a quadratura de Gordon [69] para realizar o fechamento por quadratura, cujos pesos w_i e abscissas ξ_i , são aqueles que satisfazem:

$$\mu_k = \int_0^{+\infty} v^k f(v, t) dv = \sum_{i=1}^n \xi_i^k w_i, \quad k = 0, \dots, 2n - 1 \quad (3.24)$$

Aplicando o método de MCGRAW [68] a equação de balanço populacional simplificada (equação 3.14), obtém-se para os $2n$ primeiros momentos:

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_k}{dt} = \bar{H}_k^{(n)} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [(\xi_i + \xi_j)^k - \xi_i^k - \xi_j^k] a(\xi_i, \xi_j) w_i w_j \\ &+ \sum_{i=1}^n b(\xi_i) w_i [\zeta(\xi_i) \pi_k(\xi_i) - \xi_i^k], \quad k = 0, \dots, 2n - 1 \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde

$$\pi_k(\xi_i) = \int_0^{\xi_i} v^k P(v | \xi_i) dv \quad (3.26)$$

Este método tem uma larga faixa de aplicações, é rápido e bastante preciso na maioria dos problemas quando comparado com outros métodos [27], mas também apresenta desvantagens.

O QMOM não consegue representar de forma simples problemas multivariados e o método não representa de forma realista sistemas polidispersos com um forte acoplamento entre as variáveis internas e as velocidades das fases [25, 70]. O método também requer que os pesos e as abscissas sejam calculados pela a quadratura de Gordon [69] a cada integração (no tempo, no caso do exemplo da equação 3.25). Além disso, ele perde eficiência computacional quando o número de momentos é alto.

Dessa forma, MARCHISIO e FOX [70] propuseram o DQMOM (*Direct Quadrature Method Of Moments*). O DQMOM é baseado no QMOM, mas enquanto o QMOM resolve os primeiros $2n$ momentos e, através destes, calcula as abscissas e pesos, o DQMOM calcula as abscissas e pesos usando a quadratura de Gordon [69] apenas para a condição inicial. A partir desse ponto ele acompanha a evolução temporal dos campos de abscissas e pesos. Dessa forma, a quadratura de Gordon [69] somente é utilizada na inicialização do problema.

A equação 3.27 define como a função de distribuição monovariada no volume considerando sistema incompressível deve ser representada em função dos pesos e abscissas no DQMOM.

$$f(\mathbf{z}, v, t) = \sum_{i=1}^n w_i(\mathbf{z}, t) \delta[v - \xi_i(\mathbf{z}, t)] \quad (3.27)$$

Desprezando a variação na variável interna e considerando distribuição monovariada no volume, a equação de balanço populacional (equação 3.1), pode ser reescrita na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha(\mathbf{z}, v, t)}{\partial t} &= -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot [\dot{\mathbf{Z}} f_\alpha(\mathbf{z}, v, t)] + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot [D_z \cdot (\nabla_{\mathbf{z}} \cdot D_z^T f_\alpha(\mathbf{z}, v, t))] \\ &+ H(\mathbf{z}, v, t) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Substituindo nesta equação a definição dada na equação 3.27, obtém-se, após leve

manipulação algébrica, a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\bar{H}_k^{(n)} &= \sum_{i=1}^n \delta[v - \xi_i(\mathbf{z}, t)] \left[\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\mathbf{Z}}_i w_i) - \nabla \cdot [D_z \nabla w_i] \right] \\
&- \sum_{i=1}^n \delta'[v - \xi_i(\mathbf{z}, t)] \left[\frac{\partial \varsigma_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\mathbf{Z}}_i \varsigma_i) - \nabla \cdot [D_z \nabla \varsigma_i] \right] \\
&+ \sum_{i=1}^n \delta'[v - \xi_i(\mathbf{z}, t)] \xi_i \left[\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\mathbf{Z}}_i w_i) - \nabla \cdot [D_z \nabla w_i] \right] \\
&- \sum_{i=1}^n \delta''[v - \xi_i(\mathbf{z}, t)] [D_z w_i (\nabla \xi_i) \cdot (\nabla \xi_i)]
\end{aligned} \tag{3.29}$$

onde $\varsigma_i = w_i \xi_i$ é a abscissa ponderada. Assim, defini-se:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\mathbf{Z}}_i w_i) - \nabla \cdot [D_x \nabla w_i] &= \varphi_i \\
\frac{\partial \varsigma_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\mathbf{Z}}_i \varsigma_i) - \nabla \cdot [D_x \nabla \varsigma_i] &= \Psi_i
\end{aligned} \tag{3.30}$$

onde φ_i e Ψ_i são termos fonte das equações de transporte dos pesos e abscissas ponderadas, que, substituindo as equações 3.30 na equação 3.29, são calculadas por:

$$(1 - k) \sum_{i=1}^n \xi_i^k \varphi_i + k \sum_{i=1}^n \xi_i^{k-1} \Psi_i = \bar{H}_k^{(n)} + \bar{C}_k \tag{3.31}$$

onde

$$\bar{H}_k^{(n)} = \int_0^{+\infty} v^k H(\mathbf{z}, v, t) dv \tag{3.32}$$

que é a mesma definição dada no QMOM (equação 3.25), e e

$$\bar{C}_k = k(k-1) \sum_{i=1}^n \xi_i^{k-2} C_i \tag{3.33}$$

onde

$$C_i = D_z w_i (\nabla \xi_i) \cdot (\nabla \xi_i) \tag{3.34}$$

O processo de solução consiste em, a partir da condição inicial, obter os pesos e abscissas ponderadas iniciais através da quadratura de Gordon [69]. Com esse resultado, calcula-se \bar{C}_k e $\bar{H}_k^{(n)}$ com as equações 3.33 e 3.32. Com esses termos

calcula-se φ_i e Ψ_i com a equação 3.31. Assim, é possível resolver as equações 3.30 para calcular as novas abscissas e os novos pesos ponderados com os quais volta-se as equações 3.33 e 3.32. A cada passo de integração obtém-se os novos pesos e abscissas. O DQMOM pode ser estendido para problemas multivariados e envolvendo crescimento e difusão da variável (ou variáveis) internas [70].

SILVA *et al.* [27] realizou testes comparativos de desempenho envolvendo o DQMOM, o QMOM, o método das classes e o PPDC e chegou a conclusão de que o DQMOM representa a melhor alternativa para o acoplamento PB-CFD dentre os testados.

3.3 Acoplamento PB-CFD

Em face da necessidade de modelar a distribuição de tamanho das partículas, é necessário acoplar essa informação a modelagem do escoamento multifásico multifluido usualmente utilizada, e vista no capítulo 2. SILVA [25] apresentou uma ampla revisão dos conceitos e das diversas abordagens que são utilizadas na literatura, além de propor uma abordagem própria.

De forma bem resumida e utilizando-se das equações apresentadas ao longo do texto até aqui, os métodos de acoplamento mais usuais tratam cada classe de partículas como uma fase independente do sistema. A resolução da EBP (equação 3.1) resulta em uma informação de diâmetro e fração volumétrica para cada fase. São essas informações que são utilizadas nas equações constitutivas de interação entre fases (força arrasto, equação 2.4, massa virtual, equação 2.12, força de sustentação, equação 2.11). Por sua vez, a resolução das equações da modelagem multifásica com estas equações constitutivas e um modelo de turbulência, equação 2.21, fornece informações do escoamento, como a energia de dissipação turbulenta e velocidade de cada fase, que são utilizadas pelas equações constitutivas da EBP (os modelos de quebra e coalescência) e pela EBP propriamente dita.

Qualquer erro introduzido em qualquer equação pode produzir um resultado global errado. Por exemplo, um erro na equação de turbulência pode ser responsável por alterar o campo de taxa específica de dissipação de energia cinética turbulenta e de velocidade de tal forma que a quebra e a coalescência podem ser estimadas de forma errada. Isso fará com que a EBP calcule valores errados de fração volumétrica da fase e do seu(s) diâmetro(s) característico(s) para a equação de conservação de momento multifásica. Ou seja, entra-se em um ciclo de desvios sucessivos que pode levar a uma solução completamente diferente do resultado experimental do processo modelo.

Capítulo 4

A coalescência de partículas

Coalescência é a agregação de partículas fluidas com perda de identidade das partículas que se agregaram. Como mencionado anteriormente, a agregação é modelada pela frequência de agregação, $a(d_i, d_j)$ (aqui, expressa em função do diâmetro). A frequência de coalescência é tradicionalmente dividida em duas funções distintas: a *frequência de colisão*, $\theta_{ij} = \theta(d_i, d_j)$, e a *eficiência* ou *probabilidade condicional de coalescência*, $\lambda_{ij} = \lambda(d_i, d_j)$, onde i e j representam duas partículas quaisquer. De forma que a frequência de coalescência, $a(d_i, d_j)$ é obtida por:

$$a(d_i, d_j) = \theta(d_i, d_j) \lambda(d_i, d_j) \quad (4.1)$$

Em termos de fenômeno físico, isso significa que uma partícula para coalescer precisa, antes de qualquer coisa, colidir com uma outra partícula. A frequência dessa ocorrência é dada pela frequência de colisão. Uma vez que ocorra a colisão, a intensidade, o ângulo de colisão, a característica do escoamento e as propriedades das partículas definem se haverá ou não a coalescência através da eficiência de coalescência. A figura 4.1 mostra as 3 etapas principais da coalescência de partículas, figura 4.1a a situação física inicial, figura 4.1b aproximação e contato realizado a uma certa velocidade característica, e figura 4.1c deformação e drenagem do filme

após o contato. A deformação pode ou não ocorrer dependendo das características da interface.

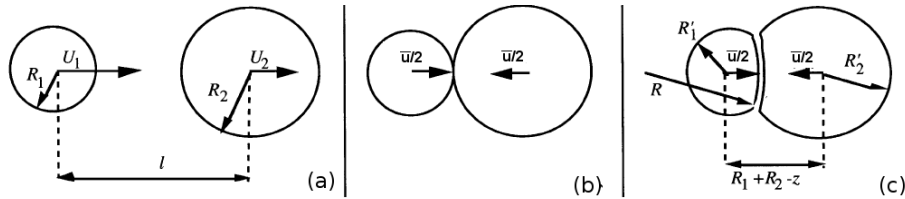


Figura 4.1: Etapas da agregação (extraído de KAMP *et al.* [71]). (a) situação física inicial (b) aproximação e contato realizado a uma velocidade $\bar{u}/2$ e (c) deformação e drenagem do filme após o contato

Os modelos de coalescência não foram avaliados experimentalmente com muito cuidado até o presente momento [18]. Falta clareza na modelagem e, principalmente, faltam dados experimentais confiáveis para validar o modelo desenvolvido.

CHESTERS [5] fez a primeira revisão sobre os modelos de coalescência da literatura. Sua revisão incluiu os mecanismos de interação devido à hidrodinâmica do escoamento e devido à turbulência do meio contínuo conhecidos até aquele momento, mas não incluiu outros mecanismos conhecidos como, por exemplo, a colisão devido à ação de forças de campo. Sua revisão é referência obrigatória, sendo que muito do que é apresentado em seu artigo é normalmente referenciado como tendo sido desenvolvido pelo próprio CHESTERS [5].

MITRE [18] apresenta a revisão dos mecanismo escritos posteriormente a CHESTERS [5], detalhando, inclusive, mecanismos que não estão completamente desenvolvidos, mesmo na data de hoje. Parte desse estudo prévio será reapresentado nesse trabalho com complementações.

LIAO e LUCAS [6] apresentam uma extensa revisão dos modelos de coalescência existentes na literatura. Destacam-se por apresentar modelos que normalmente são ignorados na literatura moderna por se considerar que são modelos completamente equivocados, como o modelo de WRIGHT e RAMKRISHNA [72]. LIAO e LUCAS [6] demonstram uma grande capacidade de sintetizar o amplo assunto em

poucas páginas tornando-se, assim, uma revisão importante, muito embora possua uma análise crítica pouco profunda, principalmente por não possuir dados experimentais que permitissem uma análise mais contundente.

4.1 Modelos de frequência de colisão

Os modelos de frequência de colisão são divididos de acordo com a origem fundamental do mecanismo que induz a colisão. Os principais mecanismos listados pela literatura são: colisão *devido à turbulência da fase contínua*, *devido à ação produzida por forças de campo*, como a gravidade, *devido a interação com a hidrodinâmica do escoamento*, excluindo dessa categoria os modelos de colisão devido à turbulência da fase contínua, e colisão *devido às interações tipo partícula-partícula*.

Pode-se generalizar os modelos de frequência de colisão como sendo o produto de uma área característica, $S_{i,j}$, por uma velocidade característica, u_r e corrigidos por um parâmetro, C , que pode ter origem teórica e/ou empírica.

$$\theta_{ij} = CS_{ij}u_r \quad (4.2)$$

Nessa forma genérica, utiliza-se a notação, u_r , para a velocidade característica e/ou velocidade relativa entre as partículas. A diferença de definição é oriunda da forma com que cada autor trata esse termo e do mecanismo ao qual se refere o modelo. Aqui, utiliza-se a mesma notação para simplificar a forma de escrever o termo e por compreender que toda velocidade característica é um tipo de velocidade relativa entre as partículas, para o processo em consideração. Esclarece-se apenas que a velocidade relativa entre as partículas **não** é sempre a diferença entre a velocidade na direção do deslocamento de cada partícula, como por exemplo, a diferença de velocidade terminal no caso de partículas em ascensão em uma coluna de bolhas.

A área característica na maior parte dos modelos é a área da seção reta de colisão

entre as partículas, definida como

$$S_{ij} = \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} = \pi (r_i r_j)^2 \quad (4.3)$$

Essa informação somente será destacada novamente apenas quando a definição da área da característica, S_{ij} , for diferente da descrita na equação 4.3.

Para alguns autores [4], o parâmetro multiplicativo do modelo, C , é uma simples constante teórica que não necessita de ajustes utilizando dados experimentais. Entretanto, existem estudos que comprovam a necessidade da utilização de constantes empíricas em casos particulares [10, 11, 14, 18]. Para uniformizar a nomenclatura, o parâmetro C pode ser diferente do citado no artigo original, isso é feito para que o produto $CS_{ij}u_r$ seja sempre igual à taxa de colisão mencionada no artigo. A diferença pode existir porque como foi dito, alguns autores [5, 73] agrupam a razão $\pi/4$, que originalmente pertence a definição da área da seção reta de colisão, equação 4.3, no valor do parâmetro, entre outras questões.

Note que, independentemente da origem do fenômeno que induz a aproximação das partículas, elas apenas vão colidir se a distância entre os seus centros diminuir. Isto significa que entre as partículas existe uma velocidade de aproximação a ponto dessa distância ser no mínimo igual a soma dos raios de cada partícula.

A grande diferença entre os modelos, seja entre as diferentes origens dos mecanismos de colisão ou entre os modelos de um mesmo mecanismo de colisão, está na forma e no conceitos agregados aos termos da equação 4.2, em especial, ao termo de velocidade característica.

A tabela 4.1 resume os modelos apresentados após a apresentação dos modelos e mecanismo que segue.

4.1.1 Modelos devido a interação com a hidrodinâmica do escoamento

A rigor, a colisão devido a interação com a turbulência também é uma interação com a hidrodinâmica do escoamento. Porém, essa classe de modelos inclui apenas os fenômenos que não são originados pela turbulência do meio contínuo.

Existe apenas um único modelo nessa categoria, que é o enunciado por FRIEDLANDER [74], que não faz referência sobre a origem da modelagem, porém, CHESTERS [5] cita VON SMOLUCHOWSKI [75] como autor desse mesmo modelo. Usualmente, a literatura o referencia como o modelo de FRIEDLANDER [74] e assim será feito nesse texto.

FRIEDLANDER [74] considera apenas partículas (pequenas gotas ou finas partículas sólidas no ar) de mesmo tamanho em um escoamento laminar e descreve a velocidade característica das partículas como um produto da taxa de cisalhamento e o diâmetro da partícula, ou seja

$$u_r = \dot{\gamma}d \tag{4.4}$$

Conforme as equações 4.2 e 4.3 têm-se o parâmetro $C = 8/3\pi$. Também é possível ver este modelo referenciado na literatura como sendo o modelo de CHESTERS [5] para coalescência em escoamento em regime laminar.

O mecanismo de FRIEDLANDER [74] considera que a velocidade da partícula é a velocidade do fluido.

Considerando o escoamento laminar, o mecanismo de colisão devido a interação com a hidrodinâmica do escoamento é o principal mecanismo que promove a colisão entre as partículas, portanto, não pode ser desprezado.

PRINCE e BLANCH [4] aplicaram esse mesmo modelo ao escoamento turbulento

de uma coluna de bolhas e caracterizaram o tipo de colisão como “colisão devido a recirculação de líquido na coluna”. Na prática, PRINCE e BLANCH [4] executaram duas modificações. A primeira considera que as partículas podem ter tamanhos distintos. A segunda foi uma proposta para a estimativa da taxa de cisalhamento. Dessa forma, a velocidade característica de PRINCE e BLANCH [4] é definida como:

$$u_r = \frac{\overline{dU_l}}{dR} \frac{(d_i + d_j)}{2} \quad (4.5)$$

onde $\overline{dU_l}/dR$ é a taxa de cisalhamento médio ao longo do raio da coluna da fase contínua, ou seja, a média da derivada da velocidade axial da fase contínua, U_l , à coordenada radial, R , no equipamento utilizado pelos autores. PRINCE e BLANCH [4] utilizaram a taxa de cisalhamento médio porque eles não resolveram o problema considerando a coordenada radial do equipamento. Para tanto, assumiram que o perfil de velocidade ao longo do raio da coluna de bolhas pode ser descrito pela equação:

$$U_l = U_{l,\max} \left[1 - \frac{R^2}{(0,7R_T)^2} \right] \quad (4.6)$$

onde R_T é o raio total da coluna e $0,7R_T$ é o ponto de inversão de sinal da velocidade axial da fase contínua. Isso permitiu obter a taxa de cisalhamento médio como sendo

$$\frac{\overline{dU_l}}{dR} = 5,3 - \frac{U_{l,\max}}{R_T} \quad (4.7)$$

Portanto, restava propor um modelo para a velocidade máxima da fase contínua. PRINCE e BLANCH [4] utilizaram o modelo de velocidade máxima de MIYAUCHI e SHYU [76]. Esse modelo foi validado para colunas de bolhas operando em regime turbulento com velocidade superficial de gás superior a 4 cm/s.

KAMP *et al.* [71] também afirmaram que esse fenômeno é importante apenas quando a velocidade superficial de gás é baixa e destaca, também, que esse tipo de fenômeno torna-se importante nas pequenas escalas de tamanho do equipamento (escala laboratorial).

Conforme as equações 4.2 e 4.3, o modelo de PRINCE e BLANCH [4] possui o parâmetro multiplicativo C é igual a $4/3$.

Não há uma forma definitiva para generalização do modelo de frequência de colisão definida por CHESTERS [5]. Por similaridade com outros modelos [4], pode-se considerar que

$$u_r = \dot{\gamma} \frac{(d_i + d_j)}{2} \quad (4.8)$$

ou

$$u_r = \dot{\gamma} (d_i^2 + d_j^2)^{1/2} \quad (4.9)$$

Um trabalho posterior do mesmo autor [71] permite supor que a forma da equação 4.8 seja a forma indicada, porque representa a velocidade relativa média entre duas partículas separadas a uma distância $(d_i + d_j)/2$. Enquanto a abordagem da equação 4.9 somente possui justificativa teórica quando considera-se movimentação randômica de partículas, o que não é o caso desse tipo de mecanismo.

PRINCE e BLANCH [4] passaram a idéia de que não utilizaram o produto da velocidade característica pela área de seção reta de colisão. Ao contrário de CHESTERS [5] que enuncia esse conceito geral e o aplica.

FRIEDLANDER [74] diz que, em um certo volume de controle, a frequência de colisão é proporcional a taxa de cisalhamento, a diferença de velocidade terminal, a flutuação de velocidade da partícula, etc.

FRIEDLANDER [74] sugere que a constante multiplicativa seja ajustada empiricamente, sendo de ordem unitária.

O desenvolvimento básico do modelo de SAFFMAN e TURNER [77] para a frequência de colisão de partículas devido à turbulência do meio contínuo considerando partículas menores que os menores vórtices do escoamento, permite compreender que fisicamente a abordagem conceitual de CHESTERS [5] é a correta.

A diferença entre o modelo de SAFFMAN e TURNER [77] e o modelo enunciado por FRIEDLANDER [74] é que a taxa de cisalhamento é diferente (a primeira para escoamento turbulento e a segunda para o escoamento laminar) e isso resulta em um modelo com filosofia igual, mas fórmula e aplicação diferente.

A similaridade entre os modelos de FRIEDLANDER [74] e SAFFMAN e TURNER [77], sugere que a generalização do modelo de CHESTERS [5] deve ser feita utilizando a equação 4.8, pois d é o diâmetro das duas partículas envolvidas (por que elas são do mesmo tamanho).

4.1.2 Modelos devido à ação produzida por forças de campo

Novamente, o único modelo existente na literatura é o atribuído a FRIEDLANDER [74].

PRINCE e BLANCH [4] e LEHR e MEWES [78] aplicam essa modelagem em seus estudos. A diferença entre os dois é que PRINCE e BLANCH [4] consideram que as frequências de colisão devido aos diferentes efeitos são completamente independentes e aditivos, enquanto LEHR e MEWES [78] consideraram que apenas um dos fenômenos pode prevalecer por vez.

Para esse caso, a velocidade característica do sistema é a velocidade relativa entre as partículas e é definida pela diferença de velocidade terminal de cada partícula, que eram bolhas de ar em água para ambos os autores.

$$u_r = |u_{T,i} - u_{T,j}| \quad (4.10)$$

Esse modelo não considera que a partícula mais rápida pode estar “acima” da partícula mais lenta, sendo, portanto, a forma modelada pelos autores, pendentes de um fator multiplicativo de 1/2 para que ela seja coerente. FRIEDLANDER [74] também utilizou um parâmetro empírico nesse modelo.

Todavia a diferença de velocidade terminal como velocidade relativa não representa a realidade para sistemas onde a partícula gera uma zona de esteira significativa. Em sistemas ar-água, o que realmente ocorre é a captura de uma bolha na zona de esteira de uma outra bolha [18, 79–85]. E foi exatamente para este efeito, que será visto na próxima seção, que WU *et al.* [81], COLELLA *et al.* [82] e WANG *et al.* [84] propuseram modelos.

Note que FRIEDLANDER [74] utiliza esse conceito para sistema de pequenas partículas formadas por gotas e finas partículas sólidas no ar. Considerando a viscosidade do meio contínuo (ar) e o tamanho das partículas envolvidas, o uso da equação 4.10 é justificado.

Não há análises na literatura sobre a utilização desse mecanismo em sistemas líquido-líquido. Tudo que pode afirmar é que em sistemas líquido-líquido onde a diferença de densidade entre as fases é pequena e as partículas são pequenas, existe uma grande tendência de que o mecanismo tenha pouca importância devido ao comportamento da velocidade terminal das partículas. Nesta situação, as diferenças na velocidade terminal perde a sua importância porque as pequenas gotas tendem a assumir a velocidade local da fase contínua [37, 38].

4.1.3 Modelos devido às interações partícula-partícula

Todos os estudos envolvendo esse tipo de abordagem foram feitos em sistemas ar-água. Portanto, esse tipo de mecanismo também é conhecido como interação bolha-bolha [18, 81, 84].

O promissor modelo de WU *et al.* [81] é restrito à colisão entre partículas de mesmo tamanho. WANG *et al.* [84] tentaram generalizar o modelo de WU *et al.* [81] para partículas de tamanhos diferentes, mas entre inúmeros problemas, obtiveram um modelo de frequência de colisão que é assimétrico, ou seja, a frequência de colisão da partícula i com a partícula j é diferente da frequência de colisão da partícula j

com a partícula i . Portanto, essa generalização está errada.

O modelo de WU *et al.* [81] descreve a velocidade relativa entre as partículas utilizando o modelo de ISHII e CHAWLA [86] dado por:

$$u_r = \left(\frac{gd}{3C_D} \frac{\rho - \rho_d}{\rho} \right)^{1/2} \quad (4.11)$$

com:

$$C_D = \frac{24}{\mathcal{R}e_p} (1 + 0,1\mathcal{R}e_p^{0,75}) \quad (4.12)$$

e

$$\mathcal{R}e_p = \frac{\rho u_r d}{\mu} (1 - \phi) \quad (4.13)$$

Conforme as equações 4.2, 4.3 e 4.11, o parâmetro desse modelo é igual a $C = (1/2)F(d/L_w)$, onde L_w é o comprimento da esteira da bolha. WU *et al.* [81] afirmaram que a forma funcional de $F(d/L_w)$ não é importante desde que a esteira da bolha não esteja completamente estabilizada, pois nessas condições, a esteira é cerca de 5–7 vezes maior que a bolha. Portanto, $F(d/L_w)$ é função de uma relação de tamanhos que varia pouco e pode ser aproximada e incluída na constante multiplicativa.

O modelo de COLELLA *et al.* [82] usa a velocidade relativa entre as partículas como a diferença de velocidade terminal entre elas,

$$u_r = |u_{T,i} - u_{T,j}| \quad (4.14)$$

e define uma área característica utilizando a razão entre o volume de influência da zona de esteira de uma partícula de tamanho d_i , V_i^{BOX} , e a distância média entre as bolhas no sistema considerado, $\langle l_w \rangle$.

$$S_{ij} = \frac{V_i^{BOX}}{\langle l_w \rangle} \quad (4.15)$$

COLELLA *et al.* [82] assumiram que o volume de influência da zona de arrasto, V_i^{BOX} , possui o formato cônico e pode ser calculado segundo o modelo de NEVERS e WUT [87].

No modelo de COLELLA *et al.* [82] o parâmetro $C = 1/\langle l_w \rangle$ deve ser determinado experimentalmente, com $\langle l_w \rangle$ possuindo ordem de magnitude unitária (pela definição de $\langle l_w \rangle$ essa observação não é razoável, porém é o que é dito pelos autores). RIBEIRO e LAGE [11] aplicaram o modelo de COLELLA *et al.* [82] na modelagem da distribuição tamanhos de bolhas em um evaporador de contato direto e determinaram que o parâmetro realmente possui a ordem de magnitude aproximadamente unitária, mas possui valor diferente para cada condição de velocidade superficial de gás considerada no estudo.

Note que o modelo de COLELLA *et al.* [82] também é assimétrico em relação a interação das partículas i e j . RIBEIRO e LAGE [11] resolveram esse problema realizando uma média entre as duas formas de interação, de forma simplificada (omitindo o modelo de eficiência considerado por RIBEIRO e LAGE [11]) significa escrever

$$S_{ij} = \frac{V_i^{BOX} + V_j^{BOX}}{2\langle l_w \rangle} \quad (4.16)$$

4.1.4 Modelos devido à turbulência do meio contínuo

A modelagem da frequência de colisão devido à turbulência do meio contínuo é a forma da frequência de coalescência mais estudada até o momento. Daqui por diante fica subentendido que a turbulência é sempre do meio contínuo. Pode-se afirmar que nenhum modelo devido a outro efeito qualquer conseguiu propor uma formulação minimamente confiável para utilização prática.

Originalmente, a frequência de colisão devido a movimentação randômica das partículas é modelada baseado na idéia da teoria cinética dos gases. Isso resulta exatamente na equação 4.2 considerando a área característica como a área definida

na equação 4.3. É evidente que existe uma grande aproximação feita ao chamar gotas e bolhas de partículas pontuais de volume aproximadamente zero. Nesse caso, supõem-se que erros associados a esse aproximação sejam corrigidos na modelagem da eficiência e em uma constante empírica que multiplica a frequência de colisão.

De forma simplificada, a turbulência possui duas escalas que servem de divisores em relação ao tamanho dos vórtices que compõem o escoamento: (i) a escala de Kolmogorov e (ii) a escala integral.

A escala de Kolmogorov corresponde ao menor tamanho dos vórtices do escoamento, no qual a energia do vórtice é convertida em energia térmica. Essa escala é definida por:

$$\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4} \quad (4.17)$$

A escala integral, L , corresponde ao maior tamanho dos vórtices no escoamento. Essa escala está relacionada com o tipo de equipamento/escoamento estudado. Por exemplo, em um tubo circular, a escala integral é aproximadamente igual ao diâmetro do tubo.

De forma geral, $L \gg \eta$ para $Re \gg 1$.

Os modelos de frequência de colisão devido à turbulência (e também de quebra como será visto mais a frente) dependem do tamanho dos vórtices que são considerados os responsáveis pelo fenômeno.

Usualmente, assume-se que os vórtices que interagem com a partícula para promover a movimentação que induz a colisão pertencem a mesma faixa de tamanho das partículas [4–6, 73]. Portanto, se a partícula possui um tamanho menor que a escala de Kolmogorov, são os vórtices de tamanho da escala de Kolmogorov que são responsáveis por promover a colisão. Essa é a faixa de tamanho de partículas sub-Kolmogorov. Se a partícula possui um tamanho maior que a escala de Kolmogorov, mas menor que a escala integral, essa é uma partícula na denominada

faixa de tamanho inercial e seria afetada somente com vórtices da mesma faixa de tamanho. Por outro lado, se a partícula é grande a ponto de possuir um tamanho maior que a escala integral do escoamento, então, diz-se que os maiores vórtices controlam o fenômeno [6, 88].

Portanto, existe uma proposta diferente de modelagem da frequência de colisão em relação ao tamanho da partícula. Sabe-se que é completamente irracional supor que as partículas “calculam” o valor das escalas do escoamento para saber como devem se comportar. Portanto, é razoável supor que para cada faixa de tamanho de partícula exista um mecanismo predominante e que exista uma região intermediária de tamanhos de partícula onde os diferentes mecanismos atuam simultaneamente.

Modelos de frequência de colisão para partículas sub-Kolmogorov

De acordo com CHESTERS [5], quando a partícula é menor que a escala de Kolmogorov as forças que governam a colisão são predominantemente viscosas e a velocidade da partícula é aproximadamente igual a velocidade da fase contínua. CHESTERS [5] considerou que as duas partículas possuem o mesmo tamanho, d .

KOCAMUSTAFAOGULLARI e ISHII [89] complementaram CHESTERS [5] afirmando que a velocidade da partícula é aproximadamente igual a velocidade da fase contínua e que as forças que governam a colisão são predominantemente viscosas quando a diferença de densidade entre as fases possa ser negligenciada.

Nessas condições, CHESTERS [5] definiu a velocidade característica como:

$$u_r = \dot{\gamma}d \quad (4.18)$$

Nesse caso, a taxa de cisalhamento turbulento dos menores vórtices do escoamento é definida por:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} \quad (4.19)$$

Considerando as equações 4.2, 4.3, 4.18 e 4.19, o parâmetro desse modelo é enunciado por CHESTERS [5] como $C = (4/\pi)(2\pi/15)^{(1/2)}$.

CHESTERS [5] cita SAFFMAN e TURNER [77] como autores desse modelo. Contudo, toda bibliografia cita CHESTERS [5] como se ele tivesse desenvolvido o modelo.

SAFFMAN e TURNER [77] estudaram a movimentação de gotas em nuvens. Esse caso representa a situação no qual as partículas possuem a velocidade aproximadamente igual à velocidade da fase contínua e a escala do escoamento é muito maior que o tamanho da partícula. Utilizando-se dessas afirmações e assumindo que a média quadrática do gradiente de velocidade é igual a $\epsilon/15\nu$ e que o gradiente de velocidade é normalmente distribuído, obtém-se que o gradiente médio de velocidade é aproximadamente igual a $\sqrt{2\pi\epsilon/15\nu}$.

Dessa forma, SAFFMAN e TURNER [77] derivam analiticamente que a taxa de colisão é dada por $(\pi d^2/4)\dot{\gamma}d$ quando $d \ll \eta$. Para SAFFMAN e TURNER [77], $r = d/2$ é o raio da partícula e $2r$ é o que separa os dois centros quando as partículas são iguais, e é a distância entre os centros e não o diâmetro das partículas que eles estão considerando durante a modelagem, dessa forma eles escrevem a modelagem final generalizando o tamanho das partículas como sendo:

$$\theta = C (r_i + r_j)^3 \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} \quad (4.20)$$

tal que $C = (4/\pi)(2\pi/15)^{(1/2)}$.

Esse modelo, que será particularmente importante nos resultados da tese, será atribuído a CHESTERS [5].

Modelos de frequência de colisão para partículas da faixa de tamanhos inercial

Dos modelos frequência de colisão devido à turbulência para partículas que estão na faixa de tamanhos inercial, destacam-se, por questões históricas, os modelos de KUBOI *et al.* [90], COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] e de PRINCE e BLANCH [4]. KUBOI *et al.* [90] é a referência mais antiga e seu modelo de frequência de colisão restringe-se a partículas de mesmo tamanho e caracteriza a velocidade característica como sendo dada por

$$u_r = \sqrt{\overline{u^2(d)}} = \sqrt{\beta (\epsilon d)^{2/3}} = \sqrt{2} (\epsilon d)^{1/3} \quad (4.21)$$

onde β é um parâmetro empírico e determinado experimentalmente pelos autores como sendo igual a 2. O modelo referenciado e utilizado por CHESTERS [5], onde o parâmetro multiplicativo é $C = \sqrt{8/(3\pi)} \approx 0,92$, considerando as equações 4.2 e 4.3.

Apesar disso, KUBOI *et al.* [90] ficou mais conhecido por fornecer a expressão da média do quadrado das flutuações de gotas e bolhas dispersas no escoamento turbulento, $\overline{u^2(d)}$, que é utilizada por inúmeros trabalhos da literatura, como os que serão mencionados a seguir, tanto na coalescência, quanto na quebra de partículas. Embora, por vezes ocorra modificações na interpretação do que é o tamanho característico e do valor do parâmetro empírico β .

O trabalho de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] foi um dos primeiros estudos a propor a modelagem da quebra e coalescência de gotas utilizando conceitos fenomenológicos e para partículas de diferentes tamanhos. Em um trabalho posterior (TSOURIS e TAVLARIDES [91]) foi corrigido de um erro na definição da área da seção reta de colisão, S_{ij} , cometido por COULALOGLOU e TAVLARIDES [73]. A velocidade característica do modelo de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] é

definida por:

$$u_r = \left[\overline{u^2(d_i)} + \overline{u^2(d_j)} \right]^{1/2} \quad (4.22)$$

onde $\overline{u^2(d_i)}$ é a média do quadrado das flutuações de velocidade associadas aos vórtices de tamanho d_i , que são também as flutuações de gotas e bolhas dispersas no escoamento turbulento segundo resultados experimentais de KUBOI *et al.* [90] e é dado por:

$$\overline{u^2(d)} = \beta (\epsilon d)^{2/3} = 2 (\epsilon d)^{2/3} \quad (4.23)$$

A relação matemática de média quadrática utilizada por COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] possui como justificativa teórica o fato de que as partículas flutuam no escoamento de forma randômica.

O modelo dado pela equação 4.22 é exatamente o modelo de PRINCE e BLANCH [4], a diferença entre os modelos está no parâmetro empírico multiplicativo da frequência de colisão, para PRINCE e BLANCH [4], $C = 1$, considerando $\beta = 2$. COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] determina experimentalmente que o valor é igual a $C = 2,8 \times 10^{-6}$, incluindo nesse valor o parâmetro β . Ele também admite que sua metodologia experimental (método de transmissão de luz) não é favorável à determinação da frequência de coalescência e supõem que o valor do parâmetro seja ainda menor que o determinado. Dessa forma, COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] recomenda a determinação experimental do parâmetro C em cada caso. É interessante observar que ele determina experimentalmente um valor de parâmetro que não é da ordem unitária, como também foi determinado em outros trabalhos da literatura [10, 14, 18]. Note-se que o experimento de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] consistia de gotas em vasos agitados enquanto o experimento de PRINCE e BLANCH [4] consistia de bolhas em coluna de borbulhamento.

Vários trabalhos surgiram após a publicação de PRINCE e BLANCH [4]. A maior parte desses trabalhos propuseram ligeiras modificações na forma que é utilizada a média do quadrado da velocidade de flutuação (equação 4.21). Por exemplo,

LEHR e MEWES [78] utilizaem:

$$u_r = \left[\overline{u(d_i)u(d_j)} \right]^{1/2} \quad (4.24)$$

LEHR e MEWES [78] não justificaram a escolha da média geométrica utilizada pelo seu modelo. Limitaram-se dizer que consideravam que as freqüências de colisão devido a diferentes efeitos não são independentes e somativas e que apenas a freqüência de colisão devido à turbulência ou devido à diferença de velocidade terminal, o que possuir maior valor, deve prevalecer em um dado caso.

Apenas KAMP *et al.* [71] sugeriu modificações significativas na forma de modular a freqüência de colisão. Ele se baseou no trabalho de KUBOI *et al.* [90]. Na definição de KUBOI *et al.* [90], a velocidade característica é a velocidade relativa de aproximação de duas partículas que estão a uma distância d . Se não há escorregamento entre as fases, a flutuação de velocidade de uma partícula é dada pela flutuação de velocidades existentes no meio contínuo.

KAMP *et al.* [71] estendeu esse modelo considerando uma distribuição contínua de partículas. Ele considerou $d_m = (d_i + d_j)/2$ e integrou a freqüência de colisão de KUBOI *et al.* [90] em todo domínio de tamanhos das partículas d_i e d_j . Dessa forma ele obteve:

$$u_r^2 = C_t^2 k_{mv}^2 (\epsilon d_m)^{2/3}; \quad d_m = (d_i + d_j) / 2 \quad (4.25)$$

onde u_r é uma medida de velocidade relativa entre duas partículas a uma distância d_m . Para o modelo de KAMP [71], considerando a equação 4.3 e 4.2, a constante multiplicativa é $C = C_{kc} \sqrt{8/(3\pi)}^{1/2}$, onde C_{kc} é um parâmetro empírico, que segundo KAMP [71] possui ordem unitária.

O modelo de velocidade relativa de KAMP *et al.* [71] (equação 4.25) inclui duas outras modificações. A primeira modificação é inclusão do fator C_t com o objetivo de considerar a diferença entre as velocidades de flutuação das bolhas e da fase

líquida existente devido a grande diferença dos valores de densidade. A segunda modificação no modelo foi à inclusão do fator, k_{mv} , que possui o objetivo de corrigir a variação do valor do coeficiente de massa virtual, C_{mv} , durante a colisão.

O coeficiente de massa virtual varia durante a colisão, pois quando as partículas se aproximam a sua forma varia. Considerando a conservação de energia cinética e uma grande diferença entre as densidades dos fluidos (o que é adequado para os sistemas gás-líquido) e sendo $k_{mv} \cong u_r^2(d_i, d_j)_0 / u_r^2(d_i, d_j)_\infty$, onde o subscrito 0 refere-se a velocidade relativa das partículas quando estas estão em contato e ∞ refere-se ao seu valor quando estas estão infinitamente afastadas, temos $u_r^2(d_i, d_j)_0 C_{mv0} = u_r^2(d_i, d_j)_\infty C_{mv\infty}$ o que determina $k_{mv} \cong 1 / \sqrt{C_{mv0} / C_{mv\infty}}$.

Quando as partículas são de igual tamanho ($d_i = d_j$) o coeficiente virtual de massa possui os valores limites de 0,5 e 0,803 quando as partículas estão infinitamente afastadas ou em contato, respectivamente. Portanto, $k_{mv} \cong 1 / \sqrt{1,61}$. Por outro lado, quando a razão dos diâmetros é muito distinta, ($d_i/d_j \rightarrow \infty$), os coeficientes de massa virtual sofrem com uma diminuição de 4 vezes o seu valor, sendo 0,125 e 0,201 quando as partículas estão infinitamente afastadas ou em contato, respectivamente, o que também fornece $k_{mv} \cong 1 / \sqrt{1,61}$.

Conclui-se que um fator constante e igual a $1 / \sqrt{1,61}$ constitui uma razoável aproximação para o valor de k_{mv} . Esse valor varia sensivelmente com a razão das densidades entre as fases dispersa e contínua, ou seja, usar este valor constante somente é uma boa aproximação em sistemas gás-líquido que tenha pequena variação da razão de densidades entre as fases no sistema.

Para sistemas gás-líquido, o modelo de KAMP *et al.* [71] é o modelo mais evoluído dentre os modelos existentes de frequência de colisão devido à turbulência considerando bolhas pertencentes a faixa de tamanho inercial.

Modelos de frequência de colisão para a grandes escalas

COLIN *et al.* [88] argumentou que, se uma das partículas é maior que a escala integral do escoamento, os vórtices (que são menores que a escala integral) não são capazes de mover a partícula em questão. A partícula é arrastada pelas grandes escalas do escoamento. Portanto, essa partícula não possui movimento relativo devido a turbulência, ocorrendo movimento apenas devido ao escoamento médio.

Logo, segundo COLIN *et al.* [88], não ocorre colisão de partículas devido à turbulência do meio contínuo quando as duas partículas são maiores que a escala integral. A única forma de ocorrer movimento relativo é quando pelo menos uma das partículas tenha a escala de tamanho na faixa inercial. COLIN *et al.* [88] não considera a possibilidade de colisão entre uma partícula sub-Kolmogorov e uma partícula maior que a escala integral.

COLIN *et al.* [88] estendeu o modelo de KAMP *et al.* [71] para incluir esse caso, propondo utilizar o modelo de KAMP *et al.* [71] quando as duas partículas estão na faixa inercial de tamanho como originalmente proposto

$$u_r^2 = C_t^2 k_{mv}^2 \left(\epsilon \frac{d_i + d_j}{2} \right)^{2/3} \quad (4.26)$$

e realizando uma modificação no diâmetro característico quando apenas uma das partículas, d_i for menor que a escala integral. Nesse caso, a velocidade relativa é função exclusiva da partícula com menor tamanho, sendo descrita por:

$$u_r^2 = C_t^2 k_{mv}^2 (\epsilon d_i)^{2/3} \quad (4.27)$$

O restante da modelagem, isto é, as aproximações e considerações feitas por COLIN *et al.* [88] são idênticas às utilizadas e/ou definidas por KAMP *et al.* [71], portanto, seu modelo também está restrito a bolhas.

4.1.5 Considerações adicionais sobre os modelos de frequência de colisão

Existe uma pequena variedade de modelos da literatura que são puramente estatísticos. Além de simplificados, esses modelos estão fortemente ligados ao equipamento que foi utilizado em seu desenvolvimento. No geral, eles não necessariamente seguem aquilo que nesse texto foi chamado de equação geral da frequência de colisão (equação 4.2).

Por exemplo, CASAMATTA e VOGELPOHL [92] considera um modelo de frequência de colisão devido à movimentação randômica das partículas (em uma aproximação do movimento devido à turbulência) como sendo proporcional ao produto do volume de ambas as partículas. Um fato notável desse modelo, é que o parâmetro empírico utilizado não é adimensional.

WRIGHT e RAMKRISHNA [72] desenvolveram um modelo de frequência de colisão para tanques agitados que possui três parâmetros empíricos,

$$\theta = C_1 \phi^{C_2} U_N^{C_3} (d_i^{(3/2)} + d_j^{(3/2)}) \quad (4.28)$$

onde U_N é a velocidade de agitação do tanque. Nesse modelo, C_1 também não é adimensional e sua unidade depende do parâmetro C_3 .

Há outros modelos, mas não foram considerados minimamente interessantes ou relevantes para serem descritos.

Também existe na literatura outras modificações que, em teoria, são fatores de correção que podem ser incluídos diretamente na equação geral (equação 4.2), ou seja, matematicamente são formas funcionais multiplicadora para a equação 4.2, sendo:

$$\theta = C F_1 S_{ij} u_r \quad (4.29)$$

Por exemplo, considerar que a existência das partículas reduz o espaço livre para a movimentação e causa um aumento na frequência de colisão, $F_1 = F_{1,cl}$. Dentre os modelos, pode-se citar:

- WU *et al.* [81]

$$F_{1,cl} = \frac{1}{\phi_{\max}^{1/3} (\phi_{\max}^{1/3} - \phi^{1/3})} \quad (4.30)$$

- HIBIKI e ISHII [83]

$$F_{1,cl} = \frac{1}{\phi_{\max} - \phi} \quad (4.31)$$

- WANG *et al.* [84]

$$F_{1,cl} = \frac{\phi_{\max}}{\phi_{\max} - \phi} \quad (4.32)$$

Por ser uma função da fração de vazios, esse termo possui importância, mas o conhecimento e a utilização dele é pequeno, não havendo referências de utilização desses modelos por outros autores. Também não há na literatura um banco de dados experimentais capaz de permitir distinguir estas opções de modelagem neste nível de detalhe.

A tabela 4.1 resume os modelos de frequência de colisão mencionados nesse trabalho. Nessa tabela, os modelos são apresentados de forma completa, ou seja, ele é o resultado do produto $CS_{ij}u_r$.

4.2 Modelos de eficiência de coalescência

Após uma partícula ter colidido com outra, inúmeros fatores determinam se ela irá coalescer ou não. Por exemplo, a intensidade da colisão, a existência de surfactantes, a deformação das partículas, a intensidade de turbulência do meio contínuo, o tamanho das partículas e as substâncias que compõem as fases são relevantes entre outros fatores [4–6, 73, 93].

Tabela 4.1: Principais modelos de frequência de colisão

Modelos devido a interação com a hidrodinâmica do escoamento	
FRIEDLANDER [74] e CHESTERS [5], com $C = 8/3\pi$ e $d_i = d_j = d$	
$\theta = C \frac{\pi d^2}{4} \dot{\gamma} d$	
PRINCE e BLANCH [4]	
$\theta_{ij} = \frac{\pi (d_i + d_j)^3}{6} \left(5,3 - \frac{U_{l,\max}}{R_T} \right)$	
Modelos devido à ação produzida por forças de campo	
FRIEDLANDER [74] e PRINCE e BLANCH [4], com $C = 1$	
$\theta_{ij} = C \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} u_{T,i} - u_{T,j} $	
LEHR e MEWES [78], se $ u_{T,i} - u_{T,j} > \sqrt{2} \left[\epsilon \sqrt{d_i d_j} \right]^{1/3}$	
$\theta_{ij} = \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} u_{T,i} - u_{T,j} $	
Modelos devido à interação partícula-partícula	
WU <i>et al.</i> [81], com $d_i = d_j = d$	
$\theta = \frac{\pi d^2}{8} F(d/l_w) \left(\frac{gd}{3C_D} \frac{\rho - \rho_d}{\rho} \right)^{1/2}$	
COLELLA <i>et al.</i> [82], segundo o autor, $\langle l_w \rangle = 1$ para seus dados experimentais	
$\theta_{ij} = S_{ij} = \frac{V_i^{BOX}}{\langle l_w \rangle} u_{T,i} - u_{T,j} $	
Modelos devido à turbulência, com $d_i, d_j < \eta$	
CHESTERS [5], com $d_i = d_j = d$	
$\theta_{ij} = \left(\frac{2\pi}{15} \right)^{1/2} d^2 \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} d$	
Modelos devido à turbulência, com $\eta < d_i, d_j < L$	
COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], com $C = 2,8 \times 10^{-6}/\sqrt{2}$	
PRINCE e BLANCH [4] com $C = 1$	
KUBOI <i>et al.</i> [90], com $d_i = d_j$ e $C = \sqrt{8/(3\pi)}$	
$\theta_{ij} = C \sqrt{2} \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} \epsilon^{1/3} \left(d_i^{2/3} + d_j^{2/3} \right)^{1/2}$	
LEHR e MEWES [78], com $\sqrt{2} \left[\epsilon \sqrt{d_i d_j} \right]^{1/3} > u_{T,i} - u_{T,j} $	
$\theta_{ij} = \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} \sqrt{2} \left(\epsilon \sqrt{d_i d_j} \right)^{1/3}$	
continua na próxima página	

continuação da tabela 4.1

KAMP *et al.* [71], com $C = 1$, $k_{mv} = 1/\sqrt{1,61}$

$$\theta_{ij} = CC_t k_{mv} \left(\frac{8}{3\pi}\right)^{1/2} \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} \left(\epsilon \frac{d_i + d_j}{2}\right)^{1/3}$$

Modelos devido à turbulência, com $\eta < d_i < L$ e $d_j > L$

COLIN *et al.* [88]

$$\theta_{ij} = CC_t k_{mv} \left(\frac{8}{3\pi}\right)^{1/2} \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} (\epsilon d_i)^{1/3}$$

A modelagem da eficiência consiste em determinar se a colisão de duas partículas resultará na geração de uma nova partícula com a perda da identidade das partículas mãe ou, se, após a colisão, as partículas se afastaram sem perda ou modificação de suas características iniciais.

LIAO e LUCAS [6] citam a existência de três metodologias de modelagem da eficiência de coalescência: Modelos baseados na relação de energia cinética e interfacial [94–96], modelos baseado na velocidade crítica de aproximação das partículas [78] e modelos baseados na drenagem do filme líquido formado entre as partículas, sendo estes últimos detalhados a seguir.

Os modelos baseados na relação da energia cinética e interfacial das partículas afirmam que a coalescência ocorrerá com maior probabilidade quanto menor for razão entre a energia interfacial e a energia cinética da colisão. SOVOVA [94], principal divulgador desse conceito de modelagem, utilizou o modelo de drenagem de filme líquido formado entre as partículas para complementar seu modelo de eficiência. A literatura não permite concluir sobre a qualidade e validade dessa idéia, visto que esse tipo de modelagem é praticamente ignorada na literatura.

O modelo de eficiência baseado na velocidade de aproximação crítica de LEHR e MEWES [78] (único nessa modalidade) diz que a coalescência ocorre com maior probabilidade quanto menor for a velocidade de aproximação real em relação à

velocidade de aproximação crítica. Portanto, o modelo de eficiência de LEHR e MEWES [78] não possui sentido físico como probabilidade condicional de eficiência [6]. Uma possível interpretação desse termo é que eficiência para os autores poderia significar uma correção ao valor da frequência de colisão, mas o texto não esclarece isso.

Por fim, os modelos de eficiência baseados na drenagem do filme líquido formado entre as partículas durante o evento da coalescência são os tipos de modelos normalmente utilizados e desenvolvidos pela literatura e são esses modelos que, daqui por diante, se entenderá como um modelo de eficiência de coalescência.

No geral, todos os fatores do modelo de eficiência de coalescência são matematicamente obtidos a partir de dois modelos distintos: um para o *tempo de contato* ou *tempo de interação*, t_{int} , e outro para o *tempo de coalescência* ou *tempo de drenagem*, t_{coal} .

O tempo de interação é contado a partir do momento que duas partículas colidem e começam a se deformar (se forem deformáveis) para a formação de um filme líquido entre eles até o momento que as partículas se afastam ou coalescem. O tempo de coalescência é o tempo necessário para que o filme líquido formado entre as duas partículas seja drenado e se rompa, permitindo que as partículas coalesçam. Portanto, se o tempo de interação for muito pequeno, não haverá tempo para que o filme seja completamente drenado e, logo, não haverá coalescência, pois as partículas se afastaram uma da outra.

A modelagem da eficiência consiste em modelar esses dois termos adequadamente. Na prática, é a razão entre o tempo de coalescência e de contato o fator principal que deve ser modelado. Em teoria, se $t_{coal} > t_{int}$ ocorre coalescência, do contrário, se $t_{coal} < t_{int}$ não ocorre coalescência. Infelizmente, essa correlação só seria precisa se os modelos de tempo de coalescência e de contato levassem em consideração todas as características físicas existentes.

ROSS [97] assumiu que o tempo de contato e de coalescência são variáveis randômicas e assumiu uma distribuição normal para o tempo de coalescência para determinar a eficiência de coalescência, obtendo:

$$\lambda(d_i, d_j) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t_{coal}}{t_{int}}\right) \exp\left(\frac{1}{2} \frac{\sigma_{t_{coal}}^2}{t_{int}^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{2} \sigma_{t_{coal}}^2 - t_{coal} t_{int}}{2 t_{int} \sigma_{t_{coal}}}\right) \quad (4.33)$$

onde $\sigma_{t_{coal}}^2$ é a variância da variável t_{coal} .

COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] simplificaram a equação 4.33 considerando que o tempo de coalescência não é uma variável normalmente distribuída e que o tempo de contato mantém-se como variável randômica, portanto, $\sigma_{t_{coal}} = 0$, obtendo;

$$\lambda(d_i, d_j) = \exp\left(-\frac{t_{coal}}{t_{int}}\right) \quad (4.34)$$

A expressão 4.34 é o modelo de eficiência mais utilizado na literatura. No decorrer do tempo, a comunidade científica dedicou-se a desenvolver modelos para o tempo de coalescência e de contato sem retornar ou tentar validade a base fundamental estabelecida por ROSS [97].

Portanto, assim como no caso dos modelos de frequência de colisão, existem vários modelos de tempo de coalescência e de tempo de contato. Muito embora, nesse caso, o número de modelos seja expressivamente maior. A questão é que cada fator associado ao sistema influencia esses dois tempos. Fatores como a existência de eletrólitos ou a presença de surfactantes influenciam sensivelmente na escolha dos modelos de tempo de coalescência e tempo de contato. Nesse texto serão considerados apenas alguns modelos para sistemas com ausência de surfactantes e eletrólitos.

Para facilitar a exposição dos principais modelos, as subseções seguintes apresentarão os modelos de tempo de coalescência e tempo de interação isoladamente. Posteriormente, um resumo apresentará a forma final dos principais modelos de eficiência.

4.2.1 Tempo de drenagem ou tempo de coalescência

O tempo de drenagem é influenciado pela característica de rigidez da superfície da partícula, isto é, se elas são deformáveis ou rígidas, e pela mobilidade da interface, isto é, se são imóveis, parcialmente móveis ou completamente móveis.

A análise do tempo de drenagem tradicionalmente considera que as partículas possuem o mesmo tamanho. CHESTERS [98] e CHESTERS e HOFMAN [99] provaram que as equações governantes para drenagem de filmes entre partículas de tamanho diferentes são iguais as equações para partículas iguais com raio equivalente, r_{eq} , definido por:

$$\frac{1}{r_{eq}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \right) \quad (4.35)$$

Portanto, nesta seção, onde estiver r ou d , pode-se compreender r_{eq} e d_{eq} .

Interfaces rígidas

CHESTERS [5] utilizou a relação de Poiseuille para escoamentos entre superfícies *quasi*-paralelas para determinar o tempo de drenagem em função da força de interação ou colisão, F_c , entre duas partículas esféricas que se aproximam com a velocidade dh/dt . Integrando a expressão dh/dt entre limites constantes de espessura de filme inicial e final, pode-se obter:

$$t_{coal} = \frac{3\pi\mu r^2}{2F_c} \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \quad (4.36)$$

Para bolhas, a aproximação de interface rígida somente faz sentido para partículas muito pequenas (menores que 1 mm) [5, 6]. Não há estudos da literatura da utilização desse tipo de modelo em gotas, mas é possível afirmar que as observações feitas para as bolhas também são válidas para gotas, pois essas seriam ainda mais próximas de partículas rígidas.

Existem algumas teorias que questionam a utilização de superfícies paralelas para esse tipo de escoamento (afinal, se as partículas são esféricas e elas não se deformam, existe uma curvatura na aproximação das partículas). Contudo, a aproximação de superfícies *quasi*-paralelas ainda é a principal hipótese utilizada [5, 6].

Interfaces deformáveis e imóveis

Para interfaces deformáveis e imóveis, a drenagem do filme é governada pelas forças viscosas, ou seja, o escoamento no filme entre as duas partículas é um escoamento laminar. A aproximação de interfaces deformáveis e imóveis somente é válida para sistemas com baixa densidade numérica de partículas ou com uma certa quantidade de surfactante. Baseado no modelo de MACKAY e MASON [100], CHESTERS [5] obteve:

$$t_{coal} = \frac{3\mu F_c r^2}{16\pi\sigma^2} \left(\frac{1}{h_f^2} - \frac{1}{h_i^2} \right) \quad (4.37)$$

COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] partiram da equação 4.37 para desenvolver seu modelo de eficiência de coalescência, que é um dos mais citados e utilizados da literatura [6].

Interfaces deformáveis e parcialmente móveis

Para interfaces deformáveis e parcialmente móveis, CHESTERS [5] utilizou a hipótese de “fluxo quase constante” para calcular o tempo de drenagem, obtendo:

$$t_{coal} = \frac{\mu_d \pi F_c^{1/2}}{2(2\pi\sigma/r)^{3/2}} \left(\frac{1}{h_f} - \frac{1}{h_i} \right) \quad (4.38)$$

Interfaces deformáveis e móveis

Esse é o tipo de sistema mais estudado na literatura. CHESTERS [5] propõe a modelagem do escoamento do filme considerando placas paralelas e com interfaces completamente móveis. Quando o escoamento é controlado pelas forças viscosas, o tempo de drenagem é dado por:

$$t_{coal} = \frac{3\mu r}{2\sigma} \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \quad (4.39)$$

e quando as forças inerciais são predominantes, aproxima-se a solução do tempo de drenagem por:

$$t_{coal} = \frac{1}{2} \frac{\rho (\epsilon d)^{1/3} r^2}{\sigma} \quad (4.40)$$

KAMP *et al.* [71] utiliza a solução dada pela equação 4.40 em sua modelagem.

PRINCE e BLANCH [4] simplificaram o modelo de OOLMAN e BLANCH [101]. Esse modelo considera que apenas forças características da interface influenciam o tempo de coalescência. O resultado é dado por:

$$t_{coal} = \left(\frac{r_{eq}^3 \rho}{16\sigma} \right) \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \quad (4.41)$$

Nota-se que as equações 4.40 e 4.41 são possuem origens distintas e formas funcionas diferentes. Mas a diferenças observadas no modelo de eficiência de coalescência de CHESTERS [5] e de PRINCE e BLANCH [4] são diferentes apenas em um termo multiplicativo (quando se considera que a espessura de inicial e final da drenagem é constante), pois eles também assumem formas funcionais diferentes para o tempo de contato, como será visto posteriormente. Portanto, o resultado final será, curiosamente, igual, apesar de tantas diferenças no desenvolvimento intermediário.

Força de interação

A força de interação é um fator importante na modelagem quando a interface não é deformável e móvel.

A força de interação dada por CHESTERS [5] para as colisões viscosas em escoamentos turbulentos, ou seja, que correspondem a coalescência de partículas cujo o tamanho é menor que todos os vórtices do escoamento turbulento é dada por:

$$F_c \sim 6\pi\mu r(\dot{\gamma}r) = 6\pi\mu r^2\dot{\gamma} = 6\pi\mu r^2\sqrt{\epsilon/\nu} \quad (4.42)$$

onde $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento que, para um escoamento turbulento sub-Kolmogorov, pode ser definida por $\sqrt{\epsilon/\nu}$.

A força de interação dada por CHESTERS [5] para as colisões entre partículas de tamanho da faixa inercial é a força exercida pelo escoamento externo, dada por:

$$F_c \sim \pi R_a^2 \left(\frac{2\sigma}{r} \right) \quad (4.43)$$

Nota-se que a única dependência funcional entre a escala de turbulência e a coalescência, em princípio, ocorre pela expressão da força de interação. No caso de interface deformável e móvel (equação 4.40), não existe essa dependência, mas existe uma dependência com a velocidade de flutuação da partícula. Portanto, é razoável supor que esse termo seja o responsável pela dependência da escala de turbulência na eficiência de coalescência de partículas com interface deformável e móvel. Em todo caso, não há na literatura nenhum estudo dessa natureza.

Raio do disco formado entre as partículas

O raio do disco formado entre as partículas está relacionado com o balanço de forças (externa e interna) ou de energia (interfacial e cinética) durante a colisão entre as

duas partículas. Esse é outro fator relevante na modelagem complementar o tempo de coalescência.

Segundo CHESTERS [5], para colisões entre partículas na faixa de tamanhos inercial, têm-se:

$$\frac{Ra}{r} \sim \left[\left(\frac{4\rho_d}{3\rho} + C_{mv} \right) \frac{We}{2} \right]^{1/4} \quad (4.44)$$

onde C_{mv} é o coeficiente de massa virtual aproximado por CHESTERS [5] como igual a 1, que é o seu valor quando duas partículas estão muito próximas e We é o número de Weber definido como

$$We = \frac{\rho r u_{t,d}^2}{\sigma} \quad (4.45)$$

onde $u_{t,d}$ é a velocidade característica da flutuação da partícula, tradicionalmente $(\epsilon d)^{1/3}$, e para colisões entre partículas na faixa de tamanhos inferiores a escala de Kolmogorov, obtemos

$$\frac{Ra}{r} \sim (3Ca)^{1/2} \quad (4.46)$$

onde Ca é o número capilar definido como:

$$Ca = \frac{\mu \dot{\gamma} r}{\sigma} \quad (4.47)$$

Note que, necessariamente, $Ra \ll r$ e, portanto, existe um critério matemático para definir valores máximo para os números Capilar e Weber para a ocorrência de coalescência entre as partículas.

Assumindo que $Ra/r = 1$ e considerando que $\rho_d/\rho \approx 0$ e que $C_{mv} \approx 1$, obtém-se da equação 4.44, $We = 2$ e assumindo que $Ra/r = 1$, obtém-se da equação 4.46 que $Ca = 1/3$.

Esses dois valores de número adimensional não representam uma boa estimativa de valores máximos porque parte da hipótese de que $Ra \approx r$ o que não é verdade. Sendo assim, servem apenas para fornecer uma limite palpável, acima do qual as

formulações perdem o sentido físico.

Espessura final do filme

Quando os filmes formados entre as partículas se tornam muito finos, as forças intermoleculares entre as moléculas dos dois lados do filme começam a atuar. **Para líquidos puros**, a única força intermolecular correlata é a de van der Walls.

Igualando o gradiente de pressão e as forças de van der Walls, obtém-se

$$h_f \sim \left(\frac{Ar}{8\pi\sigma} \right)^{1/3} \quad (4.48)$$

Isso permite escrever a relação r/h_f que é um fator presente nos modelos apresentados de drenagem de filme.

$$\frac{r}{h_f} = \left(\frac{8\pi\sigma r^2}{A} \right)^{1/3} \quad (4.49)$$

PRINCE e BLANCH [4] utiliza o valor determinado experimentalmente por KIRKPATRICK e LOCKETT [102] sendo $h_i = 10^{-5}$ m e $h_f = 10^{-8}$ m. É evidente que esses valores não fazem sentido se a partícula tiver um tamanho na ordem de 10^{-6} m.

Na literatura não foram encontradas informações sobre a estimativa da espessura inicial. Sabe-se, porém, que $h_i \gg h_f$ e, portanto, nos termos onde existem expressões como $1/h_f - 1/h_i$, o termo de $1/h_i$ pode ser desconsiderado e onde existe expressão $\ln(h_i/h_f)$, se h_i for aproximadamente constante, o valor preciso das espessuras não são importantes, pois ele pode ser corrigido pela constante multiplicativa empírica que existe na expressão da frequência de coalescência ou da razão entre tempo de coalescência e de contato.

4.2.2 Tempo de interação ou de contato

CHESTERS [5] aproxima o comportamento das partículas pelo comportamento dos vórtices, concluindo que o tempo de interação em uma colisão predominantemente viscosa (partículas menores que a escala de Kolmogorov) deve ser inversamente proporcional à taxa de cisalhamento, ou seja,

$$t_{int} \sim (\epsilon/\nu)^{-1/2} \quad (4.50)$$

De fato, nesta faixa de tamanho, é razoável supor que a partícula terá a velocidade aproximadamente igual a velocidade local do escoamento.

Para a coalescência de partículas na faixa inercial, considerando a conservação de energia cinética e energia superficial, CHESTERS [5], obteve:

$$t_{int} = \left(F_{mc} \frac{\rho r^3}{2\sigma} \right)^{1/2} \quad (4.51)$$

onde o fator de massa F_{mc} é dado por

$$F_{mc} = \frac{4\rho_d}{3\rho} + C_{mv} \quad (4.52)$$

De fato, CHESTERS [5] interessava-se mais por bolhas de ar em água e, portanto, ele simplifica o termo considerando que $\rho_d \ll \rho$ e que $C_{mv} \approx 1$. Porém, a forma completa de seu modelo, sem simplificações, é mais interessante para o contexto dessa tese.

A modelagem mais tradicional do tempo de interação é a dada por LEVICH [103], que é baseada em análise dimensional de escala da turbulência e é dada por:

$$t_{int} \sim \frac{2^{2/3}}{\epsilon^{1/3}} \quad (4.53)$$

A proporcionalidade muitas vezes é transformada em igualdade sem qualquer con-

sideração adicional. Em todo caso, adverte-se que aqui existe uma grande aproximação, até pelo uso de uma análise de escalas. É o mesmo conceito aplicado no modelo de CHESTERS [5] para partículas menores que a escala de Kolmogorov (equação 4.50), mas agora, aplicado a partículas que estão na faixa inercial. O modelo de LEVICH [103] é utilizado por PRINCE e BLANCH [4] e outros modelos encontrados na literatura [6].

KAMP *et al.* [71] propuseram aprimorar o modelo de eficiência de CHESTERS [5] considerando bolhas com interface deformável e móvel para incluir os efeitos de deformação de forma mais eficiente e da variação da massa virtual.

Como mencionado anteriormente, KAMP *et al.* [71] fizeram um balanço de energia da coalescência de duas partículas de tamanhos genéricos. De forma aproximada, quando duas partículas entram em contato e começam a se deformar, o aumento da energia superficial é igual energia cinética da partícula. Isso é verdade em sistemas livres de surfactantes, isotérmicos e desconsiderando o trabalho realizado contra as forças de superfície.

O aumento da energia superficial é fornecido, simplesmente, pela diferença entre as áreas (depois e antes da colisão) multiplicada pela tensão superficial. A energia cinética associada ao movimento das partículas esféricas e rígidas foi equacionada por LAMB [104] considerando que o escoamento pode ser aproximado como ideal. De acordo com LAMB [104] essa energia cinética é dependente da separação entre as partículas. Contudo, KAMP *et al.* [71] prova matematicamente que essa dependência é insignificante para as pequenas separações entre as partículas durante a colisão. Dessa forma, KAMP *et al.* [71], considerando sistemas onde a energia cinética da fase dispersa possa ser ignorada, generalizaram a utilização da equação de LAMB [104] para partículas esféricas ligeiramente deformáveis e, utilizando a equação de conservação de *momentum*, obtiveram:

$$t_{int} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\rho C_{mv} d_{eq}^3}{3\sigma} \right)^{1/2} \quad (4.54)$$

onde, para esse caso, o coeficiente de massa virtual é obtido pela equação:

$$C_{mv} = \frac{\mathbb{L}\mathbb{N} - \mathbb{M}^2}{\mathbb{L} - 2\mathbb{M} + \mathbb{N}} \frac{1}{d_{eq}^3} \quad (4.55)$$

sendo \mathbb{L} , \mathbb{M} e \mathbb{N} coeficientes geométricos originários da formulação de energia cinética de LAMB [104], que são expressos em séries convergentes dadas por:

$$\mathbb{L} = d_i^3 \left(1 + \frac{3d_j^3}{(d_i + 2d_j)^3} + \frac{3d_i^3}{(2d_i + 3d_j)^3} + \mathbf{O} \left(\frac{d_i^9 d_j^9}{l^{18}} \right) \right) \quad (4.56)$$

$$\mathbb{M} = \frac{d_i^3 d_j^3}{(d_i + d_j)^3} \left(\frac{251}{72} + \mathbf{O} \left(\frac{d_i^9 d_j^9}{l^{18}} \right) \right) \quad (4.57)$$

$$\mathbb{N} = d_j^3 \left(1 + \frac{3d_i^3}{(d_j + 2d_i)^3} + \frac{3d_j^3}{(2d_j + 3d_i)^3} + \mathbf{O} \left(\frac{d_i^9 d_j^9}{l^{18}} \right) \right) \quad (4.58)$$

4.2.3 Considerações adicionais sobre os modelos de eficiência de coalescência

Os principais modelos de eficiência de coalescência de partículas fluidas registrados na literatura são os modelos de CHESTERS [5], que se destacam pela aplicação a toda faixa de tamanho de partículas e a todo tipo de interface.

Para partículas cujo tamanho pertença a faixa inercial, citam-se os modelos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] e PRINCE e BLANCH [4] por razões históricas. Note que, a menos de uma constante multiplicativa, a forma final do modelo de PRINCE e BLANCH [4] será idêntica a forma final do modelo de CHESTERS [5] para interfaces deformáveis e móveis, embora a origem fenomenológica seja completamente diferente.

Para bolhas de tamanho pertencente a faixa inercial e com interface deformável e móvel, destaca-se também o modelo de KAMP *et al.* [71], por ser o mais completo

da categoria.

