

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO**  
**CENTRO UNIVERSITÁRIO NORTE DO ESPÍRITO SANTO**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENERGIA**

**LUCAS HENRIQUE PAGOTO DEOCLECIO**

**MODELAGEM DA ZONA DE CREMAGEM DE UMA MISTURA ÓLEO/ÁGUA VIA  
CFD**

**SÃO MATEUS – ES**

**2018**

**LUCAS HENRIQUE PAGOTO DEOCLECIO**

**MODELAGEM DA ZONA DE CREMAGEM DE UMA MISTURA ÓLEO/ÁGUA VIA  
CFD**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Energia da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito para obtenção do grau de mestre em energia.

Orientador: Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Ana Paula Meneguelo

Co-orientador: Prof. Dr. Daniel da Cunha Ribeiro

**SÃO MATEUS – ES**

**2018**

Dados Internacionais de Catalogação na publicação (CIP)  
(Divisão de Biblioteca Setorial do CEUNES - BC, ES, Brasil)

---

D418m Deoclecio, Lucas Henrique Pagoto, 1992-  
Modelagem da zona de cremagem de uma mistura óleo/água  
via CFD / Lucas Henrique Pagoto Deoclecio. – 2018.  
130 f. : il.

Orientador: Ana Paula Meneguelo.

Coorientador: Daniel da Cunha Ribeiro.

Dissertação (Mestrado em Energia) – Universidade Federal  
do Espírito Santo, Centro Universitário Norte do Espírito Santo.

1. Fluidodinâmica computacional. 2. Emulsão O/A. I.  
Meneguelo, Ana Paula. II. Ribeiro, Daniel da Cunha. III.  
Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Universitário  
Norte do Espírito Santo. IV. Título.

CDU: 620.9

---

Elaborado por Filipe Briguiet Pereira - CRB-6 ES-000863/O

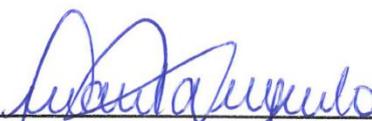
LUCAS HENRIQUE PAGOTO DEOCLECIO

**MODELAGEM DA ZONA DE CREMAGEM DE UMA MISTURA  
ÁGUA/ÓLEO VIA CFD**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Energia da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Energia.

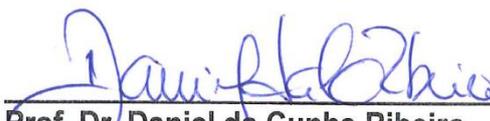
Aprovada em 23 de agosto de 2018.

**COMISSÃO EXAMINADORA**



---

**Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup>. Ana Paula Meneguelo**  
Universidade Federal do Espírito Santo  
Orientadora



---

**Prof. Dr. Daniel da Cunha Ribeiro**  
Universidade Federal do Espírito Santo  
Coorientador



---

**Prof. Dr. Marcelo Silveira Bachelos**  
Universidade Federal do Espírito Santo



---

**Dr<sup>a</sup>. Karolline Ropelato**  
Engineering Simulation and Scientific  
Software

## **AGRADECIMENTO**

Agradeço primeiramente a Deus pelas suas incontáveis bênçãos. Depois, a todos os meus familiares e amigos que me ajudaram e apoiaram durante a caminhada. Dedico um agradecimento especial, a minha esposa Letícia Louback Lara Pagoto pelo incentivo, amor e resiliência, importantes nos momentos difíceis.

Aos professores e orientadores Prof. Dr. Ana Paula Meneguelo e Dr. Daniel da Cunha Ribeiro pelos ensinamentos e experiências compartilhadas durante o trabalho. Também agradeço aos profissionais da Coordenação de TI pelo apoio na utilização do cluster.

Aos membros da banca examinadora Prof. Dr. Marcelo Silveira Bachelos e Dr<sup>a</sup>. Karolline Ropelato, por terem aceitado o convite de participar da banca.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Energia (PGEN) da UFES, por todo o conhecimento compartilhado.

Tudo tem o seu tempo determinado, e há  
tempo para todo o propósito debaixo do céu.

Eclesiastes 3:1

## RESUMO

Os separadores gravitacionais de misturas dispersas de dois líquidos estão presentes em várias áreas da indústria. Contudo, a previsão da dinâmica da separação desses equipamentos é complexa, visto que envolve os mecanismos concomitantes e de influência mútua (por meio da distribuição do tamanho de gotas (DTG)) de cremagem (ou sedimentação) e coalescência. Logo, é importante conhecer os fenômenos e os modelos disponíveis para a sua representação antes da implementação do modelo. O objetivo desta dissertação é modelar por meio da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) a zona de cremagem laminar de uma separação gravitacional em batelada no regime de Stokes. Para tal, os resultados numéricos (com auxílio do *software* Ansys Fluent<sup>®</sup> 15.0 e 18.2) foram comparados com os resultados experimentais de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). Para modelar a influência da fração volumétrica da fase dispersa na taxa de cremagem, o modelo de arrasto de Schiller e Naumann (1935) foi empregado com o modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954). A DTG foi discretizada com o método de integração numérica de Gauss-Legendre e a previsão do tamanho das gotas nascidas do processo de coalescência foi estimada com o modelo de Wang e Davis (1996). Tanto a representação da DTG quanto os modelos de arrasto se mostraram adequados para modelar o processo de separação, contudo, a determinação dos limites da zona de cremagem se mostrou fator relevante, especialmente em relação da determinação da interface de coalescência, que parece ser função do fator de empacotamento das gotas. Os modelos de coalescência avaliados foram o de eficiência de coalescência constante, velocidade de aproximação crítica e tempo de drenagem do filme de uma gota deformável com interface parcialmente móvel. Os três modelos apresentaram resultados similares no regime de escoamento modelado, no entanto, o modelo de drenagem do filme foi empregado com o seu coeficiente padrão e não precisou ser calibrado, isto porque esse modelo é mais completo, pois além da velocidade relativa entre as gotas leva em conta a viscosidade das fases, a tensão superficial e o diâmetro das gotas. Os modelos de coalescência foram calibrados para uma condição experimental e depois empregados com o mesmo parâmetro de ajuste para os outros experimentos com diferentes DTGs e fração volumétrica, sugerindo os parâmetros de ajuste dos modelos são funções das propriedades do líquidos apenas. O erro máximo médio entre as posições das interfaces de cremagem e coalescência experimentais e numéricas foi de 5,03%. Além disso, o perfil de fração volumétrica das fases também foi estimado com razoável precisão modelos numéricas.

**Palavras-chave:** Coalescência, Cremagem, Arrasto, CFD, Separação Gravitacional, EBP.

## ABSTRACT

Gravitational separators of dispersed mixtures of two liquids are present in many industry areas. However, the separation dynamics prediction of these equipment is complex, since it involves the concomitant and of mutual influence (by means of the droplet size distribution (DSD)) mechanisms of creaming (or sedimentation) and coalescence. Therefore, it is important to know the phenomena and the models available for their representation before the model implementation. The objective of this dissertation is to model, through Computational Fluid Dynamics (CFD), the laminar creaming zone of a batch gravitational separation in the Stokes regime. For this, the numerical results (using Ansys Fluent® 15.0 and 18.2) were compared with the experimental results of Jeelani, Hosig and Windhab (2005). To model the influence of the dispersed phase volume fraction on the creaming rate, the Schiller and Naumann drag model (1935) was used with the Richardson and Zaki (1954) drag modifier. The initial DSD was discretized with the Gauss-Legendre Quadrature and the new droplets size born from the coalescence process was estimated using the Wang and Davis (1996) model. Both the DSD representation and the drag models were suitable to model the separation process; however, the determination of the creaming zone limits was shown to be a relevant factor, especially in relation to the determination of the coalescence interface, which seems to be a function of the droplets packaging factor. The coalescence models evaluated were constant coalescing efficiency, critical approach velocity and film drainage time of a deformable drop with partially mobile interface. The three models presented similar results in the modeled flow regime; however, the film drainage model was used with its standard coefficient and did not need to be calibrated. This is because this model is more complete because, besides the relative velocity between the droplets it takes into account the phases viscosities and the surface tension, and the droplets diameter. The coalescence models were calibrated for an experimental condition and then employed with the same fitting parameter for other experiments with different DSD and volume fraction, suggesting the models fitting parameters are function of the liquids properties only. The maximum error between the experimental and numerical creaming and coalescence positions was 5.03%. In addition, the phases volume fraction profile was also estimated with reasonable accuracy by the numerical models.

**Keywords:** Coalescence, Creation, Drag, CFD, Gravitational Separation, EBP.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Linhas de corrente em uma gota de glicerina sedimentando em óleo de rícino. ....	25
Figura 2 – Regime de forma de gotas e bolhas em sedimentação livre em líquidos.....	26
Figura 3 - Coeficiente de arrasto de uma esfera em função do número de Reynolds. ....	29
Figura 4 – Valores experimentais e do modelo de Ruches e Issa (2000) de <i>modRI</i> para dispersões de líquidos.....	34
Figura 5 – Sedimentação experimental em batelada (esquerda) e respectiva curva de decaimento (direita) com notações de alturas.....	36
Figura 6 – (a) Curva de decaimento em batelada sigmoidal com o tempo. (b) Curva de decaimento em batelada exponencial com o tempo. ....	36
Figura 7 – Deformação de uma gota e da superfície de coalescência e formação e drenagem do filme de fase contínua.....	38
Figura 8 – Vídeo imagens da separação de glicerol (fase dispersa) em biodiesel (fase contínua) com diferentes concentrações da fase dispersa, $\varphi d$ . ....	39
Figura 9 – Resultados de um teste de garrafa com emulsão de água em óleo com 30% de água. Os pontos são dados experimentais e as linhas correspondem ao modelo dos autores.....	40
Figura 10 –Representação da DTG pelo método discreto. ....	45
Figura 11 - Aproximação, deformação e drenagem do filme de fase contínua com interface imóvel. ....	50
Figura 12 - Aproximação, deformação e drenagem do filme de fase contínua com interface parcialmente móvel.....	53
Figura 13 - Posição das interfaces com diferentes concentrações da fase dispersa determinados experimentalmente e pelo modelo de Grimes (2012b). ....	61
Figura 14 – Distribuição do tamanho de gotas de óleo inicial. ....	68
Figura 15 – Exemplificação da determinação dos diâmetros de referência das classes extras.....	77
Figura 16 – Geometria da célula de separação em 3D (a) e 1D (b) na malha com elementos de 6 mm.....	78
Figura 17 – Vetores resultantes do campo de velocidade na malha de 6 mm na vista lateral (a) e vista isométrica (b) da célula de separação em 3D.....	78
Figura 18 – Diagrama com a relação das equações de conservação com os modelos de arrasto e coalescência empregados na modelagem. ....	81

Figura 19 – Taxa de cremagem das interfaces de 90 (a), 80 (b) e 70% (c) (v/v) de concentração de fase contínua parametrizadas com diferentes malhas com elementos com tamanhos de 4, 6, 8 e 10 mm. ....	83
Figura 20 – Perfil do modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954) com $n$ igual a 3 aplicado até a interface de coalescência com 75% de fração volumétrica de fase dispersa para as malhas de 6, 8 e 10 mm. ....	85
Figura 21 - Perfil da fração volumétrica da fase contínua no tempo de 2 min experimental e numérico com as malhas de 6, 8 e 10 mm. ....	85
Figura 22 – Perfil da fração volumétrica da fase contínua no tempo de 60s para o Experimento A e sem o emprego das UDFs na malha de 6 mm com 3, 4, 6 e 8 faixas de tamanhos para representar a DTG inicial. ....	89
Figura 23 – DTG inicial e estimativa no ponto de inflexão para os Experimentos A (a), B (b) e C (c). ....	91
Figura 24 – Perfil da fração volumétrica da fase com o emprego das UDFs com 4 e 6 classes de tamanhos iniciais (I) e 2, 3 e 4 tamanhos extras (E). (a) Experimento A com o tempo de 120s e (b) Experimento B com o tempo de 100s. ....	92
Figura 25 – DTGs experimentais e discretizadas dos Experimentos A, B e C com 6 classes de tamanho. ....	95
Figura 26 – Curvas de decaimento para o Experimento A com o modelo de eficiência de coalescência constante para os valores de 3,0, 5,0 e 7,0 % e do modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). ....	96
Figura 27 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e eficiência de coalescência constante para os valores de 3,0, 5,0 e 7,0 % para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento A. ....	97
Figura 28 - Curva de decaimento para o Experimento B com o modelo de eficiência de coalescência constante para o valor de 7,0 % ....	98
Figura 29 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e eficiência de coalescência constante para o valor de 7,0 % para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento B. ....	99
Figura 30 - Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de eficiência de coalescência constante para os valores de 0,7 e 3,0% ....	100
Figura 31 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de eficiência de coalescência constante 7,0% e o modificador de arrasto aplicado até 65% de concentração da fase dispersa. ....	102

Figura 32 - Curvas de decaimento para o Experimento A com o modelo de velocidade de aproximação crítica para as velocidades de 1,0, 0,05 e 0,01 mm/s. ....	105
Figura 33 - Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e velocidade de aproximação crítica para as velocidades de 1,0, 0,05 e 0,01 mm/s para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento A.....	105
Figura 34 - Curvas de decaimento para o Experimento B com o modelo de velocidade de aproximação crítica para a velocidade de 0,05 mm/s.....	106
Figura 35 - Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e velocidade de aproximação crítica para a velocidade de 0,05 mm/s para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento B.....	106
Figura 36 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de velocidade de aproximação crítica com valor de 0,003mm/s.....	107
Figura 37 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de velocidade de aproximação crítica iguala 0,05 mm/s e o modificador de arrasto aplicado até 65% de concentração da fase dispersa.....	108
Figura 38 – Curva de decaimento para o Experimento A com o modelo de tempo de drenagem do filme com C igual 1. ....	110
Figura 39 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e tempo de drenagem do filme com C igual 1 para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento A.....	110
Figura 40 – Curva de decaimento para o Experimento B com o modelo de tempo de drenagem do filme com C igual 1. ....	111
Figura 41 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e tempo de drenagem do filme com C igual 1 para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento B.....	111
Figura 42 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de tempo de drenagem com C igual a 10 e interface de coalescência igual a 55% de fase dispersa.....	112
Figura 43 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de tempo de drenagem do filme com C igual a 1 e o modificador de arrasto aplicado até 65% de concentração da fase dispersa. ....	113
Figura 44 – Curvas de decaimento experimental do Experimento A dos modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica, tempo de drenagem do filme e de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). ....	115

Figura 45 – Curvas de decaimento experimental do Experimento B dos modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica, tempo de drenagem do filme e de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). .....	115
Figura 46 – Curvas de decaimento experimental do Experimento C dos modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica, tempo de drenagem do filme e de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). .....	116
Figura 47 – Perfil de fração volumétrica da fase contínua para o Experimento A no tempo de 2 min experimental e dos modelos coalescência calibrados de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica e tempo de drenagem do filme. ....	117

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Coeficiente $n$ de Zaki e Richardson em função do Número de Reynolds.....	32
Tabela 2 – Modelos Multifásicos, de Turbulência, Balanço Populacional, Coalescência e Arrasto e forma de representar a DTG por autor.....	66
Tabela 3 – Valores experimentais das condições iniciais.....	68
Tabela 4 – Número de faixas de tamanhos de gota verificadas.....	74
Tabela 5 – Coeficientes Gauss-Legendre.....	75
Tabela 6 – Malhas e Passos de Tempos empregados para verificação da independência destes nos resultados das simulações.....	79
Tabela 7 - Modelos empregados nas simulações.....	80
Tabela 8 – Tempo de processamento para a simulação $n$ igual a 3 e $\lambda$ igual a 1,5 % até o tempo de 2 min com as malhas de 10, 8 e 6 mm.....	87
Tabela 9 – Discretização da DTG do Experimento A com 3, 4, 6 e 8 classes de tamanho.....	88
Tabela 10 – Estimativa do diâmetro médio de Sauter e porcentagem da fase dispersa ainda presente na dispersão no ponto de inflexão.....	90
Tabela 11 – Diâmetros de referência para o Experimento A e B com 2, 3 e 4 classes de tamanhos de partículas extras.....	90
Tabela 12 – Integral da DTG original segundo os dados da Figura 14 e o integral pela Quadratura de Gauss-Legendre com 4 classes de tamanho para os Experimentos A, B e C...	94
Tabela 13 - Discretização das DTGs iniciais com 6 classes de tamanho com diâmetros de referência ( $dk$ ) e fração volumétrica ( $\varphi k$ ) de cada classe.....	94
Tabela 14 - Diâmetros de referência para os Experimentos A, B e C com 4 classes de tamanhos de partículas extras.....	94
Tabela 15 – Erro médio e valor eficaz dos erros com o modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) para os Experimentos A, B e C.....	103
Tabela 16 – Erro médio e valor eficaz dos erros com o modelo de eficiência de coalescência constante igual a 7,0 % para os Experimentos A e B.....	103
Tabela 17 - Erro médio e quadrado das diferenças com o modelo de velocidade de aproximação igual a 0,05 mm/s para os Experimentos A e B.....	108
Tabela 18 – Erro médio e quadrado das diferenças com o modelo do tempo de drenagem do filme com $C$ igual a 1 para os Experimentos A e B.....	114

## LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

### Letras Latinas

$a$	Raio do Disco de Fase Contínua Formado na Coalescência
$a_1, a_2, a_3$	Constantes do Modelo de Arrasto de Morsi e Alexander
$A_{cir}$	Área de uma Circunferência
$A_k$	Pesos do método de Gauss-Legendre.
$C_D$	Coefficiente de Arrasto
$C_{HAM}$	Constante de Hamaker
$C_{MA}$	Coefficiente de Massa Aparente
$d$	Diâmetro de uma Gota
$e$	Espessura
$EO$	Número de Eötvös
$f$	Função Densidade do Número de Partículas
$F$	Força de Interação entre Duas Gotas ou entre uma Gota e uma Superfície
$F_{arrasto}$	Força de Arrasto
$F_{empuxo}$	Força de Empuxo
$F_{pk}$	Troca de Momento Interfacial
$g$	Aceleração da Gravidade
$h$	Frequência de Coalescência
$K_{pk}$	Coefficiente de Troca de Momento Interfacial
$K$	Constante
$\dot{m}$	Fluxo de Massa
$M$	Morte de Partículas
$Mo$	Número de Morton
$mod$	Modificador de Arrasto
$n$	Expoente do modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954)
$N$	Nascimento de Partículas
$P$	Pressão
$\mathbf{r}$	Coordenada Externa do Vetor de Estado de uma Partícula
$R$	Raio de uma Gota
$Re$	Número de Reynolds
$S$	Termo Fonte nas Equações de Balanço Populacional
$U$	Velocidade
$\mathbf{U}$	Vetor Velocidade
$U_{HS}$	Velocidade Terminal de Hadamard e Rybczynski
$U_{ST}$	Velocidade Terminal de Stokes
$t$	Tempo
$\forall$	Volume
$\mathbf{x}$	Coordenada Interna do Vetor de Estado de uma Partícula

