

Elsa Maria de Carvalho Ferreira Gomes

**Simulação de Regimes Permanentes e
Transitórios de Misturadores-Decantadores**

Contribuição para uma formulação fisicamente significativa

Dissertação apresentada à Universidade do Porto
para obtenção do grau de Doutor em Ciências de Engenharia

Porto, 2005

Ao Alípio,
à Carolina
e
ao Miguel

Pluralitas non est ponenda sine necessitate.

Se uma explicação simples basta, não há necessidade
de procurar outra mais complicada.

A navalha de Ockham

Agradecimentos

Quero em primeiro lugar agradecer à minha orientadora, a Doutora Lígia Ribeiro a orientação, o auxílio e toda a energia que me consegue transmitir.

Ao Doutor Carlos Madureira e à Doutora Margarida Guimarães, meus co-orientadores, agradeço a enorme disponibilidade, todo o conhecimento que me transmitiram principalmente sobre o fenómeno físico-químico, objecto de estudo deste trabalho, e a palavra sempre amiga que dá alento para continuar.

Ao Eng.º Pedro F. Regueiras agradeço a sua contribuição na análise exigente dos algoritmos e a sua amizade.

Agradeço às instituições que tornaram este trabalho possível, nomeadamente à Faculdade de Engenharia do Porto e ao Instituto Superior de Engenharia do Porto (ISEP), pelos meios de trabalho disponibilizados. Ao PRODEP agradeço o apoio financeiro e ainda ao ISEP a possibilidade do meu acesso a esta bolsa.

Agradeço também ao Gilberto e à Margarida Ribeiro, do departamento de Química do ISEP, todas as conversas sobre o decantador e o misturador e à Luísa Hoffbauer, do departamento de Matemática do ISEP, as dicas estatísticas.

Aos meus familiares e amigos mais próximos agradeço todo o apoio, ânimo e a disponibilidade. Obrigada ‘serviço de desencaminhamento’!

Ao Alípio agradeço a ajuda e o encorajamento dados com carinho ao longo de todos estes anos. Aos meus meninos agradeço toda a alegria que trazem aos meus dias.

Resumo

O projecto e controlo de baterias de misturadores-decantadores é importante para a viabilidade técnica e económica de processos industriais de extracção líquido-líquido. A experimentação directa com estes equipamentos nem sempre é praticável, dada a sua complexidade e custo. Em alternativa, a simulação por computador permite prever e dimensionar estes equipamentos, reduzindo os custos.

Neste trabalho desenvolvemos um modelo dinâmico da unidade de decantação de um sistema de extracção misturador-decantador, com capacidade de descrição de regimes transitórios, incluindo os fenómenos hidrodinâmicos de coalescência gota-gota e gota-interface e (eventualmente) os fenómenos de transferência de massa por estes condicionados para o decantador gravitacional longo (*shallow layer settler*). Partindo do modelo de regime permanente desenvolvido por Ruiz para o decantador, desenvolveu-se um programa sequencial capaz de simular também um sistema misturador-decantador em regime transitório. Dado o carácter não-linear do problema a estratégia adoptada foi essencialmente numérica.

O algoritmo desenvolvido mostrou-se capaz de simular o comportamento da banda de dispersão em estado transiente. Por outro lado, os resultados obtidos por este algoritmo quando o estado estacionário é alcançado estão de acordo com resultados anteriormente publicados para o estado estacionário.

Este trabalho permitiu a detecção de possíveis limitações a nível conceptual no algoritmo para o regime transitório que haviam sido introduzidas pelo modelo de regime permanente. Para ultrapassar estas limitações propusemos um modelo matemático inovador, usando uma formulação cinética, em que o movimento da dispersão é modelado pela gravidade.

Palavras-chave: Simulação de Sistemas Líquido-Líquido; Misturadores-Decantadores; Decantador Gravitacional Longo; Simulação Numérica.

Abstract

The design and control of mixer-settler batteries is very important for the technical and economical viability of the industrial processes of liquid-liquid extraction. Direct experimentation with these equipments is not always feasible, due to their complexity and costs. Computer simulation allows predicting the behavior and optimizing the design of these types of equipments, reducing the costs.

In this work we develop a dynamical model for the settler unit of a liquid-liquid system, able to describe the transient state, including hydrodynamic phenomena of drop-drop and drop-interface coalescence and eventually the mass transfer phenomena for the shallow layer settler.

Starting from a steady-state model developed by Ruiz for the settler, we developed a sequential algorithm able to simulate also the transient state of a mixer-settler system. Given the non-linear character of the problem, the adopted strategy was essentially numerical.

The algorithm developed was able to simulate the band thickness for the transient state. On the other hand, the results obtained with this algorithm when the steady-state is reached are in agreement with the results previously published for the steady-state.

During this work we detected possible conceptual limitations of this algorithm introduced by the model of the steady-state. To overcome these problems, we have proposed a new dynamic model using a kinetic formulation in which the movement of the dispersion is modeled as caused by gravity.

Keywords: Liquid-Liquid Systems Simulation; Mixer-Settlers; Shallow Layer Gravity Settler; Numeric Simulation.

Resumé

Le projet et le contrôle de batteries de mélangeurs-décanteurs sont importants pour la viabilité technique et économique de processus industriels d'extraction liquide-liquide. L'expérimentation directe avec ces équipements n'est pas toujours faisable, à cause de sa complexité et de son coût. Par contre, la simulation par ordinateur permet de prévoir et de mesurer ces équipements, réduisant les coûts.

Dans ce travail, nous développons un modèle dynamique de l'unité de décantation d'un système d'extraction mélangeur-décanteur, avec capacité de description de régimes transitoires, y compris les phénomènes hydrodynamiques de coalescence des gouttes et ceux des gouttes avec l'interface et (éventuellement) les phénomènes de transfert de matière conditionné par ceux-ci, pour le décanteur de la gravité long. En partant du modèle de régime permanent développé par Ruiz pour le décanteur, nous développons un programme séquentiel capable de simuler aussi un système mélangeur-décanteur dans le régime transitoire. Dû au caractère non linéaire du problème, la stratégie adoptée a été essentiellement numérique.

L'algorithme développé s'est montré capable de simuler le comportement de la bande de dispersion dans l'état transitoire. D'autre part, les résultats obtenus par cet algorithme quand l'état stationnaire est atteint sont conformes à des résultats précédemment publiés pour l'état stationnaire.

Ce travail a permis la détection de possibles limitations à niveau conceptuel dans l'algorithme pour le régime transitoire qui ont été introduites par le modèle de régime permanent. Pour dépasser ces limitations, nous proposons un modèle mathématique innovateur, utilisant une formulation cinétique suivant laquelle le mouvement de la dispersion est formé par la gravité.

Mots clés: Simulation de Systèmes Liquide-Liquide; Mélangeurs-Décanteurs; Décanteur de la Gravité Long; Simulation Numérique.

Sumário

1. INTRODUÇÃO	1.1
1.1 ENQUADRAMENTO	1.4
1.2 OBJECTIVO	1.4
1.3 JUSTIFICAÇÃO E MOTIVAÇÃO	1.5
1.4 CONTRIBUIÇÕES	1.6
1.5 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO.....	1.7
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	2.1
2.1 O MISTURADOR	2.3
2.1.1 Hidrodinâmica.....	2.4
2.1.2 Transferência de massa	2.7
2.2 O DECANTADOR	2.8
2.2.1 Modelação matemática.....	2.8
2.2.2 Fenómeno de coalescência	2.14
3. O MODELO MATEMÁTICO.....	3.1
3.1 DESCRIÇÃO DO SISTEMA.....	3.3
3.2 O MODELO MISTURADOR-DECANTADOR.....	3.5
3.3 O MISTURADOR	3.6
3.3.1 A divisão das gotas	3.7
3.3.2 A coalescência das gotas	3.8
3.3.3 Transferência de massa	3.8
3.4 O DECANTADOR	3.9
3.4.1 A coalescência	3.13
3.4.2 Principais hipóteses do modelo	3.14
3.5 ALTERAÇÕES AO MODELO DE RUIZ	3.16
3.5.1 Modelo cinemático da banda de dispersão.....	3.16
4. O ALGORITMO MISTURADOR-DECANTADOR.....	4.1
4.1 ABORDAGEM NUMÉRICA PARA O DECANTADOR	4.3
4.1.1 Coalescência com a interface	4.6
4.1.2 Coalescência entre gotas	4.6
4.1.3 Cálculo da espessura H	4.8
4.1.4 Outras abordagens	4.8

4.2	O ALGORITMO MISTURADOR-DECANTADOR PARA ESTADO ESTACIONÁRIO.....	4.9
4.2.1	<i>Inicialização do sistema</i>	4.10
4.2.2	<i>Simulação do misturador</i>	4.11
4.2.3	<i>Simulação do misturador-decantador</i>	4.13
4.3	O ALGORITMO MISTURADOR-DECANTADOR PARA ESTADO TRANSITÓRIO	4.16
4.3.1	<i>Fluxograma</i>	4.16
4.3.2	<i>Estrutura de dados para a implementação do modelo</i>	4.19
4.3.3	<i>Preenchimento da estrutura de dados</i>	4.21
4.4	CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA	4.23
4.5	FONTES DE ERRO	4.25
4.5.1	<i>Erros de truncatura</i>	4.26
4.5.2	<i>Erros de arredondamento</i>	4.28
4.6	CRITÉRIOS DE PARAGEM	4.29
4.6.1	<i>No misturador-decantador</i>	4.29
5.	ANÁLISE DOS RESULTADOS	5.1
5.1	O MISTURADOR	5.3
5.2	O MISTURADOR-DECANTADOR PARA O ESTADO ESTACIONÁRIO	5.8
5.2.1	<i>Primeiro conjunto de dados experimentais</i>	5.10
5.2.2	<i>Segundo conjunto de dados experimentais</i>	5.23
5.2.3	<i>A variação do tamanho das gotas no decantador</i>	5.29
5.3	O MISTURADOR-DECANTADOR PARA ESTADO TRANSITÓRIO.....	5.31
5.3.1	<i>Primeiro conjunto de dados experimentais</i>	5.31
5.3.2	<i>Segundo conjunto de dados experimentais</i>	5.42
5.3.3	<i>Limitações do algoritmo</i>	5.45
5.4	ALGORITMO MODIFICADO	5.54
5.5	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	5.56
6.	ANÁLISE DA PRECISÃO NUMÉRICA DOS RESULTADOS.....	6.1
6.1	DISCRETIZAÇÃO NO VOLUME DAS GOTAS	6.3
6.2	DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO	6.11
6.3	MÉTODO NUMÉRICO	6.15
7.	O NOVO MODELO PARA O DECANTADOR	7.1
7.1	O MODELO MATEMÁTICO.....	7.3
7.2	ABORDAGEM NUMÉRICA	7.6
7.2.1	<i>Alimentação</i>	7.10
7.2.2	<i>Transferência longitudinal</i>	7.10

7.2.3	<i>Coalescência com a interface</i>	7.11
7.2.4	<i>Coalescência entre gotas</i>	7.12
7.2.5	<i>Drenagem de fase contínua</i>	7.13
7.2.6	<i>Cálculo do hold up</i>	7.13
7.2.7	<i>Cálculo da altura H</i>	7.14
7.3	IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO	7.14
8.	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	8.1
8.1	CONCLUSÕES	8.3
8.2	PERSPECTIVAS FUTURAS	8.8

Índice de Figuras

Figura 3.1: Decantador gravitacional horizontal	3.4
Figura 3.2: Esquema da banda de dispersão	3.9
Figura 4.1: Dados de entrada	4.11
Figura 4.2: Algoritmo misturador-decantador para regime estacionário.....	4.14
Figura 4.3: Rotina Settler.....	4.15
Figura 4.4: Algoritmo de simulação para regime transitório.....	4.17
Figura 4.5: Cunha no regime estacionário	4.18
Figura 4.6: Cunha em regime transitório – 1º passo no tempo.....	4.18
Figura 4.7: Cunha em regime transitório – 2º passo no tempo.....	4.19
Figura 4.8: Cunha em regime transitório – n-ésimo passo no tempo	4.19
Figura 4.9: Matriz M para o 1º passo no tempo.....	4.22
Figura 4.10: Matriz M para o 2º passo no tempo.....	4.22
Figura 4.11: Matriz M para o 3º passo no tempo.....	4.22
Figura 4.12: Matriz M para o 4º passo no tempo.....	4.22
Figura 4.13: Matriz M para o 6º passo no tempo.....	4.23
Figura 5.1: Evolução do hold up no tempo.....	5.5
Figura 5.2: Variação das frequências de interacção no tempo	5.6
Figura 5.3: Distribuição das gotas $\text{volume} \times \text{concentração}$	5.7
Figura 5.4: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 1).....	5.13
Figura 5.5: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 2).....	5.13
Figura 5.6: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 3).....	5.14
Figura 5.7: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 4).....	5.14
Figura 5.8: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 5).....	5.15
Figura 5.9: Volume médio das gotas no decantador (experiência 1).....	5.18
Figura 5.10: Volume médio das gotas no decantador (experiência 2).....	5.19
Figura 5.11: Volume médio das gotas no decantador (experiência 3).....	5.19
Figura 5.12: Volume médio das gotas no decantador (experiência 4).....	5.20
Figura 5.13: Volume médio das gotas no decantador (experiência 5).....	5.20
Figura 5.14: Misturador-decantador do laboratório do ISEP	5.24
Figura 5.15: Espessura da banda de dispersão no decantador (condições da exp.1).....	5.26

Figura 5.16: Espessura da banda de dispersão no decantador (condições da exp.2)	5.27
Figura 5.17: Frequência relativa dos tamanhos das gotas à entrada do decantador ($X=0$) para 30 classes de discretização.	5.29
Figura 5.18: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador ($X=50$ cm) para 30 classes de discretização.	5.30
Figura 5.19: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador ($X=89$ cm) para 30 classes de discretização.	5.30
Figura 5.20: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da exp 1 (curva superior) à exp 3 (curva inferior) ao fim de 3500 s.....	5.32
Figura 5.21: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da exp 4 (curva superior) à exp 5 (curva inferior) ao fim de 3500 s.....	5.33
Figura 5.22: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da exp 5 (curva inferior) à exp 4 (curva superior) ao fim de 3500 s.....	5.33
Figura 5.23: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=10$ cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.	5.34
Figura 5.24: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=10$ cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.....	5.35
Figura 5.25: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=50$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.	5.36
Figura 5.26: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=50$ cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.....	5.36
Figura 5.27: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=89$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.	5.37
Figura 5.28: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=89$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.....	5.38

Figura 5.29: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.	5.39
Figura 5.30: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.	5.39
Figura 5.31: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.	5.40
Figura 5.32: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.	5.40
Figura 5.33: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=89 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.	5.41
Figura 5.34: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=89 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.	5.41
Figura 5.35: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da experiência 2 (curva inferior) à experiência 1 (curva superior), ao fim de 1670 s.	5.42
Figura 5.36: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da experiência 1 (curva superior) à experiência 2 (curva inferior), ao fim de 3300 s.	5.43
Figura 5.37: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 3300 s: da experiência 1 (estacionário) à experiência 2.	5.44
Figura 5.38: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 3300 s: da experiência 1 (estacionário) à experiência 2.	5.45

Figura 5.39: A banda de dispersão para o transiente ao longo do tempo (3500 s) quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3	5.46
Figura 5.40: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 3500s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.	5.47
Figura 5.41: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 3500s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.	5.47
Figura 5.42: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 3500s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.	5.48
Figura 5.43: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.	5.48
Figura 5.44: A banda de dispersão para o transiente ao longo do tempo (2000 s) quando se reduz o hold up 10 vezes.....	5.49
Figura 5.45: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 1000s, quando se reduz o hold up 10 vezes.	5.50
Figura 5.46: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 1000s, quando se reduz o hold up 10 vezes.	5.50
Figura 5.47: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm para 100 s, 200 s e 300 s, quando se reduz o hold up 10 vezes.	5.51
Figura 5.48: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm para 100 s, 200 s e 300 s, quando se reduz o hold up 10 vezes.	5.51
Figura 5.49: Banda de dispersão para o primeiro estado estacionário e para um, dez, trinta, 50 e cem segundos: da experiência 2 à experiência 1.....	5.54
Figura 5.50: Comparação das espessuras da banda de dispersão no decantador obtidas pelos programas SM-D e SM-DM (condições da exp.1 – 2º conjunto de dados).	5.55
Figura 5.51: Comparação das espessuras da banda de dispersão no decantador obtidas pelos programas SM-D e SM-DM (condições da exp.2 - 2º conjunto de dados).	5.55

Figura 5.52: Comparação das espessuras da banda de dispersão no decantador obtidas pelos programas SM-D e SM-DM (condições da exp.5 - 1º conjunto de dados).	5.56
Figura 6.1: Frequência relativa dos tamanhos das gotas à entrada do decantador ($X=0$) para 56 classes de discretização.	6.4
Figura 6.2: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador ($X=50$ cm) para 56 classes de discretização.	6.5
Figura 6.3: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador ($X=89$ cm) para 56 classes de discretização.	6.5
Figura 6.4: Espessura da banda de dispersão no decantador para as diferentes classes de discretização (condições da experiência 4).	6.6
Figura 6.5: Volume médio das gotas no decantador para as diferentes classes de discretização (experiência 4).	6.8
Figura 6.6: Comparação das médias dos desvios obtidas para a espessura da banda e volumes médios das gotas para as várias classes.	6.11
Figura 6.7: Influência do passo no tempo na espessura da banda ao fim de 500 segundos de cálculo (experiência 4 à experiência 5).	6.14
Figura 6.8: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para a espessura da banda de dispersão (condições da experiência 5) para 30 classes de discretização.	6.16
Figura 6.9: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 30 classes de discretização.	6.16
Figura 6.10: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para a espessura da banda de dispersão (condições da experiência 5) para 10 classes de discretização.	6.18
Figura 6.11: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 10 classes de discretização.	6.18
Figura 6.12: Variação da função aproximada do número total de gotas por unidade de tempo ao longo do decantador (condições da experiência 5).	6.19

Índice de Tabelas

Tabela 5.1: Parâmetros das simulações	5.4
Tabela 5.2: Resultados obtidos para diferentes classes de discretização (Ribeiro, 1994)	5.6
Tabela 5.3: Resultados obtidos para diferentes classes de discretização.....	5.6
Tabela 5.4: Propriedades físicas das fases líquidas (temperatura a 25°).....	5.10
Tabela 5.5: Condições experimentais	5.11
Tabela 5.6: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 1)	5.16
Tabela 5.7: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 2).....	5.16
Tabela 5.8: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 3).....	5.16
Tabela 5.9: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 4).....	5.17
Tabela 5.10: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 5).....	5.17
Tabela 5.11: Resultados obtidos com um nível de significância de 5% para cada uma das experiências	5.18
Tabela 5.12: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 1).....	5.21
Tabela 5.13: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 2).....	5.21
Tabela 5.14: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 3).....	5.22
Tabela 5.15: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 4).....	5.22
Tabela 5.16: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 5).....	5.23
Tabela 5.17: Propriedades físicas das fases líquidas (temperatura a 25°).....	5.24

Tabela 5.18: Condições experimentais.....	5.24
Tabela 5.19: Valores dos parâmetros nos programas de simulação.....	5.25
Tabela 5.20: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 1)	5.28
Tabela 5.21: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 2)	5.28
Tabela 5.22: Resultados obtidos com um nível de significância de 5% para cada uma das experiências.....	5.29
Tabela 6.1: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados para as diferentes classes de discretização (condições da experiência 4).....	6.7
Tabela 6.2: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores publicados para as diferentes classes de discretização (experiência 4)... ..	6.9
Tabela 6.3. Tempos de execução do programa SM-D para as diferentes classes de discretização, num Pentium 4 a 2,67 GHz com 512 MB de RAM (no caso experiência 5).	6.10
Tabela 6.4: Valores das médias dos desvios para a espessura da banda e volumes médios das gotas para as várias classes.....	6.10
Tabela 6.5: Influência da variação do passo no tempo nos resultados relativos ao módulo de mistura.	6.11
Tabela 6.6: Influência da variação do passo no tempo nos resultados obtidos para a espessura da banda pelo programa SM-D.	6.13
Tabela 6.7: Influência da variação do passo no tempo nos resultados obtidos para os volumes médios das gotas pelo programa SM-D.....	6.13
Tabela 6.8: Tempos de execução do programa SM-D para o transiente e para os diferentes passos no tempo num Pentium 4 a 2,67 GHz e 512 MB de RAM (da experiência 4 à experiência 5).	6.15
Tabela 6.9: Desvios obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 30 classes de discretização.	6.17

Tabela 6.10: Desvios obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 10 classes de discretização.....	6.19
--	------

Nomenclatura

<i>Símbolo</i>	<i>Designação</i>	<i>Dimensões</i>
$A_p(x)$	Área média projectada das gotas na interface activa	(L^2)
c	Constante empírica da velocidade	(L^{-1})
C	Constante da equação (3.23)	(L^{-1})
$C(x,t)$	Volume de fase dispersa que coalesce com a interface activa	(L^3)
C_1	Constante de divisão	adimensional
C_2	Constante de divisão	adimensional
C_3	Constante de coalescência	(L^{-3})
C_4	Constante de coalescência	(L^{-2})
c_{c0}	Concentração de fase contínua à entrada do vaso	$(M.L^{-3})$
c_{d0}	Concentração de fase dispersa à entrada do vaso	$(M.L^{-3})$
C_s	Constante	adimensional
$D(x,t)$	Volume de fase dispersa que drena com a interface passiva	(L^3)
D_{AD}	Difusidade da fase dispersa	$(L^2.T^{-1})$
D_{ag}	Diâmetro da turbina	(L)
ds	Desvio relativo	
dv	Incremento em volume	(L^3)
F	Teste estatístico F	
$F(x,t)$	Velocidade da dispersão na alimentação do decantador	$(L.T^{-1})$
$F_c(x,t)$	Velocidade da fase contínua na alimentação do decantador	$(L.T^{-1})$
$F_d(x,t)$	Velocidade da fase dispersa na alimentação do decantador	$(L.T^{-1})$
g	Aceleração da gravidade	$(L.T^{-2})$

$g(v)$	Frequência de divisão de uma gota de volume v	(T^{-1})
$H(x), H(x,t)$	Altura da banda de dispersão	(L)
$h(v,v')$	Frequência de colisão de duas gotas de volumes v e v'	(T^{-1})
k	Constante na equação (7.3)	(T^{-1})
k	Constante na equação (3.23)	adimensional
K_{ag}	Constante da equação (4.14)	(LT^{-2})
k_c	Coefficiente parcial de transferência de massa da fase contínua	$(L.T^{-1})$
L	Comprimento total da banda de dispersão	(L)
m	Coefficiente de distribuição do soluto entre fases líquidas	adimensional
n_k	Número de gotas da classe k por unidade de volume da dispersão	(L^{-3})
n_v	Número de intervalos da grelha de volumes	adimensional
$n(v,x)dv$	Número de gotas de tamanho v a $v+dv$ por unidade de volume da dispersão	(L^{-3})
N	Número de rotações por unidade de tempo	(T^{-1})
$N(x)$	Número total de gotas por unidade de volume de dispersão	(L^{-3})
N_{Re}	Número de Reynolds	adimensional
P	Potência de agitação	$(ML^2.T^{-3})$
p_i	Número de réplicas das medidas experimentais na posição x_i	
$Q(x)$	Caudal volumétrico da dispersão	$(L^3.T^{-1})$
$Q_c(x,t)$	Caudal volumétrico da fase contínua	$(L^3.T^{-1})$
$Q_d(x)$	Caudal volumétrico da fase dispersa	$(L^3.T^{-1})$
S_e^2	Quadrado da média dos erros experimentais	
S_r^2	Média do quadrado dos desvios da simulação	
t	Tempo	(T)

$U(x)$	Velocidade axial das gotas na banda de dispersão	(LT^{-1})
U_0	Velocidade axial inicial das gotas na banda de dispersão	(LT^{-1})
$\bar{\bar{v}}$	Média dos volumes médios das gotas	(L^3)
$\hat{v}$	Volume das gotas obtido obtido por simulação	(L^3)
$\bar{v}$	Volume médio das gotas	(L^3)
$V(x,t)$	Volume da banda de dispersão na posição x e no tempo t	(L^3)
$V_c(x,t)$	Volume de fase contínua na posição x e no tempo t	(L^3)
$V_d(x,t)$	Volume de fase dispersa na posição x e no tempo t	(L^3)
v, v'	Volume da gota	(L^3)
v_e	Volume médio na alimentação do misturador	(L^3)
v_k	Volume da classe de discretização k (4.1)	(L^3)
v_{max}	Volume máximo presente na fase dispersa	(L^3)
v_{min}	Volume mínimo presente na fase dispersa	(L^3)
W	Largura do decantador	(L)
x	Variável de estado	(L)
$Y(x)$	Volume da fase dispersa por unidade de tempo	$(L^3.T^{-1})$
$z(v,x)dv$	Número de gotas de tamanho v a $v+dv$ (no volume de controlo) por unidade de tempo	(T^{-1})
$z_k(x)$	Número de gotas da classe de tamanho k (no volume de controlo) por unidade de tempo	(T^{-1})
$Z(x)$	Número total de gotas por unidade de tempo	(T^{-1})
α	Nível de significância estatística	
α	Constante da equação (7.1)	(LT^{-1})
β	Constante da equação (7.5)	(L^{-2})
$\beta(v v')$	Distribuição de probabilidade dos volumes das gotas filhas resultantes da divisão de uma gota mãe de volume v'	

γ	Constante da equação (7.19)	(T^{-1})
Δx	Incremento em x	(L)
ε	Potência dissipada por unidade de massa no misturador	$(L^2.T^{-3})$
$\eta(x), \eta(x,t)$	Taxa de retenção da fase dispersa (<i>hold up</i>)	Adimensional
$\eta^*(x)$	Fracção de superfície da fase dispersa na interface activa	Adimensional
η_0	Taxa de retenção (<i>hold up</i>) na entrada do decantador	Adimensional
η_M	Taxa de retenção máxima	Adimensional
θ	Tempo médio de residência	(T)
$\lambda(v,v')$	Eficiência de coalescência de duas gotas de volumes v e v' na equação (3.4)	
$\lambda(v,v')$	Frequência de coalescência gota-gota na equação (3.20)	(T^{-1})
λ^*	Frequência de coalescência gota-interface	(T^{-1})
λ_0^*	Parâmetro da frequência de coalescência gota-interface	(T^{-1})
λ_0	Parâmetro da frequência de coalescência gota-gota	$(L^2.T^{-1})$
μ_c	Viscosidade da fase contínua	$(M.L^{-1}.T^{-1})$
μ_m	Viscosidade da mistura líquido-líquido	$(M.L^{-1}.T^{-1})$
ρ_c	Massa volúmica da fase contínua	$(M.L^{-3})$
ρ_d	Massa volúmica da fase dispersa	$(M.L^{-3})$
ρ_m	Massa volúmica da mistura líquido-líquido	$(M.L^{-3})$
σ	Tensão interfacial	$(M.T^{-2})$
σ_e	Desvio padrão da distribuição das gotas à entrada do misturador	
τ	Idade da gota	(T)
v_1, v_2	Grau de liberdade	
Φ, Φ_d	Taxa de retenção da fase dispersa (ou <i>hold up</i>) no misturador	adimensional

Abreviaturas

<i>EXP</i>	Valores obtidos experimentalmente
<i>efic.</i>	Eficiência média de extracção
<i>fq.coal.</i>	Frequência de coalescência
<i>fq.div.</i>	Frequência de divisão
<i>ISEP</i>	Instituto Superior de Engenharia do Porto
<i>SM-D</i>	Programa de Simulação apresentado nesta dissertação
<i>SM-DM</i>	Programa de Simulação SM-D Modificado
<i>SP</i>	Programa de Simulação de Pinto (2004)
<i>SPA</i>	Programa de Simulação Acoplado de Pinto (2004)
<i>SR</i>	Programa de Simulação de Ruiz (1985)

1. Introdução

1.1 Enquadramento

1.2 Objectivo

1.3 Justificação e motivação

1.4 Contribuições

1.5 Organização do trabalho

1. Introdução

Os processos de separação de dois líquidos imiscíveis são importantes em muitos campos da indústria, tais como na recuperação de um solvente valioso depois de um processo de extracção ou na remoção de óleos imiscíveis com a água no tratamento das águas. Têm também grande importância na indústria petrolífera (Jeelani e Hartland, 1993).

Esses sistemas formados por dois líquidos imiscíveis são designados por sistemas líquido-líquido, constituindo um a fase dispersa (formada por gotas) e o outro a fase contínua. O conjunto das duas fases designa-se por dispersão.

Equipamentos como colunas de extracção e baterias de misturadores-decantadores são muito utilizados na extracção líquido-líquido, sendo as colunas mais usadas nas indústrias petroquímicas e os sistemas misturador-decantador mais usados na mineralurgia. Os sistemas misturador-decantador surgem como uma boa opção para este tipo de extracção dado que na extracção dos minérios há necessidade de atingir uma pureza elevada e que esta se consegue com tempos de contacto entre as fases muito curtos. Neste tipo de sistemas, devido à área de contacto ser pequena, a transferência de massa praticamente não existe (Ribeiro M., 2002).

Um tipo de decantador é o gravitacional industrial que, usualmente, é um tanque horizontal, de forma cilíndrica ou rectangular, continuamente alimentado por um dos extremos, sendo as fases separadas retiradas no extremo oposto. O fluxo da dispersão nestes decantadores é essencialmente horizontal. Os decantadores gravitacionais verticais são geralmente alimentados lateralmente e as fases separadas são retiradas pelo topo e pelo fundo do decantador. O fluxo da dispersão é essencialmente vertical. Este tipo de decantadores é mais utilizado em experiências laboratoriais (Jeelani e Hartland, 1993).

Neste trabalho propomo-nos estudar o comportamento de um sistema líquido-líquido, no interior de um decantador gravitacional longo, como será explicado nas secções seguintes.

1.1 Enquadramento

O trabalho aqui descrito enquadra-se nas actividades de um grupo de investigação que, desde 1985, tem vindo a estudar, sob uma perspectiva de Engenharia, sem perda de rigor físico e matemático, o comportamento hidrodinâmico e da transferência de massa de dispersões líquido-líquido. Este esforço foi desenvolvido ao longo do tempo em três vectores principais:

- inicialmente no caso relativamente simples dos vasos agitados mais ou menos homogéneos, primeiro algoritmicamente, em regime *batch* e contínuo permanente (Guimarães, 1989) e em regime contínuo transitório (Ribeiro L., 1994) e mais tarde experimentalmente, em regime *batch* e contínuo permanente (Ribeiro M., 2002);
- em seguida, no caso complexo de colunas agitadas em regime contínuo permanente e transitório (Gomes L., 1999), tendo a autora (do trabalho que aqui apresentamos) proposto uma implementação para ambientes computacionais de processamento paralelo, deste algoritmo de simulação (Gomes E., 1999);
- mais recentemente no caso pouco explorado e ainda mais complexo (por não poder, como o anterior, ser modelado em termos de andares finitos) de unidades misturador-decantador horizontal (*shallow-layer*) em regime contínuo permanente (Baptista, 2004), (Pinto, 2004) e (Silva, 2005).

1.2 Objectivo

O presente trabalho, que segue directamente na linha dos citados na secção anterior, tem como objectivo o desenvolvimento e respectiva validação de um algoritmo para simulação de transientes hidrodinâmicos, incluindo os fenómenos de coalescência gota-

gota e gota-interface activa, em unidades misturador-decantador, sem consideração directa e explícita dos fenómenos de transferência de massa entre fases, mas eventualmente a eles extensível.

O algoritmo escolhido para simular o misturador para regimes transitórios foi o algoritmo proposto por Ribeiro L. (1994). O algoritmo para simular o decantador para o estado transitório parte do modelo matemático proposto por Ruiz (1985) para o estado estacionário e mais recentemente trabalhado por Pinto (2004), acrescentando-lhe a iteração no tempo.

Dado que no interior do decantador se encontra um sistema líquido-líquido, pretende-se simular a hidrodinâmica da dispersão que percorre o decantador, formando uma banda (ou cunha) de dispersão. Recorrendo à simulação por computador pretende-se prever o que acontece a esta banda ao longo do tempo.

Numa fase seguinte, e dadas as restrições impostas pelo primeiro algoritmo, propõe-se um modelo inovador baseado na cinética da cunha.

1.3 Justificação e motivação

A experimentação directa com baterias de misturadores-decantadores é dispendiosa, tornando a simulação por computador bastante atractiva. Por outro lado, recorrendo à simulação torna-se possível projectar unidades misturador-decantador e conhecer melhor os fenómenos que ocorrem nas unidades de mistura e de decantação (Rommel *et al.*, 1992).

A importância do conhecimento dos fenómenos de extracção líquido-líquido e da transferência de massa entre líquidos deve-se ao elevado rendimento que se consegue obter, a custos energético e ambiental reduzidos, em equipamentos robustos, controláveis e de elevada eficiência técnica. Os tipos de equipamento mais utilizados para este fim são, como foi já referido, colunas de extracção e baterias de misturadores-decantadores. O problema do projecto, comando e controlo destes equipamentos é

fundamental para a viabilidade técnica e económica de processos industriais de extracção líquido-líquido, como os da recuperação de substâncias não renováveis ou perigosas. A experimentação directa com os equipamentos é por vezes impraticável, dada a sua complexidade e custo, pelo que a simulação no computador é a alternativa possível (Hossain *et al.*, 1983).

O estado da arte no que respeita à modelização de processos de extracção líquido-líquido é muito diferente no que respeita a misturadores e a decantadores (Barnea e Mizrahi, 1975d) tendo sido o misturador mais frequentemente escolhido como objecto de estudo.

Os misturadores podem ser simulados à custa de vasos agitados homogéneos (Ribeiro L., 1994). Equipamentos mais complexos, como as colunas de extracção, podem simular-se à custa da combinação destas estruturas mais simples, como foi demonstrado por Regueiras *et al.* (1998).

De um modo geral, o conhecimento do comportamento do decantador, quer no estado estacionário quer no transiente, em função das variáveis que controlam o processo é mais limitado do que o conhecimento dos misturadores e colunas de extracção. Este facto é claramente demonstrado pela multiplicidade de modelos existentes, como consta das revisões de Blass *et al.* (1992), Hartland e Jeelani (1994). Estes modelos aplicam-se geralmente em configurações físicas específicas dos equipamentos e para uma escala de laboratório. Mais recentemente trabalhos como os de Padilla, Ruiz e Trujillo (1996) e de Ruiz e Padilla (1996) utilizam uma abordagem diferente, baseada na equação de balanço da população, à semelhança do trabalho efectuado por Ribeiro L. (1994) para o misturador.

1.4 Contribuições

Nesta Secção enumeramos algumas das contribuições mais relevantes do trabalho descrito nesta dissertação.

Apresentamos um algoritmo para a simulação do misturador-decantador para o estado estacionário com uma abordagem numérica diferente das abordagens já existentes (Ruiz, 1985; Pinto, 2004) e obtivemos bons resultados por comparação com os resultados experimentais publicados. A grande vantagem deste algoritmo foi o facto de permitir um ponto de partida para o algoritmo de simulação para regimes transitórios uma vez que os anteriores apenas consideravam o comportamento estacionário do misturador.

Assim, propusemos um novo algoritmo para misturadores-decantadores para regimes transitórios baseado no modelo matemático do estado estacionário, acrescentando a iteração no tempo. Supõe-se que estado inicial do sistema líquido-líquido é um estado estacionário e que, se provocarmos uma alteração na dispersão no misturador, voltamos a atingir um novo estado estacionário ao fim de um certo tempo.

Não dispondo de resultados experimentais do transiente para validar o respectivo programa computacional, comparamos os valores obtidos no estado estacionário (o de partida e o de chegada) com os resultados experimentais publicados. Os resultados obtidos foram bons. Detectamos, no entanto, algumas limitações possíveis deste novo algoritmo herdadas do algoritmo para o estado estacionário.

Propusemos então, um novo modelo matemático para simular o comportamento da banda de dispersão no decantador. Este novo modelo, bem diverso do anterior e ultrapassando as suas limitações, utiliza uma formulação cinética, sendo o movimento da dispersão modelado pela gravidade.

1.5 Organização do trabalho

No Capítulo 2 deste trabalho descreve-se o resultado da pesquisa efectuada à bibliografia existente sobre modelos e algoritmos publicados para sistemas de misturadores-decantadores. Faz-se também uma revisão dos trabalhos existentes sobre as unidades misturador e decantador separadas. Faz-se uma pesquisa mais breve na área de misturadores e mais pormenorizada na área de decantadores.

No Capítulo 3 começa-se por descrever o fenómeno físico que nos propomos modelar: o comportamento de um sistema líquido-líquido em regime transitório, no interior de uma unidade de decantação do tipo decantador gravitacional longo. De seguida, descreve-se o desenvolvimento de um modelo dinâmico para o decantador do tipo horizontal, usando como ponto de partida o modelo do regime permanente desenvolvido por Ruiz, na Universidade de Utah (1985). Este modelo considera que as dimensões da banda de dispersão que se forma no decantador são determinadas pelo balanço entre o fluxo de entrada e o fluxo das gotas que coalescem com a interface activa, tendo em conta o fenómeno de coalescência entre as gotas que, ao provocar mudanças no tamanho das gotas, interfere na coalescência destas com a interface activa.

No Capítulo 4 descreve-se o algoritmo utilizado para descrever o sistema acoplado misturador-decantador. Apresentam-se as estratégias numéricas usadas na resolução do problema matemático relativo ao decantador. O algoritmo relativo ao misturador é o algoritmo para o vaso agitado já apresentado por Ribeiro L. (1994).

No Capítulo 5 apresentam-se e discutem-se os resultados obtidos pelos programas de simulação (para os regimes permanente e transitório) e apresentam-se as limitações do modelo de Ruiz (1985).

No Capítulo 6 faz-se uma análise do efeito da discretização das coordenadas espaciais e da variável tempo na precisão numérica dos resultados do programa de simulação desenvolvido.

No Capítulo 7 propõe-se um novo modelo matemático para simular a hidrodinâmica na banda de dispersão, para obviar as limitações encontradas no modelo anterior para o estado transitório.

No Capítulo 8 apresentam-se as conclusões deste trabalho, bem como as perspectivas de trabalho futuro.

2. Revisão bibliográfica

2.1 O misturador

2.2 O decantador

2. Revisão bibliográfica

O objectivo do trabalho a que nos propusemos é a concepção e desenvolvimento de um simulador para um decantador horizontal longo, em estado transitório. Não é possível, no entanto, falar num simulador para um decantador, encarando este como uma unidade isolada, uma vez que não é autónoma. O simulador em apreço corresponde pois a um sistema misturador-decantador no qual existem duas unidades, a de mistura (correspondente a um vaso agitado) e a de decantação.

Neste Capítulo, fazemos uma breve revisão da bibliografia existente não só sobre misturadores-decantadores mas também sobre misturadores e decantadores considerados separadamente, visto estas unidades serem por vezes estudadas separadamente.

2.1 O misturador

O estudo dos fenómenos que ocorrem num sistema líquido-líquido no interior de um misturador, e a simulação do seu comportamento, tem sido tema de vários trabalhos de investigação.

Num sistema líquido-líquido ocorrem, em geral, dois tipos de fenómenos: hidrodinâmicos e de transferência de massa de um soluto entre duas fases líquidas. Sabe-se que os primeiros condicionam fortemente os segundos.

Um sistema líquido-líquido é formado por duas fases, a contínua e a dispersa. A fase dispersa é constituída por uma população de gotas. Estas gotas e as interacções entre elas são responsáveis pelos fenómenos hidrodinâmicos de coalescência e de divisão. Assim, muitos dos estudos analíticos que visam o comportamento hidrodinâmico de um sistema líquido-líquido debruçam-se sobre equações de balanço de populações das gotas.

A simulação das dispersões agitadas tem sido abordada usando técnicas de balanço das populações de gotas (envolvendo dificuldades relativas à resolução da equação de balanço) ou usando técnicas de simulação directa (Monte-Carlo). Um exemplo de aplicação da técnica de simulação directa é o trabalho de Guimarães (1989) para o misturador em contínuo, em regime estacionário. Ao presente trabalho, interessa, no entanto, o regime transitório.

2.1.1 Hidrodinâmica

Em 1966, Valentas e Amundson (1966) apresentaram trabalhos sobre a coalescência e a divisão das gotas na fase dispersa baseados no balanço populacional. Estudaram a distribuição do tamanho das gotas num sistema contínuo e no estado estacionário. Conseguiram obter o comportamento do vaso agitado (com alimentação em contínuo) para o estado transitório por aproximação numérica à equação integro-diferencial do balanço populacional com um método numérico iterativo de 1ª ordem conjuntamente com um método preditor-corrector de 3ª ordem.

Em 1969, Bayens e Laurence (1969) contribuíram com um modelo de simulação do comportamento dos sistemas líquido-líquido em que a fase dispersa tem um tempo de residência bem determinado, no caso de um vaso fechado e perfeitamente agitado, analisando a transferência de massa e já incluindo no modelo a coalescência na fase dispersa. Afirmaram que a transferência de massa é fortemente afectada pelos fenómenos de coalescência e de divisão. Utilizaram uma função de distribuição das gotas trivariada, dependente do tamanho, concentração do soluto e idade das gotas.

Em 1971, Ross (1971), partindo do modelo de Valentas e Amundson *op cit.*, desenvolveu um novo modelo para a divisão e coalescência das gotas. Apresentou a coalescência como o produto da frequência de colisão pela eficiência de coalescência.

Em 1973, Shah e Ramkrishna (1973) propuseram um modelo hidrodinâmico com solução analítica, não contemplando, porém, a coalescência (consideraram dispersões com baixa fracção de fase dispersa). A divisão era vista como um evento binário. Descreveram a dispersão como uma distribuição trivariante no tamanho, concentração e

idade das gotas, considerando a transferência de massa. Os resultados obtidos mostraram a importância da dinâmica da fase dispersa na transferência de massa nos sistemas líquido-líquido.

Em 1977, Coualaloglou e Tavlarides (1977) apresentaram um modelo baseado no de Ross (1971), para campos turbulentos e localmente isotrópicos, englobando os fenômenos de coalescência e de divisão na resolução da equação do balanço populacional. Apesar deste modelo não considerar a transferência de massa, tem sido considerada como adequada a sua utilização em sistemas em que a transferência de massa ocorre (Ribeiro M., 2002). Por este motivo é um modelo muito utilizado quer em vasos agitados, quer em colunas de extração.

Em 1980, Hsia e Tavlarides (1980) desenvolveram um modelo de simulação da distribuição do tamanho das gotas numa dispersão homogênea turbulenta usando o método de Monte-Carlo. Analisaram quatro processos de interação das gotas: a divisão, a coalescência, as entradas e as saídas das gotas em cada volume de controlo, em estudo.

Em 1981, Sovová (1981) apresentou uma alternativa ao modelo inicial de Coualaloglou e Tavlarides (1977), introduzindo uma expressão para a eficiência de coalescência das gotas, baseando o mecanismo de coalescência no impacte da colisão e não na drenagem.

Em 1994, Tsouris e Tavlarides (1994) apresentaram expressões para a frequência de, colisão modificando o modelo da eficiência de coalescência apresentado por Coualaloglou e Tavlarides (1977), e para a divisão das gotas, em dispersões turbulentas.

Em 1994, Ribeiro L. (1994), utilizando o modelo Coualaloglou e Tavlarides para a hidrodinâmica da fase dispersa, propôs um método de integração numérica directa da equação do balanço para o vaso perfeitamente agitado e em regime transitório, que demonstrou conduzir a um algoritmo de simulação rápido e eficiente.

Em 2002, Ribeiro M. (2002) utilizou o modelo do vaso agitado para regimes transitórios anteriormente proposto por Ribeiro L. (1994) e comparou os resultados obtidos por

simulação com os resultados obtidos experimentalmente em laboratório. Estes resultados, que corresponderam às expectativas de Ribeiro M. (2002), foram obtidos numa instalação de um misturador construída com dispositivos apropriados para obter as distribuições dos calibres das gotas sem recorrer a técnicas invasivas.

Ainda em 2002, Ruiz, Lermenda e Padilha (2002) apresentaram um trabalho sobre o fenómeno de divisão das gotas num vaso agitado, onde afirmam que a distribuição do tamanho das gotas produzidas pelo misturador é importante para o desempenho de um reactor de extracção de solvente, não só porque afecta a extracção, mas também porque influencia a separação das fases no decantador. Consideraram que as perdas orgânicas por arrastamento que se dão no processo de extracção estão também relacionadas com a distribuição do tamanho das gotas. Para estudarem apenas o fenómeno de divisão das gotas na ausência do fenómeno de coalescência entre as gotas, utilizaram uma dispersão com uma fracção de fase dispersa (*hold up*) muito baixa.

Os mesmos autores publicaram um trabalho em 2004 (Ruiz e Padilla, 2004), ainda sobre o fenómeno de divisão das gotas num vaso agitado fechado. Afirmam que nas dispersões líquido-líquido existe um tamanho máximo de estabilidade da gota. As gotas com um tamanho abaixo do máximo são capazes de resistir ao campo de fluxo, sem se dividirem, enquanto que as maiores se dividem. Sugerem que num vaso agitado fechado se consegue um equilíbrio da distribuição do tamanho das gotas mesmo nos casos em que não se dá o fenómeno da coalescência. Seguem o modelo de balanço populacional (Tsouris e Tavlarides, 1994; Kumar e Ramkrishna, 1996) mas como neste trabalho tratam apenas a divisão das gotas, consideram nulas as parcelas da equação do balanço que correspondem à coalescência das gotas. Resolvem a equação resultante utilizando uma abordagem numérica de discretização proposta por Sastry e Gaschignard (1981), uma técnica já utilizada em trabalhos anteriores sobre decantadores. Comparando os resultados obtidos por simulação com os dados experimentais para a distribuição do tamanho das gotas concluem: enquanto a eficiência de divisão tem um efeito reduzido na evolução da distribuição das gotas da dispersão, a função de densidade das gotas filhas escolhida tem sobre ela uma forte influência. Para a função de densidade das gotas filhas utilizam uma função densidade em forma de U proposta por Kostoglou *et*

al. (1997) e não uma função densidade normal (Valentas e Admunson, 1966; Coulaloglou e Tavlarides, 1977), ou normal truncada (Ribeiro *et.al.*, 1995a), ou ainda uma distribuição beta unimodal (Bapat,1983). A escolha desta função é justificada pelos os autores como sendo a que melhor modela o sistema em estudo, sendo reduzida a probabilidade de produzir duas gotas filhas de igual tamanho na divisão da gota mãe.

2.1.2 Transferência de massa

A fase dispersa de um sistema líquido-líquido é constituída por gotas. Nos estudos existentes sobre a transferência de massa, por simplicidade, as gotas são encaradas geralmente como esferas, havendo dois tipos de modelos: o modelo das gotas rígidas e o modelo das gotas oscilantes (ou de circulação turbulenta).

No modelo das gotas rígidas, as gotas são vistas como partículas sólidas e supõe-se que os movimentos do soluto no interior da gota se devem exclusivamente a fenómenos de difusão (Cruz-Pinto, 1979) Cit. por (Ribeiro L., 1994).

No modelo das gotas oscilantes, à circulação do fluxo difusional no interior da gota é sobreposta uma vibração radial aleatória (Cruz-Pinto *et al.*, 1983) Cit. por (Ribeiro L., 1994).

O algoritmo de Ribeiro L. (*op. cit.*) admite que a fracção da massa transferida durante os fenómenos de interacção na fase dispersa é desprezável. Aquele algoritmo contempla os dois modelos de transferência de massa. O trabalho que se descreve nesta dissertação permite apenas a utilização do modelo das gotas rígidas. Esta opção deve-se ao facto de este ser o modelo cujo tratamento numérico é mais complexo, uma vez que obriga a considerar não só a dimensão e a concentração, como também a idade das gotas como coordenadas internas do espaço de estados (ver Capítulo 3).