Há diversas formulações ligeiramente diferentes em um ponto ou outro, mas na maioria dos estudos repete-se velhas fórmulas (já apresentadas) com novos aspectos. Por exemplo, utilizar o modelo de tempo de coalescência de CHESTERS [5] (equação 4.40) e o tempo de contato baseado no trabalho de LEVICH [103] (equação 4.53) para partículas maiores que a escala de Kolmogorov. Têm-se, nesse caso, um novo conjunto de modelos de eficiência com razoável base física e nunca estudado na literatura. Esse tipo de permutação de conceitos não cria base conceitual nova, mas permite a multiplicações de formulação final de modelos. Esse tipo de modelo não é levado em consideração nesse texto.

Os principais modelos de eficiência de coalescência estão listados nas tabelas 4.2, 4.3 e 4.4. As tabelas 4.2 e 4.3 apresentam todos os modelos de CHESTERS [5], sendo que a tabela 4.2 lista os modelos para as partículas menores que a escala de Kolmogorov e a tabela 4.3 aqueles para as partículas maiores que esta escala e menores que a escala integral do escoamento.

Como os modelos de CHESTERS [5] foram escritos para partículas com o mesmo tamanho, não fica claro se o uso do diâmetro equivalente d_{eq} é útil para caracterizar o tipo de modelo que deve ser utilizado ou se somente os tamanhos das partículas devem ser levados em consideração. Além disso, não há uma modelagem clara que envolva a coalescência de uma partícula menor que a escala de Kolmogorov e outra partícula cujo o tamanho pertença a escala inercial. Entretanto, a figura 4.2 mostra o comportamento dos dois modelos de eficiência de CHESTERS [5], para partículas menores que a escala de Kolmogorov e para partículas pertencente a faixa de tamanho inercial, considerando partículas com interface deformável e parcialmente móvel. Percebe-se que é possível utilizar o modelo de eficiência idealizado para partículas na faixa inercial para caracterizar a eficiência de partículas que possuem o tamanho inferior a escala de Kolmogorov. A diferença entre os modelos ocorre quando as partículas são maiores que a escala de Kolmogorov.

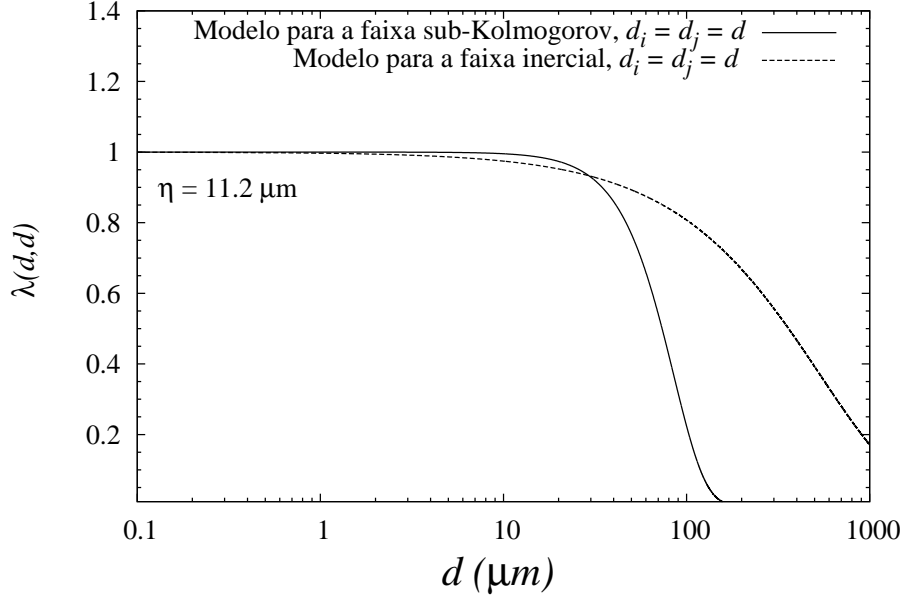


Figura 4.2: Modelos de eficiência de CHESTERS [5] para partículas com interface deformável e parcialmente móvel. Considerando o sistema líquido-líquido com $\mu_d = 0,001$ Pa.s, $\mu = 0,0115$ Pa.s, $\rho = 880$ Kg/m³, $\rho_d = 865$ Kg/m³ e $\sigma = 0,0115$ N/m e considerando que $\epsilon = 140000$ m²/s³

A tabela 4.4 apresenta os demais modelos de eficiência de coalescência, todos para partículas maiores que a escala de Kolmogorov e menores que a escala integral do escoamento. Em todos esses casos, a velocidade característica é proporcional a $(\epsilon d)^{1/3}$ e faz parte da definição do número de Weber.

A definição do número de Weber, We , pode ser em relação ao raio (como em todos os casos de CHESTERS [5] da tabela 4.3) ou em relação do diâmetro da partícula e será explicitada caso a caso.

Em todos os casos, C_{eff} é um parâmetro empírico, normalmente associado à correção do uso da relação de escalas de turbulência e/ou correção do valor de espessura inicial/final do filme líquido formado entre as partículas.

Tabela 4.2: Modelos de CHESTERS [5] para partículas menores que a escala de Kolmogorov, $d < \eta$

Interface rígida

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \frac{1}{4} \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \right]$$

Interface deformável e imóvel

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \frac{8}{9} \mathcal{C} a^2 r^2 \left(\frac{1}{h_f^2} - \frac{1}{h_i^2} \right) \right]$$

Interface deformável e parcialmente móvel

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \frac{\sqrt{3}}{4} \left(\frac{\mu_d}{\mu} \right) \mathcal{C} a^{3/2} r \left(\frac{1}{h_f} - \frac{1}{h_i} \right) \right]$$

Interface deformável e móvel

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \frac{3}{2} \mathcal{C} a \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \right]$$

onde:

$$\mathcal{C} a = \mu(\epsilon/\nu^{1/2}d/2\sigma$$

e o raio da partícula, r , pode ser tratado pela definição de raio equivalente

$$1/r = 1/r_{eq} = 1/2(1/r_i + 1/r_j)$$

Tabela 4.3: Modelos de CHESTERS [5] para partículas maiores que a escala de Kolmogorov e menores que a escala integral, $\eta < d < L$

Interface deformável e imóvel

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \frac{3}{8} \mathcal{O}h We^{1/2} r^2 \left(\frac{1}{h_f^2} - \frac{1}{h_i^2} \right) \right]$$

Interface deformável e parcialmente móvel

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \frac{\sqrt{2}}{4} \left(\frac{\mu_d}{\mu} \right) \mathcal{O}h \left(\frac{We}{F_{mc}^2} \right)^{1/4} \left(\frac{1}{h_f} - \frac{1}{h_i} \right) \right]$$

Interface deformável e móvel

$$\lambda = \exp \left[-C_{eff} \left(\frac{We}{2F_{mc}} \right)^{1/2} \right]$$

onde:

$$F_{mc} = \frac{4\rho d}{3\rho} + C_{mv} \text{ com } C_{mv} = 1$$

$$We = \rho(\epsilon d)^{2/3} d / 2\sigma$$

$$\mathcal{O}h = \mu / (\sigma \rho r)^{1/2}$$

e o raio da partícula, r , pode ser tratado pela definição de raio equivalente

$$1/r = 1/r_{eq} = (1/r_i + 1/r_j)/2$$

Tabela 4.4: Outros modelos relevantes para partículas maiores que a escala de Kolmogorov e menores que a escala integral, $\eta < d < L$

Interface deformável e imóvel
COULALOGLOU e TAVLARIDES [73]
$\lambda = \exp\left(-C_{eff} \frac{2We\mu d^2}{\sigma(1+\phi)}\right)$
Interface deformável e móvel
PRINCE e BLANCH [4]
$\lambda = \exp\left[-C_{eff} \frac{\ln(h_i/h_f)}{3,5636} \left(\frac{We}{2}\right)^{1/2}\right]$
KAMP <i>et al.</i> [71]
$\lambda = \exp\left[-C_{eff} \left(\frac{We_K}{C_{mv}}\right)^{1/2}\right]$

onde :

$We = \rho(\epsilon d)^{2/3} d / 2\sigma$

e o raio da partícula, r , pode ser tratado pela definição de raio equivalente

$1/r = 1/r_{eq} = (1/r_i + 1/r_j)/2$

e no modelo de KAMP *et al.* [71], temos:

$We_K = \rho u_r^2 d_{eq} / 2\sigma$, $u_r = (C_t / \sqrt{1,61}) [\epsilon(d_i + d_j)/2]^{1/3}$, $C_{mv} = \frac{\mathbb{L}\mathbb{N} - \mathbb{M}^2}{\mathbb{L} - 2\mathbb{M} + \mathbb{N}} \frac{1}{d_{eq}^3}$

com \mathbb{L} , \mathbb{M} \mathbb{N} descritos pelas equações 4.56, 4.57 e 4.58, respectivamente.

4.3 Comentários sobre os modelos de coalescência

A coalescência necessita de estudos experimentais precisos para a validação experimental adequada dos modelos [10, 14, 18].

Mesmo considerando a ausência completa de surfactantes, ainda existem fenômenos que não foram modelados. Um exemplo é a quebra ocasionada pelo choque de partículas. Nos modelos tradicionais, quando duas partículas colidem, ou elas coalescem, ou elas não coalescem. Entretanto, KO e RYOU [105] mostram experimentalmente que se a colisão das partículas for muito intensa, devido ao forte cisalhamento na colisão, existe a produção de pequenas partículas, chamadas de partículas satélites.

Eles também mostram que a coalescência pode ocorrer normalmente tal qual é modelado pelos modelos tradicionais, mas dependendo da inércia associada, pode ocorrer quebras sequenciais binárias, com a formação de um número expressivo de partículas satélites. A figura 4.3 mostra três tipos de fenômenos observados na coalescência, ns colisão das partículas em alta velocidade.

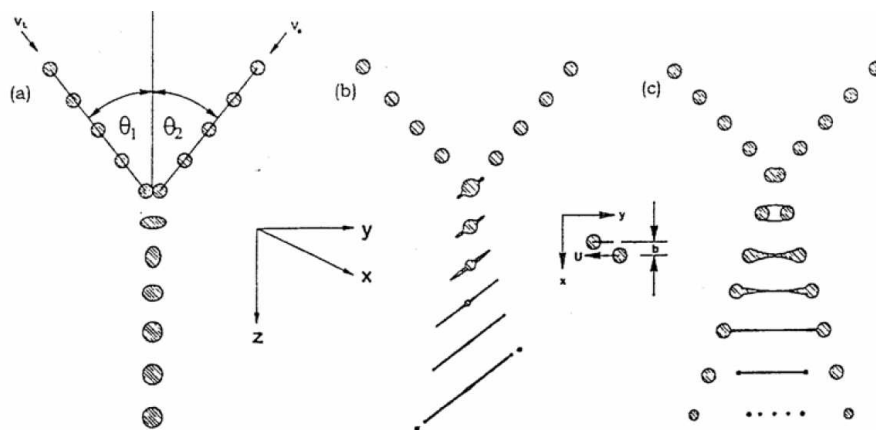


Figura 4.3: Exemplos de colisão entre partículas. (a) colisão a baixa velocidade ocorrendo coalescência das partículas (b) coalescência instável, resultando apenas em uma fragmentação significativa das partículas envolvidas em muitas partículas de pequeno tamanho (c) coalescência instável resultando em quebra essencialmente binária com a fragmentação formando partículas filhas (retirado de HAGESAETHER [93]).

Esses efeitos são mais significativos quando a diferença de densidade entre a fase dispersa e contínua é pequena, ou seja, em sistema líquido-líquido e quando a velocidade superficial da fase dispersa é superior a 5 cm/s em qualquer tipo de sistema [93]. Também são observados em sistemas gás-líquido quando a velocidade superficial da fase dispersa é superior a 10 cm/s na temperatura ambiente [105].

Ainda que estes fenômenos possam ser ignorados, para a seleção de um dos modelos analisados é necessário assumir uma hipótese sobre o comportamento da interface caso não existam dados experimentais que digam como a interface se comporta, o que normalmente acontece. Essa escolha não é trivial. A literatura convencionou que bolhas de ar em água livre de surfactantes possuem interface deformável e móvel [4–6, 10, 18, 71, 78, 106]. Mas, para CHESTERS [5], isso somente é verdade se a bolha for maior que 1 mm [5, 6]. Portanto, nem a mais simples das escolhas é trivial. Infelizmente, até o momento, esse processo de tomada de decisão não pode ser modelado.

A literatura ainda requer uma melhor forma de caracterização de qual o modelo de eficiência de coalescência deve ser utilizado em cada caso.

Em todo caso, sendo necessário realizar uma simulação de um sistema envolvendo coalescência de partículas menores que a escala de Kolmogorov, é inevitável utilizar os modelos de CHESTERS [5]. Dependendo do tipo de interface as soluções de CHESTERS [5] podem ser as únicas existentes/estudadas até o momento. Para bolhas com hipótese de que a interface é deformável e móvel o modelo de KAMP *et al.* [71] é o modelo mais evoluído [10].

Em emulsões, espera-se que as partículas não tenham a interface completamente móvel. Todas as demais condições são filosoficamente possíveis. CHESTERS [5] recomenda considerar partículas deformáveis e parcialmente móveis, exceto quando a partícula for menor que 1 mm, onde tanto esse modelo quando o modelo considerando que a partícula é rígida pode ser utilizado.

Capítulo 5

A quebra de partículas fluidas

O primeiro estudo sobre o fenômeno de quebra promovida pelo escoamento local externo à partícula foi de TAYLOR [107]. Porém, apenas HINZE [108] propôs uma classificação das causas de deformação e quebra das partículas (tensões viscosas e dinâmicas) para diferentes tipos de escoamento (paralelo laminar, Couette e turbulento) resumindo o conhecimento sobre o assunto até então. HINZE [108] tentou relacionar estas causas nos diversos escoamentos através de um balanço de forças em termos das tensões envolvidas.

O estudo de HINZE [108] consistia em tentar calcular a magnitude de tensão, \mathcal{T} , que causa a deformação da partícula para cada tipo de escoamento. Sabendo que a tensão superficial tende a contrabalançar esta força atuando com uma tensão da ordem de σ/d , onde d é o diâmetro da partícula. A razão entre estas duas tensões fornece um número adimensional $\mathcal{T}d/\sigma$ que caracteriza a deformação da partícula.

Por exemplo, quando as forças viscosas dominam o escoamento, \mathcal{T} é uma medida da tensão viscosa, $\mathcal{T} = \mu\mathcal{D}'$, onde \mathcal{D}' é a taxa de deformação. Assim o número adimensional torna-se o “número capilar”:

$$\mathcal{C}a = \frac{\mu\mathcal{D}'d}{\sigma} \tag{5.1}$$

Quando o escoamento é dominado pelas forças inerciais, \mathcal{T} é uma medida das tensões dinâmicas do escoamento, $\mathcal{T} = \rho U^2$, onde U é uma velocidade característica do escoamento da fase contínua, e o número adimensional se torna o número de Weber:

$$\mathcal{W}e = \frac{\rho U^2 d}{\sigma} \quad (5.2)$$

Por vezes o número capilar também é chamado de número de Weber associado às forças viscosas.

A quebra da partícula é esperada sempre que o número adimensional exceder um valor limite, que depende das características do escoamento, das razões entre as densidades e viscosidades das fase dispersa e contínua e de um número adimensional que é a razão entre as forças viscosas e de tensão superficial na partícula fluida, o número de Ohnesorge,

$$\mathcal{O}h = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d \sigma d}} \quad (5.3)$$

Não raro, usa-se o número de Reynolds e o número de Weber, pois

$$\mathcal{O}h = \frac{\mu_d}{\mu} \sqrt{\frac{\rho}{\rho_d}} \sqrt{\frac{\mathcal{W}e}{\mathcal{R}e_p^2}} \quad (5.4)$$

com $\mathcal{W}e = \rho d u^2 / \sigma$ e $\mathcal{R}e_p = \rho u d / \mu$. É necessário um ajuste na proporcionalidade da relação caso utilize-se o raio da partícula no local do diâmetro na definição de número de Weber.

O que nesse texto chama-se de número de Ohnesorge da fase contínua, pode ser reescrito como $\sqrt{\mathcal{W}e / \mathcal{R}e_p^2} = \mu / (\rho \sigma d) = \mathcal{O}h_c$.

A teoria de quebra de partículas fluidas em escoamentos turbulentos foi proposta de forma independente por KOLMOGOROV [109] e HINZE [108], sendo baseada em duas hipóteses fundamentais:

1. para vórtices maiores que a microescala de Kolmogorov, $\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$, a inércia domina;
2. apenas as flutuações da velocidade em uma distância similar ao diâmetro da partícula são capazes de causar grandes deformações. Nesse caso, $\mathcal{T} = \overline{\rho u^2(d)}$ e $We = \overline{\rho u^2(d)}d/\sigma$ onde $\overline{u^2(d)}$ é o valor médio do quadrado das flutuações da magnitude da velocidade entre dois pontos afastados pela distância d ;

Assumindo que a turbulência é praticamente isotrópica na região das escalas de tamanho comparáveis ao diâmetro da maior partícula, pode-se utilizar alguns resultados da teoria da turbulência para determinar se a partícula é estável ou instável, mas não permitindo nenhuma outra conclusão.

Porém, para simular a evolução dos tamanhos das partículas é necessário conhecer quantas partículas quebram nas unidades de tempo e volume (frequência de quebra das partículas, $b(v)$) e quantas, $\varsigma(v)$, e como são as partículas formadas, $P(v|v')$. Muitos dos modelos que foram propostos tomaram como base a teoria de quebra de partículas fluidas de KOLMOGOROV [109] e HINZE [108], postulando a interação de vórtices com as partículas fluidas, além de outras hipóteses que dependem de cada modelo.

Resultados experimentais recentes em escoamentos turbulentos bem definidos [110, 111] indicam que existe mais de um mecanismo de quebra de partículas fluidas em escoamentos turbulentos. Isto é, coexistem mais mecanismos de quebra do que os postulados por KOLMOGOROV [109] e HINZE [108]. Essas observações serão apresentadas ao longo do capítulo.

Até o momento, os modelos da quebra de partículas fluidas podem ser classificados em dois tipos básicos:

1. *os modelos de frequência de quebra*, que fornecem uma expressão para a frequência de quebra, $b(v)$, e postulam as formas funcionais de número de filhas,

$\zeta(v)$, e da probabilidade de distribuição de tamanhos das filhas, $P(v'|v)$.

2. *os modelos de quebra*, que são modelos que postulam apenas o número de filhas na quebra, $\zeta(v)$. A frequência de quebra, $b(v)$, e a probabilidade de distribuição de tamanhos das filhas, $P(v'|v)$ ou são modeladas diretamente, ou são obtidos a partir da expressão para a frequência específica de quebra, $\Omega(v'|v)$ (correlacionados pela equação 3.10).

Existem duas grandes revisões de modelos de quebra publicadas na literatura, LASHERAS *et al.* [7] e LIAO e LUCAS [8]. Ambos são bem abrangentes, mas LASHERAS *et al.* [7] é mais crítico em sua análise. LUO e SVENDSEN [112] apresenta uma interessante recapitulação histórica sobre as características dos modelos de quebra até então.

A apresentação dos modelos utiliza essa divisão básica. Observe que não há modelos para o número de partículas formadas na quebra. Todos os modelos existentes dependem de uma hipótese, usualmente, a hipótese utilizada é de que a quebra é binária, ou seja, $\zeta(v) = 2$.

5.1 Modelagem da frequência de quebra

Essa categoria de modelos é a que tem o maior número de representantes. VALENTAS *et al.* [113], ROSS e CURL [114], NARSIMHAN *et al.* [115], KONNO *et al.* [116], HSIA e TAVLARIDES [117], CHATZI e LEE [118], HESKETH *et al.* [119], HESKETH *et al.* [120] e ALOPAEUS [121] são apenas alguns exemplos de trabalhos propondo modelos de frequência de quebra encontrados na literatura que não serão citados ao longo do texto. Todavia, a maioria desses modelos não produziu conhecimento fenomenológico significativo sobre a quebra de partículas. Por exemplo, VALENTAS *et al.* [113] propôs um modelo que é, simplesmente, $C_1 d^{C_2}$, onde C_2 foi escolhido para melhor representar os dados experimentais dentre valores uma lista de valores possíveis e C_1 é um parâmetro empírico.

Dos principais modelos de frequência de quebra destacam-se os modelos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], LEE *et al.* [122], PRINCE e BLANCH [4] e ANDERSSON e ANDERSSON [123]. Em todos esses casos, as partículas são maiores que a escala de Kolmogorov. O único resultado para a quebra de partículas menores que a escala de Kolmogorov é o de CRISTINI *et al.* [124], para $r < \eta$.

COULALOGLOU e TAVLARIDES [73]

COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] calcularam a frequência de quebra da partícula de diâmetro d como sendo o produto do inverso do tempo de quebra e a fração das partículas que quebram:

$$b(d) = \frac{1}{t_b} \frac{\Delta N(d)}{N(d)} \quad (5.5)$$

onde $N(d)$ é o número total de partículas de tamanho d .

Eles consideraram que a quebra ocorre devido à colisão entre vórtices e partículas quando os vórtices possuírem energia cinética superior do que a energia superficial da partícula. Sendo assim, a fração de partículas que quebram é proporcional à fração de vórtices com energia suficiente para induzir a quebra.

COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] assumiram uma distribuição exponencial para a média quadrática das flutuações de velocidade [90] e que as partículas seguem esta mesma distribuição, de forma que:

$$\frac{\Delta N(d)}{N(d)} = \exp\left(-\frac{E_s}{\bar{E}}\right) \quad (5.6)$$

onde a energia da superfície obedece a relação $E_s \propto \sigma d^2$ e a energia cinética turbulenta média das partículas correlaciona-se da forma $\bar{E} \propto \rho_d d^3 \overline{u^2(d)}$, onde a velocidade de flutuação das partículas é dada pela equação 5.7.

$$\overline{u^2(d)} \approx 2 (\epsilon d)^{2/3} \quad (5.7)$$

O tempo de quebra foi assumido proporcional ao tempo característico do movimento relativo de afastamento dos vórtices, $t_b \propto d / \left(\overline{u^2(d)} \right)^{1/2}$, portanto, $t_b \propto d^{2/3} \epsilon^{-1/3}$. Assim, eles obtiveram a seguinte expressão para a frequência de quebra em dispersões diluídas:

$$b(d) = C_{c1} d^{2/3} \epsilon^{1/3} \exp \left(- \frac{C_{c2} \sigma}{\rho_d \epsilon^{2/3} d^{5/3}} \right) \quad (5.8)$$

onde C_{c1} e C_{c2} são parâmetros empíricos

LEE *et al.* [122]

Assim como COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] e LEE *et al.* [122] utilizam exatamente a mesma teoria, porém, realizaram uma análise dimensional nos dados experimentais de NARSIMHAN [115] para determinar a forma da distribuição da média quadrática das flutuações de velocidade. Dessa forma, obtiveram:

$$b(d) = C_{L1} d^{2/3} \epsilon^{1/3} \left[1 - \int_0^1 F \left(\frac{C_{L2} \sigma}{\rho_d \epsilon^{2/3} d^{5/3} x^{11/3}} \right) dx \right] \quad (5.9)$$

onde F é a distribuição cumulativa χ^2 e C_{L1} e C_{L2} são parâmetros a serem determinados experimentalmente.

Existem outros autores que utilizam outras distribuições para a “média quadrática das flutuações de velocidade da partícula”. Porém, a distribuição exponencial para $\overline{u^2(d)}$ foi experimentalmente verificada por KUBOI *et al.* [90] ($\overline{u^2(d)} \sim (\epsilon d)^{2/3}$) e é compatível com a teoria de HINZE [108] e KOLMOGOROV [109]. De forma que demais modelos que busquem modificar a forma funcional da distribuição média quadrática das flutuações de velocidade da partícula não são avaliados nesse texto. Referências sobre esses modelos podem ser encontradas na literatura [18, 73, 112]

PRINCE e BLANCH [4]

PRINCE e BLANCH [4] partiram dos mesmos postulados usados por COULALOGLOU e TAVLARIDES [73]. Eles também atribuem a quebra de uma partícula como sendo o resultado da colisão entre partícula e vórtices. Porém, equacionam o modelo de quebra parcialmente diferente da forma abordada anteriormente.

PRINCE e BLANCH [4] consideraram que a frequência de quebra, $b(d)$ é o produto da frequência de colisão entre partículas e vórtice de um certo tamanho, θ_{de} , e a eficiência de quebra, \mathbb{F} , que é definida como a probabilidade de uma quebra ocorrer uma vez que ocorra a colisão entre partícula e vórtice.

$$b(d) = \theta_{de}(d) \mathbb{F}(\overline{u(d)}) \quad (5.10)$$

Usando argumentos da teoria cinética dos gases [125], eles estimaram a frequência de colisão entre partículas e vórtices como sendo:

$$\theta_{de} = n_e S_{de} (\overline{u_d^2} + \overline{u_e^2})^{1/2} \quad (5.11)$$

onde n_e é a concentração dos vórtices na faixa de interesse, $\overline{u_d^2}$ e $\overline{u_e^2}$ são as velocidades de flutuação médias das partículas e vórtices, respectivamente, e S_{de} é a seção reta de colisão entre as partículas de raio $d/2$ e vórtices de tamanho $d_e = 2\pi/k$, definida por

$$S_{de} = \frac{\pi}{4} (d + d_e)^2 \quad (5.12)$$

dado que k é o número de onda associado aos vórtices. A equação 5.12 foi adequadamente corrigida em relação a formulação expressa no artigo de PRINCE e BLANCH [4] utilizando os conceitos associados a teoria cinética dos gases [125].

O número de vórtices em uma dada faixa de tamanhos foi obtido integrando o

espectro de energia no subintervalo inercial da turbulência isotrópica:

$$\frac{dn_e(k)}{dk} = 0,1 k^2 \quad (5.13)$$

A equação 5.13 somente é válida no subintervalo inercial. Da forma que está escrita, n_e tende a infinito quando o tamanho dos vórtices tende a zero, quando k tende a infinito. Dessa forma, eles utilizaram a hipótese de HINZE [108] que disse que um vórtice muito pequeno não teria energia necessária para induzir a quebra e que um vórtice muito grande provocaria a convecção da partícula e não induziria a quebra. Esse conceito é amplamente utilizado em vários modelos de quebra desenvolvidos após a publicação de PRINCE e BLANCH [4].

Entretanto, o valor dessa faixa válida de tamanho de vórtices não foi proposto por HINZE [108]. PRINCE e BLANCH [4] arbitraram um intervalo de integração para incluir vórtices de tamanho entre $0,2d \leq d_e$, ou seja, $k \leq 10\pi/d$

A eficiência de quebra considerada por PRINCE e BLANCH [4] é uma expressão obtida da distribuição exponencial para a média quadrática das velocidades que corresponde a hipótese de que a quebra ocorre se $\overline{u^2(d)} > \overline{u_{crit}^2(d)}$, sendo igual, em conceito, a expressão usada por COULALOGLOU e TAVLARIDES [73].

$$\mathbb{F}(u) = \exp\left(-\frac{\overline{u_{crit}^2(d)}}{\overline{u_e^2(d_e)}}\right) \quad (5.14)$$

onde $\overline{u_e^2} \cong (\epsilon d_e)^{2/3}$ é a velocidade média dos vórtices de tamanho d_e . Nesse caso, a diferença nesta eficiência de quebra e a expressão usada por COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] está na utilização do conceito de velocidade crítica, $\overline{u_{crit}^2(d)}$, para calcular a energia cinética crítica.

Assumiu-se a existência de um valor crítico para o número de Weber que, para bolhas de ar em água, é igual a 2,3 de acordo com PRINCE e BLANCH [4], o que fornece $\overline{u_{crit}^2(d)} \cong 1,52 (\sigma/\rho d)^{1/2}$

A forma final do modelo frequência de quebra de PRINCE e BLANCH [4] é dada por:

$$b(d) = \int_0^{k_{\max}=10\pi/d} S_{de} \left(\overline{u_d^2} + \overline{u_e^2} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\overline{u_{crit}^2}(d)}{\overline{u_e^2}} \right) \frac{dn_e(k)}{dk} dk \quad (5.15)$$

LASHERAS *et al.* [7] analisaram a hipótese de que vórtices muito menores que a partícula não teriam a energia necessária para quebrá-la, feita por PRINCE e BLANCH [4]. Para tanto, eles variaram o limite superior de integração para os casos de $d_{e,\min} = 20, 10$ e 5% do diâmetro da partícula, d e até mesmo para a microescala de Kolmogorov, definida por $k_{\max} = 0,5 (\epsilon/\nu^3)^{1/4}$. Seus resultados são reproduzidos na figura 5.1. Note que $0,5 (\epsilon/\nu^3)^{1/4}$ é maior que $40\pi/d$ para toda faixa de diâmetro avaliado.

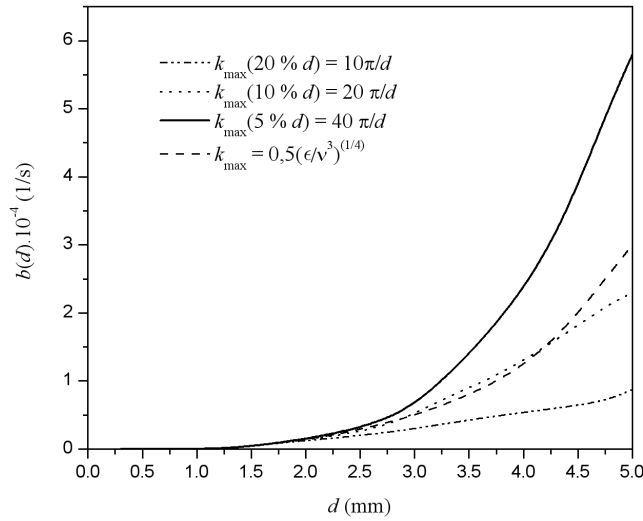


Figura 5.1: Frequência de quebra do modelo de PRINCE e BLANCH [4], sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\mu = 0,001$ Pa.s $\rho = 1000$ kg/m³ e $\epsilon = 1$ m²/s³

LASHERAS *et al.* [7] também analisaram o comportamento da taxa de quebra com o diâmetro para os modelos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], KONNO *et al.* [116] e PRINCE e BLANCH [4]. Estes resultados são reproduzidos na figura 5.2, na qual o valor da frequência foi adimensionalizado com o valor

máximo obtido em cada modelo para permitir comparação adequada.

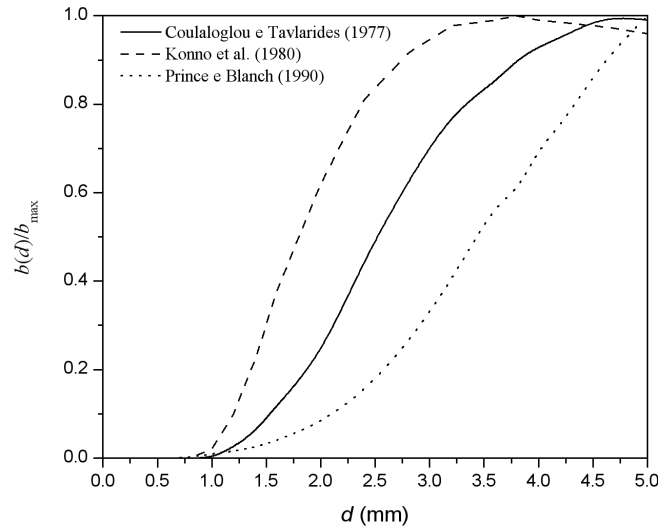


Figura 5.2: Frequência de quebra adimensional em função do diâmetro, modelos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], KONNO *et al.* [116] e PRINCE e BLANCH [4], sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m³ e $\epsilon = 1$ m²/s³

Nota-se na figura 5.2 que os modelos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] e KONNO *et al.* [116] apresentam um máximo para a frequência de quebra em um certo diâmetro. Entretanto, existe um máximo matemático nos três modelos, a questão é que para o valor de ϵ considerado, o ponto máximo de frequência de quebra do modelo de PRINCE e BLANCH [4] ocorre em um valor de diâmetro muito alto e sem significado físico.

ANDERSSON e ANDERSSON [123]

O modelo de ANDERSSON e ANDERSSON [123] foi ratificado experimentalmente de acordo com os dados de ANDERSSON e ANDERSSON [111].

Os estudos experimentais de ANDERSSON e ANDERSSON [111] mostraram que a quebra de gotas nas condições experimentais estudadas por eles ocorre, preferencialmente, quando múltiplas partículas de mesmo tamanho e que a quebra de

bolhas é preferencialmente binária e em tamanhos diferentes. Sendo esse o motivo apontado por ANDERSSON e ANDERSSON [123] para a inexistência de modelos adequados para a modelagem da distribuição de tamanho das partículas filhas na quebra de gotas. Nota-se que esse também é o motivo apontado pelo autor deste texto para justificar o desenvolvimento de uma tese no assunto.

ANDERSSON e ANDERSSON [111] utilizaram velocimetria por imagem de partículas (PIV) para obter a correlação de segunda ordem da flutuação da velocidade e através de modelo inferir a energia de dissipação turbulenta. Contudo, a velocimetria de imagem não possui precisão suficiente para permitir obter adequadamente a energia de dissipação turbulenta.

ANDERSSON e ANDERSSON [123] produziram um modelo para a frequência de quebra que respeita a idéia central de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73]. ANDERSSON e ANDERSSON [123] consideraram que a frequência de quebra é dada pelo produto de uma frequência de interação da partícula com vórtices e uma eficiência de quebra, ambos termos integrados em toda a faixa de tamanho relevante de vórtices.

$$b(d) = \int_{d_{e,\min}}^{d_{e,\max}} \theta_{de}(d, d_e) \mathcal{F}(d, d_e) dd_e \quad (5.16)$$

A frequência de interação entre a partícula os vórtices é definida por ANDERSSON e ANDERSSON [123] como proporcional ao volume da partícula a densidade numérica dos vórtices Dessa forma, a frequência é calculada pelo produto da densidade de vórtices (segundo o resultado TENNEKES e LUMLEY [56]) e o volume de todas as partículas de tamanho d , calculadas supondo que estas sejam esferas. Por outro lado, o tempo de interação entre a partícula e o vórtice é obtido considerando a escala de tempo de rotação dos vórtices ($\tau = d_e^{2/3}/\epsilon^{1/3}$). A expressão de frequência de interação é expressa por:

$$\theta_{de}(d, d_e) = \frac{C_{aa}\pi d^3 \epsilon^{1/3}}{6d_e^{14/3}} n_{de} (1 - \phi) \quad (5.17)$$

onde C_{aa} é uma constante que segundo LUO e SVENDSEN [112] é 0,822.

A probabilidade de quebra, $\mathcal{F}(d, d_e)$, é que define se a interação entre uma partícula de tamanho d e um vórtice de tamanho d_e produz quebra ou não, similar a idéia considerada em outros modelos [4, 73, 126].

$$\mathcal{F}(d, d_e) = \int_{\chi_{\min}}^{\infty} \exp(\chi) d\chi \quad (5.18)$$

onde $\chi = E_e(d_e)/\bar{E}_e(d_e)$ é a razão entre a energia do vórtice, $E_e(d)$, e a energia média do vórtice, $\bar{E}_e(d_e)$, de tamanho d_e .

ANDERSSON e ANDERSSON [123] postulam duas condições para que a quebra ocorra. A primeira é que a energia disponível no vórtice seja maior do que o acréscimo de energia superficial da partícula mãe pela sua deformação, isto é

$$E_e(d) \geq \sigma \pi d^2 \gamma \doteq E_s(d) \quad (5.19)$$

onde γ é um fator determinado experimentalmente por ANDERSSON e ANDERSSON [111] como aproximadamente igual a 0,3 levando em conta a deformação sofrida por partículas que, efetivamente, irá quebrar. A energia disponível no vórtice de tamanho d_e para realizar a quebra é dada por

$$\bar{E}_e(d_e) = \min [\bar{E}_e(d_e), \bar{E}_{e,limitada}(d_e, d)] \quad (5.20)$$

sendo que a energia cinética média do vórtice, $\bar{E}_e(d_e)$ é dado pela sua forma clássica

$$\bar{E}_e(d_e) = \rho \frac{1}{2} \frac{\pi d_e^3}{6} u_e^2 \quad (5.21)$$

Por sua vez, a energia limitada está relacionada a partículas de tamanho pequeno em relação ao tamanho do vórtice. ANDERSSON e ANDERSSON [123] supõem que nesses casos apenas uma fração da energia será transferida. Eles postulam de que a energia pode ser calculada considerando um volume toroidal formado pela

área da seção reta da partícula e a circunferência do vórtice, levando a:

$$\bar{E}_{e,limitada}(d_e, d) = \rho \frac{1}{2} \frac{\pi d^2}{4} \pi d_e \overline{u_e^2} \quad (5.22)$$

Em termos adimensionais,

$$\chi \geq \frac{E_s(d)}{\min [\bar{E}_e(d_e), \bar{E}_{e,limitada}(d_e, d)]} = \frac{\sigma \pi d^2 \gamma}{\min \left[\rho \frac{1}{2} \frac{\pi d_e^3}{6} \overline{u_e^2}, \rho \frac{1}{2} \frac{\pi d^2}{4} \pi d_e^2 \overline{u_e^2} \right]} \doteq \chi_{ei} \quad (5.23)$$

A outra condição para que a quebra ocorra é que a tensão turbulenta seja maior ou igual a tensão interfacial.

$$\frac{\overline{\rho u_e^2}}{2} \geq \frac{2\sigma}{d_{def}} \quad (5.24)$$

onde d_{def} é o diâmetro característico da partícula deformada. O termo $2\sigma/d$ representa a tensão interfacial de um cilindro de raio d [126]. Essa inequação pode ser reescrita em termos adimensionais tal que,

$$\chi \geq \chi_t \doteq \frac{4\sigma}{d \overline{\rho u_e^2}} \quad (5.25)$$

De acordo com ANDERSSON e ANDERSSON [123] a quebra ocorre apenas quando os dois critérios são satisfeitos simultaneamente. De forma que χ_{\min} da equação 5.18 é obtido por:

$$\chi_{\min} = \max [\chi_{ei}, \chi_t] \quad (5.26)$$

Dessa forma, resta apenas definir quais são os limites de tamanhos de vórtices que podem ser utilizados na equação 5.16. ANDERSSON e ANDERSSON [123] assumem que $d_{e,\min} = d/10$ e $d_{e,\max} = 10d$. Mas note que toda a teoria supõem que as partículas e os vórtices estejam contidas na faixa inercial de tamanho, ou seja, $\eta < d < L$ e $\eta < d_e < L$. De forma que, em teoria, esse modelo é limitado a partículas que satisfaçam a condição $10\eta < d < L/10$, embora não haja restrição explícita, o

que, no caso, é uma restrição de idealidade do modelo. Os dados experimentais de ANDERSSON e ANDERSSON [111] são obtidos quase no limite dessas condições.

Duas considerações se destacam nesse trabalho. A primeira é considerar que a energia necessária para a quebrar a partícula deve ser maior do que a energia interfacial da partícula deformada. O segundo destaque é a hipótese, que foi postulada anteriormente no trabalho de LEHR *et al.* [126], relativa a consideração da formação de uma partícula cilíndrica no processo. Esse postulado não havia sido confirmado experimentalmente em nenhum outro trabalho até ANDERSSON e ANDERSSON [111]. Embora, em LEHR *et al.* [126] o $\overline{\rho u_e^2} \geq 2\sigma/d_1$, onde d_1 é a menor partícula filha formada.

ANDERSSON e ANDERSSON [123] afirmam que não existe um modelo satisfatório para a distribuição de tamanhos da partículas filhas, afirmando que o modelo não está pronto para ser utilizado na EBP, não recomendando a utilização de nenhum modelo para complementar o seu modelo de frequência de quebra.

CRISTINI *et al.* [124]

Com base em resultados de simulações DNS, CRISTINI *et al.* [124] propuseram um modelo de frequência de quebra de gotas cujos raios sejam menores que a escala de Kolmogorov do escoamento, $d/2 < \eta$.

Segundo CRISTINI *et al.* [124], o tempo de relaxação capilar, $\tau_\sigma = \mu r/\sigma$ é a escala de tempo das gotas quando a razão entre as viscosidades das fases, μ_d/μ , é menor ou aproximadamente igual a 1. Quando a razão entre as viscosidades é muito maior que 1, tempo relevante é $(\mu_d/\mu)\tau_\sigma$.

CRISTINI *et al.* [124] definem um volume adimensional, \bar{v} , como função da razão entre a escala de tempo das gotas e a escala de tempo de Kolmogorov, $\tau_\eta = 1/\dot{\gamma} = \sqrt{\nu/\epsilon}$. Considerando que a escala de tempo das gotas é o tempo de relaxação capilar,

o volume adimensional é expresso por:

$$\bar{v}^{1/3} = \frac{\tau_\sigma}{\tau_\eta} = \mathcal{C}a = \frac{\mu\dot{\gamma}r}{\sigma} \quad (5.27)$$

Sabendo que $\dot{\gamma} = \nu/\eta^2$, é possível escrever a relação $\tau_\sigma/\tau_\eta = \mathcal{C}a$ obtendo:

$$\frac{r}{\eta} = \mathcal{C}a \left(\frac{\sigma^4 \rho}{\mu^5 \epsilon} \right)^{1/4} \quad (5.28)$$

Considerando que, segundo CRISTINI *et al.* [124], $r/\eta < 1$, obtém-se a seguinte relação:

$$\mathcal{C}a < \frac{\mathcal{W}e_{r,\eta}}{\mathcal{R}e_{r,\eta}} \doteq \mathcal{C}a_\eta \quad (5.29)$$

onde $\mathcal{W}e_{r,\eta} = \rho\sqrt{\epsilon\nu}r/\sigma$ e $\mathcal{R}e_{r,\eta} = (\epsilon\nu)^{1/4}r/\nu$. A relação da equação 5.29 define um número Capilar máximo, $\mathcal{C}a_{\max}$, tal que

$$\mathcal{C}a_{\max} = \frac{\mathcal{W}e_{r,\eta}}{\mathcal{R}e_{r,\eta}} \quad (5.30)$$

CRISTINI *et al.* [124] definiram a taxa de quebra como a integral da função cumulativa da distribuição da frequência da força de flutuação do escoamento, $\mathcal{F}(s)$, em todos os tamanhos possíveis de volume adimensional:

$$b(\bar{v}) = \int_0^{\bar{v}} \mathcal{F}(s) ds \quad (5.31)$$

A partir de seus resultados de DNS, concluíram que a função pode ser simplificada, escrevendo:

$$b(d) = C\dot{\gamma}\bar{v} = C\dot{\gamma}\mathcal{C}a^3 \quad (5.32)$$

Essa relação é válida para todo número Capilar, tal que, $\mathcal{C}a_{crit} < \mathcal{C}a < \mathcal{C}a_{\max}$.

Utilizando resultados da teoria multifractal [127], CRISTINI *et al.* [124] deter-

minam uma relação para o número Capilar crítico do sistema, utilizando:

$$\mathcal{Ca}_{crit} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Re}}} \quad (5.33)$$

onde o número de Reynolds é definido utilizando a macroescala do escoamento, $\mathcal{Re} = UL/\nu$.

5.2 Modelos de quebra

Os trabalhos de TSOURIS e TAVLARIDES [91], LUO e SVENDSEN [112], MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129], HAGESAETHER *et al.* [130], LEHR *et al.* [126] sintetizam de forma significativa o estado da arte dos modelos de quebra que postularam o número de partículas geradas e derivaram os modelos de frequência de quebra e distribuição de tamanhos das partículas geradas na quebra.

Outros modelos, como os modelos de COLELLA *et al.* [82], WANG *et al.* [131] e ZHAO e GE [132] não acrescentam informações consideradas relevantes à discussão e não serão avaliados nesse texto.

Não foi encontrado nenhum modelo de quebra aplicável à faixa sub-Kolmogorov de tamanho de partículas.

TSOURIS e TAVLARIDES [91]

TSOURIS e TAVLARIDES [91] foi o primeiro a propor uma formulação para a frequência de quebra e para a distribuição de tamanhos da partícula filha. Eles criticaram o comportamento não-monotônico do modelo de frequência de quebra de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], que foi considerado fisicamente errado, sem explicações adicionais ou dados experimentais, embora o comportamento não-monotônico também ocorra em outros modelos (figura 5.2). Dessa forma, eles pro-

puseram um modelo para a quebra de partículas muito parecido com o modelo de PRINCE e BLANCH [4].

$$b(d) = \mathbf{C}_{tt1} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} S_{de} \left(\overline{u_d^2} + \overline{u_e^2} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\mathbf{C}_{tt2} E_{\min}}{E_e} \right) \frac{dn_e(k)}{dk} dk \quad (5.34)$$

onde a seção reta de colisão foi definida como $S_{de} = \pi(d + d_e)^2$ e o tamanho do vórtice é dado por $d_e = 2/k$. As velocidades médias dos vórtices e das partículas são calculadas por $\overline{u_e^2} \cong 8,2(\epsilon/k)^{2/3}$, $\overline{u_d^2} \cong 1,07(\epsilon d)^{2/3}$, respectivamente, E_e é a energia cinética média do vórtice de tamanho d_e , assumindo que este seja esférico, $\frac{\pi d_e^3}{6} \frac{1}{2} \rho \overline{u_e^2}$ e \mathbf{C}_{tt1} e \mathbf{C}_{tt2} são parâmetros que devem ser determinados experimentalmente. Existem algumas diferenças nas definições feitas por PRINCE e BLANCH [4] e as de TSOURIS e TAVLARIDES [91], que são detalhes numéricos que podem ser completamente absorvidos nos parâmetros empíricos.

A maior diferença entre os modelos de frequência de quebra de TSOURIS e TAVLARIDES [91] e PRINCE e BLANCH [4] é a definição da energia mínima necessária para realizar a quebra, E_{\min} . No modelo de PRINCE e BLANCH [4], ela é a energia associada à velocidade crítica, calculada a partir do número de Weber crítico, obtido da teoria de KOLMOGOROV [109] e HINZE [108]. No modelo de TSOURIS e TAVLARIDES [91], ela é a média da energia de superfície em excesso necessária para gerar um par de partículas. Essa média considera a formação de um par composto pelas menor e maior partículas filhas possíveis e de um par de partículas de mesmo volume:

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \pi \sigma \left[\left(2 \left\{ \frac{d}{2^{1/3}} \right\}^2 - d^2 \right) + (d_{\max}^2 + d_{\min}^2 - d^2) \right] \quad (5.35)$$

onde d_{\min} é o diâmetro da menor partícula filha que pode ser formada na quebra e $d_{\max} = (d^3 - d_{\min}^3)^{1/3}$ o diâmetro da outra partícula resultante desta quebra.

TSOURIS e TAVLARIDES [91], assim como PRINCE e BLANCH [4] e outros autores [112, 123, 126, 130], postulam o tamanho dos vórtices que podem interagir com a partícula. No modelo de TSOURIS e TAVLARIDES [91], o tamanho máximo

é definido pelo tamanho da partícula, mas o tamanho mínimo não é mencionado no artigo. Note que exige-se que as partículas devem estar no intervalo inercial, sendo este a restrição de aplicação do modelo.

LASHERAS *et al.* [7] fizeram uma análise de sensibilidade do tamanho máximo que o vórtice pode ter ($2/k_{\min}$). Os resultados, reproduzidos na figura 5.3, mostram a alta sensibilidade do modelo de TSOURIS e TAVLARIDES [91] a este limite. Quando k_{\min} muda de $2/d$ para $1/d$ a frequência de quebra de bolhas de 1 mm de diâmetro muda de $0,2 \text{ s}^{-1}$ para 32 s^{-1} . Quando $k_{\min} = 2/L_e$, com $L_e = 1 \text{ mm}$ diâmetro da maior partícula considerada, ou seja, para $k_{\min} = 2000$, o comportamento da frequência de quebra com o diâmetro modifica-se qualitativamente.

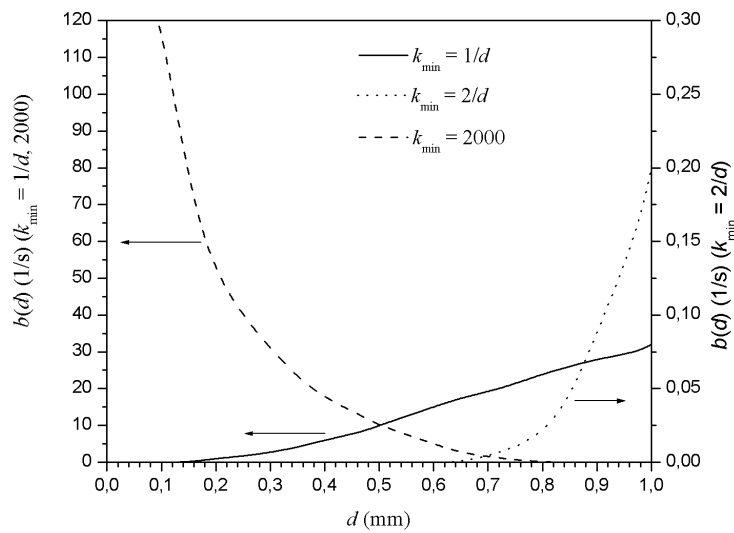


Figura 5.3: Análise da dependência do modelo de frequência de quebra de TSOURIS e TAVLARIDES [91] com o valor de k_{\min} , sistema ar-água, $\sigma = 0,072 \text{ N/m}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ e $\epsilon = 1 \text{ m}^2/\text{s}^3$

LUO e SVENDSEN [112]

LUO e SVENDSEN [112] destaca-se entre os modelos de quebra por ser o modelo mais utilizado na literatura [14, 18, 42, 85, 133], sendo inclusive, um modelo disponível no *software* comercial CFX [134].

LUO e SVENDSEN [112] propuseram um modelo de quebra baseado na frequência de colisão das partículas com vórtices. Assim, a frequência de quebra de partículas com tamanho d devido à interação com vórtices na faixa de tamanho entre d_e e $d_e + dd_e$ é dada pelo produto da frequência de colisão entre partícula e estes vórtices, $\theta_{de}(d)$, e uma eficiência de quebra, $\mathbb{F}(d)$, isto é, $b_e(d) = \theta_{de}(d)\mathbb{F}(d)$.

A frequência de colisão foi modelada como:

$$\theta_{de}(d, d_e) = S_{de} \left(\overline{u_e^2} + \overline{u_d^2} \right)^{1/2} \frac{dn_e}{dd_e} N(d) \quad (5.36)$$

onde a seção reta de colisão foi dada por $S_{de} = (\pi/4)(d + d_e)^2$ [125], a velocidade relativa foi aproximada pela velocidade média dos vórtices, $\left(\overline{u_e^2} + \overline{u_d^2} \right)^{1/2} \approx \left(\overline{u_e^2} \right)^{1/2} \cong \beta^{1/2} (\epsilon d_e)^{1/3}$, com $\beta = 2,045$ e $N(d)$ é a densidade numérica de partículas com diâmetros d .

A densidade numérica dos vórtices, n_e , foi calculada segundo TENNEKES e LUMLEY [56]. Eles afirmaram que a energia cinética contida nos vórtices caracterizados pelo comprimento de onda entre k e $k + dk$ é igual a $E(k)\rho(1 - \phi)(-dk)$, onde $E(k)$ é o espectro de energia associado ao comprimento de onda estabelecido e ϕ é a fração volumétrica da fase dispersa. Por outro lado, a energia cinética contida nos vórtices de tamanho entre d_e e $d_e + dd_e$ é obtida pela relação $(dn_e/dd_e)\rho(\pi/6)d_e^3(u_e^2/2)(dd_e)$.

Dessa forma, com base na relação do comprimento de onda com o tamanho do vórtice ($k = 2\pi/d_e$) e considerando a relação $E(k) = c_1\epsilon^{2/3}k^{-5/3}$, pode-se determinar que (dn_e/dd_e) é dado por :

$$\frac{dn_e}{dd_e} = \frac{0,822(1 - \phi)}{d_e^4} \quad (5.37)$$

onde o fator envolvendo a fração volumétrica da fase dispersa, ϕ , transforma a densidade numérica de vórtices por volume da fase contínua na densidade numérica de vórtices por volume da mistura bifásica. Utilizando as equações 5.36 e 5.37 e a

variável adimensional $\xi = d_e/d$, LUO e SVENDSEN [112] forneceram:

$$\theta_{de}(\xi) = 0,923(1 - \phi)(\epsilon d)^{1/3} \frac{(1 + \xi)^2}{d^2 \xi^{11/3}} N(d) \quad (5.38)$$

Para calcular a eficiência de quebra, LUO e SVENDSEN [112] primeiramente assumem que a quebra é binária. E tal qual outros autores, eles definem que a quebra ocorre sempre que o vórtice tiver energia, $E(d_e)$, suficiente para promover a quebra. LUO e SVENDSEN [112] afirmam que a energia do vórtice deve ser superior ao aumento da energia superficial que ocorre na geração de duas partículas filhas, $\Delta E_s(d, d_1)$, onde d o diâmetro da partícula mãe, d_1 e $(d^3 - d_1^3)^{1/3}$ são, respectivamente, o diâmetro da menor e da maior partícula filha resultante da quebra binária.

LUO e SVENDSEN [112] utilizaram a distribuição exponencial de probabilidade para a energia cinética normalizada, $\chi = E(d)/\bar{E}(d_e)$, dos vórtices de tamanho d_e , dada por:

$$P_e(\chi) = \exp(-\chi), \quad (5.39)$$

sendo que

$$\int_0^\infty P_e(\chi) d\chi = 1 \quad (5.40)$$

Assim, a eficiência de quebra pode ser calculada como sendo igual a probabilidade que o vórtice tenha energia maior que $\Delta E_s(d, d_1)$, o que leva a expressão:

$$\mathbb{F}(d, d_1, d_e) = \int_{\chi_{crit}}^\infty P_e(\chi) d\chi = \exp(-\chi_{crit}), \quad (5.41)$$

sendo

$$\chi_{crit} = \frac{\Delta E_s(d, d_1)}{\bar{E}(d_e)} \quad (5.42)$$

Estas equações fornecem a probabilidade de quebra de uma partícula de tamanho d pela interação com um vórtice de tamanho d_e para originar a menor filha de

tamanho d_1 .

LUO e SVENDSEN [112] chegaram a uma função exponencial (equação 5.41) similar a do modelo de TSOURIS e TAVLARIDES [91]. Entretanto, as formulações que definem a energia cinética média dos vórtices de tamanho d_e , para o subintervalo inercial da turbulência isotrópica, são matematicamente diferentes em um fator multiplicativo. LUO e SVENDSEN [112] considera

$$\bar{E}(d_e) = \frac{\pi d_e^3}{6} \frac{1}{2} \overline{\rho u_e^2} = \frac{\pi \beta}{12} \rho \xi^{11/3} d^3 (\epsilon d)^{2/3} \quad (5.43)$$

verifica-se que ao invés de $\pi\beta/12 = 0,524$, com $\beta = 2$, TSOURIS e TAVLARIDES [91] obtiveram 0,535 (que seria o valor se $\beta = 2,045$).

A outra diferença nesses modelos é a forma da energia crítica. LUO e SVENDSEN [112] definiram-na como o aumento da energia superficial quando a partícula de diâmetro d se quebra ($E_{crit} = \Delta E_s$).

$$\begin{aligned} \Delta E_s(d, d_1) &= \pi \sigma \left[d_1^2 + (d^3 - d_1^3)^{2/3} - d^2 \right] \\ &= \pi \sigma d^2 \left[f_V^{2/3} + (1 - f_V)^{2/3} - 1 \right] \\ &= C_f(f_V) \pi \sigma d^2 \end{aligned} \quad (5.44)$$

onde a fração de volume é dada por $f_V = (d_1/d)^3$ e o fator C_f é definido como $C_f = f_V^{2/3} + (1 - f_V)^{2/3} - 1$, de forma que $C_f \in [0, 2^{1/3} - 1]$.

A integral desta probabilidade para todo valor possível de d_1 deve fornecer o valor unitário, pois o modelo de LUO e SVENDSEN [112] sempre admite que ocorrerá quebra porque o aumento da energia superficial pode tender a zero. Desta forma, uma partícula sempre quebra neste modelo. Isto implica que a verdadeira variável de distribuição da equação 5.41 é $\chi_{crit}(d_e, d_1)$, pois $\int_0^\infty \exp(-\chi_{crit}) d\chi_{crit} = 1$ [93].

LUO e SVENDSEN [112] obtiveram a frequência de quebra da uma partícula de diâmetro d e que gera uma partícula cujo o menor diâmetro é d_1 integrando

$\theta_{de}\mathbb{F}(d, d_1, d_e)$ na faixa relevante dos tamanhos dos vórtices,

$$\Omega(f_V|v)N(d) = \int_{d_{e,\min}}^{d_{e,\max}} \theta_{de}\mathbb{F}(d, d_1, d_e)dd_e \quad (5.45)$$

o que fornece:

$$\Omega(f_V|v) = 0,923(1-\phi)\left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \int_{\xi_{\min}}^1 \frac{(1+\xi)^2}{\xi^{11/3}} \exp(-\chi_{crit}) d\xi, \quad (5.46)$$

com

$$\chi_{crit} = \frac{12C_f(f_V)\sigma}{\beta\rho\epsilon^{2/3}d^{5/3}\xi^{11/3}} \quad (5.47)$$

onde o limite superior da integração desconsiderou todos os vórtices maiores que a partícula e o limite inferior foi definido como o limite do subintervalo inercial de turbulência isotrópica, $\xi_{\min} = d_{\min,e}/d$ com $d_{\min,e}/\eta \approx 11,4 - 31,4$, onde η é a microescala de Kolmogorov.

Na equação 5.46, f_V aparece como a variável da distribuição de tamanhos de partículas filhas, no lugar de d_1 .

Convertendo a variável que representa o tamanho da partícula filha de f_V para v , através da relação $\Omega(v_1|v)dv_1 = \Omega(f_V|v)df_V$, pode-se escrever que $v\Omega(v_1|v) = \Omega(f_V|v)$. Das definições das funções de quebra, tem-se que $\Omega(v_1|v) \equiv \varsigma(v)P(v_1|v)b(v)$. Assim, a integral em v_1 no intervalo $[0, v/2]$ de $\Omega(v_1|v)$ fornece a taxa total de quebra binária da partícula de volume v , ou diâmetro d . Isto equivale a integrar $\Omega(f_V|v)$ em f_V no intervalo $[0, 1/2]$, obtendo:

$$b(v) = \frac{1}{2} \int_0^1 \Omega(f_V|v) df_V = \int_0^{1/2} \Omega(f_V|v) df_V \quad (5.48)$$

$$b(v) = 0,923(1-\phi)\left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \int_{\xi_{\min}}^1 \frac{(1+\xi)^2}{\xi^{11/3}} \int_0^{1/2} \exp(-\chi_{crit}) df_V d\xi \quad (5.49)$$

LASHERAS *et al.* [7] avaliou a dependência do modelo ao limite superior de integração no tamanho dos vórtices e seus resultados estão reproduzidos na figura 5.4.

Pode-se verificar que existem grandes variações para o valor da frequência de quebra (até superiores a 100%) com a alteração do valor de ξ_{\max} de 1 para 2.

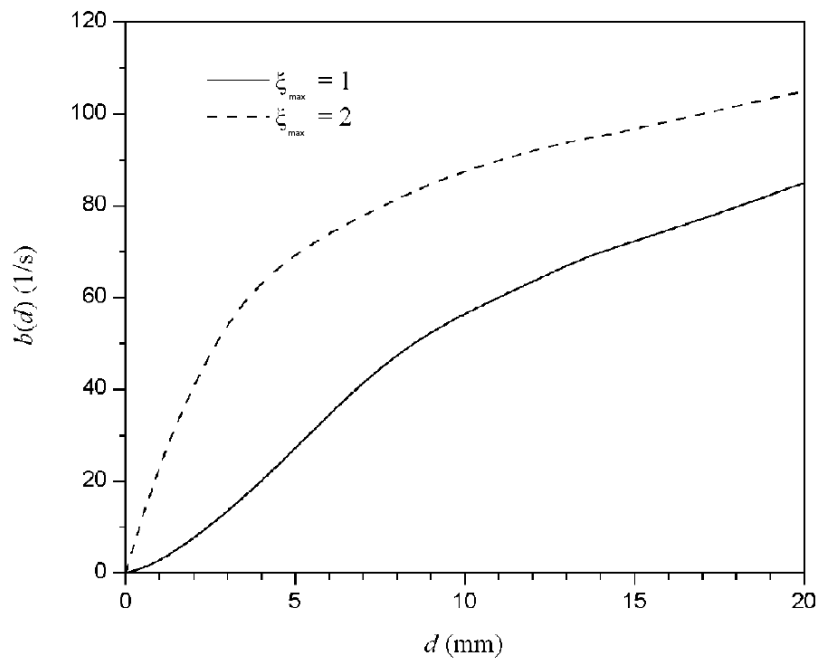


Figura 5.4: Sensibilidade do modelo de LUO e SVENDSEN [112] a variação do limite superior de integração no tamanho dos vórtices, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m³ e $\epsilon = 1$ m²/s³

Um comportamento similar é observado quando se analisa o limite inferior da integração [7, 18, 123]. Essa inconsistência é sistematicamente trabalhada por outros autores tentando encontrar soluções para resolver esse problema [123, 126, 130, 131].

Embora, segundo LUO e SVENDSEN [112] o modelo não dependa de ajuste de parâmetros, ele depende dos limites de integração no tamanho dos vórtices que podem produzir quebra [7, 18, 93, 123, 130, 131] e estudos utilizando otimização de parâmetros mostra que, na verdade, o modelo depende do ajuste do valor de uma constante multiplicativa [10, 14, 18].

HAGESAETHER *et al.* [130]

HAGESAETHER *et al.* [130] contestaram o modelo de LUO e SVENDSEN [112] apontando que o mesmo assume que uma partícula sempre quebra, pois a energia superficial vai a zero quando o diâmetro de uma das partículas filhas vai a zero. Isso implica em um apreciável aumento da taxa total de quebra de partículas com a formação preferencial de partículas pequenas, o que será mostrado ao avaliar a modelagem da distribuição de tamanhos de partículas filhas de LUO e SVENDSEN [112], e impedindo que uma solução estacionária para a equação de balanço populacional seja encontrada ao resolver o problema transiente ($t \rightarrow \infty$), independentemente da malha utilizada.

No modelo de LUO e SVENDSEN [112], existe apenas uma limitação na quebra da partícula: se ela for menor do que o tamanho mínimo dos vórtices considerados, que são aqueles pertencentes à faixa inercial da turbulência isotrópica. Tal limitação não foi considerada por HAGESAETHER *et al.* [130], que assumiram $\xi_{\min} \cong 0$, o que viola as hipóteses usadas no desenvolvimento do modelo de LUO e SVENDSEN [112].

Para eliminar este problema, HAGESAETHER *et al.* [130] fizeram duas modificações na eficiência de quebra de LUO e SVENDSEN [112]. A primeira foi adicionar um novo critério necessário para que a quebra da partícula ocorra, o de *densidade de energia*, ao critério de energia superficial. O critério de densidade de energia é uma proposta que consiste em postular que um vórtice somente pode quebrar uma partícula se a sua densidade de energia cinética, w_e , (energia cinética dividida pelo seu volume) for maior do que a densidade de energia superficial, w_s , (energia superficial dividida pelo volume) da menor partícula formada, isto é:

$$w_e(d_e) \geq w_s(d_1) \tag{5.50}$$

onde

$$w_e(d_e) \equiv \frac{6 E(d_e)}{\pi d_e^3} \quad (5.51)$$

e

$$w_s(d_1) = \frac{6\sigma}{d_1} \quad (5.52)$$

Portanto, um vórtice somente irá quebrar uma partícula de diâmetro d para gerar a menor partícula de diâmetro d_1 se ele tiver energia superior ao aumento de energia da superfície ($E(d_e) \geq \Delta E_s(d, d_1)$) e que a sua densidade de energia seja maior que a da partícula filha de diâmetro d_1 .

A segunda modificação de HAGESAETHER *et al.* [130] foi postular que a probabilidade na quebra de uma partícula é proporcional tanto à diferença entre a energia do vórtice e o aumento de energia superficial associada à quebra quanto à diferença entre as densidades de energia do vórtice e da menor partícula filha. Desta forma a eficiência de quebra de uma partícula de diâmetro d para gerar a menor partícula de diâmetro d_1 devido ao choque com o vórtice de tamanho d_e e energia $\bar{E}(d_e)$ seria dada por:

$$\mathbb{F}[d, d_1, d_e, e(d_e)] \propto [w_e(d_e) - w_s(d_1)] [E(d_e) - \Delta E_s(d, d_1)] \quad (5.53)$$

Os critérios de quebra adotados por HAGESAETHER *et al.* [130] levam às seguintes conseqüências:

1. O critério de energia superficial pode levar a uma restrição ao valor máximo de d_1 , abaixo de seu valor máximo obtido pela quebra em duas partículas de mesmo tamanho, $\max(d_1) = d/\sqrt[3]{2}$, caso a energia do vórtice seja inferior ao máximo de $\Delta E_s(d, d_1)$, isto é, $E(d_e) < \Delta E_s\left[d, d/\sqrt[3]{2}\right]$. Estabelece-se, assim, um valor máximo de diâmetro da menor filha, $d_{1,\max}$, para o qual a

equação 5.53 se aplica, obtido por:

$$d_1 \leq d_{1,\max} = \begin{cases} \text{solução de } \bar{E}(d_e) = \Delta E_s [d, d_{1,\max}], \text{ para } E(d_e) < \Delta E_s [d, d/\sqrt[3]{2}] \\ d/\sqrt[3]{2}, \text{ em caso contrário} \end{cases}$$

2. O critério de densidade de energia, equação 5.50, estabelece um valor mínimo para d_1 para o qual a equação 5.53 se aplica,

$$d_1 \geq d_{1,\min} \equiv \frac{\pi \sigma d_e^3}{E(d_e)} \quad (5.54)$$

Assim podemos escrever a probabilidade de quebra por:

$$\mathbb{F}[d, d_1, d_e, E(d_e)] = \begin{cases} \frac{[w_e(d_e) - w_s(d_1)] [\bar{E}(d_e) - \Delta E_s(d, d_1)]}{\int_{d_{1,\min}}^{d_{1,\max}} [w_e(d_e) - w_s(x)] [\bar{E}(d_e) - \Delta E_s(d, x)] dx}, & d_1 \in [d_{1,\min}, d_{1,\max}] \\ 0, & d_1 \notin [d_{1,\min}, d_{1,\max}] \end{cases} \quad (5.55)$$

Além disso, para um dado tamanho do vórtice, $d_{1,\min}$ cresce indefinidamente com a diminuição da energia do vórtice enquanto que $d_{1,\max}$ cresce com o aumento da energia do vórtice até atingir o maior valor possível, $\max(d_1) = d/\sqrt[3]{2}$.

Desta forma, existe um valor da energia do vórtice para o qual $d_{1,\min} = d_{1,\max}$, que é chamado de *ponto crítico de quebra*, $E_{PCQ}(d, d_e)$, pois qualquer vórtice de tamanho d_e com energia inferior a este limite não quebra a partícula de diâmetro d porque os dois critérios não são simultaneamente satisfeitos.

Para o cálculo das taxas de quebra, HAGESAETHER *et al.* [130] consideraram a mesma expressão que LUO e SVENDSEN [112] para a taxa de colisão específica entre partícula e os vórtices, dada pela equação 5.38, mas com a velocidade relativa entre vórtice e partícula sendo dada por $[\bar{u}_j^2(d) + \bar{u}_i^2(d_e)]^{1/2}$ com $\bar{u}_i^2(d) \cong \beta(\epsilon d)^{2/3}$.

HAGESAETHER *et al.* [130] definiram que o vórtice deve ter o valor máximo

de $10d$, ignorando a restrição $10d < L$. Isso elimina a sensibilidade observada na figura 5.4, mas introduz uma limitação de aplicação do modelo, especialmente em escala laboratorial, pois nesses casos, normalmente a escala integral é bem menor que na escala industrial.