### Letras Gregas

$\beta$	<i>Kernel</i> , ou Frequência de Coalescência
$\delta$	Função Delta Dirac
$\varepsilon$	Dissipação de Energia
$\lambda$	Eficiência de Coalescência

$\mu$	Viscosidade Absoluta
$\mu_k$	Momentos da Função Densidade do Número de Partículas
$\xi$	Fração a massa que cada gota pivô recebe na discretização
$\rho$	Massa Específica
$\sigma$	Tensão Superficial
$\tau_k$	Tensor Tensão de Cisalhamento da Fase $k$
$\tau_i$	Tempo de Coalescência de uma Gota na interface com sua fase Homogenia
$\varphi$	Fração Volumétrica
$\psi$	Taxa de Coalescência da Fase Dispersa na Interface com sua fase Homogenia

### Subscritos

1	Gota 1
2	Gota 2
$c$	Fase Contínua
$car$	Característico
$cri$	Crítico
$C$	Coalescência
$d$	Fase Dispersa
$eq$	Equivalente
$f$	Final
$i$	Inicial
$I$	Interface
$k$	Fase Equacionada
KH	Kumar e Hartland
$m$	Mistura
$max$	Máximo
$o$	Inicial
$p$	Fase não equacionada
$Q$	Quebra
$r$	Relativo
RI	Rusche e Issa
RZ	Richardson e Zaki

### Siglas

CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional (do inglês <i>Computational Fluid Dynamics</i> )
DPM	<i>Discrete Phase Modeling</i>
DTG	Distribuição do Tamanho de Gotas
E-E	Modelo Multifásico Euleriano-Euleriano
E-L	Modelo Multifásico Euleriano-Lagrangiano
EPB	Equações de Balanço Populacional
FWKO	<i>Free Water KnockOut</i>
MOM	<i>Methods of Moments</i>
PD	Algoritmo <i>Product-Difference</i>
QMOM	<i>Quadrature Method of Moments</i>
DQMOM	<i>Direct Quadrature Method of Moments</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i>

## SUMÁRIO

AGRADECIMENTO .....	iii
RESUMO .....	v
ABSTRACT .....	vi
LISTA DE FIGURAS .....	vii
LISTA DE TABELAS .....	xi
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS .....	xii
SUMÁRIO.....	xiv
1. INTRODUÇÃO .....	16
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....	19
2.1. MODELOS DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICOS .....	19
2.2. FORÇA DE ARRASTO EM MISTURAS DISPERSAS LÍQUIDO-LÍQUIDO .....	22
2.3. MODELAGEM DO ARRASTO EM CFD .....	28
2.4. SEPARAÇÃO GRAVITACIONAL EM BATELADA EXPERIMENTAL .....	34
2.5. BALANÇO POPULACIONAL .....	41
2.6. MODELAGEM DA COALESCÊNCIA .....	47
<b>2.6.1. Modelos de Frequência de Colisão.....</b>	<b>48</b>
<b>2.6.2. Modelos de Eficiência de Coalescência.....</b>	<b>48</b>
2.6.2.1. Modelo de velocidade de aproximação crítica.....	49
2.6.2.2. Modelo de tempo de drenagem do filme.....	50
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	55
3.1. MODELAGEM DE SEPARAÇÃO GRAVITACIONAL EM CFD .....	56
4. METODOLOGIA .....	67
4.1. DADOS EXPERIMENTAIS .....	67
4.2. SOFTWARES.....	69
4.3. MODELAGEM .....	69
<b>4.3.1. Modelagem do escoamento Multifásico.....</b>	<b>69</b>

4.3.2.	<b>Modelagem do Arrasto.....</b>	<b>70</b>
4.3.3.	<b>Solução das Equações de Balanço Populacional.....</b>	<b>71</b>
4.3.4.	<b>Modelagem da Coalescência .....</b>	<b>72</b>
4.3.5.	<b>Representação da DTG .....</b>	<b>74</b>
4.3.6.	<b>Geometria em CAD .....</b>	<b>77</b>
4.3.7.	<b>Malha e Passo de Tempo.....</b>	<b>79</b>
4.4.	MODELOS E EQUAÇÕES EMPREGADAS .....	79
5.	RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	82
5.1.	TESTE DE TAMANHO DO ELEMENTO DA MALHA E PASSO DE TEMPO ..	82
5.2.	DISCRETIZAÇÃO DA DTG E TESTE DO NÚMERO DE CLASSES.....	87
5.3.	CALIBRAÇÃO DOS MODELOS DE COALESCÊNCIA .....	96
5.3.1.	<b>Eficiência Constante.....</b>	<b>96</b>
5.3.2.	<b>Modificador de Arrasto e a Interface de Coalescência .....</b>	<b>100</b>
5.3.3.	<b>Velocidade de Aproximação Crítica .....</b>	<b>104</b>
5.3.4.	<b>Tempo de Drenagem do Filme .....</b>	<b>109</b>
5.3.5.	<b>Comparação Entre os Modelos de Coalescência .....</b>	<b>114</b>
6.	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS .....	119
	REFERÊNCIAS .....	121
	APÊNDICE – A .....	128

## 1. INTRODUÇÃO

O processo de separação de misturas dispersas de dois líquidos imiscíveis é de grande importância para várias aplicações industriais, como segregação de produtos, recuperação de solventes, metalurgia, processamento de petróleo e recuperação de catalisadores após reações químicas (MISRA et al., 2017; PANDA et al., 2017; YE et al., 2016). No caso da indústria petrolífera os separadores geralmente são os primeiros equipamentos encontrados pelo escoamento multifásico oriundo dos poços (LALEH; SVRCEK; MONNERY, 2011). Assim, a eficiência destes tem forte efeito sobre a capacidade dos outros equipamentos da facilidade. Com o crescimento da indústria de exploração *offshore*, cresce o interesse pelo desenvolvimento de modelos que auxiliem no projeto, adaptação e remoção de gargalo existente tanto nos separadores novos como nos existentes (OSHINOWO; QUINTERO; VILAGINES, 2015).

O projeto desses equipamentos normalmente é realizado por meio modelos semi-empíricos baseados na Lei de Stokes. Contudo, esses modelos geralmente definem apenas a razão comprimento/diâmetro do separador e não incluem informações sobre o escoamento no interior do equipamento, o que normalmente resulta no seu superdimensionamento (GHAFARKHAH et al., 2017; KHAROUA; KHEZZAR; SAADAWI, 2013). O estudo do complexo fenômeno de separação multifásico também pode ser realizado em plantas pilotos. No entanto, apesar desses estudos gerarem resultados precisos se realizados de maneira cuidadosa, eles normalmente são custosos (MCCLENEY et al., 2017). Uma alternativa a estes métodos é o estudo da dinâmica da separação com testes de garrafa a partir de uma amostra retirada do separador contínuo (JEELANI; HARTLAND, 1987; OSHINOWO; QUINTERO; VILAGINES, 2016). No entanto, a previsão do comportamento do separador contínuo a partir dos dados de teste de garrafa requer uma interpretação sofisticada, além de não prever o efeito dos dispositivos internos no interior do separador.

Segundo Ye e outros (2016) a Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC, ou do inglês *Computational Fluid Dynamics*, CFD) é uma ferramenta que pode ser empregada para compreender o escoamento no interior dos separadores e otimizar o seu desempenho. De acordo com Panda e outros (2017), modelos validados em CFD podem ser empregados para projetar equipamentos em escala industrial, permitindo avaliar parâmetros como, influência da vazão de cada fluido, diâmetro das gotas e posição e geometria de internos. Ademais,

Abdulkadir e Hernandez-Perez (2010) citam as vantagens do baixo custo quando comparado às plantas piloto, simulação de condições de escoamento que não seriam possíveis em experimentos, redução do tempo para concepção de protótipos, redução do consumo energético e diminuição dos impactos ambientais.

Contudo, de acordo com McCleney e outros (2017) cuidados devem tomados durante a implementação e análise dos resultados em CFD, uma vez que é comum encontrar estudos na literatura de pouca concordância entre simulações e dados experimentais laboratoriais ou de campo. Isso ocorre, pois, o fenômeno de separação gravitacional é complexo e muitos submodelos precisam ser considerados (PANDA et al., 2017) visto que pode envolver a sedimentação de partículas fluidas que interagem umas com as outras, variação da distribuição do tamanho de gotas (DTG) devido à coalescência binária e interfacial, presença de impurezas e surfactantes, propriedades das fases, turbulência e formação da zona densamente compactada (JEELANI; HARTLAND, 1985, 1987; GRIMES et al., 2012a; MISRA et al., 2017; PANJWANI et al., 2015). Pode-se acrescentar também a dificuldade de se obter informações experimentais da mistura, como por exemplo a DTG, tensão superficial, viscosidades, perfil de concentração das fases e outros. Dessa forma, determinar a influência de cada submodelo sobre o resultado final e ponderar os erros experimentais é uma tarefa difícil e, portanto, um melhor entendimento do processo de separação deve ser alcançado antes da seleção ou exclusão de modelos e metodologias.

Assim, entre os desafios de modelar a separação gravitacional estão a previsão da variação da DTG em razão da coalescência e da troca de momento entre as fases, principalmente devido ao arrasto. Devido às interações entre as gotas da fase dispersa, a taxa de cremagem destas se desvia daquela prevista pela Lei de Stokes. Isso cria a necessidade da determinação de fatores de correção do arrasto em função da fração volumétrica da fase dispersa (RUSCHE; ISSA, 2000). Ademais, uma vez que gotas com diâmetros diferentes sedimentam com velocidades diferentes (NADIV; SEMIT, 1995), a modelagem do processo de separação deve levar em conta a distribuição dos tamanhos de gotas (MISRA et al., 2017). Resultados de Kharoua, Khezzar e Saadawi (2012a, b, 2013) indicam que apesar da modelagem da separação com uma distribuição de tamanhos de gotas (DTG) monodispersa prever tendências e resultados qualitativos coerentes, esta pode resultar em discrepâncias significativas em relação aos valores de eficiência de separação.

Deste modo, a coalescência é um dos fenômenos governantes na separação gravitacional, uma vez que este controla a evolução da DTG e, por conseguinte, a taxa de

cremagem (ABDEL-AAL; AGGOUR; FAHIM, 2003; KANG et al., 2012; MISRA et al., 2017). No entanto, a maior parte dos modelos de coalescência presentes na literatura foram propostos para escoamentos turbulentos e não devido ao empuxo (LIAO; LUCAS, 2010), como ocorre na separação gravitacional que requer um escoamento calmo e favorável o qual não impeça a sedimentação ou cremagem das gotas (FRISING; NOÏK; DALMAZZONE, 2006). Assim, é de interesse a determinação de um modelo de coalescência induzida pela diferença de velocidade de cremagem de gotas de tamanhos diferentes. Além disso, a maioria dos modelos de coalescência contêm parâmetros de ajuste que devem ser determinados empiricamente, por meio das curvas de decaimento de um teste de garrafa por exemplo. Deste modo, surge o interesse em modelar o escoamento em um separador contínuo em CFD com o modelo numérico calibrado a partir de um simples teste de garrafa.

O objetivo desta dissertação é definir uma metodologia para a modelagem da zona de cremagem (ou sedimentação) de uma separação gravitacional em batelada no regime de Stokes (número de Reynolds das gotas menor que um) de uma dispersão de dois líquidos imiscíveis por meio da Dinâmica dos Fluidos Computacional de forma a possibilitar a utilização futura do modelo na análise e projeto de separadores industriais. Os dados experimentais de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) foram utilizados como parâmetros de entrada e dados para validação do modelo em CFD. O modelo proposto leva em conta a restrição dos movimentos das gotas por meio de um modificador de arrasto que é função da fração volumétrica da fase dispersa. Três modelos de coalescência adaptados para modelar a coalescência devido às colisões induzidas pela diferença de velocidade de cremagem de gotas de tamanhos diferentes foram avaliados e comparados. A análise quantitativa do ajuste desses modelos se deu por meio da média e do valor eficaz dos erros em relação aos dados experimentais. Com o objetivo de avaliar se os parâmetros de ajuste dos modelos de coalescência dependem apenas das propriedades dos líquidos (ex.: tensão superficial, viscosidade e massa específica) e/ou das condições iniciais da mistura (fração volumétrica e DTG), estes modelos de coalescência foram aplicados com os mesmos parâmetros em experimentos compostos pelos mesmos líquidos, mas com diferentes DTGs e fração volumétrica da fase dispersa. Sendo função apenas das propriedades dos líquidos e uma vez calibrados, por meio de um simples teste de garrafa, esses parâmetros podem então ser empregados na modelagem em CFD de um separador contínuo. Além disso, foi apresentada uma metodologia para a discretização e representação da DTG, de modo a ponderar a influência desta na dinâmica da separação gravitacional.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Devido à complexidade dos fenômenos presentes no processo de separação gravitacional de dispersões de líquidos imiscíveis, este capítulo apresenta ao leitor uma revisão dos conceitos e modelos presentes na literatura sobre a separação em si e sobre a modelagem multifásica em CFD. Dessa forma, a compreensão dos Capítulo 3, Revisão Bibliográfica, Capítulo 4, Metodologia, é facilitada.

### 2.1. MODELOS DE ESCOAMENTO MULTIFÁSICOS

Os modelos de escoamentos multifásicos podem ser Euler-Euler (E-E) ou Euler-Lagrange (E-L). A estratégia dos modelos E-L consiste em resolver o escoamento da fase contínua com as equações da continuidade e de Navier-Stokes, enquanto que cada partícula da fase dispersa é rastreada individualmente. Por outro lado, os modelos E-E focam na solução das equações de conservação de mecânica dos fluidos para ambas as fases. Os modelos E-E também se dividem nos que aplicam uma função marcadora na interface entre fases e os que consideram os fluidos como sendo interpenetrantes.

Na modelagem E-L, a posição e a velocidade de cada partícula são conhecidas a todo tempo e, portanto, a modelagem das colisões das partículas, que podem ou não resultar em coalescência, e a modelagem da troca de quantidade de movimento entre gotas, que influencia na restrição do movimento destas, pode ser feita de forma precisa. Contudo, como em uma mistura concentrada o número de partículas é muito grande, a modelagem numérica com modelos E-L se torna altamente custosa do ponto de vista computacional (GHAFKHAH et al., 2017).

Apesar dos modelos E-E que utilizam funções marcadoras de interface, como os modelos VOF (*Volume of Fluid*, ou Volume de Fluido), serem adequados para representar misturas de fluidos imiscíveis, a enorme área interfacial entre as fases em misturas dispersas torna esses métodos extremamente custosos do ponto de vista computacional. Contudo, há autores que empregam o modelo VOF combinado com modelos DPM (modelagem da fase discreta, ou do inglês, *discrete phase modeling*), que é um modelo E-L, em simulações de separadores trifásicos, como Ghaffarkhah e outros (2017) e Laleh, Svecsek e Monnery (2011),

uma vez que esses modelos são capazes de representar a interface entre as fases já separadas, onde o escoamento está estratificado; embora, não sejam adequados para modelar a região da mistura dispersa no reparador.

Em geral, a complexidade dos escoamentos multifásicos faz com que sua modelagem numérica envolva simplificações, como por exemplo, a aplicação média às equações de governo. Ademais, um grande problema inerente à modelagem de escoamentos de mistura reais encontradas na indústria é a presença de contaminantes que modificam a propriedades físicas das fases (SIMMONS et al., 2004). Uma alternativa ao modelo VOF são os modelos que empregam as equações da continuidade e de Navier-Stokes com um procedimento de média. Essa estratégia permite obter uma solução de maneira muito menos custosa do ponto de vista computacional na modelagem de misturas concentradas. A aplicação de médias às equações faz com que as informações das interfaces sejam perdidas, ou seja, a posição e a velocidade de cada partícula não são mais conhecidas, mas sim a quantidade e a velocidade média das gotas em certo elemento da malha. Assim, os modelos E-E que empregam um processo de média modelam as interações entre as partículas de forma estocástica, ou seja, estimam a probabilidade de uma colisão ocorrer e não se ela realmente ocorreu. Desta forma, quando a modelagem da separação gravitacional é feita com um modelo multifásico E-E no qual os fluidos são tratados como interpenetrantes, a colisão e o resultado da colisão de duas partículas não são representados, mas sim a frequência média de colisão e as taxas médias de coalescência e a troca de quantidade de movimento média entre as fases. No entanto, como muitas vezes a análise realizada visa obter informações sobre as características macroscópicas do escoamento, como por exemplo, como a fração volumétrica na saída do separador contínuo, essa perda de informação não inviabiliza os modelos ou reduz sua importância, principalmente quando se trata de mistura concentradas nas quais o número de partículas dispersa é elevado (FAGHRI; ZHANG, 2006; NIECKELE, 2011).

Os principais modelos de equações médias são modelos E-E conhecidos como modelo de dois-fluidos e o modelo de deslizamento. Aquele consiste na solução das equações de conservação de massa e quantidade de movimento médias para cada uma das fases, as quais são tratadas como interpenetrantes (MILIOLI; MILIOLI, 2001; NIECKALE, 2011). Em tese, o modelo de escoamento de dois fluidos é aplicável para todas as faixas de fração volumétrica da fase dispersa, incluindo quando uma das fases se encontra dispersa na outra e quando as fases se encontram separadas. No entanto, conforme o regime do escoamento muda, por exemplo, com a inversão ou separação da mistura, o fechamento das equações, devido à troca

de quantidade de movimento entre as fases e a turbulência deve mudar para corresponder ao novo regime (BEHZADI; RUSCHE; ISSA, 2007).