Embora no presente trabalho os fenómenos de transferência de massa não tenham sido estudados para o sistema misturador-decantador, o algoritmo está preparado para que estes possam vir a ser facilmente integrados no futuro.

2.2 O decantador

Nesta Secção fazemos uma revisão dos estudos já realizados sobre o sistema misturador-decantador, focando a atenção na unidade de decantação.

Quando a dispersão saída do misturador entra no decantador, forma-se rapidamente uma zona heterogénea entre as duas camadas, aquosa e orgânica, existentes neste. É esta zona, que usualmente tem a forma de uma cunha (a menos que o seu comprimento seja superior ao do decantador), que se pretende estudar. Usámos neste trabalho, indiferentemente, a designação de cunha ou banda de dispersão para designar esta zona. No interior da cunha ocorrem os fenómenos de coalescência entre as gotas e na interface activa têm lugar os fenómenos de coalescência das gotas com um meio equivalente a uma gota de dimensão infinita.

O estudo, num decantador, destes fenómenos de separação que ocorrem entre as fases, com vista à sua simulação, é escasso, em particular para o caso do estado transitório. No caso dos decantadores gravíticos paralelepípedicos em que o fluxo da dispersão é essencialmente horizontal, as características da banda de dispersão (espessura, distribuição do calibre das gotas, bem como a sua velocidade) variam ao longo do decantador, dificultando o trabalho de análise e modelação matemática.

A este trabalho interessa principalmente o estudo existente sobre decantadores gravitacionais horizontais, dado que se pretende apenas simular o comportamento da cunha de dispersão de um decantador gravitacional longo.

2.2.1 Modelação matemática

A literatura existente relativamente à modelação da hidrodinâmica da separação das fases num decantador gravitacional não é muito abundante no que diz respeito ao estado estacionário e é escassa no que respeita ao estado transitório. No entanto, há estudos que analisam o processo físico e os factores que controlam a coalescência, quer entre as gotas, quer das gotas com a interface. O conhecimento destes fenómenos é importante para conseguir prever a separação das fases.

Em 1970, Jeffreys e Davies (1970) apresentaram um modelo matemático que supõe que as coalescências (entre gotas e das gotas com a interface) na banda de dispersão ocorrem por camadas. A altura da cunha depende das sucessivas coalescências por camadas. Segundo os autores, os resultados obtidos por simulação para o comprimento da cunha e para a distribuição do tamanho das gotas aproximavam-se razoavelmente dos resultados obtidos experimentalmente.

Ainda em 1970, Jeffreys *et al.*(1970) apresentaram um modelo que, conhecendo os tempos de coalescência entre as gotas e das gotas com a interface e supondo a velocidade das gotas constante, prevê a variação do tamanho das gotas ao longo da banda bem como a espessura da banda de dispersão.

Posteriormente, em 1974, Vijayan e Ponter (1974) acrescentaram ao modelo de Jeffreys *op. cit.* uma equação para a cinética da coalescência no decantador, com vista a analisar o contributo dos processos de coalescência (quer entre as gotas, quer das gotas com a interface) no comprimento da cunha. No entanto, dificuldades experimentais na obtenção das distribuições das gotas e a ocorrência do fenómeno de coalescência entre gotas impediram uma avaliação correcta do modelo.

Em 1985, Ruiz (1985) formulou um modelo matemático para simulação da banda de dispersão para o estado estacionário de um misturador-decantador gravitacional horizontal. Este modelo propõe uma equação de balanço dada pela diferença entre a fase dispersa que entra no decantador e as gotas que vão coalescer com a interface activa. A coalescência entre as gotas que ocorre no interior da banda de dispersão provoca uma alteração no tamanho das gotas, logo interfere no fenómeno de coalescência com a interface.

Este modelo tem os seguintes pressupostos e simplificações:

- As propriedades físicas da dispersão só se alteram ao longo do eixo dos xx (direcção do movimento), ou seja, qualquer alteração na direcção vertical (na fatia) é desprezável.

- Em cada fatia, na posição x da banda de dispersão, as gotas têm a mesma velocidade, ou seja, o efeito de parede é desprezável.
- A coalescência entre gotas é binária.
- O comprimento da interface activa é idêntico ao comprimento da banda de dispersão (pequena inclinação na interface activa).
- Em qualquer posição x da banda de dispersão a distribuição do tamanho das gotas pode ser representada por uma distribuição contínua (no volume das gotas).

Saliente-se que Ruiz não tenta simular o misturador-decantador para o estado transiente, mas unicamente o estado estacionário. Esta autora considera excelentes os resultados obtidos pela simulação quando comparados com os resultados experimentais.

Em 1990, Salem e Sheirah (1990) apresentaram um modelo matemático para simular e prever o comportamento dinâmico de cascatas de misturadores-decantadores em extracção contracorrente. O modelo foi resolvido recorrendo a um módulo de programas de simulação, DSSP Version 1.0, desenvolvido por Sheirah (1987) e trata o sistema que se pretende simular como uma série de blocos. Cada bloco descreve o comportamento do sistema. Os resultados obtidos mostraram que o modelo pode ser usado para determinar o número óptimo de andares (na experiência em questão consideraram-se quatro andares), a capacidade de cada andar, e o tempo que cada unidade (misturador-decantador) necessita para atingir o estado estacionário. Os autores não referem, todavia, como estudam as variações da dispersão ao longo da banda de dispersão no decantador e o módulo de programas DSSP não se encontra disponível.

Em 1994, Hartland e Jeelani (1994) fizeram uma importante revisão da literatura sobre decantadores gravitacionais, quer verticais, quer horizontais, no estado estacionário, em ambiente fechado. Os decantadores gravitacionais usados na indústria são geralmente horizontais, de formato cilíndrico ou, mais frequentemente rectangular, sendo a dispersão líquido-líquido continuamente injectada por uma das extremidades. Na

extremidade oposta do decantador encontram-se as duas fases separadas. Os decantadores verticais são mais usados em laboratório, para fins experimentais.

Estes autores estudam dois tipos de dispersões caracterizadas pelo tamanho das gotas: as primárias e as secundárias. As dispersões primárias, em que as gotas têm um diâmetro médio da ordem de 100 μm ou superior e que coalescem rapidamente com a interface, são as que se podem encontrar em muitos decantadores gravitacionais industriais e são, por isso, as que despertam maior interesse de estudo. As dispersões secundárias, são aquelas em que as gotas têm um diâmetro da ordem de 1 μm ou menos e demoram bastante tempo a coalescer com a interface. Os autores não fazem qualquer referência a gotas com dimensões intermédias.

No trabalho destes autores são apresentadas equações de coalescência (binária e interfacial) aplicáveis a decantadores gravitacionais de fluxo horizontal. A equação proposta para a coalescência com a interface baseia-se na ideia de que a diminuição do caudal volumétrico da fase dispersa deve ser igual ao volume que coalesceu com a interface num elemento de volume (diferencial) do decantador. A equação proposta para a coalescência binária entre as gotas baseia-se no balanço do número de gotas (no tempo e no espaço) e no diâmetro das gotas num elemento diferencial do decantador. Apresentam também um modelo (uma equação quadrática) para a variação da altura da cunha ao longo do comprimento do decantador, referindo, relativamente ao formato da cunha, o fenómeno de esta começar por subir e só depois descer. Atribuem a subida à turbulência que ocorre na dispersão na alimentação do decantador e a descida à coalescência da fase dispersa com a interface activa. Drown e Thomson (1977) tinham já publicado estudos empíricos sobre este fenómeno.

Quando se referem a decantadores verticais, calculam a altura total da dispersão como sendo a soma de duas alturas; uma correspondente à da dispersão na zona de sedimentação e a outra à altura da dispersão na zona de coalescência (zonas compactas). No decantador horizontal, porém, a zona de sedimentação é considerada desprezável.

Aqueles autores referem ainda que é importante a localização e as dimensões da ranhura de entrada da alimentação da dispersão no decantador, relativamente à cunha, uma vez que afecta a velocidade das gotas e os fenómenos hidrodinâmicos na cunha. Este assunto tinha sido já abordado por outros autores como Davies *op.cit.* ou Barnea e Mizrahi (1975c). Os autores referidos obtêm ainda bons resultados na comparação dos valores obtidos por simulação com os dados experimentais, relativamente quer aos obtidos pelos próprios autores em trabalhos anteriores (Jeelani e Hartland, 1991), quer aos obtidos por outros autores, como por exemplo Vijayan e Ponter (1974).

Em 1996, Ruiz e Padilla (1996) propuseram um modelo matemático para a separação de fases num decantador gravitacional de fluxo vertical. A expressão apresentada baseia-se na equação do balanço da população de gotas, já anteriormente proposta por Ruiz (1985) no seu trabalho de doutoramento para um decantador de fluxo horizontal. Neste trabalho, visto tratar-se do caso de decantadores verticais, consideram que a velocidade e o tamanho das gotas da fase dispersa, bem como o *hold up* da fase dispersa, sofrem alterações apenas na direcção vertical. Os autores consideraram que este modelo descreve o fenómeno correctamente quando validado contra resultados experimentais obtidos num sistema misturador-decantador em laboratório.

Em 1999, Jeelani, Panoussopoulos e Hartland (1999) publicaram um trabalho sobre o efeito da turbulência na separação das dispersões líquido-líquido em decantadores fechados, de diferentes geometrias. Afirmam que a separação é afectada pela turbulência inicial existente no decantador, afectando a sedimentação inicial (decantadores verticais) e a coalescência com a interface. Com a redução da turbulência, estes fenómenos aumentam gradualmente, adquirindo um perfil sigmoidal. Apresentam um modelo que descreve a separação de dispersões em sistemas fechados, considerando o efeito de turbulência inicial sobre as dispersões.

Em 2004, Pinto (2004) apresentou um modelo para uma unidade de mistura-decantação, tendo em conta os fenómenos de hidrodinâmica e de transferência de massa, para o estado estacionário de um decantador gravitacional longo. Propôs um modelo computacional baseado no modelo de balanço populacional das gotas (tendo em conta

as frequências de coalescência gota-a-gota e gota-interface) anteriormente publicado por Ruiz (1985). Este trabalho vai servir como uma das referências para a validação do trabalho descrito nesta tese, tendo em conta que, apesar de se tratarem de trabalhos com objectivos diferentes, visto que um tem por objectivo simular o estado estacionário e o outro o transiente, pode pensar-se no estado estacionário como sendo um estado limite do transiente e, assim sendo, o resultado final da simulação do transiente tem que coincidir com o da simulação directa do estado permanente.

Os fenómenos de separação da dispersão em duas fases, que ocorrem no decantador (vertical ou horizontal), têm sido investigados nas últimas décadas de modo apenas esporádico. Tal como no misturador, podem distinguir-se dois tipos de modelos matemáticos para os descrever, os determinísticos e os probabilísticos. Os modelos determinísticos incidem no estudo da drenagem da película que separa a gota da interface activa (coalescência da gota com a interface) e no estudo da interacção entre duas gotas vizinhas (coalescência entre gotas). Os modelos probabilísticos consideram a separação como um acontecimento estocástico e tentam simulá-la usando diferentes distribuições de probabilidade para a coalescência entre gotas e a coalescência gota-interface (Rommel, Meon e Blass, 1992).

Identificámos a existência no mercado de pacotes computacionais aplicáveis à simulação de sistemas misturadores-decantadores. O SOLVEX da NEA (Nuclear Energy Agency) data de 1975. Está escrito em FORTRAN-IV e disponível para plataformas com o sistema operativo OS/360 (SOLVEX, 1975). Aparentemente não sofreu qualquer evolução para plataformas mais recentes. O módulo LexSet, da AspenTech, simula a extracção de solventes em misturadores-decantadores. Trata-se de uma ferramenta comercial nem sempre disponível em ambientes universitários, de modo a poder ser explorada em investigação e desenvolvimento. Tanto quanto sabemos, a informação relativa aos modelos matemáticos seguidos para a implementação destes programas não se encontra acessível.

2.2.2 Fenómeno de coalescência

No nosso trabalho supomos que, no decantador, apenas ocorre o fenómeno hidrodinâmico de coalescência, não ocorrendo divisão de gotas. Nas secções seguintes fazemos uma revisão dos estudos feitos sobre a coalescência entre as gotas e a coalescências das gotas com a interface activa.

2.2.2.1 Coalescência entre as gotas

Os modelos para calcular a coalescência entre duas gotas no decantador são frequentemente extensões dos modelos já existentes para a coalescência de uma gota com a interface activa.

Em 1965, McAvoy e Kintner (1965) apresentaram uma expressão para prever o tempo de coalescência de duas gotas, tratando cada uma das gotas a coalescer como duas esferas rígidas de igual tamanho.

Em 1970, Jeffreys e Davies (1970) propuseram uma outra expressão para a variação com o tempo da largura da película, entre duas esferas de igual tamanho, supondo que as duas gotas a coalescer se deformam em duas superfícies paralelas.

Em 1977, Coulaloglou e Tavlarides (1977), já referidos da Secção relativa à coalescência entre as gotas no misturador, apresentaram um modelo para a drenagem da película entre duas gotas de diferentes diâmetros, tanto para gotas rígidas, como para gotas deformadas.

Em 1998, Jeelani e Hartland (1998) publicaram um estudo sobre a colisão de duas gotas esféricas em dispersões líquido-líquido. Afirmam que, quando duas gotas colidem, a fase contínua existente (a película de separação) entre elas vai drenando ao longo do tempo, provocando progressivamente um estreitamento da película de separação entre gotas. Quando a película se torna muito fina as forças de van der Waals dominam, levando à rotura da película e, consequentemente, à coalescência das gotas.

Estes autores apresentam ainda uma expressão analítica para descrever a variação do diâmetro e a mobilidade da superfície das gotas, dependendo da velocidade e da espessura da separação das gotas durante o impacto da colisão.

2.2.2.2 Coalescência das gotas com a interface activa

Como foi já referido, o conhecimento dos processos de coalescência é muito importante para a análise da separação da dispersão no interior do decantador. A maioria dos estudos centram-se no fenómeno de coalescência de uma gota com a fase mãe.

Os estudos efectuados por Jeffreys e Davies (1970) e de Vijayan e Ponter (1974) foram uma importante contribuição para o conhecimento deste fenómeno. Parece estar bem definido que o processo de coalescência com a interface pode ser descrito como um fenómeno composto por quatro etapas, sendo a drenagem (3) a etapa mais lenta. As quatro etapas são as seguintes:

1. A aproximação da gota com a interface, resultando na deformação de ambas.
2. Desaceleração da gota, acompanhada por vezes de oscilações, formação da camada limite entre a gota e a interface.
3. Drenagem da película de fase contínua entre a gota e a interface dando origem à rotura da gota.
4. Passagem do conteúdo da gota para a fase mãe. A gota desaparece.

Note-se que a coalescência da gota com a interface pode não se efectuar completamente de uma só vez. Neste caso, o fenómeno designa-se por coalescência parcial (Charles e Mason, 1960a). Muitos dos trabalhos existentes dedicam-se ao estudo da coalescência de uma gota com a interface activa e dos parâmetros físicos que estão relacionados com este processo, como a área superficial, viscosidade e tensão interfacial.

Quando uma gota se aproxima da interface forma-se uma película de fase contínua entre a gota e a interface activa e que pode não ser uniforme em toda a superfície de contacto. O tempo de coalescência é dado pela frequência de drenagem dessa película de fase contínua. Os modelos existentes para prever o tempo de coalescência baseiam-se no estudo da drenagem da referida película (Woods e Burriel, 1972).

Em 1956, Gillespie e Rideal (1956) apresentaram um modelo (dos discos paralelos) para a rotura da película de fase contínua entre a gota e a interface (experiências realizadas com água e benzeno). Este modelo pressupõe que a película tem largura uniforme e que ambas as superfícies de contacto permanecem imóveis.

Em 1960, Charles e Mason (1960b) calcularam a espessura da película de separação incluindo tempos de coalescência no seu modelo. O modelo baseia-se ainda na aproximação de dois discos paralelos de superfícies rígidas (um deles correspondente à gota e o outro à interface).

Em 1969, Hodgson e Woods (1969) estudaram a drenagem lenta da película e propuseram uma expressão para o cálculo do tempo de drenagem, fazendo uma aproximação do tipo de um cilindro infinito a uma superfície plana e rígida. São pioneiros no estudo da reprodutibilidade de experiências de coalescência.

Em 1971, o modelo de Lang e Wilke (1971) encara a coalescência como o processo de drenagem de uma fina película, de espessura constante, sob uma esfera (a gota) de superfície rígida.

Em 1984, o modelo hidrodinâmico de Chen *et al.* (1984) baseia-se nas considerações teóricas de Buevich e Lipkina (1978), mas estende a teoria tendo em consideração os efeitos das forças de van der Waals (avaliadas pelo coeficiente de London-Hamaker).

Em 1985, Ruiz (1985), na sua tese de doutoramento, propôs um modelo hidrodinâmico baseado no balanço entre a quantidade de dispersão que entra e a quantidade de gotas que coalescem com a interface activa. Considera que a coalescência entre as gotas afecta a coalescência com a interface, ao produzir uma alteração do tamanho das gotas da dispersão. Este modelo será analisado em detalhe no Capítulo 3.

Em 1992, Rommel, Meon e Blass (1992) fizeram uma importante revisão da bibliografia existente. Referem que experimentalmente se detecta um aumento do tempo de coalescência com o aumento do diâmetro das gotas e o facto é justificado hidrodinamicamente: um aumento do tamanho da gota leva a um aumento da superfície

de contacto entre a gota e a interface activa, donde resulta um abrandamento do processo de drenagem.

A revisão bibliográfica efectuada por estes autores não se reduz ao estudo da coalescência de uma só gota com a interface (como referências acima citadas), mas também ao estudo da coalescência de aglomerados de gotas com interfaces horizontais. Referem estudos efectuados em decantadores verticais e horizontais, para sistemas fechados e em contínuo, salientando, no entanto, que muitos deles são estudos empíricos.

Em 1996, Ruiz e Padilla (1996) afirmam que, para o sistema em estudo, a frequência de coalescência gota-interface é constante, não dependendo nem do tamanho das gotas nem da espessura da banda de dispersão no interior do decantador. A independência relativamente à espessura da banda de dispersão deve-se, segundo os autores, ao equilíbrio entre os seguintes fenómenos:

- Quando a banda de dispersão se torna mais espessa, a força que pressiona a gota contra a interface aumenta, uma vez que pelo menos uma parte do peso da banda é transmitido à gota na interface. Quanto maior for essa força, maior é a velocidade de drenagem da película da fase contínua e, nestas condições, a frequência de coalescência deveria aumentar.
- Por outro lado, a força exercida pela espessura da banda vai aumentar a deformação das gotas maiores o que, por sua vez, aumenta a área da película a ser drenada, pelo que, a frequência de coalescência deveria diminuir.

Em 2002, Henschke *et al.* (2002) apresentam um modelo para a coalescência, para decantadores fechados, em estado estacionário. Referem a dificuldade que as impurezas existentes na dispersão acrescentam à modelação do fenómeno, provocando nomeadamente alterações electrostáticas, mobilidade interfacial e atracção de van der Waals. Este modelo considera a sedimentação das gotas, a deformação das gotas na zona de compactação, bem como os fenómenos de coalescência, quer gota-a-gota, quer gota-interface.

Alguns autores dedicaram-se ainda ao estudo da influência da temperatura nos fenómenos que ocorrem na banda de dispersão, pois sabe-se que uma alteração na temperatura origina uma alteração nas propriedades físicas dos fluidos. Um aumento de temperatura leva, por exemplo, à redução do tempo de coalescência, quer das gotas entre si, quer das gotas com a interface (Barnea e Mizrahi, 1975a).

Para o presente trabalho interessam sobretudo o modelo de Coulaloglou e Tavlarides (1977) e o trabalho de Ribeiro L. (1994), relativamente à unidade de mistura. Com efeito, utilizámos o algoritmo de Ribeiro L. *op. cit.* para a simulação do misturador e, neste algoritmo, os fenómenos hidrodinâmicos são descritos pelo modelo de Coulaloglou e Tavlarides *op. cit.* Para a unidade de decantação, interessa-nos essencialmente o modelo de Ruiz (1985), que nos fornece a equação do balanço das gotas para um decantador horizontal. O trabalho de Pinto (2004) serviu como uma das referências para a validação de resultados relativamente ao estado estacionário. A utilização destes modelos descreve-se, de forma detalhada, nos Capítulos que se seguem.

3. O modelo matemático

3.1 Descrição do sistema

3.2 O modelo misturador-decantador

3.3 O misturador

3.4 O decantador

3.5 Alterações ao modelo de Ruiz

3. O modelo matemático

Para descrever o sistema misturador-decantador usámos dois modelos matemáticos independentes. Um modelo diz respeito ao módulo de mistura e o outro ao módulo de decantação. Neste Capítulo começamos por descrever o sistema que pretendemos simular e as respectivas hipóteses de trabalho, bem como os modelos matemáticos utilizados para o misturador e para o decantador.

3.1 Descrição do sistema

Como foi já referido, neste trabalho propomo-nos estudar o comportamento de um sistema líquido-líquido, no interior de um decantador gravitacional longo. O decantador contém duas fases líquidas e uma zona heterogénea de gotas entre as duas fases. Se esta zona não cobre a totalidade do comprimento do decantador forma-se uma cunha de dispersão.

Um sistema misturador-decantador é composto por um misturador (ou vaso agitado) e um decantador. A Figura 3.1 representa esquematicamente um misturador ligado a um decantador gravitacional horizontal. A dispersão entra no misturador e é fortemente agitada durante um certo intervalo de tempo (o tempo de residência no vaso) podendo ocorrer transferência de um soluto entre as duas fases líquidas (fenómeno de transferência de massa).

Como hipótese de trabalho consideramos um misturador perfeitamente agitado, em regime contínuo, e uma dispersão homogénea. A dispersão sai do vaso e entra no decantador onde ocorre uma separação das fases por acção da gravidade. Enquanto a dispersão percorre o decantador dá-se a separação da fase leve e da fase pesada (ou fase orgânica e fase aquosa) formando uma banda (ou cunha) de dispersão ao longo do decantador. É o comportamento dessa cunha que pretendemos estudar.

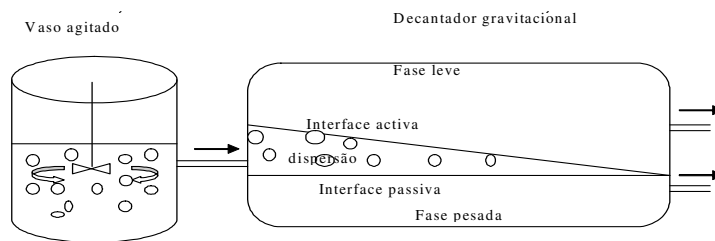


Figura 3.1: Decantador gravitacional horizontal

O formato da cunha depende dos fenómenos hidrodinâmicos de coalescência que ocorrem na fase dispersa. Existem, neste processo, dois tipos de coalescência. Por um lado, ocorre a coalescência entre as gotas, que é responsável pelo aumento de tamanho das gotas ao longo da cunha. Por outro lado existe a coalescência das gotas com a interface activa que é responsável pela diminuição do número das gotas ao longo da cunha. A interface activa é a fronteira da fase ex-dispersa (fase orgânica) que se acumula num dos lados da cunha. Em cima se for mais leve, em baixo no caso contrário. A interface passiva é a fronteira da fase contínua (fase aquosa) por onde se dá o escoamento da fase contínua existente na cunha de dispersão, por drenagem gravitacional.

O conceito geral em que se baseia o modelo do decantador gravitacional longo (*shallow layer gravity settler*) é o de que a sua área horizontal é suficiente para que, alimentado numa das extremidades e descarregado na outra, nele se forme uma cunha de dispersão que não cobre a totalidade da interface entre fases. Admitimos como hipótese de trabalho que no início o decantador se encontra com as duas fases líquidas. Pressupõe-se que no interior dessa cunha se verificam as seguintes condições:

- Existe coalescência gota-gota resultante da grande proximidade entre as gotas e da elevada taxa de retenção da fase dispersa.
- A divisão das gotas durante a sua residência na cunha é desprezável devido à pequena turbulência.

- Existe coalescência gota-interface activa, ou seja, existe coalescência entre as gotas e a camada que constitui a fuga da fase dispersa da cunha.
- Existe drenagem gravitacional da fase contínua durante a sua residência na cunha, que leva ao escoamento da fase contínua pela interface passiva.
- O movimento longitudinal da cunha de dispersão é um movimento de fluxo em pistão com fugas da fase dispersa correspondentes à coalescência com a interface activa e da fase contínua correspondentes à drenagem.
- O ângulo de inclinação da interface activa é pequeno de forma a podermos considerar que o comprimento da interface activa é igual ao comprimento da banda de dispersão.
- Na banda de dispersão a transferência de massa é desprezável, dada a fraca interacção entre as gotas, a baixa superfície específica e o curto tempo de residência na banda de ambas as fases.

3.2 O modelo misturador-decantador

Tal como já referimos, usámos dois modelos matemáticos independentes para descrever o misturador-decantador, um para o misturador e outro para o decantador.

O modelo matemático do misturador, no qual se baseia o algoritmo do misturador por nós adoptado, está descrito em detalhe no trabalho de Ribeiro L. (1994). Por esse motivo, neste trabalho, a descrição do modelo matemático do misturador faz-se de uma forma mais breve que a referente ao modelo do decantador.

Ao considerarmos os dois modelos acoplados, o modelo para o misturador e o modelo para o decantador, estamos a supor que, na ligação entre os dois módulos, as características da dispersão não variam. Ou seja, supomos que a dispersão que sai do misturador é a que entra no decantador. A concepção do equipamento deve obedecer a este princípio (Pinto, 2004).

Para descrever as propriedades das gotas que formam a fase dispersa utiliza-se, tal como Ribeiro L. (1994), um conjunto adequado de n coordenadas. Esse conjunto surge geralmente dividido em *coordenadas externas*, associadas com a distribuição espacial das gotas, e *coordenadas internas*, associadas com propriedades específicas tais como a dimensão, a composição química, a massa, ou a temperatura das gotas. Ribeiro *op.cit.* utiliza a terminologia *espaço de estados* para o espaço definido pelo conjunto das n coordenadas (externas e internas) ao longo do tempo.

No misturador, uma vez que se está a considerar que este é perfeitamente agitado, e portanto homogêneo, o sistema líquido-líquido pode ser apenas descrito através da distribuição das propriedades das gotas no espaço formado pelas coordenadas internas (modelo de constantes concentradas): volume (v), concentração (c) e idade (τ) (Ribeiro L., 1994, p. 4-4). O modelo matemático utilizado para descrever a transferência de massa no misturador (gotas rígidas) obriga a um espaço tridimensional para representar o estado do sistema.

No decantador é indispensável considerar os parâmetros: comprimento (x), largura (w) e altura (H) da banda de dispersão. Quanto às coordenadas internas consideraremos apenas a coordenada dimensão das gotas, uma vez que, como já referimos, pressupomos que não ocorre transferência de massa no decantador (Ruiz, 1985; Ribeiro M., 2002) pelo que a concentração de soluto e a idade se tornam irrelevantes. Neste caso, porque se trata de um modelo de constantes distribuídas, é também necessário considerar as coordenadas externas das gotas (posição e velocidade).

3.3 O misturador

Ribeiro L. (1994) adoptou o modelo de Coulaloglou e Tavlarides (1977) para descrever o processo de divisão e coalescência (fenómenos hidrodinâmicos) das gotas da fase dispersa no misturador. Aquela autora considerou a existência de transferência de massa e desenvolveu algoritmos para dois modelos, o das gotas rígidas e o das gotas oscilantes. No nosso trabalho apenas consideramos o modelo das gotas rígidas. Trata-se do modelo numérico mais complexo, pois obriga a um espaço de estados trivariante, na

dimensão, concentração e idade da gota (enquanto que o modelo das gotas oscilantes apenas considera a dimensão e a concentração da gota). Note-se que a transferência de massa não está, neste momento a ser considerada no decantador, mas o módulo do misturador já está preparado para que tal venha a acontecer no sistema misturador-decantador, em trabalho futuro.

3.3.1 A divisão das gotas

A divisão das gotas depende de vários factores tais como: o tamanho das gotas, a tensão interfacial e a viscosidade de ambas as fases. Supõe-se que, quando uma gota se divide, a mistura no seu interior é suficiente para garantir instantaneamente uma concentração idêntica e uniforme no interior das gotas formadas, que deve igualar a concentração média da gota mãe no instante da divisão.

Para descrever o processo de divisão das gotas é necessário conhecer a frequência temporal das divisões, $g(v)$, a distribuição das dimensões das gotas filhas e o número de gotas resultantes da divisão de uma gota mãe (Ribeiro L., 1994).

$$g(v) = C_1 \frac{\varepsilon^{1/3} v^{-2/9}}{1 + \Phi} \exp \left[- \frac{C_2 \sigma (1 + \Phi)^2}{\rho_d \varepsilon^{2/3} v^{5/9}} \right] \quad (3.1)$$

Como se observa na expressão (3.1) a frequência de divisão depende das constantes adimensionais C_1 e C_2 , determinadas experimentalmente. Os parâmetros ε , σ , ρ_d e Φ representam respectivamente a potência de agitação do misturador, a tensão interfacial, a massa volúmica da fase dispersa e o *hold up*. O volume da gota representa-se por v .

A descrição do processo hidrodinâmico da divisão exige o conhecimento da distribuição das dimensões das gotas filhas e do número de gotas filhas formadas pela divisão de uma gota mãe. Coualoglou e Tavlarides (*op.cit.*) supõem que a distribuição das gotas filhas é representada por uma distribuição de probabilidade normal. Conjuntamente com a hipótese de divisão binária e escolhendo a variância da distribuição de modo a que 99.6% das gotas formadas tenham um volume compreendido entre zero e o volume da

gota mãe, Coualaloglou e Tavlarides (*op.cit.*) obtêm para função de distribuição de volumes das gotas filhas, $\beta(v' | v)$, a expressão (3.2).

$$\beta(v' | v) = \frac{2.402}{v} \exp \left[- \frac{4.5(2v' - v)^2}{v^2} \right] \quad (3.2)$$

3.3.2 A coalescência das gotas

As expressões (3.3) e (3.4) descrevem a frequência de colisão, $h(v, v')$, e a eficiência de coalescência, $\lambda(v, v')$, respectivamente, no processo hidrodinâmico da coalescência. Admite-se que o mecanismo de colisão é análogo ao da colisão entre moléculas e, para descrever a coalescência, usa-se um modelo probabilístico simples, com base no argumento de que a coalescência ocorre se o tempo de contacto das duas gotas exceder o tempo necessário para o filme líquido entre as gotas que colidem atingir a espessura crítica de rotura.

$$h(v, v') = C_3 \varepsilon^{1/3} (v^{2/3} + v'^{2/3}) (v^{2/9} + v'^{2/9})^{1/2} \quad (3.3)$$

$$\lambda(v, v') = \exp \left[- C_4 \frac{\mu_c \rho_c \varepsilon}{\sigma^2} \left(\frac{v^{1/3} v'^{1/3}}{v^{1/3} + v'^{1/3}} \right)^4 \right] \quad (3.4)$$

C_3 e C_4 são igualmente constantes e ρ_c e μ_c representam, respectivamente, a massa volúmica e a viscosidade da fase contínua.

3.3.3 Transferência de massa

A transferência de massa de um soluto entre duas fases líquidas é fortemente dependente da hidrodinâmica das interacções que ocorrem na fase dispersa (Ribeiro M., 2002). Dois modelos correntemente utilizados para descrever este fenómeno são o modelo das gotas rígidas e o modelo das gotas oscilantes (ou de circulação turbulenta). O que distingue estes dois modelos, no que diz respeito à formulação algorítmica, é o coeficiente global de transferência de massa depender unicamente da dimensão e concentração da gota no caso do modelo das gotas oscilantes,

e no caso do modelo das gotas rígidas depender também da idade da gota (Ribeiro L., 1994, p. 3-32). A escolha do modelo é determinada pelas condições operatórias em presença. No presente trabalho, supomos que não ocorre transferência de massa no módulo de decantação. No que diz respeito ao misturador utiliza-se o modelo das gotas rígidas.

3.4 O decantador

Nesta Secção descrevemos o modelo matemático para o decantador proposto por Ruiz (1985) para o estado estacionário. Este mesmo modelo será utilizado como base para o algoritmo iterativo que desenvolvemos para o estado transiente (Capítulo 4).

O modelo matemático para o decantador considera que a banda de dispersão é determinada pelo balanço entre a quantidade de dispersão que entra no decantador e a que desaparece por coalescência das gotas com a interface activa e por drenagem pela interface passiva. A coalescência que ocorre entre as gotas na banda de dispersão altera o tamanho das gotas, e portanto, influencia a coalescência com a interface.

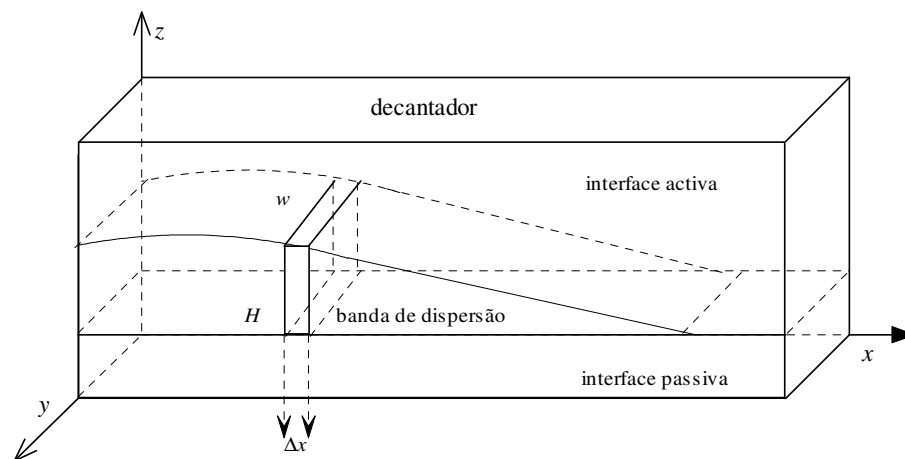


Figura 3.2: Esquema da banda de dispersão

Na Figura 3.2 representamos esquematicamente a banda de dispersão que se forma no interior do decantador (caso em que a fase dispersa é a fase de menor massa específica). Considerando uma diferenciação longitudinal da banda por elementos de volume de

secção horizontal infinitesimal $w \times H \times \Delta x$, a que chamamos volumes de controlo ou “fatias”, podemos encarar cada um deles como um vaso perfeitamente agitado, no interior do qual se processa a coalescência gota-a-gota e a coalescência com a interface activa (a drenagem é considerada de forma implícita).

O balanço para o número das gotas por unidade de tempo, numa fatia da banda de dispersão, para o estado estacionário pode expressar-se por:

(número de gotas de tamanho compreendido entre v e $v+dv$ que entra no volume de controlo por unidade de tempo) – (número de gotas de tamanho compreendido entre v e $v+dv$ que sai do volume de controlo por unidade de tempo) – (número de gotas de tamanho compreendido entre v e $v+dv$ que coalesce com a interface activa) – (número de gotas de tamanho compreendido entre v e $v+dv$ que desaparece por coalescência gota-gota no volume de controlo por unidade de tempo) + (número de gotas de tamanho compreendido entre v e $v+dv$ que surge por coalescência gota-gota no volume de controlo por unidade de tempo) = 0	(3.5)
--	-------

Ao conjunto das gotas com tamanhos (em volume) compreendidos entre v e $v+dv$, chamamos *classe de volume* v .

A equação do balanço é traduzida matematicamente pela equação (3.6), representando $n(v,x)dv$ o número de gotas da classe de volume v , na posição x , por unidade de volume da banda de dispersão, e $Q(x)$ o caudal volumétrico da dispersão que entra no volume de controlo na posição x .

$$\begin{aligned}
 & Q(x)n(v,x)dv \Big|_x - Q(x)n(v,x)dv \Big|_{x+\delta x} - \frac{w\delta x \eta^*(x)}{A_p(x)} \frac{n(v,x)dv \lambda^*(v)}{N(x)} - \\
 & \frac{wH(x)\delta x}{N(x)} \left[\int_0^\infty \lambda(v,v')n(v,x)n(v',x)dv' \right] dv + \frac{wH(x)\delta x}{2N(x)} \left[\int_0^v \lambda(v-v',v')n(v-v',x)n(v',x)dv' \right] dv = 0
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

onde,

$$Q(x) = \frac{Q_d(x)}{\eta(x)} \tag{3.7}$$

$$H(x) = \frac{Q(x)}{wU(x)} = \frac{Q_d(x)}{wU(x)\eta(x)} \quad (3.8)$$

sendo $Q_d(x)$ o caudal volumétrico da fase dispersa, $\eta(x)$ a taxa de retenção ou *hold up*, $U(x)$ a velocidade das gotas na banda de dispersão, w a largura do decantador e $H(x)$ a altura da banda na posição x do decantador.

$$\eta(x) = \begin{cases} \eta_0 + \frac{\eta_M - \eta_0}{L_M} x, & \text{se } x < L_M \\ \eta_M, & \text{se } x \geq L_M \end{cases} \quad \text{com } L_M \cong 30 \text{ cm e } \eta_M = 0.7 \quad (3.9)$$

$$U(x) = \frac{U_0 \eta_0}{\eta(x)} e^{-cx} \quad (3.10)$$

No modelo proposto, o *hold up* e a velocidade axial das gotas no decantador traduzem-se pelas expressões apresentadas em (3.9) e (3.10), onde a constante η_0 representa o *hold up* inicial, U_0 a velocidade inicial e c a constante empírica da velocidade (Ruiz (1985) obtém experimentalmente para c o valor $6.894 \times 10^{-3} \text{ mm}^{-1}$).

Na equação (3.6), a constante $\eta^*(x)$ é a fracção de superfície da fase dispersa (valor obtido experimentalmente por Ruiz *op.cit*, próximo de 1), $\lambda^*(v)$ é a frequência de coalescência gota-interface (também este parâmetro é obtido experimentalmente), $A_p(x)$ é a área média projectada das gotas e $N(x)$ é o número total de gotas por unidade de volume da banda de dispersão, na posição x .

$$N(x) = \int_0^\infty n(v, x) dv \quad A_p(x) = \frac{\pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \int_0^\infty v^{\frac{2}{3}} n(v, x) dv}{N(x)} \quad (3.11)$$

Substituindo a equação (3.7) na equação (3.6) e calculando o seu limite quando $\delta x \rightarrow 0$, obtemos a equação (3.12), função do caudal de fase dispersa:

$$\begin{aligned} \frac{d \left[\frac{Q_d(x)}{\eta(x)} n(v, x) dv \right]}{dx} = & - \frac{w \eta^*(x)}{A_p(x)} \frac{n(v, x) dv \lambda^*(v)}{N(x)} - \frac{Q_d(x)}{\eta(x) U(x) N(x)} \left[\int_0^\infty \lambda(v, v') n(v, x) n(v', x) dv' \right] dv \\ & + \frac{Q_d(x)}{2 \eta(x) U(x) N(x)} \left[\int_0^v \lambda(v - v', v') n(v - v', x) n(v', x) dv' \right] dv \end{aligned} \quad (3.12)$$

Seja $z(v, x) dv$ a frequência de gotas da classe de volume v na posição x , isto é, o número de gotas na posição x e da cada classe de volume v por unidade de volume da banda de dispersão e por unidade de tempo:

$$z(v, x) dv = Q(x) n(v, x) dv = \frac{Q_d(x)}{\eta(x)} n(v, x) dv \quad (3.13)$$

Fazendo a respectiva mudança de variável na equação (3.12), obtém-se a equação seguinte,

$$\begin{aligned} \frac{d [z(v, x) dv]}{dx} = & - \frac{w \eta^*(x) \lambda^*(v)}{A_p(x)} \frac{z(v, x) dv}{Z(x)} - \frac{1}{U(x) Z(x)} \left[\int_0^\infty \lambda(v, v') z(v, x) z(v', x) dv' \right] dv \\ & + \frac{1}{2 U(x) Z(x)} \left[\int_0^v \lambda(v - v', v') z(v - v', x) z(v', x) dv' \right] dv \end{aligned} \quad (3.14)$$

$Z(x)$ é o número total de gotas na posição x por unidade de tempo (frequência).

$$Z(x) = \int_0^\infty z(v, x) dv \quad (3.15)$$

Escrevendo-se $A_p(x)$ da seguinte forma

$$A_p(x) = \frac{\pi \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}}}{4} \frac{\int_0^\infty v^{\frac{2}{3}} z(v, x) dv}{\int_0^\infty z(v, x) dv} \quad (3.16)$$

O volume médio das gotas é dado por:

$$\bar{v}(x) = \frac{\int_0^{\infty} vn(v, x)dv}{\int_0^{\infty} n(v, x)dv} = \frac{\int_0^{\infty} vz(v, x)dv}{\int_0^{\infty} z(v, x)dv} \quad (3.17)$$

A equação (3.14) é uma equação integro-diferencial não linear que não tem uma solução analítica (Ruiz, 1985). Na Secção 4.1 descreve-se a solução numérica adoptada para a sua resolução.

3.4.1 A coalescência

No decantador pressupomos que o fenómeno da divisão não ocorre dada a baixa turbulência. No entanto, no que diz respeito ao fenómeno da coalescência consideramos que ocorrem dois tipos de coalescência, a coalescência entre as gotas e das gotas com a interface activa.

3.4.1.1 A coalescência entre as gotas

As expressões apresentadas em seguida dizem respeito à frequência de coalescência entre as gotas, seguindo ainda o modelo proposto por Ruiz (1985).

A equação (3.18) representa a frequência de morte de gotas na posição x , por unidade de volume da banda de dispersão, por coalescerem entre si. A equação (3.19) representa a correspondente frequência de nascimento das gotas. Estas expressões pressupõem que, dada a grande proximidade entre as gotas, não existe colisão, ao contrário do modelo proposto por Coulaloglou e Tavlarides (1977). Já nos referimos a este facto na Secção em que descrevemos o sistema físico.

$$\frac{1}{U(x)Z(x)} \left[\int_0^{\infty} \lambda(v, v') z(v, x) z(v', x) dv' \right] dv \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{2U(x)Z(x)} \left[\int_0^v \lambda(v - v', v') z(v - v', x) z(v', x) dv' \right] dv \quad (3.19)$$

Nas expressões (3.18) e (3.19),

$$\lambda(v, v') = \lambda_0 \left(v^{-1/3} + v'^{-1/3} \right)^2 \quad (3.20)$$

representa a frequência de coalescência entre gotas, sendo λ_0 um parâmetro que depende das propriedades físico-químicas do sistema. Ruiz (1985) usou o valor $0.40 \times 10^{-2} \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ no seu modelo computacional. Este valor foi obtido (por meio não explicitado) ajustando o modelo aos dados experimentais relativos à média dos tamanhos das gotas ao longo da banda de dispersão, no decantador. No decantador do laboratório do ISEP, Pinto (2004) obtém um valor distinto para este parâmetro, $0.23 \times 10^{-2} \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$, a partir do ajuste, pelo método de Levenberg-Marquardt, aos dados das experiências efectuadas. Os dois sistemas líquido-líquido, bem como os respectivos equipamentos, descrevem-se no Capítulo 5.

3.4.1.2 A coalescência gota-interface

A expressão (3.21) representa a frequência de colisão entre as gotas e a interface, sendo $\lambda^*(v)$ a frequência de coalescência das gotas com a interface (que se considera constante).

$$\frac{w \eta^*(x) \lambda^*(v) z(v, x) dv}{A_p(x) Z(x)} \quad (3.21)$$

Como se considera que a coalescência das gotas com a interface é independente do tamanho das gotas pode falar-se em λ_0^* em vez de $\lambda^*(v)$ (Ruiz, 1985). O valor empírico proposto por Ruiz, para o sistema líquido-líquido que utilizou foi $\lambda_0^*=0.17$. Pinto, propõe $\lambda_0^*=0.55$, valor obtido por ajuste aos dados experimentais correspondentes ao sistema líquido-líquido estudado no laboratório do ISEP (Pinto, 2004).

3.4.2 Principais hipóteses do modelo

O modelo matemático do decantador utiliza um conjunto de pressupostos para descrever o comportamento hidrodinâmico no interior da banda de dispersão. Importa referir que

este modelo considera que a espessura da banda é relativamente pequena (H aproximadamente 1 cm) correspondendo, por isso, a uma estratificação vertical incompleta. Esta simplificação leva aos pressupostos enumerados a seguir.

- Existe coalescência binária entre as gotas.
- Cada fatia vertical infinitesimal é aproximadamente homogênea relativamente à composição granulométrica da fase dispersa.
- A composição de cada fatia vertical infinitesimal é suficientemente representada por uma distribuição contínua dos calibres das gotas e pela taxa de retenção de fase dispersa (*hold up*). Dado o pequeno volume de cada fatia, essa distribuição deve considerar-se como uma distribuição de probabilidade – ponto de vista estocástico – e não como a distribuição real das gotas – ponto de vista do balanço de população. Dado, porém que as equações diferenciais obtidas não são formalmente tratadas como equações estocásticas mas como equações em médias ou modas estatísticas (hipótese de Landau), o modelo tem carácter pseudo-determinístico.
- Em cada fatia vertical infinitesimal o mecanismo de transporte não é discriminatório relativamente ao calibre das gotas (as gotas da fatia têm todas a mesma velocidade longitudinal).
- O efeito de parede é desprezável (viscosidade nula).
- Dado o fraco nível de interacção das gotas, a baixa superfície específica e o relativamente curto tempo de residência na banda de dispersão de qualquer uma das fases, supõe-se que a transferência de massa é desprezável.
- Em cada fatia, a camada superficial em contacto com a interface activa tem uma distribuição granulométrica igual à da fatia com empacotamento máximo de esferas rígidas (hipótese de conservação da esfericidade).

- A variação da taxa de retenção na fatia resulta da drenagem gravitacional da fase contínua para a interface passiva, aumentando até ao empacotamento máximo de esferas rígidas (*hold up* aproximadamente igual a 0.7).

Estes pressupostos e simplificações foram propostos por Ruiz (1985), que diz tê-los confirmado experimentalmente.

3.5 Alterações ao modelo de Ruiz

Pinto (2004) apresentou algumas propostas de alteração ao modelo descrito na Secção anterior, com vista a obter expressões de inspiração menos empírica e fisicamente mais significativas, bem como mais realistas face à situação experimental existente no laboratório do ISEP. Neste trabalho implementamos e testamos essas propostas de alteração ao modelo. Assim, apresentam-se em seguida as alternativas ao modelo matemático de Ruiz (1985) que consideramos. Os resultados obtidos com a implementação destas alternativas descrevem-se no Capítulo 5.

3.5.1 Modelo cinemático da banda de dispersão

3.5.1.1 Variação do *hold up* por drenagem gravitacional

Na versão de Ruiz considera-se, como foi já referido, a seguinte expressão para o *hold up* em função da posição ao longo da banda,

$$\eta(x) = \begin{cases} \eta_0 + \frac{\eta_M - \eta_0}{L_M} x, & \text{se } x < L_M \\ \eta_M, & \text{se } x \geq L_M \end{cases} \quad \text{com } L_M \cong 30 \text{ cm e } \eta_M = 0.7 \quad (3.22)$$

Esta formulação introduz uma descontinuidade de 2ª ordem na abcissa L_M dos perfis de velocidade e de caudal longitudinal. Este modelo empírico foi substituído por uma hipótese cinética, de primeira ordem, que traduz a drenagem gravítica, de tipo viscoso. Supõe-se que a drenagem da fase contínua da banda se faz por um mecanismo de percolação controlado pela viscosidade.

Consideramos como medida da variação da dispersão no ponto x do perfil longitudinal da banda,

$$\frac{\partial(\eta_M - \eta(x,t))}{\partial x} = -C(\eta_M - \eta(x,t)) \Rightarrow \eta(x) = \eta_M - (\eta_M - \eta_0)e^{-k \cdot x / L_M} \quad (3.23)$$

em que C é uma constante que absorve o factor de proporcionalidade entre a abcissa x e a variação do *hold up*. Tem-se que $C = k/L_M$, onde k é um factor adimensional (será $k \approx 2$ se quisermos reproduzir o comportamento global do modelo de Ruiz).