HAGESAETHER *et al.* [130] evitaram calcular diretamente o modelo empregando discretizações tanto na variável de distribuição de energia, χ , quanto no tamanho dos vórtices, d_e , fornecendo:

$$\Omega(v_1|v) = 0,923 \frac{(1-\phi)}{d} \left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \sum_{d_{e,\min}} \frac{(1+d_e/d)^2 \left[1+(d_e/d)^{2/3}\right]^{1/2}}{(d_e/d)^4} \mathbb{F}(d, d_1, d_e) \quad (5.56)$$

com

$$\mathbb{F}(d, d_1, d_e) = \sum_{E(d_e) > E_{\min}} \mathbb{F}[d, d_1, d_e, E(d_e)] \omega_{e(d_e)}(d, d_e, E(d_e)) \quad (5.57)$$

onde ω_e fornece a fração de vórtices de tamanho d_e que possui energia $E(d_e)$, tal que:

$$\sum_{E(d_e)} \omega_{\bar{E}(d_e)}(d, d_e, e(d_e)) \cong \int_{\chi_c}^{\infty} \exp(-\chi) d\chi = \exp(-\chi_c) \quad (5.58)$$

A metodologia matemática utilizada pelos autores para calcular o resultado da equação pode ser encontrada no artigo original [130] e não será detalhada nesse texto.

No contexto na análise física do modelo, cabe ressaltar apenas que a discretização exige a imposição de um valor mínimo de tamanho de vórtice. Os autores dizem ter usado um valor muito próximo de zero, mas não esclarecem que valor é esse. No texto de sua tese [93], Hagesaether deixa subentendido que o valor utilizado foi o menor valor possível que não introduziu erros numéricos a solução de seu problema. Portanto, permite-se concluir que o diâmetro mínimo de vórtices é um problema em aberto, embora os autores do modelo não compartilhem dessa conclusão.

Por fim, porém não menos importante, a quebra é binária. Essa hipótese está intimamente interligada na dedução do modelo e não pode ser alterada, pois havendo, por exemplo, três partículas, o modelo seria capaz de fornecer a frequência de quebra da menor partícula d_1 , mas não seria capaz de fornecer a frequências de quebra das demais partículas, pois não haveria forma de propor uma fechamento na equação de integração da probabilidade de quebra em todos os tamanhos possíveis.

Os modelos de LEHR *et al.* [126] e de WANG *et al.* [131] são muito parecidos a modelagem de HAGESAETHER *et al.* [130] e LUO e SVENDSEN [112]. As diferenças entre eles são baseadas nas escolhas que foram feitas para a modelagem da frequência de colisão e, principalmente, na definição dos limites de vórtices que podem induzir a quebra de uma certa partícula de tamanho d , ou seja, na forma funcional da eficiência de quebra.

LEHR *et al.* [126]

LEHR *et al.* [126] utilizaram a mesma frequência de colisão entre vórtices e uma dada partícula que LUO e SVENDSEN [112] (equação 5.38) considerando de que a velocidade relativa entre vórtice e partícula é igual a

$$\left(\overline{u_e^2} + \overline{u_d^2}\right)^{1/2} \approx \left(\overline{u_e^2}\right)^{1/2} \cong \beta^{1/2} (\epsilon d_e)^{1/3} \quad (5.59)$$

com $\beta = 2$, que também é a abordagem utilizada por LUO e SVENDSEN [112]. Entretanto, diferenciaram-se de LUO e SVENDSEN [112] na definição de densidade numérica dos vórtices, que foi definida sem o termo envolvendo a fração volumétrica da fase dispersa e com uma constante multiplicativa ligeiramente diferente :

$$\frac{dn_e}{dd_e} = \frac{0,8413}{d_e^4} \quad (5.60)$$

a origem da diferença está na consideração do valor empírico embutido nessa constante.

Assim, LEHR *et al.* [126] chegaram a seguinte expressão para a frequência de colisão entre o vórtice e uma partícula:

$$\theta_{de}(d) = 0,934 (d + d_e)^2 (\epsilon d_e)^{1/3} d_e^{-4} = 0,934 (\epsilon d)^{1/3} \frac{(1 + \xi)^2}{d^2 \xi^{11/3}} \quad (5.61)$$

A eficiência de quebra foi definida por LEHR *et al.* [126] tal que a quebra ocorra sempre que a força de pressão dinâmica do vórtice, $0,5\rho u_e^2$, for maior do que a força de tensão superficial da partícula mãe, de diâmetro d , que é calculada assumindo que a partícula está alongada na forma de um cilindro com diâmetro igual a da menor partícula filha a ser formada, d_1 , sendo dada por $2\sigma/d_1$. ANDERSSON e ANDERSSON [123] verificaram experimentalmente que esse postulado de formação de uma partícula alongada na forma de um cilindro é válido, embora em cada caso tenha sido utilizado teoria diferente para explicar esse processo. Desta forma, o critério de quebra é dado por um balanço de tensões na forma:

$$\frac{1}{2}\rho u_e^2 \geq 2\frac{\sigma}{d_1} \quad (5.62)$$

onde o lado esquerdo da equação é a energia cinética do vórtice por unidade de volume, isto é, a densidade de energia, $w_e(d_e)$, e o lado direito é a densidade de energia superficial da menor partícula filha, $w_s(d_1)$. Ambas definidas por HAGESAETHER *et al.* [130].

De fato, a hipótese de HAGESAETHER *et al.* [130] e LEHR *et al.* [126] são parecidas, porém a hipótese de LEHR *et al.* [126], fisicamente, corresponde a pressão dinâmica maior que pressão interfacial, enquanto HAGESAETHER *et al.* [130] não possui base física, poi o critério envolvendo as densidades de energia definidas não tem base física.

ANDERSSON e ANDERSSON [123] utilizaram a mesma formulação de LEHR *et al.* [126] como um dos seus critérios de quebra e a consideraram validada experimentalmente segundo os dados de ANDERSSON e ANDERSSON [111].

A eficiência de quebra de uma partícula de diâmetro d quando colide com um vórtice de tamanho d_e para gerar a menor partícula filha com diâmetro d_1 , $\mathbb{F}(d, d_1, d_e)$, é igual a definida exatamente da mesma forma que LUO e SVENDSEN [112] (equação 5.41), isto é:

$$\mathbb{F}(d, d_1, d_e) = \int_0^\infty P_e(\chi) \mathbb{F}[d, d_1, d_e, \chi] d\chi = \int_{\chi_{crit}}^\infty P_e(\chi) d\chi = \exp(-\chi_{crit}) \quad (5.63)$$

Porém, assumindo partículas filhas esféricas e os critérios deste modelo χ_{crit} é dado por:

$$\chi_{crit}(\xi, v_1, v) = \frac{[\Delta E]_s}{\bar{E}(d_e)} = \frac{2\sigma/d_1}{0,5\rho u_e^2} = \frac{2(\pi/6)^{1/9} \sigma}{v_1^{1/3} \rho v^{2/9} (\epsilon\xi)^{2/3}} \quad (5.64)$$

onde $v_1 = \pi d_1^3/6$ é o volume da menor partícula filha.

Ao contrário de LUO e SVENDSEN [112], LEHR *et al.* [126] interpretaram **corretamente** que a variável de distribuição que caracteriza a menor partícula filha é χ_{crit} , relacionado-a com d_1 ou v_1 dentro das hipóteses do modelo.

LEHR *et al.* [126] determinaram a frequência de quebra das partículas de diâmetro d , ou volume v , para gerar duas partículas (quebra binária) com o volume da menor partícula, v_1 , em uma faixa de valores que corresponde ao intervalo entre χ_{crit} e $\chi_{crit} + d\chi_{crit}$, na forma:

$$\Omega(\chi_{crit}|v) = 0,943 \left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \int_{\xi_{min}}^{\xi_{max}} \frac{(1+\xi)^2}{\xi^{11/3}} \exp(-\chi_{crit}) d\xi \quad (5.65)$$

A integral de Ω ao longo de todo o domínio possível de qualquer variável de distribuição deve fornecer o mesmo resultado. Assim, para v_1 , d_1 e f_V tem-se que:

$$b(v) = \int_0^{v/2} \Omega(v_1|v) dv_1 = \int_0^{d/\sqrt[3]{2}} \Omega(d_1|d) dd_1 = \int_0^{1/2} \Omega(f_V|v) df_V \quad (5.66)$$

enquanto que para χ_{crit}

$$\int_0^{v/2} \Omega(v_1|v) dv_1 = 0,943 \left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \int_{\xi_{min}}^{\xi_{max}} \frac{(1+\xi)^2}{\xi^{11/3}} \int_{\chi_{crit,min}}^\infty \exp(-\chi_{crit}) d\chi_{crit} d\xi \quad (5.67)$$

onde o limites da integral em χ_{crit} são obtidos da equação 5.64 com $\chi_{c,\min} = \chi_{crit}(\xi, v/2, v)$.

Da equação 5.64 obtemos que:

$$\frac{d\chi_{crit}}{\chi_{crit}} = -\frac{dv_1}{3v_1} \quad (5.68)$$

Assim, podemos escrever:

$$\Omega(v_1|v) = 0,943 \left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \int_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} \frac{(1+\xi)^2}{\xi^{11/3}} \frac{\chi_{crit}}{3v_1} \exp(-\chi_{crit}) d\xi \quad (5.69)$$

LEHR *et al.* [126] definiram os limites de integração assumindo que apenas vórtices com tamanho entre o diâmetro da partícula mãe e o diâmetro da menor partícula filha contribuía para a frequência de quebra, ou seja, $d_1 \leq d_e \leq d$ ou $d_1/d \leq \xi \leq 1 \Rightarrow \xi_{\min} = d_1/d$ e $\xi_{\max} = 1$

Logo, a frequência total de quebra da partícula de volume v é dada integrando $\Omega(v_1|v)$ em v_1 , que fornece:

$$b(v) = 0,943 \left(\frac{\epsilon}{d^2}\right)^{1/3} \int_0^{v/2} \int_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} \frac{(1+\xi)^2}{\xi^{11/3}} \frac{\chi_{crit}}{3v_1} \exp(-\chi_{crit}) d\xi dv_1 \quad (5.70)$$

Na realidade, a variável de distribuição de tamanho da menor partícula filha na equação que define Ω em um dado modelo é aquela definida pela eficiência ou probabilidade de quebra, \mathbb{F} .

Comparando os modelos LUO e SVENDSEN [112] e LEHR *et al.* [126], as únicas diferenças são:

1. o limite inferior de integração: $\xi_{\min} = d_1/d$ no modelo de LEHR *et al.* [126], enquanto que ξ_{\min} no modelo de LUO e SVENDSEN [112] vem do limite inferior do intervalo inercial da turbulência isotrópica $\xi_{\min} = d_{\min,e}/d$,

2. o valor de χ_{crit} : no modelo de LEHR *et al.* [126] esse termo é obtido por um critério de tensão, enquanto no modelo de LUO e SVENDSEN [112] ele é baseado em um critério de energia,
3. uma pequena variação no termo multiplicativo da integral, e
4. o correto equacionamento da variável de distribuição de \mathbb{F} .

Como o modelo LEHR *et al.* [126] mantém o limite superior da integral no tamanho dos vórtices igual ao tamanho da partícula mãe, ele apresenta o mesmo problema de sensibilidade ao valor de ξ_{max} observado no modelo de LUO e SVENDSEN [112].

Quase todos os modelos citados até aqui, com exceção dos modelos de ANDERSSON e ANDERSSON [123] e de CRISTINI *et al.* [124], foram construídos a partir de diversos postulados sobre o comportamento das partículas no campo de turbulência e, então, empregados para analisar o comportamento de sistemas polidispersos de interesse, usualmente vasos agitados ou colunas de borbulhamento.

Os escoamentos de colunas de bolhas e tanques agitados são complexos demais para a validação de modelos de quebra de partículas. Eles possuem um campo de turbulência de difícil caracterização, sendo não homogêneo e anisotrópico. Também existem efeitos associados à presença de velocidade relativa entre as fases, causada ou não por empuxo, e efeitos de paredes sólidas móveis sobre as partículas, que originam outros mecanismos de quebra de partículas, como a quebra devido à ação de uma pá de agitação (colisão ou geração de campo fortemente cisalhante).

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129]

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] realizaram um extenso estudo da quebra de bolhas de ar com velocidade relativa praticamente nula em um jato de água turbulento axialmente simétrico em um equipamento cuidadosamente projetado e operado

para evitar a interferência de outros efeitos que não a turbulência. O escoamento turbulento foi caracterizado e as medidas foram realizadas em regiões do escoamento com turbulência completamente desenvolvida e localmente homogênea e isotrópica.

Os efeitos de empuxo são desprezíveis devido à grande velocidade do jato em relação à velocidade terminal das bolhas e ao fato de que as bolhas permaneciam na zona de medição um tempo muito menor (tempo de residência inferior a 0,01 s) do que o necessário para elas serem aceleradas até a sua velocidade terminal. Efeitos de oscilações na forma das bolhas foram também considerados pouco importantes porque o tempo de residência das bolhas na zona de medição eram inferiores ao tempo de resposta das oscilações.

A fração volumétrica da fase dispersa foi sempre inferior a 10^{-5} , de forma que as bolhas não interferem na turbulência da fase contínua e a coalescência de bolhas pode ser desprezada. Na região de medida, o valor de ϵ variou menos de 10%, sendo a turbulência praticamente homogênea e isotrópica. Valores de ϵ nos experimentos foram na faixa de 25 a 2700 m^2s^{-3} . As distribuições de tamanho das bolhas foram medidas por cuidadosa análise de imagens obtidas por filmagem de alta velocidade.

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] determinaram experimentalmente a frequência de quebra das bolhas pertencentes a maior classe das bolhas consideradas, para a qual a equação de balanço populacional pode ser simplificada pela exclusão do termo de nascimento por quebra. A EBP gera uma relação direta entre a frequência de quebra e a evolução da quantidade de bolhas nesta classe por integração em regime estacionário. Os autores verificaram que a taxa de quebra obtida experimentalmente aumentava com a dissipação de energia, ϵ , na forma de uma lei de potência com o expoente de ϵ igual a 0,37 – 0,39. Essa dado é concordante com a dependência prevista pelo modelo proposto por eles e que será visto a seguir.

A partir do comportamento experimental, MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] propuseram um modelo fenomenológico no qual a quebra origina-se da deformação da partícula causada pela sua interação com a turbulência do escoamento.

A deformação da partícula é controlada por um balanço de tensões, conforme a teoria clássica de HINZE [108] e KOLMOGOROV [109]. A energia mínima necessária para deformar a partícula está associada a soma da sua energia superficial ($E_s = \pi\sigma d^2$) e a energia viscosa associada à taxa de deformação do fluido no interior da partícula ($E_p \propto (\mu_d U/d)(\pi d^3/6) \propto \mathcal{R}e_p(\mu_d^2/\rho_d d^2)(\pi d^3/6)$, onde $\mathcal{R}e_{int} \equiv \rho_d U d/\mu_d$).

Note que o número de Ohnesorge pode ser interpretado como a raiz quadrada da razão entre as tensões viscosa e a superficial ou, equivalentemente, entre a densidade de energia viscosa e superficial, pois $\mathcal{O}h^2 = (\mu_d^2/\rho_d d^2)(\sigma/d)^{-1}$. Como o número de Ohnesorge é muito pequeno (menor que 10^{-2}) para bolhas, a energia superficial é a única parcela relevante. Assim, a tensão que tende a manter a partícula coesa é apenas a tensão associada à energia superficial, \mathcal{T}_s , cuja a magnitude é expressa por:

$$\mathcal{T}_s(d) = \frac{E_s}{\pi d^3/6} = \frac{6\sigma}{d} \quad (5.71)$$

onde se assume que a partícula fluida mantém a forma esférica. De forma geral, temos

$$\mathcal{T}_s(d) = k_s \frac{\sigma}{d} \quad (5.72)$$

onde k_s é uma constante que depende da forma geométrica da partícula.

Assumindo que as partículas estejam na faixa inercial da turbulência isotrópica, a tensão média originadas das flutuações de velocidade existentes entre dois pontos na fase contínua separados de uma distância d pode ser calculada por:

$$\mathcal{T}_t(d) = \frac{1}{2} \overline{\rho u_t^2}(d) \quad (5.73)$$

onde $\overline{u^2}(d)$ é o valor médio quadrático das flutuações de velocidade entre dois pontos separados de uma distância d . Note que a equação 5.73 também representa uma densidade de energia.

A condição de igualdade de tensões, $\mathcal{T}_t(d) = \mathcal{T}_s(d)$, estabelece um diâmetro crítico, d_{crit} . Partículas com diâmetros menores que o crítico não quebram, enquanto

que as partículas com diâmetros maiores que o crítico quebram porque sua energia superficial de coesão seria inferior à energia dinâmica para a sua deformação [108, 109]. Para d pertencente ao intervalo inercial, temos

$$\overline{u^2(d)} = \beta (\epsilon d)^{2/3}, \quad (5.74)$$

com $\beta = 8,2$, de forma que o diâmetro crítico é fornecido por:

$$d_{crit} = \left(\frac{12\sigma}{\beta\rho} \right)^{3/5} \epsilon^{-2/5} \quad (5.75)$$

Para uma partícula de diâmetro d , tal que $d > d_{crit}$, dois pontos em sua superfície são separados pela distância d' , $d_{min} < d' < d$, onde d_{min} é a distância na qual a tensão dinâmica associada as flutuações de velocidade se iguala a tensão interfacial da partícula:

$$\frac{1}{2}\rho\beta (\epsilon d_{min})^{2/3} = \frac{6\sigma}{d} \Rightarrow d_{min} = \left(\frac{12\sigma}{\beta\rho d} \right)^{3/2} \epsilon^{-1} \quad (5.76)$$

Como há uma faixa de valores possíveis para d' é de se esperar que a partícula possa quebrar gerando filhas de diferentes tamanhos.

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] postularam que a velocidade característica de quebra da partícula, u_b , é dependente da diferença entre o gradiente de pressão dinâmica exercida na superfície da partícula devido às flutuações de velocidade, $0,5\rho\overline{u^2(d)}$, e a pressão coesiva associada à tensão interfacial, $6\sigma/d$, devendo ir a zero quando as duas tensões se igualarem. Desta forma, eles assumiram que o tempo de quebra da partícula, t_b , é dado por:

$$t_b \propto \frac{d}{u_b} = \frac{d}{\sqrt{\overline{u^2(d)} - 12\sigma/(\rho d)}} \quad (5.77)$$

A frequência de quebra de uma partícula de diâmetro d é o inverso do tempo de

quebra dessa partícula, sendo, então, dada por:

$$b(d) = C \frac{\sqrt{\overline{u^2(d)} - 12\sigma/(\rho d)}}{d} = C \frac{\sqrt{\beta(\epsilon d)^{2/3} - 12\sigma/(\rho d)}}{d} \quad (5.78)$$

onde C para bolhas foi obtido experimentalmente como igual a $0,25 \pm 0,03$. A concordância com os dados experimentais foi dentro do erro experimental de 10%. Pode ser escrito utilizando a definição de número de Weber, de forma que:

$$b(d) = \frac{C}{d} \sqrt{\frac{2\sigma}{\rho d}} \sqrt{\mathcal{W}e - \mathcal{W}e_{crit}} \quad (5.79)$$

com $\mathcal{W}e_{crit} = 6$ e $\mathcal{W}e = \rho \left[\overline{u^2(d)} \right] r/\sigma$, sendo $\overline{u^2(d)} = \beta(\epsilon d)^{2/3}$.

Pode-se converter o termo $1/d \sqrt{\frac{2\sigma}{\rho d}}$ nos números de Capilar, Ohnesorge da fase contínua (que utiliza a densidade e a viscosidade da fase contínua e não da fase dispersa), resultando em uma expressão com a seguinte forma funcional:

$$b(d) = C \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\sqrt{\epsilon/\nu}}{\mathcal{C}a} \mathcal{O}h_c \sqrt{\mathcal{W}e - \mathcal{W}e_{crit}} \quad (5.80)$$

com $\mathcal{C}a = \mu \sqrt{\epsilon/\nu} d/2\sigma$ e $\mathcal{O}h_c = \mu/\sqrt{\rho\sigma d}$. Escrevendo o número de Ohnesorge modificado em função do número de Reynolds da partícula e o número de Weber, pode-se escrever

$$b(d) = C \frac{\sqrt{\epsilon/\nu}}{\mathcal{C}a} \sqrt{\frac{\mathcal{W}e}{\mathcal{R}e_p^2}} \sqrt{\mathcal{W}e - \mathcal{W}e_{crit}} \quad (5.81)$$

onde $\mathcal{R}e_p = \rho [u(d)] d/(2\mu)$.

Analisando a dependência da frequência de quebra com o diâmetro da partícula (equação 5.78), observa-se que esta passa por um valor máximo quando o diâmetro é definido por $d_{b,max} = (3/2)^{6/5} d_{crit} \cong 1,63 d_{crit}$. Assim, o valor máximo da frequência de quebra é dado por:

$$b_{max} = b(d_{b,max}) = \frac{C 3^{4/5} \beta^{9/10} \sqrt{5}}{27} \left(\frac{\rho}{\sigma} \right)^{2/5} \epsilon^{3/5} \quad (5.82)$$

No limite de partículas muito grandes, $d \gg d_{crit}$, a tensão superficial pode ser desprezada frente a tensão dinâmica das flutuações de velocidade e a equação 5.78 reduz-se a: $b(d) \approx C\beta^{1/2}\epsilon^{1/3}d^{-2/3}$ para $d \gg d_{b,max}$

Por outro lado, para partículas com diâmetro d tal que $d_{crit} < d < d_{b,max}$ é possível obter o comportamento da frequência de quebra quando $d \approx d_{crit}$, que são as condições vigentes em sistemas onde a quebra ocorre em condições próximas ao equilíbrio da distribuição de tamanho. A equação 5.78 pode ser escrita em termos da variável adimensional $x = d/d_{crit}$ na seguinte forma:

$$b(x) = C \left(\frac{12\sigma}{\rho} \right)^{-2/5} \beta^{9/10} \epsilon^{3/5} \left[x^{-3/2} \sqrt{x^{5/3} - 1} \right] \quad (5.83)$$

Aproximando o termo da equação 5.83 entre colchetes pelo primeiro termo de sua série de Taylor em torno de $x = 1$, obtém-se:

$$b(d) = C \frac{\sqrt{15}}{3} \left(\frac{12\sigma}{\rho} \right)^{-2/5} \beta^{9/10} \epsilon^{3/5} \sqrt{\frac{d}{d_{crit}} - 1} \quad (5.84)$$

para $d/d_{crit} \approx 1$. Esta condição é a usualmente válida quando o valor de ϵ não é muito elevado. Nesta região de d , $b(d)$ é monotonicamente crescente com $\sqrt{d/d_{crit} - 1}$ que fornece um comportamento da frequência de quebra com o diâmetro da partícula similar aos obtidos por outros modelos [106, 123, 130, 131]

A figura 5.5 mostra o comportamento do modelo com a variação do diâmetro da partícula mãe. Percebe-se a presença de um ponto máximo em todas as curvas e que a frequência de quebra aumenta com o aumento da energia de dissipação turbulenta, ϵ .

O modelo MARTÍNEZ-BAZÁN [128] contraria o “sentimento” introduzido por TSOURIS e TAVLARIDES [91] de que, com o aumento do diâmetro da partícula, maior é a frequência de quebra (comportamento monotônico) e reafirma trabalhos anteriores [4, 73, 116] de que existe um valor máximo para a frequência de quebra relativa a um determinado diâmetro. Deve-se ressaltar que TSOURIS e TAVLAR-

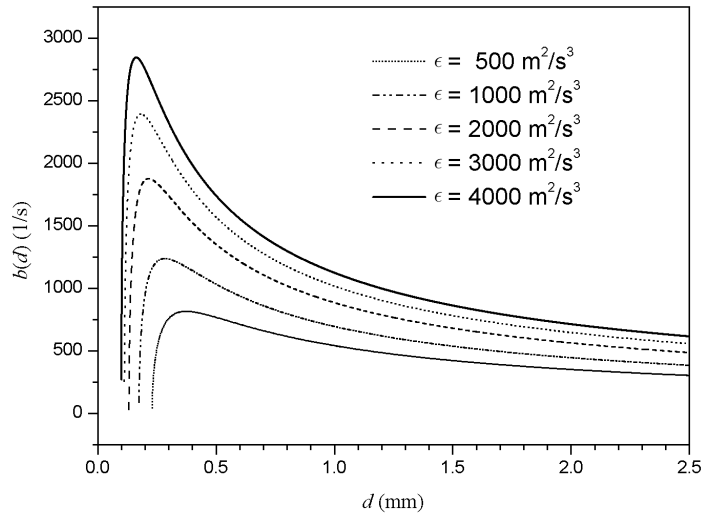


Figura 5.5: Comportamento do modelo de frequência de quebra de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] com o diâmetro da partícula mãe, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m e $\rho = 1000$ kg/m³

IDES [91] criticaram o comportamento não-monotônico de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] sem justificativas teóricas ou experimentais. No trabalho experimental de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128], o comportamento não-monotônico foi novamente observado.

De fato, pode-se imaginar que se uma partícula é muito pequena, sua força de coesão é grande. Conforme a partícula aumenta de tamanho, essa força diminui. Portanto, a partir de um diâmetro crítico, inicialmente o tempo de quebra diminui, assim, a frequência de quebra aumenta. Com o aumento do diâmetro, haverá um valor no qual o tamanho da partícula passa a influenciar a quebra, pois uma partícula tem que ser “estrangulada” para que ela quebre. Se a partícula é muito grande, mesmo que o fluido interno da partícula não ofereça resistência ao processo, o tempo que leva para que o estrangulamento se conclua é maior e, portanto, o tempo de quebra é maior. Assim, a frequência de quebra diminui. Logo, em teoria, o comportamento não-monotônico é mais fácil de explicar do que o comportamento monotônico.

O grande número de modelos com comportamento monotônico pode ser uma

conseqüência dos dados experimentais disponíveis para ratificar o modelo. Se todas as partículas possuem um tamanho inferior ao tamanho no qual a freqüência é máxima, os resultados indicariam que a freqüência de quebra é monotônica para aquela faixa de diâmetros avaliados. Dessa forma, o comportamento não-monotônico não seria observado porque as partículas não possuem uma faixa de tamanhos grande o suficiente naquele sistema.

O modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] é o **único** dos modelos de quebra revisados que tem uma forte base experimental e apresentou resultados para a quebra de bolhas com qualidade muito superior aos outros modelos [7]. Este é o modelo recomendado por RAFIQUE *et al.* [85] e MITRE *et al.* [10] para a simulação de colunas de borbulhamento.

5.3 Modelagem da distribuição de tamanhos das partículas filhas

A modelagem da distribuição de tamanhos das partículas originadas na quebra dividem-se em quatro classes de modelos de quebra [7, 18, 85]:

1. os modelos estatísticos (VALENTAS *et al.* [113], COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], HSIA e TAVLARIDES [117], LEE *et al.* [122], CHATZI *et al.* [95], HESKETH [120], CHATZI e KIPARISSIDES [135], PRINCE e BLANCH [4], entre outros),
2. os modelos fenomenológicos baseados em considerações sobre colisões entre partículas e vórtices (NAMBIAR *et al.* [136], TSOURIS e TAVLARIDES [91], LUO e SVENDSEN [112], HAGESAETHER *et al.* [130], LEHR *et al.* [126], WANG *et al.* [131]),
3. os modelos híbridos, que envolvem uma combinação das duas alternativas acima (KONNO *et al.* [116]),

4. os modelos fenomenológicos baseados em considerações envolvendo as tensões turbulentas e de superfície (MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129]).

Para os modelos de quebra que fornecem uma expressão para a taxa específica de quebra, a função de distribuição de probabilidade de tamanho das partículas filhas é calculada por:

$$P(v_1|v) = \frac{\Omega(v_1|v)}{\varsigma(v)b(v)} \quad (5.85)$$

Assumindo que a partícula possui a forma esférica

$$v_1 = \frac{m_1}{\rho_d} = \frac{\pi d_1^3}{6}, \quad (5.86)$$

e é formada por um fluido é incompressível, e lembrando que o tamanho da partícula filha é uma variável de distribuição, temos que:

$$P(m_1|m) dm_1 = P(v_1|v) dv_1 = P(f_V|v) df_V = P(d_1^3|d^3) dd_1^3 = P(d_1|d) dd_1 \quad (5.87)$$

o que permite relacionar as diferentes formas de escrever a função de distribuição de probabilidade de tamanho das partículas filhas por:

$$m_1 P(m_1|m) = v_1 P(v_1|v) = f_V P(f_V|v) = d_1^3 P(d_1^3|d^3) = \frac{d_1}{3} P(d_1|d) \quad (5.88)$$

Como a unidade da função de distribuição de probabilidade de tamanho das partículas filhas, P , é igual ao inverso da unidade da variável de distribuição, também é comum definir uma forma adimensional de P multiplicando-o pela mesma variável, mas relativa à partícula mãe. Por exemplo, $vP(v_1|v)$ e $d^3P(d_1^3|d^3)$ são formas adimensionais muito usadas para mostrar o comportamento das funções de distribuição.

5.3.1 Modelos estatísticos

Os modelos estatísticos postulam as formas funcionais de $\zeta(m)$ e $P(m_1|m)$. Em termos práticos, postulam a forma funcional de $P(m_1|m)$ e, usualmente, utilizam $\zeta(m) = 2$.

VALENTAS *et al.* [113] propuseram que a quebra ocorre em duas partículas de mesma massa, de forma que:

$$P(m_1|m) = \delta\left(m_1 - \frac{m}{2}\right) \quad (5.89)$$

COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] consideraram que o tamanho de uma das partículas formadas em uma quebra binária era normalmente distribuída no volume da partícula, tal que:

$$P(v_1|v) = \frac{12}{5v} \exp\left[-\frac{9}{2} \frac{(2v_1 - v)^2}{v^2}\right] \quad (5.90)$$

Essa distribuição foi truncada de tal forma que 99,6% das partículas são formadas com o volume entre 0 e o volume da partícula mãe. Assim, sabe-se que a integral dessa distribuição em todos os tamanhos possíveis não é 1, como deveria ser, mas sim, 0,995.

HSIA e TAVLARIDES [117] mostraram que o modelo estatístico de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73] não consegue reproduzir diversos resultados experimentais a utilização de uma distribuição das partículas filhas dadas por uma função beta. A forma empregada por eles foi:

$$P(v_1|v) = \frac{30}{v} \left(\frac{v_1}{v}\right)^2 \left(1 - \frac{v_1}{v}\right)^2 \quad (5.91)$$

Eles também assumiram quebra binária.

LEE *et al.* [122] também assumiram uma distribuição beta para o volume das partículas filhas na forma:

$$P(v_1|v) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \frac{v_1^{a-1} \left(1 - \frac{v_1}{v}\right)^{b-1}}{v} \quad (5.92)$$

onde a e b são constantes empíricas que, para quebra binária, tiveram seus valores ajustadas para dados experimentais de um reator *air-lift*, fornecendo $a = b = 2$.

A distribuição beta é uma função de dois parâmetros que varia muito de forma com os valores destes parâmetros e, por isso, permite ajustar com facilidade uma variedade de dados experimentais.

HESKETH *et al.* [120] investigaram experimentalmente a quebra de partículas em escoamentos turbulentos em tubos. Eles tentaram interpretar seus resultados usando diversas distribuições de probabilidade de tamanho das partículas filhas considerando quebra binária, incluindo a quebra em partículas iguais, quebra aleatória (distribuição uniforme), quebra por atrito (maior probabilidade de gerar partículas muito pequenas que seriam arrancadas da partícula mãe pela ação do escoamento) e uma distribuição empírica que é dada por:

$$P(v_1|v) = \frac{C_n}{v} \left(\frac{1}{v_1 + Bv} + \frac{1}{v - v_1 + Bv} + \frac{1}{2B - 1} \right) \quad (5.93)$$

onde B é um parâmetro determinado experimentalmente e C_n é uma constante de normalização dada por:

$$C_n = \frac{1}{2} \frac{2B - 1}{(2B - 1) [\ln(B) - \ln(1 + B)] + 2} \quad (5.94)$$

Esse modelo tem a forma de U, ou seja, preve uma pequena quantidade de partículas com tamanhos parecidos.

HESKETH *et al.* [120] concluíram que seu modelo não é muito bom, pois ele não conseguiu reproduzir adequadamente seus próprios dados experimentais, devido ao

fato de que subestimava o número de partículas filhas na região $0,225 \leq f_V \leq 0,5$.

Embora sem nenhuma base física, este modelo empírico introduziu uma forma em U para a distribuição de probabilidade de tamanho das partículas filhas que é a obtida em diversos modelos baseados na colisão de partículas e vórtices e na energia de superfície das partículas que serão vistos adiante.

O modelo de PRINCE e BLANCH [4] não inclui uma expressão para a distribuição das partículas filhas. Eles assumiram que a quebra era binária com as partículas filhas tendo tamanhos aleatórios, o que implica em uma distribuição uniforme de probabilidade

$$P(v_1|v) = \frac{1}{v} \quad (5.95)$$

Uma possível justificativa para esta distribuição seria a de que, em sistemas onde a dissipação de energia fosse bem elevada, haveria energia para quebrar as partículas em ampla faixa de tamanho dos vórtices. Entretanto, a distribuição de energia dos vórtices não é a mesma em todas as suas escalas de tamanho e, assim, não se deve esperar uma distribuição uniforme de probabilidade de tamanho das partículas filhas mesmo em elevados níveis de dissipação de energia.

A figura 5.6 mostra o comportamento dos modelos estatísticos de COULALOGLOU e TAVLARIDES [73], HSIA e TAVLARIDES [117] e LEE *et al.* [122].

5.3.2 Modelos híbridos

KONNO *et al.* [116] propuseram um modelo em que se assume que cada partícula mãe, de volume v , é formada por J volumes elementares, v_e , $J = v/v_e$. Como n partículas filhas geradas na quebra são formadas por um número inteiro dos K volumes elementares, tendo um volume adimensional igual a $K_i = v'_i/v_e$. Pela

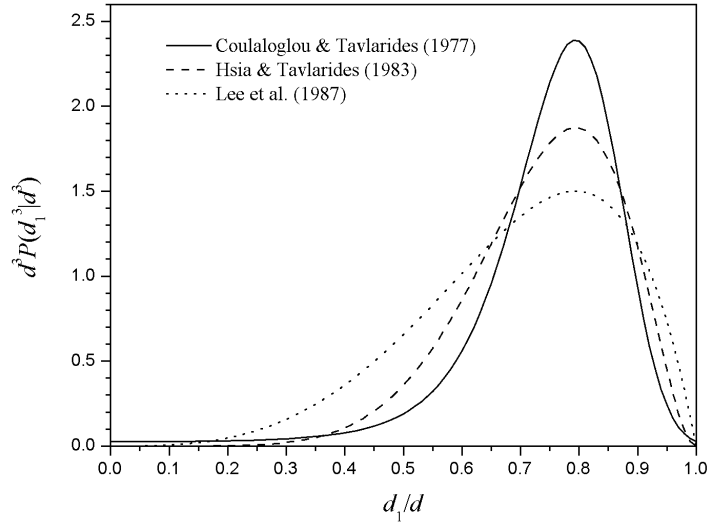


Figura 5.6: Modelos estatísticos de distribuição de tamanho das filhas

conservação de volume na quebra, tem-se que:

$$\sum_{i=1}^m K_i = J \quad (5.96)$$

Eles ainda assumiram que a quebra gerando uma partícula filha de tamanho v'_i ocorre apenas quando a partícula mãe interage com um vórtice de mesmo tamanho da partícula filha, sendo a probabilidade de gerar tal filha proporcional à energia cinética contida nos vórtices de tal tamanho. Desta forma, a probabilidade de quebra em m partículas de tamanho adimensional K_i seria proporcional ao produto das energias dos vórtices de tamanho $v_e K_i$ para $i = 1, \dots, m$.

Usando o espectro de energia de Heisenberg e $J = 100$, KONNO *et al.* [116] obtiveram uma distribuição quase contínua para o tamanho das partículas filhas que representava bem os seus dados experimentais para $m = 3$ (**quebra ternária**). Curiosamente, KONNO *et al.* [116] mostraram que a distribuição obtida para o tamanho das partículas filhas poderia ser bem aproximada pela seguinte função beta:

$$P(d_1|d) = \frac{\Gamma(12)}{\Gamma(9)\Gamma(3)} \frac{1}{d} \left(\frac{d_1}{d}\right)^8 \left(1 - \frac{d_1}{d}\right)^2 \quad (5.97)$$

O espectro de energia de Heisenberg depende da dissipação de energia. Contudo, o resultado do modelo de KONNO *et al.* [116] não depende. Da mesma forma, não há dependência da distribuição adimensional de probabilidade das partículas filhas com o aumento do tamanho da partícula mãe, o que contraria dados experimentais [7].

Esse tipo de modelo é uma alternativa interessante, pois possibilita a utilização de conhecimentos fenomenológicos e complementa as informações com características estatísticas.

5.3.3 Modelos fenomenológicos baseados em colisão com vórtices

NAMBIAR *et al.* [136] foram os primeiros a desenvolver um modelo para a distribuição de tamanho das filhas utilizando a hipótese de colisão de partículas com vórtices. Eles consideraram que a quebra ocorre devido à colisão de vórtices menores que a partícula e que possuam energia suficiente para superar o aumento de energia superficial associada à quebra. O tamanho mínimo do vórtice que pode gerar a quebra, $d_{e,\min}$, é calculado pelo modelo, bem como o diâmetro máximo que uma partícula pode ter sem sofrer quebra, d_{\max} .

O modelo leva em conta a energia superficial das partículas filhas e prediz que a função de distribuição de probabilidade passa por um mínimo quando se formam duas partículas iguais. Exceto quando a partícula tem diâmetro d_{\max} , quando a quebra ocorre *apenas* gerando partículas de mesmo tamanho. A distribuição de tamanho das partículas filhas do modelo de NAMBIAR *et al.* [136] é dada por

$$P(v'|v) = \frac{4sen \left| \frac{\pi - 2\varphi}{3} \right| P_e(d_e | d_{e,\min} \leq d_e \leq d)}{\pi d_e d sen \varphi}, \quad \varphi = \cos^{-1} \left(1 - 2 \frac{v'}{v} \right) \quad (5.98)$$

onde $P_e(d_e | d_{e,\min} \leq d_e \leq d)$ é a probabilidade de se achar um vórtice de tamanho d_e tal que $d_{e,\min} \leq d_e \leq d$, v' é o volume da partícula filha, e d e v são o diâmetro e o

volume, respectivamente, da partícula mãe.

O modelo de NAMBIAR *et al.* [136] possui a forma da distribuição de probabilidade de tamanho das partículas obtida no formato em V. Quando a partícula é maior que o menor tamanho para o qual a quebra ocorre, a quebra em partículas iguais representa o mínimo na distribuição de probabilidade e este mínimo é zero. Conforme o tamanho da partícula mãe aumenta, a distribuição de probabilidade de tamanho das partículas aproxima-se de uma distribuição uniforme (o ângulo do V aumenta). O modelo prevê probabilidade nula de se ter uma quebra binária em partículas iguais para $d > d_{\max}$, o que é altamente improvável [7, 111].

TSOURIS e TAVLARIDES [91] postulam que a formação da partícula de tamanho d_1 é inversamente proporcional a energia requerida para quebrar a partícula mãe, d , em duas partículas, d_1 e $d_2^3 = d^3 - d_1^3$. Essa energia requerida é proporcional a diferença de energia superficial entre partículas filhas e a partícula mãe, $e(d_1) = \pi\sigma(d_1^2 + d_2^2 - d^2)$. A energia é máxima quando as partículas possuem igual tamanho, $e_{\max} = \pi\sigma d^2(2^{1/3} - 1)$ e mínima quando a partícula mãe não quebra, a rigor a energia mínima é definida da forma $e_{\min} = \pi\sigma d_{\min}^2$, onde d_{\min} precisa ser especificado. O modelo de TSOURIS e TAVLARIDES [91] é dado por

$$P(d_1|d) = \frac{e_{\min} + [e_{\max} - e(d_1)]}{\int_{d_{\min}}^d e_{\min} + [e_{\max} - e(d_1)] dd_1} \quad (5.99)$$

Note que a energia superficial não depende da turbulência do meio contínuo, portanto, o modelo de TSOURIS e TAVLARIDES [91] não depende da turbulência do meio contínuo e, assim, produz o mesmo resultado independente da condição de vazão e/ou turbulência do sistema, logo, não reproduz a realidade.

LUO e SVENDSEN [112], HAGESAETHER *et al.* [130], LEHR *et al.* [126] e WANG *et al.* [131] desenvolveram modelos para a frequência de quebra específica, $\Omega(v_1|v)$. Portanto, a função de distribuição de tamanhos de partículas filhas é obtida pela relação dada na equação 5.85. Existe, contudo, alguns comentários relevantes

a serem feitos.

Os erros associados ao modelo de LUO e SVENDSEN [112] ficam ainda mais notáveis quando analisados pelos resultados da função de distribuição de tamanhos de partículas filhas. Nota-se na figura 5.7 que a probabilidade de que a menor partícula seja muito pequena tende a infinito, em qualquer condição [7, 18, 93, 126, 131]. Essa quebra ocorre devido ao cisalhamento da partícula com o campo de turbulência e nesse modelo desconsidera a elevada tensão superficial existente em partículas fluidas muito pequenas. Nos modelos de HAGESAETHER *et al.* [130], WANG *et al.* [131] e LEHR *et al.* [126] isso não é mais observado.

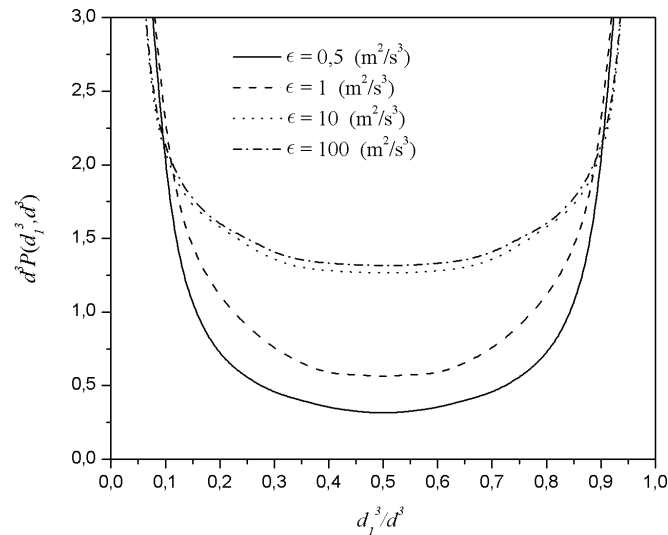


Figura 5.7: Comportamento do modelo de distribuição de tamanhos das partículas filhas de LUO e SVENDSEN [112] com a energia de dissipação turbulenta, sistema ar-água, $\sigma = 0,072$ N/m, $\rho = 1000$ kg/m³

A figura 5.7 também permite concluir que a dependência funcional do modelo com a turbulência tende a diminuir com o aumento desta. Verifica-se que a diferença nos resultados considerando os dois maiores valores de energia de dissipação turbulenta mostrados na figura é pequeno.

A forma discreta do modelo de HAGESAETHER *et al.* [130] torna-se um problema para o cálculo da distribuição de tamanhos das partículas fluidas. O trunca-

mento necessário para resolver com acurácia seu modelo exige um alto número de discretizações, mas um alto número de discretizações faz com que exista divisões e multiplicações de números muito pequenos, o que introduz um outro tipo de erro numérico.

No modelo de WANG *et al.* [131], observa a mesma indefinição do tamanho máximo dos vórtices que podem induzir a quebra [123].

O modelo de LEHR *et al.* [126] apresenta um comportamento duplo com a modificação da intensidade de turbulência no meio. Quando a turbulência é pequena, a tendência é de que a quebra seja preferencialmente em tamanhos iguais, quando a turbulência aumenta, torna-se mais provável a quebra em tamanhos diferentes (uma bem pequena e outra quase do tamanho da partícula mãe). A figura 5.8 mostra isso e também permite verificar a afirmação feita anteriormente de que a formação de filhas com tamanho zero não é infinito.

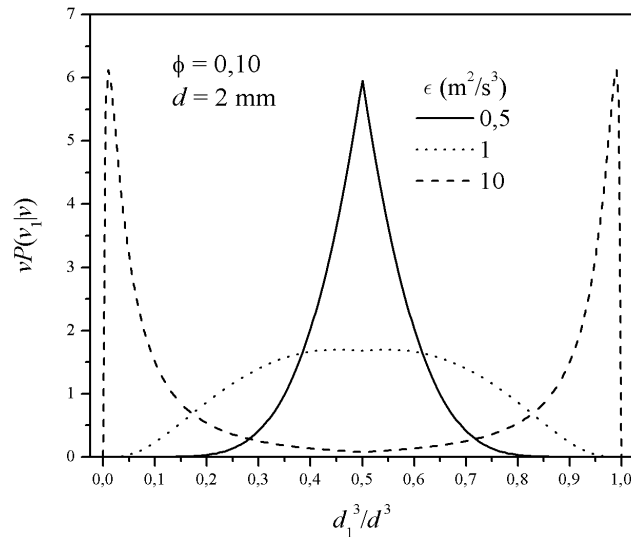


Figura 5.8: Comportamento do modelo de distribuição de tamanhos das partículas filhas de LEHR *et al.* [126] com a energia de dissipação turbulenta, sistema ar-água, $\sigma = 0,072 \text{ N/m}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$

Os estudos de LASHERAS *et al.* [7], EASTWOOD *et al.* [110] e de ANDERSSON e ANDERSSON [111] contradizem experimentalmente a dualidade de compor-

tamento observado no modelo de LEHR *et al.* [126].

Modelos fenomenológicos de equilíbrio de tensões

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] propuseram uma nova distribuição de probabilidade das partículas formadas na quebra com base no mecanismo de quebra proposto em artigo anterior [128]. Em ambos os casos, eles analisaram experimentalmente a quebra de bolhas em água. Nesse caso o número de Ohnesorge é suficientemente pequeno ($Oh < 10^{-3}$) para a energia armazenada na partícula fluida provir apenas da energia superficial.

Em MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] uma partícula de diâmetro d sofria quebra apenas se $d > d_{crit}$, sendo d_{crit} o diâmetro crítico calculado pelo balanço entre as tensões superficial e dinâmica.

Entretanto, existe um diâmetro mínimo da partícula, d_{min} , onde a tensão dinâmica calculada se iguala a tensão superficial. Para diâmetro abaixo de d_{min} , a tensão superficial é maior. O valor de d_{min} , assim calculado, se encontra na equação 5.76. Esse diâmetro representa o menor diâmetro possível de uma partícula filha, logo a $P = 0$ para $d_1 < d_{min}$.

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] tiveram que introduzir uma hipótese sobre o número de partículas filhas. Ele propuseram quebra binária, embora o modelo possa ser estendido a um número maior de partículas filhas. Também consideraram a conservação de volume da partícula, ou seja, fluido incompressível durante o processo de quebra. Dessa forma, é válida a relação:

$$d_2 = d \left[1 - \left(\frac{d_1}{d} \right)^3 \right]^{1/3} \quad (5.100)$$

tal como é necessário que $d_1 \geq d_{min}$ e $d_2 \geq d_{min}$. Portanto, se $d_1 = d_{min}$, d_2 é o

máximo diâmetro possível de uma partícula filha, d_{\max} , calculado por:

$$d_2 = d \left[1 - \left(\frac{d_{\min}}{d} \right)^3 \right]^{1/3} = d_{\max} \quad (5.101)$$

concluí-se, então, que a quebra somente ocorre quando $d_{\min} \leq d_1 \leq d_{\max}$.

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] assumiram que a velocidade de quebra e, portanto, a frequência de quebra era proporcional à raiz quadrada da tensão em excesso definida pela diferença entre as tensões dinâmica e superficial:

$$\Delta\mathcal{T}(d, d_1) \equiv \frac{1}{2}\rho\beta(\epsilon d_1)^{2/3} - \frac{6\sigma}{d}, \quad \beta = 8, 2 \quad (5.102)$$

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] consideraram que se a quebra existe, ela é proporcional a tensão em excesso de ambas as partículas filhas. Isso significa postular a seguinte função de distribuição das partículas originadas na quebra:

$$P(d_1|d) = \begin{cases} C\Delta\mathcal{T}(d, d_1)\Delta\mathcal{T}(d, d_2), & d_1 \in [d_{\min}, d_{\max}] \\ 0, & d_1 \notin [d_{\min}, d_{\max}] \end{cases} \quad (5.103)$$

onde C é uma constante de normalização.

Considere as variáveis adimensionais convenientemente definidas por $D = d_1/d$, $\Lambda = d_{\text{crit}}/d$, $D_{\min} = d_{\min}/d$ e $D_{\max} = d_{\max}/d$. Substituindo a equação 5.102 na equação 5.103 e utilizando as mencionadas variáveis adimensionais, obtemos:

$$P(d_1|d) = \begin{cases} \mathbf{C} \left[\frac{1}{2}\rho\beta(\epsilon d)^{2/3} \right]^2 [D^{2/3} - \Lambda^{5/3}] [(1 - D^3)^{2/9} - \Lambda^{5/3}], & D \in [D_{\min}, D_{\max}] \\ 0, & D \notin [D_{\min}, D_{\max}] \end{cases} \quad (5.104)$$

Como $\int_0^d P(d_1|d) dd_1 = \int_0^1 P(D|d) dD = 1$, temos que $P(D|d) = dP(d_1|d)$ é a função distribuição adimensional do tamanho das filhas. A constante de normalização é determinada a partir desta integral, de forma que a distribuição normalizada

nas variáveis adimensionais é dada por:

$$P(D|d) = \begin{cases} \frac{[D^{2/3} - \Lambda^{5/3}] [(1 - D^3)^{2/9} - \Lambda^{5/3}]}{\int_{D_{\min}}^{D_{\max}} [\bar{D}^{2/3} - \Lambda^{5/3}] [(1 - \bar{D}^3)^{2/9} - \Lambda^{5/3}] d\bar{D}}, & D \in [D_{\min}, D_{\max}] \\ 0, & D \notin [D_{\min}, D_{\max}] \end{cases} \quad (5.105)$$

A função de distribuição de tamanho das partículas filhas de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] possui um máximo para a quebra em partículas de mesmo tamanho (vide figura 5.9). Ao contrário da forma das funções baseadas na teoria de colisões com vórtices [7, 8, 18], não há parâmetros não físicos e ela possui a melhor concordância com resultados experimentais para a quebra binária de bolhas [7, 10, 18, 85].

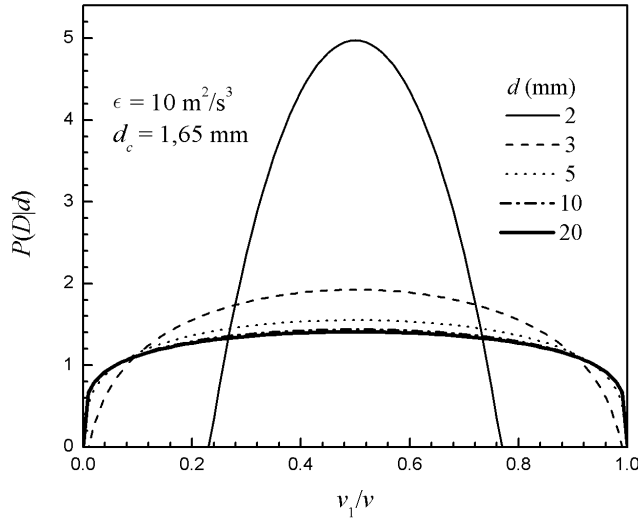


Figura 5.9: Comportamento do modelo de distribuição de tamanhos das partículas filhas de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] com o diâmetro da partícula mãe, sistema ar-água, $\sigma = 0,072 \text{ N/m}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ e $\epsilon = 10 \text{ m}^2/\text{s}^3$

Note que a grande diferença entre esse modelo e os modelos baseados em teoria de colisões com vórtices é que não é necessário presumir o tamanho do vórtice. É necessário, apenas, conhecer a turbulência adequadamente.

MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] mostraram que é possível considerar quebra múltipla ($\varsigma > 2$) e se for assumido que a energia total (superficial + dinâmica) do sistema se conserva na quebra. Dessa forma, surge uma equação adicional que permite resolver o problema de forma precisa quando a quebra é ternária ou para “qualquer número” de partículas **desde que** todas menos uma possuam o mesmo tamanho.

Assim, a generalização do problema para $\varsigma > 2$ com partículas de tamanhos diferentes esbarraria em um problema de fechamento. Faltam $n - 2$ equações para determinar o tamanho de cada partícula filha. Apesar de ser possível resolver o problema de quebra ternária utilizando a conservação de energia como equação de fechamento do problema, isto, de acordo com a literatura, ainda não foi feito.

5.4 Considerações adicionais sobre mecanismos de quebra

RISSO e FABRE [137] demonstraram que uma bolha acumula energia no seu movimento oscilatório de deformação. A dinâmica desta deformação é que define quanto de energia pode ser extraída de um vórtice por colisão. Assim, a colisão de um vórtice com uma bolha pode tanto aumentar quanto diminuir a energia de deformação armazenada na bolha. Em média, eles mostraram que a energia de deformação armazenada na bolha aumenta com o constante bombardeamento dos vórtices. Dessa forma, ela acaba sofrendo quebra quando esta energia consegue superar a energia superficial coesiva.

Assim, RISSO e FABRE [137] identificaram dois mecanismos de quebra. O primeiro corresponde à clássica interpretação do balanço de tensões da teoria de HINZE [108] e KOLMOGOROV [109]. Esta ocorre quando um vórtice de intensa energia causa uma quebra instantânea da bolha ao interagir com ela. O segundo é um mecanismo de ressonância, no qual a bolha vai aumentando gradativamente

a sua energia através da interação com vórtices de baixa energia até que a sua quebra ocorra. Para que este segundo mecanismo exista, é necessário que o tempo de amortecimento das oscilações da forma da bolha seja maior que o tempo médio entre colisões da mesma com vórtices.

EASTWOOD *et al.* [110] estudaram experimentalmente a quebra de gotas de vários líquidos (heptano, óleos de silicone e de oliva) em um jato de água turbulento. Seus resultados experimentais indicaram que a frequência de quebra de partículas com densidade não desprezível frente ao fluido contínuo não obedecem a teoria de HINZE [108] e KOLMOGOROV [109] quando o número de Weber é pequeno.

EASTWOOD *et al.* [110] mostraram que a frequência de quebra depende da frequência de passagem dos vórtices de grande escala do escoamento, isto é, dependem de u'/L , onde u' é o RMS das flutuações de velocidade, $u' = \langle u \rangle - u$ e L é a escala integral local da turbulência. Eles mostraram também que a frequência de quebra era inversamente proporcional a uma escala de tempo construída com a viscosidade da fase dispersa e a tensão interfacial, isto é, $b(d) \propto (\mu_d d \sigma)^{-1}$.

A figura 5.10 mostra imagens sucessivas obtidas por filmagem de alta velocidade de gotas de um óleo de silicone ($\rho_d = 970 \text{ kg/m}^3$, $\mu_d = 50,9 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$, $\sigma = 0,037 \text{ N/m}$) em água. Esta figura mostra claramente a existência de um mecanismo de deformação com posterior quebra das gotas alongadas. O mecanismo final da quebra parece ser a capilaridade, pois os locais de quebra correspondem às regiões onde se formaram os filamentos de menor diâmetro da fase dispersa da gota original. Um número grande de gotas filhas é observado no processo. As gotas são alongadas por interação com vórtices de grandes escalas.

EASTWOOD *et al.* [110] puderam excluir uma possível influência de um mecanismo de quebra por ressonância, como sugerido por RISSO e FABRE [137], analisando os tempos de ressonância e amortecimento das gotas e o tempo de observação de seus experimentos.

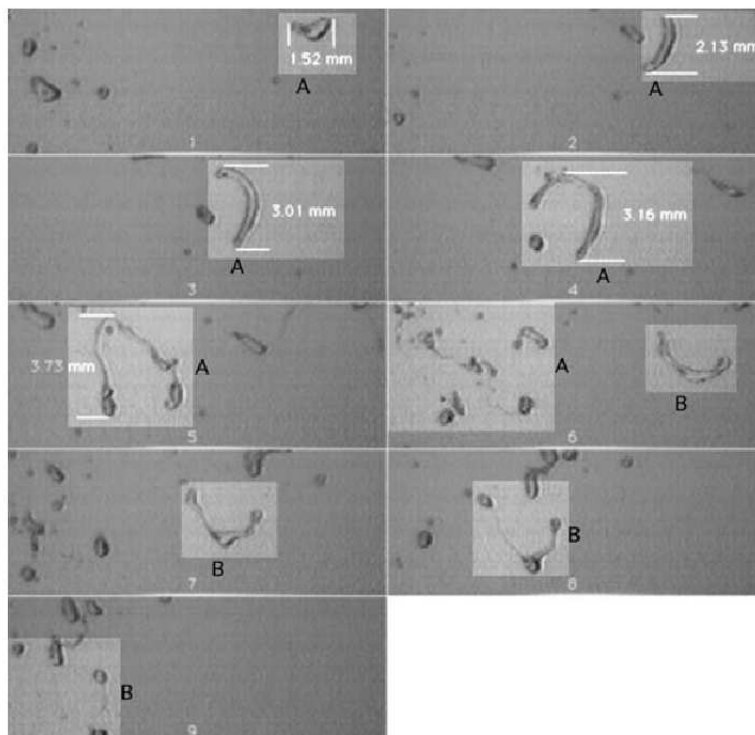


Figura 5.10: Evolução temporal da quebra de duas gotas (A e B) mostrando um mecanismo de deformação com posterior quebra das gotas alongadas. Δt entre as imagens de 10^{-3} s (figura extraída de EASTWOOD *et al.* [110])

As principais diferenças nos sistemas experimentais analisados por EASTWOOD *et al.* [110] e MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] são os menores números de Weber das gotas, que são menores nos estudos de EASTWOOD *et al.* [110] que as bolhas de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129], e os números de Ohnesorge que são mais altos para gotas do que para as bolhas, principalmente porque a razão $\mu_d/\sqrt{\rho_d}$ é maior no sistema de EASTWOOD *et al.* [110].

EASTWOOD *et al.* [110] explicaram a não conformidade destes resultados com a teoria de Hinze-Kolmogorov argumentando que estes experimentos foram realizados em uma região do jato com menor dissipação de energia (baixos valores de Weber). Dessa forma, os vórtices na faixa inercial da turbulência deformam as gotas, mas não tem energia suficiente para quebrá-las. Como o mecanismo de ressonância de RISSO e FABRE [137] não ocorre, as gotas são quebradas apenas por interação com vórtices das maiores escalas da turbulência.

ANDERSSON e ANDERSSON [111] verificaram exatamente os mesmos resultados experimentais observados por EASTWOOD *et al.* [110]. Eles não tentaram correlacionar os números de Weber e Ohnesorge, mas confirmaram que o mecanismo de quebra para gotas envolvia interações com vórtices das maiores escalas da turbulência. Eles também afirmaram que a quebra de gotas usualmente forma várias partículas filhas de tamanhos aproximadamente iguais. Essa percepção também é vista nos resultados de EASTWOOD *et al.* [110] (figura 5.10). Embora ele não tenha chamado a atenção para o fato e que a figura 5.10 seja apenas uma amostra dos resultados dele.

ANDERSSON e ANDERSSON [111] observaram a quebra binária para bolhas. Seu estudo caracteriza o tempo de quebra como determinante para a formação de um número grande de partículas filhas. Em sistemas ar-água, a quebra é rápida e não envolve uma deformação profunda da partícula. Enquanto que para gotas a quebra é comparativamente lenta, envolve uma grande deformação que permite observar a interação com os vórtices de maior escala de forma mais precisa.

Os estudos experimentais de MAAB *et al.* [138] não apenas confirma o que já havia sido observado e discutido por EASTWOOD *et al.* [110] e ANDERSSON e ANDERSSON [111], como acrescenta informações sobre o número de partículas filhas obtidos no processo de quebra. Nas imagens de seu resultado experimental considerando o sistema Tolueno (fase dispersa) e água, é possível observar a existência de mais de 30 partículas filhas. Essa imagem é reproduzida na figura 5.11.

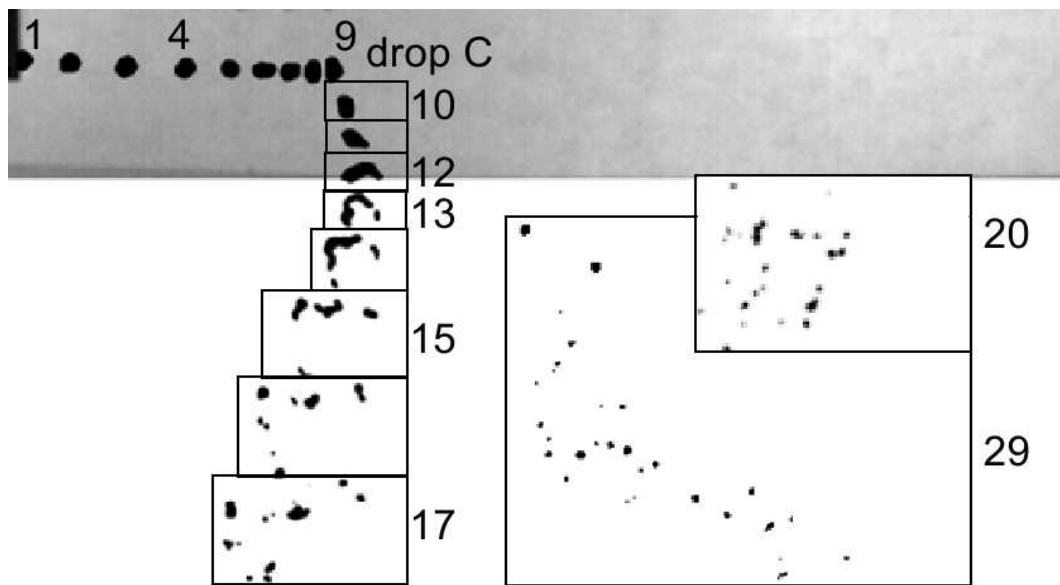


Figura 5.11: Resultados experimentais de MAAB *et al.* [138]. Sistema tolueno/água. Os números na figura representam o número do quadro (do frame do vídeo) de onde aquela visualização foi retirada para compor a figura. O tempo total de quebra é 16 ms.

Por fim, um último ponto a ser discutido está relacionado ao escoamento interno à partícula. Como já foi dito, para que a quebra ocorra deve haver um estrangulamento da partícula. Para tal, o fluido interno deve escoar. Portanto, a viscosidade da fase dispersa influencia no processo de quebra. Quanto menos viscoso for o fluido da fase dispersa, mais rápido deve ser o processo de quebra da partícula. Essa questão deve ser muito importante para justificar tempos de quebra maiores com maior formação de partículas filhas das gotas. Em todo caso, todas as informações pertinentes a essa análise são de ANDERSSON e ANDERSSON [111] que provaram que o tempo de quebra de bolhas é muito menor que o tempo de quebra de gotas, mas não provam

que o escoamento interno a partícula é o responsável por essa característica.

5.5 Conclusões sobre os modelos de quebra

Da extensa revisão realizada sobre os modelos de quebra de partículas fluidas, chegase a algumas conclusões.

Observa-se que com exceção do modelo de ANDERSSON e ANDERSSON [123], os modelos que tem como base o modelo de LUO e SVENDSEN [112] possuem dependência com os limites máximo e/ou mínimo do tamanho dos vórtices, sendo, portanto, dependente desses fatores [7, 123].

De todos os modelos analisados, apenas o modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] não possui hipóteses que levem a existência de fatores arbitrários que interferem nos resultados preditos pelo mesmo ou questionem os mecanismos propostos. Este modelo possui apenas um parâmetro experimental que deve ser ajustado conforme o experimento.

O modelo de quebra de LUO e SVENDSEN [112] é um dos piores modelos de quebra disponíveis atualmente, embora seja o mais utilizado. Isso fica claro quando se observa que HAGESAETHER *et al.* [130], que pertencem ao mesmo grupo de trabalho, é um dos maiores críticos do modelo. Além disso, vários outros autores apontaram falhas nesse modelo [7, 18, 123, 126, 131]. Portanto, **utilizar o modelo de quebra de LUO e SVENDSEN [112] é um erro conceitual grave.**

NAMBIAR *et al.* [136] foi o único modelo de distribuição de tamanhos de partículas filhas que não é puramente estatístico desenvolvido para gotas (ainda que seja um modelo completamente irreal). Todos os outros modelos de distribuição de tamanhos das partículas filhas com base fenomenológica mencionados foram desenvolvidos para bolhas e estendidos para gotas sem qualquer alteração.

A quebra de gotas raramente é binária. Dados experimentais de EASTWOOD *et al.* [110], ANDERSSON e ANDERSSON [111] e MAAB *et al.* [138] confirmam, de forma independente, que, para o caso de gotas, a quebra usualmente origina mais de duas partículas filhas. Portanto, a modelagem desse fenômeno requer, sem dúvida alguma, considerações sobre o número de partículas filhas formadas. Essa suspeita persistia desde a década de 1960 [113], mas pouco esforço para resolver esse problema foi feito até os dias de hoje, sendo que apenas em 2004 [110] houve progressos nesse estudo.

EASTWOOD *et al.* [110], ANDERSSON e ANDERSSON [111] e MAAB *et al.* [138] confirmam que a quebra envolve interações com vórtices das maiores escalas da turbulência.

Capítulo 6

Metodologia Experimental

Todos os dados experimentais utilizados nessa tese foram obtidos no Núcleo de Separadores Compactos do Instituto de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Itajubá, sob a responsabilidade dos professores Eli Siva, Luiz Fernando Barca e Marcos Aurélio de Souza (coordenador), no contexto do projeto contratado pela Engenharia Básica do Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello (CENPES) da PETROBRÁS, cujo o título é: “Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo” [139, 140].

Esse capítulo tem como objetivo descrever resumidamente toda a metodologia experimental utilizada na obtenção dos dados experimentais que serão analisados, interpretados e modelados na presente tese de doutorado.

6.1 A seção de testes

Normalmente, para a dessalinização do óleo em uma refinaria, adiciona-se água doce e se esco a carga, por uma válvula globo, com dupla sede, consistindo, portanto, de um sistema com perda de carga localizada, que serve para efetuar a mistura da

água doce com a água salgada existente no óleo.

O objetivo principal do estudo experimental é determinar o comportamento da emulsão de água em óleo ao escoar por um sistema com perda de carga localizada, identificando a influência da concentração de água, da vazão e da perda de carga nesse processo.

Para reproduzir essas condições, utilizou-se um dispositivo que representa esta perda de carga localizada. Esse dispositivo consiste de um duto de seção transversal quadrada, com 5 mm de lado e 200 mm de comprimento, possuindo, em suas extremidades, trechos cônicos, de transformação dessa seção quadrada para a circular. Esta conicidade visa minimizar as perdas de carga de aproximação e de descarga.

A seção quadrada foi escolhida para facilitar a discretização hexaédrica do canal em simulação numérica que foi realizada em outras etapas desse mesmo estudo [141, 142].

Na parte central desse duto, três gavetas móveis, com seção reta quadrada de 5 mm de lado, permitem que se defina uma variedade de configurações geométricas para o acidente.

A figura 6.1 mostra a vista em corte da seção de testes com as gavetas parcialmente fechadas. A figura 6.2 apresenta a vista em perspectiva da seção de testes (corte central), com o foco nas gavetas móveis (destacada na região central).

O passo das roscas que ajusta o posicionamento das gavetas são de 0,5 mm. A medição do posicionamento das gavetas foram efetuadas utilizando relógios comparadores com escala de 0,01 mm, permitindo a interpolação em 0,002 mm. Esses relógios comparadores podem ser visualizados na figura 6.3 que apresenta a imagem da seção de testes utilizada.