Para levar em conta a troca de massa e quantidade de movimento, termos fontes derivados do processo de média surgem nas equações de governo. Assim, as Equações 1 e 2, de conservação de massa e quantidade de movimento, respectivamente, segundo o modelo de dois fluidos são dadas por (FAGHRI; ZHANG, 2006; RANADE, 2002):

$$\frac{\partial(\varphi_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_k \rho_k \mathbf{U}_k) = \sum_{p=1, p \neq k}^n \dot{m}_{pk} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varphi_k \rho_k \mathbf{U}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_k \rho_k \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k) \\ = -\varphi_k \nabla P - \nabla \cdot (\varphi_k \tau_k) + \varphi_k \rho_k g + \sum_{p=1, p \neq k}^n \dot{m}_{pk} U_{k,I} + \sum_{p=1, p \neq k}^n F_{pk} \end{aligned} \quad (2)$$

Onde,  $\rho$  é a massa específica,  $\varphi$  é a fração volumétrica,  $\mathbf{U}$  é o vetor velocidade,  $\dot{m}$  é o fluxo de massa de uma fase para outra e  $P$  é o campo de pressão, o qual é compartilhado por ambas as fases. Os subscritos  $k$ ,  $p$  e  $I$  indicam a fase que está sendo equacionada, a outra fase e as propriedades da interface entre as fases. Assim, o termo  $\mathbf{U}_{k,I}$  na Equação 2 representa a velocidade relativa entre a fase  $k$  e a interface. Para dispersão de líquidos imiscíveis, o termo  $\dot{m}_{pk}$  é igual a zero em ambas as equações, pois, não há mudança de fase ou transferência de massa de uma fase para a outra (FAVERO; SILVA; LAGE, 2015; ROUDSARI et al., 2012; VILAGINES; AKHRAS, 2010). O termo  $F_{pk}$  na Equação 2 representa a troca de *momentum* interfacial entre as fases e depende do atrito, pressão e coesão na interface.  $F_{pk}$  pode ser escrito na forma:

$$F_{pk} = K_{pk} |\mathbf{U}_p - \mathbf{U}_k| \quad (3)$$

Onde,  $K_{pk}$  é o coeficiente de troca de momento entre as fases  $p$  e  $k$  e  $|\mathbf{U}_p - \mathbf{U}_k|$  é a velocidade relativa entre as fases. A determinação de  $K_{pk}$  é uma tarefa difícil, pois depende da estrutura da interface. No caso de uma dispersão em que a geometria da fase dispersa possa ser considerada com formato esférico, correlações empíricas podem ser utilizadas para se obter o coeficiente de troca de quantidade de movimento entre as fases. Além disso, esse

termo deve conter todas as forças agindo entre as fases. Em muitas aplicações, a força de arrasto é a força dominante em relação as outras forças, como de sustentação e massa aparente (GHAFKHAH et al., 2017; MISRA et al., 2017; PANJWANI et al., 2015; ROUDSARI et al., 2012; RUSCHE; ISSA, 2000). As forças devido a massa aparente são relevantes nos casos em que a massa específica da fase dispersa é muito menor do que a da fase contínua, como em um escoamento de gás disperso em um líquido. A força de sustentação é significativa quando há um gradiente de velocidade da fase contínua ao redor da gota, o que não é significativo para gotas pequenas. Considerando apenas a força de arrasto, o coeficiente  $K_{pk}$  pode ser modelado como:

$$K_{pk} = \frac{3}{4} C_D \varphi_k \varphi_p \rho_k |\mathbf{U}_p - \mathbf{U}_k| \quad (4)$$

Onde  $C_D$  é o coeficiente de arrasto baseado no número de Reynolds relativo entre as fases. No caso de misturas concentradas,  $C_D$  pode ser modificado pela presença de outras partículas outros fatores. Sua modelagem é apresentada nas Seções 2.2 e 2.3.

## 2.2. FORÇA DE ARRASTO EM MISTURAS DISPERSAS LÍQUIDO-LÍQUIDO

A taxa de sedimentação, ou velocidade de sedimentação, é função do equilíbrio entre a força gravitacional e da troca de *momentum* entre as fases através de suas interfaces. No caso da separação gravitacional, a força interfacial dominante normalmente é a força de arrasto e, portanto, sua modelagem em CFD é fundamental para representar o processo de separação em regime laminar de forma mais realista possível (LALEH; SVRCEK; MONNERY, 2011; PANDA et al., 2017; RUSCHE; ISSA, 2000).

Inicialmente, os separadores eram projetados apenas com base na velocidade de sedimentação segundo a Lei de Stokes e para gotas com diâmetros maiores do que 150  $\mu\text{m}$  (KHAROUA; KHEZZAR; SAADAWI, 2013; ZEMEL, BOWMAN, 1978). Contudo, em uma análise mais rigorosa, a Lei de Stokes se aplica à sedimentação de apenas uma única (sem interação com outras gotas ou com as paredes), lenta (*creeping flow*, ou seja, Reynolds menor do que 1) e rígida esfera (FRISING; NOÏK; DALMAZZONE, 2006). Contudo, a presença de outras gotas e a deformabilidade destas, pelo fato de serem fluidas, aumentam a complexidade da modelagem do coeficiente de arrasto em uma dispersão em relação a situação de aplicação

da Lei de Stokes. Isso se dá, primeiramente, pelo fato das gotas interagirem por meio de distorções das linhas de corrente, o que influencia e restringi o movimento uma das outras. Além disso, o grau de deformabilidade das gotas e a presença de impurezas ativas nas superfícies também modificam o coeficiente de arrasto. No entanto, apesar de não representar a força de arrasto em uma dispersão real, a lei de Stokes serve de ponto de partida para o estudo das variáveis que influenciam na velocidade de sedimentação. De fato, muitos modelos empíricos preveem a velocidade de sedimentação pelo produto do coeficiente de arrasto de Stokes e de um fator de correção que é função da concentração da fase dispersa. (KUMAR; HARTLAND, 1985; JEELANI; HARTLAND, 1987, 1998; NADIV; SEMIAT, 1995).

Iniciando a análise do processo de sedimentação com a Lei de Stokes, a força de arrasto de uma esfera rígida é dada pela Equação 5, onde  $C_D$  é o coeficiente de arrasto que é função do número de Reynolds ( $Re$ ). Para  $Re < 1$ ,  $C_D$  obedece a Lei Stokes e é igual a  $24/Re$ . O número de Reynolds para uma esfera é dado pela Equação 6, onde  $d$  é o diâmetro da esfera,  $U_r$  é a velocidade relativa entre as fases,  $\rho_c$  é a massa específica da fase contínua e  $\mu_c$  é a viscosidade da fase contínua. Na Equação 5,  $A_{cir}$  é a área de uma circunferência com diâmetro  $d$ . Quando uma esfera atinge sua velocidade terminal, a força de arrasto entra em equilíbrio com a força de empuxo, representada pela Equação 7, onde  $\rho_d$  é a massa específica da fase dispersa,  $\forall$  é o volume da gota e  $g$  é a aceleração da gravidade (RUSCHE; ISSA, 2000).

$$F_{arrasto} = C_D A_P \rho_c \frac{U_r^2}{2} \quad (5)$$

$$Re = \frac{\rho_c d U_r}{\mu_c} \quad (6)$$

$$F_{empuxo} = (\rho_d - \rho_c) \forall g \quad (7)$$

Igualando as Equações 5 e 7, obtém-se a equação para a velocidade terminal segundo a Lei de Stokes (Equação 8). Apenas igualando 5 e 7 obtém-se a 8?

$$U_{ST} = \frac{gd^2 |\rho_d - \rho_c|}{18\mu_c} \quad (8)$$

Com base na Equação 8, é possível, primeiramente, perceber que a velocidade de sedimentação varia com o quadrado do diâmetro, logo, gotas de tamanhos diferentes sedimentarão com velocidades diferentes. Como consequência, a coalescência binária é essencial para acelerar o processo de sedimentação. Segundo, quanto maior a diferença entre as massas específicas das fases, maior a velocidade de sedimentação. Terceiro, quanto menor a viscosidade da fase contínua, maior a velocidade de sedimentação. A diferença entre as massas específicas e, especialmente, a viscosidade da fase contínua são influenciadas pela temperatura, logo, promover o aquecimento da mistura tende a facilitar a separação (MANNING; THOMPSON, 1995; WARREN, 2007)

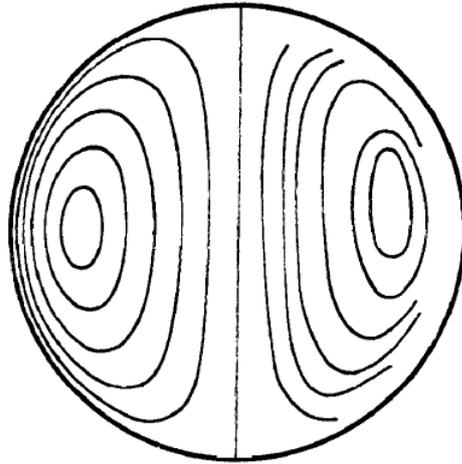
No entanto, como mencionado no início da seção, a Equação 8 não inclui todos os fenômenos presentes na sedimentação de gotas em uma mistura concentrada. Além dos fatores já mencionados, a velocidade de sedimentação de gotas também é influenciada pela recirculação no interior das gotas, mudança de forma das gotas, fluxo oposto da fase contínua, interação entre as gotas e a distribuição do tamanho de gotas (DTG). Esses fatores modificam a velocidade de sedimentação de maneira considerável (MANNING; THOMPSON, 1995; NADIV; SEMIAT, 1995) e serão discutidos a seguir com o intuito de ponderar sua significância nas simulações em CFD da separação gravitacional em regime laminar.

Primeiramente, devido à difusão de quantidade de movimento (causado pela viscosidade) na interface para o interior da gota, uma recirculação no interior desta pode ocorrer. Na Figura 1 é possível observar a exemplificação das linhas de corrente no interior de uma gota de glicerol sedimentando em óleo de rícino. A velocidade terminal de uma única gota esférica com circulação interna depende da razão entre as viscosidades das fases e pode ser obtida pela Equação 9 (HADAMARD, 1911; RYBCZYNSKI, 1911, apud SOUZA, 2015). Caso haja presença de surfactantes na interface, a concentração destes será maior na parte posterior da gota o que cria um gradiente de tensão superficial ao redor da mesma. Esse gradiente de tensão superficial resiste ao movimento da interface e aumenta o arrasto (BATCHELOR, 2002). Logo, a Equação 9 deve ser compreendida como o limite máximo de velocidade alcançado por uma gota, uma vez que apenas em condições excepcionais de pureza (livre de surfactantes) das fases é que a velocidade de sedimentação estará de acordo com a equação de Hadamard e Rybczynski (Equação 9). Na prática, em muitas aplicações, devido aos efeitos dos surfactantes, a velocidade de sedimentação de gotas e bolhas observada experimentalmente está em um valor intermediário entre as Equações de Stokes e de Hadamard e Rybczynski. Ademais, em escoamentos no regime de Stokes as gotas se

comportaram como esferas sólidas, ou seja, sem recirculação, quando o número de Eötvös ( $Eo$ ) é menor do que 4 (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978; CROWE; MICHAELIDES, 2006).

$$U_{HS} = U_{ST} \frac{\mu_c + \mu_d}{\frac{2}{3}\mu_c + \mu_d} \quad (9)$$

Figura 1 - Linhas de corrente em uma gota de glicerina sedimentando em óleo de rícino.



Fonte: Batchelor (2002, p. 237).

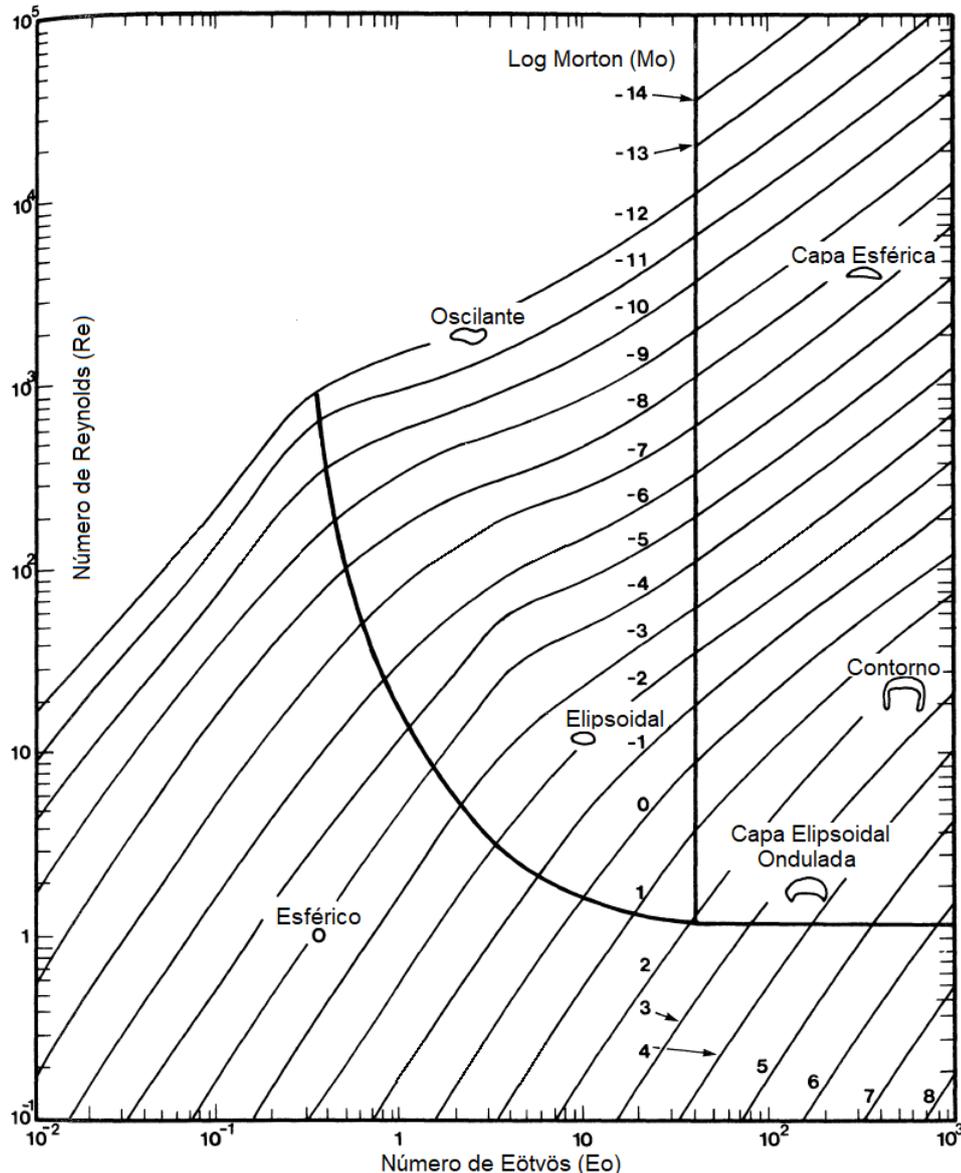
Ademais, como a força de arrasto depende da geometria, a deformação das gotas influencia de forma significativa na velocidade de sedimentação. Quanto maior o grau de deformação, mais distante da Equação 8 a velocidade terminal da gota se torna. Para minimizar a energia na superfície, a tensão superficial age de forma semelhante a uma pressão e tende a manter a gota em formato esférico de modo a reduzir a área da interface. Quanto menor o raio da gota, maior é o efeito da “pressão” causado pela tensão superficial resultante da maior curvatura da gota (BATCHELOR, 2002). Dessa forma, o formato das gotas será função do equilíbrio entre a transferência de quantidade de movimento entre as fases e a tensão superficial. O número de Eötvös é um número adimensional que relaciona a tensão superficial com a força gravitacional e é expresso pela Equação 10.

$$Eo = \frac{(\rho_d - \rho_c)gd^2}{\sigma} \quad (10)$$

O formato de bolhas e gotas em movimento em um fluido pode ser estimado com base na Figura 2 em função do número de Eötvös, do número de Morton ( $Mo$ ) (Equação 11) (que

relaciona as forças de empuxo, tensão superficial e inércia) e do número de Reynolds (CLIFT, GRACE E WEBER, 1978). Com base na Figura 2 é possível perceber que para  $Re_o < 1$  as gotas sempre têm formato esférico. Assim, segundo Crowe e Michaelides (2006) se o escoamento está no regime de Stokes, o formato das gotas será esférico, independentemente do número de Eötvös. Logo, de acordo com Clift, Grace e Weber (1978), as gotas serão esféricas caso a tensão superficial e as forças viscosas sejam muito mais significativas do que as forças de inércia. Segundo Rosa (2012), o diâmetro máximo que uma gota pode ter para que as forças inerciais durante a sedimentação não sejam capazes de deformá-la é dado pela Equação 12.

Figura 2 – Regime de forma de gotas e bolhas em sedimentação livre em líquidos.



Fonte: Clift, Grace e Weber (1978, p. 27, tradução nossa).

$$Mo = \frac{g\mu_c^4(\rho_d - \rho_c)}{\rho_c^2\sigma^3} \quad (11)$$

$$d_{\max ind} = 2 \sqrt{\frac{\sigma}{g\Delta\rho}} \quad (12)$$

Os dois fatores analisados até o presente momento tratam da sedimentação de uma única gota. O efeito da concentração da fase dispersa torna a previsão da velocidade de sedimentação de uma mistura ainda mais complexa. Quando se tratando de misturas concentradas a proximidade das gotas umas com as outras ou com a parede tenderá a diminuir a velocidade de sedimentação. Primeiro, isso acontece devido ao movimento descendente de uma grande quantidade de gotas o que desloca a fase contínua no sentido oposto. Esse efeito faz com que a velocidade relativa entre as fases se torne maior do que a velocidade de sedimentação, aumentando o arrasto. Segundo, as interações entre as gotas e com as paredes restringem o movimento da fase dispersa, diminuindo ainda mais a velocidade de sedimentação. A restrição de movimento devido a outras gotas pode fazer com que algumas gotas se movam com a mesma velocidade independente do seu diâmetro e o fluxo ascendente da fase contínua pode impedir a sedimentação das menores gotas (ABEYNAIKE et al., 2012). Ademais, a solução de problemas de sedimentação de misturas concentradas é complexa devido as distorções das linhas de correntes em razão da presença das gotas (JEELANI; HARTLAND, 1988; KUMAR; HARTLAND, 1985).

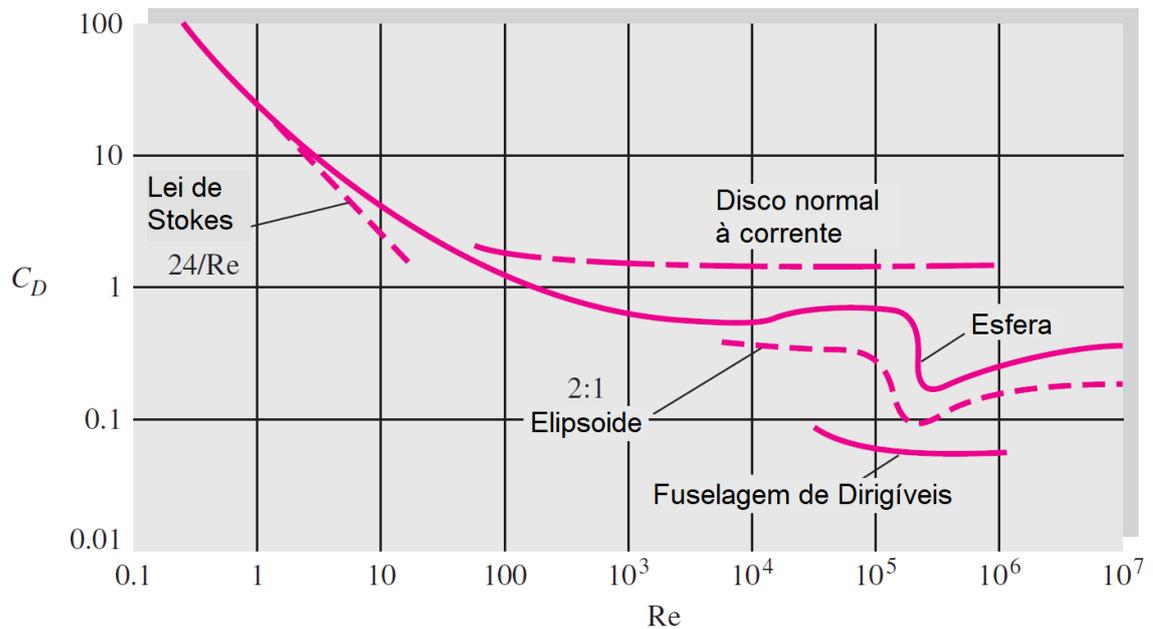
Deste modo, devido ao grau de dificuldade em se prever a velocidade de sedimentação em função da interação entre as inúmeras gotas presentes em uma mistura concentrada, vários modelos empíricos e semi-empíricos foram propostos na literatura para prever a velocidade das partículas em uma mistura. Em geral, muito desses modelos aplicam fatores de correção, que são função da fração volumétrica da fase dispersa, à velocidade terminal de Stokes. De acordo com Rusche e Issa (2000), os desvios dos resultados previstos pelos vários modelos propostos na literatura são significativos. Ademais, devido as complexidades dos sistemas fluidos, o desvio dos modelos em relação aos dados experimentais também é significativo uma vez que mudanças na velocidade de sedimentação podem não ser função apenas da fração volumétrica da fase dispersa.