3.5.1.2 Velocidade longitudinal

Na versão proposta por Ruiz *op. cit.* a velocidade longitudinal de deslocamento da fase dispersa é dada, como foi já referido, pela expressão,

$$U(x) = U_0 \frac{\eta_0}{\eta(x)} e^{-cx}, \quad c = 0.006894 \text{ cm}^{-1} \quad (3.24)$$

Na versão que se propõe, ter-se-á simplesmente (Pinto, 2004),

$$U(x) = U_0 \frac{\eta_0}{\eta(x)} \quad (3.25)$$

3.5.1.3 Espessura da banda de dispersão

No modelo de Ruiz, a espessura da banda de dispersão é descrita por

$$H(x) = \frac{Y(x)}{W \cdot U(x) \eta(x)} = \frac{1}{W \cdot U_0 \eta_0} Y(x) e^{c \cdot x} \quad \begin{cases} Y(x) = \text{caudal volúmico entrado} \\ W = \text{largura do vaso} \end{cases} \quad (3.26)$$

Na nova formulação, a espessura da banda depende do mecanismo de drenagem. De facto, tanto o caudal volúmico que atravessa a secção transversal como a espessura da banda de dispersão tendem a decrescer.

Em regime transitório, uma banda com secção inicial de espessura crescente seguida de uma outra decrescente é dinamicamente indefensável, se supusermos,

como faz Ruiz, que a banda é alimentada pontualmente no seu início. Por outro lado, uma observação cuidadosa do fenómeno de crescimento inicial da espessura da banda em regime transitório sugere que o crescimento inicial resulta de uma distribuição da alimentação ao longo desse troço, de modo que o acréscimo de alimentação em cada secção pode superar as fugas da fase dispersa por coalescência com a interface activa e da fase contínua por drenagem para a interface passiva. Propõe-se assim, a seguinte expressão para a espessura da banda:

$$H(x) = \frac{Y(x)}{W.U(x).\eta(x)} = \frac{1}{W.U_0\eta_0}Y(x) \quad (3.27)$$

Numa primeira fase, o trabalho desenvolvido para o misturador-decantador em regime transitório utilizou o modelo matemático que acabamos de descrever para obter a banda de dispersão em cada passo no tempo.

Algumas debilidades deste modelo, demonstradas na Secção 5.3.3 levaram-nos a conceber um novo modelo para o decantador no estado transitório e que se apresenta no Capítulo 7.

4. O algoritmo misturador-decantador

- 4.1 Abordagem numérica para o decantador
- 4.2 O algoritmo misturador-decantador para estado estacionário
- 4.3 O algoritmo misturador-decantador para estado transitório
- 4.4 Critério de convergência
- 4.5 Fontes de erro
- 4.6 Critérios de paragem

4. O algoritmo misturador-decantador

O objecto do nosso estudo é, como já foi dito, um sistema misturador-decantador em regime transitório. Neste Capítulo descreve-se o algoritmo de resolução do modelo matemático do misturador-decantador que serve como simulador desse sistema. Este algoritmo compreende duas secções: a que designamos por módulo do misturador (vaso agitado) e a que designamos por módulo do decantador (decantador gravitacional longo).

O algoritmo desenvolvido para o sistema misturador-decantador em regime transitório foi construído a partir de um algoritmo que simula o comportamento do sistema em estado estacionário. Neste Capítulo descrevemos ambos os algoritmos.

O módulo do misturador utiliza em ambos os casos o algoritmo de Ribeiro L. (1994) para o vaso agitado em regime transitório. Por esta razão, faz-se uma breve descrição do seu funcionamento, não se descrevendo em pormenor os métodos numéricos utilizados para resolver as equações matemáticas.

Começamos por descrever a abordagem numérica utilizada para resolver a equação integro-diferencial que traduz os fenómenos hidrodinâmicos na banda de dispersão.

4.1 Abordagem numérica para o decantador

A equação de balanço para a população de gotas que utilizamos no módulo de simulação do decantador é a equação (3.14), referida Secção 3.4, para estado estacionário.

Trata-se, como se refere na Secção 3.4, de uma equação integro-diferencial não linear cuja resolução analítica é impossível. Recorreu-se, pois, à integração numérica, num espaço de estados discretizado.

Para proceder à discretização da variável volume, v , escolheu-se uma grelha logarítmica. O que motivou esta escolha foi o facto de o volume das gotas se poder distribuir por várias ordens de grandeza do respectivo domínio. Não é vantajoso considerar uma grelha linear com um número muito elevado de classes, o que só penalizaria o tempo de execução do programa.

A relação entre duas classes vizinhas é dada por uma progressão geométrica de razão $(v_{max} / v_{min})^{1/(n_v-1)}$, sendo n_v o número de classes, ou intervalos, de discretização (Ribeiro L., 1994). Cada classe de discretização no intervalo (v_{min}, v_{max}) é obtida por:

$$v_k = v_{min} \left(\frac{v_{max}}{v_{min}} \right)^{\frac{k-1}{n_v-1}} \quad k = 1, \dots, n \quad (4.1)$$

$$\Delta v_k = \left| v_{k+\frac{1}{2}} - v_{k-\frac{1}{2}} \right| \quad k = 1, \dots, n \quad (4.2)$$

A escolha de v_{min} e v_{max} faz-se em função das características físico-químicas do sistema em estudo.

A grelha de volumes adoptada, bem como a estratégia de discretização no módulo do decantador são as descritas por Ribeiro L. (1994) para o misturador, daí falarmos em extensão ao decantador do método utilizado no misturador. No entanto, no caso do misturador, ao considerarmos o fenómeno da transferência de massa, é necessário caracterizar a dispersão através de uma função de distribuição trivariante em que, para além do volume, se considera as restantes duas coordenadas internas, nomeadamente a concentração e a idade das gotas. No decantador, uma vez que se supõe, como aproximação aceitável, que a transferência de massa pode ser ignorada, é necessário apenas considerar a variável interna volume.

A equação (3.14), apresentada no Capítulo 3, uma vez discretizada é, substituída pela equação (4.3):

$$\frac{d[z_k(x)]}{dx} = - \overbrace{\frac{w\eta^*(x)\lambda_k^* z_k(x)}{\pi \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{nClasses} v_k^3 z_k(x)}}^A - \overbrace{\frac{1}{U(x) \sum_{k=1}^{nClasses} z_k(x)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ij} z_i(x) z_j(x) \right]}^B + \overbrace{\frac{1}{2U(x) \sum_{k=1}^{nClasses} z_k(x)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ii}^* z_i(x) z_i^*(x) \right]}^C \quad (4.3)$$

$$i^* tq v_i^* = v_j - v_i$$

Pretende-se resolver a equação (4.3) na variável interna v_k , volume de gotas, para todo o k (para todas as classes de volumes) e para cada valor da variável externa x (posição longitudinal na cunha).

O processo de resolução adoptado consiste no seguinte: para cada volume de controlo ($H \times w \times x$) correspondente à posição x na cunha de dispersão, são estudados os processos hidrodinâmicos. Assim, para este volume de controlo, calcula-se o número de gotas que aparecem e que desaparecem por coalescência entre gotas (parcelas B e C , respectivamente), e por coalescência com a interface (A), por unidade de tempo. Este cálculo permite determinar o valor de $d[z_k(x)]/dx$. Para determinar $z_k(x)$ recorre-se a um método numérico de resolução de equações diferenciais ordinárias. Neste trabalho usaram-se métodos de passo simples, o Método de Euler e o de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Se utilizarmos o Método de Euler, obtém-se $z_k(x)$ do seguinte modo:

$$z_k(x) = \frac{d[z_k(x)]}{dx} \times \text{passo} + z_k(x_{anterior}) \quad (4.4)$$

Desta forma fica-se a conhecer a frequência das gotas por unidade de volume de dispersão no volume de controlo ($H \times w \times x$) correspondente à posição x no decantador.

A condição inicial $z_k(0)$ é a frequência de gotas da classe k na posição $x=0$, ou seja à entrada do decantador. No nosso trabalho, considerámos que a dispersão que entra no decantador é a que sai do misturador, depois de ter atingido o estado estacionário, admitindo que, como refere Pinto (2004), a concepção do equipamento misturador-

decantador obedece ao princípio de manter as características da dispersão na ligação entre o módulo de mistura e o módulo de decantação.

Nas subsecções seguintes detalha-se cada uma das parcelas que constituem a equação do balanço.

4.1.1 Coalescência com a interface

A expressão (3.21) apresentada na Secção 3.4.1.2 descreve a coalescência das gotas com a interface. Em (4.5) substituem-se as variáveis existentes no denominador (a área média de gotas projectada, A_p e o número total de gotas que entra no elemento de volume por unidade de tempo, Z) pela expressões respectivas.

$$\frac{w\eta^*(x)\lambda^*(v)z(v,x)dv}{A_p(x)Z(x)} \equiv \frac{w\eta^*(x)\lambda^*(v)z(v,x)dv}{\frac{\pi}{4}\left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\int_0^{\infty}v^{\frac{2}{3}}z(v,x)dv} \equiv \frac{w\eta^*(x)\lambda^*(v)z(v,x)dv}{\frac{\pi}{4}\left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\int_0^{\infty}v^{\frac{2}{3}}z(v,x)dv} \quad (4.5)$$

Considerando a discretização dos volumes em classes, v_k , e passando os integrais a somatórios para as classes de volume.

$$\frac{w\eta^*(x)\lambda_k^*z_k(x)}{\frac{\pi}{4}\left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\sum_{k=1}^{nClasses}v_k^{\frac{2}{3}}z_k(x)} \quad (4.6)$$

onde se considera que,

$$z_k(x) = \int_{v_k}^{v_{k+1}} z(v,x)dv \quad (4.7)$$

4.1.2 Coalescência entre gotas

Na Secção 3.4.1 apresentamos também as equações (3.18) e (3.19) correspondentes às frequências de nascimento e morte das gotas por coalescência gota-a-gota.

As equações (4.8) e (4.9) são equivalentes respectivamente às equações (3.18) e (3.19) substituindo Z pela expressão respectiva.

$$\frac{1}{U(x)Z(x)} \left[\int_0^\infty \lambda(v, v') z(v, x) z(v', x) dv' \right] dv \equiv \frac{1}{U(x) \int_0^\infty z(v, x) dv} \left[\int_0^\infty \lambda(v, v') z(v, x) z(v', x) dv' \right] dv \quad (4.8)$$

$$\frac{1}{2U(x)Z(x)} \left[\int_0^v \lambda(v - v', v') z(v - v', x) z(v', x) dv' \right] dv \equiv \frac{1}{2U(x) \int_0^\infty z(v, x) dv} \left[\int_0^v \lambda(v - v', v') z(v - v', x) z(v', x) dv' \right] dv \quad (4.9)$$

Usando a discretização proposta por Ribeiro L. (1994), a equação (4.8) escreve-se,

$$\frac{1}{U(x) \sum_{k=1}^{nClasses} z_k(x)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ij} z_i(x) z_j(x) \right] \quad (4.10)$$

Do mesmo modo, a equação (4.9) escreve-se,

$$\frac{1}{2U(x) \sum_{k=1}^{nClasses} z_k(x)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ii^*} z_i(x) z_{i^*}(x) \right], \quad i^* \text{ tq } v_{i^*} = v_j - v_i \quad j=1, \dots, n \quad (4.11)$$

Nestas expressões consideramos que,

$$Z(x) = \int_0^\infty z(v, x) dv = \sum_{k=1}^{nClasses} \int_{v_k}^{v_{k+1}} z(v, x) dv = \sum_{k=1}^{nClasses} z_k(x) \quad (4.12)$$

Para diminuir a imprecisão do cálculo inerente à discretização, bem como garantir a conservação do volume de fase dispersa, usamos um procedimento descrito por Ribeiro L. (1994, p. 4-23). Este procedimento consiste em identificar, para as gotas que surgem por coalescência, a respectiva classe de volume, que corresponde à soma dos volumes das gotas intervenientes. Depois de identificada a classe resultante, a fracção das gotas que entram por coalescência é então distribuída pelas classes adjacentes.

4.1.3 Cálculo da espessura H

Foi já referido que, conhecendo a variação da distribuição do tamanho das gotas em cada elemento de volume da posição x no decantador, se aplica um método de resolução de equações diferenciais ordinárias para obter o respectivo número de gotas por unidade de volume de dispersão e por unidade de tempo. Conhecido o número de gotas em cada classe de discretização de volume, aproxima-se o valor do volume das gotas em cada classe usando-se o volume médio dessa classe. O respectivo somatório para todas as classes representa o volume de fase dispersa por unidade de tempo, ou seja, o caudal de fase dispersa, Q_d .

A altura da cunha numa posição x no decantador obtém-se pelo quociente entre o caudal e o produto da velocidade pela largura do decantador (equação (4.13)).

$$H(x) = \frac{Q_d(x)}{wU(x)\eta(x)} = \frac{Q(x)}{wU(x)} \quad (4.13)$$

4.1.4 Outras abordagens

O algoritmo misturador-decantador para o estado estacionário tem como referência o trabalho de Ruiz (1985). Também Pinto (2004) desenvolveu um algoritmo de simulação para estado estacionário a partir do trabalho efectuado por Ruiz *op.cit.* No Capítulo 5 desta dissertação faz-se a comparação dos resultados obtidos pelo nosso trabalho com os resultados obtidos por Pinto. Nesta Secção pretende-se comparar a abordagem numérica efectuada no presente trabalho com a de Pinto *op.cit.*

No módulo do misturador, Pinto *op.cit.* usa o algoritmo de Guimarães (1989) para o vaso em regime permanente. No presente trabalho utilizamos o algoritmo de Ribeiro L. (1994) para regimes transitórios.

No módulo do decantador, Pinto utiliza, tal como o presente trabalho, o modelo de Ruiz (1985). Todavia, na discretização da equação do balanço de gotas, utilizamos no nosso trabalho o método proposto por Ribeiro L. (1994) no misturador, enquanto que Pinto

segue o método utilizado por Ruiz (*op.cit.*) e que havia sido proposto anteriormente por Sastry e Gaschignard (1981).

Ambos os métodos discretizam as equações da coalescência das gotas dividindo a escala contínua do tamanho (volumes) das gotas em intervalos de classes. A grelha de discretização usada por Pinto é uma grelha logarítmica, sendo a relação entre duas classes vizinhas dada por uma progressão geométrica de razão constante, cujo valor é sugerido por Ruiz (1985, p. 103). A grelha utilizada neste trabalho é também logarítmica e de razão $(v_{max} / v_{min})^{1/(n_v-1)}$, onde n_v representa o número de intervalos da discretização em v no domínio (v_{min}, v_{max}) .

Para resolver a equação diferencial discretizada Pinto *op.cit* utiliza métodos numéricos de passo simples: o método de Euler e o método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Também utilizamos estes métodos no nosso trabalho para resolver a equação diferencial.

A diferença fundamental na abordagem numérica efectuada pelos dois trabalhos resume-se, pois, ao seguinte:

- no misturador, os algoritmos de simulação utilizados são diferentes. O trabalho de Pinto *op.cit* utiliza um algoritmo para regimes estacionários, enquanto que no nosso trabalho adoptamos um algoritmo para regimes transitórios.
- no decantador, a discretização das equações é feita de forma diferente. Pinto *op.cit.* utiliza o mesmo método que Ruiz (1985). No nosso trabalho a discretização das equações do decantador é feita usando o método utilizado no algoritmo do misturador. Trata-se do método de discretização directo usado já anteriormente por Ribeiro L. (1994) no misturador e que, sendo uma abordagem simples, é eficiente.

4.2 O algoritmo misturador-decantador para estado estacionário

Quer o algoritmo do misturador-decantador para regime estacionário, quer o algoritmo para o misturador-decantador para regime transitório compreendem essencialmente dois

módulos (para além da inicialização do sistema): a simulação do misturador e a simulação do decantador gravitacional.

Para simular o decantador no estado estacionário, começa-se por efectuar a simulação no misturador (vaso agitado) para o estado transitório, até que seja atingido o estado estacionário (em média, oito a dez vezes o tempo médio de residência no vaso, tempo este que garante a invariância da taxa de retenção a menos de 2×10^{-5} (Ribeiro L., 1994). Faz-se em seguida a ligação do misturador ao decantador. O sistema líquido-líquido que entra no decantador é o resultado da simulação do vaso depois de ser atingido o estado estacionário. A distribuição das gotas que sai do vaso e entra no decantador vai ser a solução inicial da equação diferencial, $z_k(0)$, como referimos na Secção 4.1 .

4.2.1 Inicialização do sistema

O módulo de inicialização do sistema diz respeito à leitura dos dados de entrada, a partir de um ficheiro. Este ficheiro contém os dados iniciais necessários para a simulação do comportamento do sistema, ou seja, os valores relativos à discretização a adoptar e aos modelos matemáticos utilizados, as características físicas do misturador e do decantador (dimensões) e do sistema líquido-líquido (massa volúmica, viscosidade, tensão interfacial) e as condições de funcionamento como a taxa de retenção na alimentação no misturador, a potência dissipada por unidade de massa, o tempo de residência e a definição da distribuição de volumes da fase dispersa à entrada do misturador. Os dados de entrada deste módulo são esquematizados na Figura 4.1.

Dados relativos ao decantador Comprimento Largura Altura da fenda de alimentação (H_0) Dados relativos ao sistema líquido-líquido Nome da fase contínua Massa volúmica da fase contínua Viscosidade da fase contínua Nome da fase dispersa Massa volúmica da fase dispersa Viscosidade da fase dispersa Tensão interfacial Nome do soluto Coef. de distribuição do soluto entre fases (massa/volume) Dados relativos aos modelos matemáticos Constantes de Bapat C_1, C_2, C_3 e C_4 (coalescência/divisão das gotas no misturador) Constantes inerentes ao modelo de transferência de massa (no misturador) Constantes $\lambda_0^*, \lambda_0, \eta^*$ e c inerentes ao modelo do decantador Dados de funcionamento (no misturador) Taxa de retenção na alimentação Concentração de soluto na fase contínua na alimentação Concentração de soluto na fase dispersa na alimentação Volume médio das gotas da fase dispersa na alimentação Desvio padrão da distrib. de volumes da fase dispersa na alimentação Potência dissipada por unidade de massa Tempo de residência Multiplicador do tempo de residência Passo no tempo Volume do misturador Dados da grelha de volumes Mínimo Máximo Número de intervalos Dados da grelha de concentrações Mínimo Máximo Número de intervalos
--

Figura 4.1: Dados de entrada

4.2.2 Simulação do misturador

O módulo de simulação do misturador para estado transiente usa o algoritmo de Ribeiro L. (1994), considerando o fenómeno da transferência de massa e usando o modelo das gotas rígidas. Este simulador permite prever, em regime transitório, o

comportamento da função distribuição das gotas da fase dispersa, bem como, considerando a transferência de massa, a eficiência de extracção do contactor líquido-líquido.

O simulador aplica-se a um vaso perfeitamente agitado, alimentado em regime contínuo e em que a dispersão no seu interior é homogénea, ou seja, as suas propriedades não dependem da posição no interior do vaso.

O método utilizado para a simulação do misturador é detalhadamente descrito por Ribeiro *op.cit.* Referem-se aqui apenas os aspectos mais relevantes para a compreensão do seu funcionamento e aplicabilidade ao misturador-decantador.

O programa que traduz o algoritmo de simulação para o misturador permite a definição dos parâmetros de funcionamento e dos parâmetros relativos aos modelos matemáticos. Dado que se trata de simular o regime transitório, o tempo de simulação é determinado por um multiplicador do tempo médio de residência.

Relativamente à distribuição inicial dos volumes das gotas à entrada do misturador, é possível definir o volume médio e o respectivo desvio padrão, assim como o tipo distribuição. No nosso caso seleccionamos uma distribuição Normal.

O modelo de Coulaloglou e Tavlarides (1977) utiliza, para a frequência de divisão das gotas no misturador, a potência dissipada por unidade de massa de dispersão (ou densidade mássica de potência), ε . No entanto, nas experiências realizadas em laboratório foi utilizada a velocidade de agitação no misturador, caracterizada pelo número de rotações por unidade de tempo. Surge assim a necessidade de converter rotações por unidade de tempo em potência de agitação P , utilizando-se as expressões (Pinto, 2004):

$$\varepsilon = \frac{P}{V\rho_m} \quad (4.14)$$

$$P = \frac{K_{ag}}{g} \rho_m N^3 D_{ag}^5 \left(\frac{D_{ag}^2 N \rho_m}{\mu_m} \right)^q \quad (4.15)$$

em que V é o volume da dispersão no misturador, ρ_m é a massa volúmica da dispersão, K_{ag} é um parâmetro que depende das características geométricas do equipamento utilizado e das condições operacionais, N é o número de rotações por unidade de tempo do agitador, D_{ag} o diâmetro das pás do agitador e q uma constante tal que:

$$q = \begin{cases} -1, & N_{Re} < 10 \\ \text{entre } 0 \text{ e } 1, & N_{Re} < 10^4 \\ 0, & N_{Re} \geq 10^4 \end{cases} \quad \text{em que } N_{Re} = \frac{ND_{ag}^2 \rho_m}{\mu_m} \text{ é o número de Reynolds} \quad (4.16)$$

μ_m é a viscosidade da mistura líquido-líquido,

$$\rho_m = \phi_d \times \rho_d + (1 - \phi_d) \times \rho_c \quad (4.17)$$

ρ_d e ρ_c são as massas volúmicas da fase dispersa e da fase contínua, respectivamente, e ϕ_d a fracção de fase dispersa ou *hold up*.

4.2.3 Simulação do misturador-decantador

Nesta Secção apresenta-se o algoritmo misturador-decantador, ou seja, o algoritmo resultante do acoplamento do módulo do misturador com o módulo do decantador, para o estado estacionário. Como o algoritmo do misturador trata o regime transitório e não o regime permanente, só se atinge o estacionário depois de um certo tempo de simulação (cerca de dez vezes o tempo de médio residência no vaso).

A Figura 4.2 e Figura 4.3 representam o algoritmo sob a forma de fluxograma. Como foi referido, numa primeira fase procede-se à simulação do misturador até ser atingido o estado estacionário. Depois inicia-se a simulação do sistema misturador-decantador.

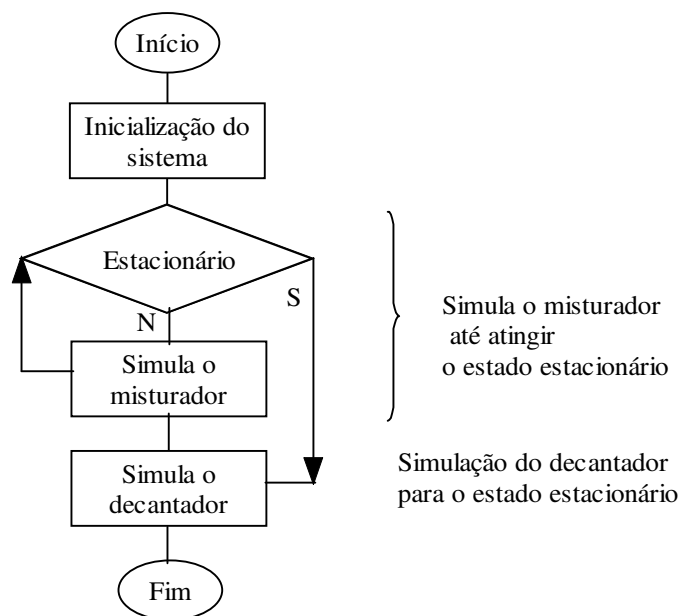


Figura 4.2: Algoritmo misturador-decantador para regime estacionário

A rotina responsável pela simulação do decantador é a rotina `Settler` e o respectivo fluxograma pode analisar-se na Figura 4.3.

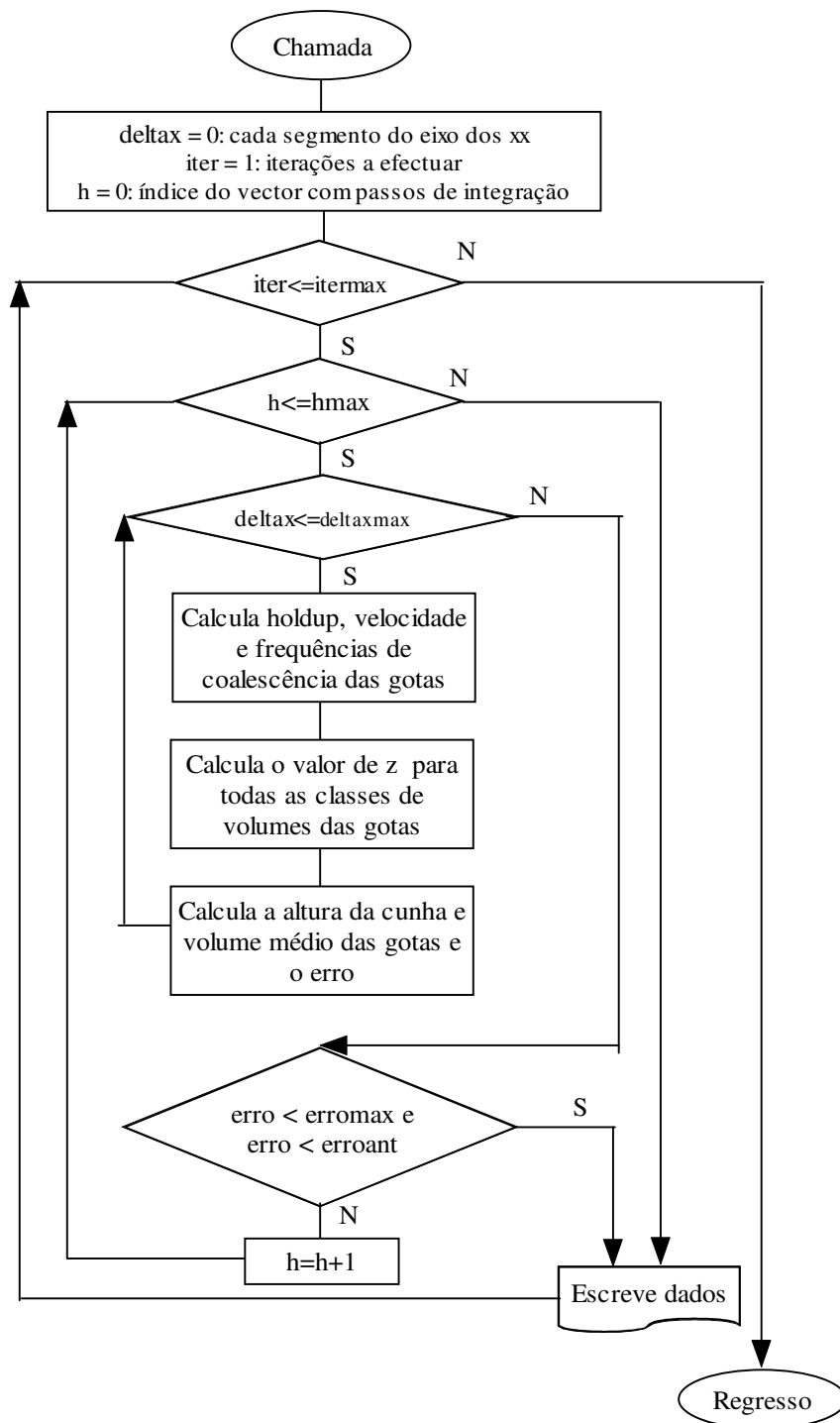


Figura 4.3: Rotina Settler

4.3 O algoritmo misturador-decantador para estado transitório

O algoritmo de simulação para regimes transitórios parte de uma situação de estado estacionário, ou seja, o início do transiente corresponde a um estado estacionário. Introduce-se uma alteração num dos parâmetros (*hold up*, caudal ou velocidade de agitação) no misturador e, como a ligação entre o misturador e o decantador em regime transitório é contínua, estuda-se o impacto que esta alteração produz na dispersão e, consequentemente, na espessura e no comprimento da banda de dispersão no interior do decantador ao longo do tempo.

A abordagem numérica é, neste caso, feita por dois tipos de integração: no espaço e no tempo. A integração no espaço foi já tratada no algoritmo estacionário. O estudo da cunha fez-se dividindo-a em pequenos segmentos (Δx) a que chamamos volumes de controlo ou fatias. A integração no tempo torna-se necessária no algoritmo para estado transitório devido às alterações ao longo do tempo na dispersão que vai dando entrada no decantador.

4.3.1 Fluxograma

Para simulação do regime transitório acrescentou-se ao algoritmo do decantador para o estado estacionário a componente relativa à integração no tempo. Na Figura 4.4 apresenta-se o respectivo fluxograma.

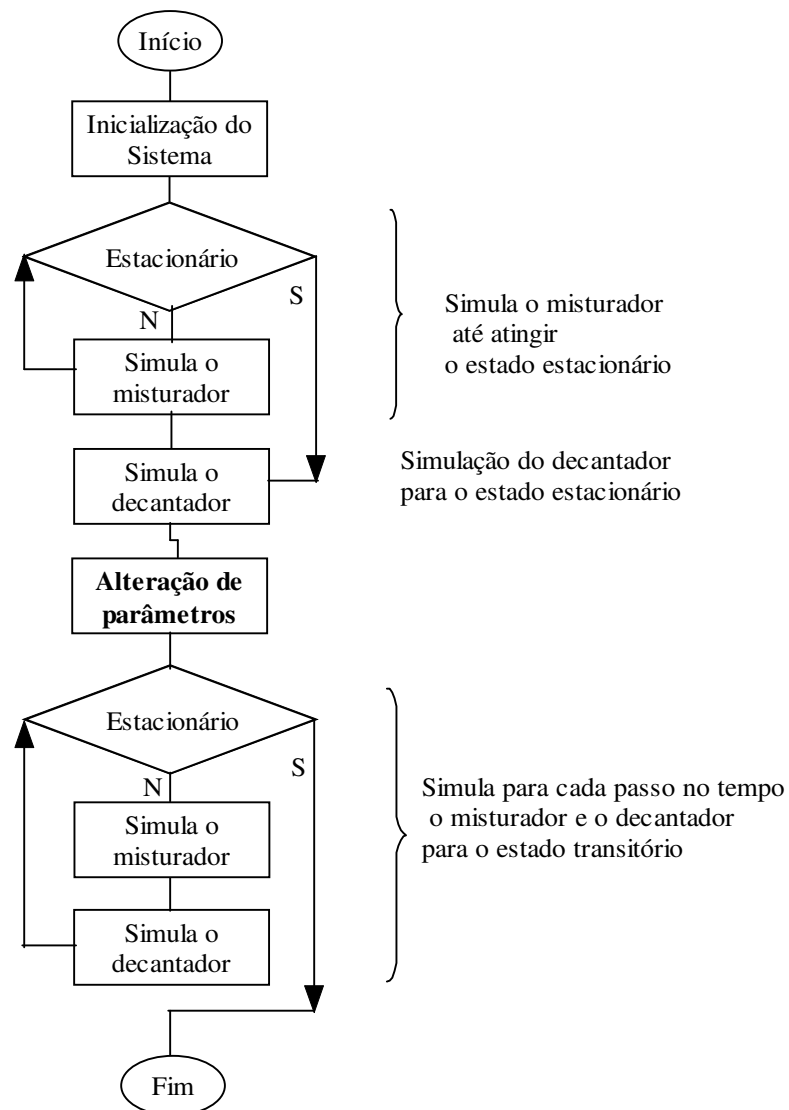


Figura 4.4: Algoritmo de simulação para regime transitório

Vamos começar por descrever a abordagem ao problema do transiente de uma forma mais geral, passando, nas secções seguintes, a uma descrição mais detalhada. Assim, nesta descrição supõe-se que as gotas na dispersão têm, em cada segmento (ou fatia), uma velocidade longitudinal independente do calibre das gotas (hipótese do modelo já referida na Secção 3.4.2).

No instante inicial considera-se uma situação de estado estacionário (Figura 4.5). No primeiro passo no tempo, provoca-se uma alteração nas condições operacionais do vaso que leva a uma alteração nas características da dispersão. A dispersão sai do misturador

e entra no decantador ocupando a 1ª fatia de discretização no espaço (de x_1 até x_2). As fatias de discretização seguintes não foram afectadas. Por isso, a distribuição das gotas mantém-se nessas fatias idêntica à do estado anterior, que corresponde ao estacionário (Figura 4.6). No passo de tempo seguinte a dispersão no vaso continua em alteração (não atingiu o estado estacionário) e ao chegar ao decantador vai entrar para o 1º espaço. No entanto, a alteração provocada anteriormente já afectou o 2º espaço (Figura 4.7). Ou seja, em cada instante, a dispersão que acabou de sair do vaso entra para o 1º espaço no decantador, tendo a dispersão anterior passado para o 2º, a anterior a essa para o 3º e assim por diante (Figura 4.8). Como consequência, os efeitos do estado estacionário de que se partiu, só deixam de estar presentes na cunha ao fim do tempo necessário para que a 1ª dispersão a entrar no decantador, depois do estacionário, percorra todos os segmentos de discretização em x .

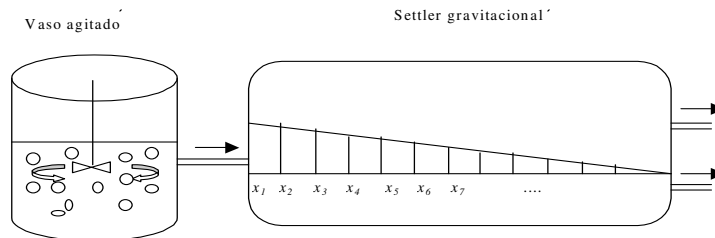


Figura 4.5: Cunha no regime estacionário

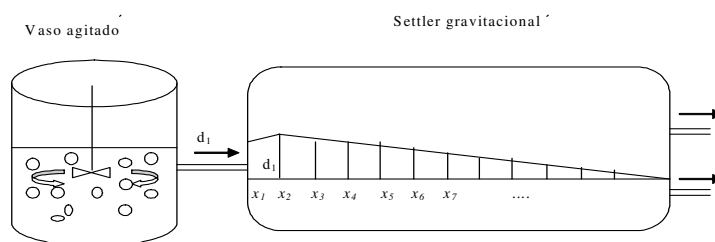


Figura 4.6: Cunha em regime transitório – 1º passo no tempo

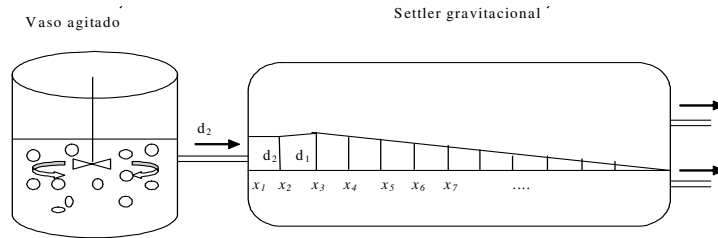


Figura 4.7: Cunha em regime transitório – 2º passo no tempo

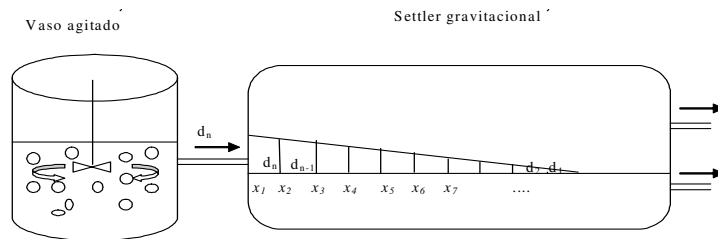


Figura 4.8: Cunha em regime transitório – n-ésimo passo no tempo

Na Secção seguinte descreve-se a estrutura de dados utilizada na implementação do algoritmo. A utilização desta estrutura permite-nos calcular de forma eficiente a banda de dispersão durante a simulação.

4.3.2 Estrutura de dados para a implementação do modelo

Na Secção anterior descrevemos, de um modo geral, o algoritmo de simulação para o regime transitório. Nesta Secção descreve-se detalhadamente esse algoritmo, bem como a estrutura de dados de suporte.

Para cada tempo t , o algoritmo calcula as alturas $hc_t(x)$ da banda de dispersão. A altura em cada posição x resulta da composição das últimas k alturas da banda de dispersão nos tempos $h_t(x)$, $h_{t-1}(x)$, $h_{t-2}(x)$, ..., $h_{t-k}(x)$, calculadas usando a rotina Settler, onde k

depende do comprimento do decantador e da velocidade das gotas $U(x)$. A forma como se obtém a cunha composta depende da velocidade longitudinal das gotas, $U(x)$, correspondendo ao número máximo de passos no tempo necessários para alcançar a última fatia da cunha. Essa composição descreve-se na Secção seguinte.

Na implementação do método utiliza-se uma estrutura de dados que permite um cálculo eficiente da cunha pretendida em cada passo no tempo. Essa estrutura de dados é uma matriz M com o número de linhas n_lin e com o número de colunas n_col . O valor de n_lin é igual a k . O número de colunas, n_col , é igual ao número de pontos para os quais calculamos a espessura da cunha.

A matriz M é preenchida escrevendo obliquamente cada cunha $h_t(x)$ resultante da rotina Settler (Figura 4.4), começando na linha i . Por exemplo, na situação hipotética da velocidade, $U(x)$, ser constante e igual a 1 cm/s, a cunha $h_t(x)$ é escrita numa diagonal. Quando a escrita da cunha $h_t(x)$ atinge a última linha de M , essa mesma escrita continua a partir da primeira linha da matriz, permitindo a reutilização constante desta estrutura de dados, como se mostra na Secção seguinte. Na Secção seguinte descrevemos o preenchimento da matriz M para o caso geral.

Da forma como a matriz M está definida, $hc_t(x)$ encontra-se na linha $i=(t \bmod n_lin)$ e coluna $j=x$ da matriz. Estamos a supor que cada fatia tem 1 cm de comprimento o que implica colocar $j=x$. Caso contrário teríamos $j=\text{parte inteira}[x/\text{comprimento da fatia}]$. Por exemplo, se estivermos numa situação em que se pretende obter a altura da cunha para cada centímetro (comprimento da fatia) até aos 100 cm, temos $n_col=100$ e $n_lin=100+\text{constante}$ (por exemplo 110) e $hc_{(t \bmod 110)}(x)$. Esta constante é necessária porque o número de fatias percorridas para cada passo no tempo depende de $U(x)$ e, quando esta velocidade é em média inferior a 1 cm/s, precisa-se de mais que 100 s para que o último segmento da banda de dispersão seja atingido. Assim sendo, precisamos de mais linhas na matriz.

4.3.3 Preenchimento da estrutura de dados

Na Secção anterior descreveu-se a matriz M que vai guardando as alturas da cunha calculadas em cada iteração no tempo. Nesta Secção descreve-se o seu preenchimento ao longo do tempo, para o caso geral.

As alturas são guardadas na matriz da seguinte forma (supõe-se novamente, apenas por simplicidade na descrição, que o comprimento máximo da cunha é 100 cm e que o passo de integração no espaço é 1 cm):

- inicialmente, todas as linhas da matriz M são iguais e contêm as alturas correspondentes à 1ª cunha calculada ($h_1(x)$, correspondente ao estado estacionário inicial).
- para cada iteração $t > 1$, o novo valor para a posição (i, j) da matriz M é calculado da seguinte forma:
 - Δt_{long} : esta variável representa o tempo que a dispersão demora a atingir cada um dos segmentos. No início da simulação é zero.
 - para cada segmento $]x-1, x]$ ($x = 1, 2, \dots, 100$) ao longo da cunha, calcula-se o valor de $h_t(x)$ e coloca-se este valor na posição i, j da matriz.
 - $\Delta t_{long} = \Delta t_{long} + 1/U(x)$, esta variável é actualizada de acordo com a velocidade longitudinal estimada no segmento;
 - $i = \text{parte inteira de } [(\Delta t_{long} + t) \bmod n_{lin}]$
 - $j = x$

Nas figuras seguintes, a título de exemplo, descrevem-se algumas iterações do algoritmo do transiente onde se esquematiza o processo de preenchimento usando uma matriz M simplificada de cinco linhas e cinco colunas, supondo uma velocidade longitudinal constante de 1 cm/s. Em cada iteração tem-se $\Delta t_{long} = \Delta t_{long} + 1$, ou seja, está-se a supor que num segundo a dispersão avança 1cm. A primeira matriz ilustra M

depois do 1º passo no tempo em que o algoritmo preenche as linhas da matriz com os valores (i, j) da cunha estacionária (Figura 4.9).

1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
1,1	1,2	1,3	1,4	1,5

Figura 4.9: Matriz M para o 1º passo no tempo

Na 2ª iteração, a cunha $h_2(x)$ (na Figura 4.10 a negrito) é escrita na diagonal da matriz M . Obtém-se $hc_2(x)$ na 1ª linha.

2,1	1,2	1,3	1,4	1,5
1,1	2,2	1,3	1,4	1,5
1,1	1,2	2,3	1,4	1,5
1,1	1,2	1,3	2,4	1,5
1,1	1,2	1,3	1,4	2,5

Figura 4.10: Matriz M para o 2º passo no tempo

Na 3ª iteração escreve na diagonal da matriz M a cunha $h_3(x)$. O último valor calculado é guardado, de forma circular, novamente na 1ª linha (ver Figura 4.11). Obtém-se $hc_3(x)$ na segunda linha da matriz;

2,1	1,2	1,3	1,4	3,5
3,1	2,2	1,3	1,4	1,5
1,1	3,2	2,3	1,4	1,5
1,1	1,2	3,3	2,4	1,5
1,1	1,2	1,3	3,4	2,5

Figura 4.11: Matriz M para o 3º passo no tempo

Como se pode ver na Figura 4.12, na 4ª iteração escreve na diagonal da matriz M a cunha $h_4(x)$ e obtém-se $hc_4(x)$;

2,1	1,2	1,3	4,4	3,5
3,1	2,2	1,3	1,4	4,5
4,1	3,2	2,3	1,4	1,5
1,1	4,2	3,3	2,4	1,5
1,1	1,2	4,3	3,4	2,5

Figura 4.12: Matriz M para o 4º passo no tempo

Saltando para a 6ª iteração, escreve a cunha $h_6(x)$ na diagonal da matriz M e obtém-se $hc_6(x)$ na última linha da matriz (ver Figura 4.13). Na próxima iteração t recomeçaria a escrita na linha 1 da matriz M .

2,1	6,2	1,3	4,4	3,5
3,1	2,2	6,3	1,4	4,5
4,1	3,2	2,3	6,4	1,5
5,1	4,2	3,3	2,4	6,5
6,1	5,2	4,3	3,4	2,5

Figura 4.13: Matriz M para o 6º passo no tempo

4.4 Critério de convergência

Dada a necessidade de se fazer a integração no espaço (x) e no tempo (t), e como a abordagem numérica é feita de forma directa usando um método de resolução de equações diferenciais ordinárias, a escolha dos passos de integração bem como do critério de convergência a utilizar têm grande importância na implementação do algoritmo de simulação do misturador-decantador, principalmente no que diz respeito ao decantador. A dupla integração começará necessariamente pelo espaço (x) uma vez que:

- a) o modelo do misturador – concebido como vaso perfeitamente homogéneo e, portanto, desprovido de dimensão espacial – comporta apenas uma integração no tempo;
- b) a lógica do modelo do decantador permite propagação bidireccional das perturbações ao longo do comprimento do decantador.

No programa computacional que traduz o algoritmo, usou-se primeiro o método de Euler e depois o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, ambos métodos de resolução de equações diferenciais de passo simples (o programa permite optar por um dos dois

métodos). Os resultados obtidos pelos dois métodos foram comparados e apresentam-se na Secção 6.3.

O critério de convergência seguido na resolução da equação diferencial, e no que diz respeito ao espaço, foi o critério adoptado por Pinto (2004) no seu algoritmo para o estado estacionário. Assim, podemos mais facilmente comparar o algoritmo por nós proposto com o de Pinto.

O método referido usa a expressão seguinte para avaliar a solução aproximada, y ,

$$2^n - \varepsilon \leq \frac{y - y'}{y' - y''} \leq 2^n + \varepsilon \quad (4.18)$$

utilizando três passos, Δx , $\Delta x' = \Delta x/2$, $\Delta x'' = \Delta x/4$, e em que n representa a ordem do método, ε a precisão pretendida, e y , y' e y'' as soluções obtidas para os sucessivos passos, respectivamente.

Testa-se a convergência usando estes três passos no espaço. Se o passo Δx passar o teste usam-se os cálculos efectuados para o passo Δx . Caso contrário voltamos a dividir o passo até encontrar uma malha suficientemente fina que assegure a convergência. A solução testada ou função de teste, y , é o número total de gotas calculado em cada secção transversal do decantador (ou fatia).

A rigor, o teste de convergência deveria praticar-se a cada passo de integração (quer espacial, quer temporal) e, para poupar passos de integração, deveria – no caso de, em algum momento, não ter sido necessário diminuir o passo – contemplar-se também a hipótese do seu crescimento, utilizando Δx , $\Delta x' = 2\Delta x$, $\Delta x'' = 4\Delta x$. Porém, na implementação que propomos utilizamos um passo de integração uniforme no comprimento da cunha.

Neste momento não está implementado o teste de convergência à integração temporal, mas tem-se o cuidado de, em cada passo no tempo, partir-se não do último valor utilizado, mas sempre de um mesmo valor inicial Δx previsivelmente demasiado grande, a fim de evitar o risco de partir de um passo tão pequeno que os erros de

arredondamento e os de truncatura provocados pela precisão limitada da máquina se sobreponham aos erros próprios da ordem do método de integração utilizado, induzindo em erro o critério de convergência.

Considerando que, desta forma, a escolha do passo de integração espacial fica na dependência do passo de integração temporal arbitrado, este último é tomado como fixo, da ordem de 1 segundo de tempo físico, o que parece sensato face à experiência computacional e física de que dispomos. Esta decisão foi posteriormente avaliada ao efectuar simulações para passos mais pequenos (e maiores) e comparar os resultados obtidos (isto porque um passo no tempo mais apertado pode levar a um passo no espaço mais largo e o balanço entre os dois deverá ser avaliado com cuidado). A avaliação destes resultados faz-se na Secção 6.2.

4.5 Fontes de erro

Em qualquer método numérico, cujo objectivo é fornecer uma solução numérica de um dado problema matemático, é necessário avaliar o erro com que a solução está a ser apresentada. Sabe-se que existem três principais fontes de erro em computação numérica: os erros nos dados, os erros de truncatura e os erros de arredondamento (Higham, 2002).

A incerteza nos dados deve ser sempre considerada quando estamos a resolver problemas práticos. Este tipo de erros pode surgir de várias fontes: nas medições, nomeadamente quando se consideram poucos dígitos; na transcrição dos dados; ou serem já resultado de algum cálculo afectado de erros.

Num modelo numérico que é uma aproximação discreta de um modelo matemático, precisamos de, por um lado, garantir que está a convergir para a solução do problema e, por outro, ter noção da grandeza do erro global (ou erro de discretização) que estamos a cometer. Para este erro, contribuem os erros de truncatura e de arredondamento locais. Para que se verifique a convergência de um método numérico deve verificar-se que o erro global tende para zero à medida que a discretização se torna mais fina.

No nosso algoritmo importa pois estimar o erro que estamos a cometer quando procedemos à discretização do espaço de estados (coordenadas x e v) e do tempo. A análise do efeito da discretização na precisão numérica dos resultados apresenta-se no Capítulo 6. Importa referir que esta análise é feita por comparação dos resultados obtidos contra os resultados experimentais publicados (sujeitos também a erro). Esta validação tem a limitação de apenas testar o estado estacionário, devido ao facto de não haver dados experimentais suficientes para testar o regime transiente, objecto de estudo deste trabalho.