Quando todas as gavetas estão recuadas, tem-se um simples canal de seção reta quadrada sem qualquer fonte de perda localizada. Esse caso é chamado de “branco”,

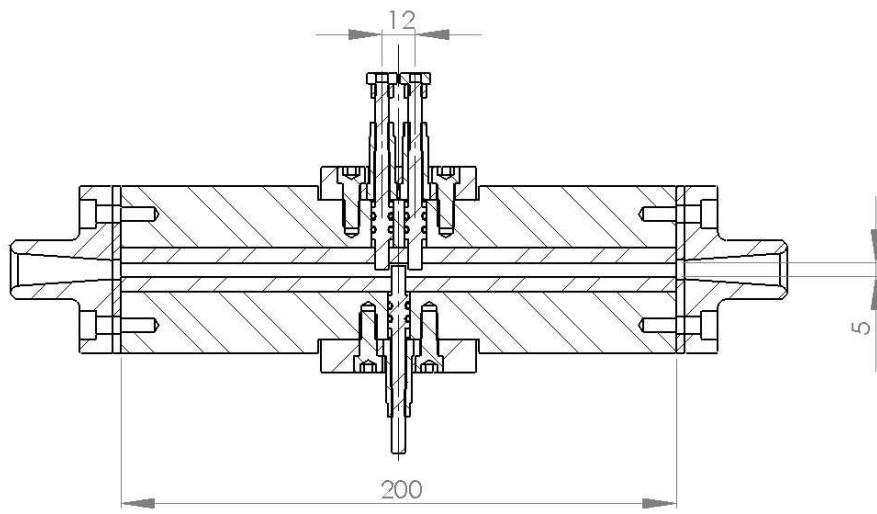


Figura 6.1: Vista em corte da seção de testes com as gavetas parcialmente fechadas

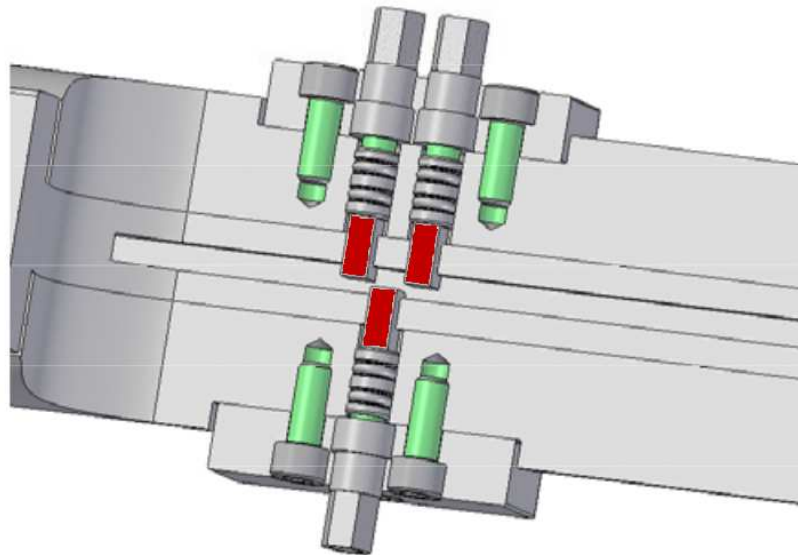


Figura 6.2: Vista em perspectiva da seção de testes. Destaque para as gavetas móveis. Figura extraída de SILVA *et al.* [140].

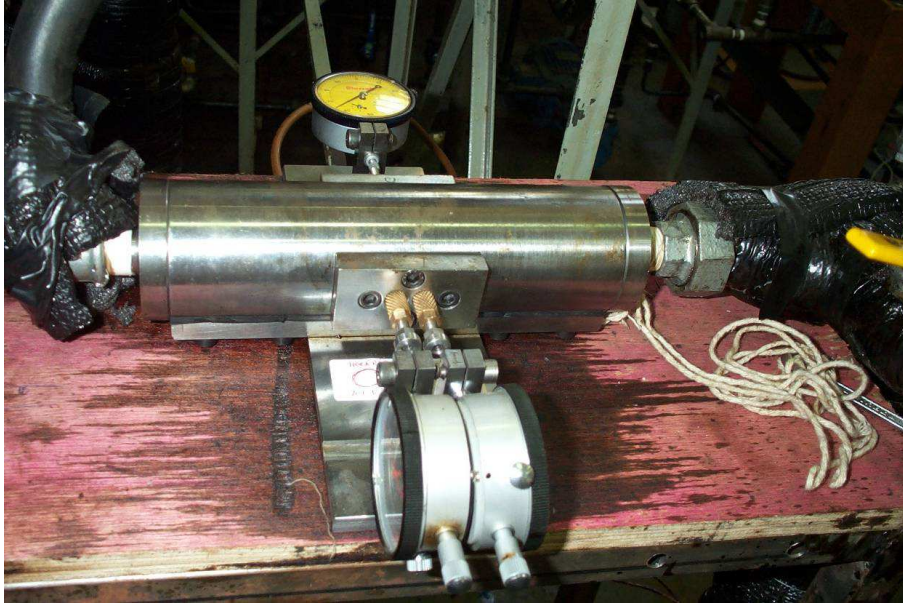


Figura 6.3: Seção de testes utilizada nos experimentos. Figura extraída de SILVA *et al.* [140].

porque representaria o comportamento da emulsão no escoamento sem o acidente.

No presente estudo do acidente, a gaveta central teve a posição variada e as duas outras gavetas foram mantidas fixas com abertura em 2 mm, simulando as características de uma válvula globo. A figura 6.4 detalha essa configuração. A região identificada como “Abertura” é a de dimensão variável. SILVA *et al.* [139] obtiveram dados experimentais com 4 valores distintos de abertura: 0,5, 1,0, 1,5 e 2,5 mm.

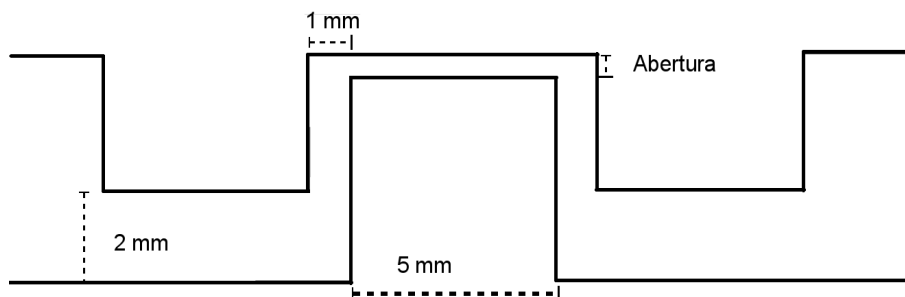


Figura 6.4: Detalhamento das dimensões do posicionamento das gavetas quando simulando uma válvula globo.

6.2 O experimento e condições de operação

A figura 6.5 apresenta o esquema básico do experimento.

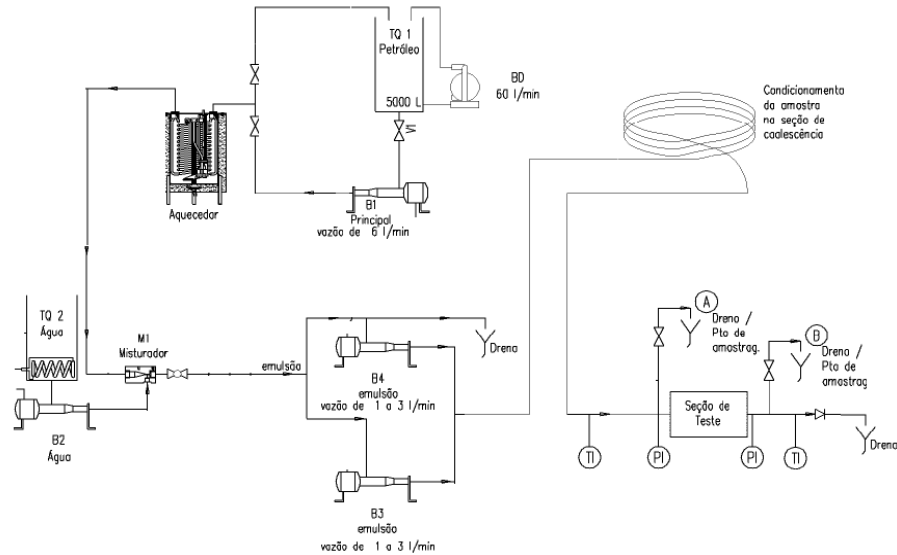


Figura 6.5: Fluxograma experimental básico. Figura extraída de SILVA *et al.* [140].

O óleo utilizado na obtenção dos dados experimentais é misturado com a água durante a execução dos experimentos a uma vazão constante e independente da vazão da condição operacional, de tal forma que a razão entre a vazão mássica da água e do óleo permite estabelecer a concentração mássica de água no sistema. Um sistema de controle da vazão em linha permite fixar a razão entre as vazões das fases com precisão de 1 %. Essa corrente é aquecida a temperatura operacional e dividida entre a corrente operacional, que irá para a seção de testes, e a corrente de purga, em retira do sistema a quantidade excedente da emulsão gerada.

A corrente operacional escoar por uma mangueira de 12,7 mm de diâmetro e aproximadamente 20 metros de comprimento que esteve enrolado, em espiral, em um tanque de aproximadamente 2 metros de diâmetro, para permitir que o tamanho médio das partículas contidas no sistema seja maior. O “aumento” do tamanho médio das partículas ocorre devido a coalescência relacionada ao gradiente de velocidade formado no escoamento (dentro do tubo, o regime de escoamento é laminar). A corrente de emulsão gerada por esse processo é a corrente que passa pelo acidente.

Embora necessário, a etapa de coalescência prévia para aumentar o tamanho das partículas introduz efeitos desconhecidos no sistema, e pode ser a fonte (ou uma das fontes) de uma instabilidade observada na formação da emulsão. Isto será discutido posteriormente com mais detalhes.

Foram obtidos até 5 réplicas experimentais para cada condição operacional. As variáveis modificadas foram: vazão de emulsão, concentração de água e abertura da gaveta central.

Como dito, foram consideradas quatro níveis abertura da gaveta central do acidente: 0,5, 1,0, 1,5 e 2,5 mm. Além disso, também foram obtidos dados experimentais onde todas as gavetas estavam completamente abertas, que é o que defini-se como “Branco”.

Foram consideradas duas concentrações nominais de água no óleo: 8 e 15 % p/p. Também foram considerados três condições de vazão nominal no sistema: 1,7, 3,0 e 4,3 kg/min, que são as vazões **baixa**, **média** e **alta**, respectivamente.

Para organizar a apresentação e identificação dos dados, foi estabelecido um código para caracterizar a faixa de vazão, concentração e abertura de gaveta, na forma: ptXgY onde X e Y são números, de 1 a 10 e de 1 a 15, respectivamente.

A tabela 6.1 apresenta como foi feita essa divisão. Nela percebe-se que a marcação de G1 a G5 correspondem a faixa de vazão alta, de G6 a 10 correspondem a faixa de vazão baixa e G11 a G15 correspondem a faixa de vazão média. Da mesma forma, cada marcação de “pt” correspondem a um valor de abertura da gaveta central diferente (o “valor” B representa o branco, todas as gavetas completamente aberta). A faixa de valores de “pt” também correspondem as concentrações distintas, pt1 a pt5 correspondem a faixa de concentração alta, 15% em massa de água na emulsão e pt6 a pt10 correspondem a faixa de concentração baixa, 8 % em massa de água na emulsão. Nota-se, portanto, que para cada condição “pt” existem cinco condições “g” que reproduzem as variáveis controladas e deveriam ser réplicas.

Tabela 6.1: Esquema de nomenclatura dos dados experimentais em relação as condições de estudo

		pt1	pt2	pt3	pt4	pt5	pt6	pt7	pt8	pt9	pt10
Abertura da gaveta (mm):		<i>B</i>	<i>2,5</i>	<i>1,5</i>	<i>1,0</i>	<i>0,5</i>	<i>0,5</i>	<i>1,0</i>	<i>1,5</i>	<i>2,5</i>	<i>B</i>
Condição de vazão	g1	Condição de vazão: 4,3 κg/min (vazão alta)					Condição de vazão: 4,3 κg/min (vazão alta)				
	g2										
	g3										
	g4	Condição de concentração: 15 % (concentração alta)					Condição de concentração: 8 % (concentração baixa)				
	g5										
	g6	Condição de vazão: 1,7 κg/min (vazão baixa)					Condição de vazão: 1,7 κg/min (vazão baixa)				
	g7										
	g8										
	g9	Condição de concentração: 15 % (concentração alta)					Condição de concentração: 8 % (concentração baixa)				
	g10										
	g11	Condição de vazão: 3,0 κg/min (vazão média)					Condição de vazão: 3,0 κg/min (vazão média)				
	g12										
	g13										
	g14	Condição de concentração: 15 % (concentração alta)					Condição de concentração: 8 % (concentração baixa)				
	g15										

Por exemplo, as condições pt4g6 a pt4g10, possuem a abertura da gaveta central igual a 1 mm, a condição de vazão baixa (1,7 kg/min) e a condição de concentração alta de água (15 % m/m).

Em teoria, a ordem de execução dos experimentos não devia ser um fator relevante a análise dos dados experimentais. Todavia, observou-se falhas na reprodutibilidade das réplicas e essas falhas encontraram justificativas na ordem de execução dos experimentos. Cada condição de vazão fixa foi seqüencialmente executada entre os pontos 1 ao 5 (mantendo as condições de concentração de água) ou entre os pontos 6 ao 10 (com a nova condição de concentração de água). Um grupo “g” de experimentos foi conduzido, em um dia (g1-g5 pela manhã e g6-g10 a tarde).

6.3 Metodologia de determinação dos valores experimentais

Os resultados experimentais são constituídos da distribuição de numérica de tamanho de partículas na entrada e na saída da seção de testes (antes e após o acidente), da vazão, da diferença de pressão, da temperatura e do posicionamento

das gavetas. Além disso, há a determinação da concentração mássica de água em óleo, da densidade e da viscosidade do óleo e da tensão interfacial entre o óleo e a água para a faixa de temperatura de operação.

Os dados de vazão, diferença de pressão e temperatura foram obtidos em linha utilizando instrumentos da montagem experimental. A densidade, a viscosidade e a tensão interfacial foram avaliadas em equipamentos adequados para tal função (um viscosímetro para as duas primeiras propriedades e um tensiômetro para a tensão interfacial).

A temperatura de operação foi estabelecida em 56,5°C com um controle de 1°C. A vazão foi determinada com uma precisão de 0,3 % e a diferença de pressão na seção de testes com uma precisão de 2 %.

A concentração de água na emulsão foi determinada pelo método de titração Karl-Fisher. Foram realizadas três coletas durante o ensaio em cada corrida experimental.

O método de titração Karl-Fisher foi desenvolvido em 1935 e consiste na dissolução da emulsão em metanol anidro, seguida de uma titração com o reagente Karl-Fisher (mistura de iodina, dióxido de enxofre, Piridina e metanol anidro). [143].

No processo utilizado na determinação da água presente na emulsão, a iodina é gerada eletroliticamente em uma câmara catódica que contém o íon de iodo. A iodina é produzida apenas enquanto houver água. A quantidade de iodina produzida é proporcional a corrente elétrica gerada. De forma geral, a cada 1 mg de água consome-se 10,72 C. Os detalhes operacionais do procedimento executado são encontrados na dissertação de PAIVA [143]. Os erros desse procedimento são da ordem de 1 % da medida [143].

As distribuições de tamanho de partícula foram obtidas utilizando um analisador de tamanho de partículas por espalhamento de luz com o equipamento da Malvern.

A rigor, o analisador não mede a distribuição normalizada de tamanho de partícula, seja numérica ou volumétrica, mas a calcula a partir dos dados de diâmetro da partícula estimados pela medição do padrão de espalhamento de um raio laser esta passa por ele.

Partículas grandes espalham em baixo ângulo e partículas pequenas espalham em ângulos mais altos. Foram executadas 12 mil leituras, onde cada leitura é tratada como uma partícula.

O equipamento gera resultados com precisão da ordem de 10 % para a distribuição volumétrica e um erro da ordem de 2 % no diâmetro calculado a partir do volume médio das partículas. É possível obter distribuições numéricas com erros muito maiores se as normas de operação não forem observadas adequadamente e não haverá nenhuma forma posterior de saber que isso aconteceu, por exemplo, caso o analista ignore a necessidade de corrigir o valor do índice de refração em amostras que requeira esse tipo de modificação ou caso o analista ignore a aglutinação indevida da amostra durante a análise. Detalhes adicionais sobre o uso desta técnica podem ser encontrados na literatura [143].

No caso presente, o equipamento da Malvern sofreu uma adaptação física. Normalmente, a amostra, que é sólida, acrescentada em um frasco com solvente é mantida homogenizada com agitação mecânica e/ou ultra-sônica. Esse procedimento não é adequado para analisar a emulsões. Nesse caso, criou-se um adaptador que permitiu inserir a amostra diretamente no sistema sem o uso do frasco. Essa adaptação assegura que a amostra analisada é a mais próxima possível da amostra coletada (sem a influência da pás de agitação, por exemplo).

Análises prévias permitiram aos analistas determinar uma grande variação no resultado da distribuição de tamanho de partículas com a ação manual do analista que coleta a amostra. A modificação do sistema levava ao surgimento de bolhas na amostra. Os analistas, portanto, tomaram cuidados adicionais para evitar esse tipo de descaracterização, sendo a única, e não muito precisa, forma de saber se houve

ou não problemas com a amostragem.

Outro cuidado quanto ao óleo, foi a não adição de desemulsificantes ou surfactantes. Esse cuidado foi necessário para se conseguir reproduzir a emulsão em escala laboratorial. A caracterização do óleo (densidade, viscosidade e tensão interfacial) foram obtidas experimentalmente e serão apresentadas junto com os resultados.

Para obter a distribuição numérica e/ou volumétrica não normalizada, é necessário utilizar a informação experimental da fração volumétrica de gotas no escoamento (que foi obtida utilizando o método de titração Karl-Fisher).

A distribuição numérica não normalizada de partículas é dada por:

$$f(v_i) = N_T \hat{f} \quad (6.1)$$

onde N_T é a densidade numérica de todas as partículas. Esse número é determinado experimentalmente pela relação

$$N_T = \frac{\phi}{\int_0^\infty v \hat{f}(v) dv} \quad (6.2)$$

onde \hat{f} é a distribuição numérica normalizada de partículas e ϕ é a fração volumétrica.

A distribuição volumétrica não normalizada de partículas é dada por:

$$F(v_i) = \phi \hat{F}(v_i) \quad (6.3)$$

A conversão entre a distribuição numérica e volumétrica é dada por

$$F(v_i) = v_i f(v_i) \quad (6.4)$$

onde $F(v_i)$ é a fração volumétrica de partículas na classe i e $f(v_i)$ é a fração numérica

de partículas na classe i e v_i é o volume característico da classe i . A discretização feita pelo equipamento é tal que $v_{i+1}/v_i \approx 1,513$, com $v_0 = 6,581 \times 10^{-25} \text{ m}^3$. O equipamento usa 100 classes nessa discretização.

O analisador de partículas da Malvern permite uma série de tratamentos estatísticos para filtrar os resultados obtidos. Das técnicas mais utilizadas, impõem-se a característica da distribuição, se ela é monomodal, bimodal, etc. Sempre é possível obter resultados, independente de ter ou não feito uma escolha adequada das características da distribuição. Os resultados utilizados por esse trabalho não possuem qualquer tipo de tratamento estatístico dessa natureza. Sendo, portanto, o tipo de resultado mais bruto possível de distribuição de tamanho de partículas.

Capítulo 7

Modelagem Matemática

A modelagem da distribuição numérica de partículas no espaço e no tempo foi apresentada na seção 3.1. A equação geral que deve ser utilizada é exatamente a equação 3.1.

Na modelagem do acidente algumas simplificações básicas podem ser efetuadas

- a distribuição é monovariada no tamanho, ou seja, apenas uma única variável interna, o volume da partícula, $\mathbf{v} = v$;
- a movimentação da partícula é fundamentalmente devido a movimentação convectiva, ou seja, as partículas não se deslocam devido a efeitos difusivos;
- o termo convectivo e estocástico da variável interna podem ser desprezados, pois pode-se dizer que não crescimento da partícula;
- o problema é estacionário.

Dessa forma, simplifica-se a equação 3.1 resultando na seguinte expressão:

$$\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \left[\dot{\mathbf{Z}} f_{\alpha}(\mathbf{z}, v, t) \right] = H(\{f_{\alpha}\}; \mathbf{z}, v, t) \quad (7.1)$$

Entretanto, há duas questões que dificultam a utilização direta da equação 7.1 da forma que ela foi escrita. Primeiro, que para resolver essa equação é necessário conhecer o campo de velocidade tridimensional do sistema, $\dot{\mathbf{Z}}$, o que agrega um problema de tempo computacional, pois resolver um problema de estimação de parâmetros envolvendo a modelagem multifásica tornaria o problema proibitivo. Porém, mesmo que fosse recomendado utilizar o acoplamento PB-CFD para resolver o problema de estimação de parâmetros, os dados experimentais f_α são obtidos na entrada e na saída do equipamento, não existindo uma caracterização espacial da distribuição numérica de partículas. Portanto, não é possível utilizar o modelo tridimensional da equação de balanço populacional.

Dessa forma, optou-se por utilizar uma simplificação que transforma a equação tornando-a zero-dimensional. A equação 7.1 pode ser estendida de forma que:

$$\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \left[\dot{\mathbf{Z}} f_\alpha(\mathbf{z}, v, t) \right] = \dot{\mathbf{Z}} \cdot \nabla_{\mathbf{z}} f_\alpha(\mathbf{z}, v, t) + f_\alpha(\mathbf{z}, v, t) \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \dot{\mathbf{Z}} = H(\{f_\alpha\}; \mathbf{z}, v, t) \quad (7.2)$$

Se, por hipótese, $\dot{\mathbf{Z}}$ é a velocidade da fase contínua em todos os pontos e sendo a fase contínua incompressível, $\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \dot{\mathbf{Z}} = 0$. Assumindo também que toda gota possui o mesmo tempo de residência no volume do acidente e que todas as variáveis da fase contínua são uniformes nesse volume, obtém-se:

$$\frac{Df_\alpha(v, t)}{Dt} \doteq \dot{\mathbf{Z}} \cdot \nabla_{\mathbf{z}} f_\alpha(\mathbf{z}, v, t) = H(\{f_\alpha\}; v, t) \quad (7.3)$$

onde $H(\{f_\alpha\}; v, t)$ é dado por:

$$B_C(t, v) = \frac{1}{2} \int_0^v f_\alpha(t, v - v') f_\alpha(t, v') a(v - v', v') dv' \quad (7.4)$$

$$D_C(t, v) = \int_0^\infty f_\alpha(t, v) f_\alpha(t, v') a(v, v') dv' \quad (7.5)$$

$$B_B(t, v) = \int_{v'}^{\infty} \varsigma(v') P(v|v') b(v') f_{\alpha}(t, v') dv' \quad (7.6)$$

$$D_B(t, v) = b(v) f_{\alpha}(t, v) \quad (7.7)$$

O tempo de residência, t_{res} , de todas as partículas no volume de controle, V_c é assumido como o tempo de residência médio da mistura. O volume de controle é onde os processos de quebra e coalescência ocorrem e onde as variáveis da fase contínua relevantes são assumidas uniformes. Assim,

$$t_{res} = \frac{V_c}{Q} \quad (7.8)$$

Os dados experimentais definem o valor da vazão volumétrica com grande precisão, mas o volume de controle não é tão bem definido. Ele não corresponde ao volume completo do equipamento, mas apenas a um certo volume na proximidade do acidente.

A forma mais genérica e simples de determinar esse volume de controle é considerando o volume do acidente.

Assume-se que o erro associado a hipótese possa ser absorvido pelo erro de 20 % atribuído a essa variável. A hipótese utilizada para definir o volume de controle é apresentada na figura 7.1.

A taxa específica de dissipação de energia turbulenta, ϵ , é determinada considerando que toda a queda de pressão no corpo de prova ocorre devido ao acidente, o que é comprovado pelos ensaios “em branco”. Dessa forma, pode-se escrever a taxa específica de dissipação de energia turbulenta global como

$$\epsilon = \frac{\Delta P}{\rho t_{res}} \quad (7.9)$$

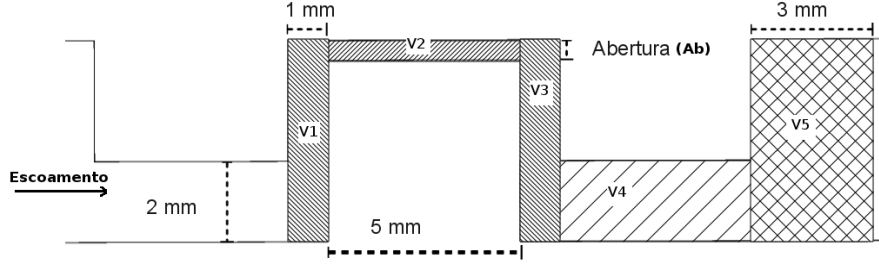


Figura 7.1: Volume de controle considerado para determinar o tempo de residência das partículas na região que produz a quebra e a coalescência. Sendo, $V1 = V3 = 1 \times 5 \times 5 \text{ mm}^3$, $V2 = 5 \times (Ab) \times 5 \text{ mm}^3$, onde Ab é a abertura de cada acidente, $V4 = 5 \times 2 \times 5 \text{ mm}^3$ e $V5 = 3 \times 5 \times 5 \text{ mm}^3$. Volume de controle total, $V_c = 25(7 + Ab) \text{ mm}^3$.

7.1 Método matemático

Para resolver o problema definido pela equação 7.3, foi selecionado o método das classes [9, 27, 57, 61, 62] uma vez que as medidas no Malvern são dadas por classes.

A equação 7.3 discretizada é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \sum_{\substack{j \geq k \\ \xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1}}} [1 - \frac{1}{2} \delta'_{j,k}] \lambda_i a(\xi_j, \xi_k) N_j N_k \\ & - N_i \sum_k^n a(\xi_i, \xi_k) N_k + \sum_{k \geq i}^n \varsigma(\xi_k) \psi_{i,k} b(\xi_k) N_k - b(\xi_i) N_i \end{aligned} \quad (7.10)$$

onde

$$\lambda_i = \begin{cases} \frac{\xi_{i+1} - (\xi_j + \xi_k)}{\xi_{i+1} - \xi_i}, & \xi_i \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1} \\ \frac{(\xi_j + \xi_k) - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}}, & \xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_i \end{cases} \quad (7.11)$$

e

$$\psi_{i,k} = \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{\xi_{i+1} - v}{\xi_{i+1} - \xi_i} P(v | \xi_k) dv + \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} \frac{v - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}} P(v | \xi_k) dv \quad (7.12)$$

O sistema de equações algébrico diferencial que compõem o método das classes, ou seja, o problema direto, foi resolvido utilizando a DASSL [144].

Para resolver o problema de estimação de parâmetros, utilizou-se a biblioteca de rotinas chamada de ODRPACK95 [145]. Essa biblioteca permite realizar a regressão da distância ortogonal, que consiste em minimizar a distância ortogonal entre as variáveis de ajuste e as variáveis ajustadas, permitindo ponderar cada termo da soma a ser minimizada.

Para facilitar o entendimento, essa parte do texto utilizará uma nomenclatura própria, ou seja, utilizará f , x , y , β como se nenhuma outra parte do texto os tivesse utilizado.

Assim sendo, sejam as variáveis de resposta y e as variáveis explanatórias x , e os parâmetros β . Existe um modelo que fornece uma relação explícita da forma

$$y \approx f(x; \beta) \quad (7.13)$$

Esta equação para y é aproximada devido aos erros nas variáveis x e y . Quando tanto x quanto y possuem erros de medição, os parâmetro β podem ser obtidos por regressão da distância ortogonal. Se apenas as variáveis de resposta y tiverem erros, então, o método transforma-se em mínimos quadrados (ponderados ou não, a escolha do usuário).

O método explícito da regressão da distância ortogonal multiresposta (mais de uma variável de entrada e saída) é definido pela seguinte minimização:

$$\min_{\beta, \delta, e} S^F = \min_{\beta, \delta, e} \sum_{i=1}^n ([e_i^T w_{e_i} e_i] + [\delta_i^T w_{\delta_i} \delta_i]) \quad (7.14)$$

onde w_{δ_i} e w_{e_i} são os pesos das variáveis explanatórias e de resposta respectivamente, e e_i , o erro nas variáveis de resposta, é definido por

$$e_i = f(x_i + \delta_i; \beta) - y_i \quad (7.15)$$

onde δ_i é o erro nas variáveis explanatórias. O erro nas variáveis de resposta é

sempre desconhecido e minimizado pela função, o erro nas variáveis explanatórias pode ou não ser levado em consideração, o que significa ser ou não ser conhecido. Usualmente, utiliza-se o inverso da variância como peso para as variáveis e essa recomendação foi utilizada nesse trabalho.

Considerando um caso simples, com apenas uma variável explanatória e uma variável de resposta, a regressão da distância ortogonal consiste em minimizar a distância que existe entre os pontos definidos pelos dados experimentais e pela resposta obtida na resolução do problema direto.

Os detalhes do método matemático (tanto em questões teóricas, quanto de implementação) podem ser obtidos no manual do usuário da biblioteca [145].

Esse trabalho considerou a regressão explícita multi-resposta, considerando erro nas variáveis de resposta. As variáveis explanatórias foram avaliadas de duas formas, considerando erro e sem considerar o erro dessas variáveis.

O problema direto consiste na simulação de 78 pontos experimentais. Cada ponto possui 74 variáveis explanatórias (a distribuição numérica ou volumétrica de tamanho das partículas obtidas antes do acidente contribui com 70 dessas variáveis, e existem ainda o diferencial de pressão, a vazão, a temperatura e o volume de controle) e 70 variáveis de resposta (a distribuição numérica ou volumétrica de tamanho das partículas após o acidente). Inicialmente, tentou-se utilizar as distribuições numéricas de partículas antes e após o acidente como variáveis explanatórias e de resposta, respectivamente, mas os resultados não foram bons. Então, usou-se as distribuições volumétricas de tamanho das partículas. Note que, apesar disso, o método das classes exige o número de partículas em cada classe, ou seja, mesmo quando x e y incluam os dados das distribuições volumétricas de tamanho de partículas, a distribuição numérica de tamanho de partículas na entrada (antes do acidente) é calculada para ser utilizada no método das classes e a distribuição numérica de tamanho de partícula é a resposta obtida na saída (após o acidente). Entretanto, elas não são usadas na análise da convergência do problema de estimação de parâmetros.

A tolerância numérica e de convergência dos parâmetros é calculada internamente e é da ordem de 10^{-10} . O número máximo de interações foi imposto como igual a 200.

Para evitar problemas na solução numérica, foi estabelecido que quando uma variável for “zero” não se considera o erro dessa variável.

O ODRPACK utiliza um fator de escalonamento para tentar colocar todas as variáveis na ordem de grandeza unitária. Esse fator de escalonamento tem como objetivo minimizar a dificuldade de solução dos algoritmos numéricos. Alguns valores para esse fator foram utilizadas e todos os ajustes apresentaram boa convergência para o mesmo ponto. Portanto, o uso do escalonamento padrão é o recomendado nesse trabalho, sendo a condição padrão definida por

$$\text{SCALE}_i = \begin{cases} 10/X_{\min} & \text{se } X = 0 \\ 1/|X| & \text{se } \log(X_{\max}) - \log(X_{\min}) > 1 \\ 1/X_{\max} & \end{cases} \quad (7.16)$$

onde X_{\min} e X_{\max} são o menor e o maior valor não zero da coluna de variáveis.

Capítulo 8

Resultados

Esse capítulo descreve os resultados experimentais obtidos no Núcleo de Separadores Compactos da UNIFEI, analisa esses dados experimentais e apresenta a modelagem do sistema para determinar a evolução da distribuição de tamanho de partículas, comparando os resultados experimentais com os resultados simulados.

A seção 8.1 aborda as características observadas nos dados experimentais. A seção 8.2 apresenta os modelos de quebra e coalescência recomendados por essa tese para a resolução do problema. A modelagem da EBP, o método numérico utilizado para resolver o problema direto e o método de estimação de parâmetros utilizado foram apresentados no capítulo 7.

Posteriormente, na seção 8.3 será apresentada a análise detalhada do resultados experimentais da distribuição numérica de tamanho de gotas observando o motivo pelo qual não foi possível obter uma boa modelagem da evolução da distribuição numérica de tamanho de gotas.

Em vista disso, a seção 8.4 apresenta a análise detalhada dos resultados experimentais considerando a distribuição volumétrica de tamanho de gotas, apresentando todos os resultados obtidos com a modelagem dessa evolução e as respectivas comparações de resultados experimentais com resultados obtidos pela simulação de

diâmetros característicos e momentos de maior ordem. Essa seção inclui a avaliação dos demais modelos analisados nessa tese.

Devido ao grande volume de modelos e de abordagens utilizadas, apenas o melhor resultado será apresentado de forma completo (com todas as figuras). Nas tentativas que não foram bem sucedidas, o resultado gráfico apenas será apresentado de forma amostral e se necessário para justificar as observações feitas.

Algumas das figuras que serão apresentadas ao longo desse capítulo possuem a impressão de haver apenas três curvas ao invés das quatro que são indicadas pela legenda. Note que quando o erro da variável explanatória não for considerado, a distribuição de tamanhos de gotas obtidas simulada antes do acidente é igual a distribuição experimental no mesmo ponto.

8.1 Resultados experimentais

Os pontos experimentais disponíveis estão em menor quantidade do que os pontos programados, pois os experimentos que apresentaram problemas de execução foram excluídos do banco de dados. Os resultados das distribuições volumétricas de tamanho das partículas pode ser encontrado no anexo A, na mesma figura onde estão os resultados simulados.

Como foi dito, o analisador de partículas discretiza a distribuição em 100 classes, contudo, muitas dessas classes não possuem partículas. Embora seja importante manter algumas dessas classes sem partículas para evitar problemas numéricos na solução do problema direto, 30 classes foram retiradas para diminuir o esforço computacional na estimação de parâmetro.

Os experimentalistas buscaram executar um mínimo de 3 réplicas experimentais (na distribuição normalizada de partículas) para cada ponto, isto é, para cada vazão e concentração de água. Contudo, em alguns casos, até 5 réplicas foram obtidos. Das

tabelas que serão apresentadas a seguir, será possível verificar que alguns pontos experimentais não possuem valores estabelecidos. Esses são os pontos que foram excluídos do banco de dados devido a problemas operacionais.

A tabela 8.1 apresenta a concentração percentual mássica de água na emulsão medida pelo método de titração Karl-Fisher. As condições de operação foram determinadas de forma que essa variável permanecesse estável durante os experimentos. O sistema de controle da linha indica se houver diferença na razão das vazões independentes de água e óleo, o que indicaria modificação na concentração de água no óleo. Como foi dito, essa informação será utilizada para determinar a distribuição não normalizada de gotas de água na emulsão.

Tabela 8.1: Concentração percentual mássica de água na emulsão

		pt1	pt2	pt3	pt4	pt5	pt6	pt7	pt8	pt9	pt10
Abertura da gaveta (mm):		<i>B</i>	<i>2,5</i>	<i>1,5</i>	<i>1,0</i>	<i>0,5</i>	<i>0,5</i>	<i>1,0</i>	<i>1,5</i>	<i>2,5</i>	<i>B</i>
Condição de vazão	g1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g2	14,5	14,5	-	-	14,5	8,3	8,3	8,3	8,3	8,3
	g3	14,6	14,6	14,6	14,6	14,6	-	8,1	8,1	8,1	8,1
	g4	14,5	14,5	14,5	14,5	14,5	8,3	8,3	8,3	8,3	-
	g5	-	14,5	14,5	14,5	-	7,8	7,8	-	7,8	7,8
	g6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g7	14,5	14,5	14,5	14,5	14,5	8,1	8,1	8,1	8,1	8,1
	g8	14,5	14,5	14,5	14,5	14,5	-	8,2	-	-	-
	g9	14,5	14,5	14,5	14,5	14,5	8,5	-	8,5	8,5	8,5
	g10	14,5	-	-	-	-	-	8,2	8,2	8,2	8,2
	g11	14,5	14,5	14,5	14,5	14,5	8,3	8,3	8,3	8,3	8,3
	g12	14,5	14,5	14,5	-	14,5	8,3	8,3	8,3	8,3	-
	g13	-	14,5	14,5	14,5	-	8,3	-	8,3	8,3	8,3
	g14	-	-	14,6	14,6	14,6	-	-	8,5	8,5	8,5
	g15	14,5	14,5	14,5	-	14,5	8,5	8,5	8,5	8,5	-

A tabela 8.2 apresenta o diferencial de pressão entre a entrada e a saída do corpo de prova. Essa informação será utilizada para determinar a taxa específica de dissipação de energia cinética turbulenta média do escoamento, que será utilizada pelos modelos de quebra e coalescência.

A tabela 8.3 apresenta a temperatura medida durante cada experimento. Essa informação será utilizada na determinação das propriedades do óleo/emulsão.

A tabela 8.4 apresenta os resultados de vazão mássica medidos durante a oper-

Tabela 8.2: Diferencial de pressão (em kgf/cm²) entre a entrada e a saída do corpo de prova.

		pt1	pt2	pt3	pt4	pt5	pt6	pt7	pt8	pt9	pt10
Abertura da gaveta (mm):		<i>B</i>	<i>2,5</i>	<i>1,5</i>	<i>1,0</i>	<i>0,5</i>	<i>0,5</i>	<i>1,0</i>	<i>1,5</i>	<i>2,5</i>	<i>B</i>
Condição de vazão	g1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g2	0,15	3,46	-	-	8,15	8,38	4,67	4,13	3,44	0,15
	g3	0,18	3,50	4,13	4,65	8,24	-	4,64	4,11	3,47	0,16
	g4	0,16	3,48	4,11	4,64	8,22	8,43	4,66	4,14	3,49	-
	g5	-	3,45	4,12	4,67	-	8,34	4,63	-	3,42	0,16
	g6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g7	0,05	0,59	0,78	0,88	1,54	1,53	0,88	0,77	0,57	0,06
	g8	0,06	0,54	0,73	0,84	1,47	-	0,84	-	-	-
	g9	0,05	0,57	0,75	0,94	1,50	1,51	-	0,74	0,55	0,04
	g10	0,06	-	-	-	-	-	0,85	0,75	0,55	0,05
	g11	0,09	1,68	2,15	2,42	4,17	4,20	2,42	2,18	1,74	0,09
	g12	0,09	1,73	2,15	-	4,19	4,24	2,41	2,19	1,73	-
	g13	-	1,73	2,16	2,45	-	4,27	-	2,17	1,75	0,09
	g14	-	-	2,16	2,44	4,31	-	-	2,20	1,76	0,09
	g15	0,10	1,73	2,15	-	4,28	2,29	2,44	2,19	1,76	-

Tabela 8.3: Temperatura (em C) do fluido durante a operação.

		pt1	pt2	pt3	pt4	pt5	pt6	pt7	pt8	pt9	pt10
Abertura da gaveta (mm):		<i>B</i>	<i>2,5</i>	<i>1,5</i>	<i>1,0</i>	<i>0,5</i>	<i>0,5</i>	<i>1,0</i>	<i>1,5</i>	<i>2,5</i>	<i>B</i>
Condição de vazão	g1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g2	60,6	60,7	-	-	61,0	60,4	60,3	60,0	60,0	60,0
	g3	61,1	61,3	61,4	61,5	61,8	-	59,9	59,8	59,6	59,6
	g4	61,1	61,7	61,5	61,8	62,1	61,1	60,8	60,5	60,5	-
	g5	-	61,2	61,4	61,5	-	60,7	60,6	-	60,7	60,6
	g6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g7	56,9	56,5	56,8	56,8	56,9	56,1	56,1	56,3	56,2	56,0
	g8	55,9	56,8	56,9	56,4	56,8	-	56,3	-	-	-
	g9	56,5	56,9	57,1	57,4	57,5	56,4	-	56,5	56,8	57,2
	g10	56,4	-	-	-	-	-	56,7	56,7	56,8	56,8
	g11	60,5	60,4	60,8	61,1	61,1	60,3	60,4	60,5	60,5	60,4
	g12	60,6	60,8	61,2	-	61,3	60,6	60,3	60,3	60,6	-
	g13	-	60,4	60,6	60,6	-	60,2	-	60,1	60,1	60,2
	g14	-	-	60,8	60,9	60,9	-	-	60,5	60,4	60,4
	g15	60,7	61,1	61,1	-	61,2	60,5	60,4	60,5	60,4	-

ação. Essa informação é utilizada para a determinação do tempo de residência e, por consequência, na taxa específica de dissipação de energia cinética turbulenta.

Tabela 8.4: Vazão mássica (em kg/min) do escoamento.

	pt1	pt2	pt3	pt4	pt5	pt6	pt7	pt8	pt9	pt10	
Abertura da gaveta (mm):	<i>B</i>	<i>2,5</i>	<i>1,5</i>	<i>1,0</i>	<i>0,5</i>	<i>0,5</i>	<i>1,0</i>	<i>1,5</i>	<i>2,5</i>	<i>B</i>	
Condição de vazão	g1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
	g2	4,30	4,30	-	-	4,29	4,31	4,30	4,30	4,29	4,33
	g3	4,29	4,30	4,32	4,31	4,29	-	4,25	4,25	4,28	4,32
	g4	4,30	4,32	4,33	4,30	4,30	4,33	4,33	4,33	4,33	-
	g5	-	4,34	4,33	4,37	-	4,33	4,32	-	4,31	4,27
	g6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	g7	1,71	1,72	1,72	1,72	1,70	1,70	1,68	1,68	1,70	1,70
	g8	1,70	1,69	1,68	1,67	1,67	-	1,68	-	-	-
	g9	1,71	1,71	1,72	1,71	1,68	1,67	-	1,67	1,67	1,68
	g10	1,71	1,71	-	-	-	-	1,72	1,72	1,69	1,71
	g11	2,97	2,98	3,00	3,00	3,00	2,99	3,00	3,00	3,00	3,00
	g12	3,00	3,00	3,00	-	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	-
	g13	-	3,00	3,00	3,00	-	2,99	-	3,00	3,00	3,00
	g14	-	-	3,00	3,00	3,00	-	-	3,00	3,01	3,00
	g15	3,00	3,00	3,00	-	3,00	3,00	3,00	3,00	3,01	-

As propriedades do óleo também foram avaliadas experimentalmente. A ordem de execução dos experimentos já se mostra importante nesse caso, pois houve uma modificação nas propriedades do sistema com o envelhecimento do óleo no tanque de armazenamento principal. Dessa forma, existem dois conjuntos de dados experimentais e correlações para tensão interfacial, viscosidade e densidade. Um conjunto se aplica para as vazões alta e baixa e o outro para a vazão média. Todas as correlações foram determinadas para a faixa de temperatura de 55 a 65 C. Em todos os casos, a temperatura deve ser utilizada em Celsius.

- Para as vazões alta (lotes G1-G5) e baixa (lotes G6-G10):

- Tensão interfacial (mN/m)

$$\sigma = -0,1782T + 33,014 \quad (8.1)$$

- Viscosidade (mPa.s)

$$\mu = 414,4 \exp(-0,0597T) \quad (8.2)$$

- Densidade constante na faixa de temperatura e igual a $865 \pm 5 \text{ kg/m}^3$.
- Para a vazão média (lotes G11-G15):
 - Tensão interfacial (mN/m)

$$\sigma = -0,1623T + 31,987 \quad (8.3)$$

- Viscosidade (mPa.s)

$$\mu = 161,26 \exp(-0,0468T) \quad (8.4)$$

- Densidade constate na faixa de temperatura e igual a $862 \pm 5 \text{ kg/m}^3$.

São considerados variáveis experimentais com erro: o diferencial de pressão, a vazão mássica, a temperatura e a distribuição de tamanho de partículas. Para as três primeiras variáveis a norma de utilização estabelecida foi que quando o erro for menor que a precisão do equipamento ou do sistema de controle, será utilizado a precisão do equipamento ou do sistema de controle como valor para o erro.

8.2 Modelagem básica da evolução da distribuição de densidade numérica de partículas

A modelagem da distribuição numérica de partículas no espaço e no tempo foi apresentada no capítulo 7. O modelo é definido pela equação 7.3. O método das classes, utilizado para resolver a equação 7.3 está definido nas equações 7.10, 7.11 e 7.12. O capítulo também apresentou o método da regressão da distância ortogonal utilizado pelo ODRPACK95 para determinação do melhores parâmetros dos modelos de quebra e coalescência.

Restou, portanto, modelar a quebra e a coalescência das gotas.

8.2.1 Modelagem recomendada da quebra e coalescência

De forma resumida, a modelagem da quebra e coalescência envolve cinco categorias de modelos que devem ser estabelecidos. De uma forma expandida, todos os modelos de quebra possuem alguma forma de determinar qual é o diâmetro/tamanho crítico da partícula abaixo do qual esta não quebra naquele mecanismo, o que significa a existência de uma etapa adicional de modelagem da quebra que precisa definir este tamanho crítico, constituindo uma sexta categoria de modelo. Recapitulando, é necessário modelar: Sendo elas:

- a frequência de colisão na coalescência,
- a eficiência de coalescência,
- a frequência de quebra,
- o diâmetro crítico abaixo do qual a quebra não ocorre,
- a distribuição de probabilidades de tamanho de partículas filhas geradas na quebra e
- o número de partículas filhas.

Como todos os modelos interferem nos resultados uns dos outros, em teoria a única forma de determinar qual é a melhor modelagem é realizando simulações de todos os possíveis modelos de cada tipo com todos dos outros tipos. Portanto, se cada categoria tiver 2 representantes, têm-se $2^6 = 64$ conjuntos de modelo/simulações a serem efetuadas. Na teoria, considerando o número de modelos que foram realmente avaliados, teríamos cerca de 400 conjuntos. Felizmente, o número de simulações é bem menor, pois algumas avaliações básicas permitem descartar um ou outro modelo sem a necessidade de avaliá-lo por completo com todos os demais. Ainda assim, têm-se o expressivo número de 49 conjuntos que foram avaliados.

Para simplificar a exposição do resultados, a presente seção define apenas o modelo recomendado, ou seja, o modelo que foi selecionado como o melhor modelo depois que todas as avaliações que foram efetuadas.

Algumas das hipóteses utilizadas na modelagem requerem justificativas mais detalhadas. Por exemplo, a quebra gera mais do que 2 partículas filhas. Os resultados obtidos permitem escrever isso e, portanto, o modelo de distribuição de partículas filhas não é binário. Mas a justificativas do porque isso ser verdade somente são vistas durante a apresentação dos resultados e quando os resultados do modelo recomendado são confrontados com os obtidos com as alternativas de modelagem.

Como detalhado durante a revisão dos modelos de quebra e coalescência, existem duas escalas de tamanho que servem de divisores para os tipos de modelos existentes: a escala de Kolmogorov e a escala integral. Todas as partículas dos resultados experimentais são bem menores que a escala integral do equipamento (todas as partículas são menores que 0,5 mm, que é a menor escala integral do conjunto de dados). Assim, nesse trabalho, apenas o contexto associado à escala de Kolmogorov, $\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$, é relevante, pois boa parte das partículas são menores que a mesma.

Segundo os modelos existentes, o mecanismo que rege os fenômenos muda quando a partícula é maior ou menor que a escala de Kolmogorov de forma abrupta. Existindo um mecanismo sub-Kolmogorov e um mecanismo inercial, tanto para coalescência quanto para a quebra. Sabe-se que de alguma forma essa transição de mecanismos ocorre devido a uma modificação da interação da partícula com o escoamento. Desta forma, é razoável supor que a transição seja contínua e suave ou mesmo que os dois mecanismo coexistam em uma dada faixa de tamanhos intermediários.

Esse trabalho se utilizou do conhecimento existente sobre a quebra e a coalescência de partículas para acrescentar novas interpretações que permitiram modelar este processos em uma faixa de tamanho de partículas que usualmente não é abordada, pois raros são os casos onde as partículas fluidas são menores que a escala de Kol-

mogorov do escoamento ao qual pertencem.

Portanto, é necessário partir do princípio de que muito do que já foi feito na literatura não está completamente errado mas que é apenas uma modelagem incompleta. E se isso é verdade, os resultados obtidos nesse trabalho indicam que essa transição entre os mecanismos de quebra não ocorre exatamente quando o diâmetro da partícula possui o valor da escala de Kolmogorov, mas em um outro valor limite, d_l . Esse diâmetro limite, d_l , não foi determinado no trabalho atual, pois os resultados indicaram que é provável que todas as partículas sejam menores que esse valor. Não há estudos de caracterização de mecanismos predominantes em uma certa faixa de tamanho de partícula na literatura. Apesar disso, esse texto continuará a chamar os mecanismos de “mecanismo da faixa sub-Kolmogorov” e “mecanismo da faixa inercial”.

Para ajudar na concepção do modelo utilizado, será demonstrado quando e como seria feita a generalização para a transição suave entre os mecanismos que atuam nas faixas sub-Kolmogorov e inercial. Note que essa generalização chegou a ser testada antes das conclusões obtidas e, por isso, fez parte do desenvolvimento do modelo final, especialmente no caso do modelo de quebra.

Daqui por diante, os parâmetros dos modelos receberão identificação única para que sejam facilmente correlacionados com os resultados que serão apresentados posteriormente.

Modelagem da coalescência

A modelagem da frequência de colisão do modelo de coalescência parte dos modelos de frequência de colisão generalizados através da equação 4.2, reproduzida abaixo:

$$\theta_{ij} = C_{fc} S_{ij} u_r \quad (8.5)$$

onde, C_{fc} é o parâmetro multiplicador da frequência de colisão, S_{ij} é a área característica definida pela equação 4.3, também reproduzida abaixo,

$$S_{ij} = \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} \quad (8.6)$$

e u_r foi determinado como:

$$u_r = \frac{u_{d_i} + u_{d_j}}{2} \quad (8.7)$$

onde u_{d_i} é a velocidade que a partícula possui associada à movimentação provocada pela turbulência que para emulsões com gotas na faixa sub-Kolmogorov, é definida por:

$$u_{d_i} = \dot{\gamma} d_i = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} d_i \quad (8.8)$$

Esse modelo resultante é o modelo de SAFFMAN e TURNER [77] com uma constante multiplicativa diferente.

Sob a hipótese de se considerar dois mecanismos, uma para a faixa de tamanho sub-Kolmogorov e outra para a faixa sub-inercial, então existe um $d_l \geq \eta$, tal que se $d_i > d_l$, a velocidade de movimentação da partícula provocada pela turbulência segue a dependência funcional de KUBOI *et al.* [90], $u_{d_i} = (\epsilon d_i)^{1/3}$. Esta generalização foi testada, mas não pode ser recomendada por não ter sido possível caracterizar a existência de partículas com diâmetro tal que $d_i > d_l$ para os dados experimentais analisados, pois o melhor d_l caracterizado nos resultados é maior que toda as partículas do escoamento e ao estabelecer um valor fixo para o d_l , têm-se resultados ruins.

A modelagem da eficiência de coalescência requer, antes de qualquer coisa, a consideração do tipo de interface que a partícula possui como sendo rígida ou deformável, e se deformável, definir se a interface é imóvel, parcialmente móvel ou móvel.

Para partículas de diâmetro menor que 1 mm pode-se assumir que a interface seja rígida [5, 6]. CHESTERS [5] recomenda que para gotas de água em óleo (não

especificado) seja assumido que a interface da partícula é deformável e parcialmente móvel. O caso estudado nesse trabalho permite realizar as duas considerações.

A única certeza que se pode ter é que a interface não é móvel, pois o óleo contém inúmeras substâncias que limitariam a mobilidade da interface.

Nesta investigação, todas as demais hipóteses foram testadas. Entretanto, os resultados indicaram que a eficiência é praticamente constante em todo o conjunto de dados, embora o valor preciso da eficiência dependa de um parâmetro empírico. Considerando os erros existentes em todas as variáveis, a eficiência é constante. Portanto, o melhor modelo é assumir que o valor da eficiência está “embutido” no valor do parâmetro multiplicativo C_{fc} .

Modelagem da quebra

Nos dados avaliados, a quebra das partículas é dominante. A frequência de quebra é inversamente proporcional ao tempo de quebra. É compreendido que para quebrar, a partícula necessita produzir uma deformação na interface e, portanto, existe uma relação de equilíbrio entre as tensões e/ou energias coesivas da interface e as tensões e/ou energias que produzem a deformação que induzirá a quebra.

Portanto, é razoável que quando uma partícula seja muito pequena, menor que um certo diâmetro crítico, d_c , a quebra não ocorra. Também pode-se compreender que quando a partícula é muito grande, aumenta o tempo que leva para que a deformação complete-se a ponto de haver a ruptura. Portanto, é de se esperar que para partícula muito grande a frequência de quebra (produzida pela turbulência do meio contínuo) diminua com o tamanho para grandes partículas.

Dessa forma, o comportamento que se espera de um modelo de frequência de quebra é que ele seja zero para partículas menores que o diâmetro crítico, aumente progressivamente até um valor máximo para partículas maiores que d_c .

Para partículas cujo raio é menor que o tamanho da escala de Kolmogorov, existe o modelo de frequência de quebra de CRISTINI *et al.* [124]. Esse mecanismo supõem que a quebra ocorra devido a interação da partícula com as menores escalas do escoamento. Para partículas cujo diâmetro pertença a escala de tamanho da faixa inercial, têm-se o modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128]. Porém, o diâmetro crítico desse modelo é usualmente muito maior do que o dobro da escala de Kolmogorov. Sendo assim, para utilizar esses dois modelos é indispensável uma modificação dos mesmos para gerar uma forma acoplada que não tenha uma região intermediária de tamanhos de partículas que não quebrem.

A escolha do modelo de CRISTINI *et al.* [124] deve-se ao fato de ser o único modelo existente até o momento para partículas muito pequenas. Esse modelo foi concebido para partículas cujo diâmetro esteja entre um dado diâmetro crítico e um valor que ainda seja menor que o dobro da escala de Kolmogorov ($d < 2\eta$). Na realidade, CRISTINI *et al.* [124] considera que $d \ll 2\eta$. O valor da frequência de quebra aumenta com o aumento do diâmetro nesse intervalo. Se for estendido a toda faixa de tamanhos de partículas, o valor da frequência de quebra tenderá a infinito quando o diâmetro da partícula tende a infinito. Portanto, esse modelo não pode ser aplicado a toda a faixa de tamanho de partículas. O modelo original de CRISTINI *et al.* [124] é apresentado na equação 8.9.

$$b_{subk}(d) = C_{b2}\sqrt{\epsilon/\nu}Ca^3 \quad (8.9)$$

válido para $Ca > Ca_{crit} = 1/\mathcal{R}e$ e C_{b2} é um parâmetro determinado pelos autores como igual a $0,148 \pm 0,015$ utilizando simulações DNS. O número capilar é definido por

$$Ca = \frac{\mu\sqrt{\epsilon/\nu}d}{2\sigma} \quad (8.10)$$

A escolha do modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128], deve-se ao fato desse modelo ter o comportamento que se espera do modelo de quebra, com a frequência de quebra indo a zero após um ponto de máximo, além de ter produzido bons

resultados quando aplicado em outros sistemas [10]. Os outros modelos são mais antigos ou possuem menor base teórica/experimental ou não possuem a característica fundamental desejada de que a frequência de quebra diminua quando o tamanho da partícula aumenta após um ponto máximo. O modelo original de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] é apresentado na equação 5.78 e reproduzido abaixo:

$$b_{mm}(d) = C_{b1} \frac{\sqrt{\beta(\epsilon d)^{2/3} - \frac{2We_{crit}\sigma}{\rho d}}}{d} \quad (8.11)$$

A primeira idéia de acoplamento consistia em simplesmente utilizar o modelo de CRISTINI *et al.* [124] até o valor de diâmetro no qual o modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] é diferente de zero, de acordo com a concepção original deste último. Essa idéia não produziu resultados razoáveis, pois existe uma descontinuidade no valor da frequência de quebra que é produzida pelos dois modelos no mencionado ponto de transição. Dessa forma, propôs-se, então, utilizar uma transição suave entre os modelos obrigando ao modelo de frequência de quebra de CRISTINI *et al.* [124] a ter um valor igual ao valor da frequência de quebra de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] no ponto de transição. O ponto de transição selecionado é o correspondente ao diâmetro que faz com que o modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] tenha o seu valor máximo.

A equação 8.11 possui um ponto de máximo em relação ao diâmetro da partícula. O diâmetro que faz com que a frequência seja máxima foi assumido como o diâmetro limite entre os mecanismos e é dado por:

$$d_l = d_{\max} = \left(\frac{3}{2}\right)^{6/5} d_{c,mm} \quad (8.12)$$

onde $d_{c,mm}$ é o diâmetro crítico do modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128], formalmente definido pelos autores como o valor do diâmetro que faz com que a frequência de quebra definida na equação 8.11 seja igual a zero, ou seja, quando as tensões produzidas pelo escoamento é igual a tensões coesivas da partícula, e é dado

por:

$$d_{c,mm} = \left(\frac{2\mathcal{W}e_{crit}\sigma}{\beta\rho} \right)^{3/5} \epsilon^{-2/5} \quad (8.13)$$

Substituindo o valor de d_{\max} nas equações 8.9 e 8.11 e igualando-as, obtém-se uma relação entre os parâmetros empíricos C_{b1} e C_{b2} , permitindo escrever esse último parâmetro em função do primeiro na forma:

$$\begin{aligned} C_{b2} &= C_{b1} \frac{32 (3^{3/5}) (2^{1/5}) (5^{1/2}) \beta^{27/10} (\sigma/\rho)^{4/5}}{729 \mathcal{W}e_{crit}^{11/5} \epsilon^{1/5} \nu} \\ &= 63,927 C_{b1} \frac{1 (\sigma/\rho)^{4/5}}{\mathcal{W}e_{crit}^{11/5} \epsilon^{1/5} \nu} \end{aligned} \quad (8.14)$$

Note que essa correlação entre os parâmetros empíricos envolve dois outros parâmetros, o número de Weber crítico e o β . Quanto a esse último, é conveniente fixá-lo de acordo com a recomendação dos autores, ou seja, $\beta = 8,2$. Assim, o Weber crítico é um parâmetro que define o ponto de transição entre os dois modelos, ou seja, fixado o escoamento (condições e propriedades), e considerando que o modelo de CRISTINI *et al.* [124] será utilizado para toda partícula para a qual $d < d_l$, o valor preciso de d_l é ajustado pelo valor do Weber crítico. Inicialmente, tentou-se manter o valor do número de Weber crítico no valor padrão ($\mathcal{W}e_{crit} = 6$), o que como será visto adiante, não produziu bons resultados. Posteriormente, tentou-se ajustar o valor de Weber crítico, mas o valor para o qual o ajuste tendia para o menor valor da função objetivo fazia com que o valor do d_l fosse maior que o maior diâmetro do escoamento. Isto é razoável, pois o valor de $\mathcal{W}e_{crit} = 6$ é para bolhas de ar em água, e espera-se que para água em petróleo esse valor seja realmente bem maior. Este resultado invalidou esse tipo de acoplamento entre os modelos.

A equação 8.15 pode ser reescrita utilizando a definição do número Capilar e da escala de Kolmogorov na forma:

$$C_{b2} = 63,927 C_{b1} \frac{1}{\mathcal{W}e_{crit}^{11/5}} Ca^{-4/5} \left(\frac{d}{2\eta} \right)^{4/5} \quad (8.15)$$

A partir do resultado anterior, estendeu-se o modelo de CRISTINI *et al.* [124] para toda a faixa de tamanho das gotas. Assim, o modelo efetivamente utilizado é definido pela equação:

$$b(d) = 63,927C_{b1} \frac{1}{We_{crit}^{11/5}} \sqrt{\epsilon/\nu} Ca^{22} \left(\frac{d}{2\eta} \right)^{4/5} \quad (8.16)$$

quando $Ca > Ca_{crit}$.

Um fator importante desse modelo é o número capilar crítico. A recomendação de CRISTINI *et al.* [124], $Ca_{crit} = 1/Re$, não é adequado para explicar os dados experimentais que foram obtidos, como será discutido posteriormente. Portanto, um novo modelo foi desenvolvido baseado no comportamento experimental observado.

Dos dados experimentais, observa-se que o diâmetro crítico do modelo é invariante com o aumento da energia de dissipação turbulenta e diminui com o aumento da vazão. O número capilar crítico é definido como:

$$Ca_{crit} = \frac{\mu \sqrt{\epsilon/\nu} d_{crit}}{2\sigma} \quad (8.17)$$

Se o diâmetro crítico tem as características mencionadas,

$$Ca_{crit} = \frac{\mu \sqrt{\epsilon/\nu} d_{crit}}{2\sigma} = C_{Ca} \frac{\sqrt{\nu}}{t_{res,med}} t_{res} \frac{\sqrt{\epsilon/\nu}}{Re_{max}^{c_{Re}}} \quad (8.18)$$

onde $Re_{max}^{c_{Re}}$ é o número de Reynolds baseado na velocidade máxima na região do acidente, t_{res} é o tempo de residência do fluido no acidente e $t_{res,med}$ é um valor médio do mesmo. Sabendo que o volume crítico de referência obtido por dados experimentais é igual a $1,313 \times 10^{-18} \text{ m}^3$, supondo que as propriedades do óleo sejam aproximadamente constantes, incorporando o tempo de residência médio ao valor da constante e observando que a variação com a vazão faz com que $c_{Re} = 3/20 = 0,1475$, obtém-se, para a condição de referência (experimentos com alta vazão e alta concentração de água) que $C_{Ca} \frac{\sqrt{\nu}}{t_{res,med}} \approx 1,65 \times 10^{-4}$. De forma que o

modelo final é dado por

$$Ca_{crit} = 1,65 \times 10^{-4} St_k Re_{max}^{-3/20} \quad (8.19)$$

onde St_k é o número de Stokes definido pela razão do tempo de residência da partícula e a escala de tempo de Kolmogorov,

$$St_k = \frac{t_{res}}{\tau_\eta} \quad (8.20)$$

onde $\tau_\eta = \sqrt{\nu/\epsilon}$ e o número de Reynolds utilizado é definido por:

$$Re_{max} = \frac{\frac{Q}{L_a L_{a,min}} L_{a,min}}{\nu} = \frac{Q}{L_a \nu} \quad (8.21)$$

onde $L_a L_{a,min}$ é a menor área seccional do escoamento e $L_a = 5$ mm.

Resta modelar a distribuição de probabilidade de tamanho das partículas filhas e o número médio de partículas formadas na quebra. Considerando o modelo de frequência de quebra é o definido apenas pela equação 8.16 (completado com o modelo de número Capilar crítico da equação 8.19), o melhor modelo de distribuição de probabilidade de tamanho de partículas filhas obtido nesse estudo é dado pela seguinte equação:

$$P(v_1|v) = \delta\left(v_1 - \frac{v}{\varsigma}\right) \quad (8.22)$$

Esse modelo corresponde a dizer que toda as gotas formam partículas filhas com igual volume. O número de partículas filhas, ς , é um parâmetro empírico do modelo. Testes utilizando o valor $\varsigma = 2$ foram realizados e não produziram bons resultados.

A tentativa de utilizar um modelo envolvendo os dois mecanismos de quebra

resultou no seguinte modelo

$$b(d) = \begin{cases} C_{b1} \frac{\sqrt{\beta (\epsilon d)^{2/3} - \frac{2\mathcal{W}e_{crit}\sigma}{\rho d}}}{d} & \text{se } d > d_l \\ 63,927 C_{b1} \frac{1}{\mathcal{W}e_{crit}^{11/5}} \sqrt{\epsilon/\nu} \mathcal{C}a^{2,2} \left(\frac{d}{2\eta}\right)^{4/5} & \text{se } d < d_l \text{ e } \mathcal{C}a > \mathcal{C}a_{crit} \end{cases} \quad (8.23)$$

8.2.2 Considerações adicionais sobre a estimação de parâmetros

O tempo computacional médio de um caso de estimação de parâmetros considerando que as variáveis explanatórias possuem erro e fornecendo um chute inicial do valor dos parâmetros próximo de um ponto de mínimo é de aproximadamente 50 horas. O tempo médio de uma única avaliação da função objetivo é de 40 minutos em simulação serial em um Intel Xeon 5570. Devido a isso, a identificação do mínimo global foi efetuada utilizando até 30 conjuntos de valores iniciais distintos para os parâmetros, mas sem considerar erro nas variáveis explanatórias, pois estes cálculos são até 5 vezes mais rápidos. O resultado dessa primeira etapa foi utilizado como chute inicial de uma regressão considerando que as variáveis explanatórias possuem erro. Essa segunda etapa teve até 4 avaliações distintas considerando sempre valores próximos aos que foram previamente determinados. O tempo computacional também é um limitante para a aplicação de um método de busca global clássico, pois nesses métodos podem existir mais de 3000 avaliações da função objetivo.

Todos os resultados apresentados nesse trabalho possuem um coeficiente de correlação entre as variáveis inferior a 0,1, ou seja, os parâmetros considerados são independentes.

8.3 Análise e simulação da evolução da distribuição de densidade numérica de tamanho de gotas

As réplicas dos dados experimentais de distribuição numérica de tamanho de gotas mostraram-se inadequadas. Embora sejam boas réplicas quando consideram a distribuição adimensional, que foi a forma de controlar a qualidade utilizada pelos experimentalistas, não são réplicas para a distribuição não-normalizada. Este problema ocorreu especialmente na entrada do equipamento. Por exemplo, a figura 8.1 apresenta todas as distribuições numéricas de tamanho de gotas para a velocidade média (vazão 3 kg/min) e concentração alta (15 % p/p) na entrada do equipamento. O objetivo era que todas essas curvas fossem réplicas. O principal problema é que a classe com menores partículas com frequência não nula varia ao longo de 7 classes distintas, como pode ser verificado na figura 8.1. Isso faz com que qualquer desvio padrão calculado envolvendo essas curvas seja muito grande, muitas vezes ele é até maior que o próprio valor do ponto.

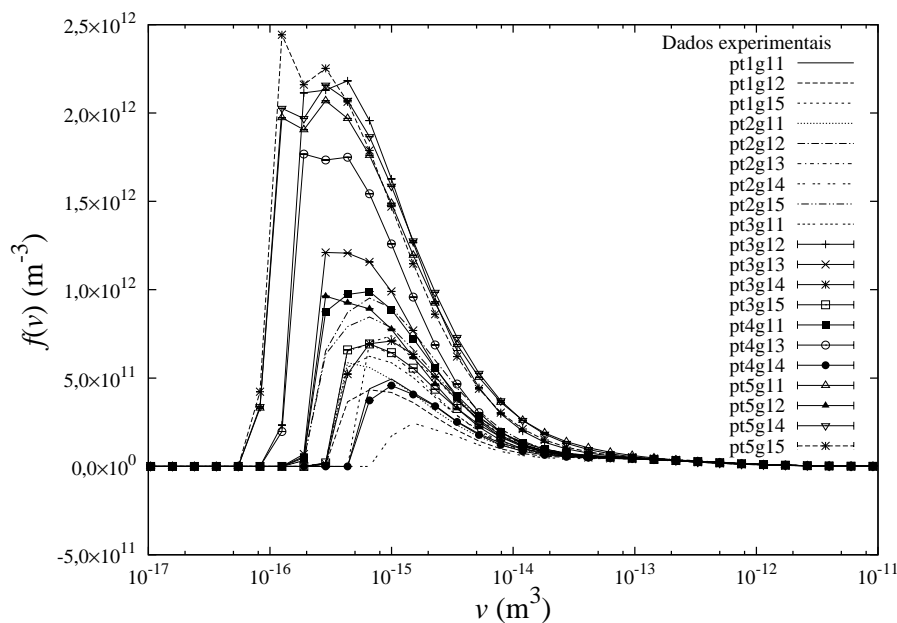
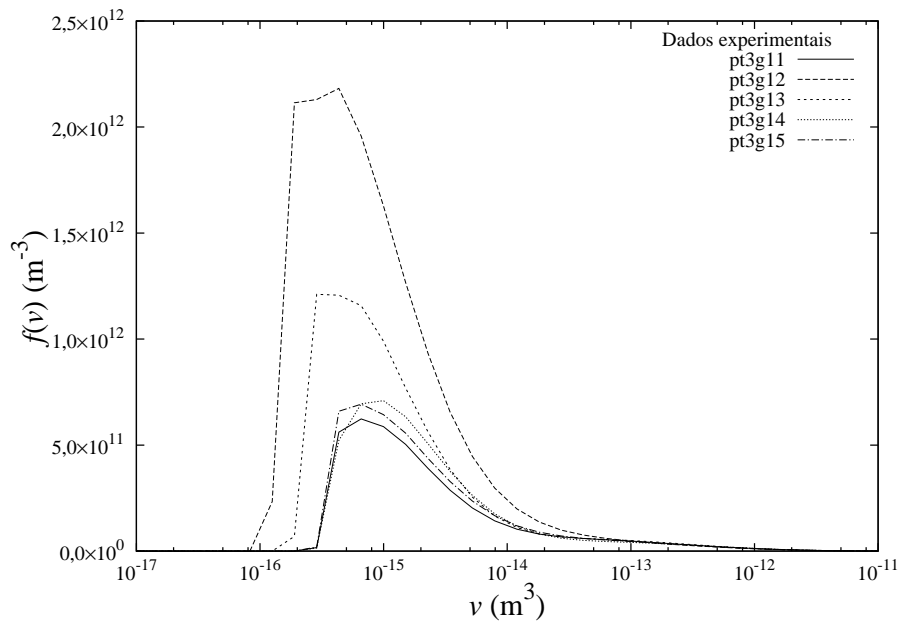


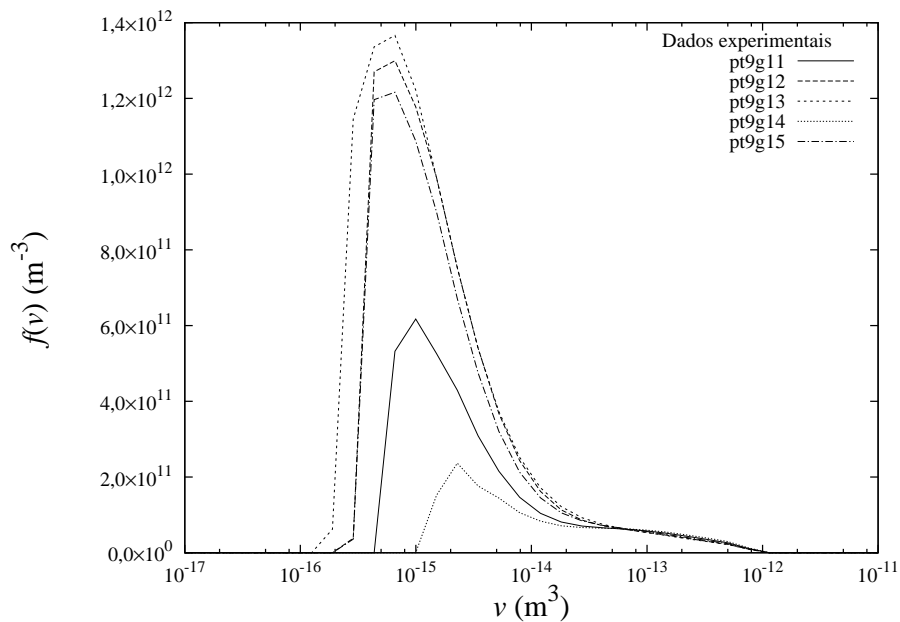
Figura 8.1: Distribuição numérica de tamanho de gotas, na entrada do acidente com a condição de vazão média e concentração alta.