Os modelos que aplicam um fator de correção à lei de Stokes utilizam o diâmetro médio das gotas para calcular a velocidade de sedimentação. No entanto, uma crítica a esses modelos é que a DTG da mistura tem forte influência na taxa de sedimentação. Além dos efeitos de restrição dos movimentos causado pela interação entre as gotas, a coalescência modifica o diâmetro das gotas e, por conseguinte, o seu escoamento de maneira drástica. Isso torna a análise da separação ainda mais complexa (NOÏK; PALERMO; DALMAZZONE, 2013).

### 2.3. MODELAGEM DO ARRASTO EM CFD

Os modelos de arrasto em CFD geralmente são baseados em análises simples, como a lei de Stokes, ou em correlações empíricas baseados nas forças agindo em uma única esfera, o que diminui sua precisão para mistura mais concentradas,  $\varphi > 3\%$  (BEHZADI; ISSA; RUSCHE 2007; RUSCHE; ISSA, 2000). Conforme o número de Reynolds aumenta, se torna maior do que 1, uma solução analítica das equações de Navier-Stokes para o coeficiente de arrasto, como no caso do regime de Stokes, não é possível. Assim, modelos empíricos para o coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds são uma saída para o problema da determinação do arrasto. A curva experimental do coeficiente de arrasto para uma única esfera em função do número de Reynolds é exposta na Figura 3. Conforme o número de Reynolds se torna maior do que 1, mais distante da solução obtida por Stokes o coeficiente de arrasto se torna. Muitos dos modelos de arrasto empregados em CFD são baseados em equações ajustadas da curva de  $C_D$  pelo número de Reynolds (Figura 3). Alguns desses modelos são o de Schiller e Naumann (1935), de Morsi e Alexander (1972), Simétrico e de Clift, Grace e Weber (1978). Há também autores que, como Behzadi, Issa e Rusche (2007), levaram em conta as interações entre as gotas devido ao aumento da fração volumétrica por meio de um fator modificador do arrasto,  $mod_{RI}$ , conforme a Equação 13. Os coeficientes padrões de  $mod_{RI}$  para dispersões de dois líquidos foram obtidos experimentalmente por Behzadi, Issa e Rusche (2007) e foram aplicados como fator de correção do arrasto por Panjwani e outros (2015) em suas simulações em CFD. Outro modificador de arrasto amplamente empregado para representar o efeito da concentração da fase dispersa em análises experimentais é o proposto por Richardson e Zaki (1954) (PANJWANI et al., 2015; SOUZA et al., 2015).

Figura 3 - Coeficiente de arrasto de uma esfera em função do número de Reynolds.



Fonte: White (2010, p. 488, tradução nossa).

$$C_{Dm} = C_D \times mod_{RI} \quad (13)$$

O modelo de arrasto proposto por Schiller e Naumann (1935) corresponde à curva empírica do coeficiente de arrasto de uma esfera rígida em função do número de Reynolds, Figura 3. A forma do coeficiente de arrasto segundo o modelo é representada pela Equação 14, onde  $Re$  é dado pela Equação 6. Como pode ser observado, a equação não se reduz imediatamente a  $C_D = 24/Re$  quando  $Re < 1$ . O modelo de Schiller e Naumann (1935), ou versões do mesmo, é amplamente empregado em simulações numéricas de diversos equipamentos em uma ampla faixa de regimes multifásicos em conjunto com o modelo de dois-fluidos. Por exemplo, o modelo pode ser empregado em tanques agitados (ROUDSARI et al., 2012; KERDOUSS et al., 2008), em colunas de extração (DIN et al., 2010), em separadores gravitacionais (MISRA et al., 2017; PANDA et al., 2017), além de outros (SILVA; DAMIAN; LAGE, 2008).

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1 + 0,15Re^{0,687})}{Re} & Re \leq 1000 \\ 0,44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (14)$$

O modelo proposto por Morsi e Alexander (1972), Equações 15 e 16, segue o mesmo princípio de Schiller e Naumann (1935), no entanto, o ajuste do coeficiente de arrasto em

função do número de Reynolds é mais fino e a sua estabilidade computacional é menor. Ghaffarkhah e outros (2017) utilizaram um modelo semelhante ao de Morsi e Alexander para determinar a velocidade de sedimentação de gotas de emulsão. A velocidade terminal foi então utilizada para definir a relação diâmetro/comprimento de um separador gravitacional por meio de modelos semi-empíricos.

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_o} + \frac{a_3}{Re_o^2} \quad (15)$$

Onde:

$$a_1; a_2; a_3 = \begin{cases} 0; 24; 0 & 0 < Re_o < 0,1 \\ 3,690; 22,73; 0,0903 & 0,1 < Re_o < 1 \\ 1,222; 29,16667; -3,8889 & 1 < Re_o < 10 \\ 0,6167; 46,50; -116,67 & 10 < Re_o < 100 \end{cases} \quad (16)$$

O modelo simétrico corresponde a uma versão do modelo de Schiller e Naumann (1935) no qual a fase dispersa se torna contínua dependendo da variação de sua fração volumétrica. Dessa forma, a massa específica, a viscosidade e o diâmetro empregados no número de Reynolds na Equação 14 correspondem à média dessas propriedades para as duas fases (ANSYS FLUENT 18.2, 2018).

O modelo de Clift, Grace e Weber (1978) corresponde a uma versão do modelo de Schiller e Naumann (1935) na qual também leva em conta deformação de gotas e bolhas devido ao escoamento por meio de um modificador de arrasto baseado no regime de escoamento da gota, conforme Figura 2. Esse modelo é recomendado para escoamento de gás/líquidos. Como as simulações de Panda e outros (2017) além de gotas também continham bolhas, os autores empregaram o modelo de Tsuchiya e outros (1997), que assim como o modelo de Clift, Grace e Weber (1978), é uma versão do modelo de Schiller e Naumann (1935) o qual leva em conta a deformação das partículas.

Desta maneira, há na literatura inúmeros modelos empíricos e semi-empíricos para representar a força de arrasto. Os modelos empregados em CFD geralmente representam o arrasto de apenas uma única e rígida esfera (BEHZADI; ISSA; RUSCHE, 2004) e, portanto, não levam em consideração os fatores apresentados na Seção 2.2, com exceção da deformação que é prevista pelo modelo de Clift, Grace e Weber (1978). Entretanto, alguns desses fatores podem não ser significativos ou são indiretamente representados pelos modelos padrões de

arrasto em CFD e pelo modelo de dois-fluidos e, assim, dispensam a necessidade de coeficientes de correção. Porém, pode haver fatores os quais não são contemplados pelos modelos tradicionais e necessitem de um modificador de arrasto. No caso do fluxo da fase contínua deslocado pelo movimento das gotas, o que aumenta a velocidade relativa entre as fases, é indiretamente representado pelo modelo multifásico de dois-fluidos devido a conservação de massa e fração volumétrica das fases. Como discutido na seção anterior, a deformação e a recirculação no interior das gotas no escoamento em um separador gravitacional não são significativas em razão do escoamento calmo (*creeping flow*), do tamanho das gotas e da presença de impurezas. Deste modo, o fator único que implica no emprego de um fator de correção para ajustar os modelos padrões de arrasto em CFD são as interações causadas pela presença de outras gotas. Como apresentado anteriormente, esse fator normalmente é assumido como sendo função da fração volumétrica da fase dispersa.

De forma semelhante aos modelos de arrasto em CFD, os modelos empíricos e semi-empíricos propostos na literatura para corrigir o arrasto segundo a Lei de Stokes em função da concentração da fase dispersa são numerosos (RUSCHE; ISSA, 2000).

Kumar e Hartland (1985) propuseram um modelo de velocidade relativa entre as fases com base no modelo de arrasto proposto por Barnea e Mizrahi, (1973) para dispersão de sólidos. O modelo foi igualado a uma equação para cálculo do coeficiente de arrasto na forma exibida na Equação 17, onde  $K$  é igual a 0,53. As constantes presentes no modelo foram alteradas para misturas líquido/líquido e seus novos valores foram determinados a partir da análise de resultados experimentais. Segundo os autores, 66% dos resultados experimentais foram previstos pelo modelo com um erro de até 10% e 92% dos experimentos com um erro de até 20%, o que foi considerado uma margem de erro aceitável pelos autores. Além disso, o modelo é aplicável para frações volumétricas na faixa de 1% a 76% e para número de Reynolds de 0,16 a 10 (JEELANI; PANDIT; HARTLAND, 1990). A velocidade de sedimentação obtida por Kumar e Hartland (1985) é dada pela Equação 18. Como o modelo não prevê a coalescência, a Equação 18 é normalmente empregada pelos autores para representar a velocidade inicial de sedimentação da mistura. Caso haja coalescência binária, e conseqüentemente, variação do diâmetro médio das gotas, a velocidade de sedimentação fica na forma da Equação 19 (JEALANI, HOSIG E WINDHAB, 2005; NOÏK; PALERMO; DALMAZZONE, 2013).

$$C_D = K + \frac{24}{Re} \quad (17)$$

$$U = \frac{(\rho_d - \rho_c)gd^2(1 - \varphi_d)^2}{18\mu_c(1 + 4,56\varphi_d)} \quad (18)$$

$$U_{KH} = U_{KH_0} \times \frac{d^2}{d_0^2} \quad (19)$$

Um dos modelos mais amplamente empregados é o modelo empírico proposto por Richardson e Zaki (1954) para escoamentos de misturas de gases e sólidos em leitos fluidizados. Esse modelo é baseado em um fator de correção da velocidade terminal de Stokes que é função apenas da fração volumétrica da fase dispersa,  $\varphi$ , (KYNCH, 1951) e do fator  $n$  que é função do número de Reynolds das gotas,  $Re$ , conforme a Tabela 1. A velocidade sedimentação segundo o modelo de Richardson e Zaki (1954) é dada pela Equação 20. Apesar de ser considerada a base para o estudo de sedimentação de gotas, a Equação 20, por ter sido concebida para a análise de partículas sólidas, não representa de maneira adequada a taxa de sedimentação de uma mistura de dois líquidos com seus coeficientes padrões (PANJWANI et al., 2015; SOUZA et al., 2015). Todavia, a velocidade de sedimentação de esferas rígidas sem coalescência pode ser prevista de forma razoável pela Equação 20, e modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954) segundo a Equação 21 (NOÏK; PALERMO; DALMAZZONE, 2013).

$$U_{RZ} = U_{ST}(1 - \varphi_d)^n \quad (20)$$

$$mod_{RZ} = \frac{1}{(1 - \varphi_d)^n} \quad (21)$$

Tabela 1 – Coeficiente  $n$  de Zaki e Richardson em função do Número de Reynolds.

<b>Re</b>	<b><math>n</math></b>
< 0,5	4,65
$0,5 \leq Re \leq 1300$	$4,374(Re)^{-0,0875}$
$Re \geq 1300$	2,33

Fonte: Seader, Henley e Roper, 2010 e Richardson e Zaki, 1954.

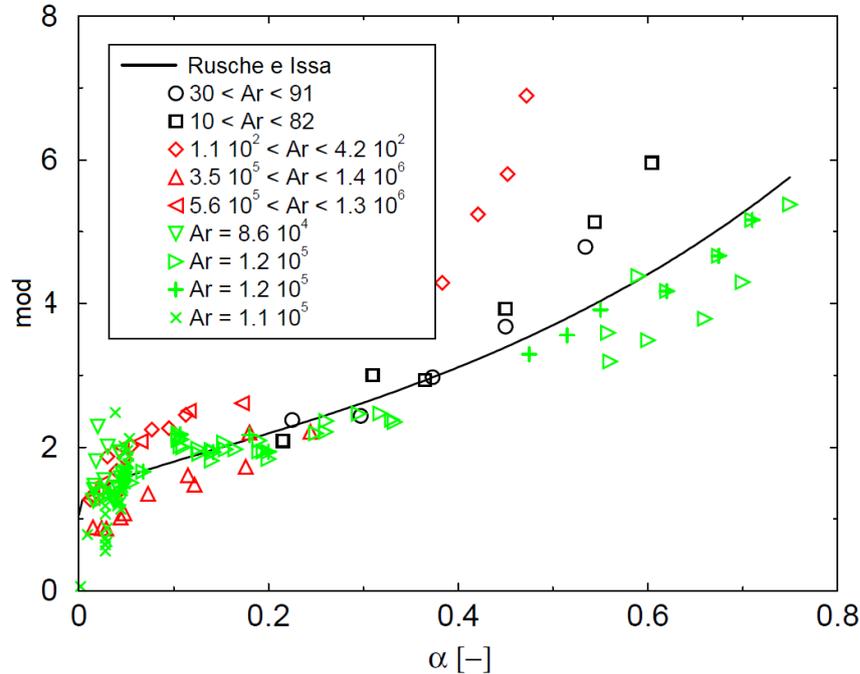
Frising e outros (2008) analisaram a contribuição da sedimentação e da coalescência na separação. Para tal, os autores adicionaram uma alta quantidade de surfactantes à mistura com o objetivo de inibir a coalescência, deste modo, apenas a sedimentação causaria a separação e a DTG seria invariável. A velocidade de sedimentação foi verificada como praticamente constante e modelada com o modelo de Richardson e Zaki (1954) para diferentes diâmetros médios de gotas e frações volumétricas, no entanto, tanto a velocidade terminal de Stokes, quanto o fator  $n$  tiveram que ser substituídos por valores baseados nos ajuste das curvas de decaimento experimentais. A substituição da velocidade terminal de Stokes das gotas podiam flocular, o que proporcionou uma velocidade de sedimentação maior do que a prevista pelo modelo de Stokes. Além disso, uma mistura real nunca é monodispersa, o que tende a elevar o valor do fator  $n$  proposto por Richardson e Zaki (1954).

Souza e outros (2015) também modelaram a velocidade de sedimentação com o modelo de Richardson e Zaki (1954). Contudo, da mesma forma que Frising e outros (2008), os coeficientes de  $U_{ST}$  e  $n$  não foram os mesmo indicados por Richardson e Zaki (1954). Mais uma vez os efeitos dos surfactantes (deformação das gotas), da distribuição do tamanho de gotas e a floculação fizeram com que a velocidade de sedimentação experimental se desviasse da velocidade prevista pela Equação 20.

Rusche e Issa (2000) definiram o coeficiente de arrasto das gotas em uma mistura como o arrasto de uma única gota, dado pela Lei de Stokes, vezes um fator de correção,  $mod_{RI}$ , que leva em conta os efeitos das interações entre as gotas. Segundo os autores, esse fator de correção depende do número de Arquimedes, do número de Reynolds, e da fração volumétrica da fase dispersa. Para obter o fator de correção, os autores ajustaram a curva de  $mod_{RI}$  em função da fração volumétrica de vários experimentos publicados na literatura com diferentes números de Arquimedes e de Reynolds, Figura 4. No entanto, devido à complexidade da modelagem, os autores não puderam observar uma dependência sistemática de  $mod_{RI}$  com os números de Arquimedes e de Reynolds. Assim,  $mod_{RI}$  foi definido apenas em função da fração volumétrica. A função definida pelos autores que melhor se ajustou as curvas experimentais é dada pela Equação 22. Para a fase dispersa líquida  $K_1$  é igual a 2,10 e  $K_2$  é igual a 0,249. Contudo, como pode ser observado na Figura 4 e de maneira semelhante ao modelo de Richardson e Zaki (1954), a Equação 22 não representa de forma adequada uma ampla faixa de sistemas líquidos com os coeficientes padrões  $K_1$  e  $K_2$  constantes.

$$mod_{RI} = exp(K_1\varphi_d) + \varphi^{K_2} \quad (22)$$

Figura 4 – Valores experimentais e do modelo de Rusche e Issa (2000) de  $mod_{RI}$  para dispersões de líquidos.



Fonte: Rusche e Issa (2000, tradução nossa).

Nota: Adaptado pelo autor.

#### 2.4. SEPARAÇÃO GRAVITACIONAL EM BATELADA EXPERIMENTAL

Durante a separação, seja em um processo contínuo ou em batelada, a dispersão apresenta duas zonas, a de sedimentação e de compactação (JEELANI; HARTLAND, 1988; JEELANI; HOSIG; WINDHAB, 2005). Segundo Jeelani e Hartland (1988) a separação em batelada de uma dispersão homogênea obtida de uma amostra retirada de um separador contínuo ou gerada em um vaso com um agitador ocorre da seguinte maneira: inicialmente, devido à ação da gravidade, as gotas começam a sedimentar (caso a fase dispersa tenha uma massa específica maior do que a da fase contínua) ou cremar (caso a fase dispersa tenha uma massa específica menor do que a da fase contínua). Conforme as gotas atingem o fundo do recipiente (ou o topo no caso da cremagem) elas coalescem com sua fase homogênea (já separada). Inicialmente, a sedimentação e a coalescência interfacial (entre as gotas e sua fase homogênea) ocorrem simultaneamente. Caso, a taxa de sedimentação seja maior do que a taxa de coalescência interfacial, as gotas se acumulam no fundo do recipiente formando uma zona densamente compactada, na qual as gotas estão imóveis umas em relação às outras. A zona de compactação pode ser inexistente caso a taxa de coalescência entre as gotas e sua fase

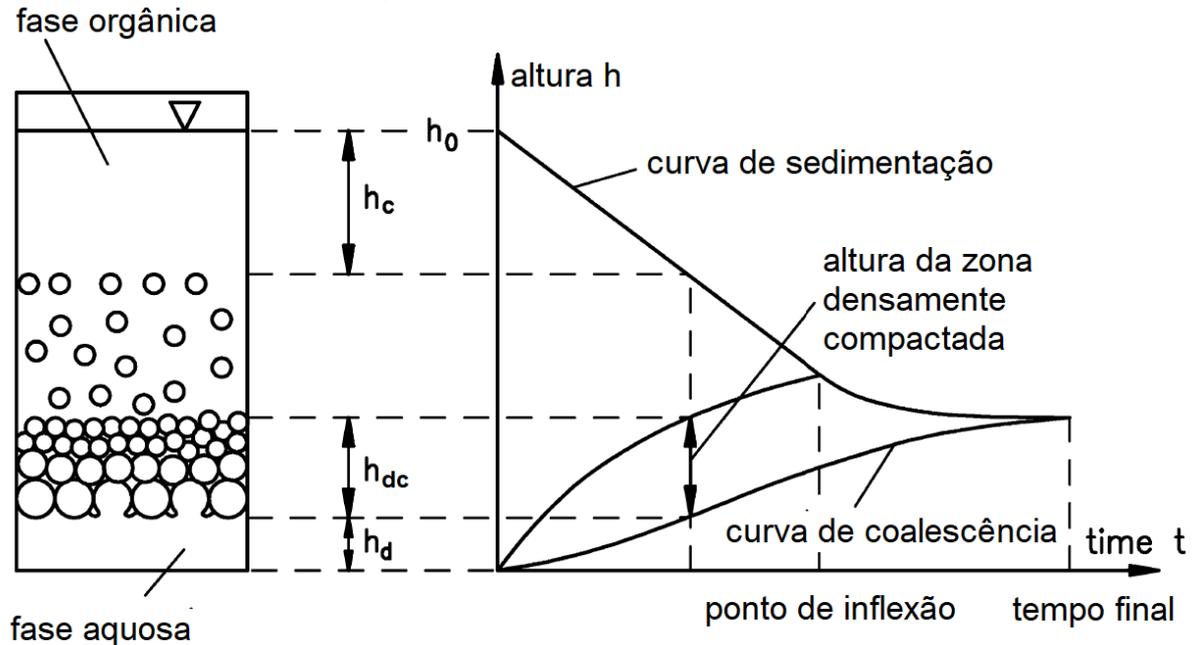
homogênea seja maior do que a taxa de sedimentação (JEELANI; HARTLAND, 1987; JEELANI; HOSIG; WINDHAB, 2005).