É aqui importante salientar os erros inerentes aos valores dos parâmetros respeitantes aos modelos matemáticos que estamos a utilizar. Como referimos na Secção 5.2, não fizemos, neste trabalho, um ajuste exaustivo dos parâmetros. Assim, no que diz respeito, por exemplo, ao modelo hidrodinâmico no misturador, e uma vez que não existem valores universais, utilizamos para as constantes C_1 , C_2 , C_3 e C_4 os valores publicados por Bapat (1982). No entanto, Ribeiro M. (2002), ao ajustar estas constantes a valores experimentais, recorrendo a um algoritmo de optimização (Levenberg-Marquardt) encontra valores diferentes. Para a constante C_1 , por exemplo, obtém um desvio percentual superior a 60% e para a constante C_4 obtém um desvio percentual superior a 80%.

4.5.1 Erros de truncatura

Os erros de truncatura respeitam ao erro que se comete ao trincar a série de Taylor, infinita, para aplicar o método numérico. Dependem da ordem do método, do tamanho do passo de integração e ainda do problema específico em presença. Quando estes erros se propagam, podem tornar o algoritmo instável, isto é, originar que uma pequena perturbação nos dados leve a grandes desvios nos resultados calculados. Um requisito óbvio para se obter sucesso num algoritmo numérico é tornar o erro de truncatura o mais pequeno possível (no limite, nulo).

No programa computacional que desenvolvemos para o misturador-decantador, permitimos a escolha entre dois métodos de resolução numérica de equações

diferenciais: Euler ou Runge-Kutta de 4ª ordem. Saliente-se que o método de Euler pode ser visto como um método de Runge-Kutta de 1ª ordem.

O método de Euler, por ser um método de integração de 1ª ordem, pode exigir passos de integração muito pequenos para se obter um resultado com uma precisão considerada adequada, o que pode implicar um grande esforço computacional, tornando impraticável a obtenção de resultados em tempo útil. Actualmente, com o avanço tecnológico dos computadores, tendo aumentado muito a rapidez dos processadores e a capacidade de memória disponível, esta limitação do método de Euler pode não ser relevante. Em contrapartida, a escolha de um passo de integração muito pequeno pode tornar o erro de arredondamento dominante.

O método de Runge-Kutta de 4ª ordem consegue, geralmente, conduzir a resultados com uma precisão elevada. Neste caso, o esforço computacional está relacionado essencialmente com a necessidade de calcular a função quatro vezes em cada passo de integração.

Fehlberg, Verner e Merson propuseram técnicas para usar o método de Runge-Kutta estimando o erro de truncatura local para cada passo de integração, com o objectivo de aumentar a precisão numérica (Conte e Boor, 1983). No entanto, é necessário ter em conta que as estimativas de erro fornecidas por alguns destes métodos mais comuns não são válidas, por exemplo, na integração de equações não-lineares. O método de Runge-Kutta-Merson foi construído para um caso especial de um sistema diferencial linear com coeficientes constantes, sendo a estimativa do erro só aplicável a este tipo de problema (Cartwright e Piro, 1992).

Existem também métodos baseados nos métodos de Runge-Kutta que possibilitam a escolha dinâmica entre métodos de diferentes ordens, dependendo da estimativa do erro obtida em cada passo de integração.

4.5.2 Erros de arredondamento

Os erros de arredondamento, devidos à precisão finita das máquinas de cálculo, podem afectar gravemente os resultados calculados. Este tipo de erro depende do tipo e do número de operações aritméticas usadas em cada passo de integração, dado que se propagam durante a execução do código.

Como vimos na Secção anterior, a diminuição do passo de integração pode ser necessária para reduzir o erro de truncatura. Todavia, a diminuição do passo de integração pode implicar que os erros de arredondamento se tornem dominantes relativamente aos primeiros. A escolha do passo de integração, em particular nos métodos de passo simples (caso dos métodos de Runge-Kutta), carece de uma análise criteriosa.

No algoritmo que desenvolvemos, consideramos, como já referimos, uma discretização logarítmica em v . Esta escolha é importante porque reduz os erros de arredondamento (e o tempo de execução), dado que evita cálculos envolvendo números muito pequenos (relativos aos volumes mais pequenos do intervalo de discretização) que poderiam levar inclusive a erros de cancelamento. A forma como o algoritmo redistribui os volumes da fracção de gotas que surgem por coalescência contribui também para a obtenção de resultados mais precisos.

Também já referimos que adoptámos um método numérico de passo simples com um passo de integração uniforme em x (ao longo da banda de dispersão) para a resolução da equação de balanço, no módulo do decantador. No entanto, não só por questões de economia de tempo de execução mas também para minimizar os erros de arredondamento, entre cada duas integrações sucessivas em x , voltamos a utilizar o passo de integração inicial. O valor adoptado para o passo de integração é fixado pelo critério de convergência referido na Secção 4.4.

Salientamos também que para a execução do programa computacional que desenvolvemos e apresentamos neste trabalho, utilizámos dupla precisão numa arquitectura de 32 bits.

4.6 Critérios de paragem

Quando se usam algoritmos iterativos é necessário saber quando se deve parar o cálculo, de forma a obter uma solução adequada para o problema que se está a resolver. O critério ideal seria, sendo conhecida a função (solução analítica), o majorante do erro associado ao método numérico. Este critério seria mais rigoroso, mas impossível de aplicar na prática.

Uma técnica bastante utilizada consiste na comparação de duas soluções consecutivas, estabelecendo-se uma tolerância ε . Sejam x_n e x_{n-1} as duas soluções consecutivas. Poder-se-ia adoptar $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$.

4.6.1 No misturador-decantador

No programa de simulação do misturador-decantador para o estado transitório tem-se em linha de conta os critérios de paragem para a dimensão espaço e para a dimensão tempo.

No espaço, os cálculos são efectuados até que a altura da banda de dispersão que se forma no decantador seja inferior ao diâmetro médio das gotas.

A experiência tem mostrado que a dispersão no misturador atinge o estado estacionário após oito a dez vezes o tempo médio de residência (Ribeiro L., 1994). Assim, a escolha do tempo de cálculo é condicionada por este acontecimento, verificando-se que a espessura da banda de dispersão e o volume médio das gotas estabilizam a menos de 0.5×10^{-2} e 0.5×10^{-4} respectivamente (o arredondamento efectuado a 2 e 4 casas decimais justifica-se pelo facto de os resultados publicados, com os quais os valores de simulação obtidos foram comparados, terem esta representação).

5. Análise dos resultados

5.1 O misturador

5.2 O misturador-decantador para o estado estacionário

5.3 O misturador-decantador para estado transitório

5.4 Algoritmo modificado

5.5 Discussão dos resultados

5. Análise dos resultados

Como foi referido, o algoritmo para o misturador-decantador compreende duas componentes, uma relativa ao misturador e outra relativa ao decantador. Estas duas componentes foram descritas no Capítulo 4.

Neste Capítulo apresentam-se os resultados obtidos para os dois regimes, ‘misturador-decantador estacionário’ e ‘misturador-decantador transiente’ e faz-se a sua análise.

5.1 O misturador

O programa de simulação do misturador utilizado neste trabalho tem como base, como foi referido em 4.2.2, o algoritmo de Ribeiro L. (1994) para o vaso agitado em regime transitório, considerando o fenómeno da transferência de massa e usando o modelo das gotas rígidas.

Atendendo que a implementação do algoritmo de Ribeiro L. (1994) foi, neste trabalho, realizada noutra linguagem (C++) e noutro ambiente de desenvolvimento (MS-Windows, Visual Studio), começamos por comparar os resultados obtidos para a simulação do vaso agitado.

Ribeiro, *op.cit*, escolheu dois sistemas físicos para efectuar os testes de simulação. Esta escolha foi condicionada pelo trabalho de Guimarães relativo à simulação do misturador em regime estacionário (Guimarães, 1989), que serviu para validação dos resultados de Ribeiro.

Dado que o nosso programa se baseia no mesmo algoritmo já validado por Ribeiro, comparamos os resultados apenas para um dos casos: o caso A (Ribeiro L., 1994, p. 5-4) relativo ao sistema Tolueno – Acetona – Água.

Os parâmetros utilizados na simulação estão indicados na Tabela 5.1. Salienta-se que a função de distribuição dos volumes das gotas na alimentação do vaso é uma função

Normal, cujo volume médio $\langle v_e \rangle$ e desvio padrão σ_e se encontram igualmente indicados na Tabela 5.1.

A discretização utilizada é a mesma de Ribeiro, *op.cit.*, sendo logarítmica em volumes, no domínio $[10^{-12}, 10^{-9} \text{ m}^3]$, e linear em concentrações, no domínio $[0, 20 \text{ Kg/m}^3]$.

Parâmetro	Valor
C_1	0.481×10^{-2}
C_2	0.558×10^{-1}
C_3	0.165×10^{-2}
$C_4 \text{ [m}^{-2}\text{]}$	0.474×10^{13}
C_s	0.300×10
$c_{c0} \text{ [Kg.m}^{-3}\text{]}$	0.200×10^2
$c_{d0} \text{ [Kg.m}^{-3}\text{]}$	0.000
$k_c \text{ [m.s}^{-1}\text{]}$	0.200×10^{-4}
$\langle v_e \rangle \text{ [m}^3\text{]}$	0.500×10^{-9}
$\mu_c \text{ [Kg.m}^{-1}\text{.s}^{-1}\text{]}$	0.001
$\rho_c \text{ [Kg.m}^{-3}\text{]}$	1000
$\sigma_e \text{ [m}^3\text{]}$	0.625×10^{-10}
ϕ	0.050
$D_{AD} \text{ [m}^2\text{.s}^{-1}\text{]}$	0.267×10^{-8}
m	0.700
$\rho_d \text{ [Kg.m}^{-3}\text{]}$	860
$\sigma \text{ [J.m}^{-2}\text{]}$	0.032

Tabela 5.1: Parâmetros das simulações

Na simulação utilizaram-se para valores de tempo de residência, θ , 120 segundos e da potência dissipada por unidade de tempo, ε , 0.15 W.Kg^{-1} . No que se refere à discretização dos volumes das gotas e das concentrações, utilizaram-se 36 classes de discretização. O passo no tempo foi de 1 segundo.

Para os parâmetros descritos, comparamos os valores obtidos por cada um dos programas para os valores médios do *hold up*, volume ($\langle v \rangle$), concentração ($\langle c \rangle$), eficiência de extracção ($\langle \text{efic.} \rangle$), idade ($\langle \tau \rangle$) e frequências de divisão ($\langle \text{fq.div.} \rangle$) e de coalescência ($\langle \text{fq.coal.} \rangle$).

Na Figura 5.1 apresentamos o comportamento do *hold up* ao longo do tempo, para um tempo de simulação igual a dez vezes o tempo de residência. Verifica-se que o *hold up* tende assintoticamente para um valor limite igual ao valor do *hold up* na alimentação, como era esperado.

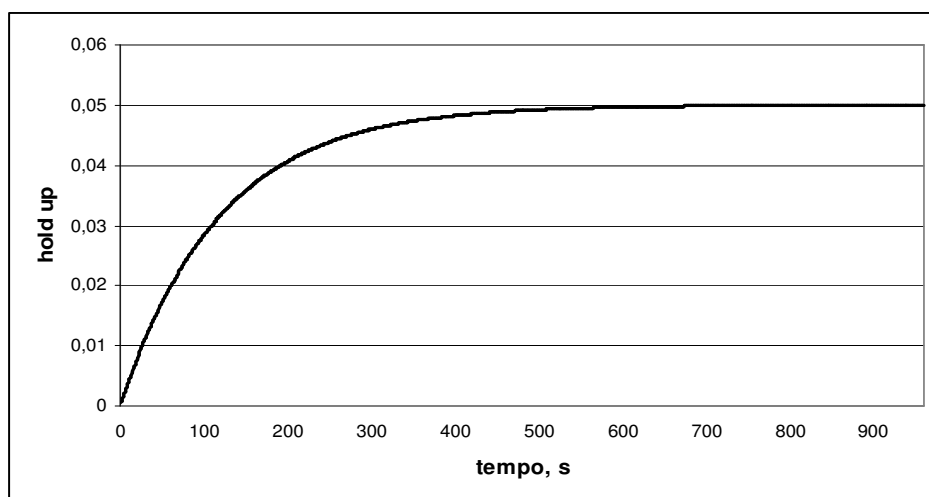


Figura 5.1: Evolução do hold up no tempo

Analisou-se, igualmente, a variação das frequências de interacção (coalescência e divisão) ao longo do tempo de simulação. Na Figura 5.2 pode ver-se o resultado obtido. O comportamento das duas curvas é o mesmo que o descrito por Ribeiro no seu trabalho *op.cit.*

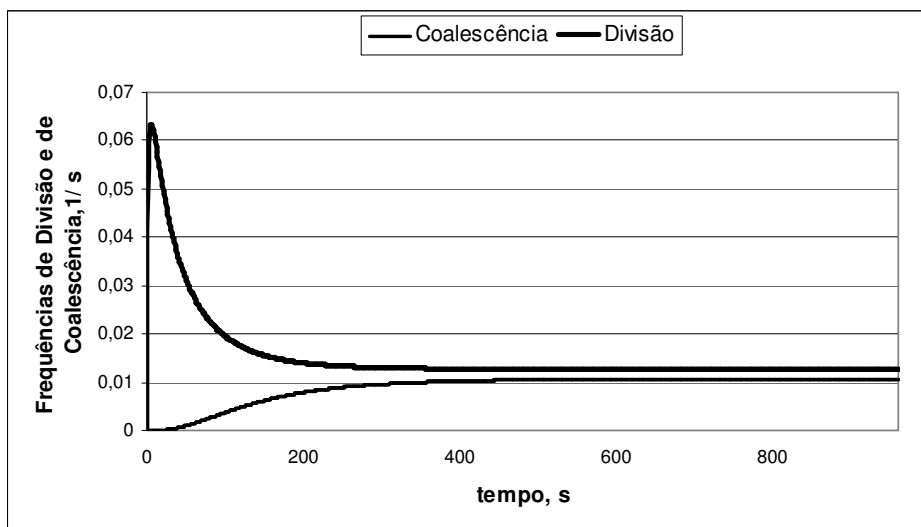


Figura 5.2: Variação das frequências de interação no tempo

Compararam-se também os valores obtidos por ambos os programas para diferentes discretizações dos volumes (v) e das concentrações (c), em regime estacionário ($8 \times \theta$).

Nº Classes $v \times c$	$\langle v \rangle$ $\times 10^{-9} [\text{m}^3]$	$\langle c \rangle$ $[\text{Kg.m}^{-3}]$	$\langle \text{efic} \rangle$	$\langle \tau \rangle$ [s]	$\langle \text{fq.div} \rangle$ $\times 10^{-2} [\text{s}^{-1}]$	$\langle \text{fq.coal.} \rangle$ $\times 10^{-2} [\text{s}^{-1}]$
12x12	0.06104	12.78	0.9429	35.59	1.207	1.109
36x36	0.06301	12.74	0.9409	35.56	1.268	1.069
60x60	0.06297	12.73	0.9404	35.55	1.267	1.070

Tabela 5.2: Resultados obtidos para diferentes classes de discretização (Ribeiro, 1994)

Nº Classes $v \times c$	$\langle v \rangle$ $\times 10^{-9} [\text{m}^3]$	$\langle c \rangle$ $[\text{Kg.m}^{-3}]$	$\langle \text{efic} \rangle$	$\langle \tau \rangle$ [s]	$\langle \text{fq.div} \rangle$ $\times 10^{-2} [\text{s}^{-1}]$	$\langle \text{fq.coal.} \rangle$ $\times 10^{-2} [\text{s}^{-1}]$
12x12	0.06104	12.77	0.9422	35.59	1.207	1.109
36x36	0.06301	12.73	0.9401	35.57	1.268	1.069
60x60	0.06297	12.72	0.9396	35.56	1.267	1.070

Tabela 5.3: Resultados obtidos para diferentes classes de discretização

Como se observa na Tabela 5.2 e na Tabela 5.3, os resultados relativos ao comportamento hidrodinâmico são os mesmos para a precisão considerada por

Ribeiro L. (1994). No que respeita à transferência de massa, observam-se pequenas diferenças que não excedem, em qualquer caso 0.1%, sendo para a idade das gotas da ordem de 0.03%.

Na simulação do sistema misturador-decantador estes erros relativos não têm significado, em particular pelo facto de no decantador o fenómeno de transferência de massa ser menosprezável, como justificado em 3.3.

Ribeiro faz ainda vários estudos acerca das distribuições bivariantes das gotas *volume-concentração*, *volume-idade* e ainda *concentração-idade*. Na Figura 5.3 apresenta-se a densidade das distribuições bivariantes em v e em c obtidas pelo nosso programa de simulação, para uma potência dissipada por unidade de massa $\varepsilon=0.15 \text{ W.Kg}^{-1}$ e um tempo de residência $\theta=120$ segundos. O resultado é obtido ao fim de 960 segundos de simulação, correspondendo ao estado estacionário da dispersão no vaso ($t=8\times\theta$). O resultado é comparável com o apresentado e analisado por Ribeiro L. (1994, p. 5-25).

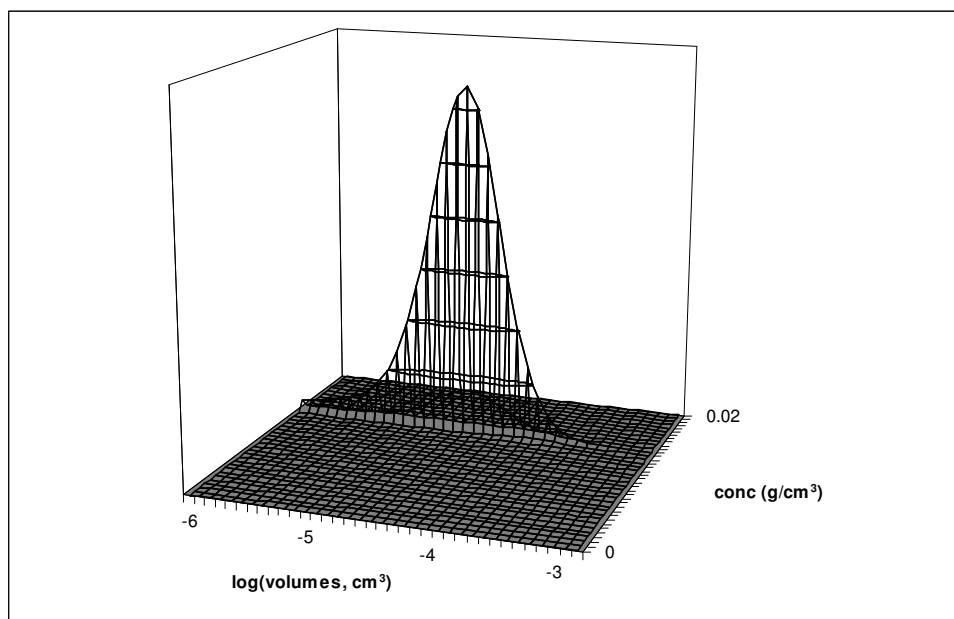


Figura 5.3: Distribuição das gotas $\text{volume} \times \text{concentração}$

5.2 O misturador-decantador para o estado estacionário

Nesta Secção apresentam-se e analisam-se os resultados da simulação do misturador-decantador em estado estacionário. Este programa utiliza o algoritmo do misturador referido na Secção anterior, capaz de simular regimes transitórios, acoplado com o algoritmo do decantador, para o estado estacionário. Depois da dispersão no vaso atingir o estado estacionário (em geral oito a dez vezes o tempo de residência no vaso (Ribeiro L., 1994), simula-se o seu comportamento no decantador no estado estacionário. Comparamos os resultados obtidos no presente trabalho com os resultados obtidos por Ruiz (1985) (experimentais e por simulação) e por Pinto (2004).

Tal como os autores acima citados, analisámos os resultados obtidos para a espessura da banda de dispersão e para os volumes médios das gotas ao longo do decantador. Utilizámos também, para esta análise, os dois métodos que referem, a saber:

- cálculo dos desvios (erro relativo) ds , obtido em cada ponto,

$$ds = \left| \frac{\bar{x}_i - x_i}{\bar{x}_i} \right|, \quad \bar{x}_i = \text{experimental}, \quad x_i = \text{simulado} \quad (5.1)$$

considerando para desvio global a média dos desvios, obtido pela expressão $\Sigma ds/(n-1)$, em que n é o número de pontos da banda de dispersão onde se efectuaram as medidas.

- análise da variância, onde os valores obtidos por simulação são comparados com os valores obtidos experimentalmente por Ruiz (1985). Esta autora utiliza o teste F para avaliar se o modelo prevê de forma aceitável a variação do volume médio das gotas ao longo da cunha de dispersão. O nível de significância usado, α , foi 0.1.

$$\frac{S_r^2}{S_e^2} > F_{1-\alpha}(v_1, v_2), \quad v_1 \text{ e } v_2 \text{ graus de liberdade} \quad (5.2)$$

Se a desigualdade em (5.2) se verificar o modelo é considerado desadequado.

Na equação anterior S_r^2 representa a média dos quadrados dos desvios do modelo de simulação e S_e^2 a média dos quadrados dos erros experimentais.

$$S_r^2 = \frac{\sum_{i=1}^n p_i \left(\frac{\bar{\bar{v}}_i - \hat{v}_i}{\bar{\bar{v}}_i} \right)^2}{n-1} \quad (5.3)$$

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} \left(\frac{\bar{v}_{ij} - \bar{\bar{v}}_i}{\bar{\bar{v}}_i} \right)^2}{\sum_{i=1}^n p_i - n} \quad (5.4)$$

$\bar{\bar{v}}_i$ é a média dos volumes médios para as amostras experimentais para cada posição x_i , $\hat{v}_i$ é o valor correspondente obtido por simulação, $\bar{v}_{ij}$ é o valor médio experimental para cada uma das amostras j em cada posição x_i . O parâmetro p_i pode ter o valor 0, 1 ou 2, dependendo do número de valores a considerar nas amostras para uma dada posição (acontece frequentemente só estar registado o valor para uma das amostras).

No caso das experiências publicadas por Ruiz, a autora afirma que $S_e^2=0.0247$ para 39 graus de liberdade. Nos nossos cálculos, efectuados a partir das tabelas fornecidas pela autora, obtivemos um valor ligeiramente diferente, $S_e^2=0.0252$ e foi este o valor que utilizamos.

Note-se que, embora este método se destine à análise de variância, as hipóteses a testar dizem respeito às médias e não às variâncias. No entanto, utilizam-se aqui as variâncias para definir a estatística do teste S_r^2/S_e^2 . Este teste pressupõe que as observações para os vários grupos constituem amostras aleatórias independentes entre si e que as populações de onde se retiram as amostras seguem distribuições normais, com iguais variâncias.

No caso presente, consideramos que a distribuição dos volumes das gotas ao longo do decantador segue uma distribuição normal. No que refere aos volumes médios das gotas em cada posição x_i do decantador, tendo apenas duas amostras experimentais não podemos afirmar, por falta de informação, que sigam a distribuição normal. No entanto, dado que a autora que publicou os valores obtidos para cada uma das amostras segue o teste-F vamos supor que os pressupostos se verificam.

Para validar o programa de simulação desenvolvido, vamos comparar os resultados que obtivemos para a espessura da banda de dispersão e para os volumes médios das gotas ao longo do decantador com:

- 1) os resultados experimentais publicados por Ruiz (1985);
- 2) os resultados experimentais obtidos por Pinto (2004), no laboratório do ISEP.

5.2.1 Primeiro conjunto de dados experimentais

Ruiz descreve um conjunto de experiências e apresenta os respectivos resultados. Esta autora, usando sempre o mesmo sistema líquido-líquido (Tabela 5.4), faz variar o caudal de fase dispersa, o caudal de fase contínua, o *hold up*, a velocidade de agitação e a largura do decantador (ver Tabela 5.5). O sistema líquido-líquido é composto por 0.25 M NaSO₄ (fase contínua, ou aquosa) e por 10%LIX 64N em Chevron (fase dispersa ou orgânica), extractante muito usado na indústria do cobre. A temperatura no misturador foi mantida a 24-25°. Na Tabela 5.4 apresentam-se as propriedades físicas do sistema líquido-líquido.

	Massa volúmica [g/cm ³]	Viscosidade [cps]	Tensão superficial [dyne/cm]
0.25 M NaSO ₄	1.029	1.16	26.8-27.2
10% LIX 64N Chevron	0.813	1.94	56.4-58.2

Tabela 5.4: Propriedades físicas das fases líquidas (temperatura a 25°)

O sistema misturador-decantador utilizado por Ruiz para análise experimental é composto por um misturador rectangular com 20 cm de comprimento, 20 cm de largura e 29 cm de altura. Usou uma turbina de 10.2 cm de diâmetro, com seis pás curvas de largura igual a 1/8 do diâmetro. A dispersão sai do misturador por um canal com 19 cm de largura. O decantador é uma caixa rectangular com 100 cm de comprimento, 20 cm de largura e 20 cm de altura. O decantador contém um compartimento estreito, de 0.6 cm de largura, para receber a dispersão. Este compartimento contém uma fenda horizontal, localizada a 13.5 cm de altura, com dimensões 19cm × 0.9 cm, para distribuir a dispersão (Ruiz, 1985).

Exp	Caudal fase dispersa [L/min]	<i>Hold up</i>	Velocidade agitação [rpm]	Largura decantador [cm]
1	1.20	0.50	360	20
2	0.88	0.37	360	20
3	1.10	0.50	360	20
4	1.00	0.50	475	20
5	1.00	0.50	285	20

Tabela 5.5: Condições experimentais

Analizamos de seguida os resultados obtidos pelo programa de simulação SM-D, para as experiências descritas na Tabela 5.5. Note-se que os diversos parâmetros que intervêm no modelo foram escolhidos de acordo com os dos autores mencionados. No que diz respeito ao misturador e relativamente ao modelo hidrodinâmico usaram-se os valores obtidos por Bapat (1982); no que diz respeito ao decantador utilizaram-se os valores apresentados por Ruiz (1985). Não houve, no nosso trabalho, um ajuste exaustivo de parâmetros em busca dos melhores valores possíveis (usando, por exemplo, um algoritmo de ajuste de parâmetros do tipo Levenberg-Marquardt), por sair do âmbito dos objectivos que nos propusemos.

Passamos a apresentar os valores obtidos pelo programa de simulação, SM-D (misturador acoplado ao algoritmo do decantador), pelo programa de simulação de Pinto (SP), pelo programa de simulação de Ruiz (SR), bem como os valores obtidos experimentalmente (EXP).

É importante referir que estes resultados são os obtidos pelo programa de simulação (SM-D) correspondente ao algoritmo completo de simulação. Os outros dois programas (SR e SP) tratam apenas o módulo de decantação, utilizando à entrada do decantador a função lognormal para representar a distribuição em volumes das gotas. Usam uma grelha logarítmica com 56 classes, em que os valores dos volumes seguem uma progressão geométrica de razão igual a 1.3087. Esta grelha logarítmica é utilizada no domínio $[2.65 \times 10^{-14}, 7.07 \times 10^{-8} \text{ m}^3]$. No programa SM-D usou-se a grelha logarítmica referida em 4.1, cujos volumes seguem uma progressão geométrica de razão $(v_{max}/v_{min})^{1/(nv-1)}$, de 30 classes no domínio $[10^{-14}, 10^{-6} \text{ m}^3]$.

Importa também referir que ao utilizar o programa acoplado misturador-decantador, a velocidade de agitação do misturador teve que ser convertida para potência de agitação, uma vez que é esta a medida utilizada no modelo de divisão das gotas no módulo do misturador. Para efectuar essa conversão começou por utilizar-se a expressão apresentada em 4.2.2. No entanto, surgiram dificuldades inerentes à necessidade de se conhecer as características geométricas do equipamento e as condições operatórias. Ruiz (1985), ao descrever as experiências, não fornece todas as características necessárias, tais como o diâmetro da pá de agitação (não é claro ser 10.2 cm) e o valor utilizado para o parâmetro do modelo do agitador, K_{ag} . Em contrapartida, fornece os valores dos volumes médios das gotas à entrada do decantador. Assim, neste trabalho, utilizamos também esta informação para ajustar a potência de agitação.

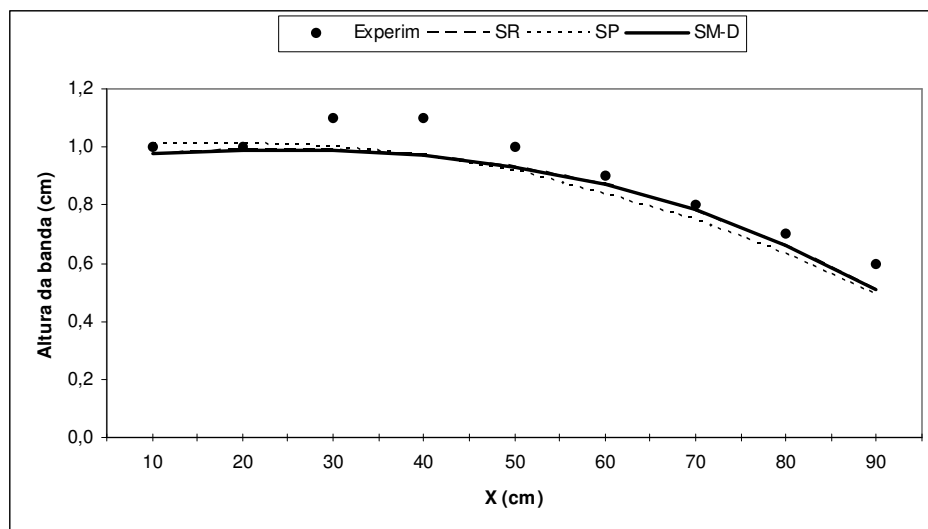


Figura 5.4: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 1)

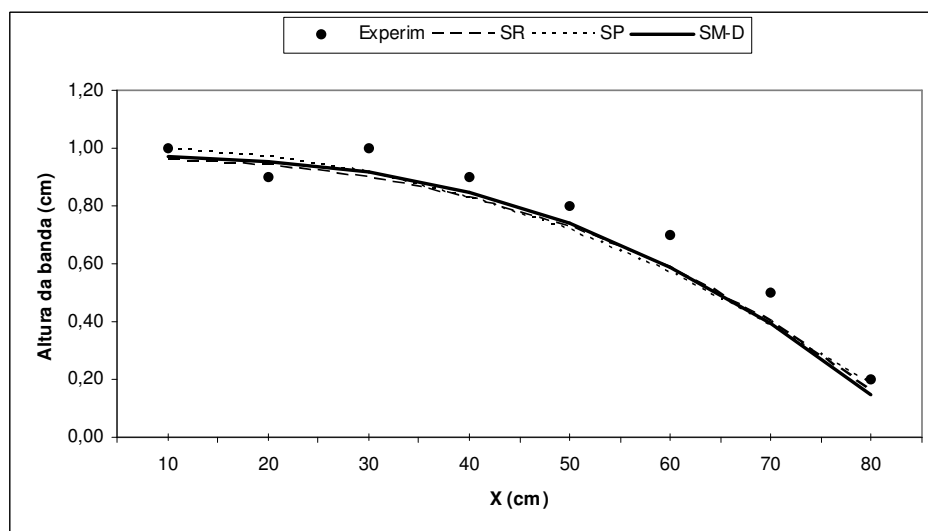


Figura 5.5: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 2)

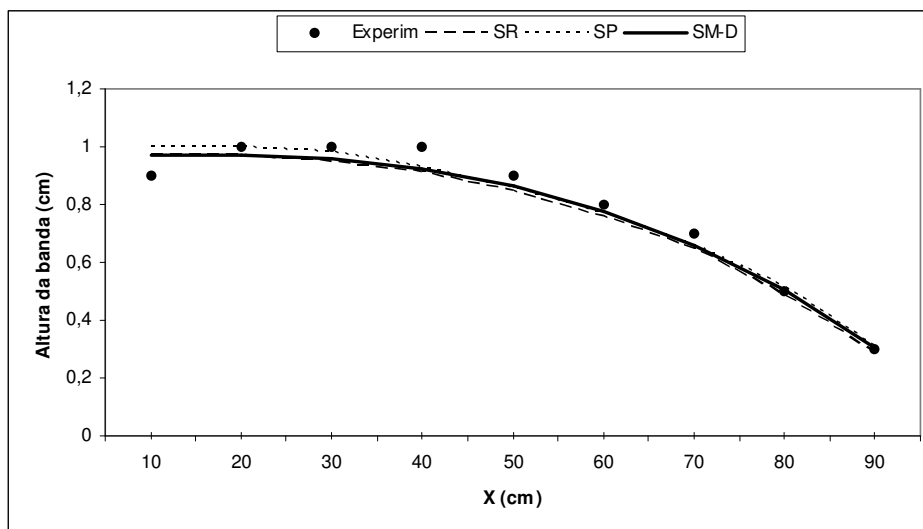


Figura 5.6: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 3)

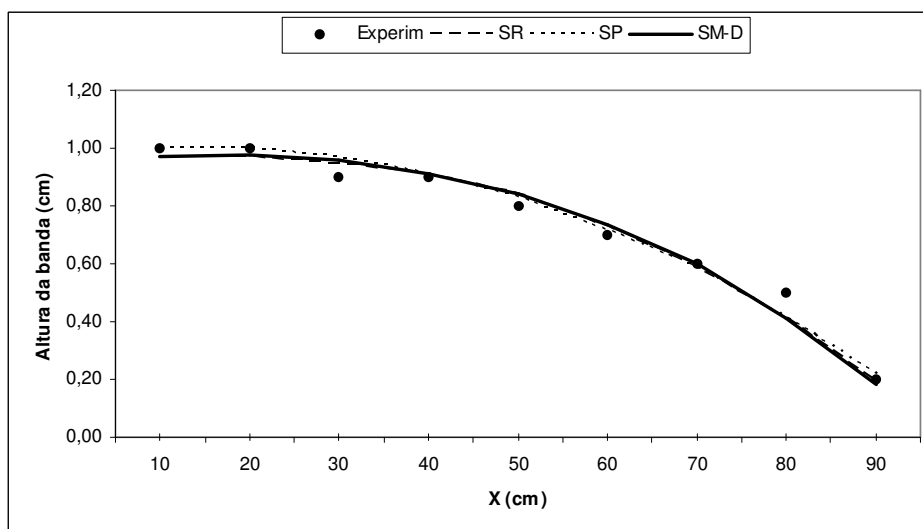


Figura 5.7: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 4)

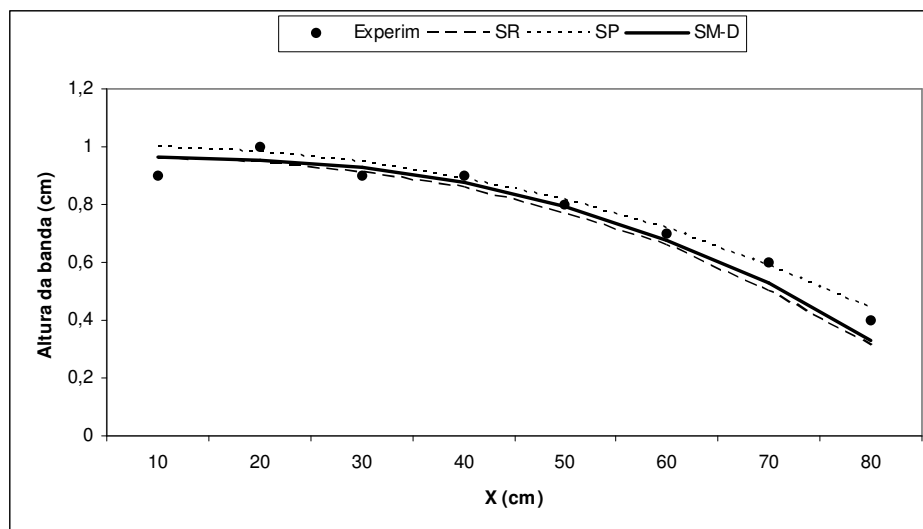


Figura 5.8: Espessura da banda de dispersão no decantador (experiência 5)

Apresentamos de seguida as tabelas com os desvios obtidos para cada um dos programas para a altura da banda ao longo do decantador, relativamente aos valores experimentais publicados.

Ao analisarem-se os valores dos desvios pode verificar-se que os valores se aproximam bastante (são da mesma ordem de grandeza) e que o presente programa de simulação, apesar de não ter sido ajustado parametricamente, apresenta bons resultados.

Para cada experiência, os desvios médios obtidos são assinalados na última linha da tabela respectiva. Em termos de desvio, o programa que obtém o melhor resultado não é sempre o mesmo. Relativamente aos comprimentos máximos da banda de dispersão, os resultados são também equivalentes.

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	1,0	0,98	1,01	0,98	0,02	0,01	0,02
20	1,0	0,99	1,01	0,99	0,01	0,01	0,01
30	1,1	0,99	1,00	0,99	0,10	0,09	0,10
40	1,1	0,97	0,97	0,97	0,12	0,12	0,12
50	1,0	0,93	0,92	0,93	0,07	0,08	0,07
60	0,9	0,87	0,84	0,87	0,03	0,07	0,03
70	0,8	0,78	0,75	0,78	0,03	0,06	0,02
80	0,7	0,66	0,63	0,66	0,06	0,10	0,05
90	0,6	0,51	0,49	0,51	0,15	0,18	0,15
$\Sigma ds/(n-1)$					0,07	0,09	0,07

Tabela 5.6: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados
(experiência 1)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	1,0	0,96	1,00	0,97	0,04	0,00	0,03
20	0,9	0,94	0,97	0,96	0,04	0,08	0,06
30	1,0	0,90	0,92	0,92	0,10	0,08	0,08
40	0,9	0,83	0,83	0,85	0,08	0,08	0,06
50	0,8	0,73	0,72	0,74	0,09	0,10	0,08
60	0,7	0,59	0,57	0,59	0,16	0,19	0,16
70	0,5	0,40	0,39	0,39	0,20	0,22	0,21
80	0,2	0,16	0,18	0,14	0,20	0,10	0,28
$\Sigma ds/(n-1)$					0,13	0,12	0,14

Tabela 5.7: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados
(experiência 2)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,9	0,97	1,00	0,97	0,08	0,11	0,08
20	1,0	0,97	1,00	0,97	0,03	0,00	0,03
30	1,0	0,95	0,98	0,96	0,05	0,02	0,04
40	1,0	0,91	0,93	0,92	0,09	0,07	0,08
50	0,9	0,85	0,86	0,86	0,06	0,04	0,04
60	0,8	0,76	0,77	0,78	0,05	0,04	0,03
70	0,7	0,65	0,66	0,66	0,07	0,06	0,06
80	0,5	0,49	0,52	0,50	0,02	0,04	0,01
90	0,3	0,29	0,31	0,31	0,03	0,03	0,02
$\Sigma ds/(n-1)$					0,06	0,05	0,05

Tabela 5.8: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados
(experiência 3)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	1,0	0,97	1,00	0,97	0,03	0,00	0,03
20	1,0	0,97	1,00	0,98	0,03	0,00	0,02
30	0,9	0,95	0,97	0,96	0,06	0,08	0,06
40	0,9	0,91	0,91	0,91	0,01	0,01	0,02
50	0,8	0,84	0,83	0,84	0,05	0,04	0,05
60	0,7	0,73	0,72	0,74	0,04	0,03	0,05
70	0,6	0,59	0,59	0,60	0,02	0,02	0,00
80	0,5	0,41	0,42	0,41	0,18	0,16	0,17
90	0,2	0,19	0,22	0,18	0,05	0,10	0,09
$\Sigma ds/(n-1)$					0,06	0,05	0,06

Tabela 5.9: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados
(experiência 4)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,9	0,96	1,00	0,96	0,07	0,11	0,07
20	1,0	0,95	0,98	0,96	0,05	0,02	0,04
30	0,9	0,91	0,95	0,93	0,01	0,06	0,03
40	0,9	0,86	0,89	0,87	0,04	0,01	0,03
50	0,8	0,77	0,82	0,79	0,04	0,02	0,01
60	0,7	0,66	0,72	0,68	0,06	0,03	0,03
70	0,6	0,50	0,59	0,53	0,17	0,02	0,12
80	0,4	0,31	0,44	0,33	0,23	0,10	0,17
$\Sigma ds/(n-1)$					0,09	0,05	0,07

Tabela 5.10: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 5)

Acrescentamos ainda a esta análise da espessura da banda de dispersão, o teste estatístico de Kolmogorov-Smirnov (Reis *et al.*, 2001) para duas amostras de igual dimensão. Este teste avalia a hipótese de duas distribuições serem ou não provenientes da mesma distribuição, não obrigando a qualquer pressuposto sobre a forma dessa distribuição.

Exp	n	p-value
1	9	0.1243
2	8	0.9640
3	9	0.6994
4	9	0.9794
5	8	0.9640

Tabela 5.11: Resultados obtidos com um nível de significância de 5% para cada uma das experiências

Os resultados apresentados na coluna “p-value” (valor de prova) da Tabela 5.11 obtiveram-se utilizando a ferramenta R 1.7.1 (Ihaka e Gentleman, 1996) para comparar, para cada uma das experiências, os valores obtidos pelo programa de simulação SM-D com os valores experimentais. Estes resultados mostram que, para todas as cinco experiências, com diferentes dimensões (n), o valor de prova é sempre superior a 0.05, o que permite concluir que, para o nível de significância 5%, os valores obtidos por simulação são fiáveis.

Avaliamos também o comportamento relativo do programa de simulação (SM-D) no que diz respeito aos volumes médios das gotas ao longo da banda de dispersão. Este comportamento representa-se nos gráficos seguintes.

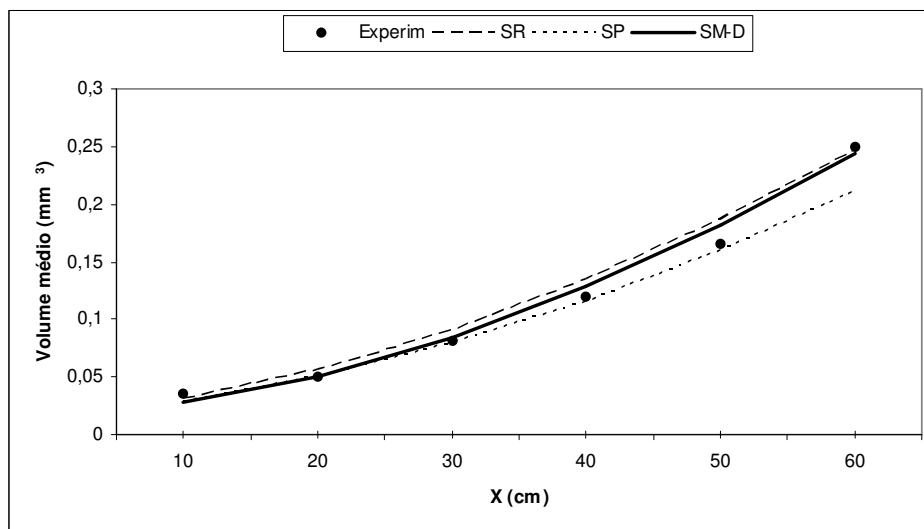


Figura 5.9: Volume médio das gotas no decantador (experiência 1)

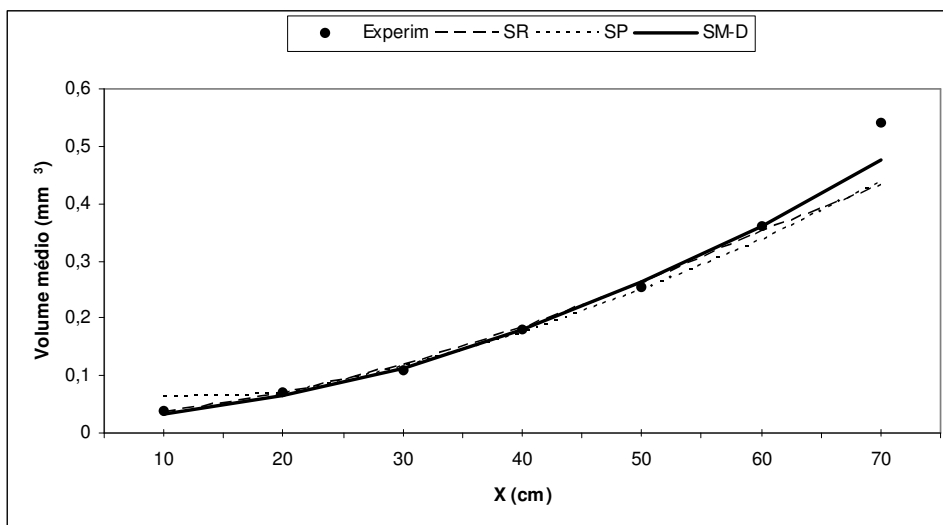


Figura 5.10: Volume médio das gotas no decantador (experiência 2)

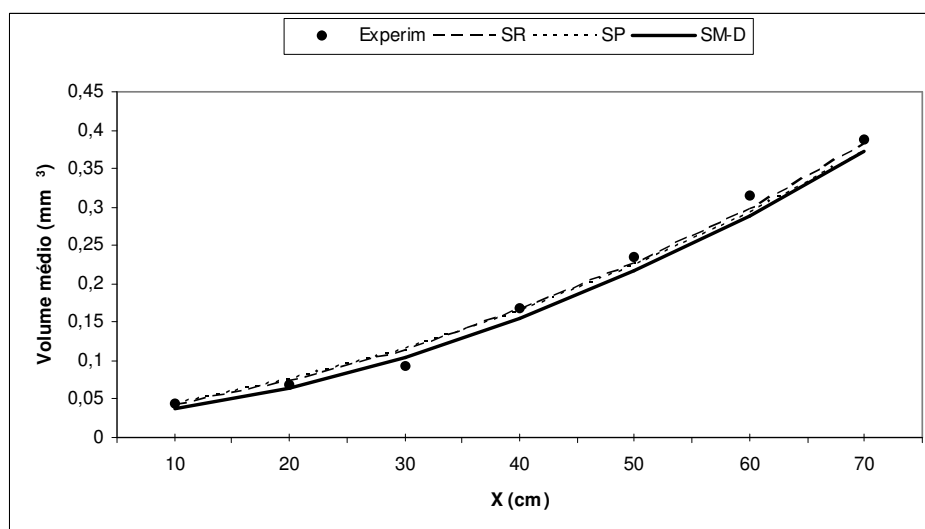


Figura 5.11: Volume médio das gotas no decantador (experiência 3)

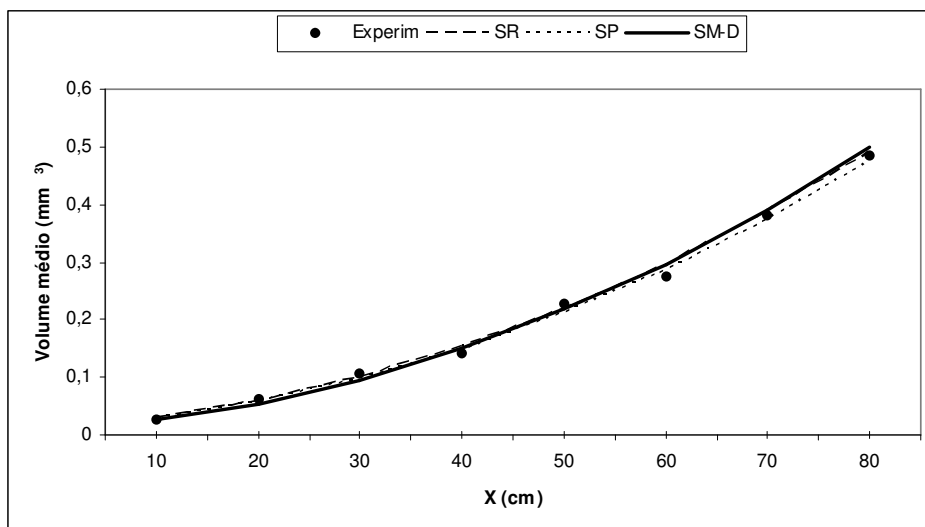


Figura 5.12: Volume médio das gotas no decantador (experiência 4)

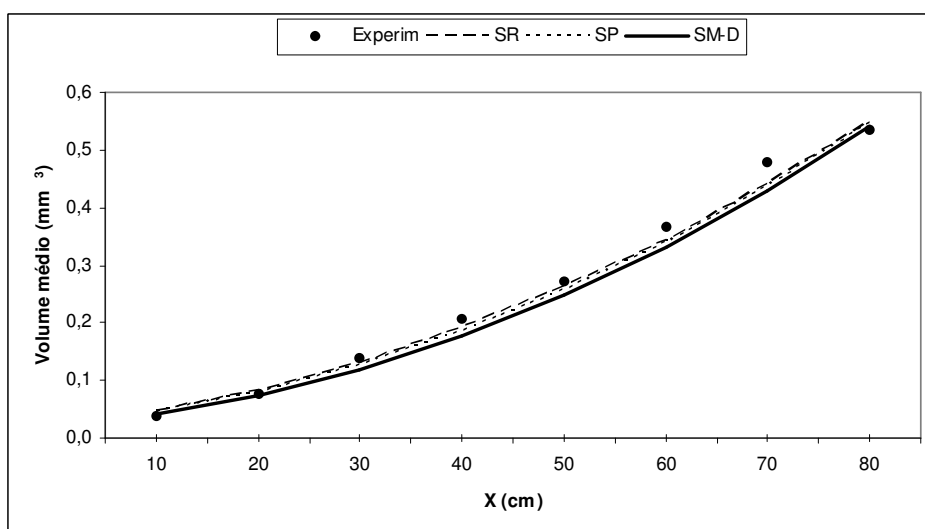


Figura 5.13: Volume médio das gotas no decantador (experiência 5)

Analisemos, agora, os desvios nos resultados obtidos. Nas tabelas seguintes apresentam-se também os valores para a razão s_r^2/s_e^2 e para $F_{1-\alpha}(v_1, v_2)$, bem como os graus de

liberdade de cada simulação. Foi já referido que, para os dados experimentais, Ruiz utilizou 39 graus de liberdade (Ruiz, 1985).