Mesmo considerando apenas as réplicas de um mesmo ponto experimental, este

problema ainda é observado. Isto pode ser visto na figura 8.2, que apresenta as réplicas da distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada para os pontos 3 (concentração alta) e 9 (concentração baixa) na vazão média. Este mesmo problema ocorre na maioria dos pontos experimentais.



(a)



(b)

Figura 8.2: Réplicas da distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada nos pontos (a) 3 e (b) 9. Condição de vazão média.

Desta forma, concluiu-se que as réplicas não possuem a qualidade necessária para serem utilizadas no processo de otimização dos parâmetros dos modelos selecionados. Essa grande variação das funções de distribuição numérica de tamanho de partículas não é observado no ponto de coleta na saída do acidente.

Avaliando os dados experimentais como um todo, percebeu-se que havia réplicas na distribuição numérica de tamanho de partículas, quando as mesmas eram comparadas dentro da mesma rodada experimental. Ou seja, as distribuições numéricas de tamanho de gotas medidas na entrada do corpo de prova para cada ponto experimental ao longo da mesma rodada podem ser consideradas como sendo réplicas. Porém, as emulsões produzidas em rodadas diferentes, mesmo havendo reprodução das condições operacionais, se mostraram diferentes. Houve algum fator desconhecido que influenciou as características da emulsão gerada. Entre os possíveis fatores, temos o envelhecimento do óleo e o processo de coalescência existente antes do corpo de prova.

Os experimentos foram executados em lotes. Cada lote manteve uma condição de vazão fixa e todos os pontos a uma dada concentração foram executados seqüencialmente. A concentração da amostra era controlada em linha alterando a razão entre as vazões de entrada de água e óleo de forma independente. A tabela 8.5 apresenta o método de caracterização das réplicas na entrada e na saída que chegou a ser utilizado. Nessa tabela, procura-se caracterizar o ponto 2, réplica 4 (pt2g4).

Tabela 8.5: Exemplificação da caracterização em “cruz” da distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada e na saída do ponto 2, réplica 4 (pt2g4).

	pt1	pt2	pt3	pt4	pt5
g1					
g2					
g3					
g4					
g5					

Nesta caracterização, a distribuição numérica de tamanho de gotas na saída é a distribuição numérica do tamanho de gotas do ponto que está sendo caracterizado,

utilizando as réplicas marcadas em azul e o próprio ponto que está sendo analisado, para determinar o desvio padrão associado a cada classe da mesma.

Já a distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada de todos os pontos de um dado lote é a média das distribuições numéricas de tamanho de gotas dos pontos que pertencem ao lote e que sejam concordantes entre si. Os desvios padrão de cada classe da distribuição são calculados com estes mesmos dados. Nesse exemplo, a distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada é caracterizada pela média dos pontos marcados em verde e o próprio ponto de análise. Os pontos marcado em cinza são discordantes em relação aos demais.

A figura 8.3 apresenta todas as curvas que fazem parte da análise do ponto pt2g4, exceto a distribuição numérica de tamanho de gotas do ponto 5, pois este é um dado completamente fora da curva, possuindo uma valor máximo de f 1000 vezes maior que as demais de sua série de comparação. Nessa figura e em todas as similares que serão apresentadas, será utilizado a nomenclatura “in” para representar a entrada e “out” para representar a saída. O eixo da esquerda possui a escala dos dados da saída e o eixo da direita possui a escala dos dados da entrada. Na figura 8.3 é possível perceber que as distribuições numéricas de tamanho de gotas na saída possuem boa concordância entre elas. Essa boa concordância é uma constante entre os casos analisados. Por sua vez, a distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada não possui uma reprodutibilidade tão boa assim. O ponto experimental pt3g4 foi descartado por que a sua primeira classe não nula é diferente das classes correspondentes nas demais curvas. Mas no que diz respeito a altura do pico, a diferença entre pt1g4 e pt4g4 é razoável (cerca de 2 vezes). Esse tipo de diferença foi atribuído a variações experimentais e não foi considerado motivo para o descarte do ponto. Se este motivo fosse usado para descarte, não sobrariam dados experimentais ao final do processo de análise.

Nessa figura, o ponto experimental pt2g4 é uma curva de pontos, que permite ver com clareza a discretização dos pivôs ao longo da curva. Note que o pico da

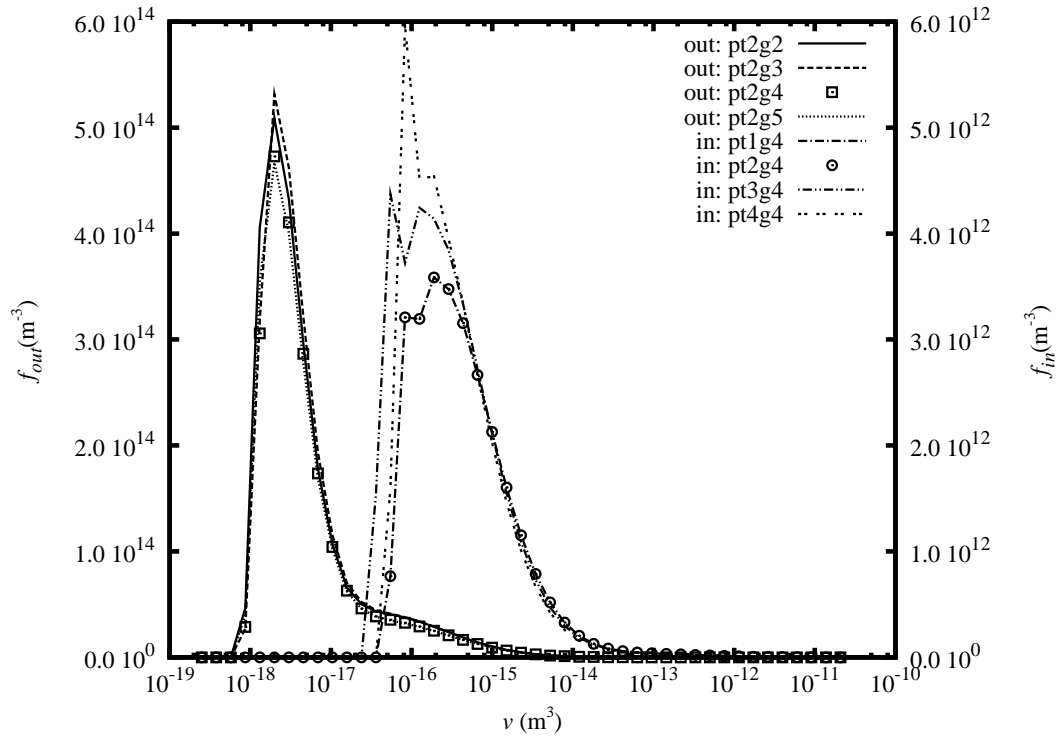


Figura 8.3: Distribuições numéricas de tamanho de gotas na entrada (escala a direita) e na saída (escala a esquerda) associadas a análise do ponto experimental pt2g4.

distribuição numérica de tamanho de gotas na saída é caracterizado por apenas 8 classes de aproximadamente 30 não nulas, ou seja, existem 22 pontos compondo a cauda composta por partículas de maior volume.

O resultado da análise do ponto experimental pt2g4 é apresentado na figura 8.4.

A análise efetuada em “cruz” levou ao descarte de quase todos os pontos experimentais referentes a condição de gaveta completamente aberta (ou seja, os pontos brancos). Motivo pelo qual nenhum deles foi utilizado. Restaram apenas 70 pontos experimentais após o processamento dessa análise, utilizando o máximo de tolerância que se pode permitir na comparação de duas curvas. No final, esse método de análise dos resultados não foi utilizado nas estimações de parâmetros finais, mas ele consiste na única forma de determinação do desvio padrão dos pontos das distribuições numéricas de tamanho de gotas.

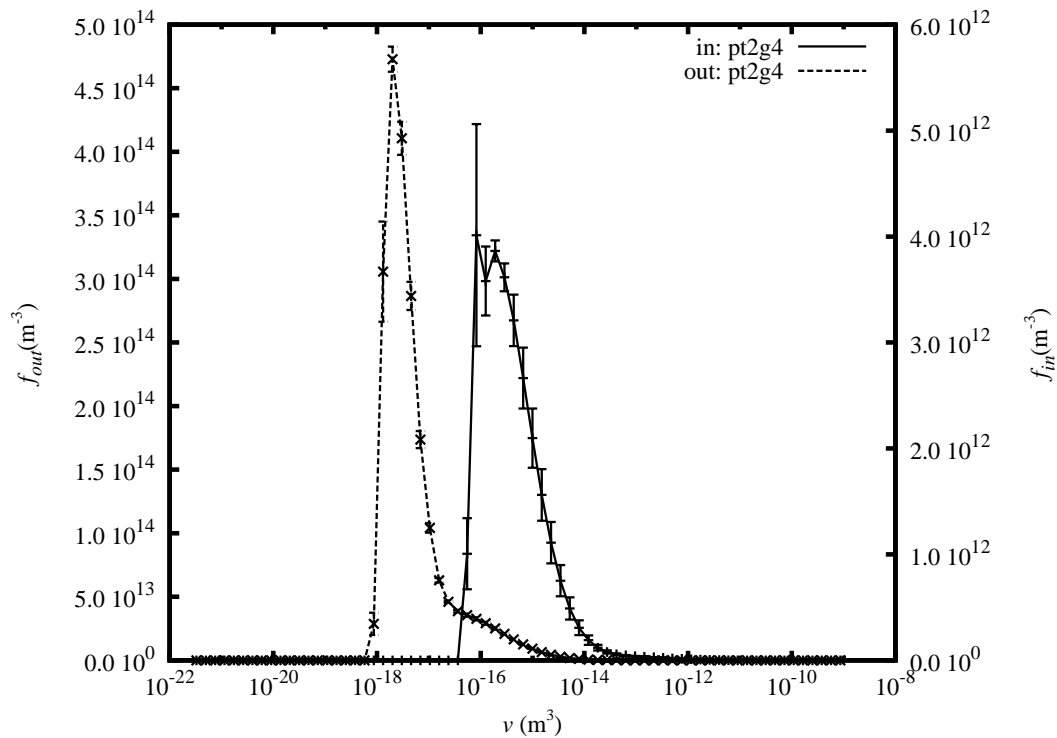


Figura 8.4: Distribuições numéricas de tamanho de gotas na entrada (eixo a esquerda) e na saída (eixo a direita) do ponto experimental pt2g4 após a análise dos dados em “cruz”.

A escala de Kolmogorov do ponto experimental pt2g4 é aproximadamente $1,0 \times 10^{-5}$ m, o que corresponde ao volume esférico de aproximadamente $5,2 \times 10^{-16}$ m³. Nesse exemplo, no qual a gaveta está quase totalmente aberta, percebe-se também pela figura 8.4, que o pico da distribuição numérica de tamanho de gotas na saída pertence a escala sub-Kolmogorov. Além disso, vê-se que boa parte da faixa de volumes da distribuição numérica de tamanho de gotas na entrada também é inferior a escala de Kolmogorov. Isto demonstrando a necessidade de se ter modelos de quebra e coalescência capazes de atuar em uma ampla faixa de tamanho de gotas.

Note que mesmo quando se utiliza a distribuição volumétrica de tamanho de gotas, é a distribuição numérica de tamanho de gotas que é utilizada no método das classes, ou seja, a necessidade de modelar a ampla região de tamanho de gotas é mantida independentemente de qual tipo de distribuição de tamanho de gotas for considerado como variáveis de resposta e explanatória durante o processo de regressão da distância ortogonal.

A tabela 8.6 apresenta a escala de Kolmogorov de todos os casos que possuem dados experimentais e o volume correspondente a escala de Kolmogorov em cada caso, considerando que as partículas são esféricas, e utilizando o valor de ϵ calculado conforme a equação 7.9.

Inicialmente, considerando a distribuição numérica de tamanho de gotas, utilizou-se o modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] assumindo ser possível ajustar o valor do Weber crítico para diminuir o diâmetro crítico do seu modelo e, conseqüentemente, aplicá-lo a faixas de tamanho de partículas inferiores a utilizada no seu desenvolvimento. A figura 8.5 apresenta o resultado dessas simulações para os pontos experimentais pt5g8 e pt2g7. Nota-se que no ponto experimental pt5g8 o resultado simulado possui boa concordância visual com o experimental, mas no ponto experimental pt2g7 os resultados são muito ruins. A maioria do resultados apresenta essa má concordância.

Em seguida, foi utilizado o modelo com duas escalas distintas de tamanho de partículas considerando a equação 8.23, que assume que o critério de transição entre os dois mecanismos de quebra era definido pelo modelo MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] sem modificações no valor do número de Weber crítico, com ajuste no valor no número de Weber crítico e considerando o modelo recomendado por este trabalho. Os dois primeiros modelos comentados não apresentaram resultados melhores que os resultados obtidos com modelo recomendado e, portanto, não são apresentados. O resultado utilizando o modelo recomendado é apresentado na figura 8.6, utilizando como exemplo os pontos experimentais pt4g4 e pt2g2. Observe que nas duas figuras a curva da distribuição numérica de tamanho de gotas simulada é muito menor que a curva experimental. Para facilitar a visualização dessas curvas, a figura 8.7 apresenta o mesmo resultado focando na distribuição numérica de tamanho de gotas simulada na saída do corpo de prova.

É evidente que o resultado obtido na figura 8.6 não é adequado para representar a evolução da distribuição numérica de tamanho de gotas. Portanto, esse resultado,

Tabela 8.6: Escala de Kolmogorov e volume esférico equivalente do vórtice.

Ponto Experimental	$\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ (m)	$v_\eta = \pi\eta^3/6$ (m ³)	Ponto Experimental	$\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ (m)	$v_\eta = \pi\eta^3/6$ (m ³)
pt2g11	$1,48 \times 10^{-5}$	$1,71 \times 10^{-15}$	pt6g11	$1,11 \times 10^{-5}$	$7,24 \times 10^{-16}$
pt2g12	$1,28 \times 10^{-5}$	$1,11 \times 10^{-15}$	pt6g12	$9,73 \times 10^{-6}$	$4,82 \times 10^{-16}$
pt2g13	$1,30 \times 10^{-5}$	$1,16 \times 10^{-15}$	pt6g13	$9,86 \times 10^{-6}$	$5,02 \times 10^{-16}$
pt2g14	$1,28 \times 10^{-5}$	$1,10 \times 10^{-15}$	pt6g15	$9,73 \times 10^{-6}$	$4,83 \times 10^{-16}$
pt2g15	$1,27 \times 10^{-5}$	$1,08 \times 10^{-15}$	pt6g2	$7,55 \times 10^{-6}$	$2,25 \times 10^{-16}$
pt2g2	$9,91 \times 10^{-6}$	$5,10 \times 10^{-16}$	pt6g4	$8,24 \times 10^{-6}$	$2,93 \times 10^{-16}$
pt2g3	$1,08 \times 10^{-5}$	$6,67 \times 10^{-16}$	pt6g5	$8,41 \times 10^{-6}$	$3,12 \times 10^{-16}$
pt2g4	$1,06 \times 10^{-5}$	$6,32 \times 10^{-16}$	pt6g7	$2,00 \times 10^{-5}$	$4,17 \times 10^{-16}$
pt2g5	$1,09 \times 10^{-5}$	$6,78 \times 10^{-16}$	pt6g9	$1,99 \times 10^{-5}$	$4,10 \times 10^{-16}$
pt2g7	$2,64 \times 10^{-5}$	$9,61 \times 10^{-15}$	pt7g10	$2,28 \times 10^{-5}$	$6,21 \times 10^{-16}$
pt2g8	$2,67 \times 10^{-5}$	$9,98 \times 10^{-15}$	pt7g11	$1,29 \times 10^{-5}$	$1,14 \times 10^{-16}$
pt2g9	$2,62 \times 10^{-5}$	$9,37 \times 10^{-15}$	pt7g12	$1,15 \times 10^{-5}$	$7,97 \times 10^{-16}$
pt3g11	$1,33 \times 10^{-5}$	$1,24 \times 10^{-15}$	pt7g15	$1,14 \times 10^{-5}$	$7,82 \times 10^{-16}$
pt3g12	$1,17 \times 10^{-5}$	$8,31 \times 10^{-16}$	pt7g2	$8,92 \times 10^{-6}$	$3,71 \times 10^{-16}$
pt3g13	$1,19 \times 10^{-5}$	$8,83 \times 10^{-16}$	pt7g3	$1,03 \times 10^{-5}$	$5,74 \times 10^{-16}$
pt3g14	$1,18 \times 10^{-5}$	$8,64 \times 10^{-16}$	pt7g4	$9,85 \times 10^{-6}$	$5,00 \times 10^{-16}$
pt3g15	$1,17 \times 10^{-5}$	$8,40 \times 10^{-16}$	pt7g5	$9,96 \times 10^{-6}$	$5,17 \times 10^{-16}$
pt3g3	$8,99 \times 10^{-6}$	$3,80 \times 10^{-16}$	pt7g7	$2,34 \times 10^{-5}$	$6,68 \times 10^{-16}$
pt3g4	$1,00 \times 10^{-5}$	$5,26 \times 10^{-16}$	pt8g10	$2,39 \times 10^{-5}$	$7,14 \times 10^{-16}$
pt3g5	$1,01 \times 10^{-5}$	$5,32 \times 10^{-16}$	pt8g11	$1,34 \times 10^{-5}$	$1,27 \times 10^{-16}$
pt3g7	$2,36 \times 10^{-5}$	$6,89 \times 10^{-15}$	pt8g13	$1,21 \times 10^{-5}$	$9,22 \times 10^{-16}$
pt3g8	$2,40 \times 10^{-5}$	$7,26 \times 10^{-15}$	pt8g14	$1,19 \times 10^{-5}$	$8,75 \times 10^{-16}$
pt3g9	$2,32 \times 10^{-5}$	$6,56 \times 10^{-15}$	pt8g15	$1,19 \times 10^{-5}$	$8,78 \times 10^{-16}$
pt4g11	$1,26 \times 10^{-5}$	$1,04 \times 10^{-15}$	pt8g2	$9,44 \times 10^{-6}$	$4,40 \times 10^{-16}$
pt4g13	$1,14 \times 10^{-5}$	$7,67 \times 10^{-16}$	pt8g3	$1,08 \times 10^{-5}$	$6,67 \times 10^{-16}$
pt4g14	$1,13 \times 10^{-5}$	$7,46 \times 10^{-16}$	pt8g4	$1,04 \times 10^{-5}$	$5,95 \times 10^{-16}$
pt4g3	$8,57 \times 10^{-6}$	$3,30 \times 10^{-16}$	pt8g7	$2,43 \times 10^{-5}$	$7,52 \times 10^{-16}$
pt4g4	$9,46 \times 10^{-6}$	$4,43 \times 10^{-16}$	pt8g9	$2,44 \times 10^{-5}$	$7,58 \times 10^{-16}$
pt4g5	$9,53 \times 10^{-6}$	$4,54 \times 10^{-16}$	pt9g10	$2,65 \times 10^{-5}$	$9,79 \times 10^{-16}$
pt4g7	$2,26 \times 10^{-5}$	$6,01 \times 10^{-15}$	pt9g11	$1,46 \times 10^{-5}$	$1,63 \times 10^{-16}$
pt4g8	$2,34 \times 10^{-5}$	$6,71 \times 10^{-15}$	pt9g12	$1,29 \times 10^{-5}$	$1,13 \times 10^{-16}$
pt4g9	$2,22 \times 10^{-5}$	$5,76 \times 10^{-15}$	pt9g13	$1,31 \times 10^{-5}$	$1,18 \times 10^{-16}$

continua na próxima página

continuação da tabela 8.6

Ponto Experimental	$\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ (m)	$v_\eta = \pi\eta^3/6$ (m ³)	Ponto Experimental	$\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ (m)	$v_\eta = \pi\eta^3/6$ (m ³)
pt5g11	$1,09 \times 10^{-5}$	$6,84 \times 10^{-16}$	pt9g15	$1,29 \times 10^{-5}$	$1,13 \times 10^{-16}$
pt5g12	$9,50 \times 10^{-6}$	$4,49 \times 10^{-16}$	pt9g2	$1,02 \times 10^{-5}$	$5,49 \times 10^{-16}$
pt5g14	$9,60 \times 10^{-6}$	$4,64 \times 10^{-16}$	pt9g3	$1,17 \times 10^{-5}$	$8,41 \times 10^{-16}$
pt5g15	$9,55 \times 10^{-6}$	$4,56 \times 10^{-16}$	pt9g4	$1,12 \times 10^{-5}$	$7,35 \times 10^{-16}$
pt5g7	$1,65 \times 10^{-5}$	$2,35 \times 10^{-15}$	pt9g5	$1,12 \times 10^{-5}$	$7,29 \times 10^{-16}$
pt5g8	$1,97 \times 10^{-5}$	$3,98 \times 10^{-15}$	pt9g7	$2,70 \times 10^{-5}$	$1,03 \times 10^{-14}$
pt5g9	$1,89 \times 10^{-5}$	$3,55 \times 10^{-15}$	pt9g9	$2,66 \times 10^{-5}$	$9,88 \times 10^{-16}$

sugeri a utilização da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, pois a maior parte dos pontos que compõem a distribuição de tamanho de gotas fazem parte da região que é mais importante na distribuição volumétrica de tamanho de gotas do que na distribuição numérica de tamanho de gotas.

Para confirmar a incapacidade do modelo em representar o fenômeno, outorgou-se um valor específico para o parâmetro de quebra de forma, tal que o pico da distribuição após o acidente ficasse bem representado. Esse valor de parâmetro foi da ordem de $10^2 - 10^4$ e faz com que a função objetivo não seja mínima, ou seja, não é um ponto de convergência do problema de estimação de parâmetros. A figura 8.8 apresenta exemplos desses resultados que permitem compreender o porque do modelo não ser capaz representar o fenômeno adequadamente utilizando a distribuição numérica de tamanho de gotas. Nos gráficos dessa figuras, percebe-se que para representar o pico, todos os pontos da distribuição compostos pelas classes de maior tamanho não são reproduzidos adequadamente. Portanto, entre falhar ao ajustar as 8-10 classes que representam o pico e falhar ao representar as 15-25 classes que representam o restante de curva, o modelo opta por tentar representar essas últimas.

Essa observação será ratificada com os resultados das estimações de parâmetros usando as distribuições volumétricas de tamanho de gotas, pois o modelo foi capaz

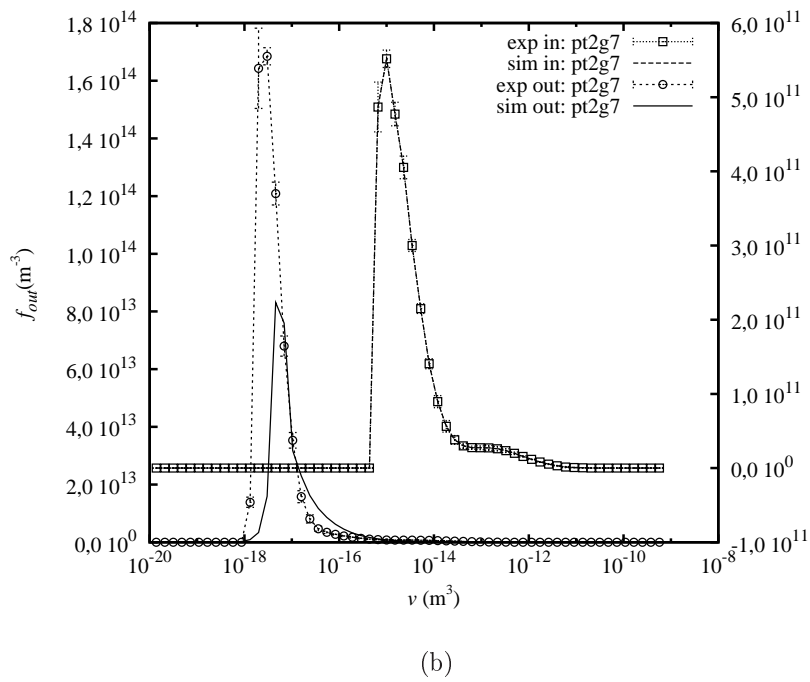
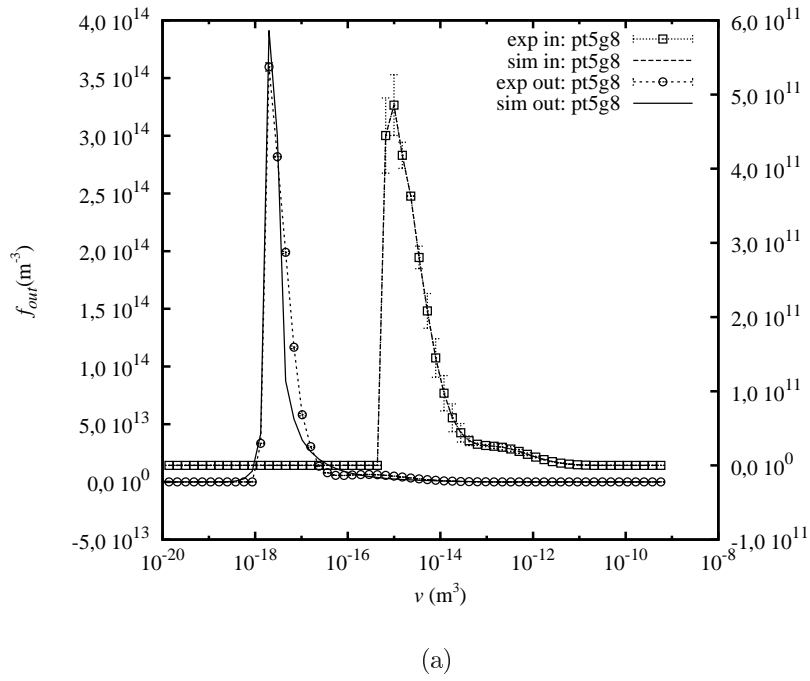
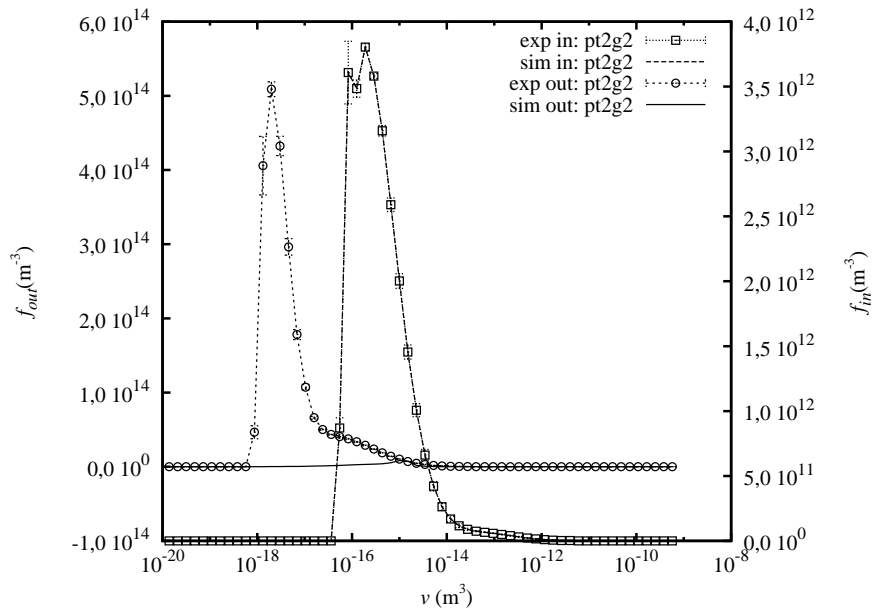
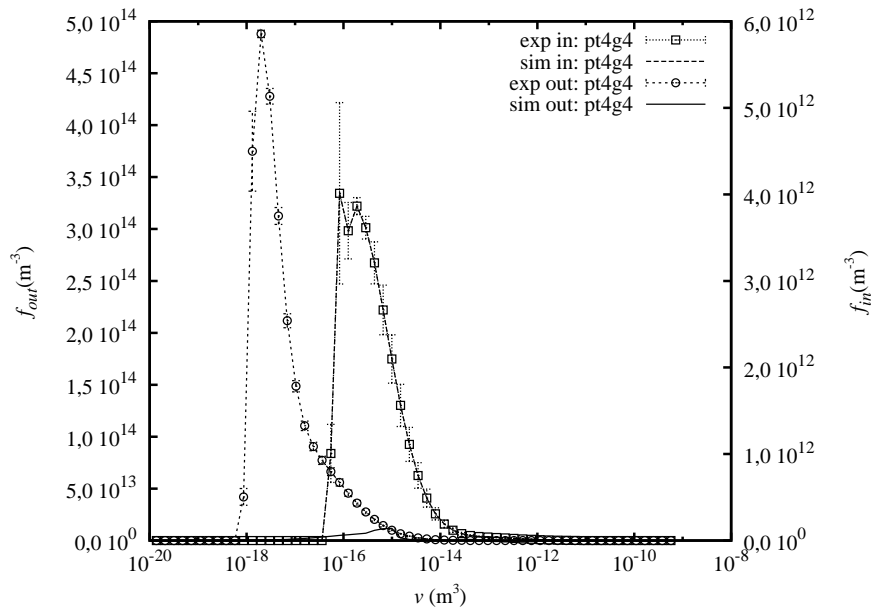


Figura 8.5: Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128, 129] e assumindo que o número de Weber crítico é um parâmetro do sistema. Pontos experimentais (a) pt5g8 e (b) pt2g7. A otimização dos parâmetros considera apenas a vazão baixa, concentração alta. Os parâmetros determinados são $(1,4 \pm 0,2) \times 10^{-3}$ para o parâmetro multiplicativo da frequência de quebra e $(5,9 \pm 1,4) \times 10^{-3}$ para o número de Weber crítico.

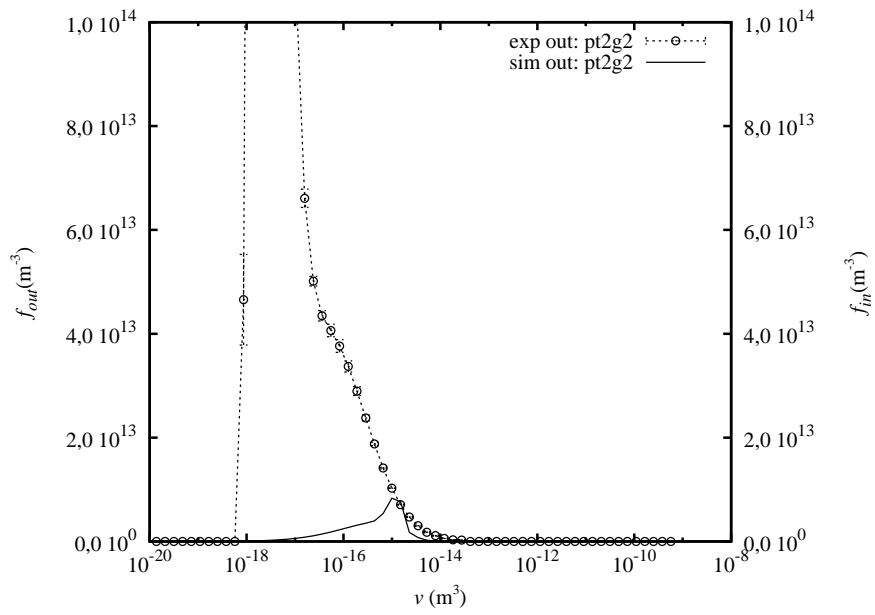


(a)

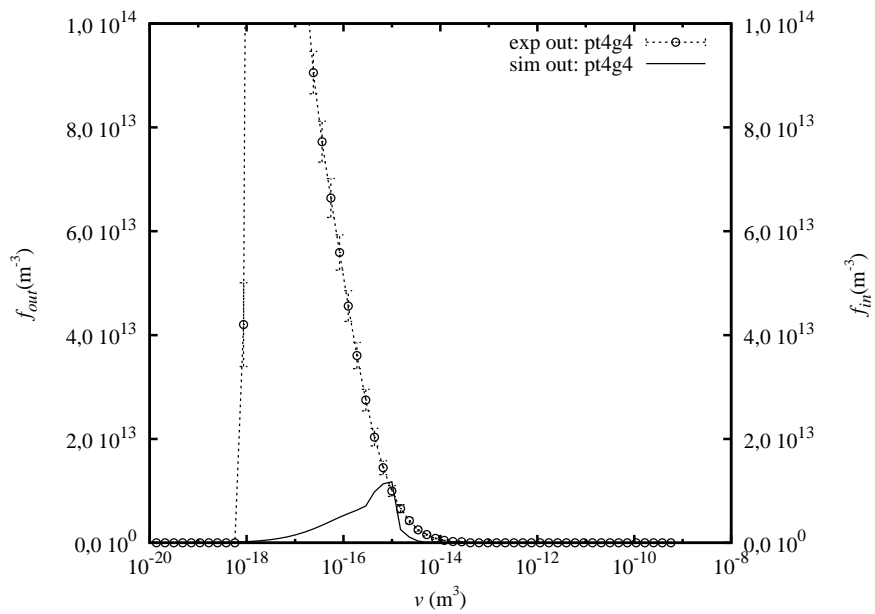


(b)

Figura 8.6: Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo recomendado considerando a distribuição numérica de tamanho de partículas. Pontos experimentais (a) pt2g2 e (b) pt4g4. Os parâmetros não possuem significado estatístico. Simulação considera apenas vazão alta, concentração alta.

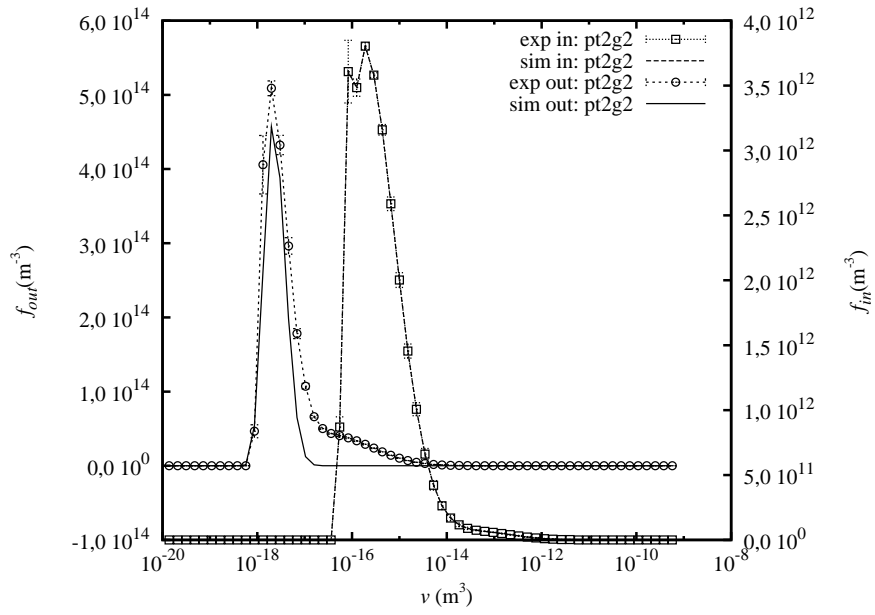


(a)

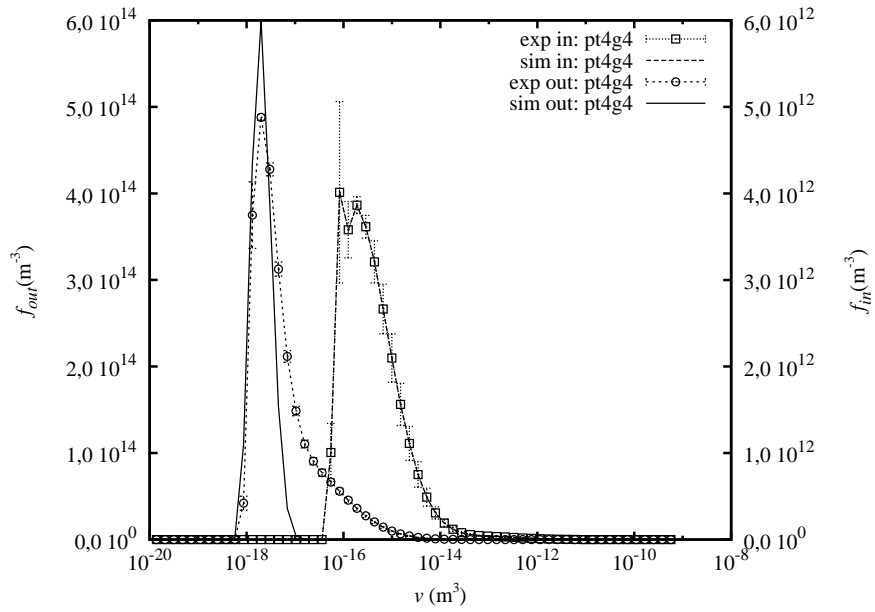


(b)

Figura 8.7: Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo recomendado considerando a distribuição numérica de tamanho de partículas. Pontos experimentais (a) pt2g2 e (b) pt4g4. Aproximação em torno do resultado simulado na saída.



(a)



(b)

Figura 8.8: Resultados de ajuste utilizando apenas o modelo recomendado considerando a distribuição numérica de tamanho de partículas utilizando um valor de parâmetro longe do ponto que minimiza a função objetivo. Pontos experimentais (a) pt2g2 e (b) pt4g4.

de representar adequadamente a região principal destas distribuições. Porém, ele foi incapaz de representar as menores classes não nulas das distribuições.

De forma complementar, ratifica-se que não foi possível obter qualquer tipo de resultado utilizando todo o conjunto de dados disponível, ou seja, considerando simultaneamente todas as vazões e concentrações. Outros modelos de distribuição de tamanho de partículas filhas foram considerados como a quebra binária uniforme e o modelo de HSIA e TAVLARIDES [117], já que o resultado da figura 8.8 induz a crer que esse possa ser o problema. Porém, nenhum resultado obtido no ponto mínimo da função objetivo foi muito diferente do determinado na figura 8.6. Pequenas diferenças foram observadas, mas no aspecto geral das distribuições, não houve modificações. Portanto, não há razão em detalhar estas pequenas diferenças sendo o resultado qualitativo tão discordante do resultado de interesse.

8.4 Análise e simulação da evolução da distribuição da densidade volumétrica de tamanho de gotas

No primeiro momento, o mesmo método de análise utilizado na distribuição numérica de tamanho de gotas foi utilizado para caracterizar os dados experimentais obtidos para distribuição volumétrica de tamanho de gotas. Entretanto, foi observado que a reprodutibilidade das distribuições volumétricas de tamanho de gotas foi mais afetada pelas condições operacionais do que as distribuições numéricas de tamanho de gotas.

É possível obter resultados de estimação de parâmetros sob hipótese de que nenhuma das variáveis explanatórias possui erro. A figura 8.9 apresenta alguns exemplos desses resultados. Note a grande margem de erro associada as distribuições volumétricas de tamanho de gotas, principalmente na entrada do corpo de prova.

Quando todos os pontos experimentais com maior variabilidade nos resultados

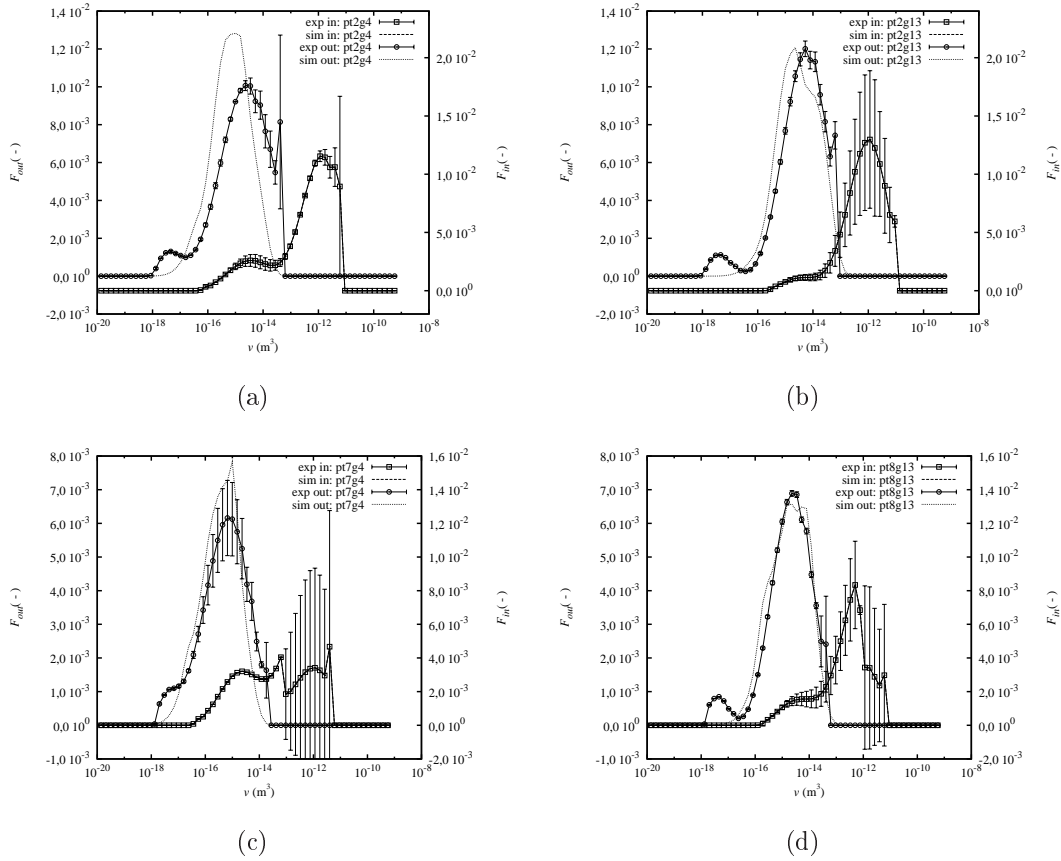


Figura 8.9: Resultados de estimação de parâmetros utilizando o modelo recomendado, a distribuição volumétrica de tamanho de gotas determinada pelo “método em cruz” sem considerar os erros nas variáveis explanatórias e usando todos os pontos experimentais disponíveis para essa análise. Pontos experimentais (a) pt2g4, (b) pt2g13, (c) pt7g4 e (d) pt8g13. Parâmetros determinados, $C_{fc} = (2,8 \pm 1,4) \times 10^{-3}$, $C_{b1} = (9,2 \pm 5,2) \times 10^{-3}$ e $\zeta = 52 \pm 30$

são removidos, o que, basicamente, equivale a remover **todos** os pontos experimentais de baixa concentração de água, a quantidade de pontos experimentais remanescentes é insuficiente para a estimação dos parâmetros considerando os erros nas variáveis explanatórias.

Sendo assim, a alternativa encontrada foi atribuir o erro do instrumento, avaliado em 10 % aos valores da densidade volumétrica de partículas em todas as classes de gotas nas distribuições volumétricas experimentais abandonando a determinação do erro através de réplicas.

Há indícios de que a formação da emulsão não permaneceu estável durante a execução dos experimentos, apesar das variáveis de controle terem permanecido estáveis durante a execução. Até mesmo o óleo em si sofreu efeito de envelhecimento que afetou as suas propriedades (viscosidade, densidade e tensão superficial). Creditam-se as diferenças observadas entre as réplicas a questões associadas à formação da emulsão. Dessa forma, é razoável supor que as curvas de distribuição de tamanho de partículas obtidas são bons dados experimentais, embora não sejam réplicas.

As distribuições volumétricas de tamanho de gotas obtidas após o acidente possuem menor variabilidade. Porém optou-se pelo uso da mesma estimativa de 10 % de erro no valor de cada classe uma vez que existem alguns pontos de algumas curvas com erros localizados muito altos que dificultariam a solução do problema de estimação, já que não há erros correspondentes nas distribuições da entrada.

O valor de erro 10 % no valor de cada classe da distribuição foi selecionado por ser o valor mínimo do erro do equipamento utilizado na análise experimental. Apesar disso, tentou-se obter soluções considerando um erro de 20 %, mas não foi possível obter valores de parâmetros estatisticamente significativos neste caso, pois o erro é muito alto nos pontos centrais das curvas de distribuição, o que prejudica a qualidade geral do ajuste.

Essa abordagem permite considerar 78 pontos experimentais. Apenas os pontos

experimentais de menor abertura da gaveta e maior vazão (pt5g2, pt5g3 e pt5g4) possuem erros significativos na distribuição de entrada que inviabilizam o seu uso. Erros grosseiros na distribuição de tamanhos de gotas após o acidente nos pontos pt8g12 e pt9g14 também inviabilizam o seu uso. Esses pontos já não eram considerados na análise anterior. Os brancos também não foram considerados, pois além da variabilidade desses resultados ser muito pior do que dos demais pontos, não há acidente, o que implicaria em determinar um novo volume de controle para o caso, e não há turbulência, portanto a forma de calcular a taxa específica de dissipação de energia cinética turbulenta não pode ser a mesma que foi utilizada nos demais pontos. Se ignorar essas questões, obtém-se resultados distorcidos em todo o conjunto de dados.

Os parâmetros determinados para os ajustes considerando que nenhuma variável explanatória possui erro e que todas as variáveis explanatórias possuem erro é apresentado na tabela 8.7. O erro no valor dos parâmetros é considerando o intervalo de confiança de 95 %.

Tabela 8.7: Parâmetros estimados considerando o modelo recomendado.

Parâmetros	Sem considerar os erros nas variáveis explanatórias	Considerando os erros nas variáveis explanatórias
C_{fc}	$(1,00 \pm 0,05) \times 10^{-2}$	$(1,05 \pm 0,24) \times 10^{-2}$
C_{b1}	$(0,98 \pm 0,06) \times 10^{-2}$	$(1,06 \pm 0,80) \times 10^{-2}$
ς	$26,0 \pm 0,9$	$26,9 \pm 9,4$

Desses resultados percebe-se que, quando se consideram os erros nas variáveis explanatórias os erros nos valores dos parâmetros aumentam significativamente, mas os valores médios não sofrem grandes alterações. Compreende-se, assim, que quando o erro nas variáveis explanatórias é muito grande, esses parâmetros passam a não ter significado estatístico. Isso fica claro ao se observar a grande margem de erro do parâmetro C_{b1} quando se considera o erro das variáveis explanatórias. Se essas variáveis tiverem um erro um pouco maior, esse parâmetro perderá o significado estatístico.

Como registrado na revisão bibliográfica (figura 5.11) existe sentido físico para a quebra de um gota produzindo até 30 partículas filhas. Nota-se, portanto, que a faixa de valores do parâmetro ζ é bem razoável.

Outra justificativa para esse valor é que todos os modelos de distribuição de partículas filhas considerando a quebra binária ou ternária testados não produziram resultados adequados.

Há outras hipóteses pertinentes à avaliação do número de filhas na quebra. Por exemplo, a hipótese de que o tempo de residência das partículas seja pequeno demais para promover sucessivas quebras com um número menor de partículas filhas em cada evento. De fato um tempo de residência de 2 a 8 ms é muito pequeno para a quebra de gotas, conforme dados da literatura [111] a quebra de gotas requer um tempo muito maior para ocorrer. Nesse caso, não é apenas o volume de controle em si que teria que ser repensado, mas a possibilidade de que a partícula tenha sido mantida dentro do volume do acidente por mais tempo devido às características do escoamento e da geometria (devido as arestas na região do acidente). Porém, nada disso pode ser verificado uma vez que não é possível observar o que acontece dentro do corpo de prova devido às suas pequenas dimensões e à coloração do petróleo.

O ideal para resolver esse tipo de questão é estudar a quebra de gotas em ambiente controlado, com fluidos escolhidos para essa finalidade, a fim de que seja possível observar o fenômeno para a sua adequada interpretação.

A comparação dos resultados simulados com os parâmetros ajustados com os resultados experimentais pode ser visualizada no anexo A para todos os 78 pontos experimentais. Esse anexo contém os resultados das simulações com os parâmetros obtidos considerando ou não os erros nas variáveis explanatórias. Apenas alguns casos selecionados foram adicionados ao corpo do texto para a análise das características da solução obtida.

A figura 8.10 apresenta o resultado do ponto experimental no qual o resultado

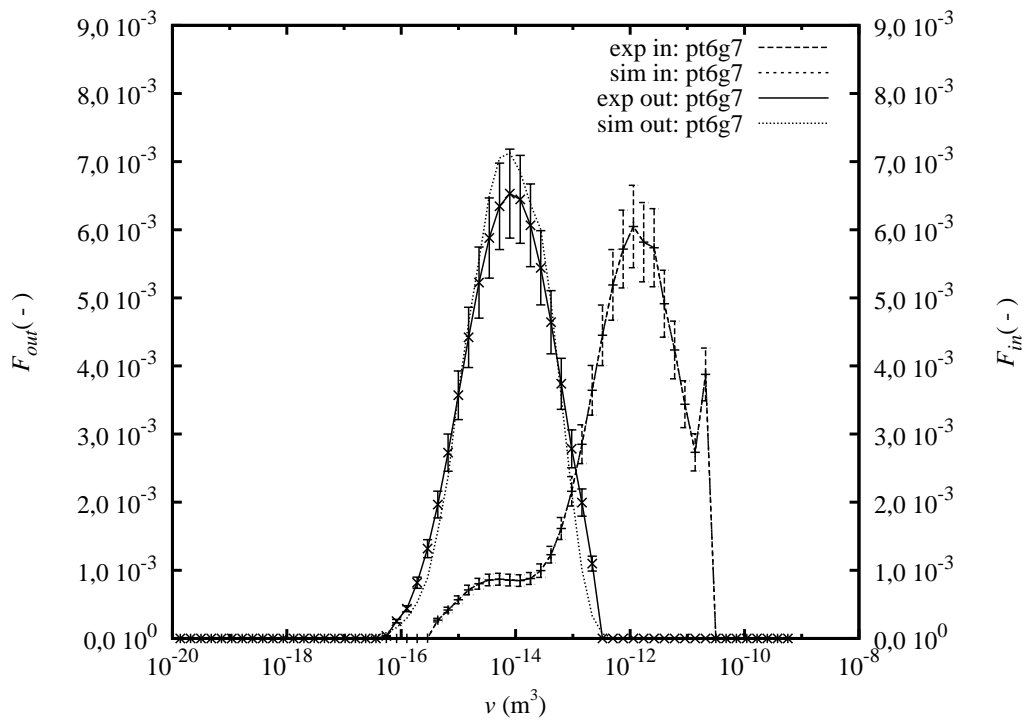
simulado e o resultado experimental possui excelente concordância. Essa mesma qualidade de concordância é observada em todos os pontos de baixa concentração e baixa vazão.

A figura 8.11 apresenta o tipo de resultado mais usual. Pode-se perceber que a comparação entre os resultados experimentais e o resultado simulado é excelente na região mais significativa da distribuição, mas o resultado simulado não é capaz de simular adequadamente a formação das pequenas partículas observadas na curva experimental após o acidente.

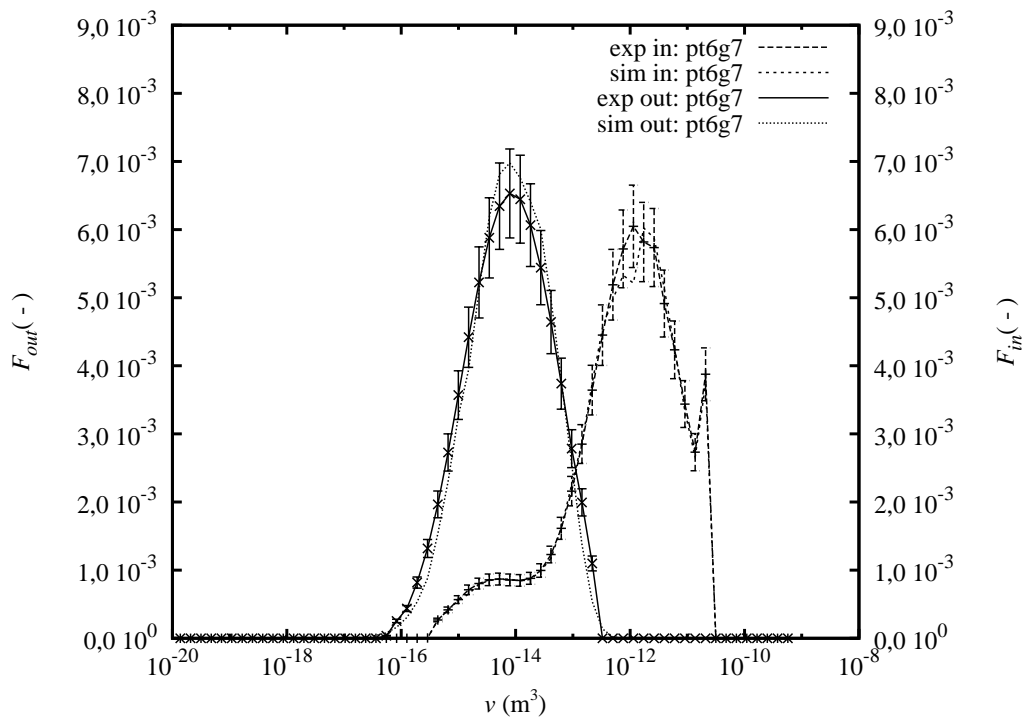
Não há uma explicação clara para a origem da característica bimodal apresentada pelas distribuições. Pode-se supor que existe uma quebra adicional associada aos vórtices existentes junto as arestas do acidente que afete de forma diferente as menores gotas. Também pode-se supor que exista uma quebra das gotas provocada pela interação destas com as paredes do acidente. Entretanto, não se pode esquecer que a modelagem inadequada da distribuição de tamanho das partículas filhas na quebra possa ser a verdadeira origem da discordância entre os resultados experimentais e simulados.

Uma última alternativa é que o procedimento experimental possua algum problema que não foi detectado. Por exemplo, a formação de microbolhas. Essa formação foi identificada em alguns pontos experimentais e por causa dela esses pontos foram descartados pelos experimentalistas. As bolhas surgem do procedimento de amostragem e análise com o analisador de partículas da Malvern [139, 140].

Essas pequenas partículas, que não possuem grande importância na distribuição volumétrica de tamanho de gotas, são a faixa de tamanho mais significativa na distribuição numérica de tamanho de gotas. Isso permite concluir objetivamente que a existência destas pequenas partículas em alguns pontos experimentais e a incapacidade do modelo para simular a característica bimodal na distribuição após o acidente é a real causa de não ter sido possível ajustar a distribuição numérica de tamanho de gotas.

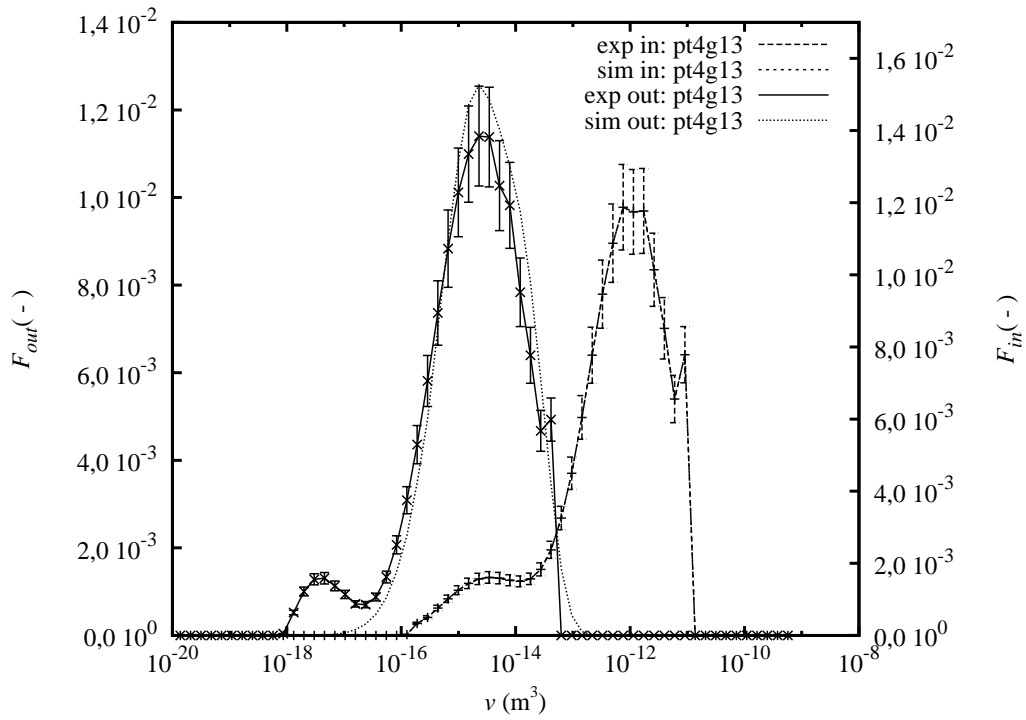


(a)

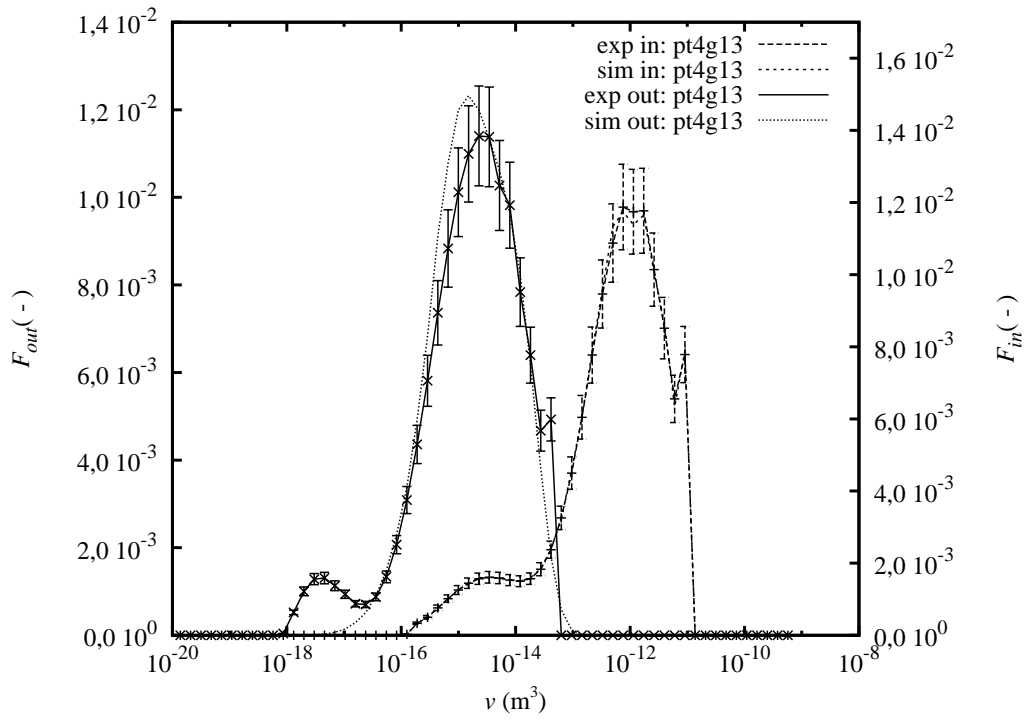


(b)

Figura 8.10: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão baixa, concentração baixa, ponto experimental, pt6g7.



(a)



(b)

Figura 8.11: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão média, concentração alta, ponto experimental, pt4g13.

Mesmo quando o resultado experimental da distribuição volumétrica de tamanho de gotas antes do acidente apresenta uma forma mais complexa, o resultado simulado é bom. As figuras 8.12 e 8.13 exemplificam dois casos distintos com essas características.

O piores resultados são exemplificados pela figura 8.14. Alguns poucos pontos de vazão alta, concentração alta apresentaram esse comportamento.

8.5 Predição dos diâmetros médios da distribuição de gotas

Diversos diâmetros médios foram calculados a partir dos resultados simulados para a distribuição volumétrica de tamanho de gotas, $D_{p,q}$, e para a distribuição numérica de tamanho de gotas, $d_{p,q}$, usando o modelo recomendado e valores ajustados dos parâmetros quando os erros nas variáveis explanatórias foram considerados no ajuste.

De forma geral, os diâmetros médios são definidos pelas seguintes equações:

$$d_{p,q} = \left(\frac{\int_0^\infty d^p \hat{f}(v) dv}{\int_0^\infty d^q \hat{f}(v) dv} \right)^{\frac{1}{p-q}} \quad (8.24)$$

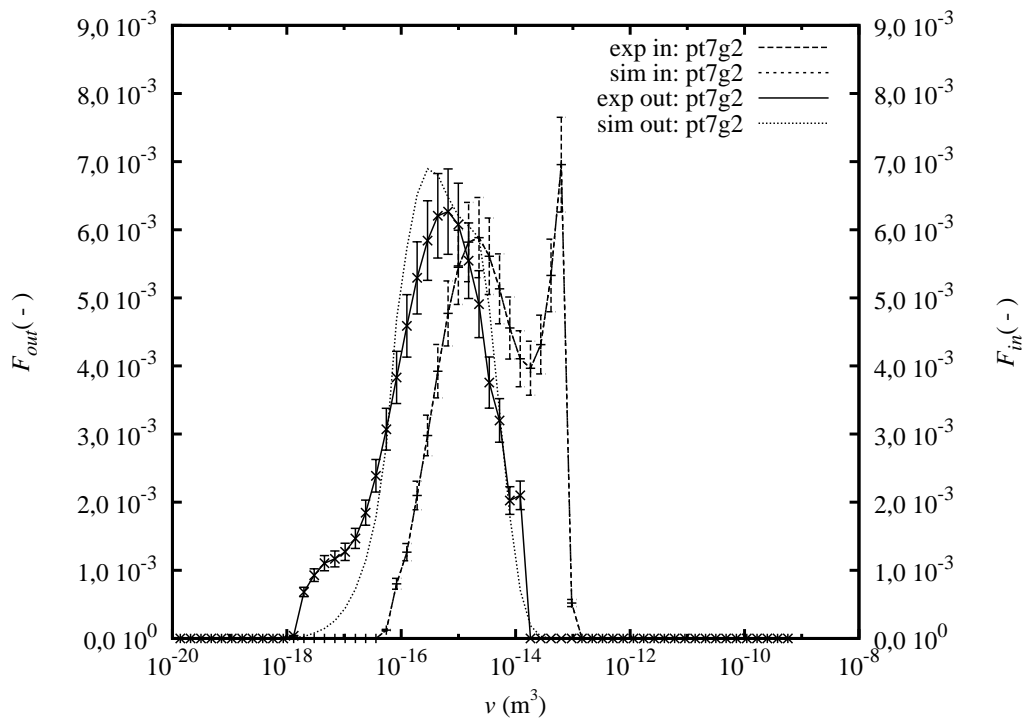
e

$$D_{p,q} = \left(\frac{\int_0^\infty d^p \hat{F}(v) dv}{\int_0^\infty d^q \hat{F}(v) dv} \right)^{\frac{1}{p-q}} \quad (8.25)$$

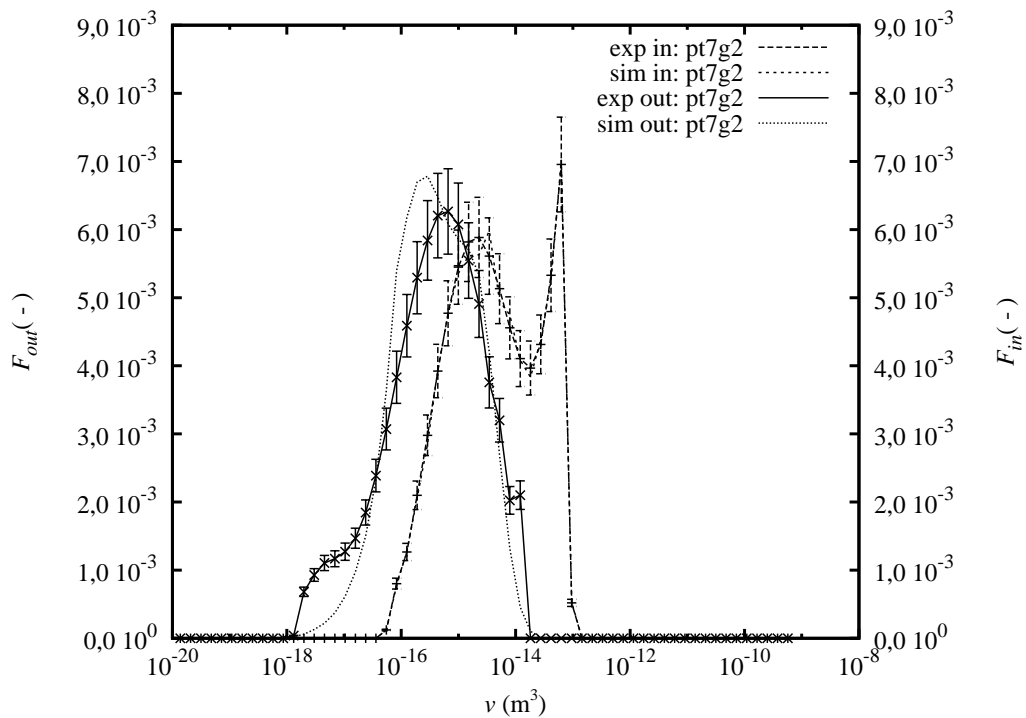
como $\hat{F}(v) = (v / \langle v \rangle) \hat{f}(v)$, obtém-se que $D_{p,q} = d_{p+3,q+3}$.