Como a distribuição do tamanho de gotas em uma mistura real é polidispersa, as gotas maiores sedimentam mais rápido do que as menores, o que promove colisões entre elas. Essas colisões podem resultar em coalescência binária, ou seja, entre duas gotas. Como consequência, a velocidade de sedimentação aumenta. No entanto, conforme as gotas maiores formam a zona compactada, ou se juntam a sua fase já separada, as gotas menores ficam para na zona de sedimentação. Como consequência, a velocidade de sedimentação aumenta inicialmente e depois diminui. Conforme as gotas se aproximam da zona de compactação, a concentração da fase dispersa aumenta e a velocidade das gotas diminui. Quando a zona compactada não é formada, a concentração da fase dispersa ao longo da altura do separador na zona de sedimentação é mais uniforme do que no caso anterior. Isto posto, é possível perceber que o perfil de sedimentação é função da distribuição do tamanho de gotas, da taxa de coalescência binária e da taxa de coalescência interfacial. Esta última influencia na concentração da fase dispersa na parte inferior da zona de sedimentação (JEELANI; HOSIG; WINDHAB, 2005; LOBO; IVANOV; WASAN, 1993). Ademais, como os efeitos do aumento do tamanho das gotas e da concentração da fase dispersa com o tempo na velocidade de sedimentação são opostos e caso eles sejam muito pequenos ou da mesma ordem, o perfil de sedimentação pode ser tornar linear (JEELANI; PANDIT; HARTLAND, 1990).

Na Figura 5 é exemplificada uma curva de decaimento típica com taxa de sedimentação constante. Como pode ser observado na Figura, há um ponto de inflexão na curva de sedimentação. De acordo com Jeelani, Hosig e Windhab (2005) isso ocorre quando a velocidade e o diâmetro médio das gotas na região de sedimentação atingem seu valor máximo. No caso da cremagem, as curvas são semelhantes, porém invertidas. Segundo, Jeelani e Hartland (1985) o perfil de sedimentação pode ser sigmoidal ou exponencial, Figura 6 a e b, respectivamente. De acordo com os autores, a curva de sedimentação tende a ser sigmoidal quando a taxa inicial de coalescência e sedimentação é pequena. Dessa forma, a velocidade terminal das gotas aumenta devido à coalescência binária (JEELANI; HARTLAND, 1998). Segundo resultados experimentais de Jeelani, Pandit e Hartland (1990), o perfil sedimentação é sigmoidal quando o número de Reynolds inicial das gotas é menor do que 1. Por outro lado, quando a taxa de sedimentação é inicialmente alta (as gotas têm pouco tempo para coalescer binariamente) e a zona compactada é formada, a concentração da fase dispersa aumenta linearmente com o tempo nas proximidades da fronteira das zonas de

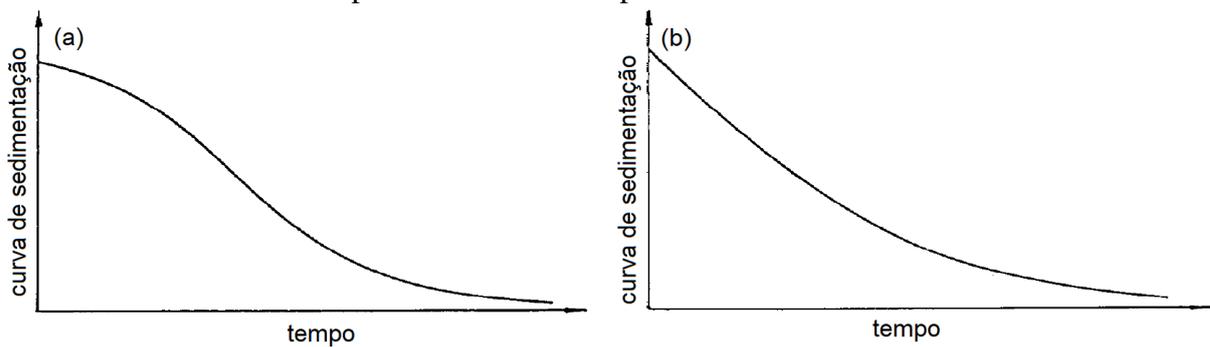
sedimentação e de compactação e, conseqüentemente, o perfil de sedimentação é exponencial (JEELANI; PANDIT; HARTLAND, 1990).

Figura 5 – Sedimentação experimental em batelada (esquerda) e respectiva curva de decaimento (direita) com notações de alturas.



Fonte: Henschke, Schlieper e Pfennig (2002, tradução nossa).

Figura 6 – (a) Curva de decaimento em batelada sigmoidal com o tempo. (b) Curva de decaimento em batelada exponencial com o tempo.



Fonte: Jeelani e Hartland (1987, tradução nossa).

A coalescência pode ocorrer entre duas gotas tanto na zona de sedimentação quanto na zona densamente compactada e entre uma gota e sua fase homogênea na interface da coalescência. Em todos os casos, a taxa de coalescência pode depender do tamanho das gotas e da força do mecanismo que tende a uni-las. A presente dissertação trata da modelagem da

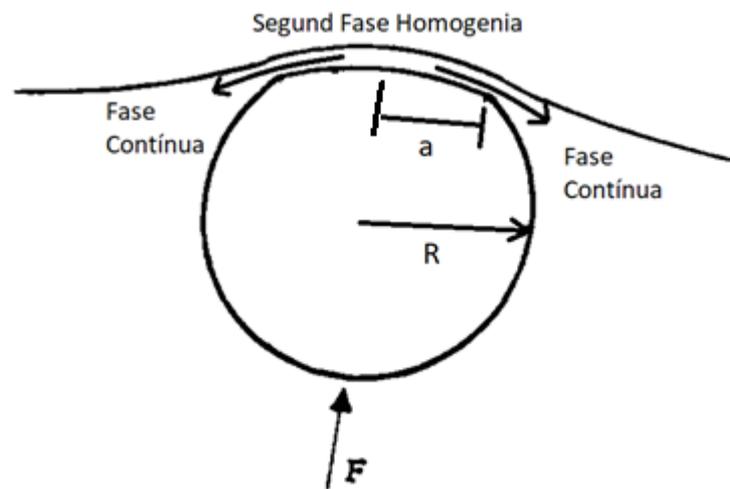
zona de sedimentação; logo, a coalescência na zona compactada e na interface de coalescência serão brevemente apresentadas apenas por fins didáticos e os modelos de coalescência devido ao empuxo na zona de sedimentação serão apresentados na Seção 2.6.

Tanto ao longo da zona compactada como na interface de coalescência a força motriz da coalescência é a força de empuxo (GRIMES, 2012a, b). Devido ao empuxo, a fase contínua que envolve as gotas é deslocada formando um filme. Esse filme entre as gotas e/ou as gotas e sua fase homogênea deve ser drenado e rompido para promover a coalescência. A taxa de coalescência entre as gotas na interface da zona compactada e sua fase homogênea é dada pela Equação 23 de Jeelani e Hartland (1985, 1987, 1998), onde  $\varphi_d$ ,  $\tau_I$  e  $d_I$  são fração volumétrica da fase dispersa, o tempo de coalescência e o diâmetro de uma gota, respectivamente, na interface com a sua fase homogênea.

$$\psi = \frac{2\varphi_d d_I}{3\tau_I} \quad (23)$$

Segundo Jeelani e Hartland (1985, 1987, 1988, 1998) e coautores o tempo de coalescência interfacial,  $\tau_I$ , pode ser função apenas da altura da zona compactada, apenas do tamanho das gotas, ou da combinação destes. Quando uma gota está na região inferior da zona compactada a força de empuxo agindo sobre ela mais a força das gotas que estão acima pressionam o filme de fase contínua, logo quanto maior a altura da zona compactada, maior a taxa de coalescência. Na Figura 7 é exemplificado o processo de drenagem do filme da fase contínua entre uma gota e uma superfície. No caso da fase dispersa ser mais leve do que a fase contínua, as gotas irão cremar, ou subir, como ocorre na Figura 7. Quando a gota atinge a interface com sua fase homogênea, tanto a gota quanto a interface se deformam e o filme de fase contínua presente entre as superfícies é drenado pela força de empuxo  $F$ . O modelo de drenagem do filme da fase contínua será discutido na Seção 2.6. No entanto, vale adiantar que o tempo de drenagem depende da força  $F$ , do raio  $R$  da gota, (Hartland e Jeelani 1987), e do comprimento do filme,  $a$ , que é função, da tensão superficial e da própria força  $F$ .

Figura 7 – Deformação de uma gota e da superfície de coalescência e formação e drenagem do filme de fase contínua.



Fonte: Lobo, Ivanov e Wasan (1993, tradução nossa).

Note: Adaptado pelo autor.

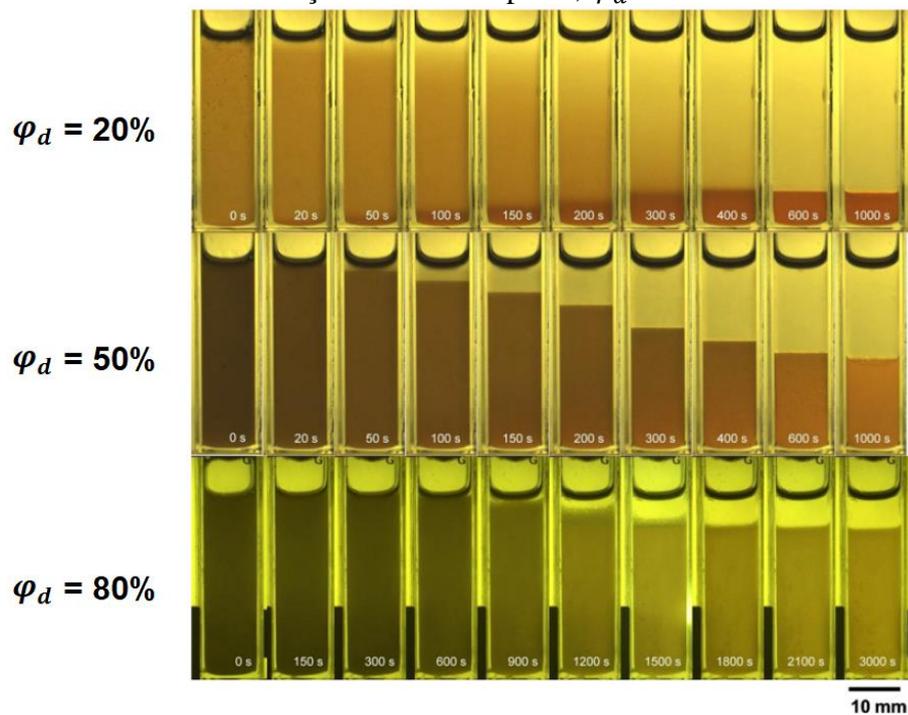
Como exposto na Figura 7, além de coalescer, as gotas podem se deformar (LOBO; IVANOV; WASAN, 1993; HENSCHKE; SCHLIEPER; PFENNIG, 2002; JEELANI; HOSIG; WINDHAB, 2005). Em razão da deformação, a concentração da fase dispersa na zona compactada pode inicialmente ser cerca de 75% e chegar a ser próxima de 100% na interface com a segunda fase já separada (JEELANI; HARTLAND, 1987, 1988).

Segundo Henschke, Schlieper e Pfennig (2002) a presença de impurezas, como surfactantes, além de inevitável em processos industriais, influencia de forma significativa na separação das fases, mesmo que parâmetros como massa específica e viscosidade não sejam alterados de forma significativa. Essa influência pode estar relacionada com alteração da tensão superficial que controla a deformação da gota, conseqüentemente, o comprimento e a pressão de drenagem do filme e as forças intermoleculares que são responsáveis pela ruptura do filme de fase contínua. Ademais, a influência dessas impurezas ocorre na escala microscópica e não podem ser exatamente quantificados por meio de experimentos. Dessa forma, avaliar a sedimentação e a coalescência de cada gota individualmente é inviável e uma taxa média deve ser empregada.

Outro ponto importante na modelagem da separação gravitacional em CFD é a determinação da interface de sedimentação ou cremagem e coalescência. As interfaces de sedimentação e de coalescência normalmente são observadas de forma visual. Entretanto, a

determinação do limite da zona de sedimentação com a região da fase contínua já separada nem sempre é de fácil visualização. Segundo Nadiv e Semiat (1995) a interface da zona de sedimentação com a fase contínua tende a ser distinta com o estreitamento da distribuição do tamanho de gotas e/ou o aumento da concentração da fase dispersa. Isso pode ser observado nas vídeo imagens de Abeynaike e outros (2012), Figura 8, na qual interface de sedimentação se torna mais visível com o aumento da fração volumétrica da fase dispersa,  $\varphi_d$ .

Figura 8 – Vídeo imagens da separação de glicerol (fase dispersa) em biodiesel (fase contínua) com diferentes concentrações da fase dispersa,  $\varphi_d$ .



Fonte: Abeynaike e outros (2012).

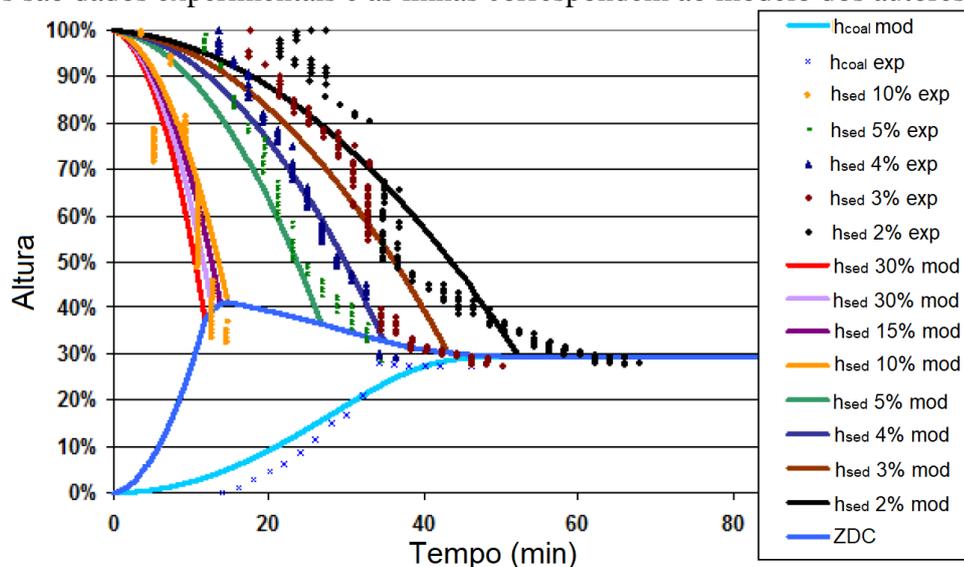
Note: Adaptado pelo autor.

Como dispersões reais são polidispersas a velocidade de sedimentação das gotas maiores é maior do que a das gotas pequenas. Isso faz com que surja um gradiente de concentração volumétrica da fase dispersa ao longo da altura da zona de sedimentação, em outras palavras, várias interfaces de sedimentação surgem no sistema, cada uma com uma fração volumétrica diferente (PALERMO et al., 2011). Quando a análise é feita de forma visual, a determinação do percentual da fase dispersa na região da interface julgada pelo observador como sendo o limite superior da zona de sedimentação não é possível. Esse gradiente também é observado nas simulações em CFD; logo, determinar qual concentração da fase dispersa deve ser escolhida para representar o limite superior da zona de sedimentação

é uma tarefa importante, pois tem forte efeito sobre a calibragem e análise dos modelos em CFD.

O gradiente de concentração foi verificado experimentalmente por Palermo e outros (2011), Figura 9. Os autores obtiveram o resultado da Figura 9 por meio de um aparelho de ultrassom. Apesar dos autores apresentarem valores para a zona de sedimentação com valores de  $\varphi$  de até 1%, o ponto de inflexão, ou seja, o ponto no qual a espessura da zona compactada começa a diminuir, ocorre quando a interface de 10% de  $\varphi$  alcança a zona compactada, apesar de interface de  $\varphi$  igual a 1% estar na parte superior do separador, como sugerido por Hartland e Jeelani (1985, 1987), Nadviv e Semiat (1995) e verificado experimentalmente por Souza e outros (2015). Dessa forma, logo após o fim da separação, determinado de forma visual, as menores gotas ainda podem estar no processo de sedimentação o que dificulta a decisão de determinar se a separação realmente ocorreu ou não e qual é a fração residual da fase dispersa ainda presente na fase contínua. Em separadores contínuos industriais essas gotas menores podem representar volumes significativos, não podendo ser negligenciadas. Como consequência, uma metodologia para determinar a fração volumétrica da interface definida como interface de sedimentação é importante para a análise em CFD de curva de decaimento gerada a partir de testes de garrafa realizados.

Figura 9 – Resultados de um teste de garrafa com emulsão de água em óleo com 30% de água. Os pontos são dados experimentais e as linhas correspondem ao modelo dos autores.



Fonte: Palermo e outros (2011, tradução nossa).