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,0355	0,0307	0,0285	0,0273	0,1352	0,1972	0,2297
20	0,0499	0,0561	0,0504	0,0510	0,1254	0,0110	0,0227
30	0,0811	0,0905	0,0796	0,0848	0,1166	0,0179	0,0461
40	0,1194	0,1340	0,1160	0,1287	0,1223	0,0285	0,0775
50	0,1650	0,1860	0,1600	0,1815	0,1273	0,0303	0,1002
60	0,2495	0,2470	0,2110	0,2442	0,0100	0,1543	0,0214
$\Sigma ds/(n-1)$					0,13	0,09	0,10
S_r^2 / S_e^2					1,252	1,030	1,141
$F_{0,90}(5,39) = 2,002$							

Tabela 5.12: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 1)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,0386	0,0352	0,0363	0,0326	0,0881	0,0596	0,0881
20	0,0709	0,0680	0,0677	0,0638	0,0402	0,0445	0,0402
30	0,1105	0,1170	0,1138	0,1131	0,0588	0,0299	0,0588
40	0,1805	0,1820	0,1754	0,1805	0,0083	0,0283	0,0083
50	0,2530	0,2600	0,2486	0,2628	0,0277	0,0174	0,0277
60	0,3620	0,3530	0,3363	0,3612	0,0249	0,0710	0,0249
70	0,5420	0,4620	0,4385	0,4772	0,1476	0,1910	0,1476
$\Sigma ds/(n-1)$					0,07	0,07	0,07
S_r^2 / S_e^2					0,333	0,407	0,578
$F_{0,90}(6,39) = 1,932$							

Tabela 5.13: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 2)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,0435	0,0413	0,0434	0,0367	0,0495	0,0012	0,1553
20	0,0690	0,0725	0,0744	0,0647	0,0515	0,0790	0,0619
30	0,0932	0,1140	0,1147	0,1043	0,2232	0,2307	0,1188
40	0,1695	0,1660	0,1647	0,1553	0,0206	0,0283	0,0837
50	0,2340	0,2270	0,2245	0,2165	0,0299	0,0406	0,0746
60	0,3150	0,2980	0,2928	0,2888	0,0540	0,0705	0,0831
70	0,3870	0,3810	0,3733	0,3732	0,0155	0,0354	0,0356
$\Sigma ds/(n-1)$					0,07	0,08	0,10
S_r^2 / S_e^2					0,765	0,860	0,777
$F_{0,90}(6,39) = 1,932$							

Tabela 5.14: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 3)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,0275	0,0298	0,0306	0,0259	0,0836	0,1127	0,0597
20	0,0630	0,0592	0,0586	0,0543	0,0603	0,0698	0,1388
30	0,1059	0,1000	0,0974	0,0958	0,0557	0,0803	0,0953
40	0,1420	0,1540	0,1492	0,1506	0,0845	0,0507	0,0603
50	0,2290	0,2190	0,2119	0,2173	0,0437	0,0747	0,0510
60	0,2755	0,2960	0,2856	0,2970	0,0744	0,0367	0,0781
70	0,3810	0,3860	0,3717	0,3909	0,0131	0,0244	0,0260
80	0,4860	0,4910	0,4715	0,5004	0,0103	0,0298	0,0297
$\Sigma ds/(n-1)$					0,06	0,07	0,08
S_r^2 / S_e^2					0,758	0,397	0,520
$F_{0,90}(7,39) = 1,878$							

Tabela 5.15: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 4)

X [cm]	Exp	SR	SP	SM-D	SR<>Exp	SP<>Exp	SM-D <>Exp
10	0,0378	0,0477	0,0480	0,0413	0,2619	0,2698	0,0939
20	0,0756	0,0837	0,0800	0,0734	0,1079	0,0589	0,0283
30	0,1385	0,1310	0,1270	0,1189	0,0542	0,0830	0,1418
40	0,2075	0,1910	0,1870	0,1776	0,0795	0,0988	0,1443
50	0,2715	0,2620	0,2580	0,2480	0,0350	0,0497	0,0864
60	0,3655	0,3440	0,3400	0,3313	0,0588	0,0698	0,0934
70	0,4775	0,4400	0,4370	0,4287	0,0785	0,0848	0,1022
80	0,5340	0,5500	0,5460	0,5416	0,0300	0,0225	0,0142
$\Sigma ds/(n-1)$					0,10	0,11	0,10
S_r^2 / S_e^2					1,148	1,224	0,877
$F_{0,90}(7,39) = 1,878$							

Tabela 5.16: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores já publicados (experiência 5)

Ao analisar as tabelas de variação do volume médio das gotas pode observar-se que $S_r^2 / S_e^2 < F_{0,90}(v_1, 39)$ para todas as simulações efectuadas, ou seja, os modelos utilizados podem considerar-se adequados.

5.2.2 Segundo conjunto de dados experimentais

Foram também realizadas experiências laboratoriais no departamento de Química do ISEP utilizando uma unidade de mistura-decantação (Figura 5.14). O misturador é uma caixa rectangular de 0.2 m de altura, 0.2 m de largura e 0.25 m de comprimento. As fases são misturadas por uma turbina Rushton com seis pás planas de 10 cm de diâmetro. A dispersão sai do misturador e entra no decantador por uma ranhura de 2×15 cm situada a 0.1 m de altura. O decantador é uma caixa rectangular com 1.05 m de comprimento, 0.2 m de largura e 0.2 m de altura. Esta unidade é descrita em pormenor em (Pinto *et al.*, 2001a).

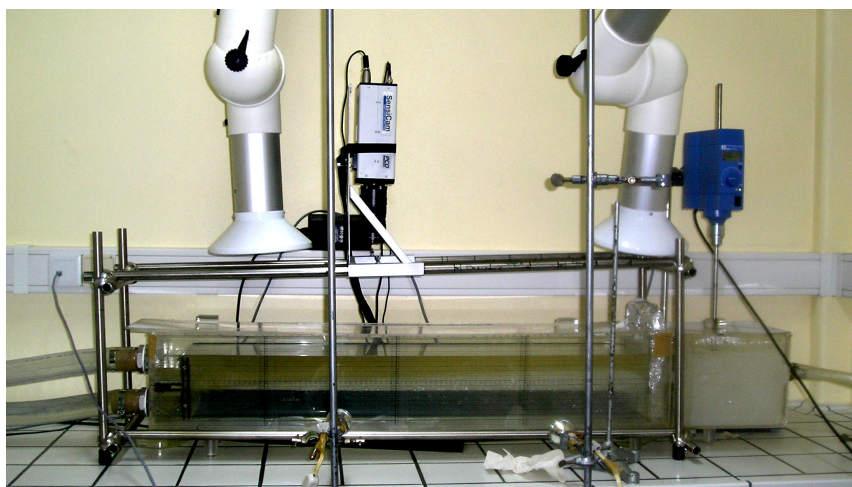


Figura 5.14: Misturador-decantador do laboratório do ISEP

Na Tabela 5.18 apresentam-se as condições experimentais relativas a duas experiências para o mesmo sistema líquido-líquido, variando os caudais das fases dispersa e contínua e o *hold up*.

As propriedades físicas das duas fases líquidas que compõem o sistema líquido-líquido (solução de Na_2SO_4 0.25M, fase contínua e querosene, fase dispersa) descrevem-se na Tabela 5.17.

	Massa volúmica [g/cm ³]	Viscosidade [cps]	Tensão superficial [dyne/cm]
Na_2SO_4 0.25M	1.06	0.912	35.6
Querosene	0.79	1.01	29.4

Tabela 5.17: Propriedades físicas das fases líquidas (temperatura a 25°)

Exp	Caudal fase dispersa [L/min]	<i>Hold up</i>	Velocidade agitação [rpm]
1	2.15	0.5	188
2	1.09	0.5	188

Tabela 5.18: Condições experimentais

Nesta Secção vamos comparar os valores obtidos pelo nosso programa de simulação (SM-D) com os valores obtidos pelo programa de simulação de Pinto, SPA (Simulação de Pinto Acoplada), e com os valores experimentais publicados. A sigla SPA distingue

o facto de, neste caso, a simulação de Pinto contemplar o misturador acoplado ao decantador.

No que diz respeito ao primeiro conjunto de dados o programa SM-D usou os parâmetros sugeridos por Ruiz (1985).

Relativamente ao segundo conjunto de dados, tratando-se de outro sistema líquido-líquido, os parâmetros que dependem do sistema são necessariamente diferentes. Os resultados apresentados por Pinto (2004) relativamente ao programa SPA resultam de um novo ajuste dos parâmetros intervenientes nas equações, quer do misturador (C_2 e C_3), quer do decantador (λ_0 e λ_0^*), a este conjunto de dados experimentais.

Contrariamente a Pinto, que alterou os valores das constantes C_2 e C_3 que intervêm no modelo hidrodinâmico para 0.0762 e 0.000887 respectivamente, no programa SM-D mantivemos os valores de referência determinados por Bapat (1982) (0.08 e 0.001 respectivamente). Esta nossa opção é justificada pelo facto de termos avaliado o módulo de mistura para as constantes de Bapat, sendo estas bastante utilizadas no modelo de Coulaloglou e Tavlarides (1977).

Os parâmetros de coalescência gota-a-gota e gota interface no decantador (λ_0 e λ_0^*) foram ajustados por Pinto (2004) para 0.000023 cm^{-2} e 0.55 s^{-1} respectivamente (Secção 3.4). Na Tabela 5.19 apresentam-se os valores utilizados para estes parâmetros pelos programas de simulação.

Parâmetro	SR (1ºconjunto dados)	SPA (2ºconjunto de dados)
$\lambda_0 [\text{cm}^{-2}]$	0.00004	0.000023
$\lambda_0^* [\text{s}^{-1}]$	0.17	0.55

Tabela 5.19: Valores dos parâmetros nos programas de simulação

Para o primeiro conjunto de dados os três programas utilizaram os valores apresentados na 1ª coluna da tabela (Ruiz, 1985). Apresentam-se também os valores utilizados para o segundo conjunto de dados pelos programas de simulação SR e SM-D.

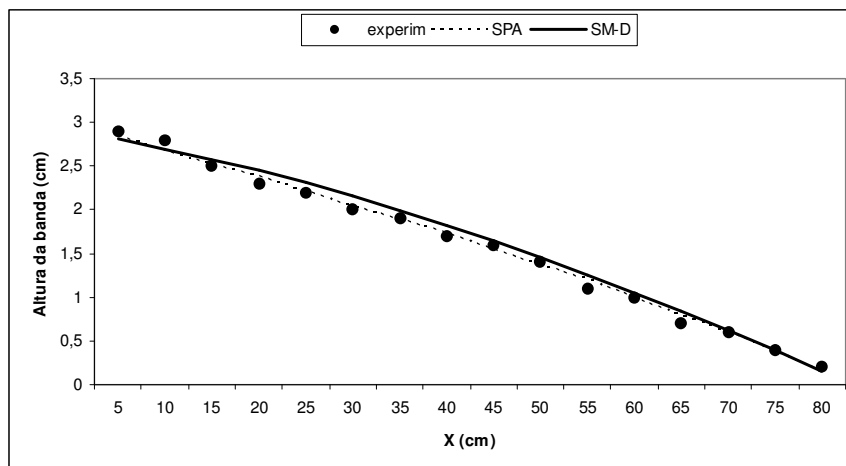


Figura 5.15: Espessura da banda de dispersão no decantador (condições da exp.1)

Consultando a Tabela 5.18 pode observar-se que em ambas as experiências o *hold up* é 0.5 e a velocidade de agitação é 188 rpm. No entanto, na experiência 1 tem-se um caudal de fase dispersa de 2.15 L/min e na experiência 2 de 1.09 L/min.

Na Figura 5.15 (condições da experiência 1) e na Figura 5.16 (condições da experiência 2) pode ver-se o comportamento da espessura da cunha obtida pelo programa de simulação SM-D e comparar com os dados experimentais e com os resultados do programa de simulação de Pinto.

A discretização usada para os volumes das gotas foi, tal como no primeiro conjunto de dados, 30 classes.

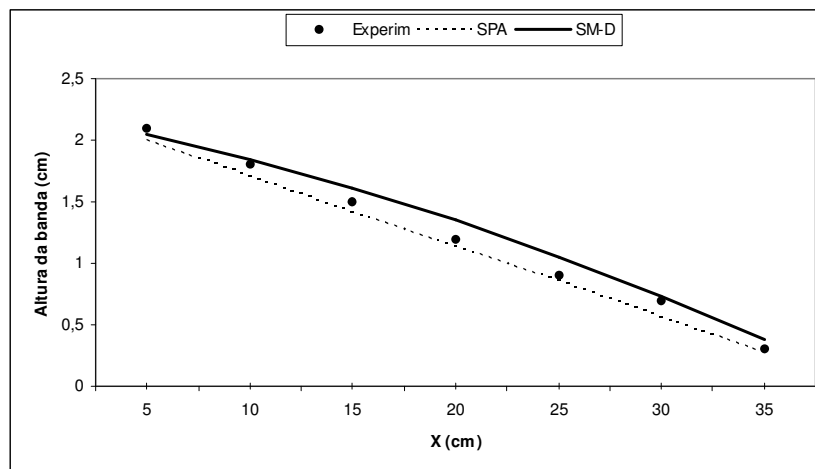


Figura 5.16: Espessura da banda de dispersão no decantador (condições da exp.2)

É observável que, para este segundo conjunto de dados, os desvios médios dos resultados obtidos pelo programa SM-D quando comparados com os dados experimentais estão dentro da mesma ordem de grandeza dos obtidos para o primeiro conjunto de dados.

Como não foram publicados quaisquer resultados relativos ao volume médio das gotas ao longo do decantador, não é possível comparar os resultados correspondentes.

X [cm]	Exp	SPA	SM-D	SPA<>Exp	SM-D <>Exp
5	2,9	2,84	2,81	0,02	0,03
10	2,8	2,68	2,70	0,04	0,04
15	2,5	2,53	2,58	0,01	0,03
20	2,3	2,38	2,45	0,03	0,07
25	2,2	2,21	2,31	0,00	0,05
30	2,0	2,04	2,16	0,02	0,08
35	1,9	1,88	2,00	0,01	0,05
40	1,7	1,73	1,82	0,02	0,07
45	1,6	1,55	1,64	0,03	0,03
50	1,4	1,37	1,45	0,02	0,04
55	1,1	1,20	1,26	0,09	0,14
60	1,0	1,00	1,05	0,00	0,05
65	0,7	0,79	0,84	0,13	0,20
70	0,6	0,60	0,62	0,00	0,03
75	0,4	0,37	0,39	0,08	0,03
80	0,2	0,16	0,15	0,20	0,23
$\Sigma ds/(n-1)$				0,05	0,08

Tabela 5.20: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 1)

Na Tabela 5.20 e na Tabela 5.21 apresentam-se os resultados obtidos e confirma-se que para a simulação SM-D o desvio, para este segundo conjunto de dados, é da mesma ordem de grandeza. Verifica-se porém uma melhor aproximação dos valores simulados aos experimentais no caso da experiência 1.

X [cm]	Exp	SPA	SM-D	SPA<>Exp	SM-D <>Exp
5	2,1	2,00	2,04	0,05	0,03
10	1,8	1,71	1,85	0,05	0,03
15	1,5	1,42	1,61	0,05	0,08
20	1,2	1,13	1,35	0,06	0,12
25	0,9	0,85	1,05	0,06	0,17
30	0,7	0,56	0,73	0,20	0,04
35	0,3	0,27	0,38	0,10	0,26
$\Sigma ds/(n-1)$				0,09	0,12

Tabela 5.21: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados (experiência 2)

Tal como no primeiro conjunto de dados, completamos a análise dos desvios médios dos resultados com um teste estatístico. Os resultados apresentados na coluna “p-value” da Tabela 5.22 foram obtidos, tal como no caso anterior, utilizando a ferramenta R 1.7.1 (Ihaka e Gentleman, 1996).

Exp	n	p-value
1	16	0.9996
2	7	1

Tabela 5.22: Resultados obtidos com um nível de significância de 5% para cada uma das experiências

Os resultados mostram que, para ambas as experiências, com diferentes dimensões (n), 16 e 7 respectivamente, o valor de prova é sempre superior a 5%, o que permite concluir que, para este nível de significância, os valores obtidos por simulação são fiáveis.

5.2.3 A variação do tamanho das gotas no decantador

Nesta Secção analisamos, para uma das experiências já descritas na Secção 5.2.1 (experiência nº 5), o comportamento do tamanho das gotas ao longo do decantador. Para esta experiência avaliou-se a frequência relativa dos tamanhos das gotas em três posições do decantador, $X=0$ cm, $X=50$ cm e $X=89$ cm (posição em que termina a banda de dispersão para o programa SR).

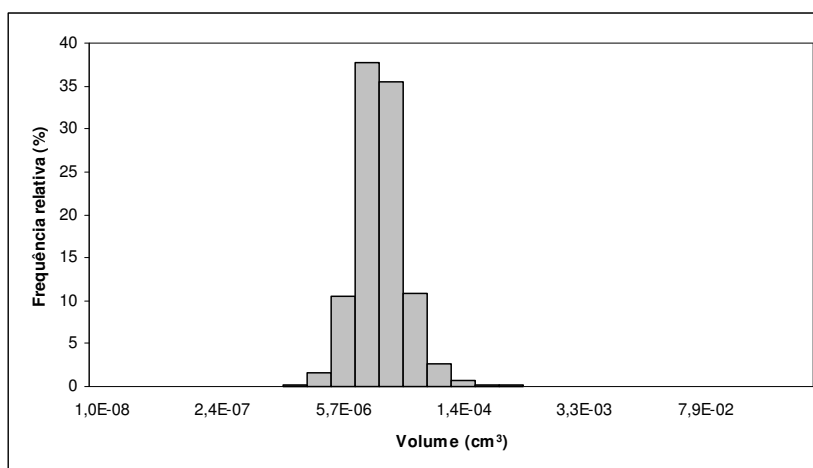


Figura 5.17: Frequência relativa dos tamanhos das gotas à entrada do decantador ($X=0$) para 30 classes de discretização.

A grelha de discretização em volumes utilizada foi uma grelha logarítmica, com 30 intervalos, no domínio $[10^{-12}, 10^{-9} \text{ m}^3]$.

A frequência relativa do tamanho das gotas em $X=0$ é a correspondente ao estado estacionário da dispersão no misturador, pois, como já foi referido, a dispersão que entra no decantador é a que sai do misturador depois de atingido o estado estacionário.

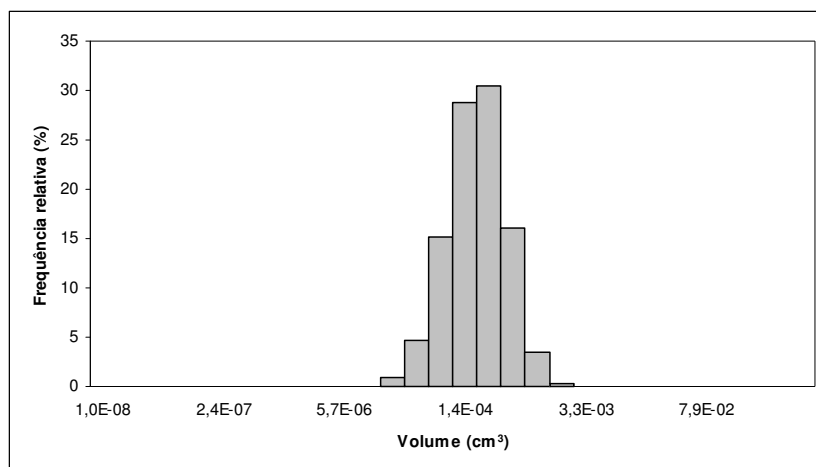


Figura 5.18: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador ($X=50$ cm) para 30 classes de discretização.

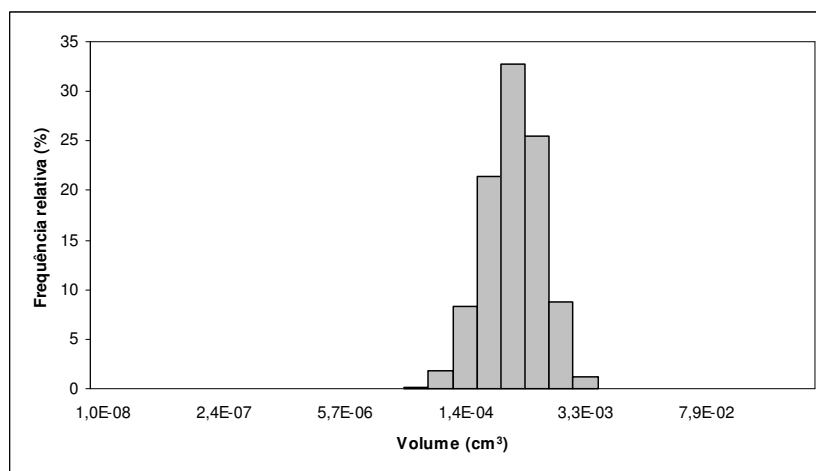


Figura 5.19: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador ($X=89$ cm) para 30 classes de discretização.

Tal como é referido nos trabalhos anteriores, é observável um movimento longitudinal do tamanho médio das gotas para a direita na grelha, ou seja, verifica-se um aumento do volume médio das gotas, à medida que avançamos ao longo do decantador. Segundo

Pinto (2004, p. 3-91), este fenómeno poderia justificar-se pelo mecanismo “fluxo de pistão”. No entanto, certas experiências realizadas com o equipamento e o sistema do ISEP mostram variação em sentido contrário. Não se dispõe ainda de uma explicação para este facto.

Apesar de apresentarmos apenas os resultados para uma das experiências, verificamos que este comportamento ocorre de forma idêntica para as outras experiências referidas na Tabela 5.5.

5.3 O misturador-decantador para estado transitório

A simulação do decantador para o estado transitório tem início num estado estacionário. Partindo do estado estacionário, introduz-se uma alteração num dos parâmetros do misturador (*hold up*, caudal ou velocidade de agitação) e estuda-se o impacto que esta alteração produz na dispersão, no interior do decantador, ao longo do tempo.

Nas duas secções seguintes apresentam-se os resultados para o mesmo conjunto de experiências que se estudaram no estado estacionário. Assim, parte-se dos resultados de uma experiência no estado estacionário e, alterando os parâmetros de modo a corresponderem a outra experiência no estado estacionário, procura-se chegar a este ao fim de um determinado intervalo de tempo.

A discretização utilizada na variável volume continua a ser a mesma utilizada nas experiências descritas anteriormente e na variável tempo usou-se 1 segundo.

5.3.1 Primeiro conjunto de dados experimentais

Começamos por analisar o par composto pelas experiências 1 e 3. As condições experimentais são as mesmas à excepção do caudal de fase dispersa, que é 1.2 L/min na experiência 1 e 1.1 L/min na experiência 3.

Na Figura 5.20 pode ver-se a passagem de um estado ao outro. A curva superior corresponde ao estado inicial e a curva inferior correspondente ao estado atingido ao

fim de 3500 segundos. Os losangos a cheio definem a curva relativa ao estado estacionário, para que se possa comparar visualmente.

Pode observar-se uma boa concordância dos resultados obtidos pelo programa para o estado transitório e os resultados correspondentes ao estado estacionário que se pretendia alcançar.

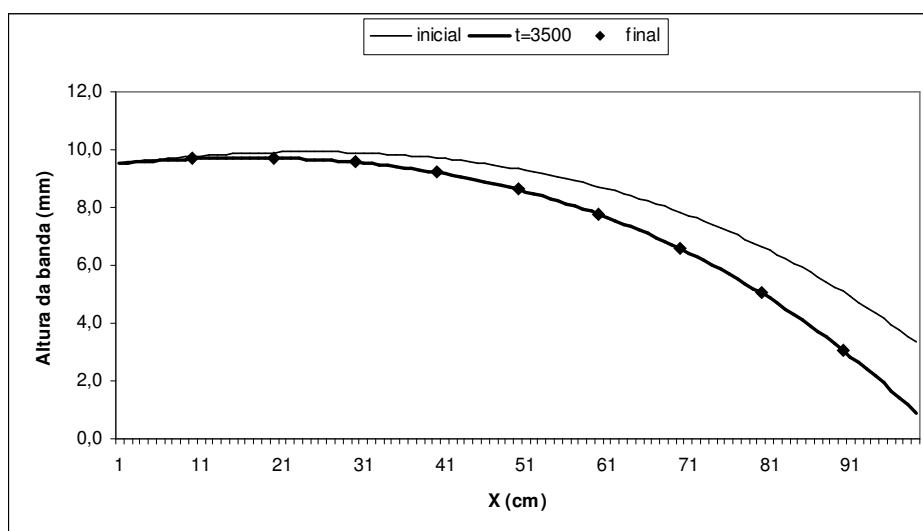


Figura 5.20: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da exp 1 (curva superior) à exp 3 (curva inferior) ao fim de 3500 s.

Na Figura 5.21 apresenta-se uma situação idêntica à anterior mas para o par composto pelas experiências 4 e 5. Neste caso, as condições experimentais são as mesmas à excepção da velocidade de agitação, que é 475 rpm na experiência 4 e 285 rpm na experiência 5.

A situação inicial corresponde à curva superior e a final, decorridos os mesmos 3500 segundos, corresponde à curva inferior. Os losangos a cheio representam novamente a curva relativa ao estado estacionário. A concordância dos resultados é, mais uma vez, bastante boa.

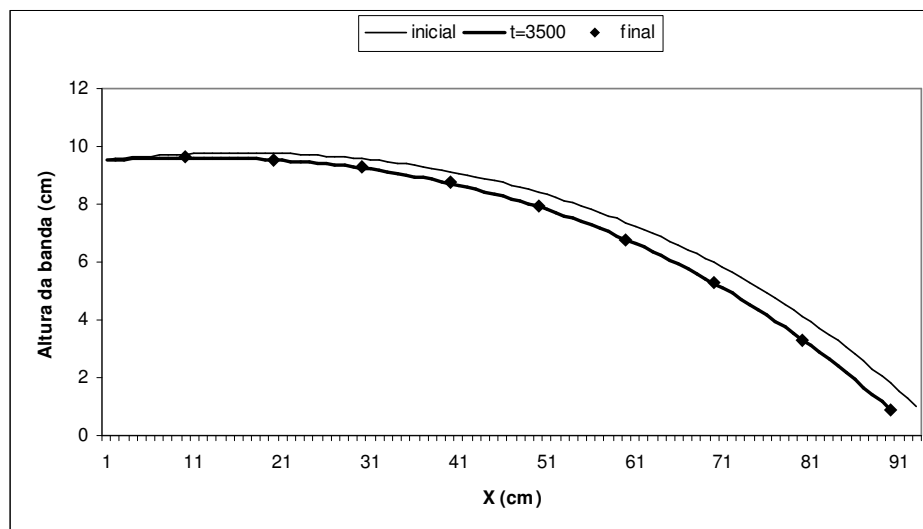


Figura 5.21: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da exp 4 (curva superior) à exp 5 (curva inferior) ao fim de 3500 s.

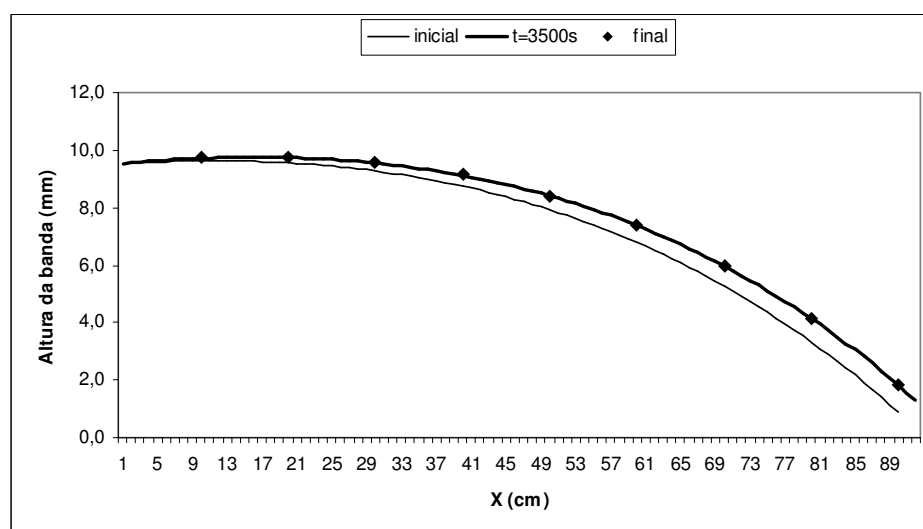


Figura 5.22: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da exp 5 (curva inferior) à exp 4 (curva superior) ao fim de 3500 s.

Na Figura 5.22 verifica-se a situação inversa, sendo a curva inferior a correspondente ao estado estacionário e a superior a correspondente ao novo estado estacionário (novamente ao fim de 3500 segundos).

Analizamos, também, qual a variação dos tamanhos das gotas (em volumes) ao longo do tempo, para as experiências número 4 e número 5, para as posições 10, 50 e 80 centímetros no decantador. Em primeiro lugar, partindo do estado estacionário correspondente à experiência 4, alterámos os parâmetros no misturador correspondentes ao estacionário da experiência 5 e verificámos se este é atingido ao fim de um certo intervalo de tempo. Em seguida, partindo do estacionário correspondente à experiência 5 verificámos se o estado estacionário correspondente à experiência 4 é conseguido, procedendo-se de forma análoga ao primeiro caso.

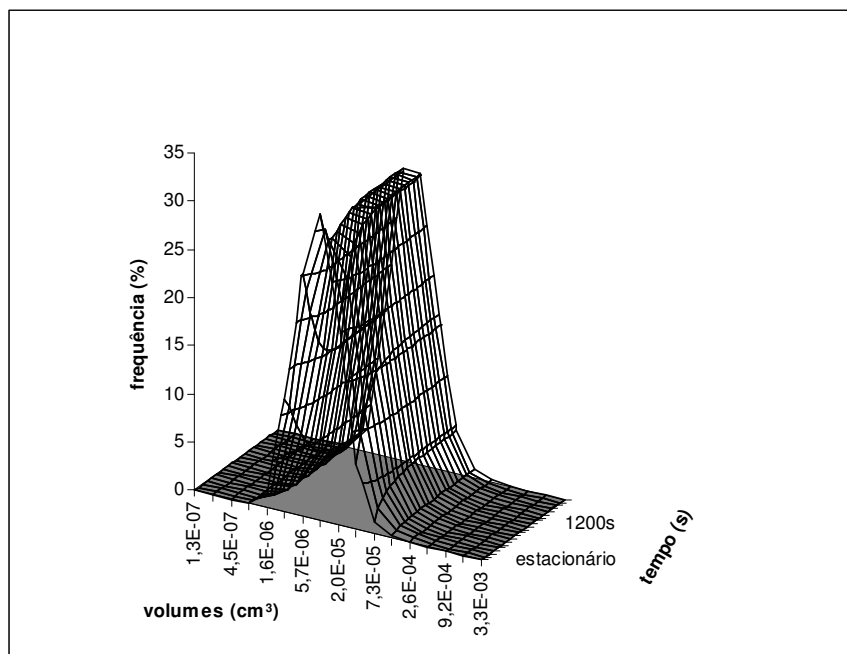


Figura 5.23: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.

Para além do gráfico tridimensional apresentado na Figura 5.23, optou-se por apresentar também um tipo de gráfico de contorno da superfície (Figura 5.24), dada a dificuldade de distinguir algumas características das curvas no gráfico tridimensional.

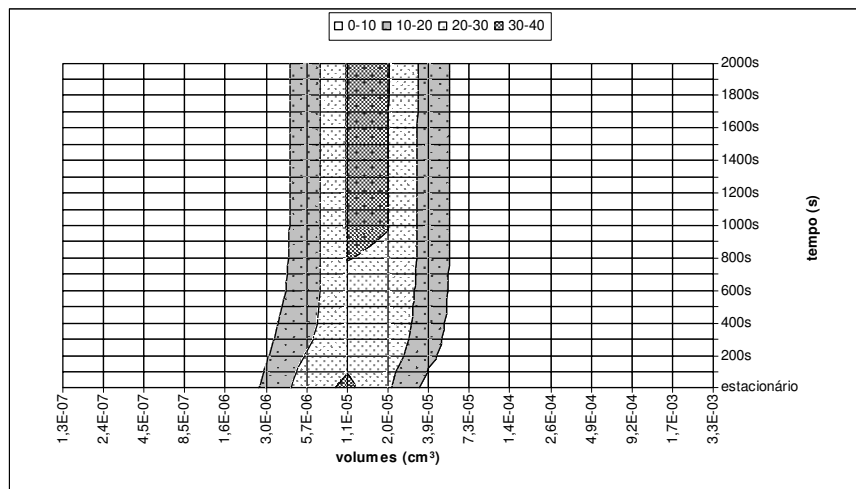


Figura 5.24: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=10$ cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.

Observando os gráficos, pode ver-se que a alteração nos tamanhos das gotas dá-se essencialmente até aos 1000 segundos, e que, no caso de $X=10$ centímetros, as curvas correspondentes ao tamanho das gotas se deslocam ligeiramente para a direita na grelha de discretização, ou seja, as gotas aumentam de tamanho. Dado que a diferença nas experiências está no parâmetro correspondente à velocidade de agitação, passando de 475 rpm para 285 rpm, e sabendo-se empiricamente que uma velocidade de agitação menor conduz a gotas de tamanho maior, podemos dizer que esta alteração nas curvas de nível é a esperada.

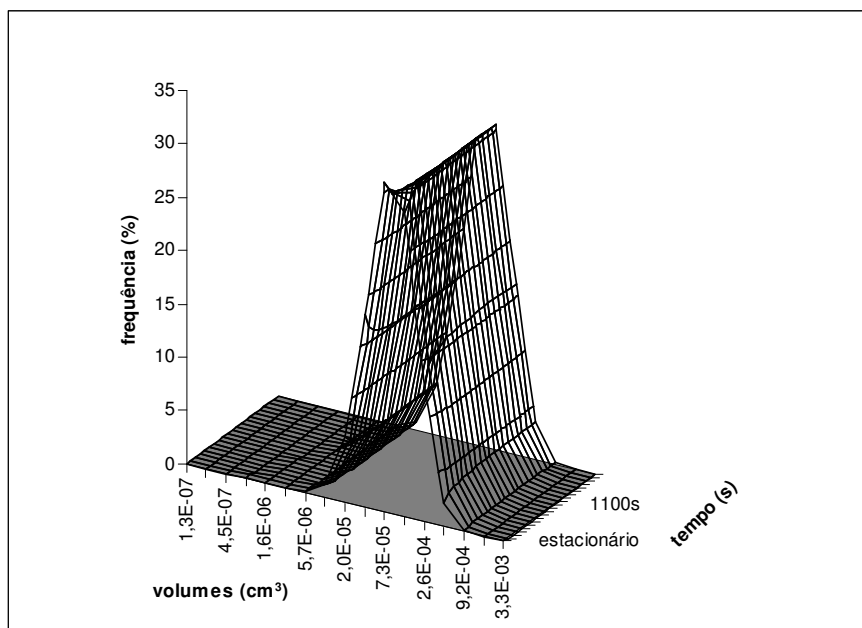


Figura 5.25: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.

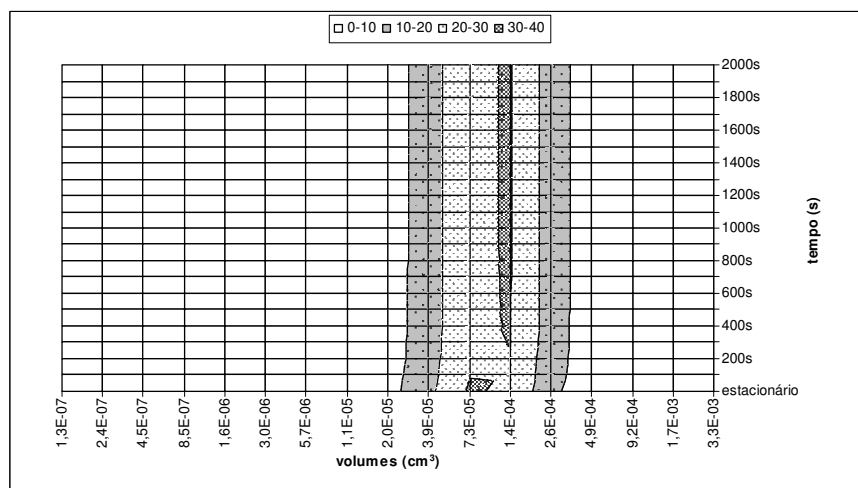


Figura 5.26: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.

Observando a Figura 5.25 e a Figura 5.26 pode ver-se que para X=50 cm os tamanhos das gotas se situam mais à direita no gráfico do que nas figuras relativas a X=10 cm,

devido ao facto de o tamanho das gotas ir aumentando ao longo do decantador. Este fenómeno é referido por Pinto (2004, p. 3-91) e será também abordado no Capítulo 6.

No que respeita à variação ao longo do tempo, observa-se, tal como para $X=10$ cm, um ligeiro aumento do tamanho das gotas até os 1000 segundos, aproximadamente.

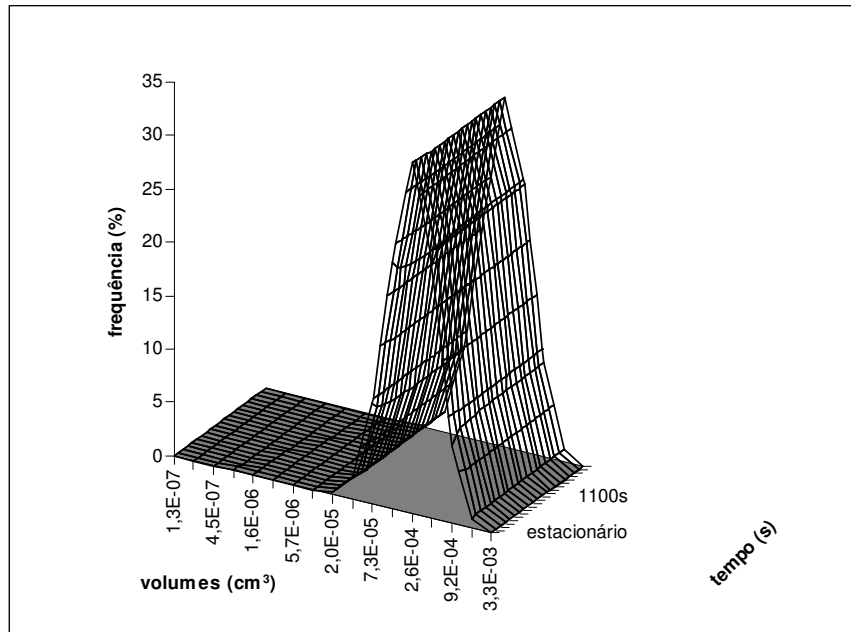


Figura 5.27: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=89$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.

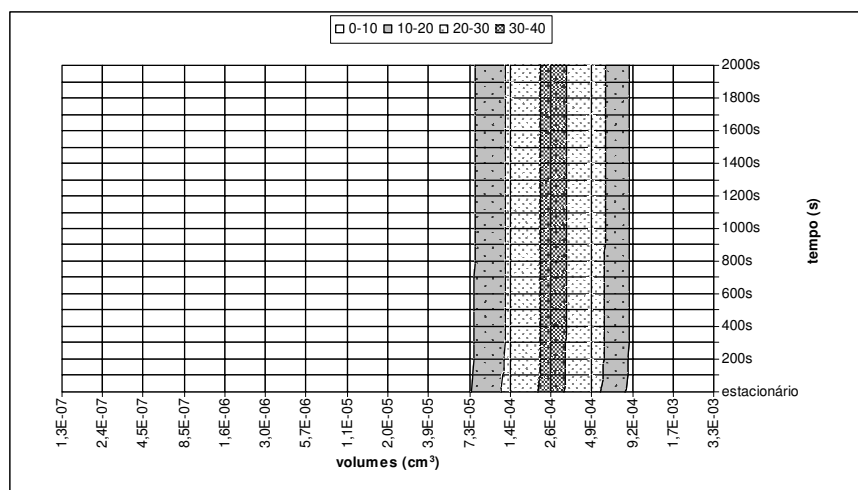


Figura 5.28: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=89$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 4 (estacionário) à experiência 5.

Na Figura 5.27 e na Figura 5.28 observa-se que a variação no tamanho das gotas no eixo dos xx corresponde a um aumento do tamanho das gotas ao longo do decantador, já referido relativamente a $X=50$ cm, e ao longo do tempo. Nesta posição do decantador as alterações são porém pequenas.

Analisemos agora a situação inversa, ou seja, vejamos o que acontece ao tamanho das gotas quando partimos do estacionário correspondente à experiência 5 e alteramos a velocidade de agitação de modo a corresponder à da experiência 4. Neste caso, trata-se de aumentar a velocidade de agitação de 285 rpm para 475 rpm. Esperamos obter uma redução no tamanho das gotas ao longo do tempo. No entanto, ao longo do decantador as gotas devem manter a tendência de aumentar de tamanho à medida que se afastam da entrada do decantador.

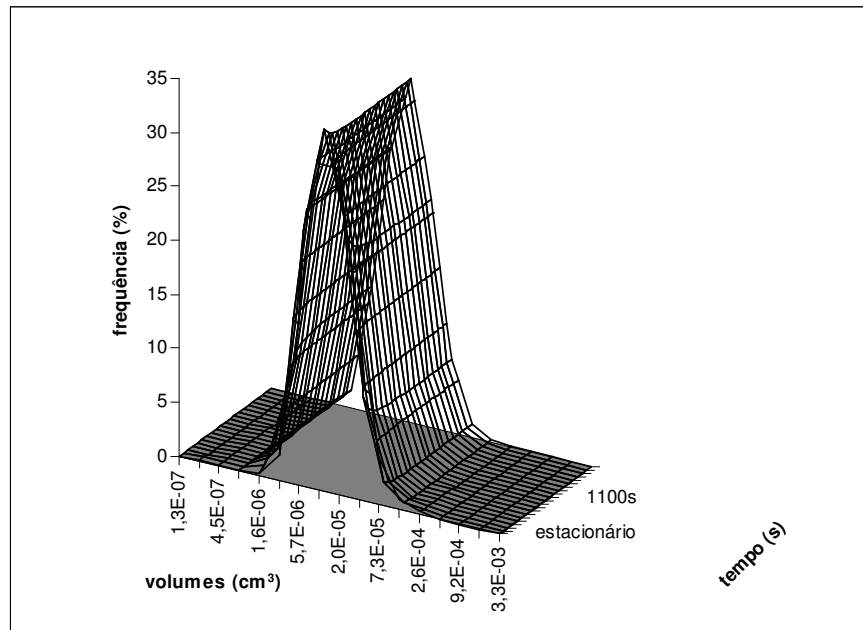


Figura 5.29: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=10$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.

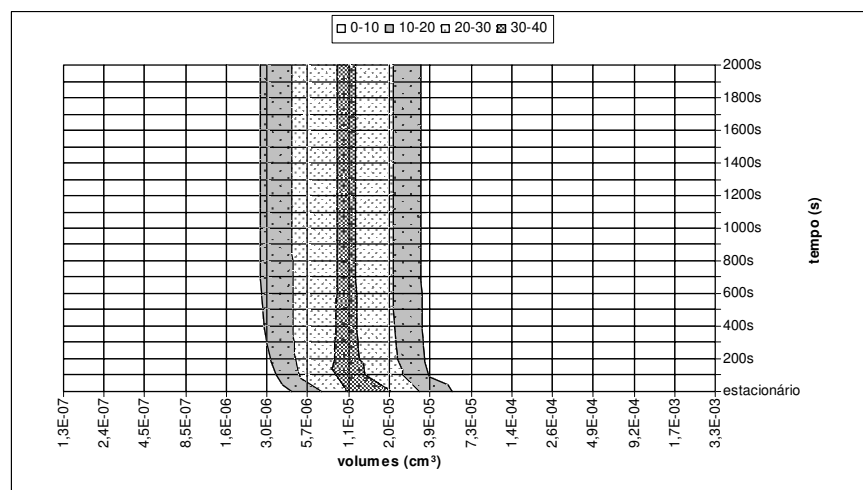


Figura 5.30: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=10$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.

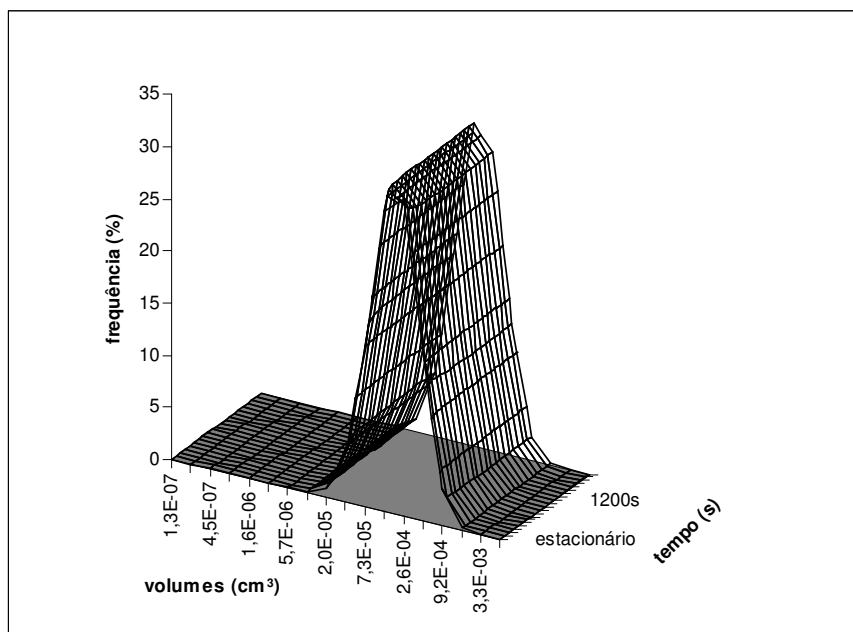


Figura 5.31: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.