Aplicando a equação 8.25 para determinar os diâmetros médios D_{10} , D_{20} , D_{30} , D_{32} e D_{43} , obtém-se:

$$D_{10} = \int_0^\infty d \hat{F}_i(v) dv = \sum_{i=1}^n d_i \hat{F}_i(v_i) \quad (8.26)$$

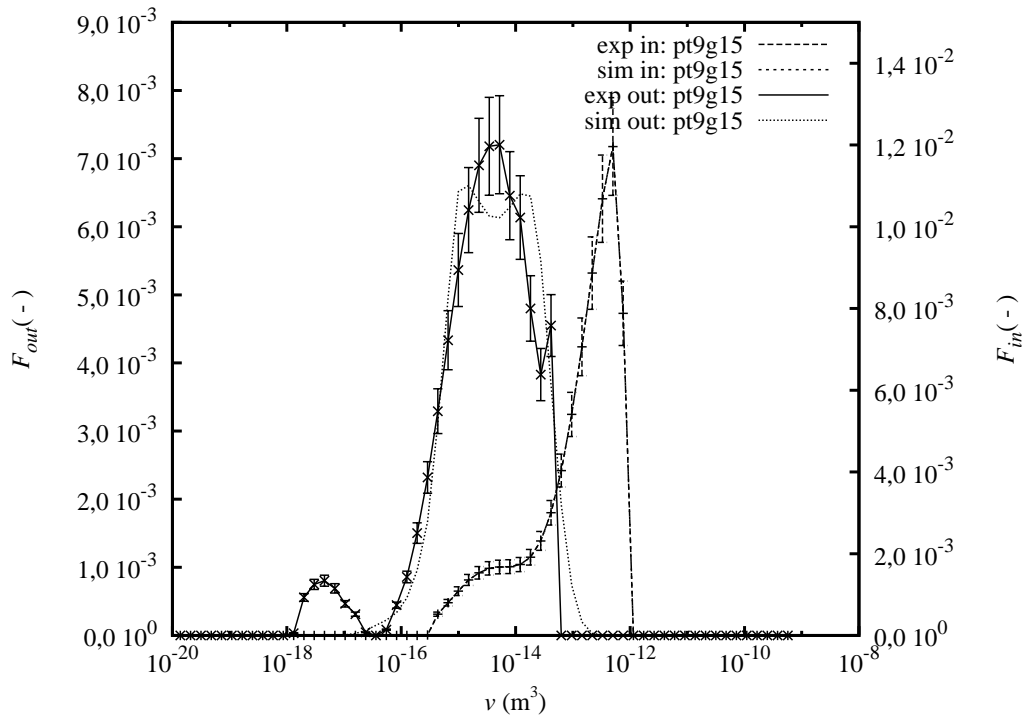


(a)

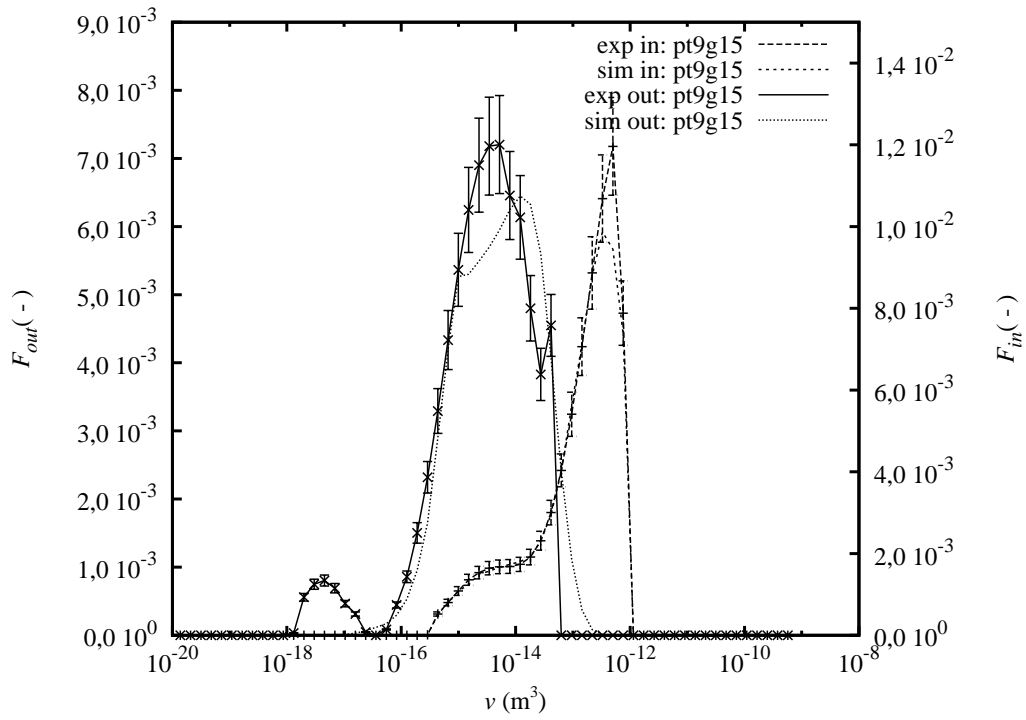


(b)

Figura 8.12: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão alta, concentração baixa, ponto experimental, pt7g2.

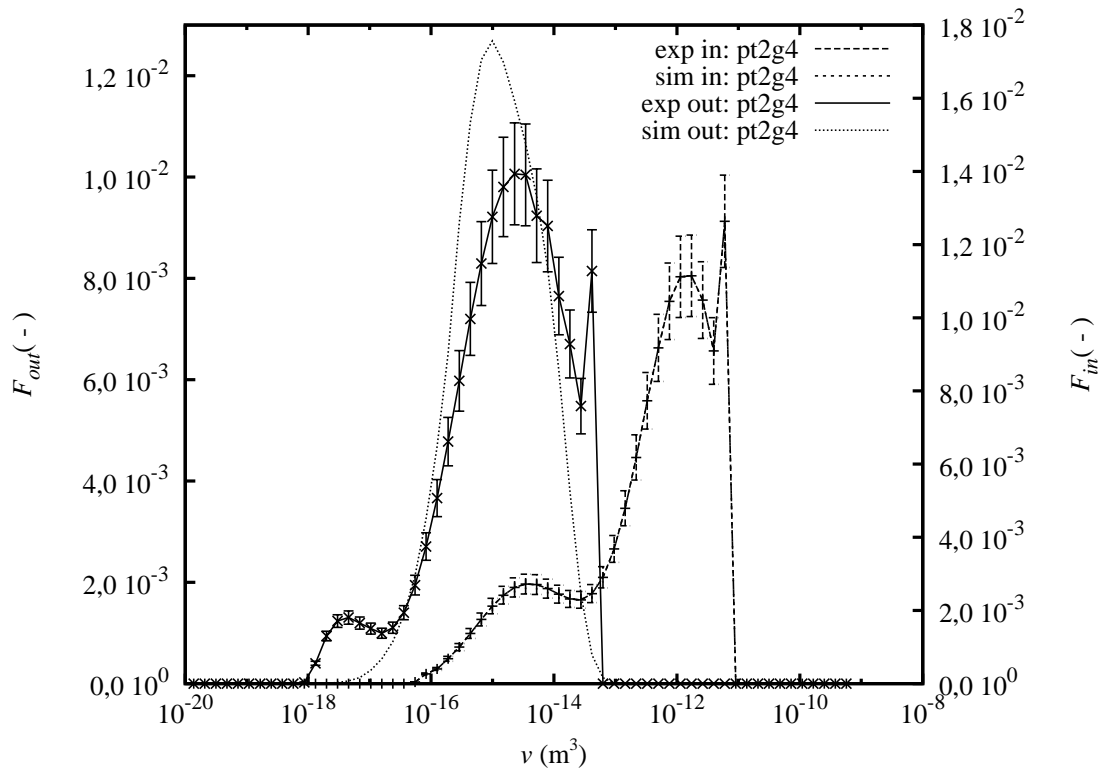


(a)

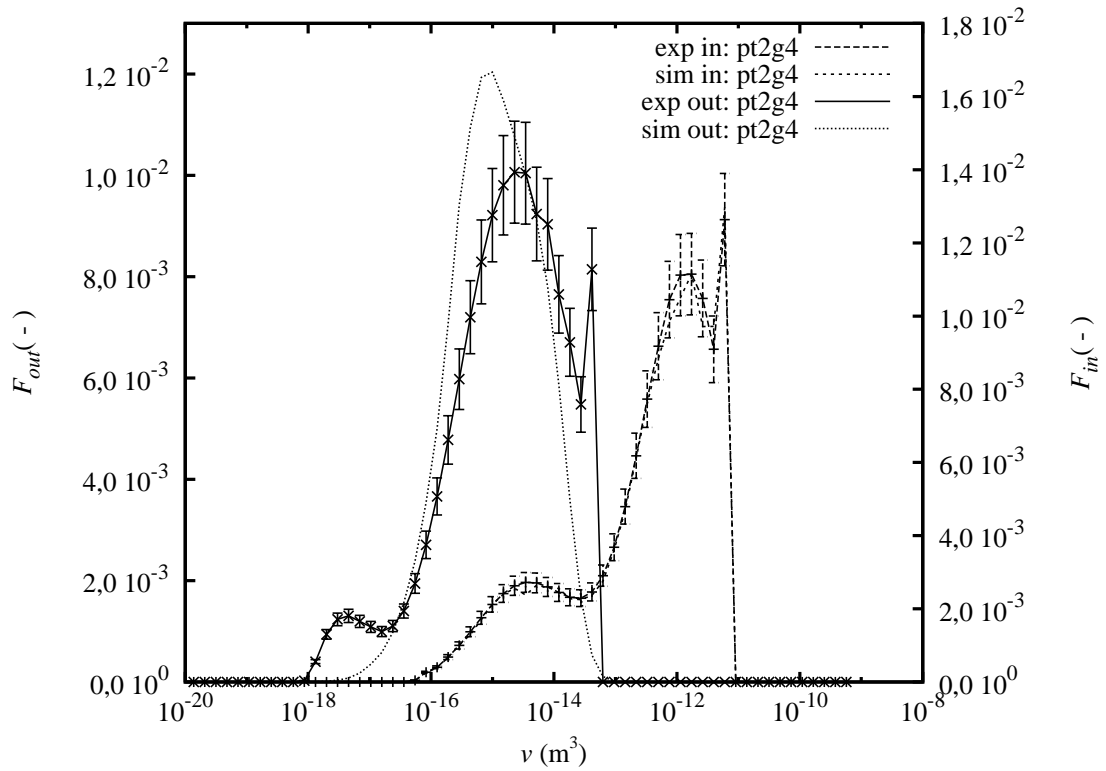


(b)

Figura 8.13: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão alta, concentração baixa, ponto experimental, pt9g15.



(a)



(b)

Figura 8.14: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas (a) sem considerar erros nas variáveis explanatórias e (b) considerando estes erros. Condição de vazão alta, concentração alta, ponto experimental, pt2g4.

$$D_{20}^2 = \int_0^{\infty} d^2 \hat{F}_i(v) dv = \sum_{i=1}^n d_i^2 \hat{F}_i(v_i) \quad (8.27)$$

$$D_{30}^3 = \int_0^{\infty} d^3 \hat{F}(v) dv = \sum_{i=1}^n d_i^3 \hat{F}_i(v_i) \quad (8.28)$$

$$D_{32} = \frac{\int_0^{\infty} d^3 \hat{F}(v) dv}{\int_0^{\infty} d^2 \hat{F}(v) dv} = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^3 \hat{F}_i(v_i)}{\sum_{i=1}^n d_i^2 \hat{F}_i(v_i)} \quad (8.29)$$

$$D_{43} = \frac{\int_0^{\infty} d^4 \hat{F}(v) dv}{\int_0^{\infty} d^3 \hat{F}(v) dv} = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^4 \hat{F}_i(v_i)}{\sum_{i=1}^n d_i^3 \hat{F}_i(v_i)} \quad (8.30)$$

A discretização em classes dada considerando que:

$$\hat{F}(v) = \sum_{i=1}^n \hat{F}_i \delta(v - v_i) \quad (8.31)$$

que é o resultado da simulação pelo método das classes.

Aplicando a equação 8.24 para determinar os diâmetros médios d_{10} , d_{20} , d_{30} , d_{32} e d_{43} , obtém-se

$$d_{10} = \int_0^{\infty} d \hat{F}_i(v) dv = \sum_{i=1}^n d_i \hat{F}_i(v_i) \quad (8.32)$$

$$d_{20}^2 = \int_0^{\infty} d^2 \hat{f}_i(v) dv = \sum_{i=1}^n d_i^2 \hat{f}_i(v_i) \quad (8.33)$$

$$d_{30}^3 = \int_0^{\infty} d^3 \hat{f}(v) dv = \sum_{i=1}^n d_i^3 \hat{f}_i(v_i) \quad (8.34)$$

$$d_{32} = \frac{\int_0^{\infty} d^3 \hat{f}(v) dv}{\int_0^{\infty} d^2 \hat{f}(v) dv} = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^3 \hat{f}_i(v_i)}{\sum_{i=1}^n d_i^2 \hat{f}_i(v_i)} \quad (8.35)$$

$$d_{43} = \frac{\int_0^\infty d^4 \hat{f}(v) dv}{\int_0^\infty d^3 \hat{f}(v) dv} = \frac{\sum_{i=1}^n d_i^4 \hat{f}_i(v_i)}{\sum_{i=1}^n d_i^3 \hat{f}_i(v_i)} \quad (8.36)$$

Note que $d_{43} = D_{10}$, pela relação $D_{p,q} = d_{p+3,q+3}$.

A tabela 8.8 apresenta a média dos erros relativos entre os valores experimentais e simulados, \bar{e} , a média dos módulos dos erros relativos, $\overline{|e|}$ e o máximo da magnitude do erro relativo, e_{\max} , dos diâmetros médios D_{pq} para a emulsão após o acidente. A análise dos diâmetros médios antes do acidente não foi adicionada nessa tabela porque não há grande variabilidade dos resultados nessa curva.

Tabela 8.8: Análise dos diâmetros característicos D_{pq} após o acidente.

D_{pq}	\bar{e}	$\overline{ e }$	e_{\max}
D_{10}	-0,01 %	8,1 %	25,6 %
D_{20}	-1,69 %	9,3 %	29,6 %
D_{30}	-1,95 %	10,3 %	31,4 %
D_{32}	-2,37 %	12,6 %	35,3 %
D_{43}	-0,03 %	14,0 %	39,5 %

Da tabela 8.8 percebe-se que os valores de $\overline{|e|}$ são muito bons e que os valores calculados não são tendenciosos porque \bar{e} é próximo de zero, sendo bem inferior a $\overline{|e|}$. Mesmo o valor de e_{\max} é razoável.

A tabela 8.9 apresenta os valores de \bar{e} , $\overline{|e|}$ e e_{\max} para os diâmetros médios d_{pq} obtidos após o acidente. A análise destes diâmetros médios antes do acidente não foi adicionada nessa tabela porque não há grande variabilidade dos resultados nessa curva.

A tabela 8.9 mostra que os diâmetros médios da distribuição numérica de tamanho de gotas não são bons, todos com erros elevados e tendenciosos, exceto para o d_{43} . Mesmo o diâmetro d_{32} , que apresenta bom erro médio, é estimado de forma tendenciosa o que, portanto, não é uma estimativa muito boa.

Tabela 8.9: Análise dos diâmetros característicos d_{pq} após o acidente.

d_{pq}	\bar{e}	$ \bar{e} $	$ e_{\max} $
d_{10}	189 %	189 %	780 %
d_{20}	142 %	142 %	546 %
d_{30}	88 %	88 %	288 %
d_{32}	21,3 %	21,3 %	50,6 %
d_{43}	-0,01 %	8,1 %	25,6 %

A predição ruim dos valores de d_{pq} está associada ao fato de que foi a distribuição volumétrica de tamanho de gotas que foi utilizada na função objetivo da regressão da distância ortogonal para a estimação de parâmetros.

8.6 Outros modelos avaliados

Essa seção aborda as alternativas de modelagem da evolução da distribuição volumétrica de tamanho de gotas. Alguns desses modelos também foram testados na modelagem da evolução da distribuição numérica de tamanho de gotas, mas os resultados obtidos não foram significativos para receberem menção adicional nesse texto.

8.6.1 Modelagem da frequência de colisão da coalescência

O modelo de frequência de colisão da coalescência, partindo do que já existe, é simples e permite poucas indagações. O modelo de frequência e a definição da área de colisão aplicados são exatamente os mesmos usados anteriormente e são reproduzidos abaixo:

$$\theta_{ij} = C_{fc} S_{ij} u_r \quad (8.37)$$

$$S_{ij} = \frac{\pi (d_i + d_j)^2}{4} \quad (8.38)$$

A única diferença possível ocorre na forma funcional utilizada para determinar a velocidade característica.

Um dos outros modelos avaliado é dado por

$$u_r = \left(u_{d_i}^2 + u_{d_j}^2 \right)^{1/2} = \sqrt{\epsilon/\nu} (d_i^2 + d_j^2)^{1/2} \quad (8.39)$$

Essa forma alternativa (equação 8.39) induziu um aumento do valor do erro dos parâmetros de aproximadamente 2 vezes. Essas comparações foram efetuadas sem levar em consideração os erros nas variáveis explanatórias. Não foi possível obter parâmetros com significado estatístico quando a estimação de parâmetros considerou os erros nas variáveis explanatórias. Portanto, esse modelo não é uma opção viável.

A rigor, a forma recomendada nesse trabalho para a velocidade relativa é também a forma desenvolvida pelos autores do modelo [77].

Houve uma etapa do desenvolvimento dos modelos que introduziu a existência de dois mecanismos de coalescência. Nesse caso, utilizou-se a seguinte modelagem para a velocidade de flutuação da partícula de tamanho d_i , u_{d_i} :

$$u_{d_i} = \begin{cases} \sqrt{\epsilon/\nu} d_i & \text{se } d_i < \eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4} \\ (\epsilon d_i)^{1/3} & \text{se } d_i > \eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4} \end{cases} \quad (8.40)$$

considerando sempre que

$$u_r = \frac{u_{d_i} + u_{d_j}}{2} \quad (8.41)$$

Esse tipo de simulação não apresentou resultado significativo e será melhor apresentado quando as alternativas para o modelo de quebra que forem utilizadas.

8.6.2 Modelagem da eficiência de coalescência

Foram testados quatro modelos alternativos de eficiência de coalescência, cada um representando um tipo de interface: partícula com interface rígida, partícula com interface deformável e imóvel, partícula com interface deformável e parcialmente móvel. Todos os modelos foram mencionados na revisão sobre os modelos de eficiência de coalescência.

O modelo de eficiência de coalescência para a partícula com interface rígida,

$$\eta = \exp \left[-C_{eff} \frac{1}{4} \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \right] \quad (8.42)$$

onde

$$h_f \sim \left(\frac{Ar}{8\pi\sigma} \right)^{1/3} \quad (8.43)$$

é praticamente constante nas condições dos dados experimentais que foram utilizados de forma que é mais adequado assumir que a eficiência é constante e integrá-la no parâmetro multiplicativo, tal qual foi feito.

O modelo de eficiência de coalescência para a partícula com interface deformável e imóvel,

$$\eta = \exp \left(-C_{eff} \frac{8}{9} Ca^2 r^2 \frac{1}{h_f^2} \right) \quad (8.44)$$

apresentou bons resultados. Qualquer figura obtida pelo modelo recomendado por ser confundida com o resultado obtido por esse modelo, pois as diferenças são muito pequenas para serem percebidas em gráficos. Os parâmetros determinados nestas condições foram: $C_{b1} = (0,97 \pm 0,5) \times 10^{-2}$, $C_{eff} = (1,65 \pm 0,76) \times 10^{-2}$, $C_{b1} = (1,02 \pm 0,6) \times 10^{-2}$ e $\varsigma = 33 \pm 10$. Comparando esses valores com a tabela 8.7 percebe-se que o erro do parâmetro multiplicativo de coalescência é mais alto, que o erro no número de partículas filhas é praticamente o mesmo e que o erro no parâmetro multiplicativo de quebra é menor. Porém, **adicionou-se um parâmetro ao conjunto**. Na prática, o modelo não foi selecionado porque a forma recomendada para modelar a eficiência

é mais simples, remove um parâmetro do sistema e visualmente funciona tão bem quanto. A diminuição do valor da função objetivo em cerca de 0,3 % não deve ser visto como algo positivo, devido a baixo valor da diminuição comparando com o acréscimo de um parâmetro.

O modelo de eficiência de coalescência considerando partícula com interface deformável e parcialmente móvel,

$$\eta = \exp \left(-C_{eff} \frac{\sqrt{3}}{4} \left(\frac{\mu_d}{\mu} \right) Ca^{3/2} r \frac{1}{h_f} \right) \quad (8.45)$$

introduziu desvios na modelagem do problema, afetando significativamente o valor dos erros dos parâmetros. Mesmo sem considerar os erros nas variáveis explanatórias, os valores do erros dos parâmetro são maiores que os valores dos parâmetros, exceto para o número de partículas filhas. Ao tentar estimar os parâmetros considerando os erros nas variáveis explanatórias, o programa descarta o ajuste do valor dos parâmetros por considerar que eles não afetam o resultado das simulações.

Enquanto ainda se considerava a possibilidade de existir um diâmetro de transição entre diferentes mecanismos nos sistema, optou-se por tentar utilizar o modelo de eficiência de coalescência de partículas com interface deformável e parcialmente móvel, que foi recomendado por CHESTERS [5] para emulsões, assumindo a forma funcional de partículas da faixa inercial. Esse modelo é dado por

$$\eta = \exp \left(-C_{eff} \frac{\sqrt{2}}{4} \mu_d \sqrt{\frac{r}{\rho\sigma}} \left(\frac{We}{F_{mc}2} \right)^{1/4} \frac{1}{h_f} \right) \quad (8.46)$$

com

$$F_{mc} = \frac{4\rho_d}{3\rho} + 1 \quad (8.47)$$

e

$$We = \frac{\rho d (\epsilon d)^{2/3}}{2\sigma} \quad (8.48)$$

O resultado dessa abordagem será apresentado posteriormente, quando for apresentado o modelo de quebra para gotas que também considera a existência de um

diâmetro de transição entre diferentes mecanismos no sistema.

Nota-se que CHESTERS [5] também recomendou para partículas menores que 1 mm, independentemente de serem bolhas ou gotas, que seja utilizado o modelo de interface rígida, o que, indiretamente, é o tipo de modelo recomendado nesse trabalho.

8.6.3 Modelagem da frequência de quebra

A modelagem da frequência de quebra possui duas fases distintas. No primeiro momento, considerou-se o modelo completo definido pelas seguinte equação.

$$b(d) = \begin{cases} C_{b1} \frac{\sqrt{\beta (\epsilon d)^{2/3} - \frac{2We_{crit}\sigma}{\rho d}}}{d} & \text{se } d > d_l \\ 63,927 C_{b1} \frac{1}{We_{crit}^{11/5}} \sqrt{\epsilon/\nu} Ca^{2,2} \left(\frac{d}{2\eta}\right)^{4/5} & \text{se } d < d_l \text{ e } Ca > Ca_{crit} \end{cases} \quad (8.49)$$

onde d_l é definido por

$$d_l = \left(\frac{3}{2}\right)^{6/5} \left(\frac{2We_{crit}\sigma}{\beta\rho}\right)^{3/5} \quad (8.50)$$

com $We_{crit} = 6$ e Ca_{crit} definido por

$$Ca_{crit} = 1,65 \times 10^{-4} St_k Re_{max}^{-3/20} \quad (8.51)$$

com o $St_k = t_{res}/\sqrt{\epsilon/\nu}$ e $Re_{max} = \frac{Q}{0,005\nu}$. e com o número capilar definido por

$$Ca = \frac{\rho\sqrt{\epsilon/\nu}d}{2\sigma} \quad (8.52)$$

Ao usar esse modelo de frequência de quebra o, cogitou-se a utilizar o modelo de distribuição de tamanho das partículas filhas de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129] para toda partícula maior que d_l . Entretanto, isso promoveu uma descontinuidade

no formação de partículas filhas, pois as maiores partículas formadas pela quebra na faixa sub-Kolmogorov são menores que as menores partículas formadas pelo modelo de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [129]. As alternativas testadas neste modelo consistiam em utilizar a de distribuição de quebra uniforme das partículas filhas para as partículas de tamanho inferior a d_l ou utilizar uma dada distribuição de tamanho de partículas filhas para todas as faixas de tamanho de gotas.

A primeira alternativa obriga a consideração de quebra binária. A segunda alternativa permite determinar o número médio de partículas filhas se o modelo selecionado for aquele que assume filhas de igual volume.

As duas alternativas foram utilizadas e não apresentaram boa concordância com os dados experimentais, o que é ilustrado pela figura 8.15 considerando que a distribuição de partículas filhas assume que as filhas possuem igual volume em todo domínio.

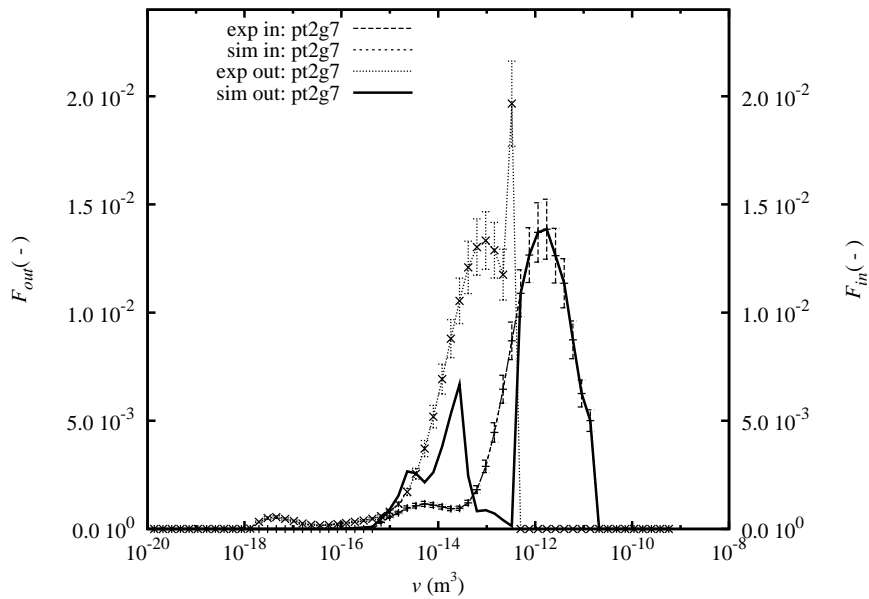


Figura 8.15: Simulação considerando o modelo de frequência de quebra dado pela equação 8.49, com $C_{fc} = 0$ e considerando todos os dados experimentais. Nota-se que as maiores partículas não sofreram quebra em quantidade suficiente para modificar a condição inicial.

A conclusão que se pode tirar com a figura 8.15 é que existe um problema na

forma do acoplamento entre os mecanismos de quebra.

Testou-se duas outras formas funcionais para o acoplamento dos modelos empregados. A primeira considerou o diâmetro crítico de MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* [128] como o ponto de transição e a segunda permitia que os dois modelos fossem completamente independentes. Nenhuma das alternativas mostrou-se satisfatória. Na verdade, utilizar o diâmetro crítico ou o diâmetro máximo como ponto de transição não fornece grandes modificações ao sistema. A segunda alternativa, embora permita repensar a forma funcional do problema, leva a uma descontinuidade na intensidade de produção de partículas filhas, o que não é algo físico ou razoável.

A alternativa de considerar que o ponto de transição entre os mecanismos é um diâmetro de partícula maior que os diâmetros das partículas no sistema se mostrou satisfatória.

Não se pode esquecer que a modelagem da frequência de quebra é intimamente ligada a modelagem da distribuição de tamanho de partículas filhas, ainda que não sejam matematicamente ligadas em seu desenvolvimento. Equívocos na modelagem da distribuição de tamanho das partículas filhas podem induzir a erros na modelagem ou na interpretação dos resultados do modelo de frequência de quebra. Sabe-se que a quebra de gotas raramente é binária, mas não há outro modelo de quebra que permita generalizar o número de partículas filhas sem criar uma característica pré-determinada para a caracterização dos tamanhos de algumas partículas filhas e não há modelos que permitam ajustar empiricamente o número de partículas filhas. Sendo assim, esse fator pode ter sido determinante para as conclusões obtidas e, assim, servir de ponto de investigação em trabalhos futuros.

Uma vez definidos os conceitos associados ao modelo de quebra, existem pelo

menos duas formas funcionais de escrevê-lo. A forma funcional recomendada, que é:

$$b(d) = \begin{cases} 63,927C_{b1} \frac{1}{\mathcal{W}e_{crit}^{11/5}} \sqrt{\epsilon/\nu} \mathcal{C}a^{22} \left(\frac{d}{2\eta}\right)^{4/5} & \text{se } \mathcal{C}a > \mathcal{C}a_{crit} \\ 0 & \text{se } \mathcal{C}a < \mathcal{C}a_{crit} \end{cases} \quad (8.53)$$

e a forma funcional dada por,

$$b(d) = 63,927C_{b1} \frac{1}{\mathcal{W}e_{crit}^{11/5}} \sqrt{\epsilon/\nu} (\mathcal{C}a - \mathcal{C}a_{crit})^{22} \left(\frac{d}{2\eta}\right)^{4/5} \quad (8.54)$$

A forma função da equação 8.54 induz a um aumento nos valores dos erros dos parâmetros determinados, a ponto dos erros serem maiores que os valores dos parâmetros. Note que a dependência funcional é completamente diferente quando o número Capilar se aproxima do valor crítico, e isso parece ser importante no modelo.

Também foi testado o uso do modelo de CRISTINI *et al.* [124] sem modificações. Embora, para esse modelo de quebra, tenha sido avaliado todos os modelos de número capilar crítico que serão observados na próxima seção e não apenas o modelo recomendado pelos autores.

$$b_{subk}(d) = C_{b2} \sqrt{\epsilon/\nu} \mathcal{C}a^3 \quad (8.55)$$

se $\mathcal{C}a > \mathcal{C}a_{crit}$ com o número Capilar definido como

$$\mathcal{C}a = \frac{\rho \sqrt{\epsilon/\nu} d}{2\sigma} \quad (8.56)$$

Nesse caso, ao considerar o erro nas variáveis explanatórias, os parâmetros são descartados pelo programa por não terem significado estatístico.

8.6.4 Modelagem da condição crítica de quebra

A modelagem da condição crítica de quebra é a parte mais empírica da modelagem. Não há precisão satisfatória nos dados para que o modelo possa ser ajustado por regressão de parâmetros.

No primeiro momento testou-se a consideração do número Capilar crítico ser igual a zero. Essa abordagem não corresponde a realidade e não foi satisfatória para resolver o problema. Além disso, não é uma proposta aceitável considerar que qualquer partícula sempre pode quebrar em um dado escoamento.

A segunda alternativa foi considerar que o número Capilar crítico era um parâmetro do sistema. O parâmetro assim determinado possuía um erro maior que o valor do parâmetro e, portanto, incluía o zero em sua faixa de valores. Assim, essa não se mostrou uma abordagem adequada.

Da literatura, obtém a indicação de

$$Ca_{crit} = \frac{1}{Re} \quad (8.57)$$

Essa forma funcional foi testada e os demais parâmetros do sistema passaram a ter erros maiores que os seus valores.

Resultados igualmente ruins foram obtidos com

$$Ca_{crit} = \frac{C_{Ca}}{Re} \quad (8.58)$$

e

$$Ca_{crit} = \frac{1}{Re^{C_{Ca}}} \quad (8.59)$$

onde C_{Ca} é um novo parâmetro empírico, que quando foi ajustado possuiu um erro maior que o seu próprio valor.

Por fim, restou o modelo recomendado:

$$\mathcal{C}a_{crit} = 1,65 \times 10^{-4} St_k \mathcal{R}e^{-3/20} \quad (8.60)$$

Esse modelo foi projetado para produzir os resultados desejados, portanto, funcionou. Ao tentar substituir suas constantes por parâmetros não se obteve resultados estatisticamente significativos para essas constantes, embora os valores ajustados tenham sido aproximadamente iguais ao que são utilizados pelo modelo.

8.6.5 Modelagem da distribuição de tamanhos das partículas filhas

Várias distribuição de tamanho de partículas filhas foram testadas nesse trabalho. Todas, com exceção do modelo recomendado, fixam o número de partículas filhas em um valor pré-determinado.

O modelo de distribuição uniforme de tamanho de partículas filhas, dado por

$$P(v_1|v) = \frac{1}{v} \quad (8.61)$$

Esse modelo é limitado a quebra binária. Ele não reproduz bem os resultados experimentais, como pode ser visto na figura 8.16. Essa figura compara os ajustes com o modelo recomendado e com sua alternativa usando a distribuição uniforme de tamanho de partículas filhas. Percebe-se na figura 8.16(b) que o pico do resultado simulado é muito menor que o pico do resultado experimental. Para aumentar o tamanho do pico é necessário aumentar o valor do parâmetro multiplicativo da frequência de quebra, mas isso desloca a curva para a esquerda. Compensar esse deslocamento aumentando o valor do parâmetro multiplicativo da coalescência também reduz o tamanho do pico, de forma que não é possível encontrar uma concordância dos resultados simulados com os resultados experimentais.

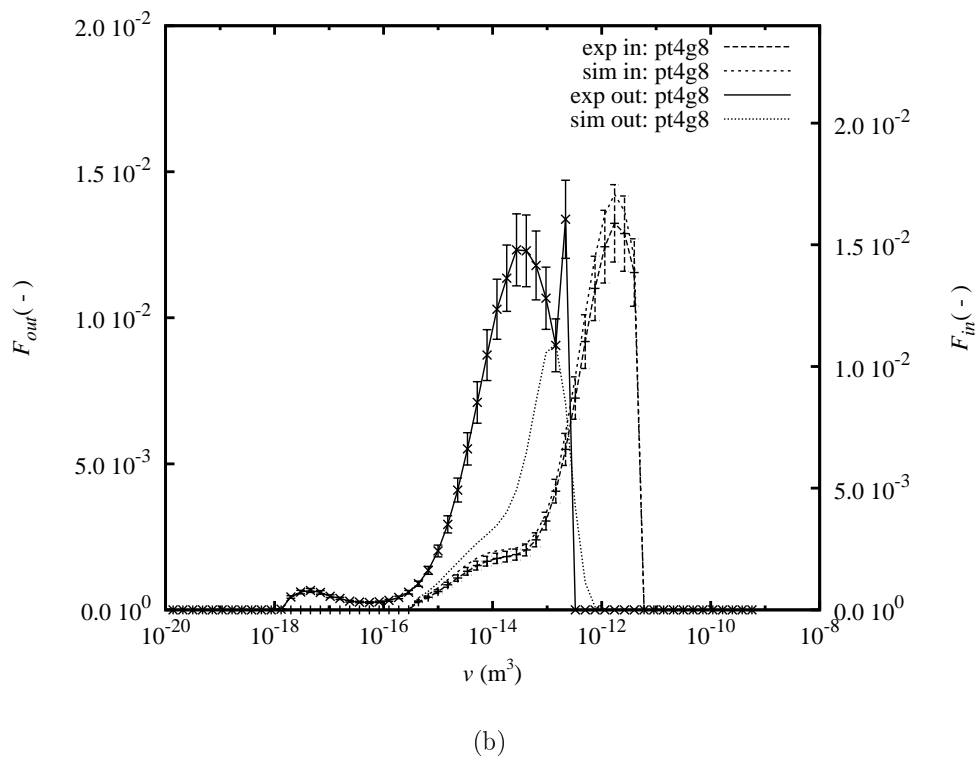
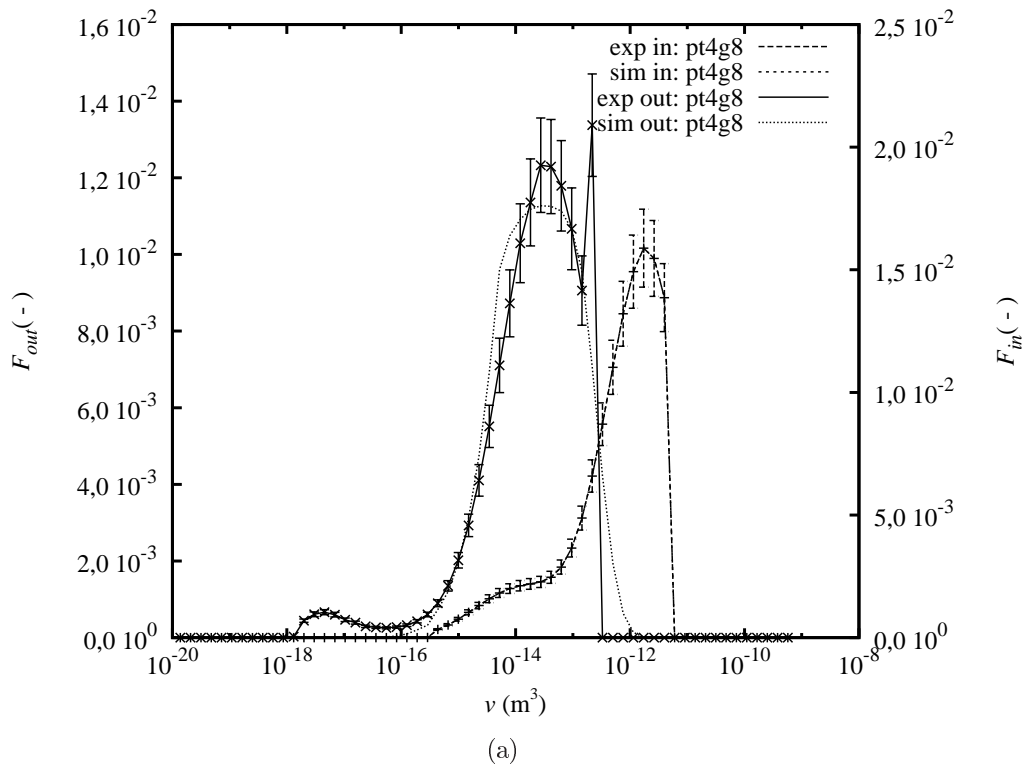


Figura 8.16: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas com (a) modelagem recomendada para distribuição de tamanho de partículas filhas e (b) distribuição de tamanho de partículas filhas uniforme. Consideram-se os erros nas variáveis explanatórias. Condição de vazão baixa, concentração alta, ponto experimental, pt4g8.

Foi desenvolvido para essa tese um modelo estatístico de distribuição de tamanho de partículas filhas para quebra ternária dado pela formulação

$$P(v_1|v) = 2\frac{(v - v_1)}{v^2} \quad (8.62)$$

Esse modelo é uma reta que fornece $P(0|v) = 2/v$ e $P(v|v) = 0$, o que significa que existe maior probabilidade de quebrar em partículas de menor volume. O modelo não funcionou bem. Os resultados têm características similares às obtidas pelo modelo de distribuição uniforme de partículas filhas.

Também foi testado um modelo de distribuição de partículas filhas em “forma de sino” (tipo distribuição β). Dentre esses modelos, têm-se HSIA e TAVLARIDES [117], LEE *et al.*[122] e COULALOGLOU e TAVLARIDES [73]. Os três modelos possuem características muito similares, então, apenas um foi testado e esse foi o de HSIA e TAVLARIDES [117], dado por:

$$P(v_1|v) = \frac{30}{v} \left(\frac{v_1}{v}\right)^2 \left(1 - \frac{v_1}{v}\right)^2 \quad (8.63)$$

Os resultados determinados por essa estimação de parâmetro não apresentaram boa concordância, como se pode ver no exemplo da figura 8.17.

Também foi testado o modelo de HESKETH [120], mas a estimação de parâmetros indicou que o parâmetro de quebra devia ser da ordem de 10^{-11} , ou seja, não haveria quebra com esse modelo, o que não é correto. Nota-se que HESKETH [120] afirma que seu modelo desenvolvido não é bom e possui problemas para sua resolução numérica adequada e recomenda a utilização de um modelo baseado em distribuição β , como HSIA e TAVLARIDES [117] e LEE *et al.*[122].

Por fim, também foi considerado o estudo da quebra binária promovendo a formação de partículas com igual volume. Esse modelo é, basicamente, o mesmo modelo

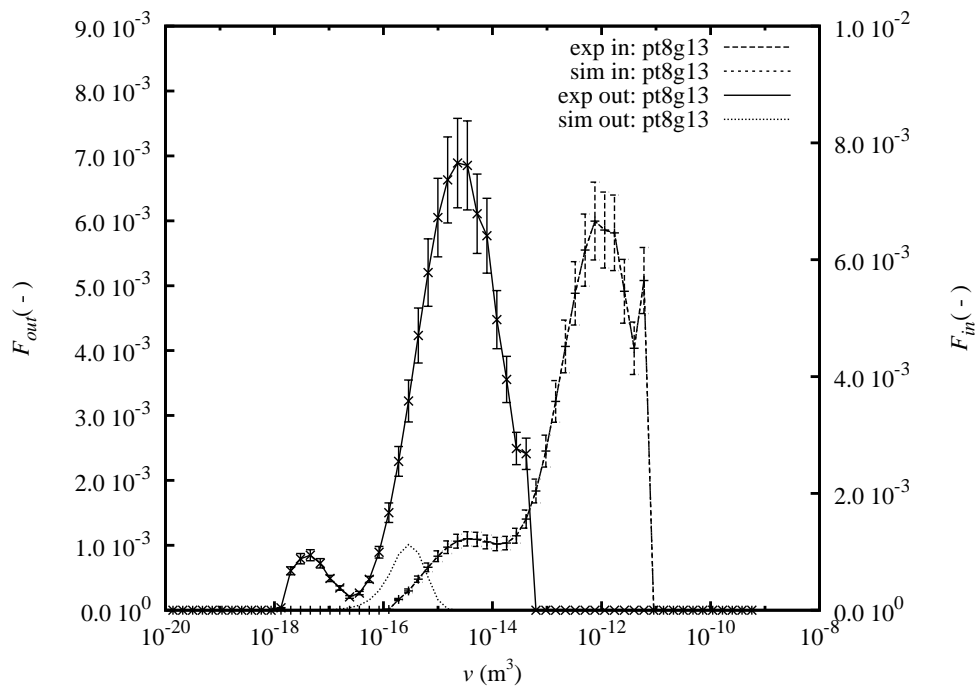


Figura 8.17: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas com modelo distribuição de tamanho de partículas filhas de HSIA e TAVLARIDES [117] Os erros nas variáveis explanatórias não foram considerados. Condição de vazão baixa, concentração alta, ponto experimental, pt8g13.

recomendado, mas fixando o número de partículas filhas geradas.

$$P(v_1|v) = \delta\left(v_1 - \frac{v}{2}\right) \quad (8.64)$$

Esse modelo não produziu bons resultados, como se pode verificar na figura 8.18. Para fazer com que o pico do resultado simulado apresentado na figura 8.18 seja menor, é necessário que o parâmetro multiplicativo da quebra seja menor, mas isso também significa deslocar o resultado para a direita, ou seja, se afastando dos resultados experimentais.

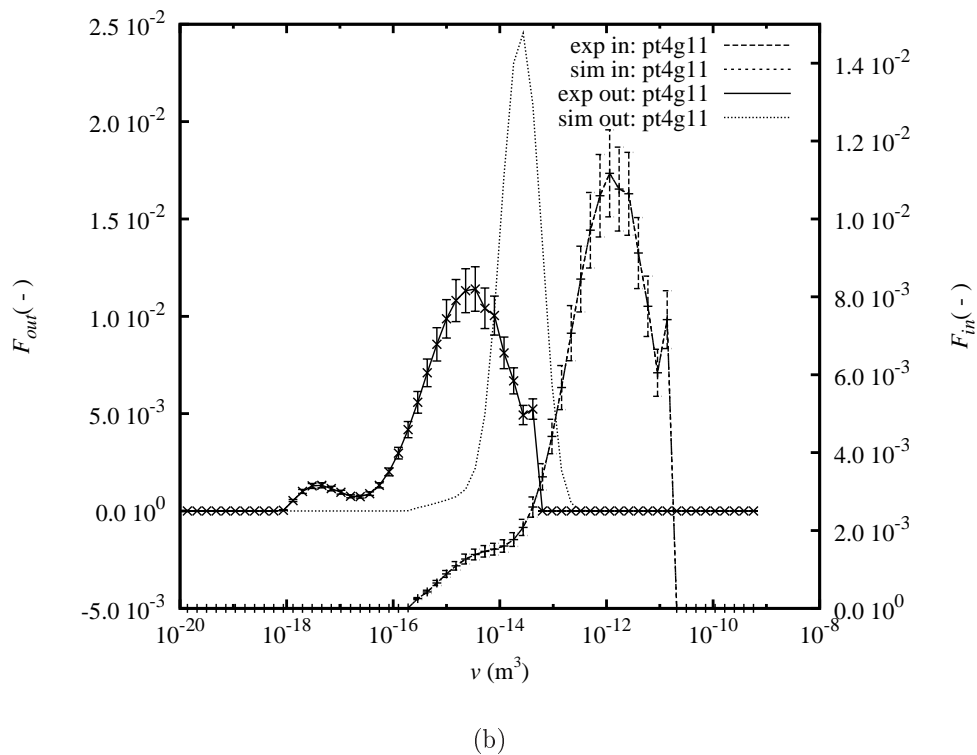
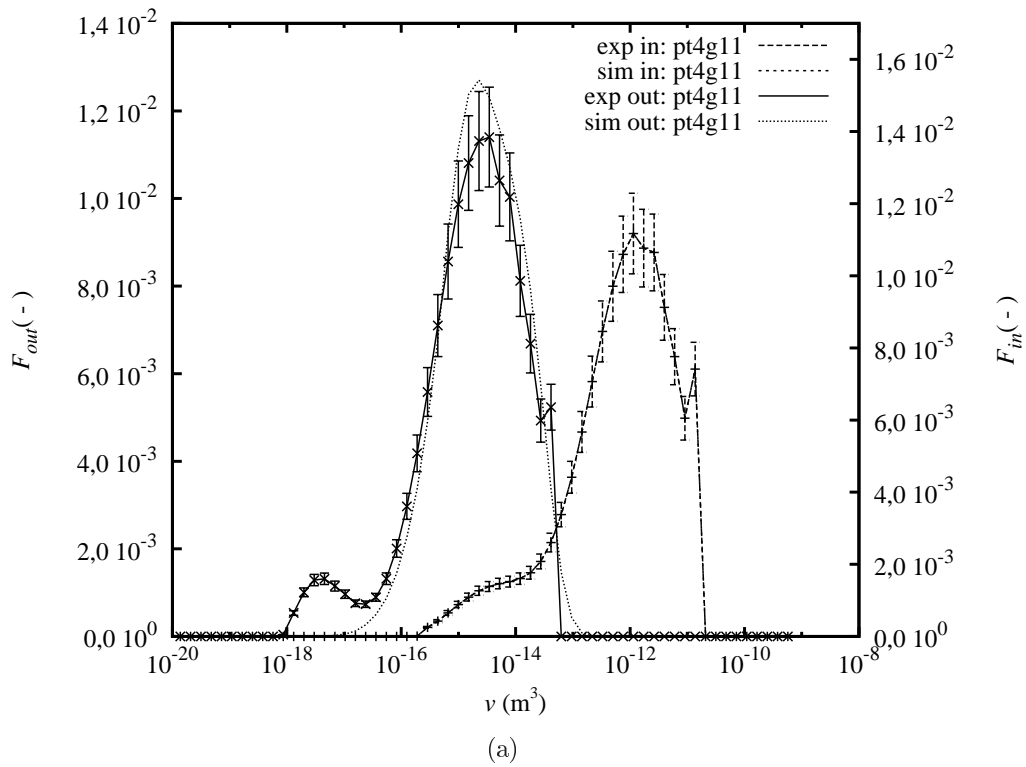


Figura 8.18: Resultados simulados versus resultados experimentais da distribuição volumétrica de tamanho de gotas com distribuição de tamanho de partículas filhas prevendo partículas com igual volume sendo (a) considerando número de partículas filhas um parâmetro empírico e (b) considerando quebra binária. Não foram considerados os erros nas variáveis explanatórias. Condição de vazão alta, concentração alta, ponto experimental, pt4g11.

Capítulo 9

Conclusão

Os dados experimentais obtidos pelo “Núcleo de Separadores Compactos” da UNIFEI são raros pela sua natureza e precisos, considerando toda a dificuldade inerente ao processo de determinação experimental. Portanto, é muito bom poder afirmar que há dados experimentais onde é possível conhecer minimamente a natureza dos erros envolvidos, muito embora não ter réplicas experimentais devido à natureza da formação da emulsão não seja algo bom.

Quase todos os modelos de quebra e coalescência da literatura foram desenvolvidos com dados experimentais obtidos de escoamentos complexos, como coluna de bolhas e tanques agitados. O modelo desenvolvido nesse trabalho também utiliza um escoamento complexo. E nesse escoamento consegue realizar boas previsões de diâmetros médios e que são fundamentais para o acoplamento da equação de balanço populacional com a fluidodinâmica computacional e para o projeto de equipamentos. Esse novo modelo também consegue realizar satisfatórias previsões da distribuição volumétrica de tamanho de gotas.

Esse trabalho não esgotou a discussão necessária para a determinação do número capilar crítico, mas precisamente, do diâmetro crítico neste sistema. A hipótese de que existe um valor máximo para a frequência de quebra não é completamente

esclarecida e o modelo de formação de partículas filhas que assume que as partículas filhas possuem o mesmo volume não é, realmente, um bom modelo, embora tenha funcionado satisfatoriamente.

Portanto, entende-se que detalhes do modelo ficaram em aberto e seu desenvolvimento ficou restrito devido à qualidade dos dados experimentais obtidos.

Existe clara necessidade de desenvolver um modelo de quebra para gotas a partir de dados experimentais de quebra obtidos em um ambiente mais controlado, no qual seria mais fácil obter dados específicos de diâmetro crítico e de distribuição de tamanho de partículas filhas. Infelizmente, tais dados experimentais não estavam disponíveis para essa tese.

Considerando todas as limitações experimentais, o modelo desenvolvido na presente tese é uma evolução significativa a modelagem de quebra que permite satisfatória determinação da evolução da distribuição volumétrica de tamanho de gotas em acidentes.

Com sugestão para trabalho futuro, têm-se a necessidade de estudar experimentalmente a quebra de gotas correlacionando o tamanho da partícula-mãe e a turbulência do meio contínuo com o número e tamanho das partículas filhas. Isso permite determinar a distribuição de tamanho de partículas filhas, o número médio de partículas filhas e do diâmetro crítico como função das condições do escoamento e das características do sistema e da partícula. Esse tipo de trabalho é fundamental para o aprimoramento dos modelos de quebra.

O mesmo tipo de trabalho pode ser realizado para a coalescência de gotas, nesse caso, com o objetivo fundamental de determinar um modelo de eficiência de coalescência, obtendo dados experimentais do escoamento do filme entre as duas partículas e dados de probabilidade de coalescência propriamente ditos. A frequência de colisão também pode ser estudada caracterizando o movimento relativo das partículas e a causa dessa movimentação. Isto não apenas permite a boa caracterização

do modelo de frequência de colisão devido à turbulência do meio contínuo como a frequência de colisão devido a outros efeitos.

Também existe a necessidade de compreender experimentalmente como efetivamente ocorre a transição entre mecanismos e mesmo se essa transição ocorre, caracterizando, em caso positivo, o ponto de transição e as tendências das funções antes e depois desse ponto, tanto para quebra, quanto para a coalescência.

Em uma eventual reprodução deste trabalho, seria recomendado a utilização de uma emulsão composta por óleos bem definidos, para que permita ter uma emulsão estável para permitir a obtenção de réplicas experimentais.

Em termos de simulação numérica dos resultados, compreende-se a necessidade de utilizar um método otimização global de parâmetros que permita resolver o problema posto em tempo hábil.

Também é possível utilizar os modelos desenvolvidos nessa tese para realizar um acoplamento PB-CFD e, assim, avaliar questões teóricas associadas as características do escoamento.

Referências Bibliográficas

- [1] SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M. *Introdução a Termodinâmica da Engenharia Química*. 5 ed. Rio de Janeiro, LTC Editora, 2000.
- [2] DREW, D. A., PASSMAN, S. L. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, 1998.
- [3] RAMKRISHNA, D., MAHONEY, A. W. “Population balance modeling. Promise for the future”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 595–606, 2002.
- [4] PRINCE, M. J., BLANCH, H. W. “Bubble coalescence and breakup in air-sparged bubble columns”, *AIChE Journal*, v. 36, pp. 1485–1499, 1990.
- [5] CHESTERS, A. K. “The modelling of coalescence processes in fluid-liquid dispersions: A review of current understanding”, *Trans IChemE*, v. 69, part A, pp. 259–270, 1991.
- [6] LIAO, Y., LUCAS, D. “A Literature Review on Mechanisms and Models for the Coalescence Process of Fluid Particles”, *Chemical Engineering Science*, v. in press, 2010.
- [7] LASHERAS, J. C., EASTWOOD, C., MARTÍNEZ-BAZÁN, C., et al. “A review of statistical models for the break-up of an immiscible fluid immersed into a fully developed turbulent flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 28, pp. 247–278, 2002.

- [8] LIAO, Y., LUCAS, D. “A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions”, *Chemical Engineering Science*, v. 64, pp. 3389–3406, 2009.
- [9] CAMPOS, F. B., LAGE, P. L. C. “A numerical method for solving the transient multidimensional population balance equation using an Euler-Lagrange formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, n. 12, pp. 2725–2744, 2003.
- [10] MITRE, J. F., TAKAHASHI, C. P., RIBEIRO JR, C. P., et al. “Analysis of breakage and coalescence models for bubble columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, pp. 6089–6100, 2010.
- [11] RIBEIRO-JR, C. P., LAGE, P. L. C. “Experimental study on bubble size distributions in a direct-contact evaporator”, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 21, n. 01, pp. 69–81, 2004.
- [12] RIBEIRO-JR, C. P., LAGE, P. L. C. “Population balance modeling of bubble size distributions in a direct-contact evaporator using a sparger model”, *Chemical Engineering Science*, v. 69, pp. 2363–2377, 2004.
- [13] RIBEIRO JR., C. P. *Desenvolvimento de um Processo Combinado de Evaporação por Contato Direto e Permeação de Vapor para Tratamento de Sucos*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil, 2005.
- [14] MITRE, J. F., RIBEIRO, C. P., LAGE, P. L. C., et al. “Estimação de parâmetros de modelos de quebra e coalescência de bolhas aplicados a um evaporador por contato direto”. In: *ENEMP 2004*, 2004.
- [15] RODRIGUES, R. C. *Estudo do aumento de escala do processo de esgotamento de aromas em colunas de borbulhamento usando fluidodinâmica computacional*. Dissertação de Mestrado, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, Março 2005.

- [16] RODRIGUES, R. C., LAGE, P. L. C. “Simulação Fluidodinâmica de Esgotamento de Voláteis em Colunas de Borbulhamento”. In: *Anais do XXXI Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados (ENEMP 2004)*, v. CDROM, 10 pp., Uberlândia, MG, 24 a 27 de Outubro 2004.
- [17] BARROS, F. P. A. *Simulação Fluidodinâmica de Evaporadores por Contato Direto*. Dissertação de Mestrado, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, 2009.
- [18] MITRE, J. F. *Estudo dos Modelos de Quebra e Coalescência para Escoamentos Polidispersos*. Dissertação de Mestrado, UFRJ, 2006.
- [19] BARROS, F. P. A., SILVA, M. O., SILVA, M. L. R., et al. “Análise da técnica de sensores duplos de condutividade para a obtenção da velocidade e do tamanho de bolhas usando filmagem de alta velocidade”. In: *XXXIII Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados*, Aracajú, 2007.
- [20] LAGE, P. L. C. “Comments on the “An analytical solution to the population balance equation with coalescence and breakage – the special case with constant number of particles” by D.P. Patil and J.R.G. Andrews [Chemical Engineering Science 53(3) 599–601]”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 57, pp. 4253–4254, 2002.
- [21] DAMIAN, R. B., LAGE, P. L. C. “An Improved Approach to the Simulation of Polidispersed Gas-Liquid Flows in ANSYS CFX - Part 1: DQMOM implementation, validation and convergence analysis”. In: *Multi-Phase Flows - Simulation, Experiment and Application*, v. CDROM, 36 pp., Rosseldorf (Dresden), Alemanha, 26 a 29 de Junho 2006. ANSYS e Forschungszentrum Rosseldorf.
- [22] SILVA, L. F. L. R., DAMIAN, R. B., LAGE, P. L. C. “Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages”. In: *available on CD*, Leipzig, Germany, 2007. International Conference on Multiphase Flow.

- [23] SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C. “Implementation of an Eulerian Multi-phase Model in OpenFOAM and its Application to Polydisperse Two-Phase Flows”. In: *1st OpenFOAM International Conference*, v. CDROM, 16 pp., Old Windson, Inglaterra, 26-27 de Novembro 2007. ICON.
- [24] DAMIAN, R. B. *Simulação CFD de Escoamentos Multifásicos Polidispersos usando Balanço Populacional*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil, 2007.
- [25] SILVA, L. F. L. R. *Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, 2008.
- [26] SILVA, L. F. L. R., DAMIAN, R. B., LAGE, P. L. C. “Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 32, n. 12, pp. 2933–2945, 2008.
- [27] SILVA, L. F. L. R., RODRIGUES, R. C., MITRE, J. F., et al. “Comparison of the accuracy and performance of quadrature-based methods for population balance problems with simultaneous breakage and aggregation”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 34, pp. 286–297, 2010.
- [28] JATOBÁ, L. F. C. *Simulação do escoamento de misturas contínuas usando quadratura adaptativa*. Dissertação de Mestrado, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, 2010.
- [29] LAGE, P. L. C. “The quadrature method of moments for continuous thermodynamics”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 31, n. 7, pp. 782–799, 2006.
- [30] PALADINO, E. E. *Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do Tipo Pressão Diferencial*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.

- [31] ISHII, M., HIBIKI, T. *Thermo-fluid Dynamics of Two-phase Flow*. Springer, 2006.
- [32] ISHII, M. *Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow*. Paris, Eyrolles, 1975.
- [33] MICHELE, V. *CFD modelling and measurement of liquid flow structure and phase holdup in two- and three-phase bubble columns*. Tese de Doutorado, Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, 2002.
- [34] BRENNEN, C. *Fundamentals of Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2005.
- [35] BOVE, S. *Computational fluid dynamics of gas-liquid flows including bubble population balances*. Tese de Doutorado, Esbjerg Institute of Engineering, 2005.
- [36] RUSCHE, H. *Computational fluid dynamics of dispersed Two-Phased Flows at High Phase Fractions*. Tese de Doutorado, University of London, Londres, Reino Unido, 2002.
- [37] CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E. *Bubbles, Drops and Particles*. London, Academic Press, 1978.
- [38] CROWE, C., SOMMERFIELD, M., YUTAKA, T. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, 1998.
- [39] STOKES, G. G. “On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums”, *Cambridge Philosophical Society Transactions*, v. 9, pp. 8–106, 1851.
- [40] SCHLICHTING, H. *Boundary Layer Layer Theory*. McGraw-Hill, 1960.
- [41] SCHILLER, L., NAUMANN, A. “Über die grundlegenden berechnungen bei der schwerkraftbereitung”, *Z. Vereins deutscher Ing.*, v. 77, n. 12, pp. 318–320, 1933.

- [42] JOSHI, J. B. “Computational flow modelling and design of bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 5893–5933, 2001.
- [43] AUTON, T. R., HUNT, J. C. R., PRUD’HOME, M. “The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 197, pp. 241–257, 1988.
- [44] LEGENDRE, D., MAGNAUDET, J. “The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 368, pp. 81–126, 1998.
- [45] DREW, D. A., CHENG, L., LAHEY, R. T. “The analysis of virtual mass effects in two-phase flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 5, pp. 233–242, 1979.
- [46] DREW, D. A. “Mathematical modeling of two-phase flow”, *Annual Reviews in Fluid Mechanics*, v. 15, pp. 261–291, 1983.
- [47] ISHII, M., MISHIMA, K. “Two-fluid model and hydrodynamics constitutive relation”, *Nuclear Engineering And Design*, v. 82, pp. 107–126, 1984.
- [48] VAN WIJNGAARDEN, L. “Hydrodynamic interaction between gas bubbles in liquid”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 77, pp. 27–44, 1976.
- [49] WATANABE, T., HIRANO, M., TANAKE, F., et al. “The effect of the virtual mass force term on the numerical stability and efficiency of system calculations”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 120, pp. 181–192, 1990.
- [50] LAHEY, J., CHEN, L. Y., DREW, D. A., et al. “The effect of virtual mass on the numerical stability of accelerating two-phase flows”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 6, pp. 281–294, 1980.
- [51] WATANABE, T., KUKITA, Y. “The effect of the virtual mass term on the stability of the two-fluid model against perturbations”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 135, pp. 327–340, 1992.

- [52] SILVA FREIRE, A. P., MENUT, P. P. M., SU, J. *Turbulência*, v. 1. ABCM, 2002.
- [53] BOUSSINESQ, J. “Théorie de l’Écoulement Tourbillant”, *Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr.*, v. 23, pp. 46–50, 1877.
- [54] SILVA FREIRE, A. T., ILHA, A., COLAÇO, M. F. *Turbulência*, v. 5. ABCM, 2006.
- [55] SATO, Y., SEKOGUCHI, K. “Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 2, pp. 79–95, 1975.
- [56] TENNEKES, H., LUMLEY, J. L., YANG, D. *A First Course in Turbulence*. MIT Press, 1972.
- [57] RAMKRISHNA, D. *Population Balances – Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. New York, Academic Press, 2000.
- [58] VIGIL, R. D., ZIFF, R. M. “On the stability of coagulation-fragmentation population balances”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 133, n. 1, pp. 257–264, 1989.
- [59] PATIL, D. P., ANDREWS, J. R. G. “An analytical solution to continuous population balance model describing floc coalescence and breakage - A special case”, *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 3, pp. 599–601, 1998.
- [60] MCCOY, B. J., MADRAS, G. “Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 3049–3051, 2003.
- [61] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. “On the solution of population balance equations by discretization - I. a fixed pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1311–1332, 1996.

- [62] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D. “On the solution of population balance equations by discretization - II. A moving pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1333, 1996.
- [63] NOPENS, I., BEHEYDT, D., VANROLLEGHEM, P. A. “Comparison and pitfalls of different discretised solution methods for population balance models: a simulation study”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, pp. 367–377, 2005.
- [64] HU, Q., ROHANI, S., JUTAN, A. “New numerical method for solving the dynamic population balance equations”, *AIChE Journal*, v. 51, n. 11, pp. 3000–3006, 2005.
- [65] BOVE, S., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H. “A novel algorithm for solving population balance equations: The parallel parent and daughter classes. Derivation, analysis and testing”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 1449 – 1464, 2005.
- [66] HULBURT, H., KATZ, S. “Some problems in particle technology. A statistical mechanical formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, pp. 555–574, 1964.
- [67] MCGRAW, R., SAUNDERS, J. H. “A condensation feedback mechanism for oscillatory nucleation and growth”, *Aerosol Science and Technology*, v. 3, pp. 367–380, 1984.
- [68] MCGRAW, R. “Description of the aerosol dynamics by the quadrature method of moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, pp. 255–265, 1997.
- [69] GORDON, R. G. “Error bounds in equilibrium statistical mechanics”, *AIChE Journal*, v. 9, n. 5, pp. 655–663, 1968.
- [70] MARCHISIO, D. L., FOX, R. O. “Solution of the population balance equation using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, pp. 43–73, 2005.

- [71] KAMP, A. M., CHESTERS, A. K., COLIN, C., et al. “Bubble coalescence in turbulent flows: A mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity bubbly pipe flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 27, pp. 1363–1396, 2001.
- [72] WRIGHT, H., RAMKRISHNA, D. “Factors affecting coalescence frequency of droplets in a stirred liquid-liquid dispersion”, *AIChE Journal*, v. 40, pp. 767–776, 1994.
- [73] COULALOGLOU, C. A., TAVLARIDES, L. L. “Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions”, *Chemical engineering Science*, v. 32, pp. 1289–1297, 1977.
- [74] FRIEDLANDER, S. K. *Smoke, dust and haze*. New York, Wiley, 1977.
- [75] VON SMOLUCHOWSKI, M. “Versuch zur mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen”, *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, v. 92, pp. 129–168, 1917.
- [76] MIYAUCHI, T., SHYU, C. N. “Fluid Flow in Gas Bubble Columns”, *Kagaku Kogaku*, v. 34, pp. 958–964, 1970.
- [77] SAFFMAN, P. G., TURNER, J. S. “On the collisions of drops in turbulent clouds”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 1, pp. 16–30, 1956.
- [78] LEHR, F., MEWES, D. “A Transport Equation for the Interfacial Area Density Applied to Bubble Columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 1159–1166, 2001.
- [79] BILICK, Z., KESTIN, J. “Transition Criteria for Two-phase flow pattern in vertical upward flow”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 13, pp. 283, 1987.
- [80] OTAKE, T., TONE, S., NAKAO, K., et al. “Coalescence and Breakup of Bubbles in Liquids”, *Chemical Engineering Science*, v. 32, pp. 377, 1997.

- [81] WU, Q., KIM, S., ISHII, M. “One-group interfacial area transport in vertical bubbly flow”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 41, pp. 1103–1112, 1998.
- [82] COLELLA, D., VINCI, D., BAGANTIN, R., et al. “A study on coalescence breakage mechanisms in three different bubbles columns”, *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 4767–4777, 1999.
- [83] HIBIKI, T., ISHII, M. “Two-group interfacial area transport equations at bubbly-to-slug flow transition”, *Nuclear Engineering And Design*, v. 202, pp. 39–76, 2000.
- [84] WANG, T., J, W., Y, J. “Population Balance Model for Gas–Liquid Flows: Influence of Bubble Coalescence and Breakup Models”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44, pp. 7540–7549, 2005.
- [85] RAFIQUE, M., P, C., DUDUKOVIĆ, M. P. “Computational modeling of gas-liquid flow in bubble columns”, *Reviews in Chemical Engineering*, v. 20, n. 3-4, pp. 225–373, 2004.
- [86] ISHII, M., CHAWLA, T. C. *Local drag laws in dispersed two-phase flow*. Relatório Técnico ANL-79-105, Argonne National Laboratory, Chicago, 1979.
- [87] NEVERS, N., WUT, J. L. “Bubble coalescence in viscous fluids”, *AIChE Journal*, v. 17, pp. 182–186, 1971.
- [88] COLIN, C., RIOU, X., FABRE, J. “Bubble Coalescence in Gas–Liquid Flow at Microgravity Conditions”, *Microgravity Science Technology*, v. 20, pp. 243–246, 2008.
- [89] KOCAMUSTAFAOGULLARI, G., ISHII, M. “Foundation of the interfacial area transport equation and its closures relations.” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 38, pp. 481–493, 1995.

- [90] KUBOI, R., KOMASAWA, I., OTAKE, T. “Behavior of Dispersed Particles in Turbulent Liquid Flow”, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 13, pp. 67–73, 1972.
- [91] TSOURIS, C., TAVLARIDES, L. L. “Breakage and coalescence models for drops in turbulent dispersions”, *AIChE Journal*, v. 40, pp. 395–406, 1994.
- [92] CASAMATTA, P. M., VOGELPOHL, A. “Modeling of fluid dynamics and mass transfer in extraction columns”, *German Chemical Engineering*, v. 8, pp. 96–103, 1985.
- [93] HAGESAETHER, L. *Coalescence and Break-up of Drops and Bubbles*. Tese de Doutorado, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Noruega, 2002.
- [94] SOVOVÁ, H. “Breakage and Coalescence of drops in a batch stirred vessel – II . Comparison of model and experiments”, *Chemical Engineering Science*, v. 36, pp. 1567–1573, 1981.
- [95] CHATZI, E., GARRIELIDES, A. D., KIPARISSIDES, C. “Generalized model for prediction of the steady-state drop size distributions in batch stirred vessels”, *Industrial Chemical Engineering Research*, v. 28, pp. 1704–1711, 1989.
- [96] LAFI, A. Y., REYES JR, J. N. *General particle transport equation*. Relatório técnico, Department of Energy Office of Energy Research – University Nuclear Engineering Research Program, 1995.
- [97] ROSS, S. L. *Measurements and models of dispersed phase mixing process*. Tese de Doutorado, Universidade de Michigan, USA, 1971.
- [98] CHESTERS, A. K. “The applicability of dynamic-similarity criteria to isothermal, liquid-gas, two-phase flows without mass transfer”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 2, pp. 191–212, 1975.

- [99] CHESTERS, A. K., HOFMAN, J. “Bubble coalescence in pure liquids”, *Applied Scientific Research*, v. 38, pp. 353–361, 1982.
- [100] MACKAY, G. D. M., MASON, S. G. “The gravity approach and coalescence of fluid drops at liquid interfaces.” *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 41, pp. 203–212, 1963.
- [101] OOLMAN, T., BLANCH, H. W. “Bubble Coalescence in Stagnant Liquids”, *Chemical Engineering Communications*, v. 43, pp. 237–261, 1986.
- [102] KIRKPATRICK, R. D., LOCKETT, M. J. “The influence of Approach Velocity on Bubble Coalescence”, *Chemical Engineering Science*, v. 29, pp. 2363–2373, 1974.
- [103] LEVICH, V. G. *Physicochemical Hydrodynamics*. Englewood Cliffs, NJ, Prentice Hall, 1962.
- [104] LAMB, H. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, 1932.
- [105] KO, G. H., RYOU, H. S. “Modeling of droplet collision-induced breakup process”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 31, pp. 723–738, 2005.
- [106] LUO, H. *Coalescence, breakup and liquid circulation in bubble column reactors*. Tese de Doutorado, University of Trondheim, Trondheim, Norway, 1993.
- [107] TAYLOR, G. I. “The formation of emulsions in definable fields of flow”, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, v. 146, pp. 501–523, 1934.
- [108] HINZE, J. O. “Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersions processes”, *AIChE Journal*, v. 1, n. 3, pp. 289–295, 1955.
- [109] KOLMOGOROV, A. N. “On the breakage of drops in a turbulent flow”, *Dokl. Akad. Navk. SSSR*, v. 66, pp. 825–828, 1949.