## 2.5. BALANÇO POPULACIONAL

A distribuição do tamanho de gotas (DTG) tem um grande impacto na reologia e estabilidades de dispersões. De fato, a DTG é um fator chave na determinação da transferência de massa e calor em dispersões e no projeto de separadores, reatores e misturadores (LIAO; LUCAS, 2010; ROUDSARI et al., 2012; ROUDSARI; RAMDHANE; MOZAFFARI, 2016). De acordo com Grimes (2012a, b), apesar da longa história do processo de separação gravitacional, a sua modelagem e a elucidação dos efeitos da distribuição do tamanho de gotas são limitadas. Além da representação da DTG de forma adequada, o comportamento desta devido à coalescência representa um desafio extra (SILVA; DAMIAN; LAGE, 2008). Dessa maneira, a modelagem da separação de misturas dispersas apenas com o modelo de dois-fluidos, sem levar em consideração a variação da DTG ao longo do tempo pode gerar resultados úteis quanto à compreensão do escoamento no interior dos equipamentos e da eficiência de separação, porém, devido a sua simplicidade, os resultados não serão precisos e o comportamento do separador será descrito, na melhor das hipóteses, apenas qualitativamente (KHAROUA, KHEZZAR E SAADAWI, 2013).

A maneira apropriada de se modelar a variação da DTG em escoamentos polidispersos é utilizando as equações de balanço populacional (EBP) (MITRE et al., 2014; SILVA; DAMIAN; LAGE, 2008). O uso de CFD acoplado às EBP é uma eficiente ferramenta para simular escoamentos multifásicos polidispersos (FAVERO; SILVA; LAGE, 2015) envolvendo, por exemplo, os fenômenos de nucleação, crescimento, coalescência e quebra, (FAVERO; SILVA; LAGE, 2015; RAMKRISHNA, 2000; SILVA; DAMIAN; LAGE, 2008). As EBP consistem em equações similares as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, no entanto, elas são aplicadas para a conservação de uma característica inerente às partículas, como diâmetro, temperatura e concentração de solutos (LIAO; LUCAS, 2010). No caso do processo de separação gravitacional de misturas de dois líquidos imiscíveis a variável de interesse relativa às gotas normalmente é o seu diâmetro, pois, para sistemas incompressíveis este pode ser usado para representar seu volume e sua massa (ROUDSARI et al., 2012).

Segundo Ramkrishna (2000) as equações de balanço populacional basicamente modelam as várias maneiras pelas quais partículas podem aparecer ou desaparecer do sistema. Isso pode acontecer por meio de processos convectivos, nos quais as partículas cruzam as fronteiras do sistema, ou por processos de nascimento ou morte de partículas que ocorrem no

interior do sistema. Os processos de nascimento e morte podem, por exemplo, ocorrer devido à quebra, agregação e nucleação. Para se determinar o balanço populacional das partículas, estas são divididas em classes, formando um espaço de controle de partículas. Esse espaço de controle pode ser descrito por uma coordenada externa,  $\mathbf{r}$ , e uma coordenada interna,  $\mathbf{x}$ , de um vetor de estado das partículas. A coordenada externa normalmente representa a posição espacial da partícula (posição do seu centroide), enquanto que a coordenada interna representa uma quantidade associada à partícula, no presente caso, o seu diâmetro. A distribuição de partículas nesse espaço de controle, ou a função densidade do número de partículas,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$ , é o número médio de partículas com um valor da componente  $\mathbf{x}$  entre determinados limites de uma classe de partículas por unidade de volume do espaço físico.

As EBP podem ser escritas conforme a Equação 24 (MITRE et al., 2014; MISRA et al., 2017):

$$\frac{\partial f(d, t)}{\partial t} + \Delta \cdot (\mathbf{U}_k f(d, t)) = S(d, t) \quad (24)$$

O termo  $\Delta \cdot (\mathbf{U}_k n(d, t))$  representa a variação da quantidade de partículas com diâmetro  $d$  devido a convecção no “espaço” de controle das partículas e  $U_k$  é a velocidade das partículas. A expressão espaço de controle foi utilizada, pois a convecção pode ocorrer nas fronteiras físicas (coordenadas externas) e/ou nas fronteiras da coordenada interna. Por exemplo, imagine um líquido saturado em um tanque agitado onde ocorre a formação de cristais. Imagine agora que um espaço de estado das partículas genérico é definido no interior do tanque e que todas as partículas contidas em uma determinada porção do tanque,  $\Delta V$ , (um determinado volume em metros cúbicos) e que estejam dentro de uma determinada faixa de tamanho de cristais,  $[a, c]$  estão incluídas nesse espaço de controle. Quando uma partícula com tamanho  $b$ , sendo  $a < b < c$ , é trazida pelo fluxo da fase contínua para o interior de  $\Delta V$ , a densidade dessa classe de partículas cresce no espaço de controle. Por outro lado, se devido ao processo de cristalização uma partícula no interior do espaço de controle cresce até um tamanho  $d$ , no qual  $d > c$ , a partícula deixa o espaço de controle por convecção na variável interna, mesmo que a posição do seu centroide ainda esteja no interior do volume  $\Delta V$  (RAMKRISHNA, 2000). No entanto, como em uma emulsão os termos referentes à nucleação e crescimento não são considerados, a convecção ocorrerá apenas devido ao fluxo da fase contínua, conforme a Equação 24 (FAVERO, SILVA; LAGE, 2015; MITRE et al., 2015; MISRA et al., 2017).

Por outro lado, a entrada e a saída de partículas no espaço de controle devido à quebra ou coalescência não se dá com uma função contínua, como no caso do crescimento dos cristais. Assim, termos fontes,  $S(\delta, t)$ , surgem no lado direito da Equação 23 para descrever o nascimento e morte de partículas devido à quebra e coalescência (FAVERO, SILVA; LAGE, 2015; MITRE et al., 2015; MISRA et al., 2017; RAMKRISHNA, 2000). Logo, a Equação 25 pode ser escrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial f(d, t)}{\partial t} + \Delta \cdot (\mathbf{U}_k f(d, t)) = N_Q - M_Q + N_C - M_C \quad (25)$$

Onde  $N_Q$ ,  $M_Q$ ,  $N_C$  e  $M_C$  representam os termos fontes de nascimento devido à quebra, morte devido à quebra, nascimento devido à coalescência e morte devido à coalescência (RAMKRISHNA, 2000). A coalescência é o fenômeno governante na separação gravitacional, portanto, os modelos de quebra não serão abordados no presente trabalho. Os termos de nascimento e morte de gotas devido à coalescência podem ser escritos da seguinte forma (RAMKRISHNA, 2000):

$$N_C = \frac{1}{2} \int_0^{d_1} \beta(d_1 - d_2, d_2, t) f(d_1 - d_2, t) f(d_2, t) dd_2 \quad (26)$$

$$M_C = \int_0^{\infty} \beta(d_1, d_2, t) f(d_1, t) f(d_2, t) dd_2 \quad (27)$$

A Equação 26 representa o nascimento de gotas de tamanho  $d_1$  devido à coalescência de gotas de tamanhos  $d_2$  e  $d_1 - d_2$  menores do que  $d_1$ . O lado direito da Equação 27 representa a morte de gotas de tamanho  $d_1$  devido à coalescência com gotas do tamanho  $d_2$ . A função  $\beta(d_1, d_2, t)$  descreve a frequência de agregação e é chamada de modelo de coalescência, ou *kernel* de coalescência, assunto tratado na Seção 2.6. O Produto  $f(d_1 - d_2, t) f(d_2, t)$  corresponde à densidade do número de pares de partículas  $d_1 - d_2$  e  $d_2$ .

No caso de  $N_C$  e  $M_C$  serem funções da densidade do número partículas,  $f(d, t)$ , que normalmente não é uma função conhecida, a Equação 25 se torna uma equação integro-diferencial parcial sem fechamento. Nesse caso, com exceção de situações bastante simples, a solução das EBP requerer um método numérico (WANG; WANG; JIN, 2005, 2006), uma vez que o emprego de soluções analíticas não é viável (DAMIAN, 2007). Dos métodos existem para a solução das EBP os métodos das Classes e dos Momentos serão apresentados aqui.

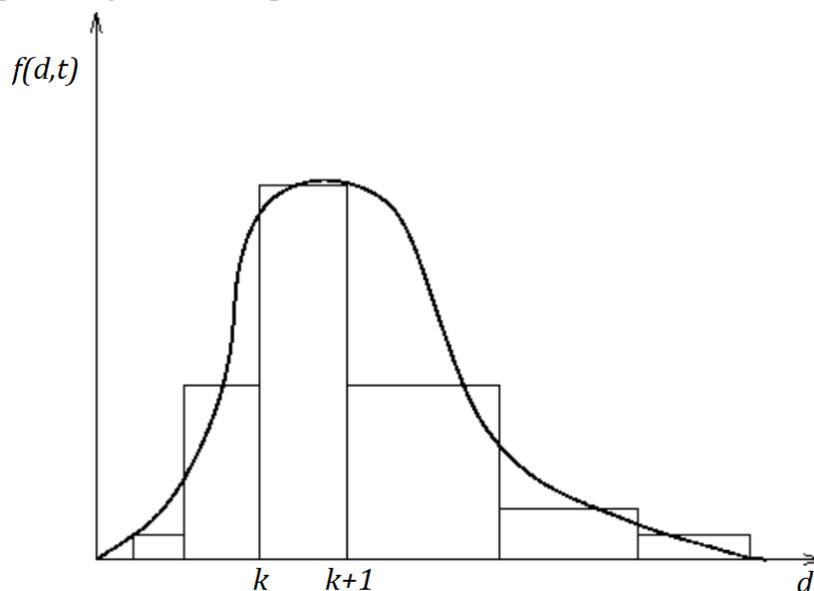
O Método das Classes ou Discreto é interessante quando a amplitude da DTG é conhecida. No método, a densidade do número de partículas é discretizada na sua variável interna  $d$  em um número finito com limites fixos de classes (DAMIAN, 2007). Assim, a densidade de partículas é aproximada pela Equação 28, onde  $N_k$  é o número de partículas na classe  $k$  e  $d_k$  é o diâmetro que representa a classe  $k$ , que é o pivô da função delta de Dirac. O valor de  $N_k$  varia ao longo do processo de separação com o tempo (ROUDSARI et al., 2012), contudo, os valores de  $d_k$  são fixos. Quando o fenômeno de coalescência gera uma partícula com tamanho entre os pivôs  $d_k$  e  $d_{k+1}$ , cada classe recebe uma fração da partícula formada (WANG; WANG; JIN, 2005, 2006). Na forma discretizada as fontes de nascimento e morte devido à coalescência ficam conforme as Equações 29 e 30, onde  $\xi_{kj}$  é responsável por determinar a fração da nova partícula que será transferida para os mais próximos pivôs. Para exemplificar, uma discretização de uma DTG genérica pelo Método das Classes é exposta na Figura 10. Como resultado do processo de discretização a Equação 25 se torna uma equação diferencial com soluções numéricas estabelecidas e pode então ser resolvida (DAMIAN, 2007).

$$f(d, t) \approx \sum_{k=1}^M N_k(t) \delta(d - d_k) \quad (28)$$

$$N_C = \sum_{k=1}^M \sum_{j=1}^M \beta_{kj} N_k N_j \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{kj}\right) \xi_{kj} \quad (29)$$

$$M_C = \sum_{k=1}^M \beta_{kj} N_k N_j \quad (30)$$

Figura 10 – Representação da DTG pelo método discreto.



Fonte: ANSYS FLUENT 18.2, 2018.

Entre as vantagens do Método Discreto estão a robustez numérica e da obtenção de  $f(d,t)$  de forma direta (ANSYS FLUENT 18.2., 2018). No entanto, uma equação de transporte é resolvida para cada classe de partículas, logo, quanto maior a quantidade de faixas de tamanhos de gotas, maior o custo computacional. Como as faixas de tamanhos são fixas, o modelo requer um conhecimento prévio da amplitude da DTG ao longo do tempo. Conseqüente, caso os diâmetros futuros das gotas não sejam conhecidos ou cresçam significativamente, um número elevado de equações de conservação precisará ser resolvido, o que aumenta consideravelmente o custo computacional das simulações (DAMIAN, 2007; WANG; WANG; JIN, 2006). Ademais, o método discreto pode ser homogêneo e heterogêneo. No primeiro, todas as partículas têm a mesma velocidade e o coeficiente de arrasto é comumente calculado em função do diâmetro médio de Sauter das partículas. No segundo, apenas as partículas de tamanho igual têm a mesma velocidade e o arrasto é calculado para cada classe de tamanho separadamente.

O método dos momentos (do inglês, *Methods of Moments*, MOM) soluciona as EBP calculando equações de conservação dos momentos da função densidade do número de partículas, ao invés do cálculo de conservação de  $f(d,t)$  em si. O momento  $k$  de uma distribuição de tamanho de gotas é definido pela Equação 31 (MCGRAW, 1997). Esse método minimiza a problemática dependência de um elevado número de equações de conservação requeridas pelo método discreto. Para casos mais simples, sem os fenômenos de

coalescência e quebra, por exemplo, as equações de transporte dos momentos podem ser escritas em uma forma fechada, em função dos próprios momentos. Nesse caso, o método dos momentos é chamado de padrão, ou do inglês, *Standard Moment Method* (SMM) (MARCHISIO et al., 2003).

$$\mu_k = \int f(d)d^k dr \quad (31)$$

No método QMOM, *Quadrature Method of Moments*, o problema de fechamento das EPBs é resolvido com uma aproximação em quadratura, o que possibilita o seu emprego em problemas envolvendo coalescência (MARCHISIO et al., 2003). De maneira semelhante ao método discreto, a função densidade do número de partículas é aproximada pela Equação 28, no entanto, o diâmetro de referência  $d_k$  deixa de ser fixo e pode variar assim como  $N_k$  (OSHINOWO; QUINTERO; VILAGINES, 2015). Os momentos são aproximados pela Equação 32, onde as abcissas,  $d_k(t)$ , e os pesos,  $N_k(t)$ , podem ser especificados pelos primeiros  $2M$  momentos de  $f(d)$ . Portanto, se a DTG será representada por quatro classes de partículas, as equações de transporte dos oito primeiros momentos da distribuição precisam ser revolvidas. A determinação das abcissas e pesos por meio dos momentos se dá pelo algoritmo *Product-Difference* (PD). Segundo Marchisio, Vigil e Fox (2003) seis momentos, e consequentemente, 3 classes de partículas, são suficientes representar a evolução de uma DTG com uma razoável precisão. No entanto, essa afirmação deve ser verificada para cada caso, uma vez que não é possível garantir que a DTG será representada de forma satisfatória com apenas três faixas de tamanhos de partículas para todos os casos.

$$\mu_k \approx \sum_{k=1}^M N_k(t)d_k^M(t) \quad (32)$$

Entre as principais limitações do QMOM estão o fato de que a solução das equações de conservação de quantidade de movimento, ao invés das próprias EBP, não permite o cálculo do campo de velocidade de cada classe de forma individual e o conjunto de abcissas e pesos é o mesmo para todo o domínio. Como consequência, o método DQMOM (*Direct Quadrature Method of Moments*) foi desenvolvido para remover essas limitações apresentadas pelo método QMOM (MARCHISIO; VIGIL; FOX, 2005; SILVA; LAGE, 2011). No método QMOM as equações de conservação resolvidas são as dos momentos da função densidade do número de partículas, por outro lado, no método DQMOM quando a

Equação 28 é substituída na Equação 25, esta se torna um sistema linear de equações em função dos pesos,  $N_k$ , e das abscissas ponderadas,  $N_k d_k$  e as equações de conservação destes são então resolvidas. Assim, o método DQMOM pode ser visto como uma versão heterogênea do QMOM com a possibilidade do diâmetro de referência da classe  $k$ ,  $d_k$ , serem determinados de forma independente para cada célula. Quanto maior o número de classes, maior a precisão do modelo.

## 2.6. MODELAGEM DA COALESCÊNCIA

Segundo Misra e outros (2017) a separação de misturas líquido-líquido em separadores gravitacionais é governada principalmente pela coalescência das gotas da fase dispersa. O processo de coalescência é mais complexo do que o processo de quebra e envolve o escoamento da fase contínua e duas partículas geralmente de tamanhos diferentes (CHESTERS, 1991). Nenhum modelo, dos vários existentes na literatura, é genérico o suficiente para ser aplicado em uma ampla faixa de escoamentos, escalas e sistemas. Isso ocorre em razão das muitas incertezas presentes, o que dificulta a validação dos modelos (SILVA, DAMINA; LAGE, 2012). Os autores Liao e Lucas (2010) resumem os modelos de coalescência em cinco categorias em função do mecanismo de coalescência: flutuações turbulentas, cisalhamento viscoso, captura em redemoinhos turbulentos, empuxo e interação com esteira turbulenta de outras partículas. Grimes (2012) também considera as colisões induzidas pelo movimento Browniano. Destes, o empuxo é mecanismo de interesse na presente dissertação.

A maioria dos autores concordam que o fenômeno de coalescência acontece em uma sequência de três passos, que são: aproximação e colisão das gotas, drenagem do filme de fase contínua entre as gotas e ruptura desse filme devido às forças intermoleculares. Assim, além da ocorrência da colisão, a força e o tempo de colisão devem ser suficientes para promover a coalescência (FRISING; NOÏK; DALMAZZONE, 2006). Desta maneira, os *kernels* de coalescência são, tipicamente, formulados com base no produto da frequência de colisão,  $h$ , e da eficiência de coalescência,  $\lambda$ , conforme Equação 33. Essa abordagem é realizada, pois nem todas as colisões resultam em coalescência.  $h$  e  $\lambda$  serão descritos nas seções 2.6.1 e 2.6.2.

$$\beta(d_1, d_2) = h(d_1, d_2)\lambda(d_1, d_2) \quad (33)$$

### 2.6.1. Modelos de Frequência de Colisão

Os modelos de frequência de colisão normalmente são baseados na clássica teoria cinética dos gases. Por conseguinte, mesmo que essa possa ser considerada uma aproximação grosseira, ela é a base da maioria dos modelos encontrados na literatura. A frequência de colisão de duas gotas é dada pelo volume varrido pelas partículas por unidade de tempo, segundo a Equação 34, onde  $u_{car}$  é uma velocidade característica e  $\pi(d_1 + d_2)^2/4$  representa a área transversal de colisão (LIAO; LUCAS, 2010). A Equação 34 pode ser empregada tanto para a coalescência decorrente de flutuações turbulentas ou do empuxo por meio da definição de  $u_{car}$ , que normalmente é a velocidade de aproximação, ou velocidade relativa entre as gotas (LEHR; MEWES, 2001). Ademais, apenas a frequência de colisões binária é assumida, pois, a probabilidade de três ou mais partículas colidirem ao mesmo tempo é muito pequena (LEHR; MEWES, 2001; LUO, 1993).

$$h(d_1, d_2) = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2 u_{car} \quad (34)$$

Um grande número de modelos de coalescência foi desenvolvido para sistemas agitados e turbulentos, contudo, estes não são adequados para a região de sedimentação laminar dos separadores gravitacionais, nos quais o empuxo domina o mecanismo de colisão, com uma possível exceção para a região de entrada. No entanto, os modelos de coalescência devido ao empuxo não são tão numerosos quanto os modelos turbulentos (LIAO; LUCAS, 2010; MISRA et al., 2017). As colisões devido ao empuxo são resultantes das diferentes velocidades de sedimentação de gotas de diferentes tamanhos. Dessa forma, a frequência de colisão fica conforme a Equação 35 onde  $u_{car}$  é a diferença da velocidade de sedimentação das gotas (LEHR; MEWES, 2001; LEHR; MILLIES; MEWES, 2002; PRINCE; BLANCH, 1990):

$$h(d_1, d_2) = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2 |u_1 - u_2| \quad (35)$$

### 2.6.2. Modelos de Eficiência de Coalescência

Conforme citado anteriormente nem todas as colisões resultam em coalescência, portanto, definir a probabilidade de uma colisão resultar em coalescência é a segunda parte do

problema. Segundo Liao e Lucas (2010) a eficiência de colisão devido ao empuxo geralmente é modelada seguindo a ideia dos modelos de turbulência, ou é adotada constante. Dessa forma, os dois modelos aplicáveis à separação gravitacional serão apresentados: o modelo de velocidade de aproximação crítica e o modelo de tempo de drenagem do filme.