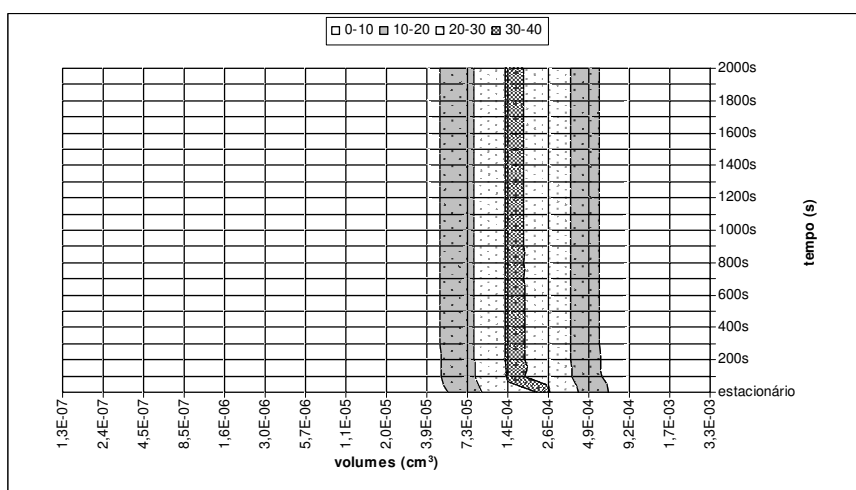


Figura 5.32: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.

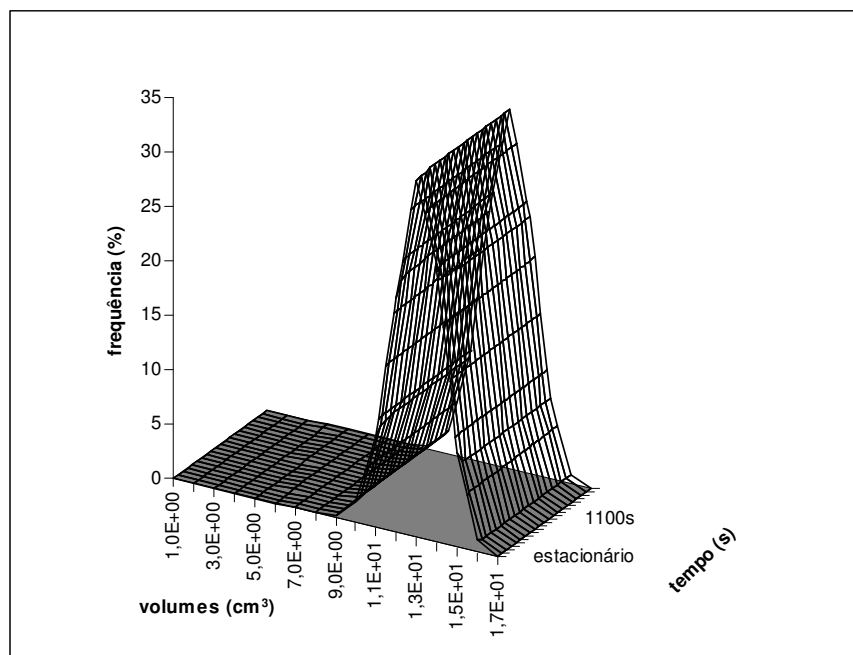


Figura 5.33: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=89 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.

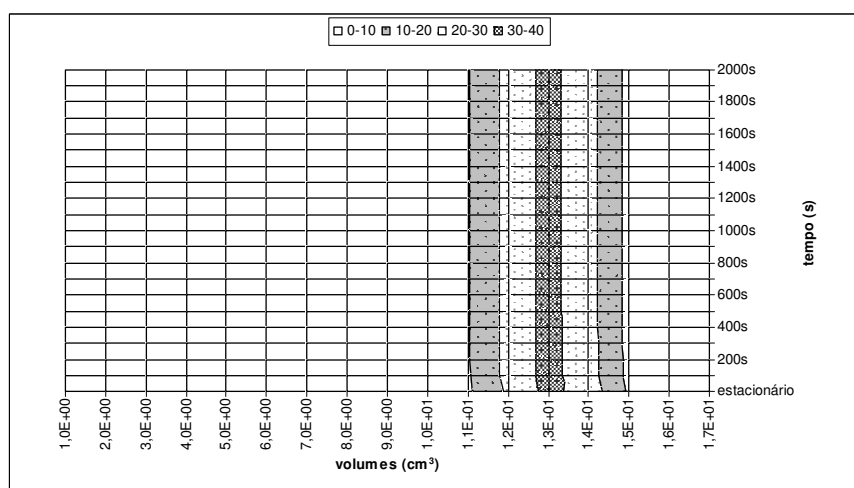


Figura 5.34: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=89 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 2000 s: da experiência 5 (estacionário) à experiência 4.

Analisando as figuras anteriores (Figura 5.29 à Figura 5.34), correspondentes à passagem do estado estacionário da experiência 5 ao estacionário¹ da experiência 4, podemos verificar que, de facto, a tendência da variação do tamanho das gotas para as posições 10, 50 e 89 centímetros no decantador, ao longo do tempo, é simétrica relativamente ao grupo de figuras que vai da Figura 5.23 à Figura 5.28. Esta situação corresponde às nossas expectativas, dado que, simulamos duas situações, sendo uma a inversa da outra.

5.3.2 Segundo conjunto de dados experimentais

Analisemos agora o par composto pelas experiências 1 e 2. As condições experimentais são as mesmas para as duas experiências à excepção do caudal de fase dispersa que é 2.15 L/min e 1.09 L/min respectivamente.

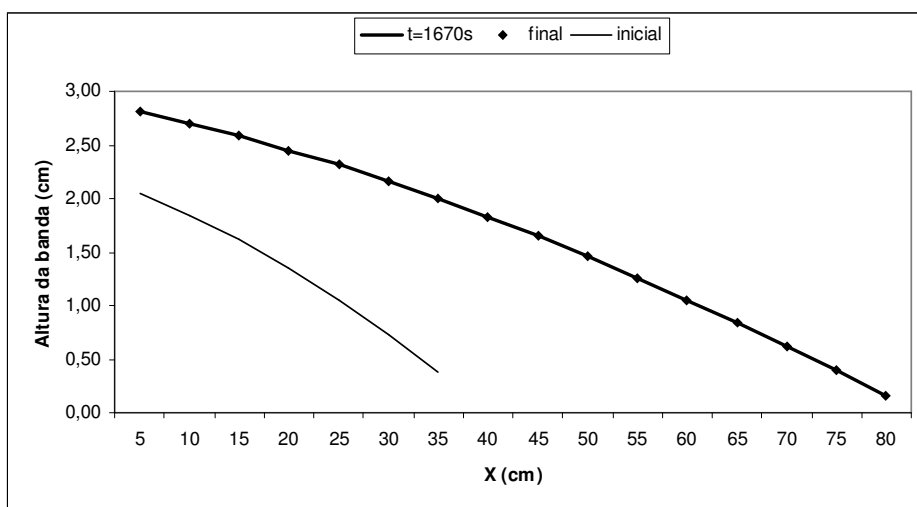


Figura 5.35: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da experiência 2 (curva inferior) à experiência 1 (curva superior), ao fim de 1670 s.

Na Figura 5.35 pode observar-se a passagem de um estado estacionário correspondente à experiência 2 (curva inferior) ao estado estacionário correspondente à experiência 1

¹ Consideramos que é atingido o estado estacionário no decantador quando deixam de se verificar alterações na espessura da banda dispersão e no tamanho das gotas a menos de $0,5 \times 10^{-2}$ e $0,5 \times 10^{-4}$ respectivamente.

(curva superior, a cheio), ao fim de 1670 segundos (10 vezes o tempo médio de residência da experiência 1). Os losangos a cheio representam a curva relativa ao estado estacionário para a experiência 1. Tal como se esperava, verifica-se que há concordância nos resultados.

Na Figura 5.36 podemos analisar a situação inversa, ou seja, podemos observar a variação da espessura da banda de dispersão quando, ao fim de 3300 segundos (10 vezes o tempo médio de residência da experiência 2) se passa do estacionário correspondente à experiência 1 (curva superior) para o estacionário da experiência 2 (curva inferior, a cheio).

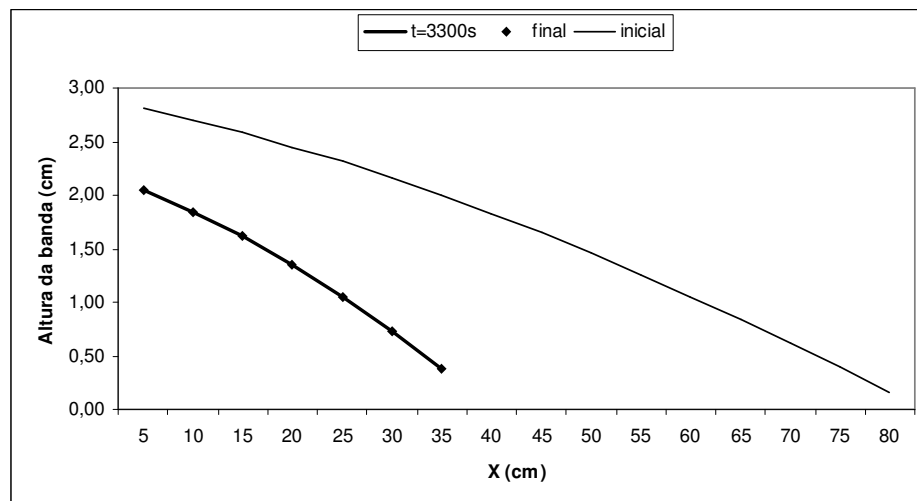


Figura 5.36: Variação da espessura da banda de dispersão no decantador ao longo do tempo: da experiência 1 (curva superior) à experiência 2 (curva inferior), ao fim de 3300 s.

Tal como na figura anterior, também nesta os losangos se sobrepõem à curva a cheio, curva esta que representa o estacionário atingido pelo programa de simulação para o transiente, ou seja, os valores coincidem, para a precisão numérica considerada.

Analísámos também, tal como fizemos para o primeiro conjunto de dados, a variação dos tamanhos das gotas (em volumes) ao longo do tempo. Partindo do estado estacionário correspondente à experiência 1, alterámos os parâmetros no misturador correspondentes ao estacionário da experiência 2 e verificámos a concordância dos

resultados ao fim de 3300 segundos (10 vezes o tempo médio de residência da experiência 2).

Na Figura 5.37 e na Figura 5.38 representa-se a variação no tamanho das gotas na posição X=10 cm do decantador, ao longo do tempo. Nesta posição do decantador observa-se que as maiores alterações ocorrem nos primeiros 100 segundos, e que começa a verificar-se alguma estabilidade nos tamanhos das gotas a partir dos 600 segundos. A partir dos 3000 s deixam de existir alterações (até à 6ª casa decimal) nos tamanhos das gotas.

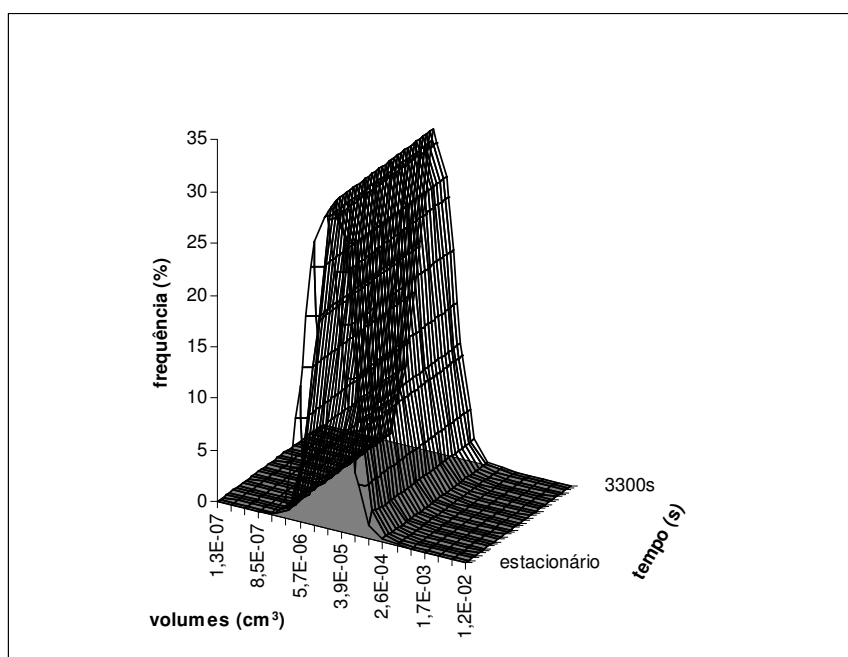


Figura 5.37: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 3300 s: da experiência 1 (estacionário) à experiência 2.

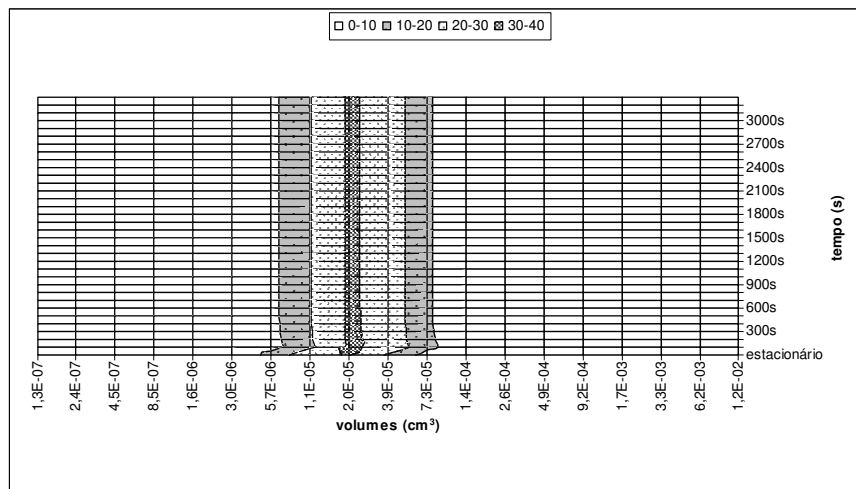


Figura 5.38: Curvas de nível da variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em $X=10$ cm, ao longo do tempo e para cada 100 s até 3300 s: da experiência 1 (estacionário) à experiência 2.

5.3.3 Limitações do algoritmo

Nas secções anteriores mostrou-se que o algoritmo misturador-decantador para o estado transitório conduz a bons resultados no caso de ocorrerem pequenas alterações dos parâmetros de simulação. No entanto, quando se provocam alterações mais significativas, a resposta do algoritmo nem sempre é satisfatória face ao comportamento esperado do sistema físico, como veremos mais adiante.

Se repetirmos a simulação para as condições correspondentes à experiência 5 (do primeiro conjunto de dados) e reduzirmos o *hold up* de 0.5 para 0.3 (corresponde a uma redução no caudal de fase dispersa de 1 L/min para 0.6 L/min) verifica-se uma redução na espessura da banda de dispersão, como se pode observar na Figura 5.39. A curva superior, que representa a banda de dispersão no estado inicial ($t=0$ segundos), corresponde ao estado estacionário. As curvas seguintes, de cima para baixo, representam a banda de dispersão ao fim de 250, 500, 1000, 2000 e 3500 segundos respectivamente.

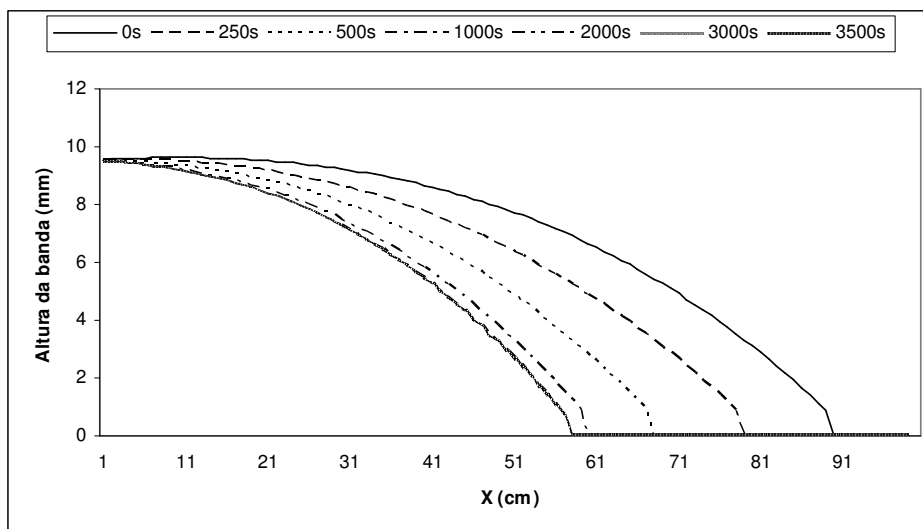


Figura 5.39: A banda de dispersão para o transiente ao longo do tempo (3500 s) quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3

Na Figura 5.40 e na Figura 5.41 representa-se, tal como fizemos anteriormente, a variação no tamanho das gotas na posição $X=10$ cm do decantador, ao longo do tempo. Observa-se que as alterações ocorrem essencialmente durante os primeiros 600 segundos.

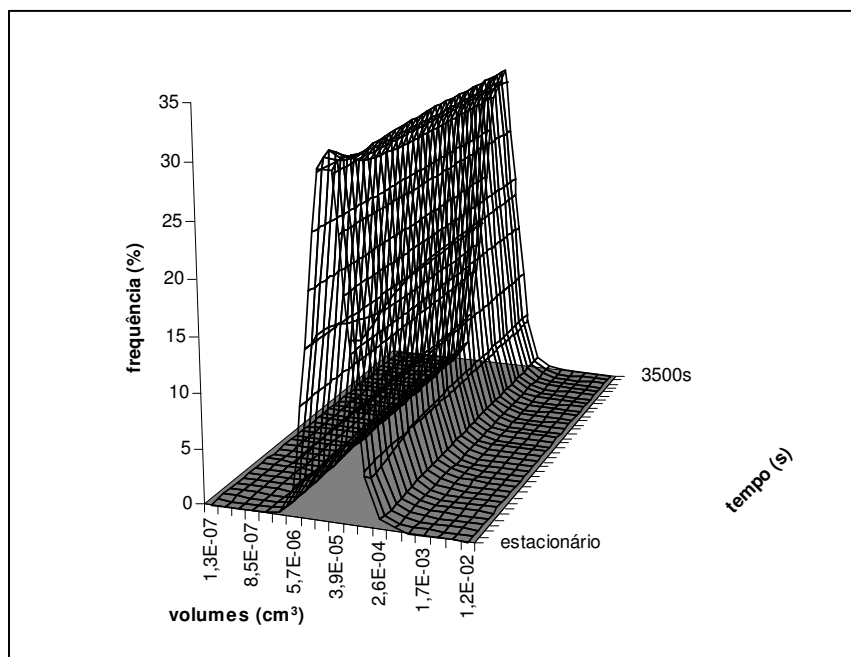


Figura 5.40: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 3500s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.

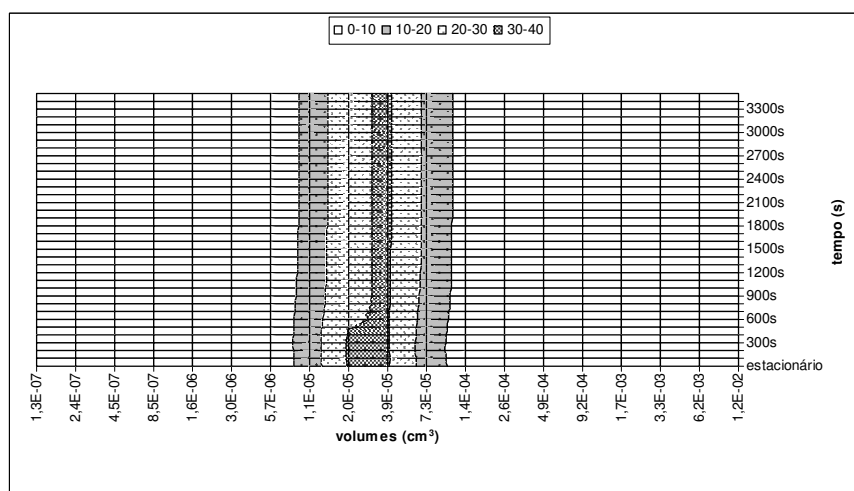


Figura 5.41: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 3500s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.

Analísamos também novamente a variação no tamanho das gotas na posição X=50 cm. Neste caso, as gotas tendem a aumentar de tamanho nos primeiros 1300 segundos. A

partir dos 3000 s deixam de existir alterações na frequência relativa dos tamanhos das gotas a partir da 2ª casa decimal.

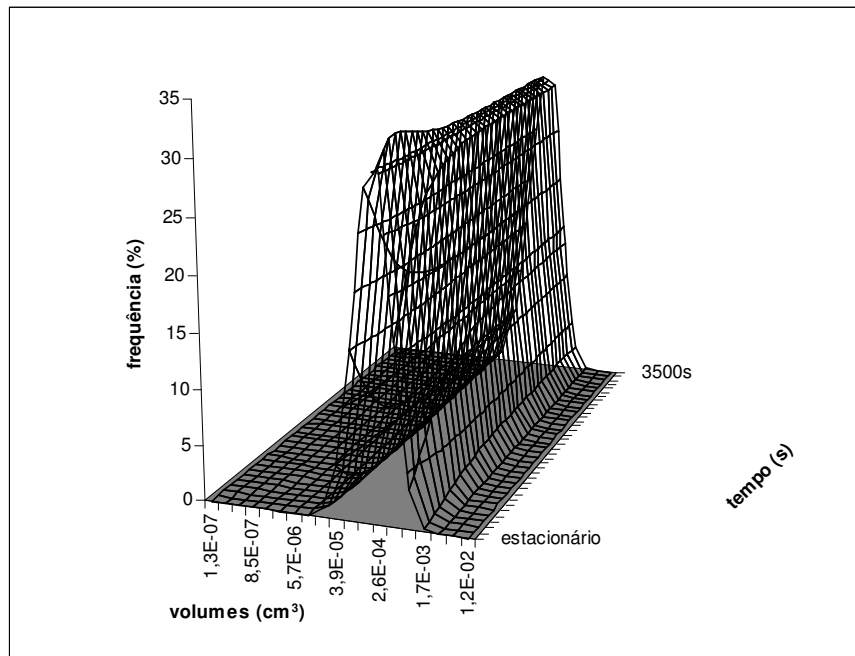


Figura 5.42: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 3500s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.

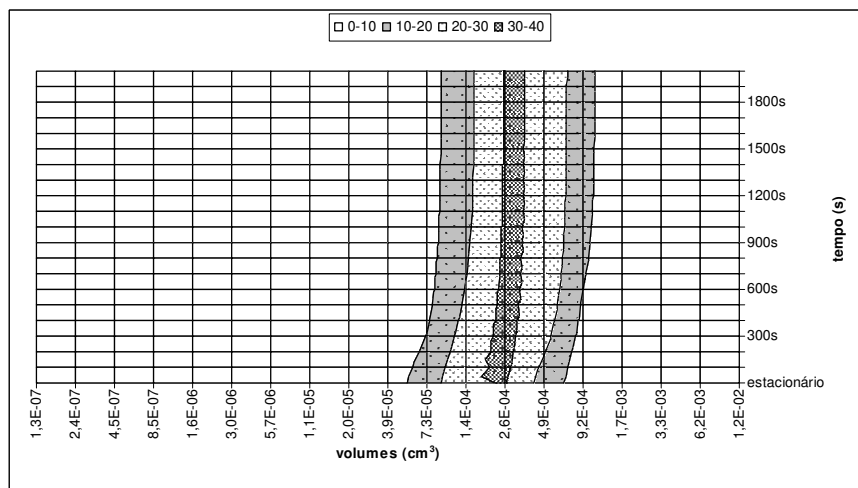


Figura 5.43: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 2000s, quando se reduz o hold up de 0.5 para 0.3.

Analisemos agora o que acontece se, para as mesmas condições do caso anterior, provocarmos uma alteração mais brusca no *hold up*. Repetimos então novamente a simulação para as condições correspondentes à mesma experiência 5 mas reduzindo o *hold up* 0.5 para 0.05. Na Figura 5.44 pode observar-se o que acontece à espessura da banda de dispersão ao longo do tempo quando se provoca esta redução brusca no *hold up*.

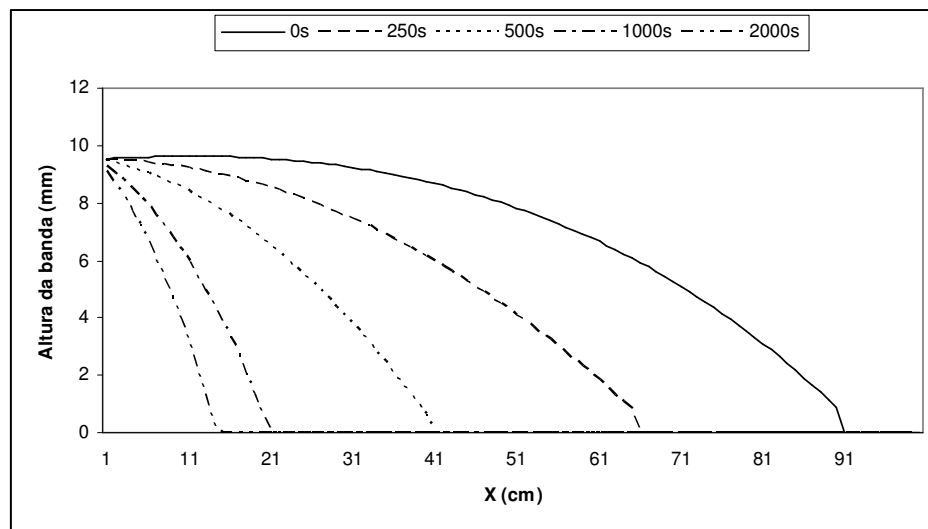


Figura 5.44: A banda de dispersão para o transiente ao longo do tempo (2000 s) quando se reduz o *hold up* 10 vezes

Na Figura 5.44, a curva superior, que representa a banda de dispersão no estado inicial ($t=0$ segundos), corresponde ao estado estacionário para as condições da experiência 5 do primeiro conjunto de dados. As curvas seguintes, de cima para baixo, representam a banda de dispersão ao fim de 250, 500, 1000 e 2000 segundos respectivamente, quando se reduz o *hold up* dez vezes.

Observa-se que, nesta situação, a banda de dispersão encolhe muito rapidamente com a passagem do *hold up* de 0.5 a 0.05. Uma redução no *hold up* desta ordem leva a uma redução do caudal de fase dispersa de 1 L/min para 0.1 L/min. Sabemos também, empiricamente, que as reduções na espessura da banda de dispersão, ao contrário do que se passa quando se dá um aumento, acontecem rapidamente. O comportamento simulado corresponde, pois, qualitativamente, ao esperado.

Nas figuras seguintes mostra-se o que acontece ao longo do decantador e do tempo, à variação do tamanho das gotas.

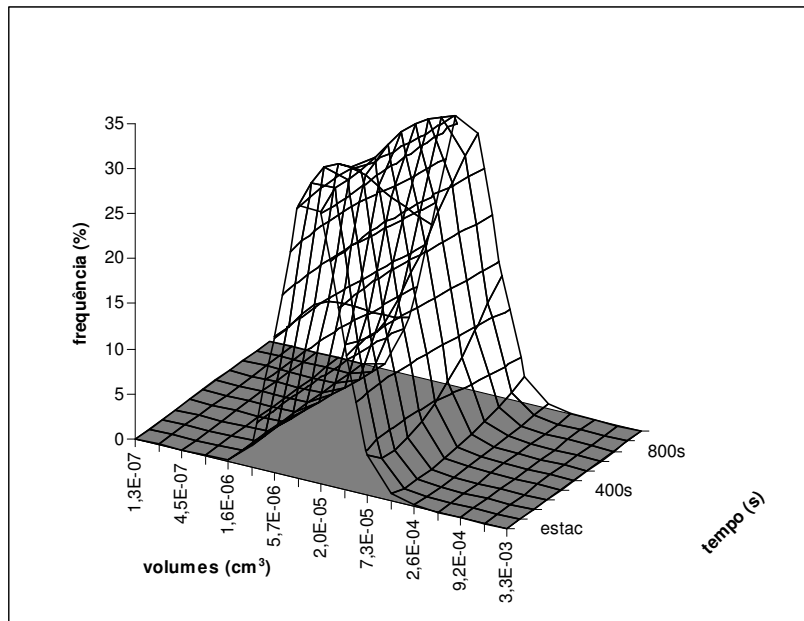


Figura 5.45: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 1000s, quando se reduz o hold up 10 vezes.

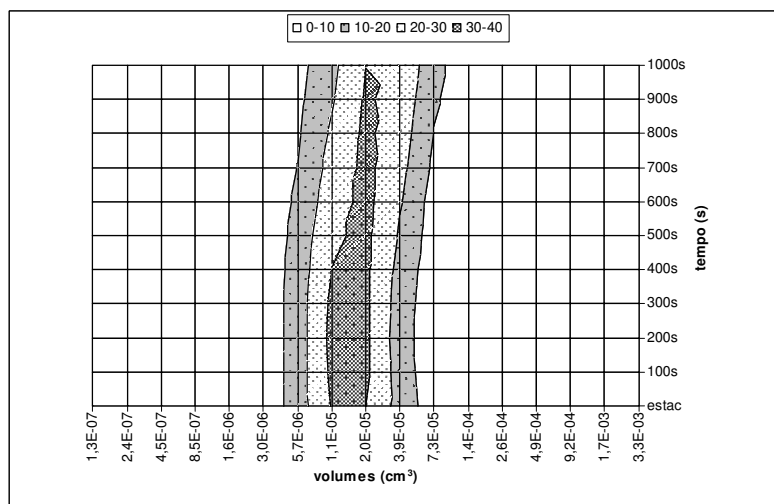


Figura 5.46: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=10 cm, ao longo do tempo e para cada 100s até 1000s, quando se reduz o hold up 10 vezes.

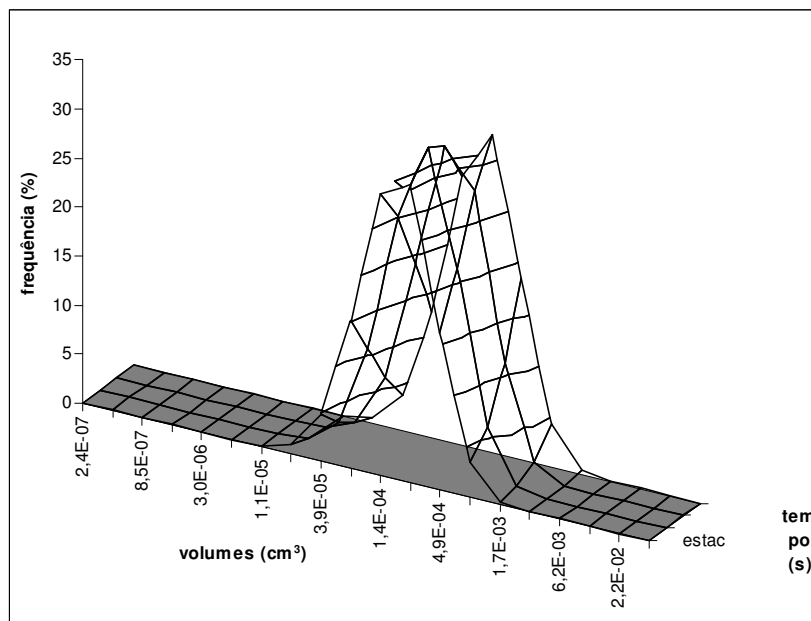


Figura 5.47: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm para 100 s, 200 s e 300 s, quando se reduz o hold up 10 vezes.

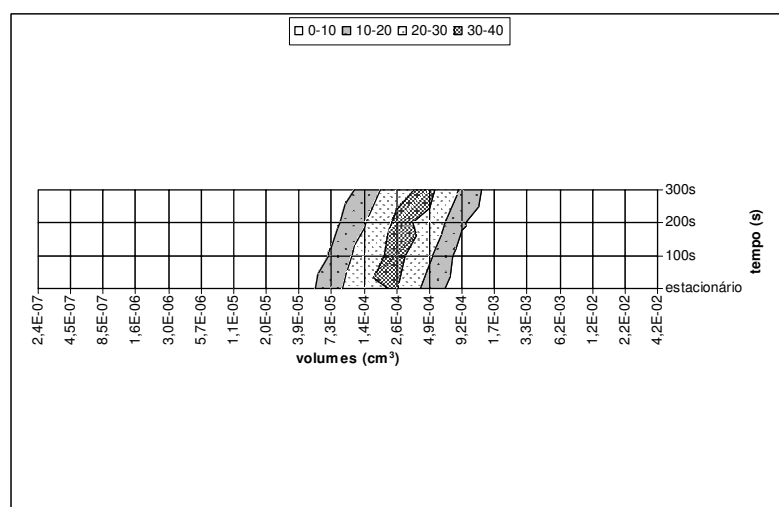


Figura 5.48: Variação da frequência relativa dos tamanhos das gotas em X=50 cm para 100 s, 200 s e 300 s, quando se reduz o hold up 10 vezes.

Analisando o grupo de figuras, da Figura 5.45 à Figura 5.48, pode observar-se que se mantém a tendência de aumento no tamanho das gotas porém de forma mais acentuada, como era espectável, dado que neste caso o *hold up* decai mais rapidamente. Para X=50 cm podemos observar que só existe informação até cerca dos 300 segundos,

querendo isto dizer, que, a partir deste passo no tempo, a banda de dispersão tem um comprimento inferior aos cinquenta centímetros, o que está de acordo com o que se pode observar na Figura 5.44.

Na Figura 5.49 pode observar-se um exemplo em que o programa de simulação SM-D conduz a resultados não totalmente satisfatórios. Nesta situação o programa, apesar de conseguir resultados bastante bons ao fim de algum tempo de simulação, constrói curvas anómalas do ponto de vista físico, para os primeiros passos de tempo. O exemplo que estamos a usar foi descrito na Secção 5.3.2. e refere-se à transição entre dois estados estacionários que diferem no caudal de fase dispersa. Parte-se de um caudal de fase dispersa de 1.09 L/min e pretende-se chegar a um valor de 2.15 L/min. Se analisarmos o que acontece à banda de dispersão nos primeiros 100 segundos percebe-se que as curvas simuladas não são plausíveis (na figura estão registadas apenas as curvas relativas ao estado estacionário de que partimos e após 1, 10, 30, 50 e 100 segundos). Depois dos 100 segundos o comportamento simulado da banda volta a ser aceitável do ponto de vista físico. Com efeito, ao fim deste tempo a dispersão afectada pela alteração do parâmetro já percorreu todo o comprimento da banda de dispersão, reflectindo as alterações.

Esta situação ocorre quando se provoca uma forte alteração no caudal de fase dispersa, ou seja, no parâmetro tempo de residência no módulo de mistura. No exemplo em presença, o caudal de fase dispersa (Q_d) passou de 2.15 L/min para 1.09 L/min, que corresponde a uma alteração do tempo de residência (θ) de 167 s para 330 s, dada pela relação $Q_d = V_m \times \eta / \theta$, sendo V_m o volume do misturador e η o *hold up*.

Quando se provoca uma alteração brusca no tempo de residência, o número de gotas por unidade de volume de dispersão que entra no decantador sofre uma alteração brusca originando um impacto imediato na espessura da banda de dispersão.

O algoritmo obriga a que seja fornecida a altura inicial da cunha ou a velocidade longitudinal inicial das gotas no estado estacionário. O programa de simulação do decantador para o estado transitório difere do programa de simulação para o estado

estacionário na componente relativa à integração no tempo. Esta limitação existente no simulador do estado estacionário mantém-se obviamente na simulação do transiente.

Note-se também que, apesar de levar ao mesmo estado permanente, do ponto de vista do transiente, não é equivalente fornecer como condição inicial a espessura da banda ou o perfil das velocidades longitudinais da dispersão. Este facto traduz-se numa incoerência do modelo.

O facto de o algoritmo ter sido pensado para um decantador alimentado por uma fenda lateral cuja altura define a altura inicial da banda de dispersão, bem como a velocidade axial inicial das gotas, origina o comportamento observado na espessura da banda de dispersão (apresentado na Figura 5.49) enquanto a dispersão em todo o comprimento da cunha não é afectada pelas alterações das condições iniciais.

Esta hipótese do decantador ser alimentado por cima e a questão da altura determinar a altura inicial da banda de dispersão, pode impedir uma simulação correcta do comportamento físico do sistema, em particular quando se trata de um decantador alimentado por baixo como é o caso do decantador existente no laboratório do ISEP (Secção 5.2.2).

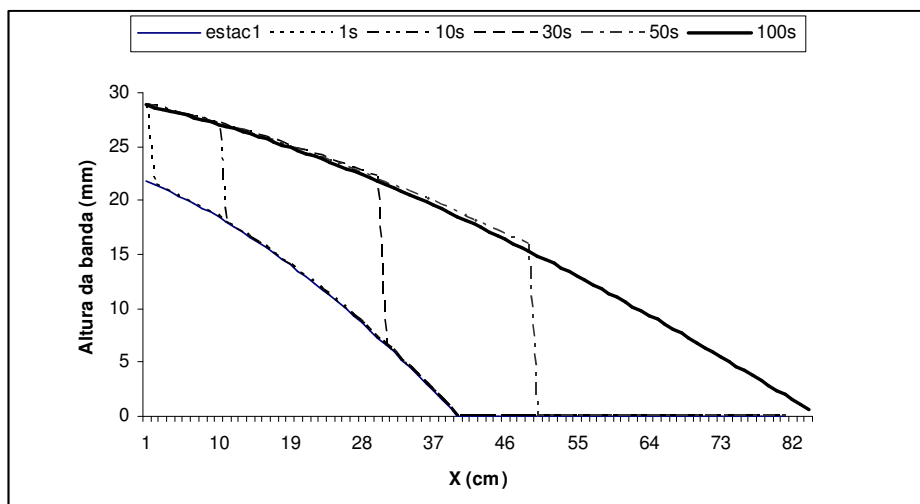


Figura 5.49: Banda de dispersão para o primeiro estado estacionário e para um, dez, trinta, 50 e cem segundos: da experiência 2 à experiência 1.

Podemos pois referir, em conclusão, que a maior limitação do algoritmo para o estado transitório resulta da necessidade de se fornecer um dos parâmetros do estado permanente final, para se poder obter a previsão do novo estado permanente quando se modificam as condições operacionais (*e.g.*, intensidade de agitação no misturador, caudais de alimentação das fases contínua e dispersa) de um estado permanente anterior. Esta limitação nega totalmente o carácter previsional (*e*, portanto, físico, no sentido da obediência implícita e explícita ao princípio de causalidade) do modelo.

5.4 Algoritmo modificado

Na Secção 3.5 propusemos algumas primeiras alterações às expressões matemáticas de Ruiz (1985). No programa de simulação SM-D as expressões do *hold up*, velocidade e altura da banda de dispersão propostas por Ruiz foram substituídas pelas expressões (3.23), (3.25) e (3.27) respectivamente, obtendo-se assim, o programa de simulação modificado SM-DM.

Os resultados obtidos pelo programa SM-DM foram muito próximos dos resultados obtidos pelo SM-D no caso do segundo conjunto de dados (experiências efectuadas no ISEP), como podemos observar na Figura 5.50 e na Figura 5.51.

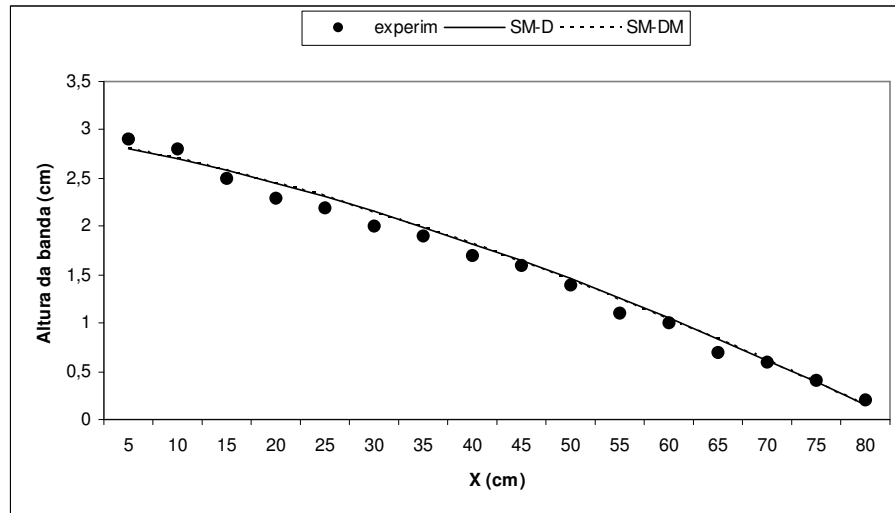


Figura 5.50: Comparação das espessuras da banda de dispersão no decantador obtidas pelos programas SM-D e SM-DM (condições da exp.1 – 2º conjunto de dados).

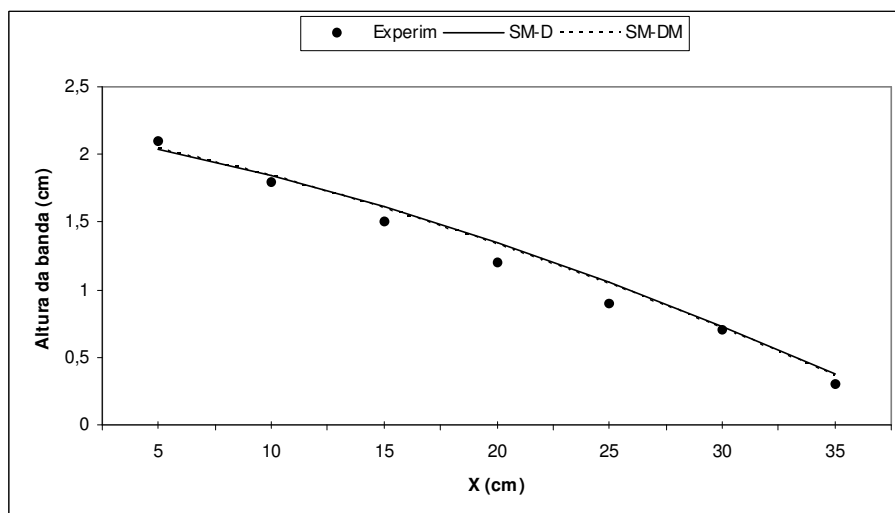


Figura 5.51: Comparação das espessuras da banda de dispersão no decantador obtidas pelos programas SM-D e SM-DM (condições da exp.2 - 2º conjunto de dados).

No que diz respeito aos resultados obtidos pelo programa de simulação SM-DM para o primeiro conjunto de dados, ou seja para as condições experimentais de Ruiz (1985), os resultados afastam-se claramente dos valores experimentais, e portanto, o programa SM-DM tem, aparentemente, um desempenho mais fraco que o programa SM-D. Na Figura 5.52 pode ver-se a banda de dispersão obtida para as condições da experiência 5 do conjunto de dados descrito por Ruiz.

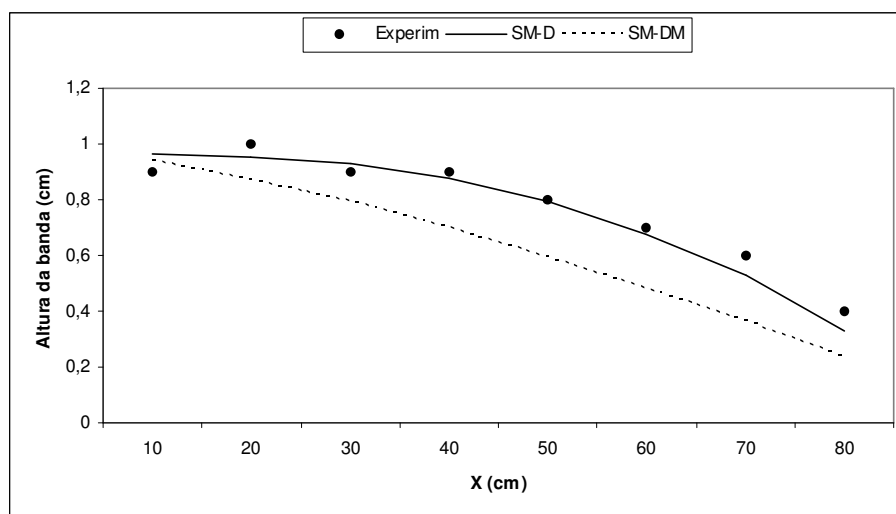


Figura 5.52: Comparação das espessuras da banda de dispersão no decantador obtidas pelos programas SM-D e SM-DM (condições da exp.5 - 1º conjunto de dados).

É importante referir que não se fez nenhum ajuste de parâmetros para o modelo matemático modificado. Quer isto dizer que os valores utilizados para os parâmetros são os mesmos que Ruiz encontrou por ajuste do seu modelo de simulação aos dados experimentais.

5.5 Discussão dos resultados

Em primeiro lugar, apresentámos os resultados obtidos pelo programa de simulação do misturador para o regime transitório. Dado que este programa se baseia num algoritmo desenvolvido e validado por Ribeiro L. (1994), comparámos os resultados obtidos com os resultados publicados por Ribeiro L. *op. cit.*

Os resultados relativos ao comportamento hidrodinâmico foram os mesmos para a precisão considerada por Ribeiro L. (1994). Relativamente aos resultados que dizem respeito à transferência de massa, observaram-se pequenos desvios que não excedem, em qualquer caso 0.1%, sendo para a idade das gotas da ordem de 0.03%. Podemos pois afirmar que o programa de simulação que desenvolvemos, no que respeita ao módulo de mistura, aproxima correctamente o comportamento esperado e conduz a resultados válidos.

Em segundo lugar analisámos os resultados para o programa acoplado misturador-decantador, SM-D, para o caso do estado estacionário. Assim, após a dispersão no misturador atingir o estado estacionário, simulámos o seu comportamento no decantador, no estado estacionário.

Os resultados obtidos foram comparados com os resultados experimentais e simulados publicados por Ruiz (1985) e por Pinto (2004). Ao analisarmos os valores dos desvios médios obtidos para a espessura da banda de dispersão verificamos que os valores são da mesma ordem de grandeza e que o programa de simulação SM-D, apesar de não ter sido ajustado parametricamente, apresenta resultados semelhantes aos obtidos pelos programas SR e SP. Com efeito, relativamente à espessura da banda e para o primeiro grupo de dados, a média dos desvios obtidos a cada 10 centímetros do decantador varia entre 0.05, no caso da experiência 3, e 0.14 no caso da experiência 2. Para estes casos os desvios médios obtidos por SR são 0.06 e 0.13 e por SP são 0.05 e 0.12 respectivamente. Para o segundo grupo de dados a média dos desvios é de 0.06 para a experiência 1 e 0.12 para experiência 2. O programa SP apresenta nestes casos 0.03 e 0.09 para desvios médios.

Também, relativamente aos volumes médios das gotas, os valores variam para o primeiro grupo de dados entre 0.07 para a experiência 2 e 0.10, nas experiências 1, 3 e 5. Os valores respectivos obtidos pelo programa SR foram 0.07 na experiência 2 e 0.13 na experiência 1, 0.07 na experiência 3 e 0.10 na experiência 5. No caso do programa SP, para as mesmas experiências, obtiveram-se 0.07, 0.09, 0.07 e 0.11 respectivamente.

Utilizámos o método estatístico Kolmogorov-Smirnov para comparar, para cada uma das experiências, os valores obtidos, para a espessura da banda, pelo programa de simulação SM-D com os valores experimentais. Os resultados mostraram que, para todas as experiências, para o nível de significância 5%, os valores obtidos por simulação são fiáveis.

Avaliámos também o comportamento relativo do programa de simulação SM-D no que diz respeito aos volumes médios das gotas ao longo da banda de dispersão, utilizando também um teste estatístico, neste caso o teste F. Para todas as simulações efectuadas, pode considerar-se que o modelo utilizado é adequado.