- [110] EASTWOOD, C. D., ARMI, L., LASHERAS, J. C. “Breakup of immiscible fluids in turbulent flows”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 502, pp. 309–333, 2004.
- [111] ANDERSSON, R., ANDERSSON, B. “On breakup of fluid particles in turbulent flows”, *AIChE Journal*, v. 52, n. 6, pp. 2020–2030, 2006.
- [112] LUO, H., SVENDSEN, H. F. “Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersions”, *AIChE Journal*, v. 42, n. 5, pp. 1225–1233, 1996.
- [113] VALENTAS, K. J., BILOUS, O., AMUNDSON, A. R. “Breakage and coalescence in dispersed phase systems”, *Industrial and Engineering Chemistry: Fundamentals*, v. 5, n. 4, pp. 533–542, 1966.
- [114] ROSS, S. L., CURL, R. L. “Measurement and models of dispersed phase mixing process”. In: *Joint Chemical Engineering Conference*, n. Paper 29b, Vancouver, 1973.
- [115] NARSIMHAN, G., GUPTA, J. P., RAMKRISHNA. D. “A model for transitional breakage probability of droplets in agitated lean liquid-liquid dispersions”, *Chemical Engineering Science*, v. 34, n. 2, pp. 257–265, 1979.
- [116] KONNO, M., MATSUNAGA, Y., ARAI, K., et al. “Simulations model for break-up process in an agitated tank”, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 13, pp. 67–73, 1980.
- [117] HSIA, M. A., TAVLARIDES, L. L. “Simulation analysis of drop breakage, coalescence and micromixing in liquid-liquid stirred tanks”, *The Chemical Engineering Journal*, v. 26, pp. 189–199, 1983.
- [118] CHATZI, E., LEE, J. M. “Analysis of interactions for liquid-liquid dispersions in agitated vessels”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 26, n. 11, pp. 2263–2267, 1987.

- [119] HESKETH, R. P., FRASER RUSSELL, T. W., ETCHELLS, A. W. “Bubble size in horizontal pipelines”, *AIChE Journal*, v. 33, n. 4, pp. 663–667, 1987.
- [120] HESKETH, R. P., ETCHELLS, A. W., FRASER RUSSELL, T. W. “Experimental observations of bubble breakage in turbulent flow”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 30, n. 5, pp. 835–841, 1991.
- [121] APOPAEUS, V. *Calculation of multicomponent mass transfer between dispersed and continuous phase*. Tese de Doutorado, Helsinki University of Technology, 2001.
- [122] LEE C. H., ERICKSON L. E., G. L. A. “Dynamics of bubble size distribution in turbulent gas–liquid dispersions”, *Chemical Engineering Communications*, v. 61, pp. 181 – 195, 1987.
- [123] ANDERSSON, R., ANDERSSON, B. “Modeling the Breakup of Fluid Particles in Turbulent Flows”, *AIChE Journal*, v. 52, n. 6, pp. 2031–2038, 2006.
- [124] CRISTINI, V., BLAWZDZIEWICZ, J., LOEWENBERG, M., et al. “Breakup in stochastic Stokes flows: sub-Kolmogorov drops in isotropic turbulence”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 492, pp. 231–250, 2003.
- [125] MACEDO, H. *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*. Brasil, RJ, Guanabara Dois, 1978.
- [126] LEHR, F., MILLIES, M., MEWES, D. “Bubble-size distribution and flow fields in bubble columns”, *AIChE Journal*, v. 48, pp. 655–663, 2002.
- [127] MENEVEAU, C., SREENIVASAN, K. R. “Multifractal nature of turbulent energy dissipation”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 224, pp. 429–484, 1991.
- [128] MARTÍNEZ-BAZÁN, C., MONTAÑÉZ, J. L., LASHERAS, J. C. “On the breakup of an air bubble injected into a fully developed turbulent flow.

- Part 1: breakup frequency”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 401, pp. 157, 1999.
- [129] MARTÍNEZ-BAZÁN, C., MONTAÑÉZ, J. L., LASHERAS, J. C. “On the breakup of an air bubble injected into a fully developed turbulent flow. Part 2: size PDF of the resulting daughter bubbles”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 401, pp. 183, 1999.
- [130] HAGESAETHER, L., JAKOBSEN, H. A., SVENDSEN, H. F. “Modeling of dispersed-phase size distribution in bubble columns”, *Industrial and Chemical Engineering Research*, v. 41, pp. 2560–2570, 2002.
- [131] WANG, T., J, W., Y, J. “A novel theoretical breakup kernel function for bubbles/droplets in a turbulent flow”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 4629–4637, 2003.
- [132] ZHAO, H., GE, W. “A theoretical bubble breakup model for slurry beds or three-phase fluidized beds under high pressure”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, pp. 109–115, 2007.
- [133] CHEN, P., SANYAL, J., DUDUKOVIC, M. P. “Numerical simulation of bubble columns flows: effect of different breakup and coalescence closures”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 1085–1101, 2005.
- [134] ANSYS INC. *ANSYS CFX-11.0 User Manual*, 2007.
- [135] CHATZI, E., KIPARISSIDES, C. “Dynamic simulation of bimodal drop size distributions in low-coalescence batch dispersion systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 47, pp. 445–456, 1992.
- [136] NAMBIAR, D., KUMAR, R., DAS, T., et al. “A new model for the breakage frequency of drops in turbulent stirred dispersions”, *Chemical Engineering Science*, v. 47, pp. 2989, 1992.
- [137] RISSO, F., FABRE, J. “Oscillations and breakup of a bubble immersed in a turbulent field”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 372, pp. 323–355, 1998.

- [138] MAAB, S., HERMANN, S., KRAUME, M. “Determination of breakage rates with single drop experiments”. In: *4th International Conference on Population Balance Modelling*, Berlim, Germany, 2010.
- [139] SILVA, E., BARCA, L. F., SOUZA, M. A. D. *Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo. Síntese de Resultados Experimentais*. Relatório técnico, Laboratório de Separação de Fases, Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, Itajubá, 2010.
- [140] SILVA, E., BARCA, L. F., SOUZA, M. A. D. *Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo. Resultados dos testes da fase 1*. Relatório técnico, Laboratório de Separação de Fases, Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, Itajubá, 2010.
- [141] LAGE, P. L. C., SOUZA, M. N., RODRIGUES, R. C., et al. *Avaliação técnica do processo de coalescência-redispersão em escoamentos de emulsões água em óleo, Etapa 1*. Relatório técnico, Laboratório de Termofluidodinâmica, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, 2005.
- [142] LAGE, P. L. C., SOUZA, M. N., SILVA, L. F. L. R., et al. *Avaliação técnica do processo de coalescência-redispersão em escoamentos de emulsões água em óleo, Etapa 2*. Relatório técnico, Laboratório de Termofluidodinâmica, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, 2007.
- [143] PAIVA, A. P. *Estudo da minimização de erro nas medições de concentração de emulsões por trituração Karl-Fisher utilizando-se projeto de experimentos*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, 2004.
- [144] PETZOLD, L. R. *A description of DASSL: A differential algebraic system solver*. Sand82-8637, Sandia National Laboratories, 1982.
- [145] ZWOKAK, J. W., BOGGS, P. T., WATSON, L. T. *ODRPACK95: A weighted orthogonal distance regression code with bound constraints*. Department

of Computer Science, Virginia Polytechnic Institute and State University,
Blacksburg, Virginia, USA, 2004.

Apêndice A

Resultados das simulações da evolução da DTG

Esse anexo apresenta todos os resultados da evolução da distribuição volumétrica de tamanho de gotas ao escoar por um acidente.

A apresentação dos gráficos segue a ordem dos pontos e em seguida, das réplicas, ou seja, pt2g2 (primeiro ponto), pt2g3, pt2g4 ... pt2g14, pt2g15, pt3g2 ... pt9g15 (último ponto).

Cada página contém duas figuras de um mesmo ponto experimental e em todos os casos, a figura (a) é o resultado da simulação sem levar em consideração os erros nas variáveis explanatórias na estimação de parâmetros e a figura (b) é o resultado da simulação considerando estes erros no ajuste. As variáveis explanatórias são: distribuição volumétrica de tamanho de gotas antes do acidente, vazão, diferencial de pressão no corpo de prova, temperatura e volume de controle.

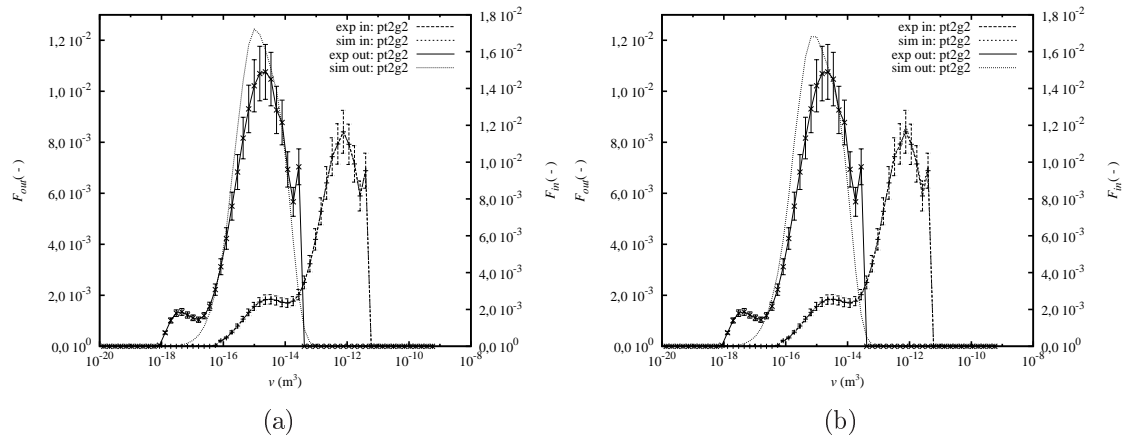


Figura A.1: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g2 (vazão alta, concentração alta).

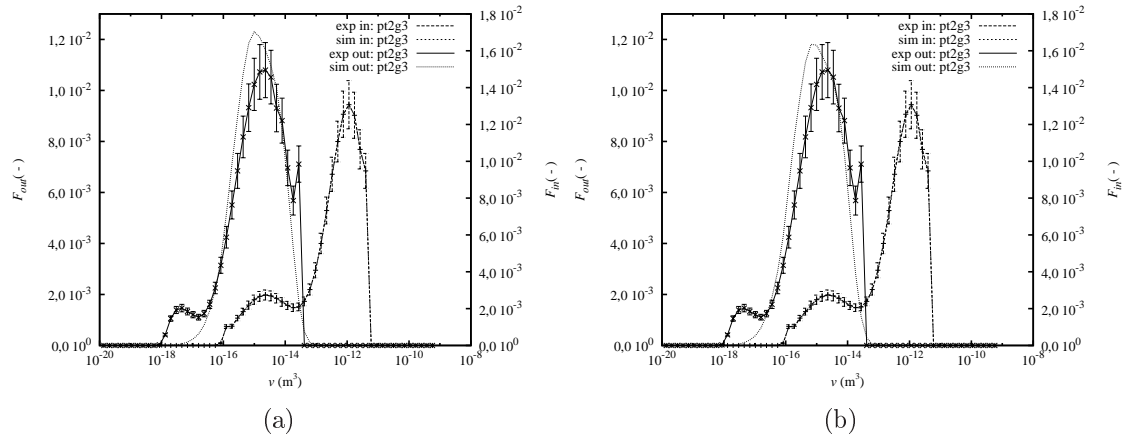


Figura A.2: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g3 (vazão alta, concentração alta).

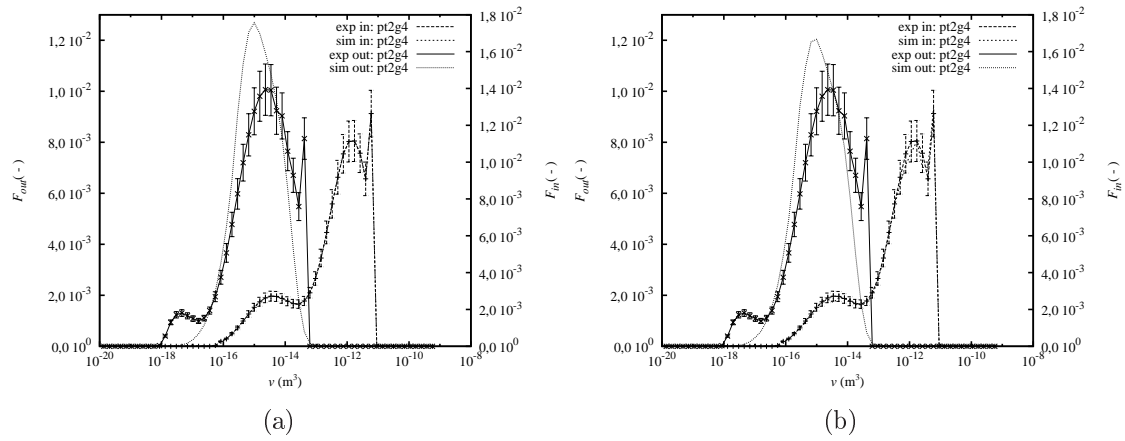


Figura A.3: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g4 (vazão alta, concentração alta).

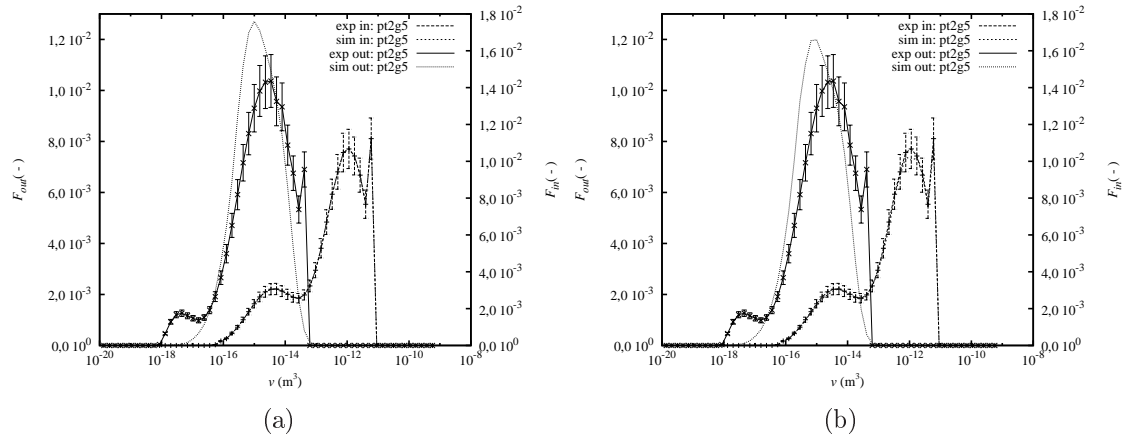


Figura A.4: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g5 (vazão alta, concentração alta).

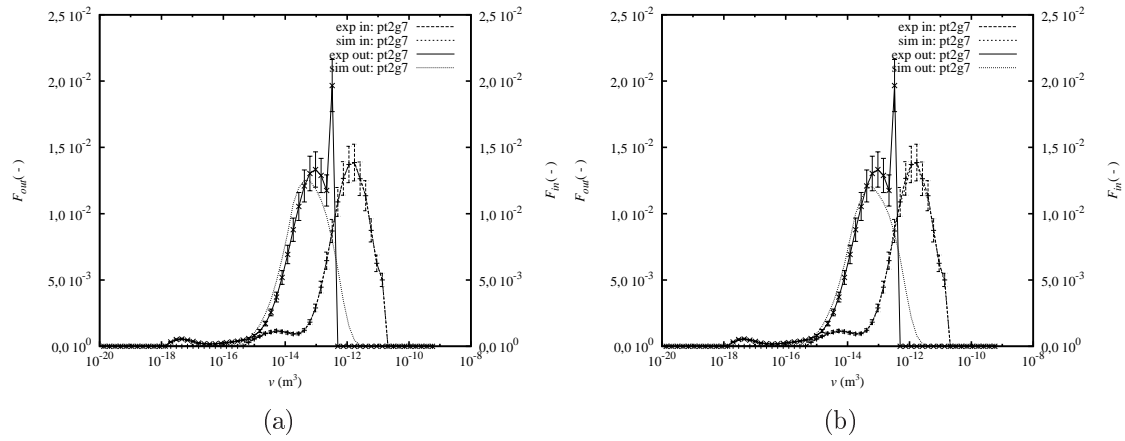


Figura A.5: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g7 (vazão baixa, concentração alta).

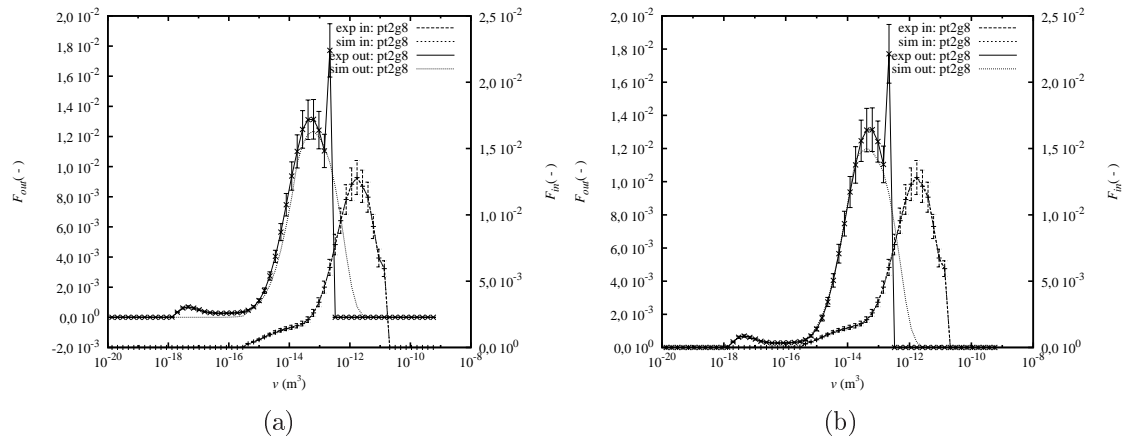


Figura A.6: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g8 (vazão baixa, concentração alta).

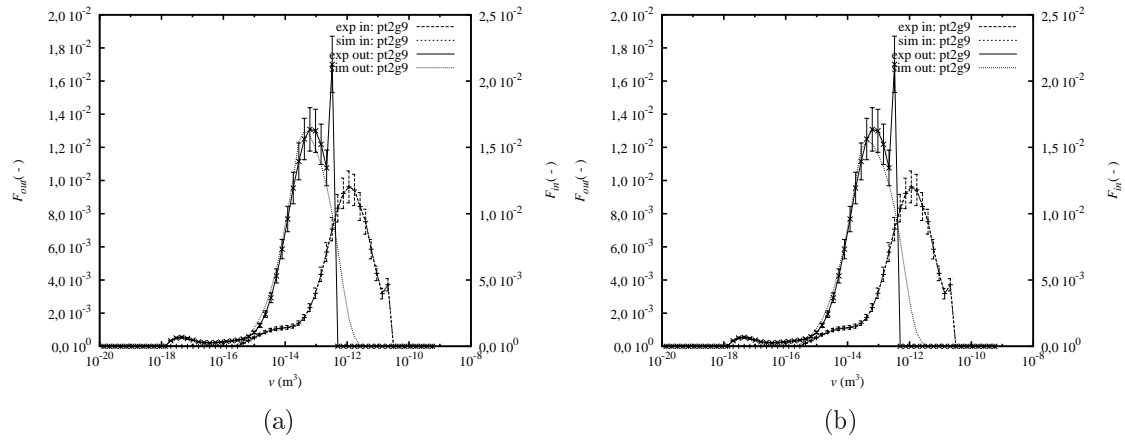


Figura A.7: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g9 (vazão baixa, concentração alta).

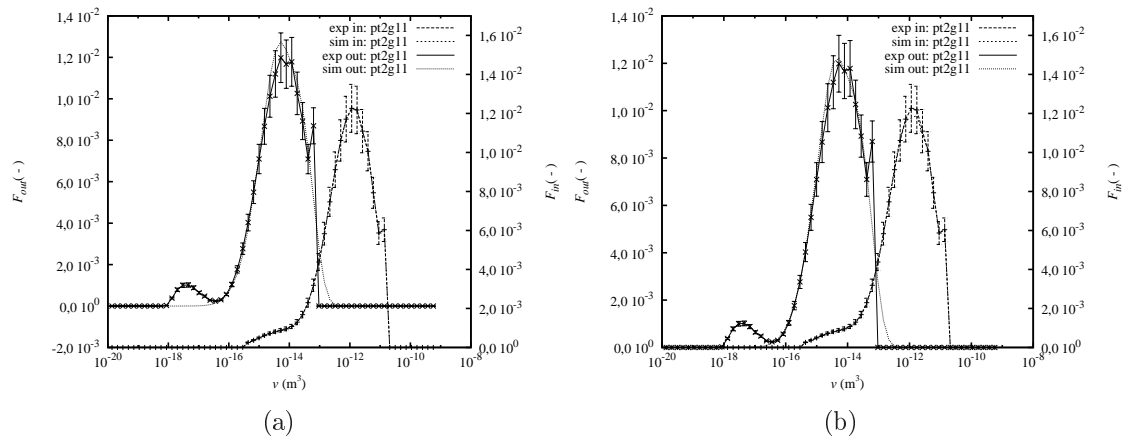


Figura A.8: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g11 (vazão média, concentração alta).

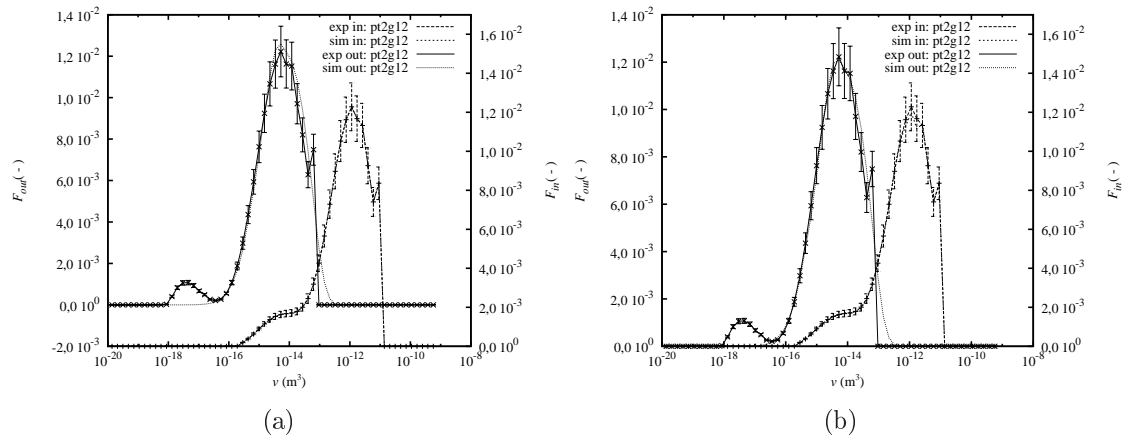


Figura A.9: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g12 (vazão média, concentração alta).

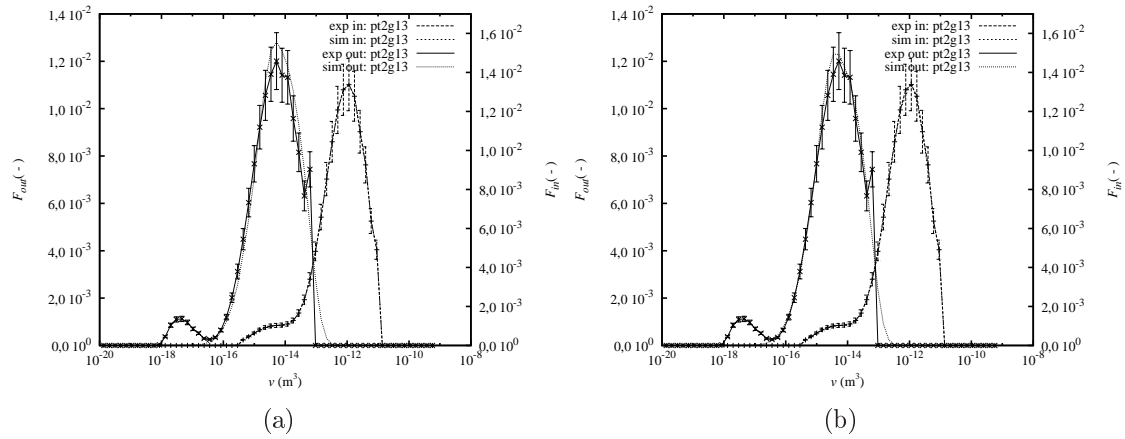


Figura A.10: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g13 (vazão média, concentração alta).

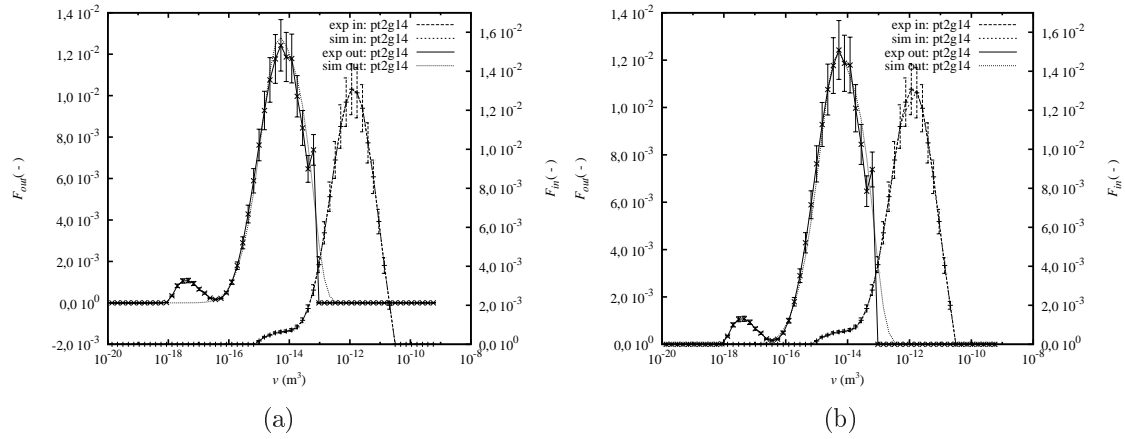


Figura A.11: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g14 (vazão média, concentração alta).

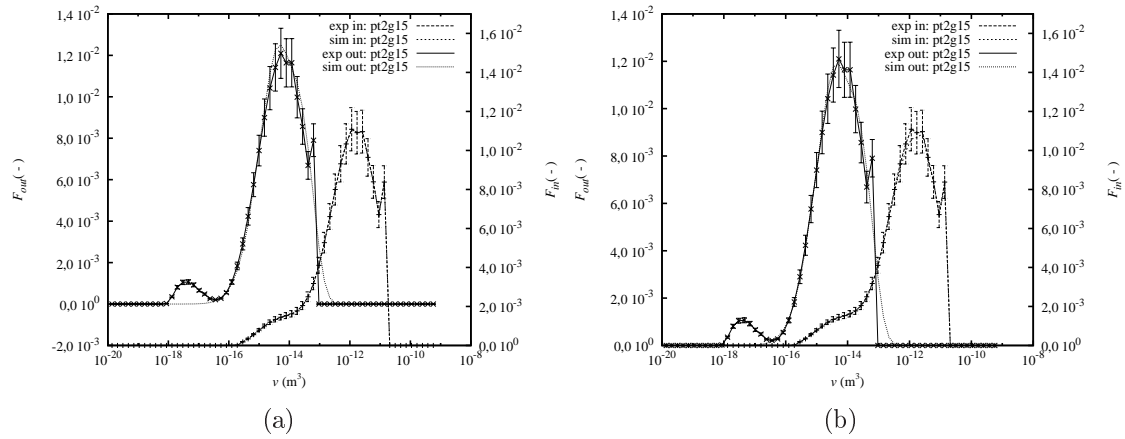


Figura A.12: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt2g15 (vazão média, concentração alta).

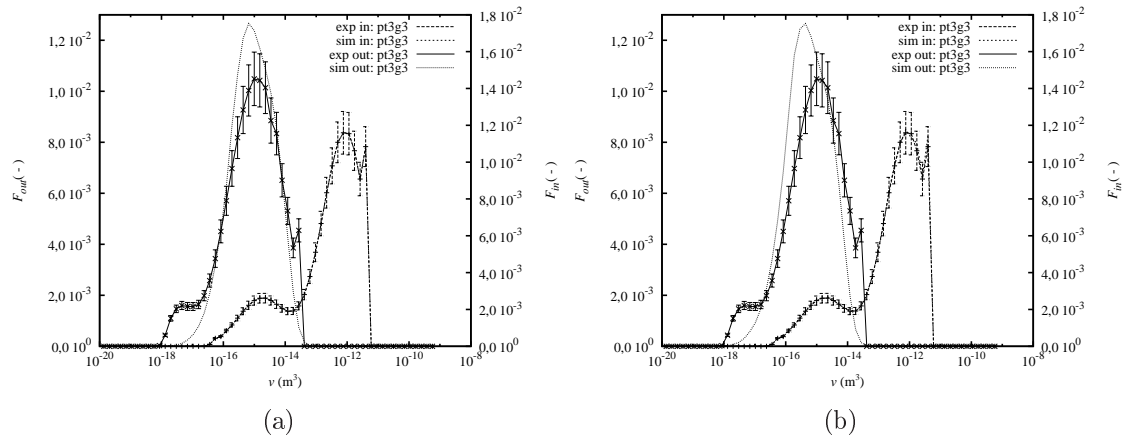


Figura A.13: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g3 (vazão alta, concentração alta).

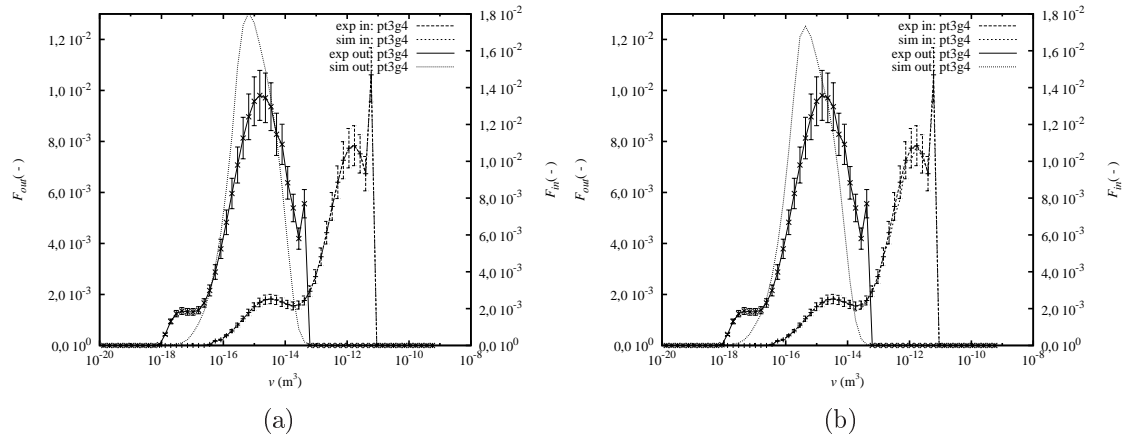


Figura A.14: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g4 (vazão alta, concentração alta).

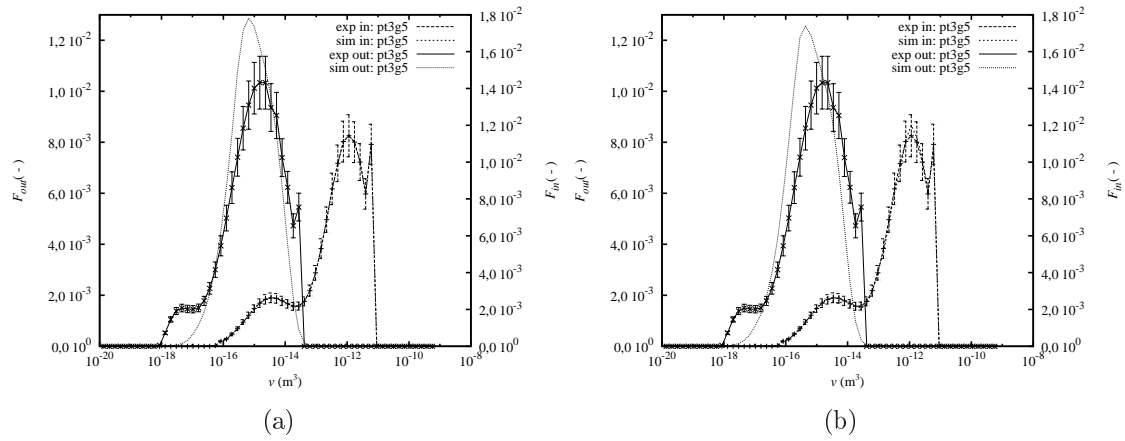


Figura A.15: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g5 (vazão alta, concentração alta).

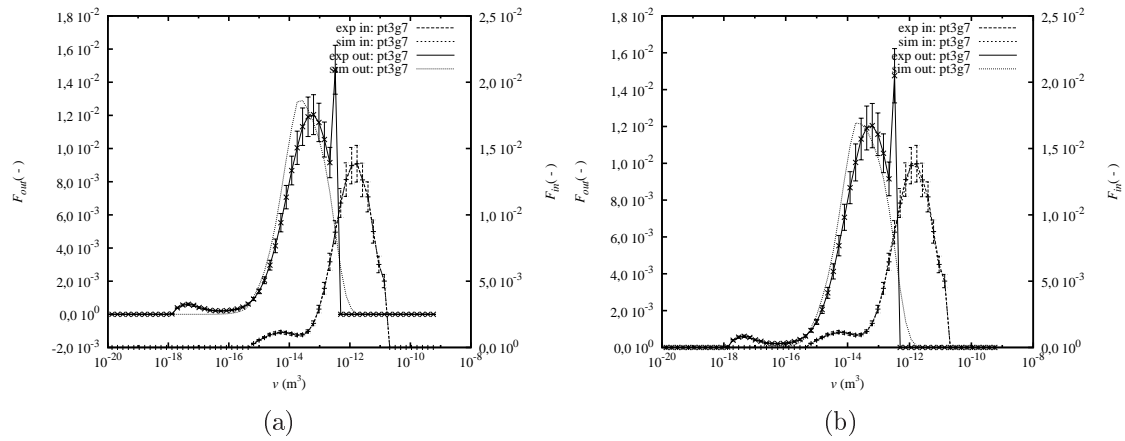


Figura A.16: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g7 (vazão baixa, concentração alta).

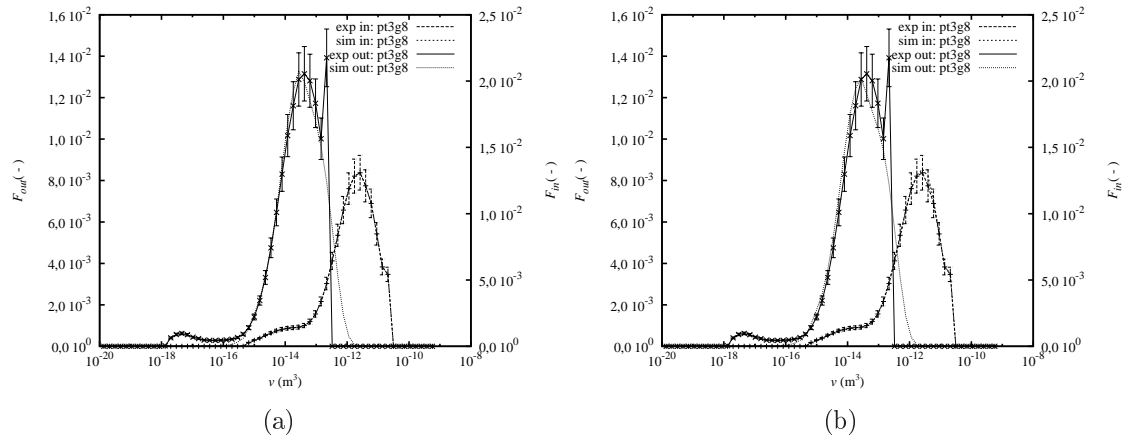


Figura A.17: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g8 (vazão baixa, concentração alta).

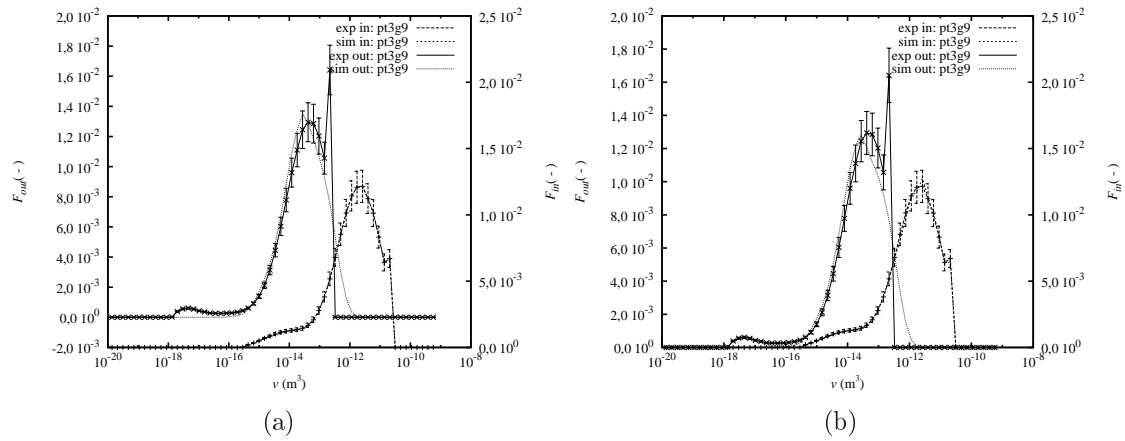


Figura A.18: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g9 (vazão baixa, concentração alta).

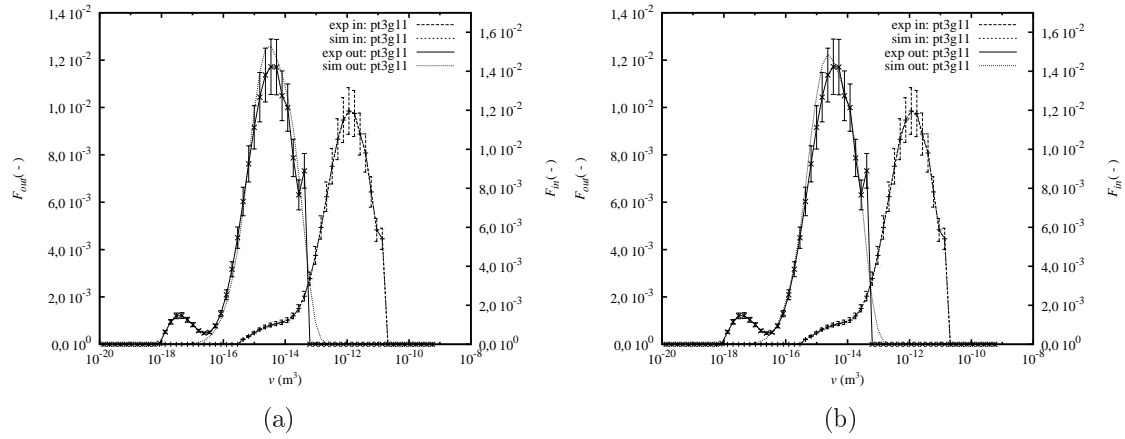


Figura A.19: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g11 (vazão média, concentração alta).

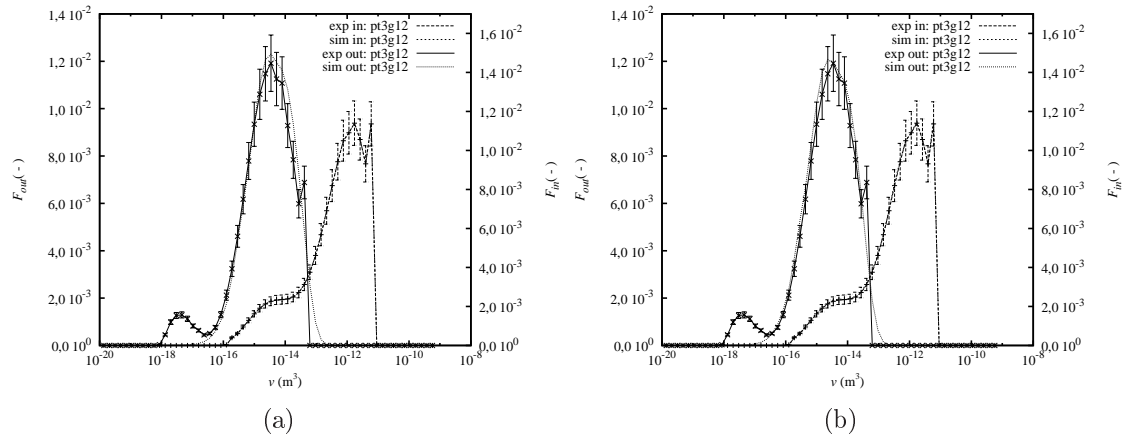


Figura A.20: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g12 (vazão média, concentração alta).

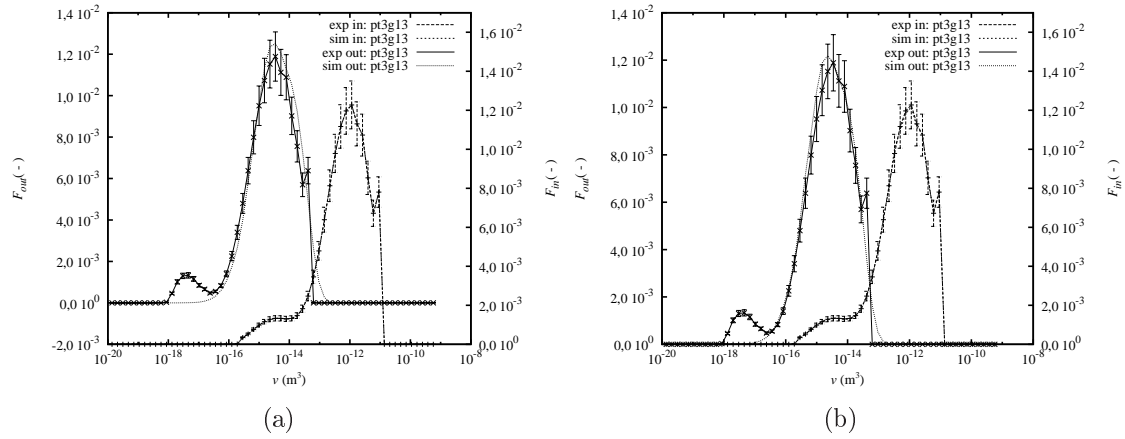


Figura A.21: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g13 (vazão média, concentração alta).

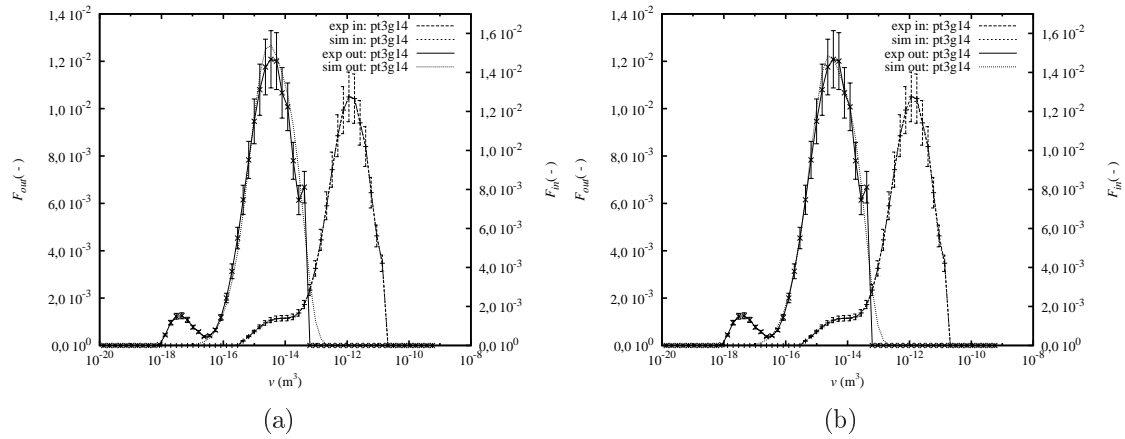


Figura A.22: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g14 (vazão média, concentração alta).

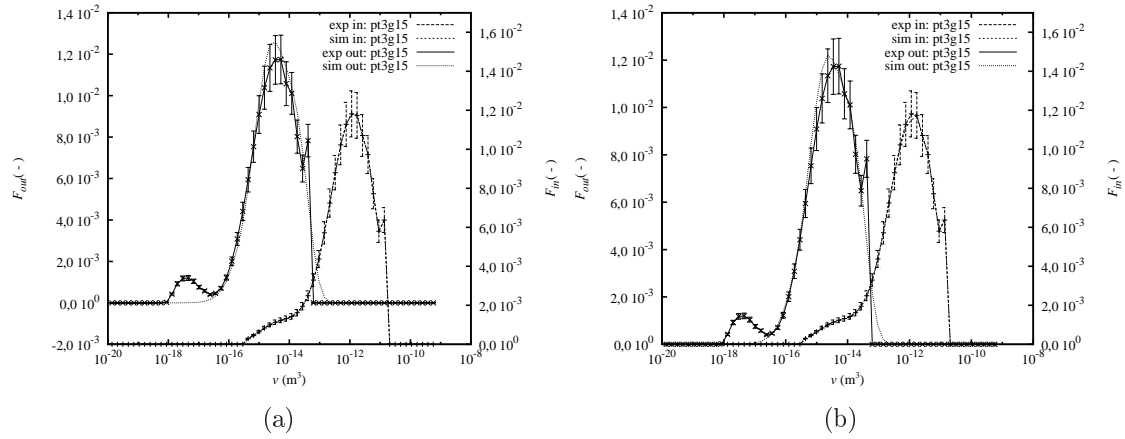


Figura A.23: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt3g15 (vazão média, concentração alta).

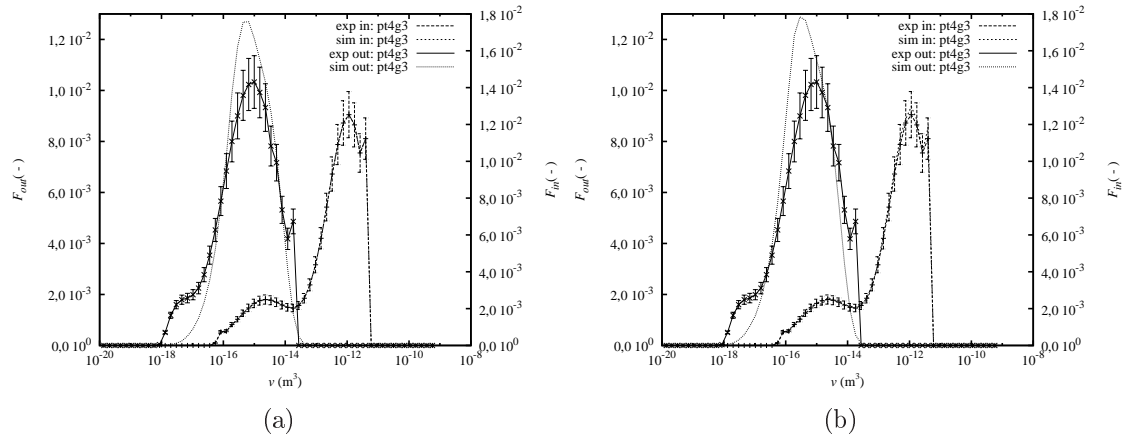


Figura A.24: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g3 (vazão alta, concentração alta).

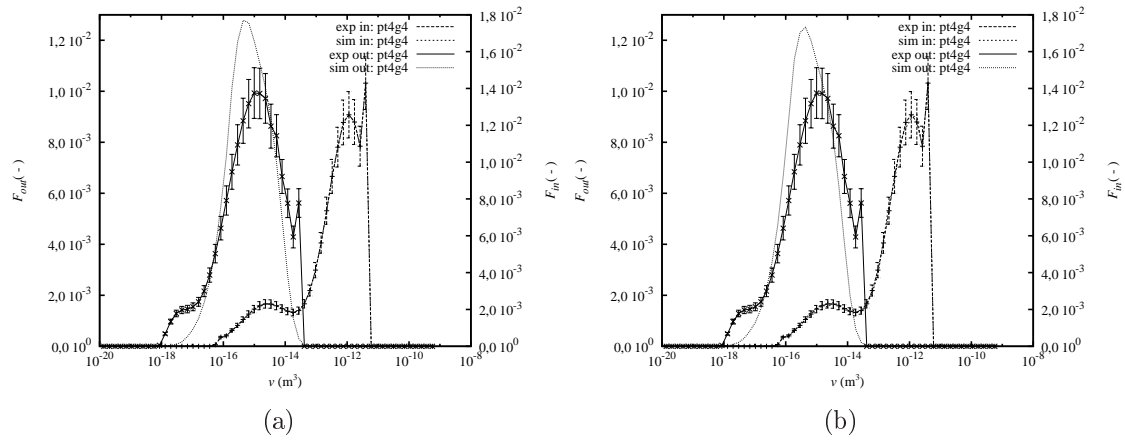


Figura A.25: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g4 (vazão alta, concentração alta).

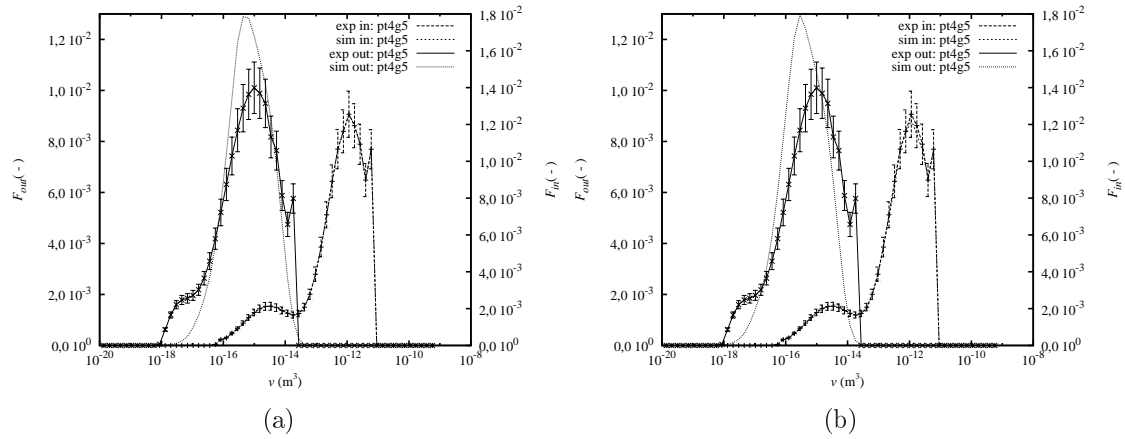


Figura A.26: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g5 (vazão alta, concentração alta).

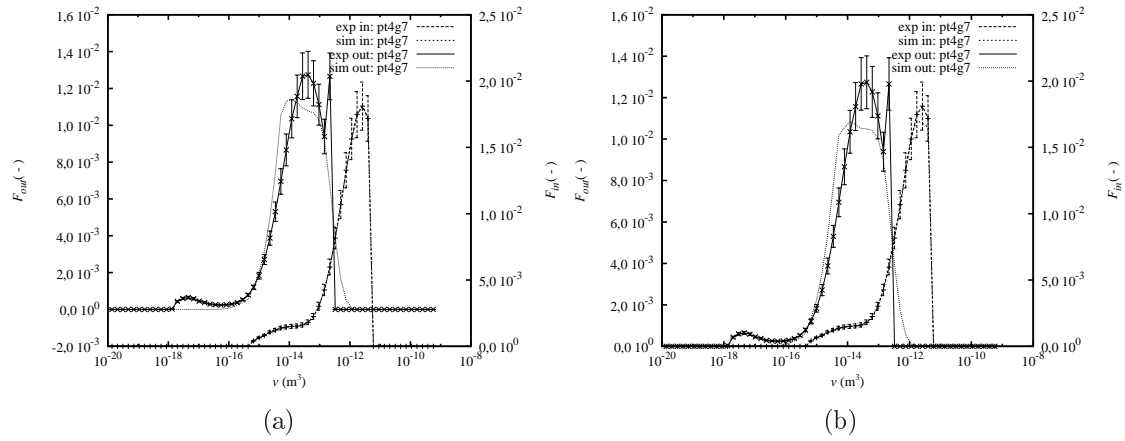


Figura A.27: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g7 (vazão baixa, concentração alta).

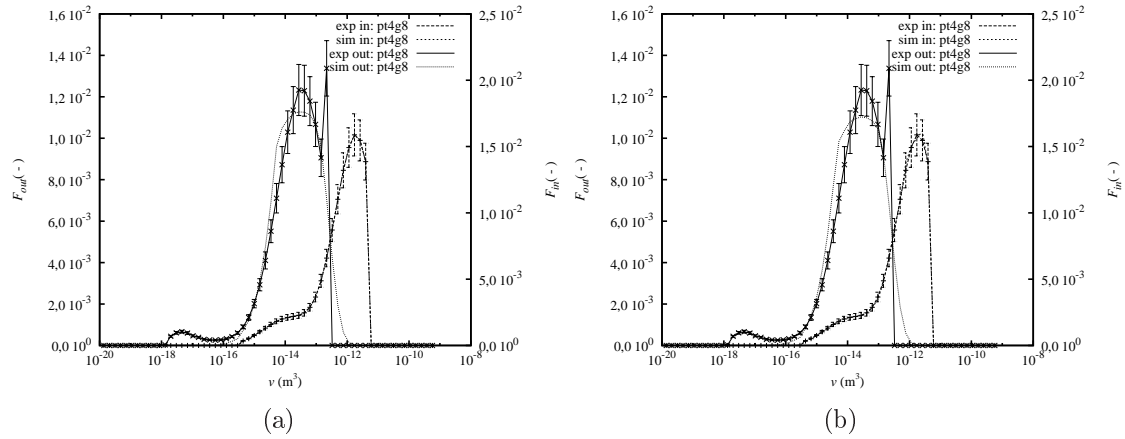


Figura A.28: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g8 (vazão baixa, concentração alta).

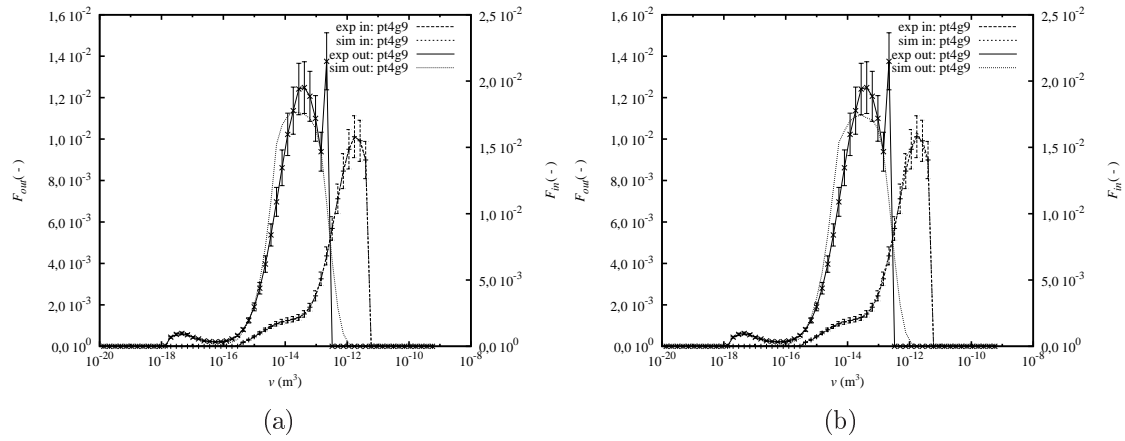


Figura A.29: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g9 (vazão baixa, concentração alta).

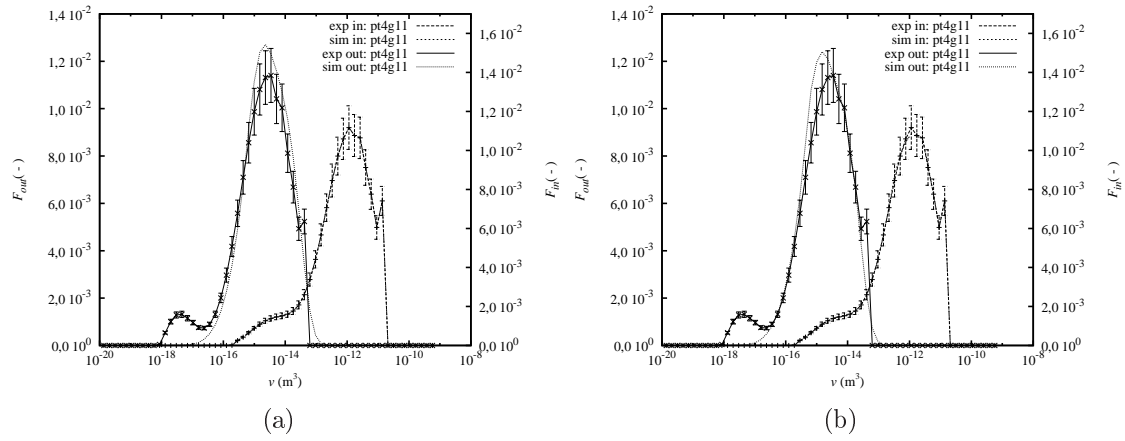


Figura A.30: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g11 (vazão média, concentração alta).

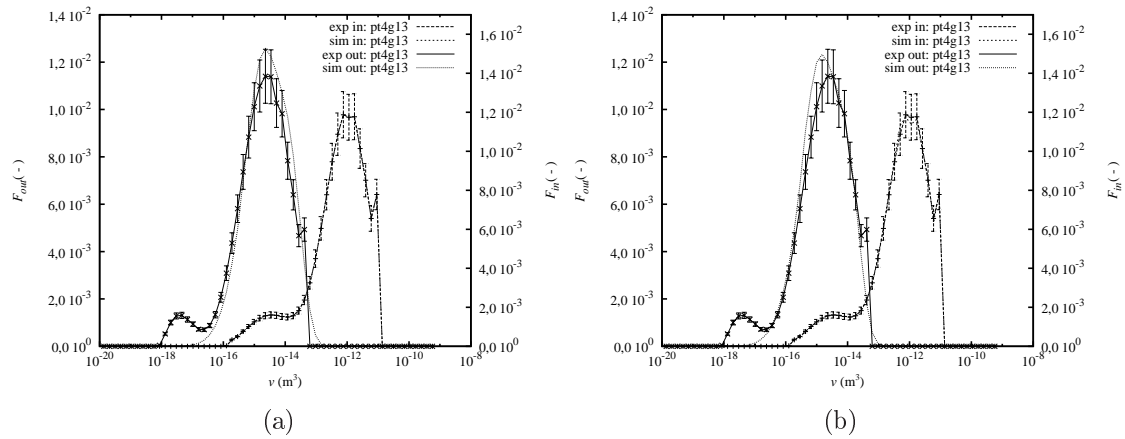


Figura A.31: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g13 (vazão média, concentração alta).

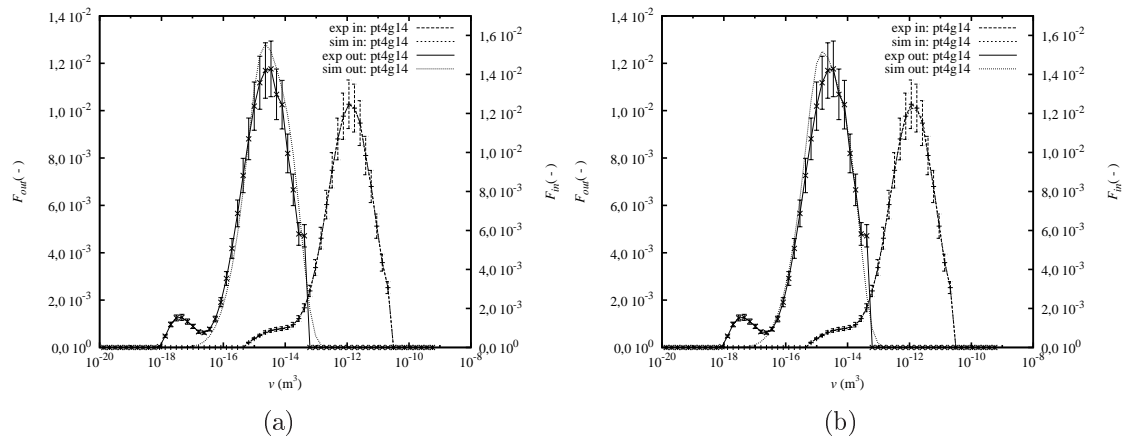


Figura A.32: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt4g14 (vazão média, concentração alta).

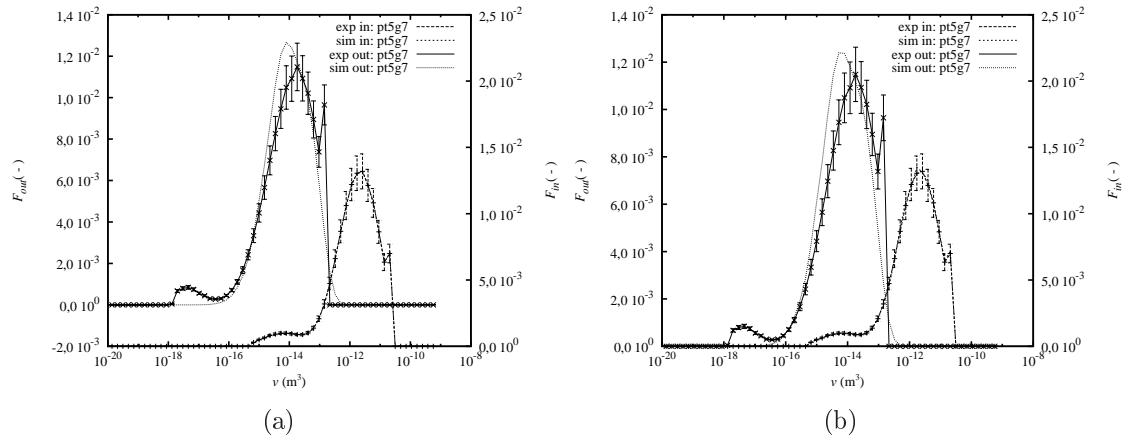


Figura A.33: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g7 (vazão baixa, concentração alta).

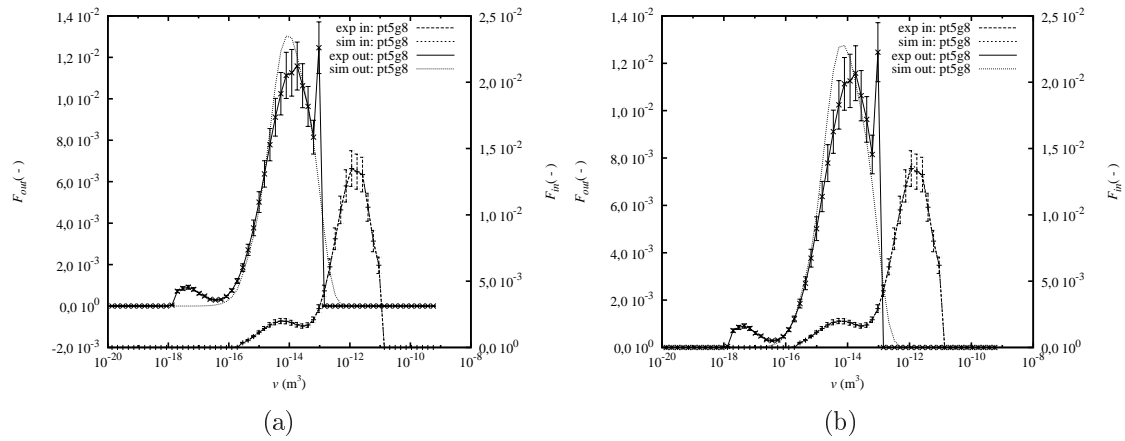


Figura A.34: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g8 (vazão baixa, concentração alta).

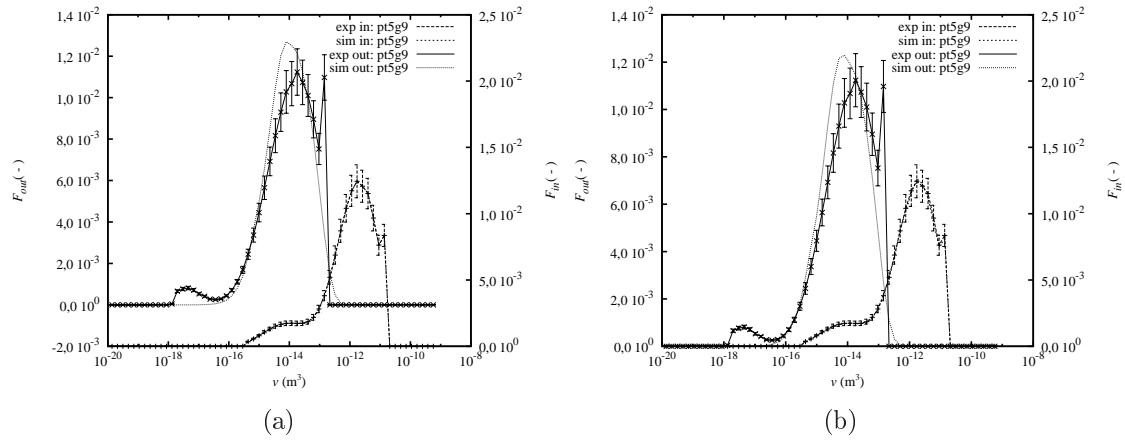


Figura A.35: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g9 (vazão baixa, concentração alta).

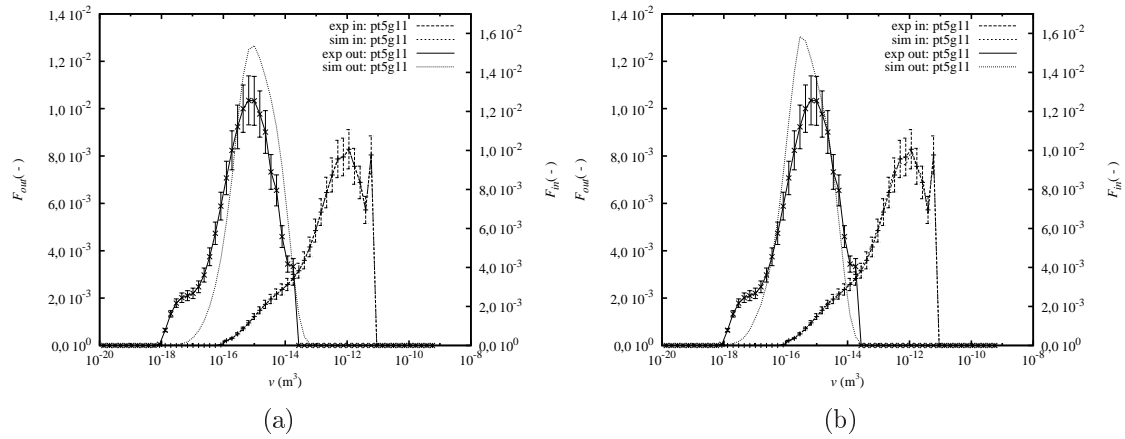


Figura A.36: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g11 (vazão média, concentração alta).

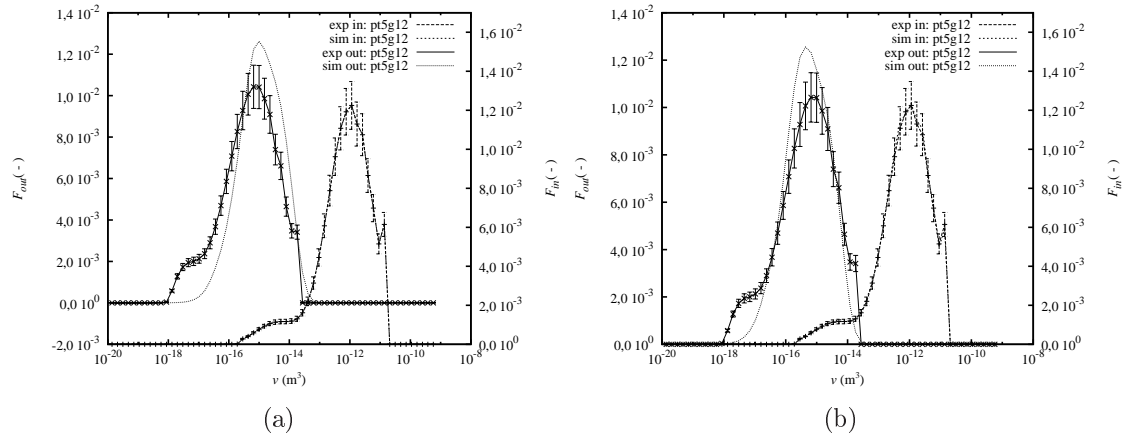


Figura A.37: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g12 (vazão média, concentração alta).