### 2.6.2.1. Modelo de velocidade de aproximação crítica

Lehr e Mewes (2001) e Lehr, Millies e Mewes (2002) propuseram o modelo de velocidade de aproximação crítica com base em dados experimentais. Os dados sugeriram que colisões a baixas velocidades de aproximação, ou colisões suaves, apresentam uma elevada eficiência de coalescência.

O modelo leva em conta a coalescência por turbulência e por empuxo. Segundo o modelo dos autores, a velocidade característica dependerá de qual desses fenômenos é predominante, de acordo com a Equação 36, onde o primeiro termo entre parêntesis corresponde à velocidade característica devido à turbulência, onde  $\varepsilon$  é a dissipação de energia, e o segundo termo corresponde à velocidade característica devido ao empuxo (LEHR; MILLIES; MEWES, 2002)

$$u_{car} = \max\left(\sqrt{2}(\varepsilon\sqrt{d_1 d_2})^{1/3}, |u_1 - u_2|\right) \quad (36)$$

A eficiência de coalescência depende do tamanho e da velocidade das gotas de forma que gotas pequenas e pequenas velocidades de aproximação favorecem a coalescência. No entanto, os autores assumem a eficiência de coalescência apenas em função da velocidade crítica e da velocidade característica (Equação 37).

$$\lambda = \max\left(\frac{u_{cri}}{u_{car}}, 1\right) \quad (37)$$

Assim, o modelo de coalescência fica:

$$\beta = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2 \min(u_{car}, u_{cri}) \quad (38)$$

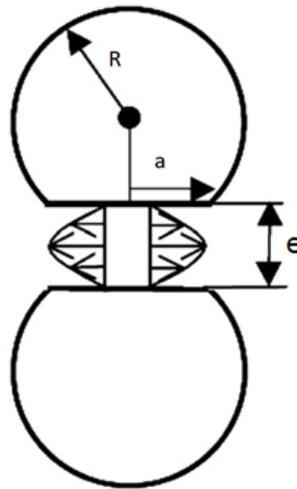
A velocidade crítica varia com a presença de surfactantes e impurezas nos líquidos e pode ser determinada por meio de experimentos. Para água destilada e ar, Leher, Millies e

Mewes (2002) obtiveram  $u_{cri}$  igual a 0,08 m/s, enquanto que Misra e outros (2017) aplicam  $u_{cri}$  igual a 0,001 m/s para um sistema óleo/água.

### 2.6.2.2. Modelo de tempo de drenagem do filme

O modelo de tempo de drenagem do filme é o mais popular entre os modelos de coalescência. De acordo com o modelo, quando duas gotas se aproximam, ou colidem, elas deslocam a fase contínua entre elas. Nesse processo, a fase contínua é comprimida e expulsa da região entre as gotas. Conforme as gotas se aproximam, a interface das mesmas na região de contato se achata, fazendo com a fase contínua forme um filme separando as duas gotas (Figura 11).

Figura 11 - Aproximação, deformação e drenagem do filme de fase contínua com interface imóvel.



Fonte: Liao e Lucas (2010).

Como consequência, a energia cinética é convertida em energia superficial, uma vez que as gotas perdem o formato esférico, mesmo que a região achatada corresponda a uma parte pequena de sua superfície. Caso toda a energia cinética seja transformada em energia superficial antes do filme de fase contínua ser reduzido a uma espessura crítica, as gotas irão ricochetear, uma vez que a energia superficial será convertida novamente em energia cinética (ASHGRIZ; POO, 1990). A espessura crítica é atingida quando as forças intermoleculares, no caso de Van der Waals para sistemas puros, se torna da mesma ordem que a tensão superficial (CHESTERS, 1991; de ARAUJO, 2006; LIAO; LUCAS, 2010). Kim e Lee (1987) assumem

um valor  $10^{-8}$  para qualquer sistema. Esse valor foi empregado por Prince e Blanch (1990) para um sistema ar/água.

Dessa forma, o modelo assume que para haver coalescência, o tempo de contato das gotas deve ser maior do que o tempo necessário para drenar e romper o filme de fase contínua. Como as gotas são esféricas, a pressão no interior da gota é maior do que na fase contínua em função da tensão superficial e da curvatura destas. Conforme as gotas se aproximam e a superfície de contato deforma, a pressão no filme se torna próxima à pressão no interior da gota. Essa pressão é responsável pela drenagem do filme de fase contínua. Essa força de interação é dada pela Equação 39, onde  $a$  é o raio do disco do filme,  $\sigma$  é a tensão superficial e  $R$  é o raio da gota (CHESTERS, 1991; LIAO; LUCAS, 2010; PRINCE; BLANCH, 1990; LOBO; IVANOV; WASAN, 1993). Para colisões no regime viscoso, ou seja, em regime laminar com Reynolds menor do que 1, a força  $F$  é proporcional a velocidade de aproximação das gotas.

$$F = \frac{\pi a^2 2\sigma}{R} \quad (39)$$

Para coalescência de uma gota com uma superfície, aplicável na interface entre a zona densamente compactada e a fase secundária homogênea,  $F$  é dado pela força de empuxo conforme a Equação 40:

$$F = \frac{4}{3} \pi R^3 \Delta \rho g \quad (40)$$

A maioria dos modelos de eficiência de coalescência assumem que o tempo de drenagem e ruptura do filme e o tempo de contato entre as gotas são variáveis randômicas (LIAO; LUCAS, 2010), uma vez que seus valores podem variar significativamente para uma certa condição do escoamento local na mesma região do escoamento (CHESTERS, 1991). Dessa forma, a maioria dos modelos assume a eficiência de coalescência segundo a Equação 41, onde a razão  $t_{drenagem}/t_{contato}$  é um indicativo da probabilidade de coalescência (CHESTERS, 1991; PRINCE. BLANCH, 1990).

$$\lambda(d_1, d_2) = \exp\left(-\frac{t_{drenagem}}{t_{contato}}\right) \quad (41)$$

Vale apenas ressaltar também que outros fatores, além da velocidade de aproximação e tamanho das gotas, influenciam no processo de coalescência como a temperatura, concentração de surfactantes e propriedades físicas da mistura. Essas variáveis podem alterar a espessura inicial e final do filme, influenciando assim na eficiência de coalescência. Esses fatores podem ser levados em conta por meio de constantes adicionadas aos modelos e obtidas por meio de dados experimentais de curvas de decaimento (MISRA et al., 2017).

O trabalho de Chesters (1991) é focado na determinação dos tempos de drenagem e contato. Segundo o autor, o tempo de contato pode ser modelado pela Equação 42, obtida partir do balanço de energia de uma colisão elástica entre duas partículas.

$$t_{contato} = \left[ \frac{4\rho_d\rho_c R^3}{(3\rho_c + 1)2\sigma} \right]^{1/2} \quad (42)$$

Posteriormente, Kamp e Chesters (2001) estenderam a equação anterior para gotas de tamanhos diferentes, Equação 43, onde  $C_{MA}$  é o coeficiente de massa aparente, adotado como 0,5 por Luo e Svendsen (1996).  $d_{eq}$  é calculado por meio da Equação 44.

$$t_{contato} = \frac{\pi}{4} \left( \frac{\rho_c C_{MA} d_{eq}^3}{3\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

$$d_{eq} = \frac{d_1 d_2}{d_1 + d_2} \quad (44)$$

A modelagem do tempo de drenagem depende de como as interfaces são tratadas. Elas podem ser rígidas ou deformáveis. Na maioria dos modelos, a força de aproximação e a velocidade de drenagem são assumidas constantes (LIAO; LUCAS, 2010).

O modelo de esfera rígida é aplicável para misturas nas quais a viscosidade da fase dispersa é muito maior do que a da fase contínua ou para gotas muito pequenas ( $d < 1\text{mm}$ ). Chesters (1991) exemplifica a aplicação desse modelo para o caso de gotas que floculam, mas não são capazes de coalescer devido à sua elevada viscosidade. O tempo de drenagem foi derivado por Chesters (1991) para o modelo de esferas rígidas (Figura 11):

$$t_{drenagem} = \frac{3\pi\mu_c}{2F} d_{eq}^2 \ln\left(\frac{e_i}{e_f}\right) \quad (45)$$

O modelo de gota deformável é dividido em três categorias: interface imóvel, parcialmente móvel e totalmente móvel. O modelo de interface totalmente móvel é indicado para sistemas puros, portanto, ele não será abordado neste trabalho, e/ou que a viscosidade da fase dispersa é muito menor que a da fase contínua.

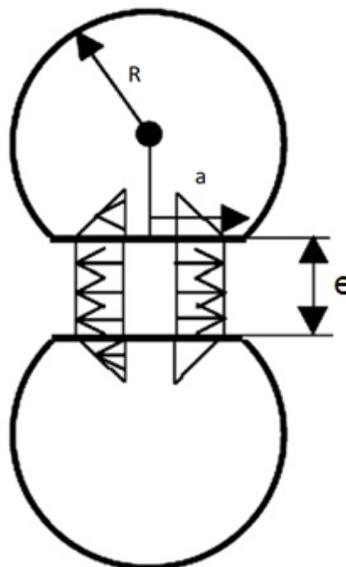
O tempo de drenagem para interface deformável imóvel é dado pela Equação 46. Contudo, segundo Liao e Lucas (2010), está hipótese de interface imóvel também é aplicável para fases dispersas com viscosidade extremamente elevada, embora os autores não quantifiquem o seu valor.

$$t_{drenagem} = \frac{3\mu_c F}{16\pi\sigma^2} d_{eq}^2 \left( \frac{1}{e_f^2} - \frac{1}{e_i^2} \right) \quad (46)$$

O modelo de interface parcialmente móvel (Figura 12) é aplicável para sistemas nos quais a drenagem é predominantemente controlada pelo movimento da superfície do filme, a contribuição do fluxo adicional dentro do filme devido ao gradiente de pressão predominante ser muito menor (CHESTERS, 1991; LIAO; LUCAS, 2010). O tempo de drenagem pode ser então modelado como:

$$t_{drenagem} = \frac{\pi\mu_d F^{1/2}}{2(2\pi\sigma/d_{eq})^{3/2}} \left( \frac{1}{e_f} - \frac{1}{e_i} \right) \quad (47)$$

Figura 12 - Aproximação, deformação e drenagem do filme de fase contínua com interface parcialmente móvel.



Fonte: Liao e Lucas (2010).

De acordo com as Equações 46 e 47, quanto maior a força de interação entre as gotas, maior o tempo de drenagem, diferentemente do que acontece no caso de interfaces não deformáveis, Equação 45. Isso pode ser explicado observando-se a Equação 39, pois, como  $2\sigma/R$  permanece constante, o comprimento do filme,  $a$ , deve aumentar com o aumento de  $F$ . Logo, colisões suaves causam uma menor deformação, conseqüentemente, um filme menor, e apresentam uma elevada eficiência de coalescência, concordando com o princípio base do modelo de velocidade de aproximação crítica.

A espessura de ruptura do filme, ou  $e_f$ , foi estimada por Chesters (1991) conforme a Equação 48, onde,  $C_{Ham}$  é a constante de Hamaker, que segundo Israelachvili (2011), apud Mitre e outros (2014) é cerca de  $6 \times 10^{-21}$  para a interação de gotas de água e hidrocarbonetos.

$$e_f = \left( \frac{C_{Ham} d_{eq}}{16\pi\sigma} \right)^{1/3} \quad (48)$$

Por fim, Chesters (1991) reescreve a Equação 41 para colisões com interfaces deformáveis parcialmente móveis no regime viscoso da seguinte maneira:

$$\lambda(d_1, d_2) = \exp \left[ -C \left( \frac{\mu_d}{\mu_c} \right) \left( \frac{\mu_c u_{car}}{\sigma} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{8\pi\sigma d_{eq}^2}{C_{Ham}} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (49)$$

### 3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O projeto de separadores gravitacionais industriais contínuos baseado em experimentos em plantas piloto podem ser custosos, além de requerer experiência do projetista quanto a interpretação dos dados no momento de ampliação de escala (JEELANI; HARTLAND, 1985; JEELANI; HARTLAND, 1998; YU; MAO, 2004). Além disso, como o processo de separação é complexo, é comum o projetista desenvolver o projeto de um separador com base na operação de outros separadores de larga escala encontrados na indústria (NADIV; SEMIAT, 1995). Outra possibilidade é o estudo da separação em batelada em laboratório ou no campo. Esse tipo de análise é de execução mais fácil do que as plantas piloto e pode ser empregada para prever o comportamento do separador contínuo. No entanto, os dados obtidos requerem uma sofisticada interpretação do comportamento da mistura para relacionar os processos em regimes transiente e permanente (JEELANI; HATLAND, 1985, 1987).

Há na literatura um grande número de estudos nos quais os parâmetros de ajuste de modelos empíricos e semi-empíricos de sedimentação e coalescência para previsão da cinética de separação de misturas de dois líquidos imiscíveis em separadores contínuos são obtidos a partir da curva de decaimento em batelada obtida de uma amostra da mistura. A análise do processo de separação em batelada é realizada em escala laboratorial e permite o estudo dos fundamentos de cada etapa da separação, além de reduzir custos em relação a uma planta piloto (ABDULKADIR; HERNANDEZ-PEREZ, 2010; JEELANI; HARTLAND, 1985; JEELANI; HARTLAND, 1987; NADIV; SEMIAT, 1995; JEELANI; HARTLAND, 1998; HENSCHKE; SCHLIEPER; PFENNIG, 2002). Contudo, segundo Zhang e outros (2017), os métodos experimentais, apesar de gerarem dados válidos, demandam tempo e são tediosos.

Além dos modelos empíricos e semi-empíricos uma alternativa cada vez mais atrativa para projeto e estudo de melhorias de separadores gravitacionais são as simulações computacionais em CFD (GOMES; GUIMARÃES; RIBEIRO, 2007; ZHANG et al., 2017). De acordo com Zhang e outros (2017) e Ghaffarkhah e outros (2017), os métodos computacionais são efetivos e convenientes para pesquisas sobre a separação de fases imiscíveis e podem contribuir para a otimização da estrutura dos equipamentos e dos parâmetros de operação. No entanto, devido aos efeitos da coalescência e restrição de movimento das gotas em um escoamento multifásico, descrever todos os fenômenos no

interior de um separador por meio de CFD é uma tarefa desafiadora (SIMMONS; WILSON; AZZOPARDI, 2002).

A revisão dos conceitos e modelos presentes na literatura sobre a separação gravitacional em regime laminar aplicáveis em CFD foram apresentadas no Capítulo 2. O presente Capítulo tem por objetivo apresentar ao leitor os estudos presentes na literatura sobre o tema, bem como a metodologia empregada pelos autores para modelar a separação gravitacional, seja em separadores contínuos ou em batelada.

### 3.1. MODELAGEM DE SEPARAÇÃO GRAVITACIONAL EM CFD

A modelagem dos fenômenos que ocorrem no interior de um separador é complexa, uma vez que ela deve incluir a coalescência binária nas zonas de sedimentação e compactada, taxa de sedimentação, coalescência interfacial e formação da zona compactada. (PANJWANI et al., 2015). Isto posto, esta seção tem por objetivo revisar e apresentar ao leitor trabalhos nos quais a modelagem da separação gravitacional de misturas água/óleo foi realizada em CFD. Para tal, os modelos de escoamento multifásico, turbulência, balanço populacional e coalescência empregados por cada autor serão, quando disponíveis, são apresentados, discutidos.

Laleh, Svrcek e Monnery (2011) modelaram o escoamento em um separador bifásico gás/líquido com os modelos DPM e VOF-DPM. De acordo com os autores, o modelo VOF é indicado para simulações de separação multifásica, uma vez que ele foi pensado para o escoamento de fluidos imiscíveis. No entanto, essa afirmação deve ser feita com ressalvas, pois, o modelo VOF é demasiadamente custoso do ponto de vista computacional quando uma fase se encontra dispersa na outra e mesmo que sua combinação com um modelo DPM seja realizada, a modelagem de dispersões concentradas, acima de 12% segundo os autores, se torna altamente custosa (LALEH; SVRCEK; MONNERY, 2011). Contudo, no estudo realizado pelos autores, a fração volumétrica da fase dispersa era menor do que 12% e o modelo DPM foi empregado para modelar a fase dispersa. Segundo os autores, como o número de Reynolds era muito maior do que 2300 (não informado pelos autores se na tubulação de entrada ou em outra região do separador) um modelo de turbulência precisou ser inserido nas simulações. O modelo escolhido foi o  $k - \epsilon$ , pois, de acordo com os autores é robusto, econômico e tem uma precisão razoável para uma ampla faixa de escoamentos encontrados na indústria. Os autores empregaram três tamanhos médios de partículas,

determinadas pela distribuição de Rosin e Rammler, mantendo os tamanhos máximo e mínimo e a fator de distribuição,  $n = 2,6$ , constantes. Isso foi feito com o intuito de avaliar a influência da DTG no processo de separação. Os resultados mostraram que a aplicação do modelo DPM apresentou resultados ruins quanto a eficiência de separação comparada a dados experimentais, contudo, a combinação dos modelos VOF e DPM resultou numa maior coerência dos resultados numéricos e experimentais.

Laleh, Svrcek e Monnery (2012) novamente empregaram uma combinação de VOF com DPM para modelar um separador trifásico de forma que tantos os fenômenos do escoamento macroscópico quanto os do escoamento microscópico pudessem ser avaliados. Alguns internos do separador como placas perfuradas e extratores de neblina foram modelados como meios porosos e a queda de pressão nestes foi determinada a partir de equações encontradas na literatura. Os autores dividiram o separador em duas regiões, a de entrada (turbulência e dispersa) e a região de separação (escoamento calmo). Embora os autores reconheçam que a modelagem com VOF não seja adequada para a região de entrada, onde as fases estão dispersas, o modelo pode modelar de forma efetiva o escoamento macroscópico da maior parte do separador (região de separação). Modelos de quebra e coalescência de gotas e bolhas também foram incluídos. Os autores empregaram a distribuição de Rosin e Rammler para descrever a DTG, com fator de espalhamento de 2,6. Como resultado, o modelo foi capaz de prever a queda na eficiência de separação com o aumento da fração volumétrica de água.