Em terceiro lugar, verificámos e validámos o programa SM-D para a simulação do transiente. A metodologia utilizada foi a seguinte: partindo do estado estacionário, introduz-se uma alteração num dos parâmetros do misturador (*hold up*, caudal ou velocidade de agitação) e estuda-se o impacto que esta alteração produz na dispersão, no interior do decantador, ao longo do tempo. Para avaliarmos os resultados utilizámos pares de experiências já usadas no caso do estacionário, representando uma delas o estacionário de que se parte e a outra o estacionário que se pretende atingir, ao fim de um certo intervalo de tempo.

Também nesta fase se avaliou o comportamento do programa SM-D, ao longo do tempo, relativamente à espessura da banda de dispersão e à variação do tamanho das gotas ao longo do decantador. Novamente, os resultados corroboram a adequação do modelo.

Identificámos algumas limitações do modelo matemático no caso de alterações bruscas nos parâmetros, principalmente no caso em que o parâmetro é o caudal de fase dispersa e em que a altura inicial das bandas correspondentes a cada um dos estados estacionários (o inicial e o final) é consideravelmente diferente. No modelo descrito por Ruiz (1985) para o estado estacionário, e do qual partimos para desenvolver o algoritmo para o transiente, esta limitação não é evidente porque trata apenas o estado estacionário.

No entanto, os resultados experimentais publicados para o regime transiente, alguns deles muito recentes (Silva, 2005) e (Baptista, 2004), não são ainda suficientes para validar completamente o comportamento dos modelos (SM-D e SM-DM) que desenvolvemos e apresentamos neste trabalho.

Referimos ainda os resultados obtidos pelo programa de simulação SM-DM. Este programa corresponde à implementação do modelo de Ruiz (1985) modificado. Esta implementação é a nossa primeira abordagem a um novo modelo em que as expressões empíricas de Ruiz são substituídas por expressões baseadas numa aproximação cinética com fundamento físico.

O facto de pensarmos que o modelo matemático de Ruiz (1985) conduz a resultados que nem sempre aproximam adequadamente o comportamento físico destes sistemas misturador-decantador, levou-nos a propor um novo modelo dinâmico, baseado numa formulação cinética, e que descrevemos no Capítulo 7.

6. Análise da precisão numérica dos resultados

6.1 Discretização no volume das gotas

6.2 Discretização no tempo

6.3 Método numérico

6. Análise da precisão numérica dos resultados

Neste Capítulo analisamos o efeito da discretização do espaço de estados e do tempo na precisão numérica dos resultados do programa de simulação SM-D.

No Capítulo 3 identificámos o espaço dos estados, definido pelas respectivas coordenadas externas e internas. As coordenadas externas respeitam à posição no espaço das gotas e as internas às propriedades físico-químicas das gotas.

O efeito da discretização das coordenadas internas, no caso do misturador, foi já detalhadamente estudado por Ribeiro L. (1994, p. 5-18). Uma vez que estamos a supor que se trata de um misturador perfeitamente agitado, o estado do sistema pode ser completamente descrito usando unicamente as coordenadas internas (Ribeiro L., 1994).

Para o decantador, tal como referimos no Capítulo 3, apenas consideramos a coordenada interna volume. Por este motivo, interessa analisar o efeito da discretização apenas na coordenada volume das gotas.

Vimos também que os parâmetros do decantador são o comprimento (x), a largura (w) e a altura (H) da banda de dispersão. O programa SM-D efectua os cálculos relativos a cada elemento de volume ($x \times w \times H$) da banda de dispersão, percorrendo o eixo dos xx , de milímetro a milímetro. Caso haja necessidade, usa uma discretização mais fina (ditada pelo critério de convergência do algoritmo, visto em 4.4). A coordenada w é constante e igual à largura do decantador. A altura H é calculada, para cada x , pelo programa.

6.1 Discretização no volume das gotas

A discretização utilizada na variável interna dimensão, ou tamanho, é sustentada pelo conhecimento do comportamento do tamanho das gotas ao longo do decantador. Na Secção 5.2.3 estudámos este comportamento para 30 classes de discretização. Nesta

Secção, pretendemos avaliar o impacto da discretização do tamanho das gotas na precisão dos resultados.

Começamos por analisar o comportamento do tamanho das gotas no decantador considerando 56 classes de discretização em volume, no domínio $[10^{-14}, 10^{-6} \text{ m}^3]$. A escolha deste número de classes deve-se ao facto de tanto Ruiz (1985) como Pinto (2004) o terem escolhido.

Pode observar-se que, para 56 classes (Figura 6.1 à Figura 6.3), no que diz respeito aos tamanhos das gotas ao longo do decantador, o comportamento é análogo ao comportamento observado para 30 classes de discretização, no mesmo domínio de volumes, descrito na Secção 5.2.3, isto é, continua a observar-se um movimento longitudinal do tamanho médio das gotas à medida que avançamos ao longo do decantador.

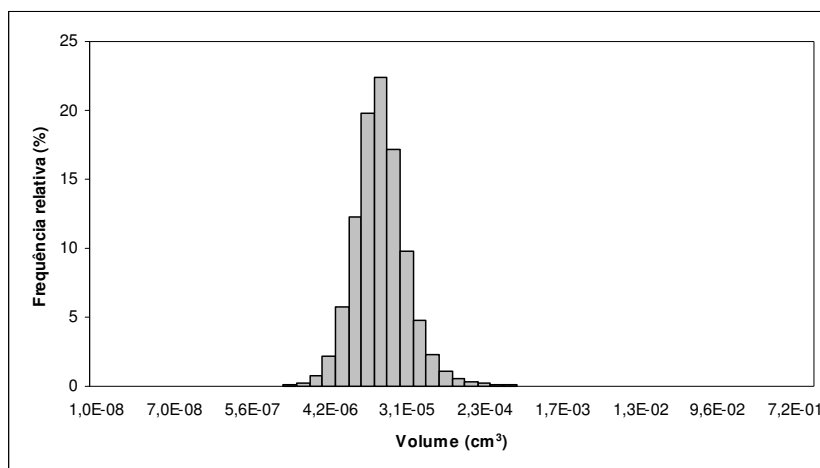


Figura 6.1: Frequência relativa dos tamanhos das gotas à entrada do decantador ($X=0$) para 56 classes de discretização.

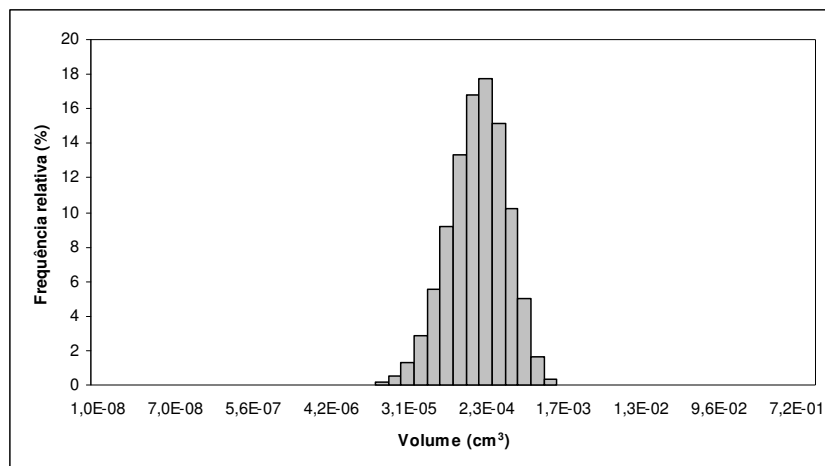


Figura 6.2: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador (X=50 cm) para 56 classes de discretização.

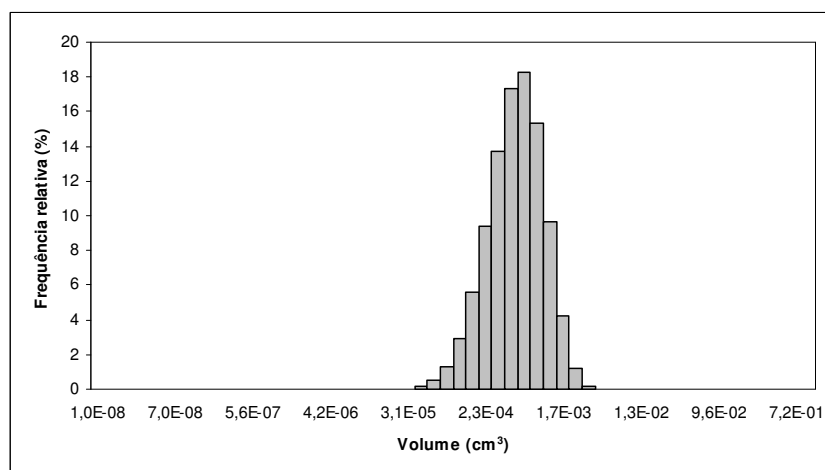


Figura 6.3: Frequência relativa dos tamanhos das gotas no decantador (X=89 cm) para 56 classes de discretização.

Passamos agora a analisar o efeito de uma variação no número de classes de discretização na precisão numérica dos resultados da simulação. Os resultados obtidos pelo programa de simulação SM-D para 30 classes de discretização, que foram apresentados no Capítulo 5, usam-se como termo de comparação.

Começamos esta análise passando a uma discretização mais fina, aumentando o número de classes para 56, passando posteriormente a uma discretização mais grosseira, com 20 e 10 classes de discretização. Comparam-se os resultados obtidos para a espessura da banda de dispersão e para os volumes médios das gotas.

Na Figura 6.4 comparamos as bandas de dispersão que se obtêm, no caso da experiência nº 4, para 10, 20, 30 e 56 classes de discretização. Podemos observar que as curvas obtidas para 56 classes e para 20 classes são análogas às obtidas com 30 classes de discretização. Apenas a curva correspondente às 10 classes de discretização se apresenta inaceitável. Neste caso, a cunha é mais curta, terminando aos 82 centímetros (para 30 classes terminava aos 93 centímetros). Ao contrário do que acontecia para as 30, 20 e 56 classes estudadas anteriormente, a curva afasta-se claramente da relativa aos dados experimentais.

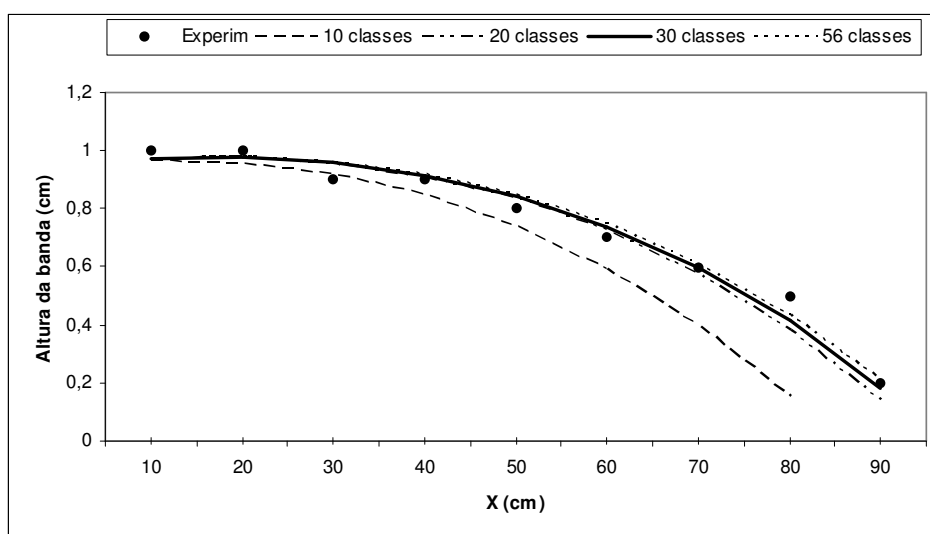


Figura 6.4: Espessura da banda de dispersão no decantador para as diferentes classes de discretização (condições da experiência 4).

Ao analisarmos os valores apresentados na Tabela 6.1 podemos verificar que, para 30 e 56 classes, a média dos desvios mantém-se em 0.06.

Comparando os resultados obtidos para 20 classes relativamente a 30 classes, a média dos desvios relativos sobe de 0.06 para 0.10, representando uma variação relativa

superior a 60%. Saliente-se que os erros associados aos dados experimentais e aos parâmetros inerentes aos modelos matemáticos são elevados (como já referimos na Secção 4.5). Recorde-se que, por exemplo, para o parâmetro C_4 , Ribeiro M. (2002) encontra um valor que quando comparado com o valor publicado por Bapat (1982) apresenta um desvio relativo superior a 80%. Também Pinto (2004), como referimos na Secção 5.2.2, encontrou valores para os parâmetros C_2 e C_3 diferentes dos propostos por Bapat *op. cit.*

Com apenas 10 classes de discretização, a média dos desvios passa de 0.06, valor obtido para as 30 classes de discretização, para 0.18, ou seja, sofre um aumento relativo percentual superior a 200% (Tabela 6.1). A qualidade dos resultados para a espessura da banda piora consideravelmente para as 10 classes de discretização.

X [cm]	Exp	10 cl	20 cl	30 cl	56 cl	10cl <>Exp	20 cl <>Exp	30cl<> Exp	56 cl <>Exp
10	1,00	0,97	0,97	0,97	0,97	0,03	0,03	0,03	0,03
20	1,00	0,96	0,98	0,98	0,98	0,04	0,02	0,02	0,02
30	0,90	0,92	0,96	0,96	0,96	0,02	0,06	0,06	0,06
40	0,90	0,85	0,90	0,91	0,92	0,06	0,00	0,02	0,02
50	0,80	0,74	0,83	0,84	0,85	0,08	0,04	0,05	0,06
60	0,70	0,59	0,72	0,74	0,75	0,15	0,04	0,05	0,07
70	0,60	0,40	0,58	0,60	0,61	0,34	0,04	0,00	0,02
80	0,50	0,15	0,38	0,41	0,43	0,70	0,23	0,17	0,13
90	0,20	0,00	0,14	0,18	0,21	0,00	0,31	0,09	0,04
$\Sigma ds/(n-1)$						0,18	0,10	0,06	0,06

Tabela 6.1: Espessura da banda – comparação dos valores obtidos com os valores já publicados para as diferentes classes de discretização (condições da experiência 4).

Analisada a variação dos resultados no que diz respeito à espessura da banda, para as diferentes classes de discretização, passamos à análise dos resultados para o volume médio das gotas. Na Figura 6.5 pode ver-se que, para as diferentes classes, as curvas relativas aos volumes médios das gotas são semelhantes, à excepção, e tal como se observou para a espessura da banda de dispersão, da curva correspondente às 10 classes de discretização.

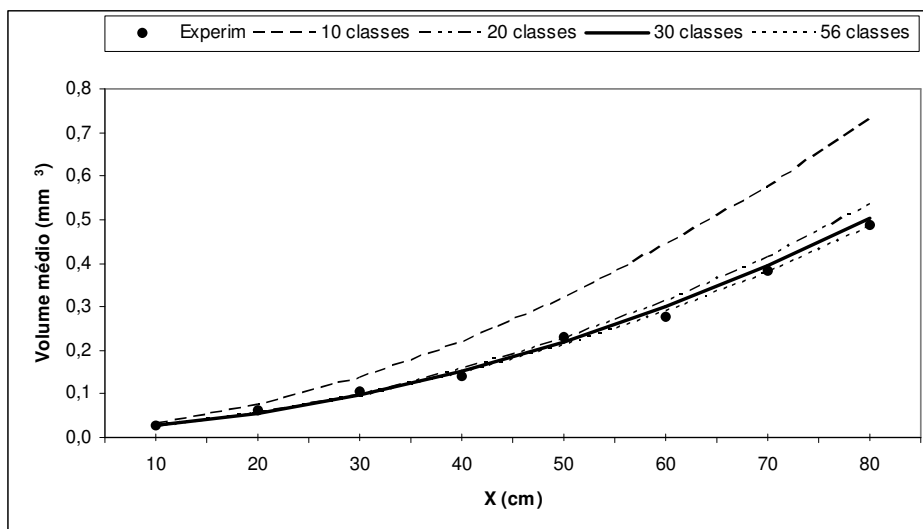


Figura 6.5: Volume médio das gotas no decantador para as diferentes classes de discretização (experiência 4).

Relativamente ao volume médio das gotas obtemos, para o caso da experiência nº 4, resultados ligeiramente melhores para 56 classes de discretização do que para 30 classes (Figura 6.5), passando a média dos desvios de 0,07 (56 classes) a 0,08 (30 classes), o que representa uma variação de 14% (Tabela 6.2).

No caso das 20 classes, a média dos desvios passa de 0,08 (30 classes) para 0,11 (20 classes), ou seja, tem-se um aumento do desvio relativo de aproximadamente 38%.

Para as 10 classes, observa-se o mesmo que se observou para a espessura da banda de dispersão, isto é, verifica-se um aumento relativo superior a 400% na média dos desvios, quando comparados com os obtidos com 30 classes de discretização.

X [cm]	Exp	10 cl	20 cl	30 cl	56 cl	10cl <>Exp	20 cl <>Exp	30cl<> Exp	56 cl <>Exp
10	0,0275	0,0330	0,0245	0,0259	0,0263	0,2010	0,1074	0,0597	0,0453
20	0,0630	0,0755	0,0542	0,0543	0,0542	0,1987	0,1390	0,1388	0,1393
30	0,1059	0,1352	0,0984	0,0958	0,0947	0,2764	0,0708	0,0953	0,1059
40	0,1420	0,2182	0,1571	0,1506	0,1477	0,5366	0,1062	0,0603	0,0401
50	0,2290	0,3209	0,2290	0,2173	0,2121	0,4012	0,0001	0,0510	0,0737
60	0,2755	0,4392	0,3153	0,2970	0,2890	0,5944	0,1445	0,0781	0,0489
70	0,3810	0,5737	0,4174	0,3909	0,3794	0,5059	0,0954	0,0260	0,0042
80	0,4860	0,7295	0,5369	0,5004	0,4850	0,5011	0,1047	0,0297	0,0021
$\Sigma ds/(n-1)$						0,46	0,11	0,08	0,07
S_r^2 / S_e^2						16,615	0,999	0,520	0,477
$F_{0,90}(7,39) = 1,878$									

Tabela 6.2: Variação do volume médio das gotas – comparação dos valores obtidos com valores publicados para as diferentes classes de discretização (experiência 4).

A variação verificada no volume médio das gotas, sendo mais acentuada, faz com que, neste caso, não se verifique a desigualdade esperada para o teste-F. Podemos pois afirmar que, para as 10 classes de discretização, e para este exemplo, a precisão dos resultados não é aceitável. Pode ver-se na Tabela 6.4 que os valores para as médias dos desvios para 10 classes de discretização são claramente superiores aos valores obtidos para as restantes classes.

Importa referir que a alteração no número de classes de discretização tem obviamente consequências no tempo de execução do programa de simulação SM-D. Na Tabela 6.3 podemos comparar os tempos de execução do programa para diferentes classes de discretização quando executado num Pentium 4 a 2,67 GHz, com 512 MB de RAM. Podemos ver que o programa demora 420 segundos para 30 classes e 5016 segundos para 56 classes de discretização, isto é, o tempo de execução aumenta aproximadamente 12 vezes. Os resultados que obtivemos mostram, por outro lado, que a precisão dos resultados obtidos para os dois casos é comparável.

Nr.Classes Volumes	Tempos [s]
10	5
20	71
30	420
56	5016

Tabela 6.3. Tempos de execução do programa SM-D para as diferentes classes de discretização, num Pentium 4 a 2,67 GHz com 512 MB de RAM (no caso experiência 5).

Apesar de Ruiz (1985) e Pinto (2004) terem utilizado 56 classes de discretização em volumes (numa grelha logarítmica), no nosso caso a escolha de uma grelha logarítmica com 30 classes parece-nos indicada (podendo mesmo eventualmente usar-se 20 intervalos). Em nosso entender, os resultados obtidos com 56 classes quando comparados com os resultados obtidos com 30 classes de discretização não justificam o esforço adicional exigido no tempo de execução do programa (cerca de 12 vezes mais). Tanto os resultados relativos à espessura da banda de dispersão como os relativos ao volume médio apresentam desvios médios aceitáveis, que diferem entre si menos de 14%.

Verificamos que o programa de simulação SM-D, só deixa de ter um bom comportamento para discretizações grosseiras. A utilização de 20 classes de discretização conduz já a soluções numéricas pouco precisas (Tabela 6.4 e Figura 6.6).

Nr.Classes Volumes	$\Sigma ds/(n-1)$ Espessura	$\Sigma ds/(n-1)$ Vol.médios
10	0,18	0,46
20	0,10	0,11
30	0,06	0,08
56	0,06	0,07

Tabela 6.4: Valores das médias dos desvios para a espessura da banda e volumes médios das gotas para as várias classes.

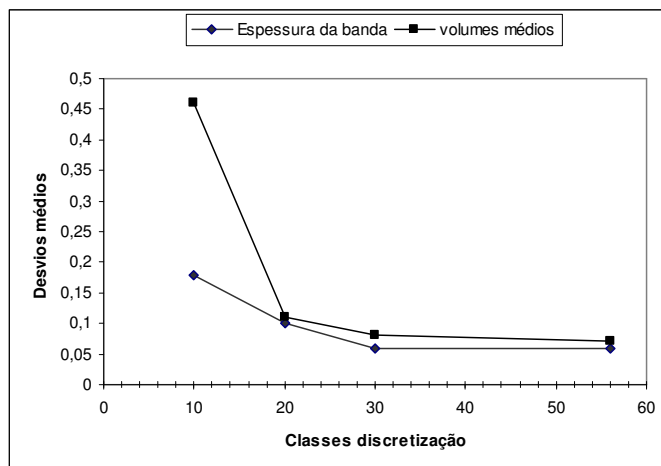


Figura 6.6: Comparação das médias dos desvios obtidas para a espessura da banda e volumes médios das gotas para as várias classes.

Salienta-se que, ao avaliar o efeito da discretização logarítmica no misturador, Ribeiro L. (1994, p. 5-21) conclui, de igual modo, que é possível obter resultados suficientemente precisos sem recorrer a discretizações muito finas, que implicam um aumento no tempo de execução da simulação. No caso do decantador chega-se a conclusões idênticas.

6.2 Discretização no tempo

Analisemos o comportamento do programa para o sistema misturador-decantador relativamente à escolha do passo no tempo.

Δt [s]	$\langle v \rangle$ $\times 10^{-9} [\text{m}^3]$	<i>hold up</i>	Nr.gotas
0.5	0,2709	0,04998	184,5
1	0,2709	0,04998	184,5
2	0,2708	0,04998	184,5

Tabela 6.5: Influência da variação do passo no tempo nos resultados relativos ao módulo de mistura.

Ribeiro L. (1994, p. 5-31) avalia a variação dos resultados obtidos para o misturador mediante a escolha do passo no tempo. Nos testes efectuados para o modelo das gotas rígidas (modelo utilizado no programa SM-D) escolheu para potência dissipada por unidade de massa 0.05 WKg^{-1} e para tempo de residência 60 segundos, fixando o número de classes $v \times c$ em 36×36 , e variando o passo no tempo (Δt) entre 0.5 e 2 segundos.

Na Tabela 6.5 apresentam-se os resultados para os volumes médios, *hold up* e número de gotas, obtidos pelo módulo de mistura do programa SM-D para as mesmas condições descritas por Ribeiro L. (1994). Comparando os valores obtidos para os diferentes passos no tempo, tem-se, tal como Ribeiro, para $\Delta t=2$ s desvios percentuais dos volumes médios abaixo dos 0.05% e para $\Delta t=0.5$ s praticamente nulos, utilizando-se para referência os valores obtidos para $\Delta t=1$ s.

Na Tabela 6.5 vemos também os resultados obtidos para o *hold up* e para o número médio de gotas, pois estes valores intervêm nos cálculos efectuados no módulo de decantação. Relativamente a estes dois parâmetros os desvios percentuais são também muito pequenos, próximos de zero no caso do *hold up* e abaixo de 0.04% (não perceptível para a precisão numérica utilizada na tabela), no caso do número médio das gotas.

Relativamente ao misturador, Ribeiro *op.cit.* concluiu que, para as condições de trabalho utilizadas, o passo de 1 segundo era adequado, o que se verifica também para o programa SM-D.

No que diz respeito ao módulo do decantador, avaliámos o comportamento do programa SM-D para os mesmos passos no tempo (0.5, 1 e 2 segundos), comparando os valores obtidos para a espessura da banda e para os volumes médios das gotas ao longo do decantador, no estado transitório. Para apresentar os resultados obtidos voltamos a utilizar como exemplo, para o estado transitório, o caso em que se parte do estado estacionário correspondente à experiência 4 e se pretende chegar ao estado estacionário correspondente à experiência 5.

Na Tabela 6.6 mostra-se, para este caso, a influência do passo no tempo nos resultados obtidos para a espessura da banda, pelo programa SM-D. Os resultados correspondem ao estacionário para a experiência 5.

X [cm]	Exp	$\Delta t=0,5$ [s]	$\Delta t=1,0$ [s]	$\Delta t=2,0$ [s]
10	0,9	0,96	0,96	0,96
20	1,0	0,96	0,96	0,96
30	0,9	0,93	0,93	0,93
40	0,9	0,87	0,87	0,87
50	0,8	0,79	0,79	0,79
60	0,7	0,68	0,68	0,68
70	0,6	0,53	0,53	0,53
80	0,4	0,33	0,33	0,33

Tabela 6.6: Influência da variação do passo no tempo nos resultados obtidos para a espessura da banda pelo programa SM-D.

Analísamos também a influência do passo no tempo nos resultados obtidos para os volumes médios das gotas (Tabela 6.7).

X [cm]	Exp	$\Delta t=0,5$ [s]	$\Delta t=1,0$ [s]	$\Delta t=2,0$ [s]
10	0,0378	0,0413	0,0413	0,0413
20	0,0756	0,0734	0,0734	0,0734
30	0,1385	0,1189	0,1189	0,1189
40	0,2075	0,1776	0,1776	0,1776
50	0,2715	0,2480	0,2480	0,2480
60	0,3655	0,3313	0,3313	0,3313
70	0,4775	0,4287	0,4287	0,4287
80	0,5340	0,5416	0,5416	0,5416

Tabela 6.7: Influência da variação do passo no tempo nos resultados obtidos para os volumes médios das gotas pelo programa SM-D.

Como se pode ver na Tabela 6.6 e na Tabela 6.7, para estes valores de Δt o passo no tempo não tem influência, para a precisão considerada, sobre a precisão numérica dos resultados obtidos pelo programa SM-D, uma vez atingido o novo estado estacionário.

Este resultado era o esperado por nós, pois, como foi visto na Tabela 6.5, a sensibilidade dos resultados no misturador face a esta variação no tempo é menosprezável. Por este motivo e dada a forma como o algoritmo foi definido, uma alteração do passo no tempo afecta sobretudo a espessura da cunha nos estados transitórios. Na Figura 6.7 pode

observar-se as três cunhas, ao fim de 500 passos de execução, para cada um dos valores supracitados do passo no tempo (Δt igual a 0.5, 1 e 2 segundos). Saliente-se todavia que a variação na espessura da cunha para passos de tempo pequenos e uma vez atingido o estado estacionário não é notória. Tendo em conta a falta de informação empírica sobre a variação das características da cunha em transiente consideramos razoável utilizar o passo no tempo de 1 segundo.

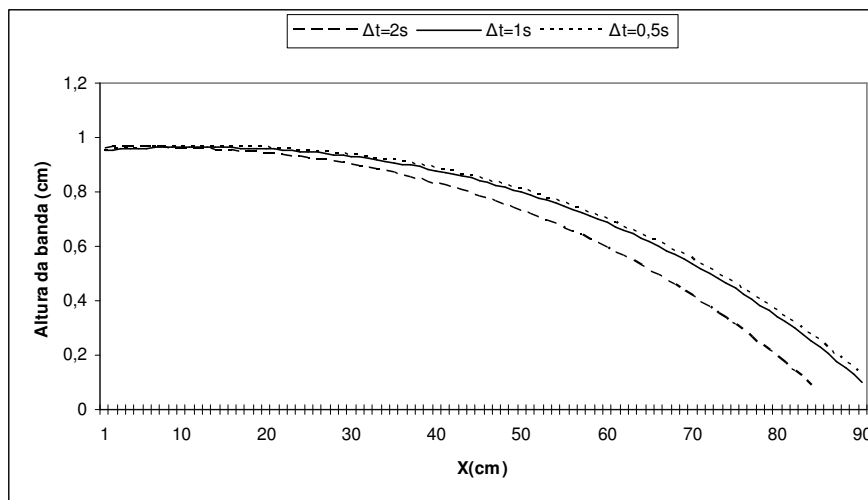


Figura 6.7: Influência do passo no tempo na espessura da banda ao fim de 500 segundos de cálculo (experiência 4 à experiência 5).

Na Tabela 6.8 podemos comparar, para este exemplo, os tempos reais de execução do programa SM-D para os passos no tempo (Δt) 0.5, 1 e 2 segundos. Este exemplo equivale ao transiente correspondente à passagem do estacionário da experiência 4 ao estacionário da experiência 5 o que corresponde a 7000 passos de execução, para $\Delta t=1$ segundo. Os primeiros 3500 passos de execução são os necessários para que o misturador atinja o primeiro estado estacionário (o tempo médio de residência no misturador para a experiência 4 é de 350 segundos). Como o tempo médio de residência para a experiência 5 é o mesmo, são em princípio necessários mais 3500 passos de execução, para $\Delta t=1$ segundo.

Δt [s]	Tempos [s]
0.5	24240
1	13620
2	6420

Tabela 6.8: Tempos de execução do programa SM-D para o transiente e para os diferentes passos no tempo num Pentium 4 a 2,67 GHz e 512 MB de RAM (da experiência 4 à experiência 5).

6.3 Método numérico

A resolução da equação integro-diferencial (3.6) implica a escolha de um método numérico apropriado. Ruiz (1985) e Ruiz e Padilla (1996) optaram pelo método de predição-correcção de Adams-Moulton. Pinto (2004) optou por métodos de passo simples, o de Euler e Runge-Kutta (4ª ordem). Segundo este último autor, o que motivou esta escolha foi o facto de se tratar de um problema de valor inicial. Assim, a estimativa para o ponto inicial de integração seria conhecida, correspondendo à dispersão (em particular a distribuição dos tamanhos das gotas) que sai do misturador.

No trabalho que apresentamos optámos também por utilizar o método de Euler, dada a sua simplicidade e dado que determinamos o valor da função em pontos próximos - de milímetro em milímetro. O método mostrou-se capaz de resolver bastante bem o problema, não necessitando de passos muito mais pequenos do que o inicial (1 mm) para passar no teste de convergência utilizado. Ao contrário do programa SP de Pinto, que afirma ter encontrado problemas de convergência ao usar este método, principalmente no início da cunha, necessitando de um passo de integração de 10^{-6} cm (Pinto, 2004), no programa SM-D a convergência é conseguida tipicamente com um passo de integração de 0.05 cm.

Na resolução numérica deste problema, utilizámos também o método de Runge-Kutta de 4ª ordem comparando-o com o método de Euler. Em geral observamos que o método de Runge-Kutta de 4ª ordem apresenta para este problema tempos de execução cerca de

50% mais elevados (tempo real) e resultados semelhantes aos obtidos pelo método de Euler.

Voltando a usar como exemplo a experiência 5 e a grelha logarítmica com 30 intervalos (para os volumes das gotas), comparámos os valores obtidos para a espessura da banda e para os volumes médios das gotas, para o estado estacionário.

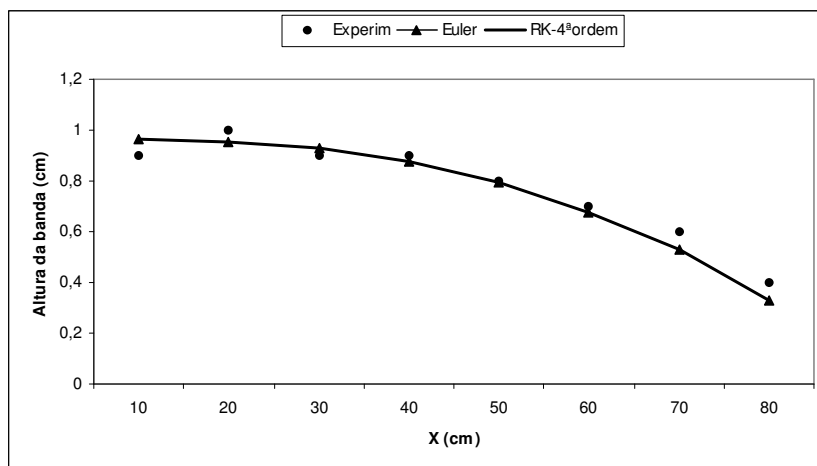


Figura 6.8: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para a espessura da banda de dispersão (condições da experiência 5) para 30 classes de discretização.

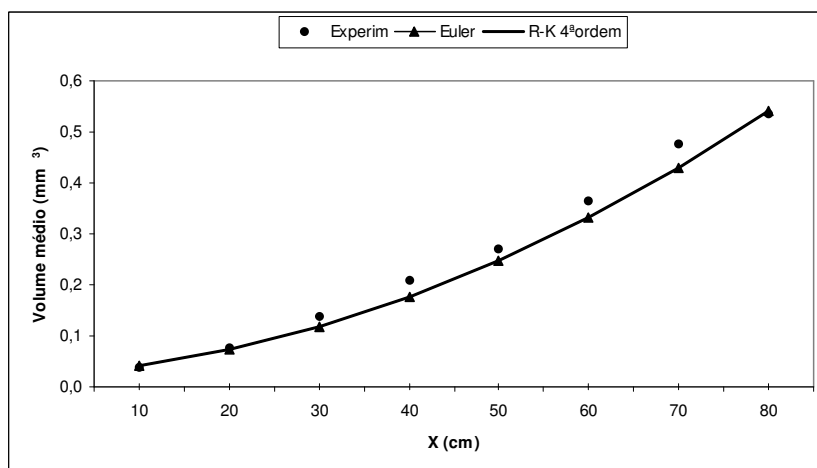


Figura 6.9: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 30 classes de discretização.

X [cm]	Exp	R-K	Euler	R-K <>Exp	Euler <>Exp
10	0,0378	0,0413	0,0413	0,0934	0,0939
20	0,0756	0,0734	0,0734	0,0295	0,0290
30	0,1385	0,1188	0,1189	0,1423	0,1418
40	0,2075	0,1774	0,1776	0,1448	0,1443
50	0,2715	0,2479	0,2480	0,0869	0,0864
60	0,3655	0,3311	0,3313	0,0940	0,0934
70	0,4775	0,4284	0,4287	0,1028	0,1022
80	0,5340	0,5412	0,5416	0,0135	0,0142
$\Sigma ds/(n-1)$				0,10	0,10

Tabela 6.9: Desvios obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 30 classes de discretização.

Comparando os valores obtidos por cada um dos métodos numéricos utilizados, obtiveram-se, para esta experiência relativamente à espessura da banda de dispersão, para a precisão utilizada (duas casas decimais), resultados idênticos, como se pode ver na Figura 6.8 (os resultados obtidos para as outras experiências foram análogos). Pode ver-se na Tabela 6.9 que se obtém o mesmo valor (0.01) para a média dos desvios dos volumes médios das gotas, para os dois métodos numéricos utilizados.

Concluimos, face ao aumento significativo do tempo de execução (o método de Runge-Kutta de 4ª ordem demora em geral mais cerca de 50% que o método de Euler), que não se justifica recorrer a uma aproximação numérica de ordem mais elevada para a discretização utilizada (30 classes).

Analisamos então, os resultados da aplicação do método de Runge-Kutta de 4ª ordem para 10 classes de discretização em volumes, visto ter sido o caso em que, os resultados obtidos pelo método de Euler se afastam dos valores experimentais. No entanto, os valores obtidos pelo programa de simulação para a espessura da banda de dispersão e para os volumes médios das gotas, usando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, são novamente muito próximos dos resultados obtidos pelo método de Euler (Figura 6.10). Mais concretamente, para a precisão utilizada (dois algarismos significativos) os resultados da espessura da banda coincidem.

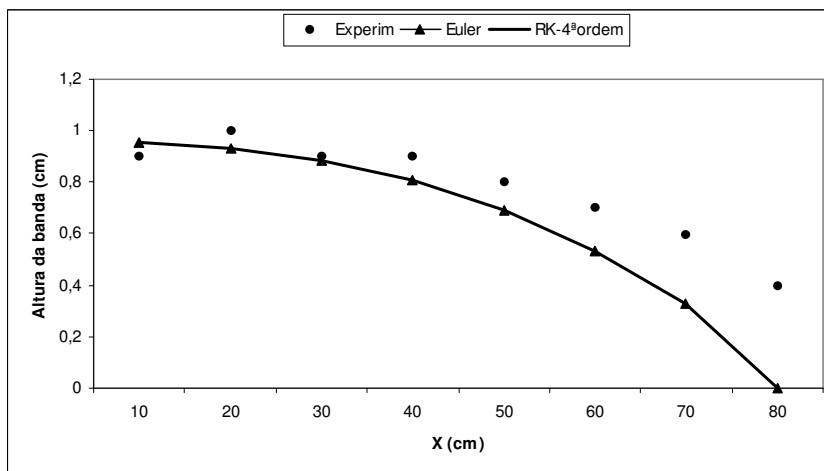


Figura 6.10: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para a espessura da banda de dispersão (condições da experiência 5) para 10 classes de discretização.

Pode observar-se na Figura 6.11 que, relativamente aos volumes médios, a situação é idêntica à observada para a espessura da cunha. Novamente, os resultados aproximam-se bastante dos resultados obtidos pelo método de Euler.

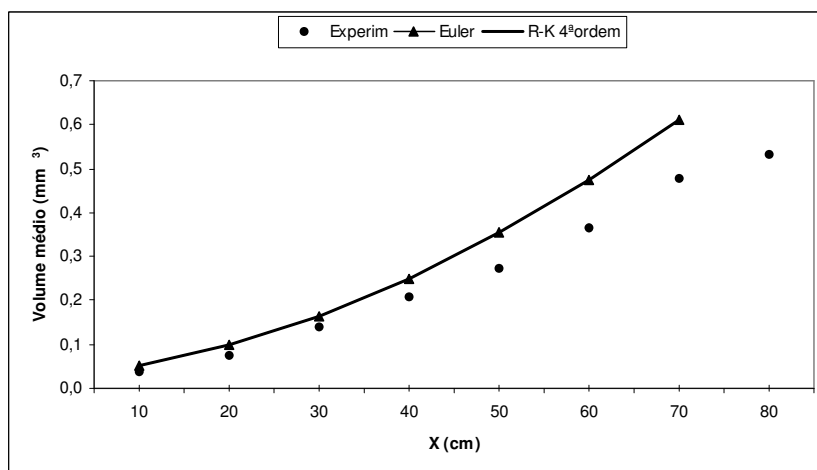


Figura 6.11: Comparação dos valores obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 10 classes de discretização.

X [cm]	Exp	Euler	R-K	Euler <>Exp	R-K <>Exp
10	0,0378	0,0529	0,0529	0,3995	0,3985
20	0,0756	0,0978	0,0978	0,2939	0,2931
30	0,1385	0,1625	0,1624	0,1731	0,1722
40	0,2075	0,2505	0,2503	0,2071	0,2062
50	0,2715	0,3559	0,3556	0,3107	0,3098
60	0,3655	0,4760	0,4756	0,3022	0,3013
70	0,4775	0,6128	0,6123	0,2834	0,2824
$\Sigma ds/(n-1)$				0,33	0,33

Tabela 6.10: Desvios obtidos pelos métodos de Euler e de Runge-Kutta de 4ª ordem para os volumes médios das gotas (condições da experiência 5) para 10 classes de discretização.

Podemos verificar na Tabela 6.10 que a média dos desvios para os volumes médios das gotas se mantém em 0.33, ou seja, para o exemplo escolhido e para 10 classes de discretização em volume das gotas não houve uma melhor aproximação numérica no caso do método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

É nossa opinião que o sucesso do método de Euler na resolução deste problema se deve ao facto de se partir de passos de integração pequenos (1 mm) e de a função a integrar ser aparentemente monótona, como pode ver-se na Figura 6.12 onde se representa o gráfico da função aproximada numericamente, para o exemplo da experiência 5.

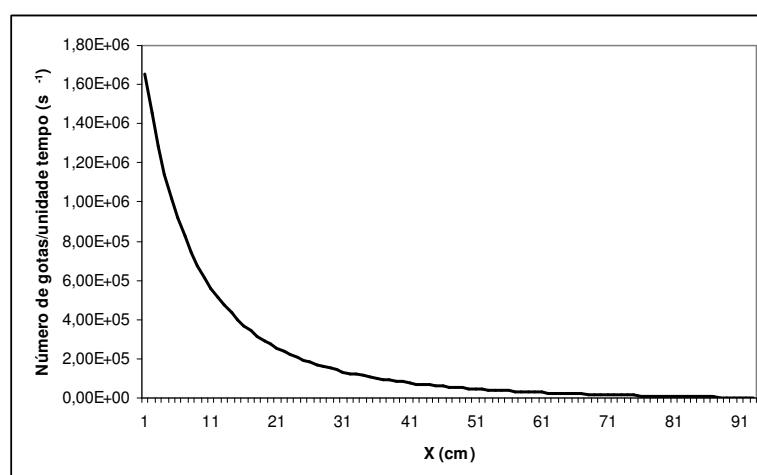


Figura 6.12: Variação da função aproximada do número total de gotas por unidade de tempo ao longo do decantador (condições da experiência 5).

O critério de convergência utilizado pode também ser responsável pela eficiência do método de Euler na resolução deste problema. Entre cada dois passos de cálculo sucessivos, o passo de integração volta a 1 mm e só depois começa a ser sucessivamente dividido por dois. Considerou-se ainda a hipótese de, no caso do passo de integração se tornar demasiado pequeno, permitir o aumento do passo para além do valor inicial de cada passo de cálculo, dobrando o seu valor. Esta metodologia é conhecida e considerada razoável para métodos de passo simples como é o caso dos métodos de Euler e Runge-Kutta de 4ª ordem. Trata-se de estimar o valor do passo de integração com vista a uma maior precisão e eficiência sem recorrer a métodos multi-passo (Rice, 1987). No programa de simulação SM-D apenas se reinicia o passo de integração com o valor inicial (1 mm), não tendo sido implementada a possibilidade de dobrar o passo, dada a facilidade de convergência do método para este problema.

7. O novo modelo para o decantador

7.1 O modelo matemático

7.2 Abordagem numérica

7.3 Implementação do algoritmo

7. O novo modelo para o decantador

Nos Capítulos anteriores apresentámos e discutimos um algoritmo capaz de simular um sistema misturador-decantador para o estado transitório. Referimos também algumas limitações de ordem qualitativa detectadas nesse algoritmo. Atendendo a essas limitações, propomos, neste trabalho, um novo modelo matemático. Este modelo matemático, totalmente inovador, usa uma formulação cinética em que o movimento da dispersão é explicitamente causado pela gravidade.

Neste Capítulo descreve-se esse novo modelo de simulação para o módulo de decantação, apresentando as expressões matemáticas inerentes ao modelo e a abordagem numérica efectuada para as resolver, numa perspectiva apenas de estudo de viabilidade (a oportunidade é inegável face ao carácter demonstradamente defeituoso dos modelos existentes).

7.1 O modelo matemático

Nesta nova abordagem modelam-se os fenómenos que ocorrem em cada elemento de volume da banda de dispersão sem recorrer às expressões de natureza empírica do modelo anterior. Assim, a modelação do transporte longitudinal das gotas é feita tendo em conta a instabilidade gravitacional que ocorre na banda de dispersão, as próprias gotas em via de compactação e a viscosidade da drenagem da fase contínua.

O estudo da variação do volume é feita, tal como no modelo anterior, para cada fatia, ou elemento de volume, $H \times w \times x$ correspondente a cada posição x na banda de dispersão no decantador.

Os fenómenos que ocorrem em cada fatia da banda de dispersão são:

1. Entrada da dispersão vinda do misturador (fase dispersa e fase contínua) no decantador. Este fenómeno faz aumentar os volumes de fase dispersa e contínua.

2. Coalescência entre as gotas que compõem a fase dispersa. Este fenómeno afecta apenas o volume médio das gotas da fase dispersa.
3. Coalescência das gotas com a interface activa, afectando a fase dispersa. Faz diminuir a quantidade de fase dispersa.
4. Drenagem da fase contínua para a interface passiva, diminuindo o volume de fase contínua.
5. Transbordo da dispersão entre cada duas fatias consecutivas. Se a fatia anterior é mais baixa, dá-se uma passagem da dispersão da fatia posterior para essa fatia. Se pelo contrário, a fatia anterior é mais alta, há passagem da dispersão da fatia anterior para a fatia posterior. Este fenómeno afecta o volume da fase dispersa e da fase contínua de cada fatia, mas não altera os volumes totais. Estamos a supor que o misturador se encontra à esquerda do decantador, ou seja, que a dispersão, no decantador, se desloca da esquerda para a direita.

A expressão seguinte traduz estes fenómenos, ou seja, a variação do volume, para cada elemento de volume correspondente à posição x do decantador, ao longo do tempo,

$$\frac{\partial V(x,t)}{\partial t} = F(x,t).w.\Delta x + \alpha \left\{ \left[\frac{H(x-\Delta x,t) - H(x,t)}{\Delta x} \right] - \left[\frac{H(x,t) - H(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \right] \right\} - \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial D(x,t)}{\partial t} \quad (7.1)$$

onde w é a largura do decantador, α é um parâmetro, $F(x,t)$ é a velocidade da dispersão que entra no decantador (alimentação) no ponto x e tempo t e H é a altura da banda de dispersão.

$\partial C(x,t)/\partial t$ representa o volume de gotas que coalesce com a interface activa por unidade de tempo e é dado pela expressão proposta por Ruiz (1985):

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{w \eta^*(x) \lambda^*(v) n(v,x) dv}{A_p(x) N(x)} \Delta x \quad (7.2)$$

$\partial D(x,t)/\partial t$ representa a variação de volume de dispersão que se perde por drenagem com a fase passiva, utilizando-se a expressão:

$$\frac{\partial D(x,t)}{\partial t} = k.V(x,t).[(1-\eta(x,t))-(1-\eta_M)] \quad (7.3)$$

onde k é uma constante, V o volume da dispersão e η o *hold up* e η_M o *hold up* máximo.

Como, por definição, se tem

$$V(x,t) = H(x,t).w.\Delta x \quad (7.4)$$

a expressão (7.1) pode também ser substituída pela da variação da altura da banda de dispersão ao longo do tempo (expressão 7.5), dividindo ambos os membros da equação (7.1) por $w.\Delta x$.

$$\frac{\partial H(x,t)}{\partial t} = F(x,t) + \beta \left[\alpha \frac{\partial^2 H(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial D(x,t)}{\partial t} \right] \quad (7.5)$$

com $\beta = 1/(w.\Delta x)$.

O modelo de Ruiz (1985) estuda, para cada fatia, apenas a variação de volume da fase dispersa. A relação entre as fases é determinada por uma expressão para o *hold up* obtida por esta autora de forma empírica. Neste modelo, dado que o *hold up* é obtido pela relação entre o volume de fase dispersa e o volume total, precisamos de conhecer, para além do volume de fase dispersa, o volume de fase contínua.

Assim sendo, a expressão da variação de volume tem que ser subdividida em duas partes, uma que determina a variação do volume de fase dispersa (7.6), e a outra calcula a variação do volume de fase contínua (7.7).

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_d(x,t)}{\partial t} = & F_d(x,t).w.\Delta x + \\ & + \alpha.w.\Delta x.\eta(x,t). \left\{ \left[\frac{H(x-\Delta x,t) - H(x,t)}{\Delta x} \right] - \left[\frac{H(x,t) - H(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \right] \right\} - \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_c(x,t)}{\partial t} = & F_c(x,t).w.\Delta x + \\ & + \alpha.w.\Delta x.(1-\eta(x,t)) \left\{ \left[\frac{H(x-\Delta x,t)-H(x,t)}{\Delta x} \right] - \left[\frac{H(x,t)-H(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \right] \right\} - \frac{\partial D(x,t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (7.7)$$

Neste novo modelo foi omitido, nesta fase, um mecanismo de transporte das gotas das interfaces activa e passiva por arrastamento (*drag*) das duas fases, mecanismo que implicaria também a modelagem dinâmica dos descarregadores de saída, bem como eventuais regolfos. Um tal mecanismo é estruturalmente incompatível com a hipótese simplificativa, e neste momento indispensável, da homogeneidade vertical das secções transversais da cunha. Por esse motivo não tratamos essa restrição neste trabalho.