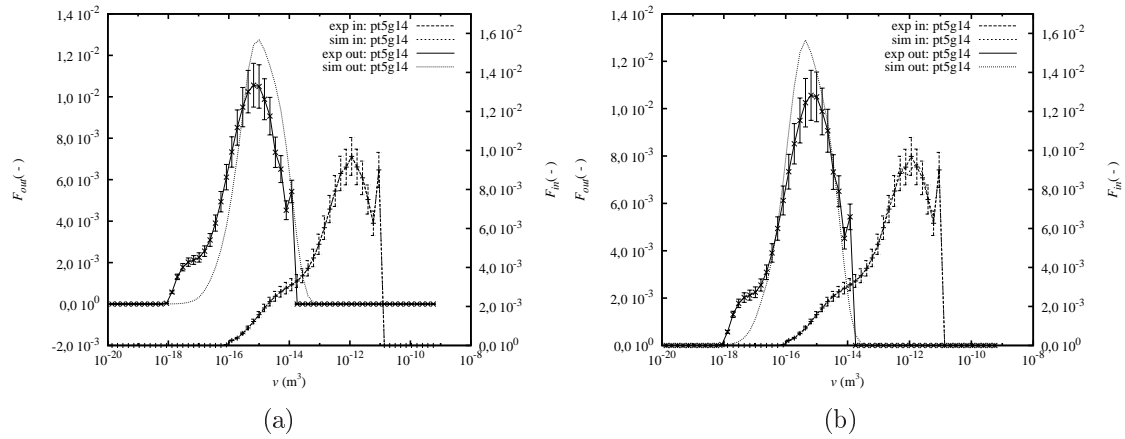


Figura A.38: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g14 (vazão média, concentração alta).

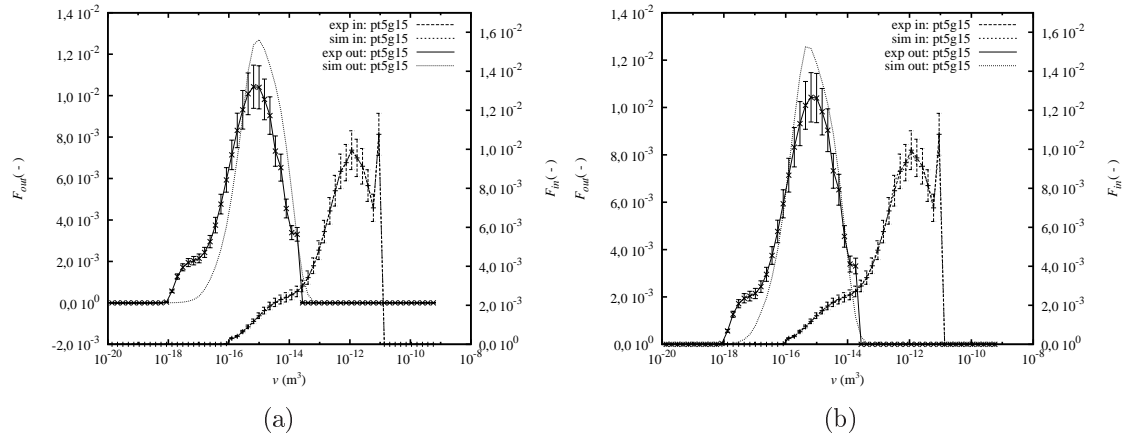


Figura A.39: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt5g15 (vazão média, concentração alta).

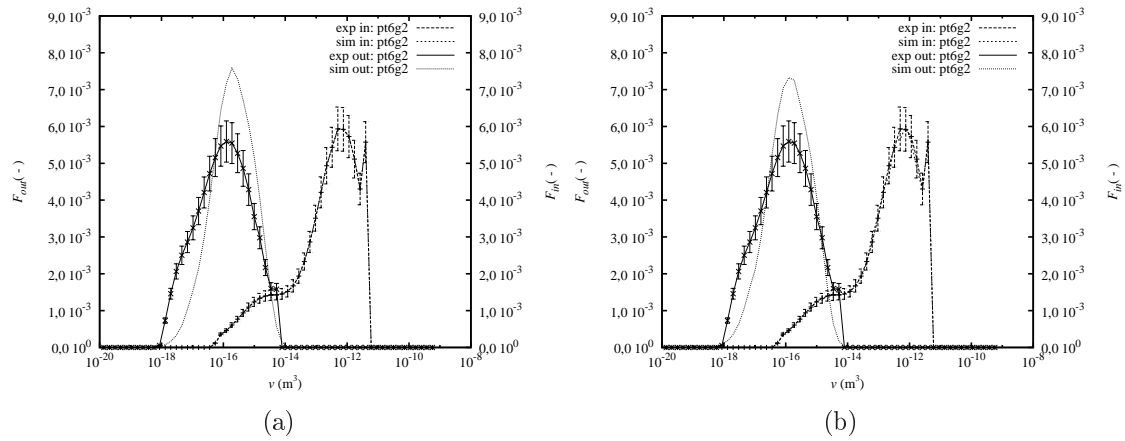


Figura A.40: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g2 (vazão alta, concentração baixa).

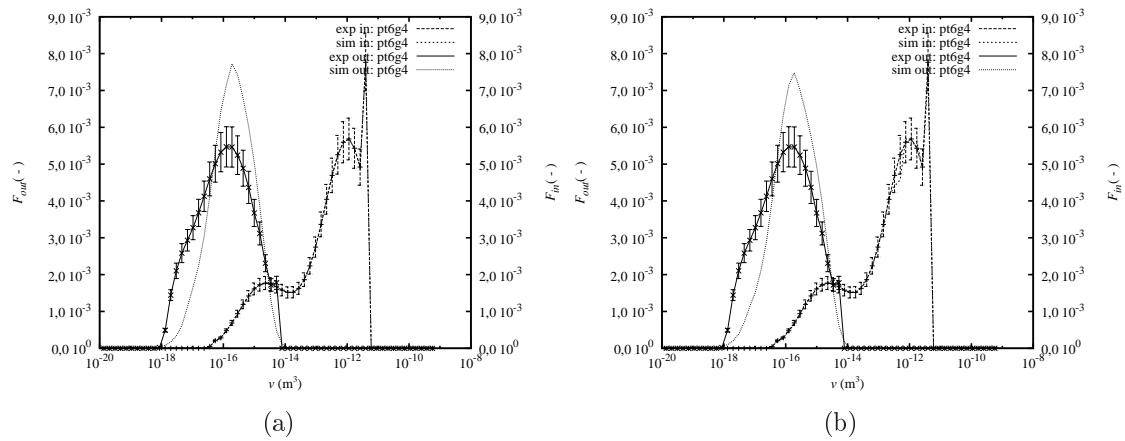


Figura A.41: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g4 (vazão alta, concentração baixa).

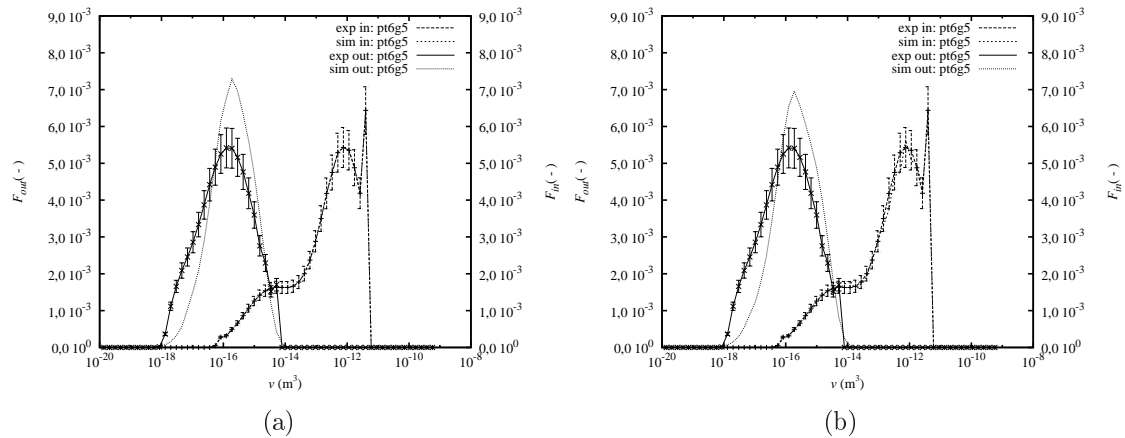


Figura A.42: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g5 (vazão alta, concentração baixa).

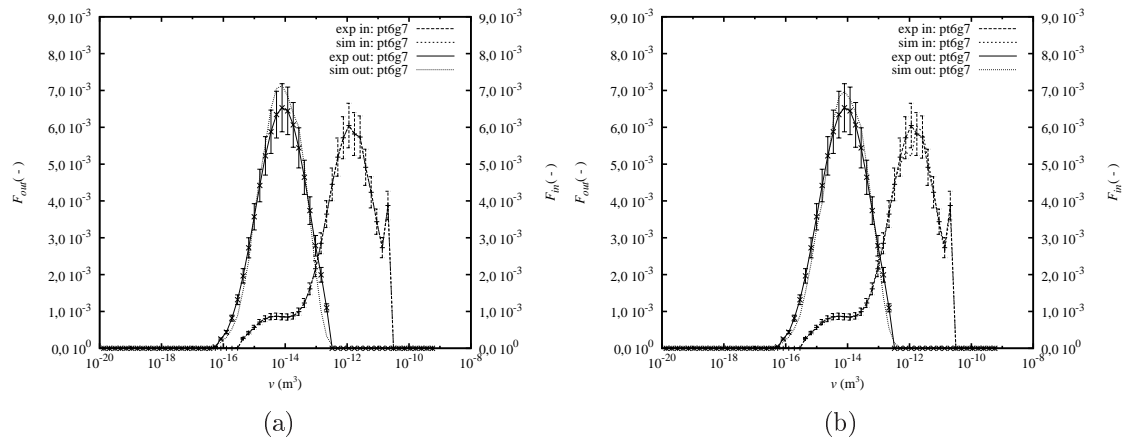


Figura A.43: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g7 (vazão baixa, concentração baixa).

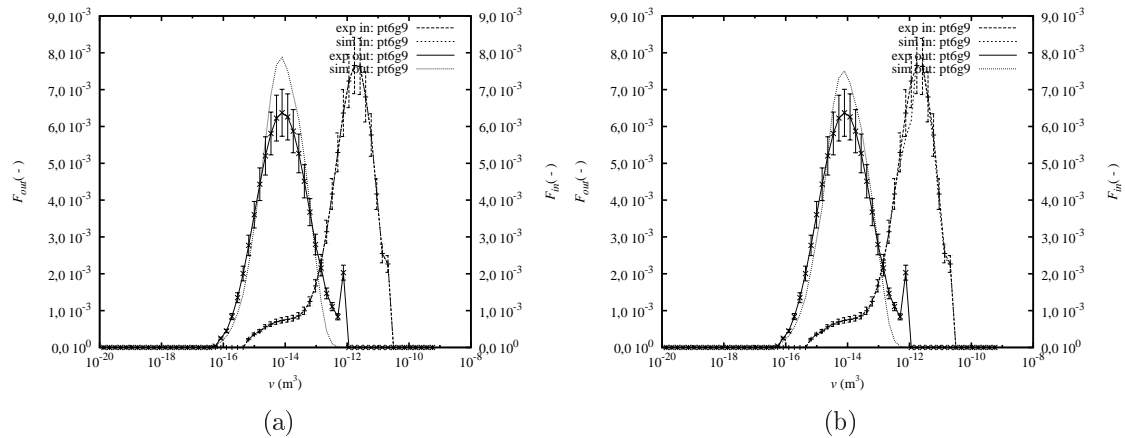


Figura A.44: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g9 (vazão baixa, concentração baixa).

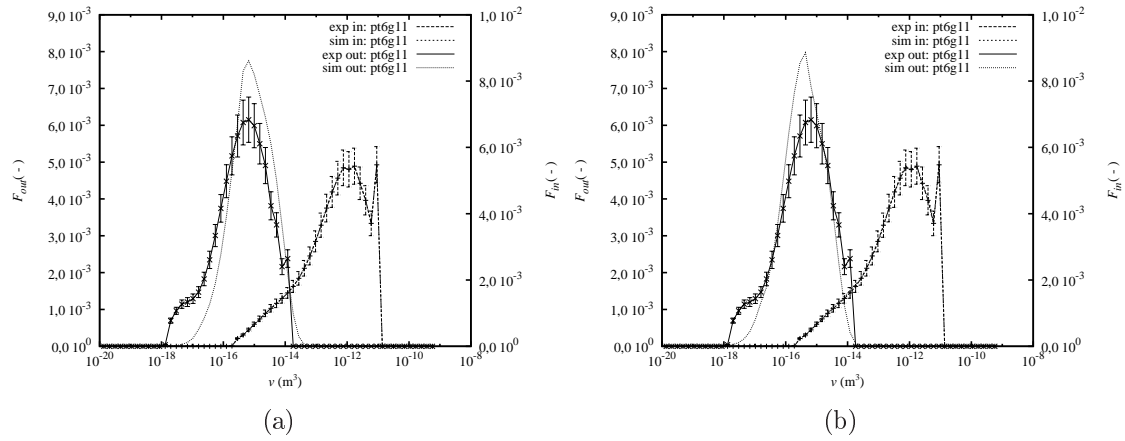


Figura A.45: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g11 (vazão média, concentração baixa).

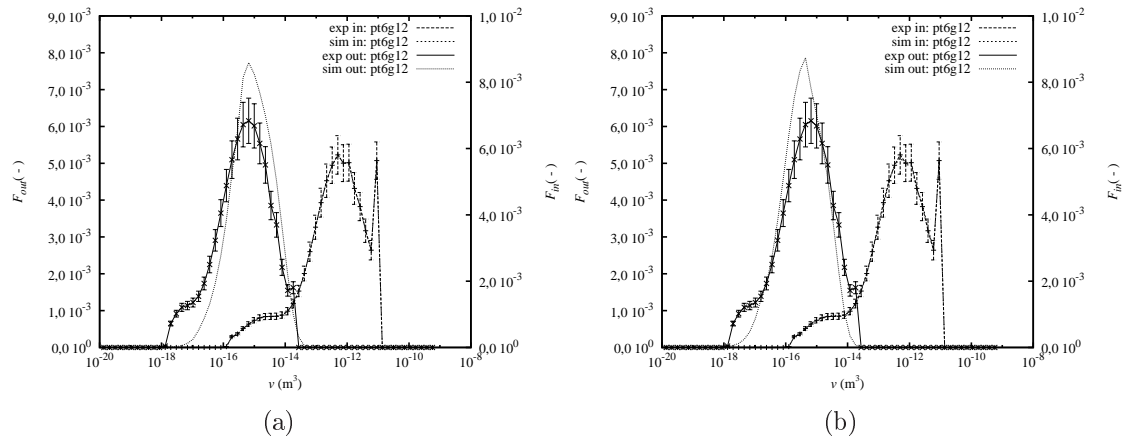


Figura A.46: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g12 (vazão média, concentração baixa).

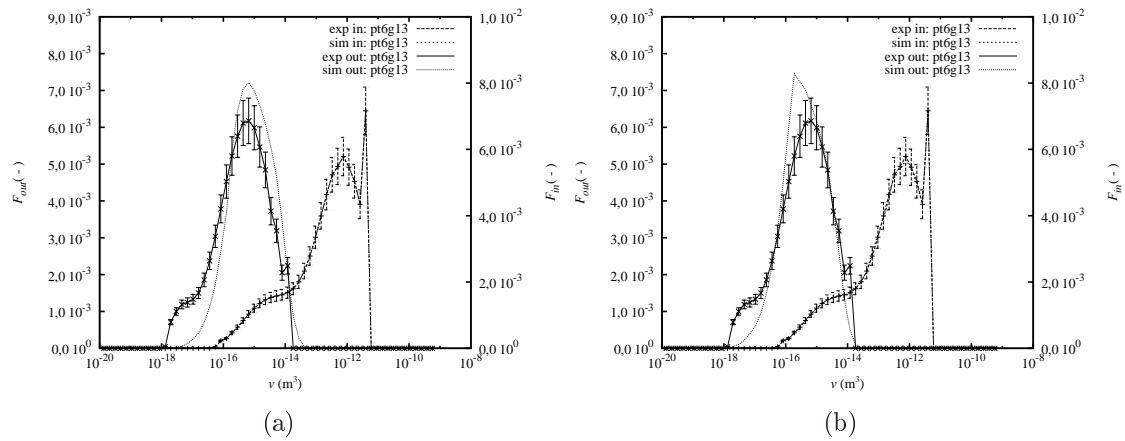


Figura A.47: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g13 (vazão média, concentração baixa).

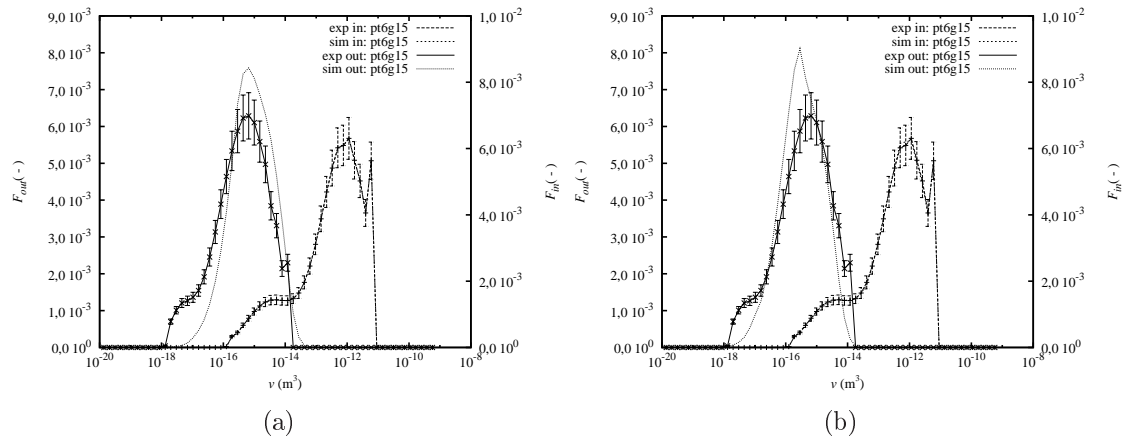


Figura A.48: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt6g15 (vazão média, concentração baixa).

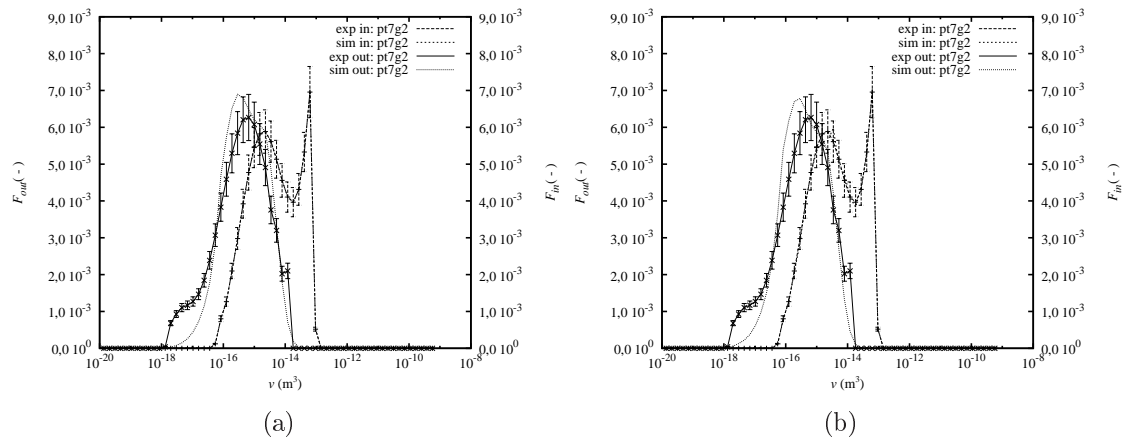


Figura A.49: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g2 (vazão alta, concentração baixa).

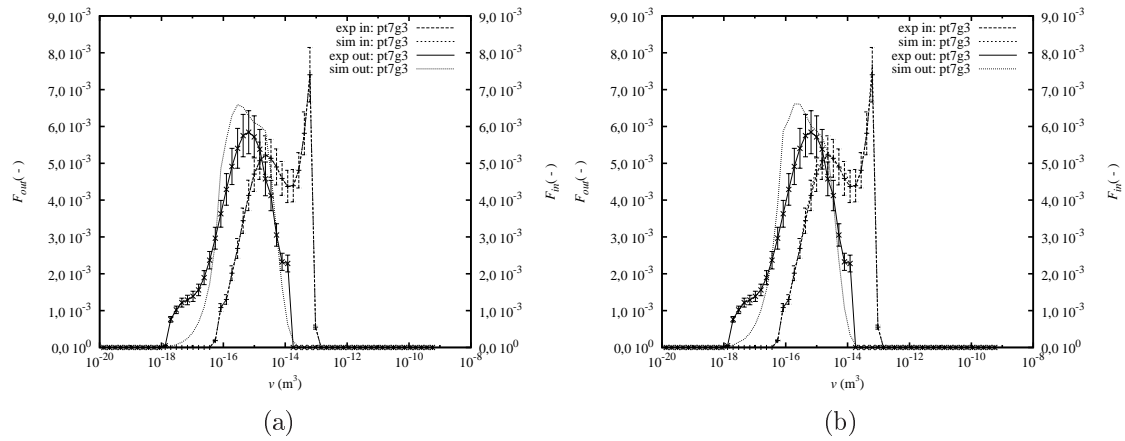


Figura A.50: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g3 (vazão alta, concentração baixa).

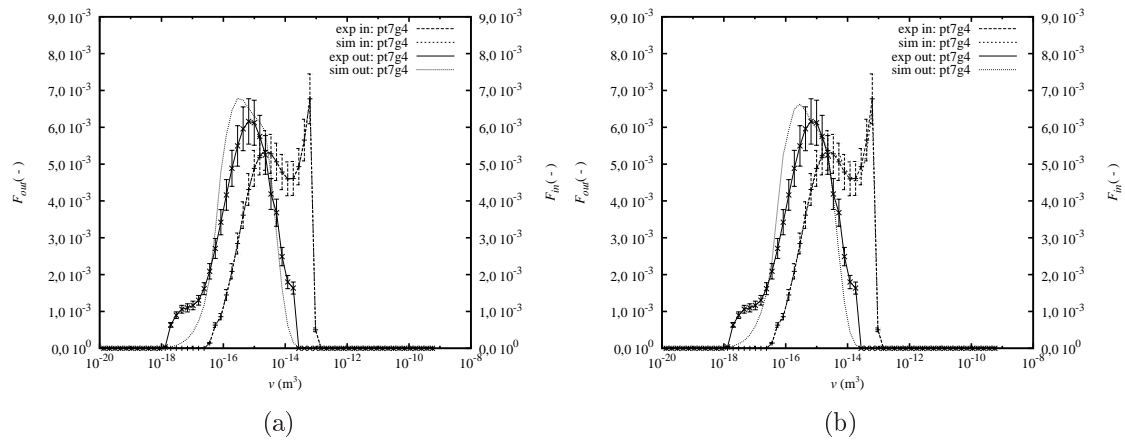


Figura A.51: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g4 (vazão alta, concentração baixa).

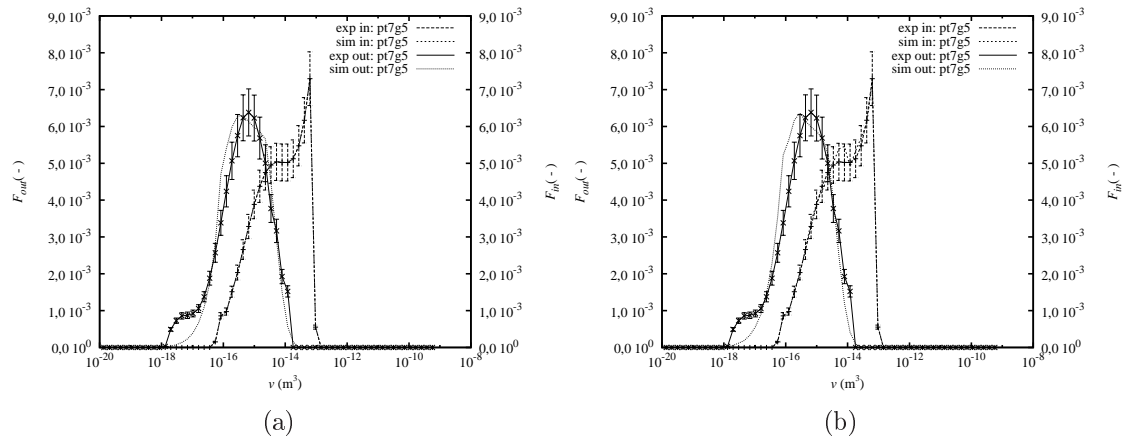


Figura A.52: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g5 (vazão alta, concentração baixa).

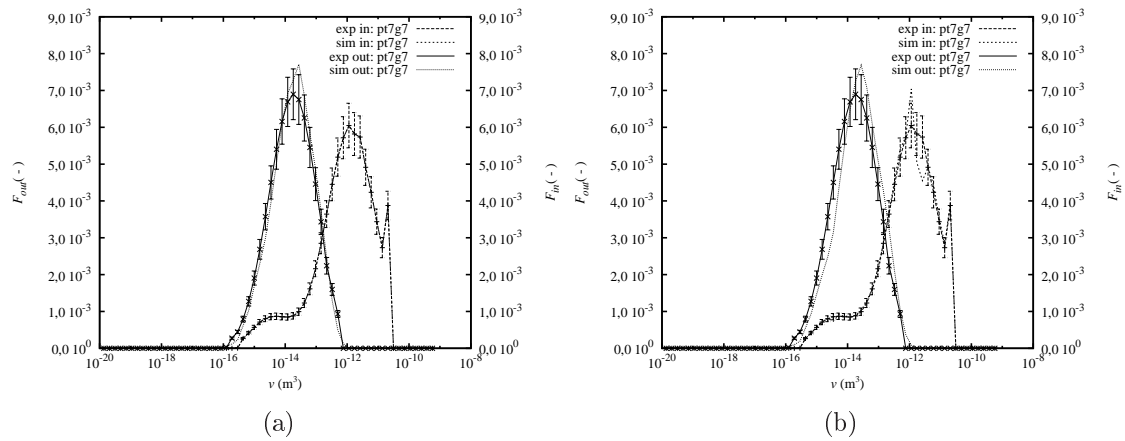


Figura A.53: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g7 (vazão baixa, concentração baixa).

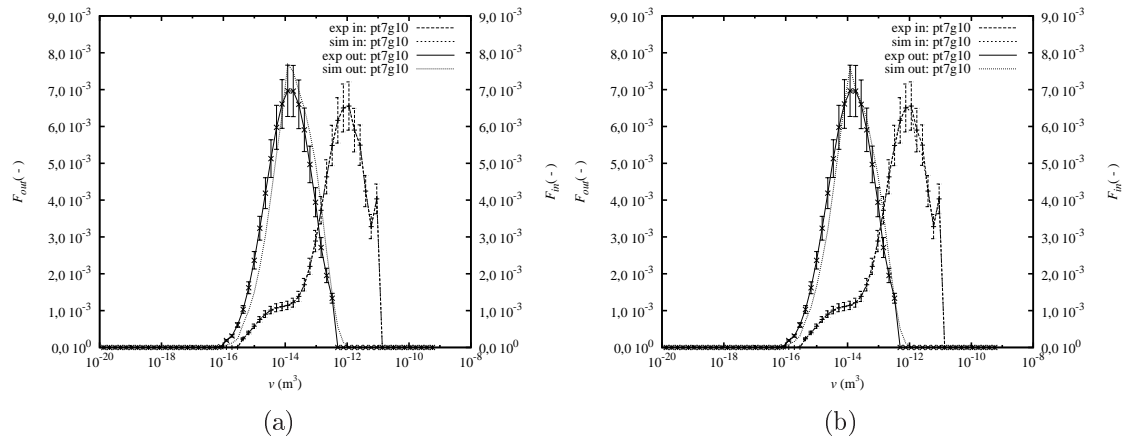


Figura A.54: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g10 (vazão baixa, concentração baixa).

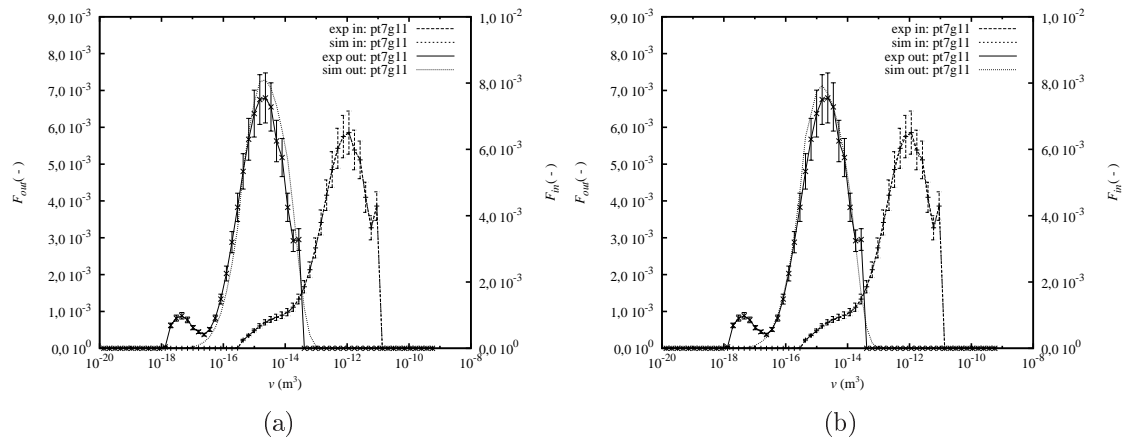


Figura A.55: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g11 (vazão média, concentração baixa).

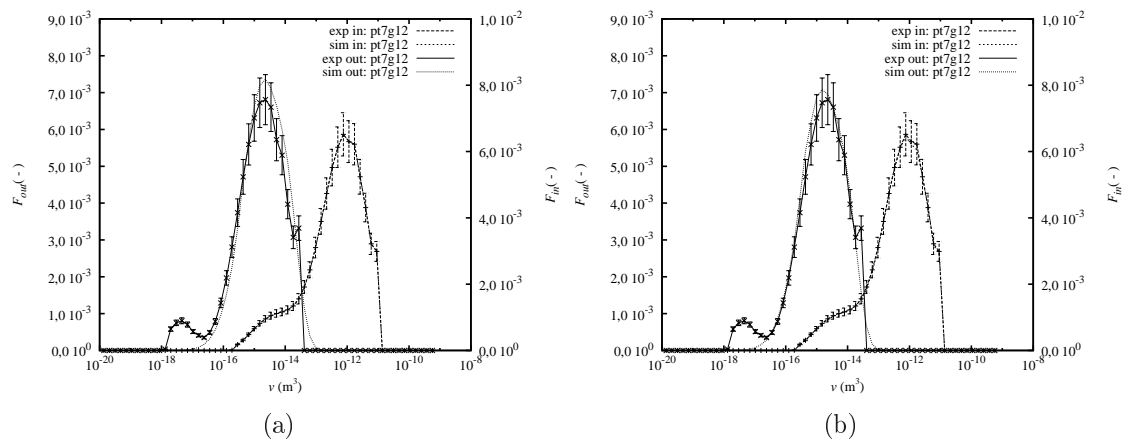


Figura A.56: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g12 (vazão média, concentração baixa).

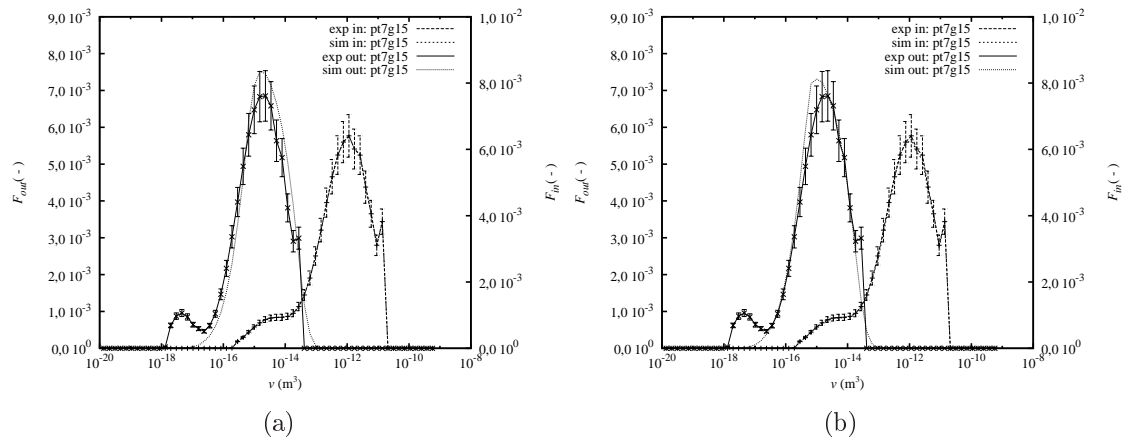


Figura A.57: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt7g15 (vazão média, concentração baixa).

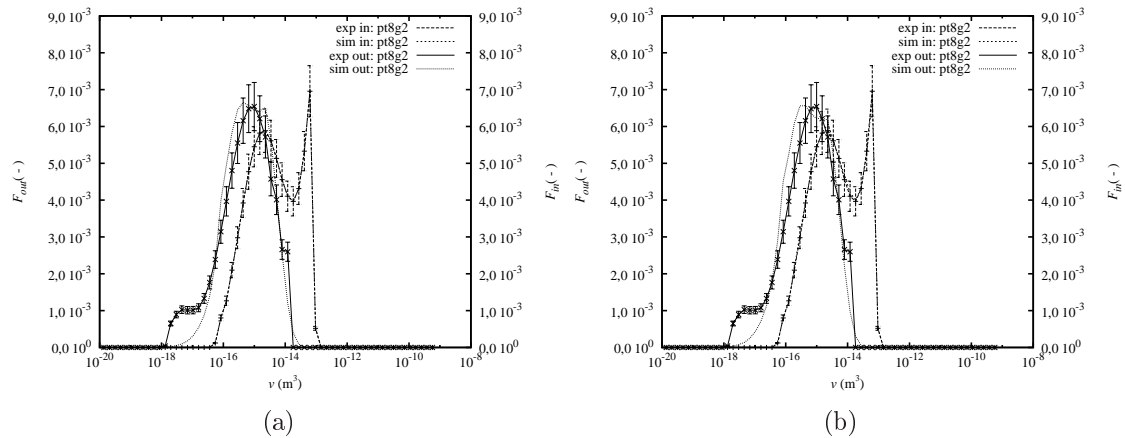


Figura A.58: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g2 (vazão alta, concentração baixa).

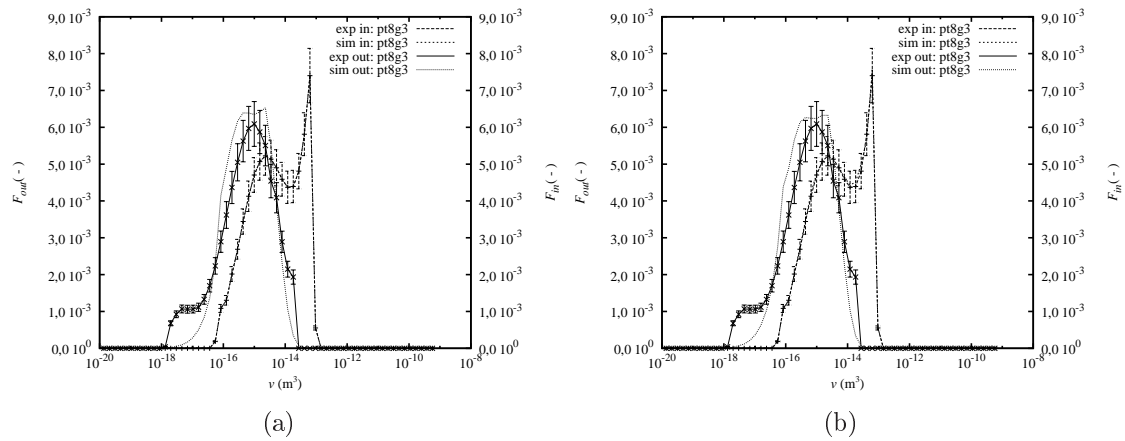


Figura A.59: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g3 (vazão alta, concentração baixa).

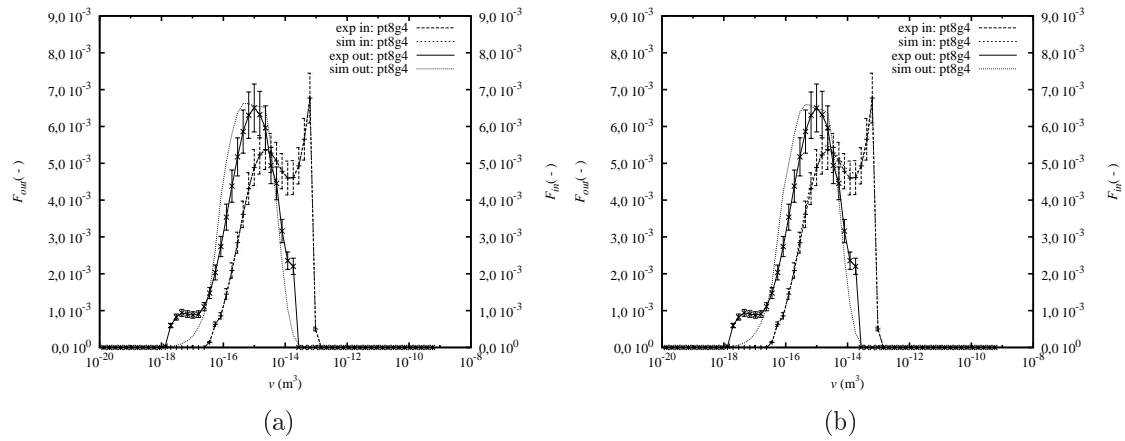


Figura A.60: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g4 (vazão alta, concentração baixa).

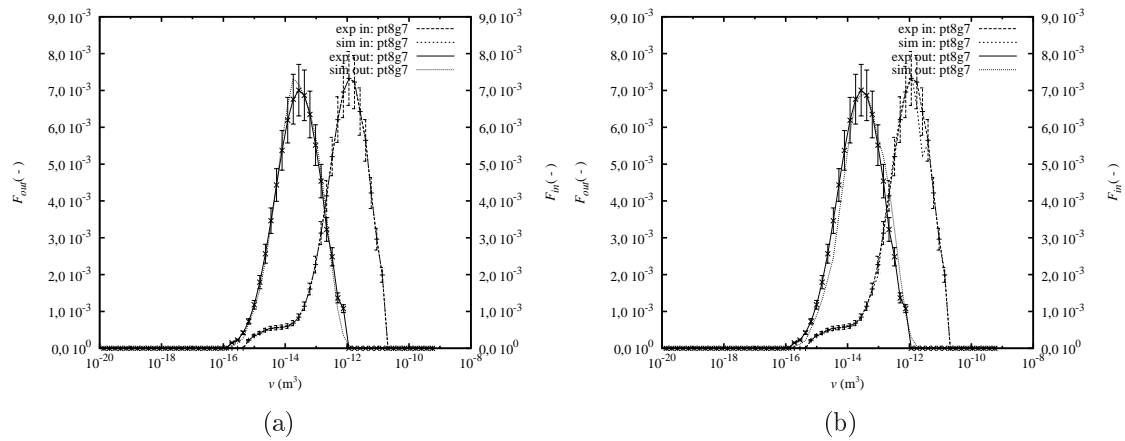


Figura A.61: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g7 (vazão baixa, concentração baixa).

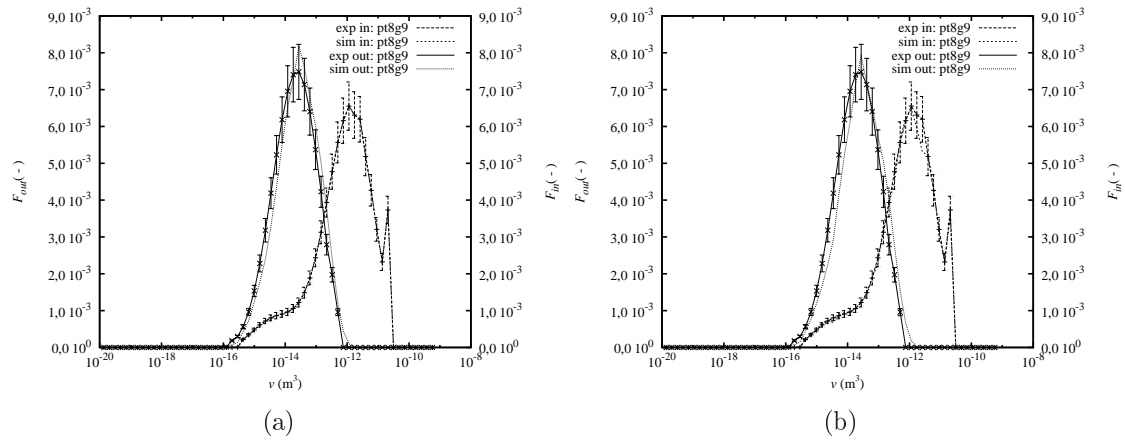


Figura A.62: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g9 (vazão baixa, concentração baixa).

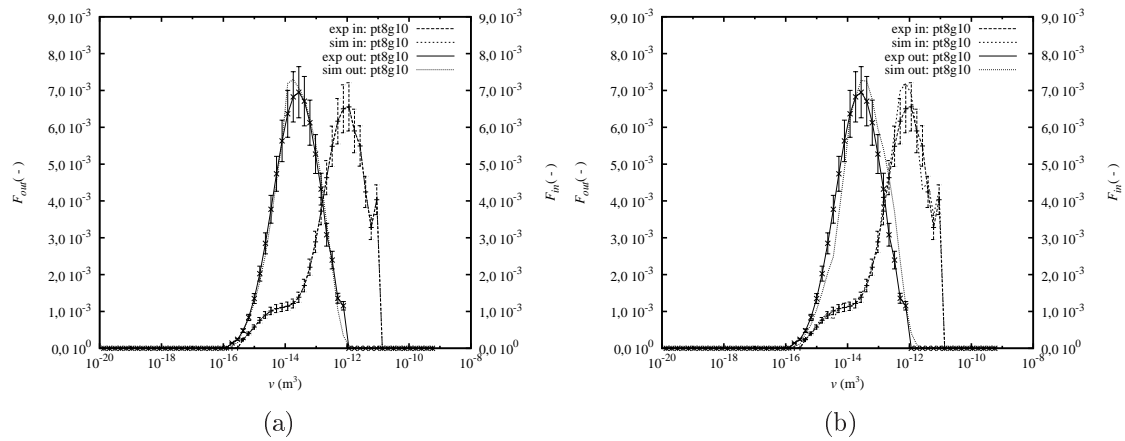


Figura A.63: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g10 (vazão baixa, concentração baixa).

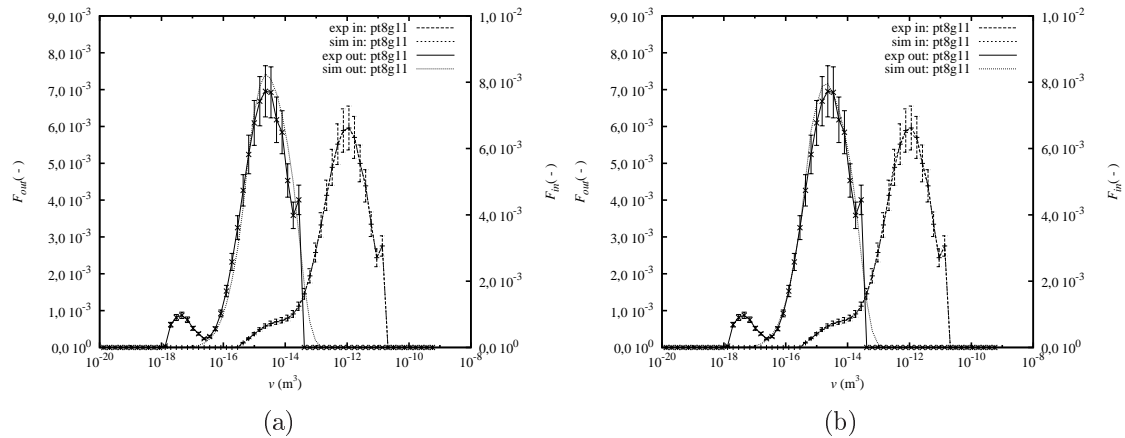


Figura A.64: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g11 (vazão média, concentração baixa).

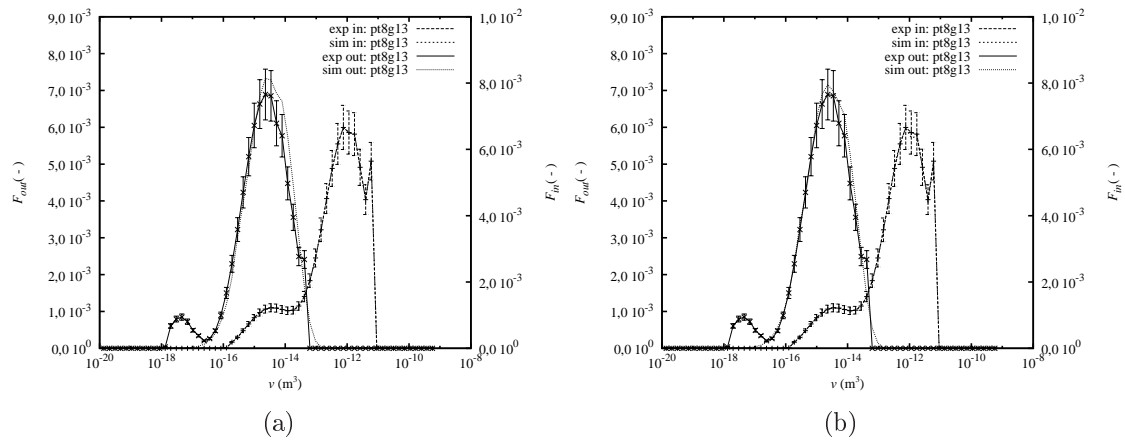


Figura A.65: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g13 (vazão média, concentração baixa).

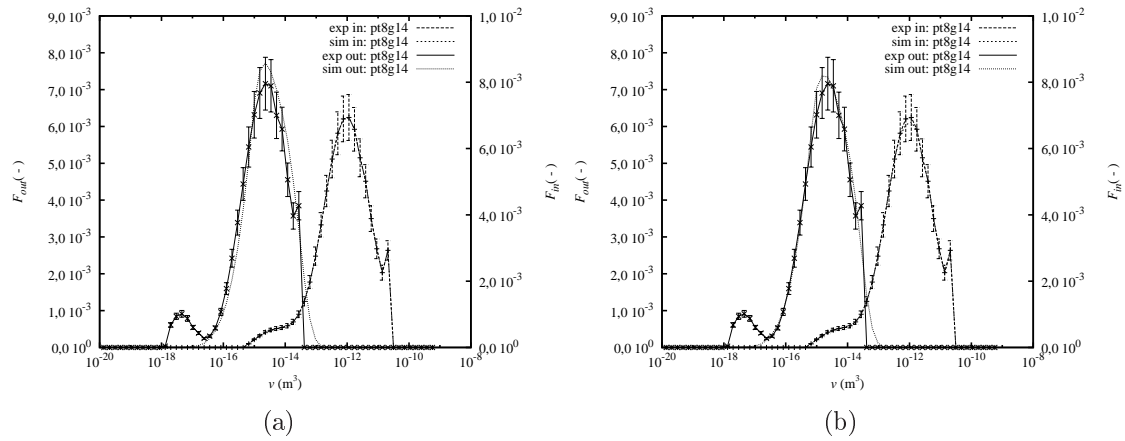


Figura A.66: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g14 (vazão média, concentração baixa).

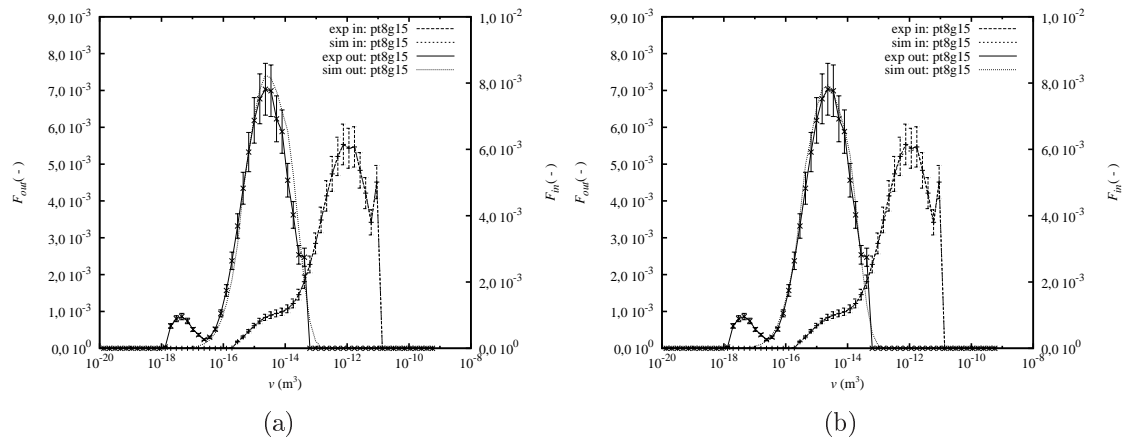


Figura A.67: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt8g15 (vazão média, concentração baixa).

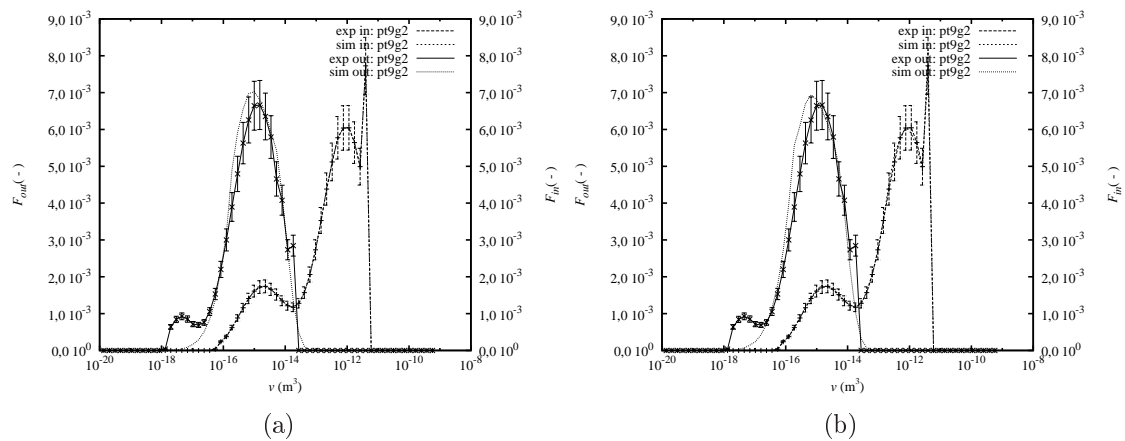


Figura A.68: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g2 (vazão alta, concentração baixa).

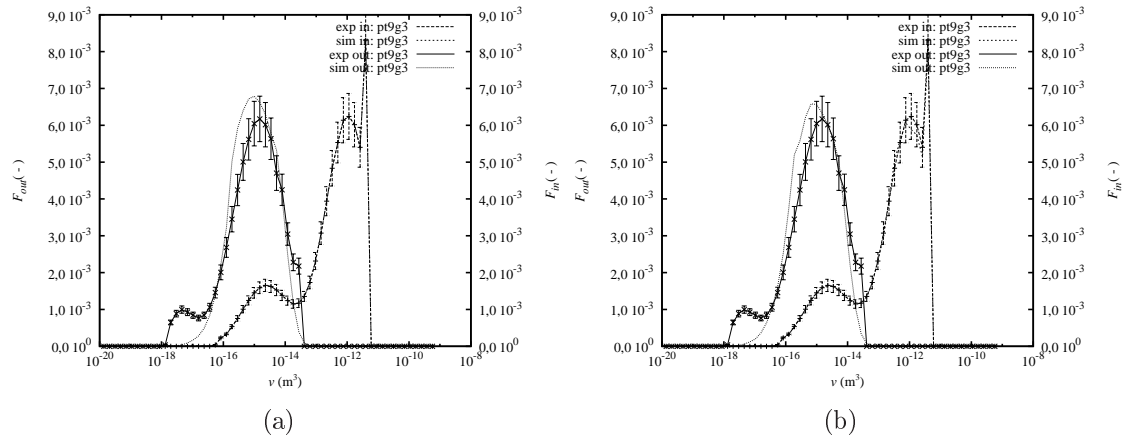


Figura A.69: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g3 (vazão alta, concentração baixa).

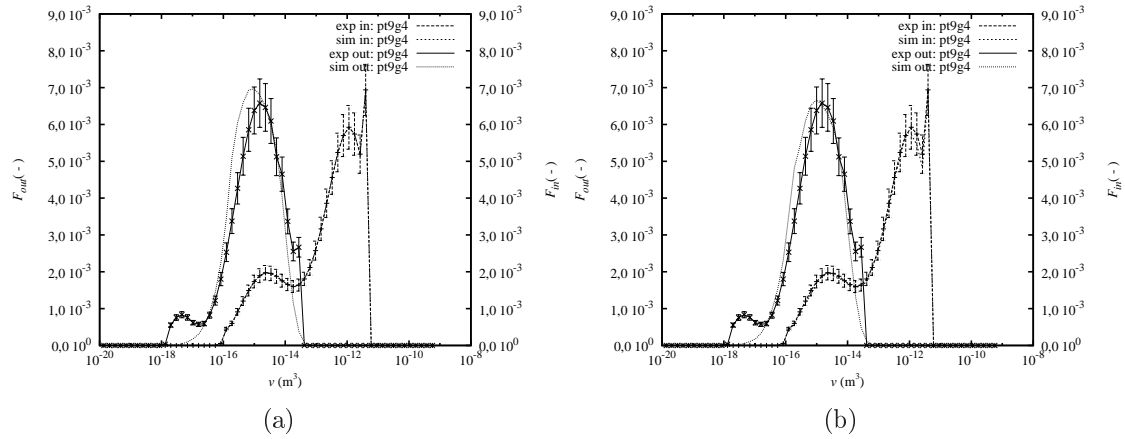


Figura A.70: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g4 (vazão alta, concentração baixa).

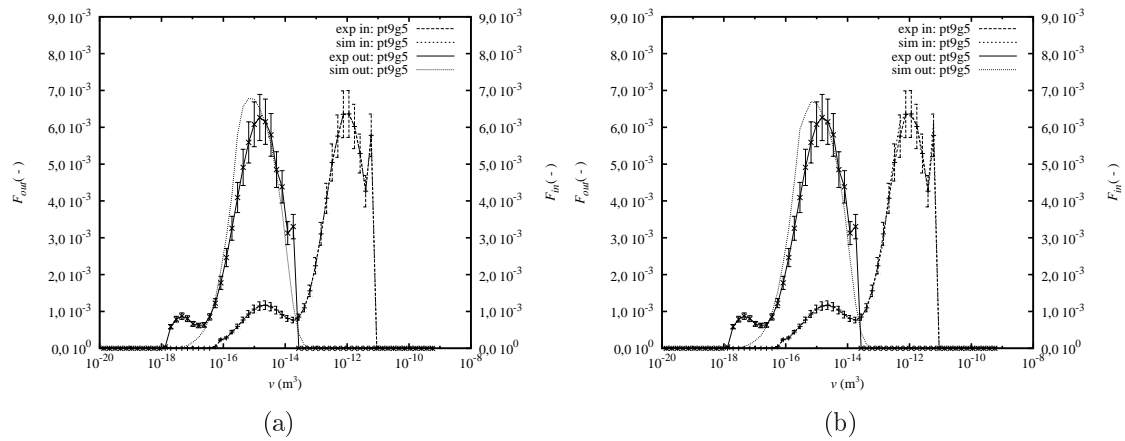


Figura A.71: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g5 (vazão alta, concentração baixa).

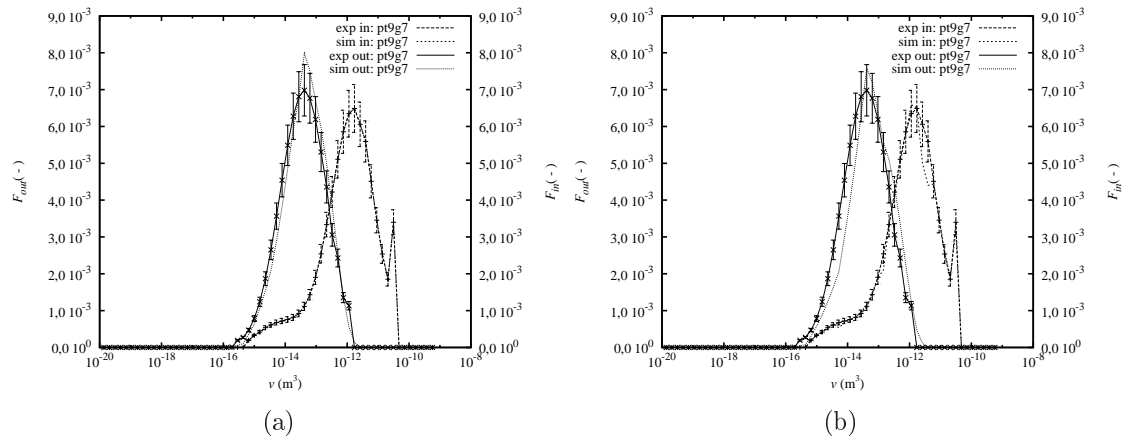


Figura A.72: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g7 (vazão baixa, concentração baixa).

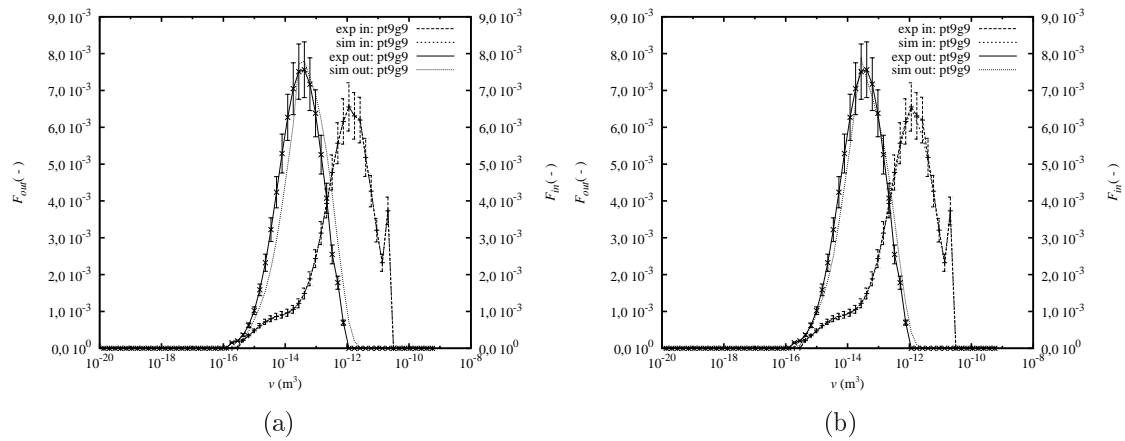


Figura A.73: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g9 (vazão baixa, concentração baixa).

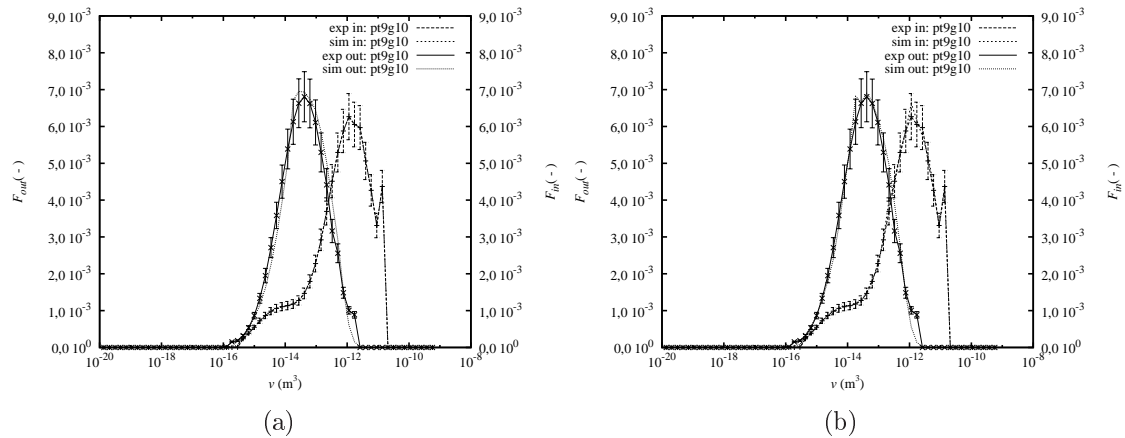


Figura A.74: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g10 (vazão baixa, concentração baixa).

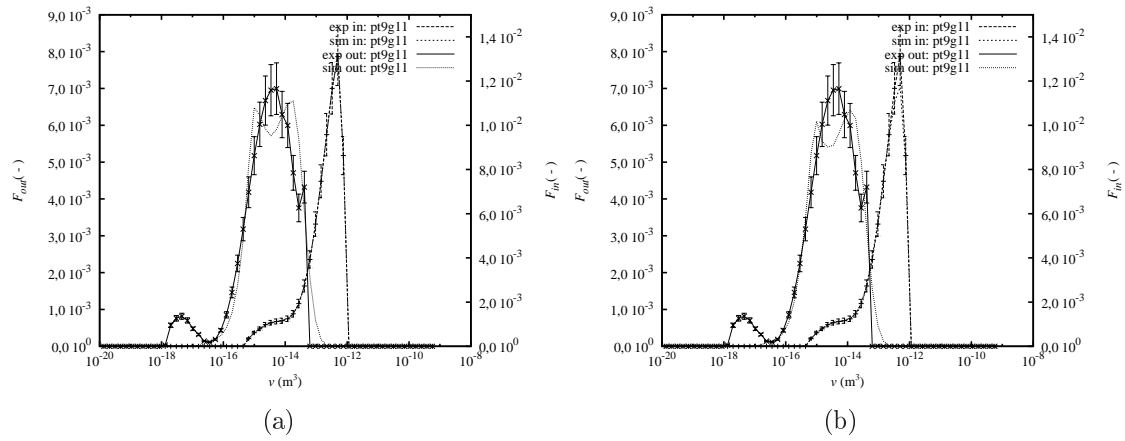


Figura A.75: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g11 (vazão média, concentração baixa).

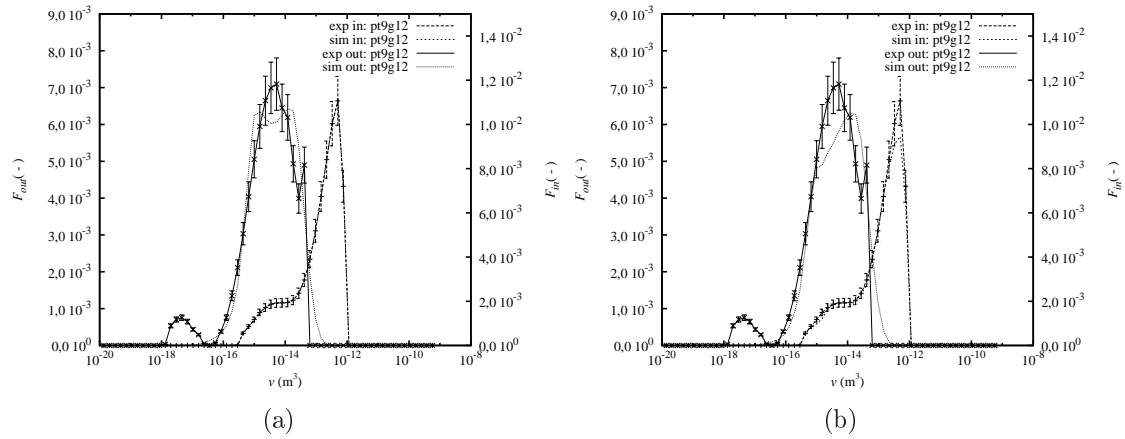


Figura A.76: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g12 (vazão média, concentração baixa).

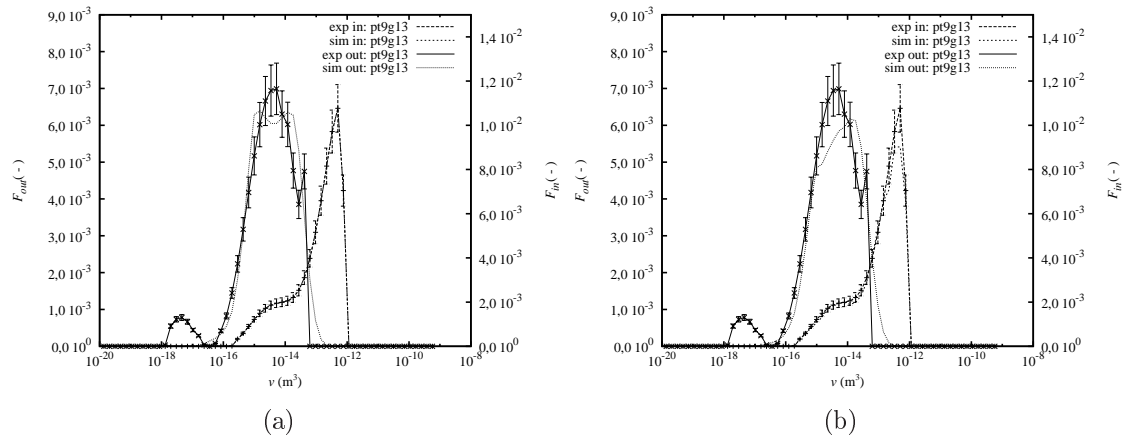


Figura A.77: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g13 (vazão média, concentração baixa).

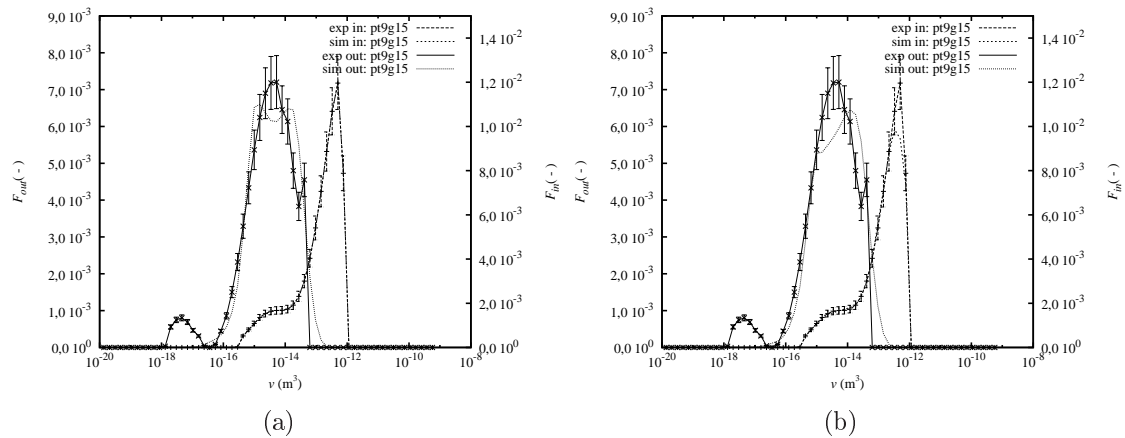


Figura A.78: Comparação entre os resultados experimentais e obtidos pela simulação da distribuição volumétrica de tamanho de gotas, (a) sem considerar e (b) considerando os erros nas variáveis explanatórias. Ponto experimental pt9g15 (vazão média, concentração baixa).