7.2 Abordagem numérica

Tal como no algoritmo anterior, optou-se por fazer uma abordagem numérica directa, discretizando o espaço de estados. A variável v_k representa, do mesmo modo, a variável de discretização do volume, v , das gotas. A grelha de volumes adoptada é também a mesma do algoritmo anterior.

Neste novo algoritmo, no que diz respeito à fase contínua, os fenómenos são analisados do ponto de vista da variação em volume de fase contínua, fatia a fatia, para cada posição x do decantador. A avaliação da variação da fase dispersa faz-se de igual modo por fatias, mas estudando os fenómenos que ocorrem ao nível das gotas.

A equação do balanço de volume de fase dispersa (7.6) foi desdobrada na equação de balanço de gotas (7.8). Esta equação decompõe-se nas parcelas:

1. o volume das gotas vindas do misturador e que entram no decantador até um comprimento, L , do decantador (A);

2. o volume de gotas que entra (ou sai) da fatia anterior e que sai (ou entra) para a fatia seguinte (B e C). Na verdade, atendendo ao que foi dito quando se descrevem os fenômenos que ocorrem em cada fatia da banda de dispersão, estas parcelas devem ser desdobradas nas expressões apresentadas em (7.9) e em (7.10). Quer isto dizer que, se a fatia a montante é mais alta, dá-se transbordo da dispersão da esquerda para a direita, se não ocorre o contrário.
3. o volume das gotas que nascem e que morrem por coalescência entre gotas (E e F), e das que morrem porque coalescem com a interface (D). Se, ao falar de volume de fase dispersa, a coalescência das gotas pode ser desprezada (em volume anulam-se), quando falamos de balanço em gotas temos que ter em conta a parcela relativa ao número de gotas que nasce devido à coalescência por unidade de tempo e o número de gotas que morre devido às coalescências por unidade de tempo (gota-a-gota ou gota-interface). Quando a análise é feita ao nível das gotas, é necessário fazer o estudo da distribuição das gotas na grelha de discretização dos volumes, pois no processo da coalescência ocorre o desaparecimento de gotas, bem como a deslocação das gotas na grelha de volumes quando se dá a coalescência entre cada duas gotas.

$$\frac{d[n_k(x,t) v_k w \Delta x H(x,t)]}{dt} = n_k(x,t) v_k Q(x) \quad (A)$$

$$+ \alpha w \Delta x \eta_k(x,t) v_k \left[\frac{H(x-\Delta x,t) - H(x,t)}{\Delta x} \right] \quad (B)$$

$$- \alpha w \Delta x \eta_k(x,t) v_k \left[\frac{H(x,t) - H(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \right] \quad (C)$$

$$- \frac{w \eta^* \lambda_k^* n_k(x,t) \Delta x v_k}{\frac{\pi}{4} \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{nClasses} v_k^{\frac{2}{3}} n_k(x,t)} \quad (D)$$

$$- \frac{w \Delta x H(x,t)}{\sum_{j=1}^{nClasses} n_j(x,t)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ki} n_i(x,t) \right] n_k(x,t) v_k \quad (E)$$

$$+ \frac{w \Delta x H(x,t)}{2 \sum_{j=1}^{nClasses} n_j(x,t)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ii^*} n_i(x,t) n_{i^*}(x,t) \right] v_k \quad (F)$$

$$i^* \text{ t.q. } v_{i^*} = v_k - v_i$$

(7.8)

Se $H(x-\Delta x,t) - H(x,t) \geq 0$

$$\alpha w \Delta x \eta_k(x-\Delta x,t) v_k \left[\frac{H(x-\Delta x,t) - H(x,t)}{\Delta x} \right]$$

senão

$$\alpha w \Delta x \eta_k(x,t) v_k \left[\frac{H(x-\Delta x,t) - H(x,t)}{\Delta x} \right] \quad (7.9)$$

Se $H(x,t) - H(x+\Delta x,t) \geq 0$

$$\alpha w \Delta x \eta_k(x,t) v_k \left[\frac{H(x,t) - H(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \right]$$

senão

$$\alpha w \Delta x \eta_k(x+\Delta x,t) v_k \left[\frac{H(x,t) - H(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \right] \quad (7.10)$$

Este cálculo permite determinar a variação do volume de fase dispersa para cada elemento de volume correspondente à posição x no decantador, em cada instante t .

A variação do volume da fase contínua é calculada considerando o balanço de volumes de fase contínua. A expressão matemática que corresponde à variação do volume de fase contínua com o tempo é:

$$\begin{aligned} \frac{dV_c(x,t)}{dt} &= Q_c(x,t) \quad (A) \\ &+ \alpha \cdot w \cdot \Delta x [1 - \eta(x,t)] \left\{ \left[\frac{H(x - \Delta x, t) - H(x, t)}{\Delta x} \right] - \left[\frac{H(x, t) - H(x + \Delta x, t)}{\Delta x} \right] \right\} \quad (B) \\ &- \gamma \cdot V(x,t) \cdot [(1 - \eta(x,t)) - (1 - \eta_M)] \quad (C) \end{aligned} \quad (7.11)$$

Esta expressão é composta pelas parcelas:

1. volume de fase contínua vinda do misturador (A) por unidade de tempo;
2. volume de fase contínua que entra (ou sai) da fatia anterior e que sai (ou entra) da fatia seguinte (B) por unidade de tempo;
3. volume de fase contínua que drena para a interface passiva (C) por unidade de tempo.

Conhecendo a variação de volume para as duas fases sabemos a variação do volume total em cada posição x , e conseqüentemente as variações do *hold up* e da espessura da banda de dispersão nessa posição.

Tal como no algoritmo anterior, conhecida a variação, calculamos os novos valores (volumes da fase dispersa e da contínua, *hold up*, espessura da banda) recorrendo a um método numérico de resolução de equações diferenciais ordinárias de passo simples, como o Método de Euler.

Nas subsecções seguintes detalha-se cada um dos fenómenos que ocorrem na banda de dispersão e a sua relação com as parcelas que constituem as equações.

7.2.1 Alimentação

Nesta abordagem, a alimentação vinda do misturador é distribuída ao longo do decantador, até um comprimento L , o que poderá explicar de uma forma mais natural o aumento da espessura inicial da banda de dispersão, verificada em alguns casos, como se refere no Capítulo 5.

Foi já referido acima que a primeira parcela (A) da equação da variação do volume da fase dispersa, equação (7.8), é a parcela correspondente ao volume de fase dispersa que entra por unidade de tempo vinda do misturador. Ao contrário do algoritmo anterior, em que a alimentação vinda do vaso é considerada apenas no primeiro volume de controlo (fatia) do decantador, neste modelo a alimentação é distribuída pelas fatias sucessivas da banda de dispersão até um comprimento L (ajustável). A distribuição da alimentação pelas fatias é feita seguindo uma distribuição previamente definida a título de ensaio.

A parcela correspondente à alimentação vinda do misturador surge também na equação correspondente à variação do volume de fase contínua (7.11) como a parcela (A). Neste caso, trata-se do caudal de fase contínua vinda do misturador.

7.2.2 Transferência longitudinal

As parcelas (B) e (C) da equação (7.8) e a parcela (B) da equação (7.11) representam a transferência de dispersão entre as fatias consecutivas da banda de dispersão, como já foi referido.

A parcela (B) corresponde à quantidade de volume de fase dispersa que entra ou sai por transbordo da fatia anterior para a fatia em estudo. Dá-se entrada de dispersão vinda da fatia anterior se esta é mais alta do que a fatia actual e dá-se saída de dispersão no caso contrário.

A parcela (C) corresponde à porção de volume de fase dispersa que entra ou sai por transbordo da fatia seguinte para a fatia em estudo. Dá-se entrada de dispersão vinda da fatia seguinte se esta é mais alta do que a fatia actual e dá-se saída de dispersão no caso contrário.

A parcela (B) da equação (7.11) representa de forma mais compacta a quantidade de volume de fase contínua que entra e que sai de uma fatia para as fatias vizinhas.

7.2.3 Coalescência com a interface

Na equação (7.8), parcela (D), referimos a coalescência da fase dispersa com a interface activa. Para determinar o número de gotas que coalesce com a interface por unidade de tempo, usamos a expressão de Ruiz,

$$\frac{w\Delta x\eta^*(x)\lambda^*(v)n(v,x)dv}{A_p(x)N(x)} \equiv \frac{w\Delta x\eta^*(x)\lambda^*(v)n(v,x)dv}{\frac{\pi}{4}\left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\int_0^\infty v^{\frac{2}{3}}n(v,x)dv} \quad (7.12)$$

Foi já referido no Capítulo 3 que $n(v,x)dv$ é o número de gotas da classe de volume v por unidade de volume de dispersão na posição x , a constante $\eta^*(x)$ é a fracção de superfície da fase dispersa (valor obtido experimentalmente, próximo de 1), $\lambda^*(v)$ é a frequência de coalescência gota-interface, (obtido experimentalmente), $A_p(x)$ é a área média projectada das gotas e $N(x)$ é o número total de gotas por unidade de volume da banda de dispersão, na posição x .

Optou-se, novamente, por uma resolução numérica directa, utilizando a discretização dos volumes em classes, v_k , passando os integrais a somatórios nas classes de volume, tendo em conta que:

$$n_k(x) = \int_{v_k}^{v_{k+1}} n(v, x) dv \quad (7.13)$$

Assim, a equação (7.12), escreve-se:

$$\frac{w \eta^* \lambda_k^* n_k(x, t) \Delta x}{\frac{\pi}{4} \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \sum_{k=1}^{n_{Classes}} v_k^{\frac{2}{3}} n_k(x, t)} \quad (7.14)$$

7.2.4 Coalescência entre gotas

Na equação (7.8), as parcelas (E) e (F) representam os fenómenos de morte e nascimento das gotas por coalescência.

Foi também já referido no Capítulo 3 que as equações (7.15) e (7.16) correspondem às frequências de morte e nascimento das gotas por coalescência gota-a-gota. Assim, temos as expressões que correspondem ao número de gotas que morrem por coalescência, por unidade de tempo, no elemento de volume ou fatia:

$$\frac{wH(x)\delta x}{N(x)} \left[\int_0^\infty \lambda(v, v') n(v, x) n(v', x) dv' \right] dv \equiv \frac{wH(x)\delta x}{\int_0^\infty n(v, x) dv} \left[\int_0^\infty \lambda(v, v') n(v, x) n(v', x) dv' \right] dv \quad (7.15)$$

$$\frac{wH(x)\delta x}{2N(x)} \left[\int_0^v \lambda(v-v', v') n(v-v', x) n(v', x) dv' \right] dv \equiv \frac{1}{2 \int_0^\infty n(v, x) dv} \left[\int_0^v \lambda(v-v', v') n(v-v', x) n(v', x) dv' \right] dv \quad (7.16)$$

A equação (7.15), que representa as gotas que desaparecem do sistema por coalescerem entre si, foi implementada usando o método de discretização proposto por Ribeiro L. (1994) da seguinte forma,

$$\frac{w\Delta x H(x,t)}{\sum_{j=1}^{nClasses} n_j(x,t)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ki} n_i(x,t) \right] n_k(x,t) \quad (7.17)$$

A equação (7.16), que representa as gotas que entram do sistema como resultado da coalescência com outra gota, foi traduzida numericamente, usando, do mesmo modo, o método proposto por Ribeiro L. (1994) da seguinte forma,

$$\frac{w\Delta x H(x,t)}{2 \sum_{j=1}^{nClasses} n_j(x,t)} \left[\sum_{i=0}^{nClasses} \lambda_{ii^*} n_i(x,t) n_{i^*}(x,t) \right], \quad i^* t.q. v_{i^*} = v_k - v_i \quad (7.18)$$

7.2.5 Drenagem de fase contínua

A parcela (C), da equação (7.11) modela a drenagem da fase contínua. A expressão (7.19) é usada para avaliar essa quantidade de volume de fase contínua que drena para a interface passiva na posição x do decantador.

$$\gamma V(x,t) [(1 - \eta(x,t)) - (1 - \eta_M)] = \gamma V(x,t) (\eta_M - \eta(x,t)) \quad (7.19)$$

sendo γ , uma constante, η_M o *hold up* máximo, η o *hold up* em x e V o volume da fatia na posição x e no tempo t .

7.2.6 Cálculo do *hold up*

Como já foi referido, neste modelo, o cálculo do *hold up* faz-se usando apenas a definição. Assim, calcula-se o volume total da fatia somando o volume de fase dispersa com o volume de fase contínua, e, seguindo a definição, obtém-se o *hold up*:

$$\eta(x,t) = \frac{V_d(x,t)}{V(x,t)} = \frac{V_d(x,t)}{V_d(x,t) + V_c(x,t)} \quad (7.20)$$

Note-se que, no algoritmo anterior também não se efectuavam cálculos para obter a variação no volume da fase contínua. Calculava-se apenas a variação do volume de fase

dispersa e, para conhecer a variação do volume total era fornecida a expressão do *hold up*.

7.2.7 Cálculo da altura H

No algoritmo anterior a espessura da banda de dispersão numa posição x do decantador era dada pelo quociente entre o caudal volumétrico da dispersão e o produto da velocidade com a largura do decantador (equação (7.21)).

$$H(x) = \frac{Q_d(x)}{wU(x)\eta(x)} = \frac{Q(x)}{wU(x)} \quad (7.21)$$

No modelo anterior o valor de $U(x)$, velocidade axial das gotas, era fornecido por uma equação encontrada por Ruiz (1985) por ajuste aos dados experimentais, ou seja, outra expressão obtida de forma empírica. Neste modelo, a velocidade axial das gotas $U(x)$, proposta por Ruiz (1985) não é utilizada. Novamente, usamos a definição para calcular a espessura da banda de dispersão da fatia em x :

$$H(x, t) = \frac{V(x, t)}{w\Delta x} \quad (7.22)$$

7.3 Implementação do algoritmo

O desenvolvimento da implementação computacional deste novo modelo foi apenas parcialmente realizado no presente trabalho.

Para esta opção contribuiu decisivamente o facto de a experimentação necessária para a validação do modelo e da sua implementação se encontrar neste momento ainda a realizar-se, devido, entre outras razões à complexidade do fenómeno, nomeadamente no estabelecimento de um estado permanente de longo prazo *cf.* (Silva, 2005).

Com efeito,

- não só a implementação em termos de cálculo numérico e de programação é muito laboriosa por exigir especiais cuidados para garantir precisão adequada com tempos de cálculo viáveis (como demonstramos no Capítulo 6),
mas também
- o aparecimento, no modelo, de novos parâmetros físicos de transporte exige, para além do algoritmo de simulação, um algoritmo de optimização de parâmetros cuja aplicação depende de dados experimentais de qualidade que, como acabámos de dizer, se não encontram ainda disponíveis.

8. Conclusões e perspectivas futuras

8.1 Conclusões

8.2 Perspectivas Futuras

8. Conclusões e Perspectivas Futuras

8.1 Conclusões

A simulação por computador de sistemas misturador-decantador é importante dado que a experimentação directa é dispendiosa. Por outro lado, um bom conhecimento dos fenómenos de separação das fases que ocorrem nos decantadores permite prever o comportamento da banda de dispersão e assim projectar decantadores com um correcto dimensionamento. Um sobredimensionamento acarreta custos mais elevados.

Nesta dissertação apresentamos um algoritmo de simulação dinâmico da unidade de decantação de um sistema misturador-decantador com capacidade de descrição de regimes transitórios, incluindo os fenómenos hidrodinâmicos de coalescência gota-gota e gota-interface e, eventualmente, os fenómenos de transferência de massa por estes condicionados.

Este trabalho enquadra-se na actividade de um grupo de investigação que, desde 1985, tem vindo a estudar o comportamento hidrodinâmico e de transferência de massa de dispersões líquido-líquido.

O ponto de partida originalmente proposto era constituído pelo modelo para o regime transitório do misturador (Ribeiro L., 1994) e pelo modelo para o regime permanente do decantador (Ruiz, 1985). Este último deveria conter informação suficiente para o fim em vista, na medida em que comportava explicitamente um mecanismo de interacção das gotas entre si e com a interface activa e implicitamente um mecanismo de transporte (embora este exclusivamente para o caso do regime permanente).

Apesar de inicialmente se dispor apenas de informação experimental sobre o perfil de espessuras da banda de dispersão, tal não se considerou impeditivo de uma validação externa (experimental) do modelo, dado que, como uma análise minimamente aprofundada do algoritmo de Ruiz explicitamente mostrava, o cálculo do perfil de

espessuras é inseparável do cálculo das composições granulométricas e, portanto, o perfil de espessuras deve conter implicitamente informação proveniente das granulometrias.

Numa primeira fase (descrita e analisada nos Capítulos 4, 5 e 6), foi atingido o objectivo proposto mediante uma estratégia em que, partindo de um estado estacionário conhecido, se provoca uma alteração num dos parâmetros operacionais do misturador (e.g., intensidade de agitação no misturador, caudais de alimentação das fases contínua e dispersa) e se estuda o impacto dessa alteração sobre a banda de dispersão no interior do decantador. Para isso, a banda de dispersão é considerada como uma sucessão de fatias transversais sucessivamente justapostas e de espessura suficientemente pequena para que, computacionalmente (isto é, tendo em consideração a precisão finita da representação dos números reais em computador), se comportem como infinitesimais. Em cada passo de uma iteração temporal devidamente controlada, *a posteriori*, em termos de precisão, os efeitos da alteração de composição e espessura da banda, anteriormente calculados até uma certa fatia, são propagados apenas à fatia imediata (e, daí, a óbvia interdependência da pequena espessura da fatia e do pequeno incremento temporal considerado). Por outro lado, a grelha de calibres das gotas no decantador é tomada como idêntica à utilizada no algoritmo de simulação do misturador, partindo do princípio de que a intensidade e velocidade das interações entre gotas no interior deste conduzem, em termos de precisão, a uma maior exigência que a do decantador.

A estratégia de validação (interna, parcial) considerada foi a da concordância do resultado “assimptótico” da evolução temporal com o resultado do cálculo directo do estado permanente correspondente, conjuntamente com a plausibilidade física do processo transitório. Esse cálculo directo obtém-se aplicando o modelo de Ruiz, “algoritmizado” à maneira de Pinto (2004), ao produto “assimptótico” da simulação dinâmica do misturador. A aplicação de métodos estatísticos adequados às diferenças das previsões dos dois algoritmos mostrou que, para o nível de significado de 5%, todos os valores obtidos pelo algoritmo dinâmico são fiáveis. A validação externa (experimental), igualmente parcial, seguiu precisamente a mesma estratégia, tomando agora como referência os resultados experimentais relativos à espessura da banda (à

época, os resultados relativos a composições granulométricas de Baptista (2004) não se encontravam ainda disponíveis).

Porém, desde logo, foram realizadas modificações substanciais nas expressões da velocidade axial das gotas (descritas na Secção 3.5) com vista a tornar as hipóteses de partida de Ruiz

- mais explícitas, fisicamente mais significativas e um pouco menos empíricas no que se refere ao transporte em regime de pistão com fugas de gotas por coalescência na interface activa e por drenagem da fase contínua para a interface passiva;
- mais conformes à situação experimental implementada nas instalações do Laboratório de Simulação de Dispersões Líquido-Líquido do ISEP (alimentação da dispersão pela interface inferior (passiva) da cunha e sobre uma distância longitudinal finita).

Estes melhoramentos foram (como se mostrou no Capítulo 5) relativamente bem sucedidos do ponto de vista do acordo visual-quantitativo com os escassos dados experimentais então disponíveis sobre a espessura da banda de dispersão (Pinto *et al.*, 2001a, 2001b) e qualitativo com os dados preliminares sobre a composição granulométrica da banda de dispersão (Baptista, 2004).

A implementação computacional deste modelo foi detalhadamente analisada nos Capítulos 5 e 6, considerando-se assim cumprida a proposta inicial.

Porém, numa segunda fase não originalmente prevista, foi detectado e analisado o defeito estrutural mais importante do modelo de Ruiz que se traduz no facto de todo o cálculo do transiente de passagem de um estado permanente conhecido a um outro imposto por novas condições operacionais exigir

- o conhecimento prévio da espessura da primeira secção da cunha no novo regime permanente, o que significa que esta é forçada a realizar uma variação instantânea

que dá origem a um perfil transitório de espessuras totalmente implausível e nunca observado experimentalmente;

ou, em alternativa

- o conhecimento prévio do perfil de velocidades longitudinais da dispersão, o que, não implicando anomalias tão graves do perfil de espessuras da banda de dispersão, é, ainda assim, absolutamente implausível.

O facto de o modelo de Ruiz permitir optar por uma destas duas alternativas, que conduzem a transientes diferentes para um mesmo estado permanente final, põe em evidência uma incoerência estrutural do modelo, traduzida por um indeterminismo fisicamente inaceitável.

Por outro lado, a necessidade de se fornecer um dos parâmetros do estado permanente final, para se poder obter a previsão do novo estado permanente quando se modificam as condições operacionais de um estado permanente anterior nega totalmente o carácter previsional do modelo.

Este facto determinou fundamentalmente que os algoritmos do transiente não tenham sido levados ao seu pleno desenvolvimento numérico e computacional (nomeadamente, ao algoritmo de optimização), para além de uma análise aprofundada das suas condições de precisão, a uma validação apenas interna e a uma demonstração da plausibilidade em termos externos.

Por este facto, passou-se ao desenvolvimento (descrito no Capítulo 7) de um modelo conceptualmente novo, baseado em hipóteses físicas plausíveis, que substituem com grande vantagem conceptual as hipóteses do modelo de Ruiz:

- a) o transporte longitudinal das gotas na banda de dispersão é movido pela própria instabilidade gravitacional desta;

- b) é condicionado por uma “viscosidade” resultante da relativa rigidez do arranjo das gotas em vias de compactação e pela viscosidade propriamente dita da drenagem da fase contínua através dos interstícios das gotas),

hipóteses cuja validade só poderá ser testada *a posteriori* pela eventual concordância com os resultados experimentais.

A estratégia adoptada para a resolução numérica das equações integro-diferenciais que descrevem a nova fenomenologia foi precisamente a mesma dos dois casos anteriores.

Reconhecemos a omissão neste modelo de qualquer mecanismo de transporte das gotas das interfaces activa e passiva por arrastamento (*drag*) das duas fases, mecanismo que implicaria também a modelagem dinâmica dos descarregadores de saída, incluindo eventuais regolfos; essa omissão é aqui explícita e naturalmente assumida dado que a sua razão se prende com o facto de um tal mecanismo (para o qual, aliás, apontam não só a plausibilidade física, mas também alguns resultados preliminares da experimentação, como, por exemplo, a variação da posição vertical da cunha por efeito da variação de um dos dois caudais de alimentação do misturador) ser estruturalmente incompatível com a hipótese simplificativa (neste momento indispensável) da homogeneidade vertical das secções transversais da cunha. Trata-se, como é evidente, de uma restrição a ser levantada mais tarde, no contexto da construção de todo um novo modelo capaz de admitir heterogeneidade vertical da banda de dispersão, modelo que será necessariamente não só conceptual, mas também computacionalmente muito mais complexo, visto envolver uma terceira variável de integração, a espessura da banda.

Dado que a experimentação necessária para a validação do modelo não está ainda disponível, o desenvolvimento da implementação computacional deste novo modelo foi apenas parcialmente realizado neste trabalho, como referimos na Secção 7.3.

8.2 Perspectivas futuras

Desta breve descrição do trabalho realizado e das suas circunstâncias, resultam directamente, para o futuro, as seguintes tarefas imediatamente à vista: antes de mais,

- o completamento da implementação numérica e computacional do novo modelo, para cumprimento das condições de precisão e rapidez de cálculo impostas pela análise que atrás desenvolvemos;

depois,

- a implementação de um algoritmo de optimização não-convexa dos parâmetros do modelo que, de acordo com a experiência prévia do grupo de trabalho sobre modelos fisicamente razoáveis, deve ser do tipo Levenberg-Marquardt, com re-escalagem explícita;

em seguida,

- a validação lógica e física do algoritmo de simulação face aos dados experimentais disponíveis (de momento, por meios ópticos, espessura e composição granulométrica da banda de dispersão em secções convenientes, mais tarde, por meios ultrassónicos, fracção de fase dispersa) e eventuais aperfeiçoamentos daí decorrentes;

eventualmente,

- a exploração do novo algoritmo de simulação (experimentação computacional) com vista à aquisição de sensibilidade para as características operacionais do sistema e eventual aplicação em algoritmos projecto (volume, comprimento e profundidade da cuba para determinada gama de condições operacionais, *e.g.*, caudais das fases e intensidade de agitação no misturador); com efeito, a experimentação computacional é extremamente importante numa área como esta, em que a experimentação directa é complexa, cara e morosa e em que os subdimensionamentos implicam perda de eficiência dos processos e os sobredimensionamentos implicam custos

elevados, não só em equipamentos, mas também, e sobretudo, em espaço e eficiência dos arranjos espaciais.

Esta última tarefa, pelo seu carácter dominante de Engenharia, excede, previsivelmente as capacidades e os interesses pessoais da presente autora.

Em fase posterior, poderão ainda conceber-se objectivos mais ambiciosos, em princípio ao alcance da autora, nomeadamente:

- a extensão do modelo actual ao caso da transferência de massa entre fases no decantador, com vista a resolver o problema, até hoje por abordar, de saber até que ponto, e em que circunstâncias, esta pode ser desprezada no cálculo da recuperação e pureza dos produtos de uma bateria complexa de misturadores/decantadores;
- o desenvolvimento de um modelo ainda mais realista, mas muitíssimo mais complexo tanto conceptual como computacionalmente, que incluía explicitamente
 - a. transporte vertical diferenciado das gotas de diferentes calibres e consequente heterogeneidade vertical da banda de dispersão;
 - b. efeitos de arrastamento das gotas pelo movimento longitudinal dos fluidos nas interfaces activa e passiva;
- a aplicação da nova generalização, a., ao caso dos decantadores de fluxo vertical (*deep-layer*) (a generalização b. é, neste caso, irrelevante), incluindo o estudo de eventuais vantagens/desvantagens em matéria de atravancamento e de arranjos espaciais das respectivas baterias.

Bibliografia

ALLAK, A.M.A; JEFFREYS, G.V. (1974) – Studies of Coalescence and Phase Separation in Thick Dispersion Bands. AIChE Journal, ISSN 0001-1541, Vol. 20, nº 3 (1974), p. 564-570.

AUSTIN, D.G.; JEFFREYS, G.V.(1981) – Coalescence Phenomena in Liquid-Liquid Systems. Journal of Chem. Tech. and Biotech., ISSN 0142-0356, Vol. 31, nº 8 (1981), p. 475-488.

AspenTech – Disponível em <http://www.aspentech.com>. Consultado em 2005-07-22.

BAPAT, P.M.; TAVLARIDES, L.L., SMITH, G.W. (1983) – Monte Carlo Simulation of Mass Transfer in Liquid-Liquid Dispersions, Chem. Eng. Sci., ISSN 0009-2509, Vol. 38, nº 12 (1983), p. 2003-2013.

BAPAT, P.M. (1982) – Mass Transfer in a Liquid-Liquid Continuous Flow Stirred Tank Reactor. Illinois Institute of Technology, EUA, 1982. Ph.D. Thesis.

BAPTISTA, Marília C.F. – Determinação Experimental de Parâmetros Condicionantes da Coalescência num Decantador de Fluxo Horizontal. Porto: Universidade do Porto, 2004. Dissertação de Mestrado.

BAYENS, C.A.; LAURENCE, R.L. (1969) - A Model for Mass Transfer in Coalescing Dispersion. Ind & Eng. Chem. Fundam., Vol. 8 (1969), p. 71-94.

BARNEA, E.; MIZRAHI, J. (1975a) – Separation Mechanism of Liquid-Liquid Dispersions in a Deep-Layer Gravity Settler. IV. Continuous Settler Characteristics, Trans. of the Inst. of Chem. Engns., ISSN 0046-9858, Vol. 53, nº 2 (1975), 83-92.

BARNEA, E.; MIZRAHI, J. (1975b) – Separation Mechanism of Liquid-Liquid Dispersions in a Deep-Layer Gravity Settler. III. Hindered Settling and Drop-to-Drop Coalescence in the Dispersion Band, Trans. of the Inst. of Chem. Engns., ISSN 0046-9858, Vol. 53, nº 2 (1975), p. 75-82.

- BARNEA, E.; MIZRAHI, J. (1975c) – Separation Mechanism of Liquid-Liquid Dispersions in a Deep-Layer Gravity Settler. II. Flow Patterns of the Dispersed and Continuous Phases within the Dispersion Band, Trans. of the Inst. of Chem. Engns., ISSN 0046-9858, Vol. 53, nº 2 (1975), p. 70-74.
- BARNEA, E.; MIZRAHI, J. (1975d) – Separation Mechanism of Liquid-Liquid Dispersions in a Deep-Layer Gravity Settler. I. The Structure of the Dispersion Band, Trans. of the Inst. of Chem. Engns., ISSN 0046-9858, Vol. 53 (1975), p. 61-69.
- BLASS, E.; MEON, W.; ROMMEL, W.; LOEBMANN, A. (1992) – Is Hydrodynamic Modeling a Sound Approach for the Design of Gravity Settlers Without Coalescing Aids?, Int. Chem. Eng., ISSN 0020-6318, Vol. 32, nº 4 (1992), p. 601-618.
- BUEVICH, Yu.A.; LIPKINA, E. Kh. (1978) – Disruption of Thin Liquid Films, Kolloidnyi Zhurnal, ISSN 0023-2912, Vol. 40, nº 2 (1978), p. 201-206. Cit. por Rommel, Meon e Blass (1992).
- CARTWRIGHT, J., H., E.; PIRO, O. (1992) – The Dynamics of Runge-Kutta Methods. Int J. Bifurcations Chaos. Vol. 2 (1992), p. 427-449. Disponível em <http://lec.ugr.es/~julyan/numerics.html>. Consultado em 2005-07-22.
- CHAPMAN, T., W. (1987) – “Extraction - Metals Processing”, cp. 8 in Rousseau, Ronald W. (Eds.), Handbook of separation process technology, Wisconsin, 1987.
- CHARLES, G.E.; MASON, S.G. (1960a) - The Mechanism of Partial Coalescence of Liquid Drops at Liquid/Liquid Interfaces. J. Colloid Sci. Vol. 15 (1960), p. 105-122.
- CHARLES, G.E.; MASON, S.G. (1960b) - The Coalescence of Liquid Drops with Flat Liquid Interfaces. J. Colloid Sci. Vol. 15 (1960), p. 236-267.
- CHEN, J.D.; HAHN, P.S.; SLATTERY, J.C. (1984) – AIChE J., ISSN 0001-1541, Vol. 30 (1984), p. 622-630. Cit. por Rommel, Meon e Blass (1992).

- CONTE, S. D.; BOOR, C. (1983) – “Elementary Numerical Analysis-An algorithm approach”. International Student Edition. McGraw-Hill, 1983. ISBN 0-07-012447-7.
- COULALOGLOU, C. A.; TAVLARIDES, L.L. (1977) - Description of Interaction Processes in Agitated Liquid-Liquid Dispersions. Chem. Engng. Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 32, p. 1289 (1977).
- DAVIES, G.A.; JEFFREYS, G.V.; SMITH, D.V.; ALI F.A. (1970) - “Recent Advances in Liquid Extraction”. Hanson, C.(Eds) Pergamon Press, Oxford, cp 4., 1970.
- DROWN, D.C.; THOMSON, W.J. (1977) – Fluid Mechanic Considerations in Liquid-Liquid Settlers. Ind. & Engng. Chem., Process Design and Develop. Vol. 16, nº2 p. 197-206 (1977).
- FAIRES, J.D.; BURDEN, R. (1998) - “Numerical Methods”. Brooks/Cole Publishing Company, 2nd ed., U.S.A., 1998. ISBN 0-534-35187.
- GILLESPIE, T.; RIDEAL, E.K. (1956) – “The Coalescence of Drops at an Oil-water Interface”. Trans. Faraday Soc., Vol. 52 (1956), p. 173-183, Cit. por Ruiz (1985).
- GODFREY, J.C.; SLATER, M.J. (1994) - “Liquid-Liquid Extraction Equipment”. John Wiley & Sons Ltd, London, 1994. ISBN 0-471-94156-5.
- GOMES, Elsa F. – Aplicação do Processamento Paralelo à Simulação Dinâmica das Colunas de Extracção Agitadas. Porto: Universidade do Porto,1999. Dissertação de Mestrado.
- GOMES, E.F.; RIBEIRO, L.M.; REGUEIRAS, P. F. R.; CRUZ-PINTO, J. J. C. (2000) - “A Parallel Algorithm for the Simulation of the Dynamic Behaviour of Liquid-Liquid Agitated Columns”; Proceedings of Vector and parallel processing VECPAR 2000, LNCS, Springer(2000).

- GOMES, E.F.; MADUREIRA, C. M. N.; GUIMARÃES, M. M. L.; RIBEIRO, L.M. (2004) - “A new Algorithm for the Dynamic Simulation of a Shallow-Layer Gravity Settler”; Proceedings of ESCAPE-14, Maio de 2004, Lisboa.
- GOMES, E.F.; MADUREIRA, C. M. N.; GUIMARÃES, M. M. L.; RIBEIRO, L.M. (2004) - “Numerical modelling of a gravity settler in dynamic conditions”; Proceedings of the Fourth International Conference on Engineering Computational Technology ECT2004, Civil-Comp Press, Setembro de 2004 em Lisboa.
- GOMES, M. Luísa. (1999) – Comportamento Hidrodinâmico de Colunas Agitadas de Extracção Líquido-Líquido. Braga: Universidade do Minho, 1999. Dissertação de Doutoramento.
- GUIMARÃES, Margarida M. L.(1989) – Processos de Interacção e Transferência de Massa na Fase Dispersa de Sistemas Líquido-Líquido. Braga: Universidade do Minho, 1989. Dissertação de Doutoramento.
- HARTLAND, S.; JEELANI, S.A.K. (1987) – Choice of Model for Predicting the Dispersion Height in Liquid/Liquid Gravity Settlers from Batch Settling Data. Chem. Eng. Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 42, nº 8 (1987), p. 1927-1938.
- HARTLAND, S.; JEELANI, S.A.K. (1994) – “Gravity Settlers”, cp. 13 in Godfrey, J.C. and Slater, M.J.(Eds.), Liquid-Liquid Extraction Equipment, John Wiley & Sons Ltd, London, 1994.
- HENSCHKE, M.; SCHLIEPER, L.H.; PFENNING, A. (2002) – Determination of a Coalescence Parameter from Batch-Settling Experiments, Chem. Engng. Journal. ISSN 1385-8947, Vol. 85 (2002), p. 369-378.
- HIGHAM, N., J. (2002) – “Accuracy and Stability of Numerical Algorithms”, 2nd ed., Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2002. ISBN 0-89871-521-0.

- HODGSON, T.D.; WOODS, D.R. (1969) – Effect of Surfactants on the Coalescence of a Drop at an Interface- J. Colloid Interface Sci. Chem. Vol. 30, nº 4 (1969), p. 429.
- HOSSAIN, K.T.; SARKAR, S.; MUNFORD, C.J.; PHILIPS, C.R. (1983) – Hydrodynamics of Mixer-Settlers. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. Vol. 22 (1983), p. 553-563.
- HSIA, M. A.; TAVLARIDES, L.L. (1980) – A simulation model for homogeneous dispersions in stirred tanks. Chem. Engng. Journal. ISSN 1385-8947, Vol. 20 (1980), p. 225-236.
- IHAKA, R.; GENTLEMAN, A. (1996) - Language for Data Analysis and Graphics. Journal of Computational Graphics and Statistics, Vol. 5, nº 3 (1996), p. 299-314. [<http://www.r-project.org>]. Acedido em 2005-03-14.
- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1985) – Prediction of Steady State Dispersion Height from Batch Settling Data. AIChE Journal. ISSN 0001-1541, Vol. 31, nº 5 (1985), p. 711-720.
- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1988) – Dynamic Response of Gravity Settlers to Changes in Dispersion Throughput. AIChE Journal, ISSN 0001-1541, Vol. 34, nº 2 (1988), p. 335-340.
- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1991a) – Collision of Oscillating Liquid Drops. Chem Eng Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 46, nº 7 (1991), p. 1807-1814.
- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1991b) – Effect of Approach Velocity on Binary and Interfacial Coalescence. Trans. IChem Eng. ISSN 0263-8762, Vol. 69A (1991), p. 271-281.
- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1993) - The Continuous Separation of Liquid-Liquid Dispersions. Chem Eng Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 48, nº 2 (1993), p. 239-254.

- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1994) - Effect of Interfacial Mobility on Thin-Film Drainage. J.Colloid Interf. Sci. Vol. 164, nº 2 (1994), p. 296-308.
- JEELANI, S.A.K.; HARTLAND, S. (1998) - Effect of Surface Mobility on Collision of Spherical Drops. J.Colloid Interf. Sci. Vol. 206 (1998), p. 83-93.
- JEELANI, S.A.K.; PANOUSSOPOULOS, K.; HARTLAND, S. (1999) - Effect of Turbulence of Separation of Liquid-Liquid Dispersions in Batch Settlers of Different Geometries. Ind. Eng. Chem. Res. ISSN 0888-5885, Vol. 38 (1999), p. 493-501.
- JEFFREYS, G.V.; HAWKSLEY, J.L. (1965) – Coalescence of Liquid Droplets in Two-Component-Two-Phase Systems: Unit .1.Effect of Physical Properties on the Rate of the Coalescence. AIChE Journal. ISSN 0001-1541, Vol. 11, nº 3 (1965), p. 413-417.
- JEFFREYS, G.V.; DAVIES, G.A. (1970) – “Recent Advances in Liquid Extraction”. Hanson, C.(Eds) Pergamon Press, Oxford, cp 4., 1970.
- JEFFREYS, G.V.; DAVIES, G.A.; PITT, K. (1970) – Rate of Coalescence of the Dispersed Phase in a Laboratory Mixer Settler, Unit .2. AIChE Journal. ISSN 0001-1541, Vol. 16, nº5 (1970), p. 823-831.
- KUMAR, S.; RAMKRISHNA, D. (1996) – On the Solution of Population Balance Equations by Discretization - I.A Fixed Pivot Technique, Chem. Eng. Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 51, nº 8 (1996), p. 1311-1332.
- KOSTOGLU, M.; DOVAS, S.; KARABELAS, A.J. (1997) – On the Steady-State Size Distribution of Dispersions in Breakage Processes, Chem. Eng. Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 52 (1997), p.1285-1299.
- LANG, S.B.; WILKE, C.R. (1971) – Int. Eng. Chem. Fumd. Vol. 10, nº 3 (1971). Cit. por Rommel, Meon e Blass (1992).

- MISEK, T. (1986) – “Components of the Coalescence Process in Dense Dispersions”, Proceedings of ISEC’86, edited by DE CHEMA, 3, 71-79, 1986.
- MCAVOY, R.M.; KINTNER, R.C. (1965) – Approach of Two Identical Rigid Spheres in a Liquid Field. J. Colloid Sci. Vol. 20 (1965), p. 325-355.
- PADILLA, R.; RUIZ, M.C.; TRUJILLO, W. (1996) - Separation of liquid-liquid dispersions in a deep-layer gravity settler: Part I. Experimental study of the separation process. Hydrometallurgy. ISSN 0304-386X, Vol. 42 (1996), p. 267-279.
- PERTLER, M.; HALBERL, M.; ROMMEL, W.; BLASS, E. (1995) - Mass Transfer Across Liquid-Phase Boundaries. Chem. Engng. and Proc. Vol. 34 (1995), p. 269-277.
- PINA, H. – “Métodos Numéricos”. McGraw-Hill, Portugal, 1995. ISBN 972-8298-04-08.
- PINTO, G.A.; BAPTISTA, M.; GUEDES, A.; GUIMARÃES, M.; MAUDEIRA, C.; FIUZA, A.M.; CRUZ-PINTO, J.J. (2001) – “Model Validation for Mixer-Settler Units”. Australia: 6th World Congress of Chemical Engineering, Melbourne, 2001.
- PINTO, G.A.; GUIMARÃES, M.; MADUREIRA, C.M.N.; REGUEIRAS, P.F.; CRUZ-PINTO, J.J. (2001) – “A New Model and Algorithm for the Mixer-Settler Unit”. Chempor’2001, Aveiro, Portugal, 2001.
- PINTO, Gilberto A. (2004) – Optimização Multi-critério da Extracção Líquido-Líquido em Misturadores-Decantadores. Porto: Universidade do Porto, 2004. Dissertação de Doutoramento.
- REGUEIRAS, P. F. R.; GOMES, M.L; RIBEIRO, L.M; GUIMARÃES, M. M. L.; CRUZ-PINTO, J. J. C. (1998) – “Efficient Computer Simulation of The Dynamics of An Agitated Liquid-Liquid Extraction Column”. Proceedings of CHEMPOR’98, 7th International Chemical Engineering Conference, 1998. Vol 2, p. 765.

- REIS, E.; MELO, P; ANDRADE, R; CALAPEZ, T. (2001) – “Estatística Aplicada”. 4ª ed. Lisboa: Edições Sílabo. Vol. 2. ISBN 972-618-256-5.
- RIBEIRO, Lígia M. S. (1994) – Simulação dinâmica de sistemas liquido-liquido. Um novo Algoritmo com Potencialidades de Aplicação em Controlo. Braga: Universidade do Minho, 1994. Dissertação de Doutoramento.
- RIBEIRO, L. M.; REGUEIRAS, P. F. R.; GUIMARÃES, M. M. L.; CRUZ-PINTO, J. J. C. (1995a) – The Dynamic Behavior of Liquid-Liquid Agitated Dispersions.I.– The Hydrodynamics. Computers and Chem Engng. ISSN 0098-1354, Vol. 19, nº 3 (1995), p. 333-343.
- RIBEIRO, L. M.; REGUEIRAS, P.F.R; GUIMARÃES, M.M.L.; CRUZ-PINTO, J. J. C. (1995b) – Numerical Simulation of Liquid-Liquid Agitated Dispersions on the VAX 6520/VP. Computing Systems in Engng. ISSN 0956-0521, Vol 6, nº 4, 5 (1995), p. 465-469.
- RIBEIRO, L. M.; REGUEIRAS, P. F. R.; GUIMARÃES, M. M. L.; CRUZ-PINTO, J. J. C. (1996) – The Dynamic Behavior of Liquid-Liquid Agitated Dispersions. II – Coupled The Hydrodynamics and Mass Transfer. Computers and Chem. Engng. ISSN 0098-1354, Vol. 21, nº 5 (1996), p. 543-558.
- RIBEIRO, Margarida M. M. (2002) – Medição e Interpretação do Comportamento Hidrodinâmico de Dispersões Liquido-Liquido em Vaso Agitado em Regime Contínuo e Descontínuo. Aveiro: Universidade de Aveiro, 2002. Dissertação de Doutoramento.
- RICE, J. R. (1987) – “Numerical Methods, Software, and Analysis ”, 3ªed., Singapore: McGraw-Hill Book Co, 1987. ISBN 0-07-052208-1.
- ROMMEL, W., MEON, W., BLASS, E. (1992) – Hydrodynamic Modeling of Droplet Coalescence at Liquid-Liquid Interfaces. Separation Science and Technology. Vol. 27, nº 2 (1992), p. 129-159.

- ROSS, S.L. (1971) – Measurements and Models of Dispersed Phase Mixing Process. University of Michigan, 1971. Ph.D. Thesis.
- RUIZ, M. C.(1985) – Mathematical Modeling of a Gravity Settler, University of Utah, 1985. Ph.D. Thesis.
- RUIZ, M.C.; PADILLA, R. (1996) – Separation of liquid-liquid dispersions in a deep-layer gravity settler: Part II, Mathematical modeling of the settler. Hydrometallurgy. ISSN 0304-386X, Vol. 42 (1996), p. 281-291.
- RUIZ, M.C; LERMANDA, P.; PADILLA, R. (2002) – Drop Size Distribution in a Batch Mixer under Breakage Conditions. Hydrometallurgy. ISSN 0304-386X, Vol. 63 (2002), p.65-74.
- RUIZ, M.C; PADILLA, R. (2004) – Analysis of Breakage functions for liquid-liquid dispersions. Hydrometallurgy. ISSN 0304-386X, Vol. 72 (2004), p. 245-258.
- SALEM, A., B; SHEIRAH, M., A. (1990) – Dynamic Behavior of Mixer-Settlers. The Canadian Journal of Chem. Engng. ISSN 0008-4034, Vol. 68 (1990), p. 867-875.
- SASTRY, K., V., S.; GASCHIGNARD, P. (1981) - Discretization Procedure for the Coalescence Equation of Particulate Processes. Ind. Eng. Chem. Fundam. ISSN 0196-4313, Vol. 20 (1981), p. 355-361.
- SCHILLING, R.,J.; HARRIS, S.,L. (2000) – “Applied Numerical Methods for Engineers”. Brooks/Cole, 2000. ISBN 0-534-37014-4.
- SHAH, B.H.; RAMKRISHNA, D. (1973) – Population Balance Model for Mass Transfer in Lean Liquid-Liquid Dispersions. Chem. Engng. Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 28 (1973), p. 389-402.
- SHEIRAH, M.A. (1987) – “Dynamic System Simulation Package DSSP”, Universidade do Qatar, Doha, Qatar, Versão 1.0, 1987.

- SHEN, H.H.; SHEN, Z.J. (1986) – “Study of Coalescence and Settler Design in Mixer-Settler”, Proceedings of ISEC’86, edited by DECHEMA. Vol. 3 (1986), p. 431-436.
- SILVA, Rui .P.M. (2005) – Estudo dinâmico de um decantador de fluxo horizontal – respostas a perturbação na velocidade de agitação no misturador. Porto: ISEP, 2005. Projecto de licenciatura em Engenharia Química
- SLATER, M.J.; RITCEY, G.M.; PILGRIM, R.F.(1974) – “Aspects of Copper Extraction in Mixer-Settlers”. Proceedings of ISEC’74, edited by Soc of Chem. Ind. (1974) p. 107-140.
- SOLVEX (1975) – “A Computer Program for Simulation of Solvent Extraction Processes, DP-1391”, Setembro, 1975. Disponível em <http://www.nea.fr/abs/html/nesc0662.html>. Consultado em 2005-07-22
- SOVOVÁ, H. (1981) – Breakage and Coalescence of Drops in a Batch Stirred Vessel – II Comparison of Model and Experiments . Chem. Engng. Sci. ISSN 0009-2509, Vol. 36 (1981), p. 1567.
- TSOURIS, C.; TAVLARIDES, L.L. (1994) – Breakage and Coalescence of Drops in Turbulent Dispersions. AIChE Journal. ISSN 0001-1541, Vol. 40 (1994), p. 395-406.
- VALENTAS, K.J.; ADMUNSON, N.R. (1966) – Breakage and Coalescence in dispersed phase systems. Ind & Eng. Chem. Fundam. Vol. 5 (1966), p. 533-561.
- VIJAYAN, S.; PONTER, A.B. (1974) – Coalescence in a Laboratory Continuous Mixer-settler Unit: Contributions of Drop/Drop and Drop/Interface Coalescences Rates on the Separation Process. The Canadian Journal of Chem. Engng. ISSN 0008-4034, Vol. 54 (1974), p. 269-278.
- WOODS, D.R.; BURRIL, K.A. (1972) – The Stability of Emulsions. J. Electroanal. Chem. ISSN 0022-0728, Vol. 37 (1972), p. 191-213.