Ghaffarkhah e outros (2017) definiram a razão diâmetro/comprimento de separadores gravitacionais por meio de dois métodos semi-empíricos populares. A eficiência de cada separador foi então comparada por meio de simulações numéricas. Para tal, os modelos VOF e DPM foram empregados. A energia cinética e a distribuição mássica da fase dispersa foram comparadas para avaliar o fenômeno da separação e comparar os modelos semi-empíricos. Os autores concluíram que apesar do modelo apresentado não ser suficiente para garantir um projeto ótimo de separador, uma vez que o modelo não foi validado por comparação com dados experimentais, ele pode ser uma importante diretriz, ou guia, para a comparação e estudo da construção de grandes separadores. Os autores também empregaram o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  devido à sua simplicidade e razoável precisão. A DTG foi modelada segundo a distribuição logarítmica de Rosin-Rammler, com um fator de distribuição de 2,6.

Apesar da região de separação ser comumente composta por três camadas de fluido estratificadas (uma de gás, uma de óleo e uma de água), isso nem sempre é verdade e fenômenos complexos como mistura dos fluidos, zonas de recirculação e entranhamento dos fluidos podem ocorrer (KHAROUA; KHEZZAR; SAADAWI, 2013). Dessa forma, cuidado deve ser tomado ao selecionar o modelo multifásico DPM, mesmo que para representar o calmo escoamento multifásico esperado no interior do separador.

Lu, Lee e Phelps (2007) avaliaram a efetividade da inclusão de duas placas perfuradas na melhora do escoamento e da separação de um FWKO (*Free Water KnockOut*). Os resultados indicaram que a instalação desses internos reduziu a os curtos-circuitos e a recirculação. O tempo médio de residência aumentou de 630s para 980s para a água e de 520s para 745 s para o óleo. A melhoria de eficiência da separação foi estima em 50% pelos autores com o uso da placa perfurada. Apesar dos autores reconhecerem que o modelo multifásico de dois-fluidos é mais indicado para o escoamento em um FWKO, eles empregaram o modelo de mistura, pois, segundo eles, o modelo de dois-fluidos é mais complicado e tem um custo computacional maior. O número de Reynolds no interior do vaso foi estimado em cerca de 58.000 e, portanto, o escoamento era turbulento. Dessa forma, o modelo  $k - \epsilon$  de turbulência foi empregado. As placas perfuradas foram tratadas como meios porosos, sendo que a queda de pressão através destas era função da velocidade, dada por uma equação encontrada na literatura.

Panda e outros (2017) empregaram simulação numérica para modelar a separação gravitacional água/óleo e comparam os resultados com dados experimentais. O modelo E-E de dois-fluidos foi utilizado em um processo de separação trifásica. Os autores comparam a espessura da zona dispersa e a concentração nessa zona com um experimento realizado em laboratório. Os resultados indicaram que apesar da espessura da zona dispersa ter concordado com os dados experimentais, a fração volumétrica da fase dispersa nessa zona foi menor que o obtido experimentalmente. Segundo os autores, isso é devido à distribuição de tamanho de gota considerada monodispersa e constante. Apesar dessa consideração, os autores puderam avaliar, mesmo que qualitativamente, a influência da vazão de cada corrente líquida, do diâmetro das gotas, da posição do defletor na entrada e densidade da fase orgânica. Os autores afirmam a importância de considerar a variação da DTG por meio da coalescência binária e interfacial. Como as simulações de Panda e outros (2017) além de gotas também continham bolhas, os autores empregaram o modelo de Tsuchiya e outros (1997), que assim como o modelo de Clift, Grace e Weber (1978), é uma versão do modelo de Schiller e Naumann

(1935) o qual leva em conta a deformação das partículas. Nenhum modelo de turbulência foi empregado.

Ye e outros (2016) investigaram a influência de diferentes parâmetros na hidrodinâmica de um separador para a extração de solventes de forma numérica e experimental. A validação das simulações numéricas foi realizada com a comparação do campo de velocidade numérico e experimental, sendo que o último foi obtido pelo método PIV (*Particle Image Velocimetry*). Para as simulações, os autores empregaram o modelo de dois fluidos, com o modelo  $k - \varepsilon$  de turbulência e gotas com diâmetro constante. As zonas de recirculação e o padrão do campo de velocidade foram semelhantes nos resultados experimentais e computacionais. A eficiência de separação foi avaliada com base na espessura da zona dispersa. Contudo, essa análise pode levar a uma conclusão enganosa, pois, Panda e outros (2017), também utilizaram um diâmetro de gotas constante, mas obtiveram uma diferença significativa quanto aos resultados da concentração da fase dispersa ao longo da zona dispersa, mesmo que a espessura dessa zona concorda-se com valores experimentais. Dessa forma, o modelo empregado por Ye e outros (2016) foi capaz de prever o campo de velocidade e a espessura da zona dispersa, contudo, não se pode afirmar que a concentração nas saídas condiz com os valores experimentais. Ademais, os autores também foram capazes de obter a curva de passagem por meio das simulações numéricas.

McCleney e outros (2017) investigaram a eficiência de um separador gravitacional com placas perfuradas por meio de simulações em CFD com o modelo de dois fluidos. Os autores analisaram a influência de submodelos (turbulência, arrasto, DTG) na eficiência da separação, que foi comparada com resultados experimentais. Dessa forma, um balanço entre a melhora na precisão de cada submodelo e o custo computacional associado a ele foi feita para se determinar a sua viabilidade. De maneira semelhante a Panda e outros (2017), os autores compararam a eficiência de separação e concentração da fase dispersa em várias localidades do separador, bem como a influência das vazões, porcentagem de água e viscosidade do óleo. Segundo os resultados alcançados, o modelo final apresentou um erro de até 10% em relação a eficiência de separação para as diferentes condições de operação analisadas. As simulações foram realizadas com diâmetro das gotas constante, pois, resultados prévios com uma distribuição do tamanho de gotas por meio de EBP resultaram pequena melhora (1-3%) quanto a eficiência de separação e apresentaram um aumento no custo computacional significativo. Os autores empregaram o modelo de turbulência  $k - \varepsilon$ , que foi comparada apenas com o modelo  $k - \omega$ . Os modelos de arrasto de Schiller-Naumann, Morsi-Alexander,

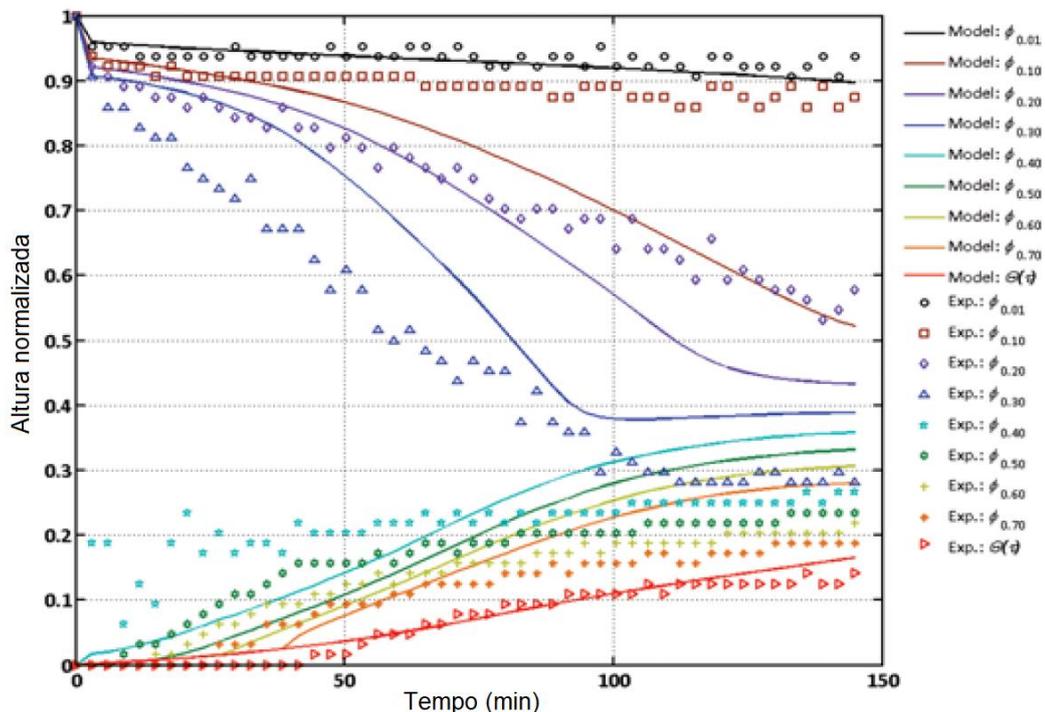
Tomiyama e Arrasto Universal foram comparados. O modelo de Morsi-Alexander resultou na eficiência de separação mais próxima aos resultados experimentais. Os autores também consideraram os efeitos da massa aparente.

Oshinowo, Quintero e Vilagines (2017) analisaram a desestabilização em batelada de uma emulsão de água em óleo de forma experimental, por meio de ultrassom, e modelagem numérica. Os autores utilizaram equações de balanço populacional com o método discreto heterogêneo. Foram utilizados 24 tamanhos de gotas com 12 grupos de velocidades. Modelos de coalescência também foram incluídos. As simulações foram realizadas com o modelo de dois-fluidos e com gotas pequenas, a ponto de não se deformarem. O modelo de arrasto de Schiller-Naumann foi empregado, contudo, a viscosidade empregada no cálculo do número de Reynolds foi a viscosidade da mistura, que é função da fração volumétrica das fases. Segundo os autores, a partir da variação da viscosidade foi possível representar a restrição dos movimentos das gotas na zona de sedimentação e na zona densamente compactada. Para modelar o decaimento turbulento, o modelo  $k - \varepsilon$  foi selecionado. De acordo com os autores, o efeito da quebra das gotas é mínimo e, portanto, não foi levado em conta. A frequência de colisão adotada para o modelo de coalescência foi a proposta de Tsouris e Tavlarides (1994) para escoamento turbulento, e não devido ao empuxo. A eficiência de coalescência escolhida foi a do modelo de Coulaloglou e Tavlarides (1977), também para escoamento turbulento. Apesar dos autores considerarem que os resultados numéricos e experimentais concordaram entre si, as frações volumétricas obtidas ao longo do separador pelos dois métodos não parecem ter muita semelhança razoável. Além disso, a turbulência foi incluída no modelo para simular o seu próprio decaimento, logo, assumir um modelo de coalescência que é função da turbulência e não da diferença de velocidade de sedimentação das gotas não parece ser coerente para uma separação em batelada.

Grimes e outros (2012a) propuseram um modelo de coalescência aplicado as EBPs para simular a separação gravitacional de uma emulsão em batelada. Como o modelo é proposto para separação de emulsões com gotas de diâmetro inicial na faixa de 1 a 10  $\mu\text{m}$ , o modelo de coalescência foi o do tempo de drenagem para esferas rígidas. Como consequência, além das colisões devido ao empuxo, os autores também incluíram os efeitos do movimento Browniano das gotas. No entanto, a força de colisão foi modelada como a força de empuxo, e não em função da quantidade de movimento das gotas, que embora dependa da força de empuxo, não é necessariamente igual a ela. Ademias, o modelo continha constante de ajuste para levar em conta fatores como a presença de surfactantes e/ou a temperatura. O

modificador de arrasto empregado devido à restrição de movimento das gotas foi o proposto por Richardson e Zaki (1954), com o expoente  $n$  fica na faixa de 5 a 6,55. Posteriormente, Grimes e outros (2012b) compararam o modelo proposto com dados experimentais, os resultados são expostos na Figura 13. Como pode ser observado, o modelo estima os perfis de sedimentação e a formação da zona compactada de forma razoável, deixando espaço para o seu aperfeiçoamento.

Figura 13 - Posição das interfaces com diferentes concentrações da fase dispersa determinados experimentalmente e pelo modelo de Grimes (2012b).



Fonte: Grimes e outros (2012, tradução nossa).

Kharoua, Khezzar e Saadawi (2012a, b) avaliaram a mudança no escoamento de entrada de um separador trifásico com a inclusão de diferentes internos e os efeitos da elevação do vertedouro por meio de simulações em CFD. A análise foi realizada com o intuito de modernizar um separador já em operação em Abu Dhabi, que por conta do aumento da fração volumétrica de água produzida, começou a apresentar problemas operacionais, incluído água e óleo fora de especificação. Os autores empregaram o modelo de dois-fluidos e o arrasto de Schiller-naumann. O modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  para mistura foi empregado. Assim, quando as equações  $k$  e  $\varepsilon$  foram resolvidos, a massa específica, a velocidade e a viscosidade utilizadas foram a da mistura. Para reduzir o custo computacional, os autores

empregaram a condição de contorno de simetria ao longo do plano axial do separador. O diâmetro das fases secundárias foi estabelecido igual a 100 microns. Os valores das simulações foram comparados com valores obtidos do campo e os resultados concordaram apenas em uma tendência geral e a discrepância nos resultados foi atribuída as hipóteses simplificadoras assumidas.

Devido às discrepâncias (resultados irreais) encontradas na modelagem anterior, Kharoua, Khezzar e Saadawi (2013) incluíram as equações de balanço populacional e modelos de quebra e coalescência na investigação da desempenho de internos em relação ao escoamento no interior do separador trifásico. Esses internos, como placas perfuradas, foram modelados como meios porosos. Em razão da falta de informações do campo em relação a distribuição do tamanho de gotas na entrada do separador, três distribuições de Rosin e Rammler foram comparadas, sendo uma estreita, uma média e uma ampla. As três DTGs tinham fator de espalhamento de 2,6 e tamanhos médios de 150, 500 e 800 microns para água e 40, 80 e 140 microns para o óleo. A DTG foi representada por sete classes de tamanhos de partículas e nenhuma informação do seu processo de discretização foi informada. O modelo multifásico empregado foi o de dois-fluidos, o de turbulência o  $k - \varepsilon$  e o balanço populacional resolvido pelo método discreto homogêneo. Os modelos de quebra e coalescência foram o de Luo (1996). Como resultado, as diferentes DTG apresentaram diferentes eficiências de separação. Devido ao modelo de coalescência adotado, a maior parte da coalescência ocorreu na região de entrada, onde a turbulência é maior e na maior parte do separador o diâmetro das gotas permanece quase que constante. Mesmo que o modelo de turbulência adotado não seja o mais indicado para o escoamento calmo na região de sedimentação de um separador gravitacional, a inclusão da DTG e do modelo de coalescência aproximou os resultados das simulações aos resultados experimentais de forma quantitativa.

Abdulkadir e Hernandez-Perez (2010) analisaram os efeitos das velocidades dos fluidos e o diâmetro das gotas em relação à eficiência de separação e a geometria de um separador. O estudo foi conduzido em CFD com os modelos de dois fluidos e o modelo  $k - \varepsilon$  de turbulência. Devido à simetria do separador, apenas metade do seu volume de controle foi simulada. Como resultado, o aumento de velocidade (representando a vazão) acarreta uma diminuição da separação e, conseqüentemente, requer um aumento no nível do vertedouro. Contudo, esse resulta parece ser óbvio e deve ser interpretado qualitativamente, ou seja, apenas como uma tendência. Para se determinar a altura ótima do vertedouro em razão da velocidade, um modelo mais completo é necessário, visto que a DTG e a variação desta não

foram representadas. Também de maneira previsível, os resultados indicaram que um aumento no tamanho das gotas facilita a separação. O escoamento na entrada não foi uniforme, sugerindo aos autores a instalação de uma placa perfurada na entrada do separador.

Vilagines e Akhras (2010) simularam o escoamento no interior de um separador trifásico de 45 m de comprimento. A malha do modelo continha mais de 100 milhões de células e foi processada por 93 processadores em paralelo. As simulações compararam dois internos instalados na entrada do separador que servem de quebradores de momento. O modelo multifásico de dois-fluidos foi empregado. Apesar de que segundo os autores a força interfacial predominante na interação óleo-água é o arrasto, as forças de sustentação, lubrificação de parede, massa aparente e dispersão turbulenta também foram incorporadas. É provável que as outras forças tenham sido incluídas por conta das interações água-gás e óleo-gás, uma vez que o separador é trifásico. Um único campo turbulento, com o modelo SST (*Shear Stress Transport*), foi resolvido para todas as fases. Apesar do alto custo computacional das simulações, equações de balanço populacional, quebra e coalescência não foram incluídas e o modelo não contemplou os efeitos da formação da zona densamente compactada.

Misra e outros (2017) empregaram a dinâmica dos fluidos computacional acoplada às equações de balanço populacional para modelar a separação gravitacional de uma mistura óleo/água com a presença de surfactantes. Ao invés de empregar um sistema bifásico, os autores utilizaram uma terceira fase, chamada de bicontínua, para modelar a camada intermediária rica em surfactantes presente no separador. A solução das EBPs foi realizada com o método QMOM com apenas os 4 primeiros momentos da distribuição. Quanto ao modelo de coalescência, os autores compararam os modelos de Prince e Blanch (1990), Grimes (2012) e uma eficiência de coalescência constante. Todas as simulações foram realizadas para escoamento laminar, tanto que a condição na entrada é tal que o número de Reynolds é 1. O modelo de dois fluidos foi empregado juntamente com o modelo de Schiller e Naumann (1935). A placa perfurada contida na geometria modelada como um meio poroso. A eficiência de coalescência foi adotada conforme a Equação 41, no entanto, o modelo de velocidade de aproximação crítica foi empregado, ao invés de modelo do tempo de drenagem do filme. Deste modo, a eficiência de coalescência foi dada por  $\lambda = \exp[-u_{rel}/u_{cri}]$ . Os efeitos dos surfactantes foram incorporados por meio de  $u_{cri}$ , que foi ajustado experimentalmente por meio de uma curva de decaimento, obtida visualmente. A formação de zona densamente compactada foi modelada com a terceira fase, chamada de bicontínua, e não

com uma camada de gotas de água com o movimento restringido, como acontece na prática. Como resultado, os autores verificaram que o modelo de coalescência constante não foi capaz de representar o processo de separação de forma adequada e que o modelo adaptado de Prince e Blanch (1990) de coalescência devido ao empuxo apresentou o melhor resultado. O modelo de Grimes (2012a) não apresentou bons resultados, no entanto, segundo os autores, ele é uma alternativa promissora para futuras simulações.

Panjwani e outros (2015) modelaram a separação gravitacional e incluíram a formação da zona densamente compactada. Os autores utilizaram curvas de decaimento de teste de garrafa para calibrar o modelo em CFD empregado na simulação de um separador contínuo horizontal. O modelo de arrasto não foi informado, no entanto, os autores empregaram o modificador de arrasto de Rusche e Issa (2000), Equação 22, com os seus coeficientes padrões. Quanto a zona densamente compactada, os autores assumem que o movimento das gotas é causado pela liberação, ou transferência de massa fase dispersa na zona compactada para a sua fase homogênea por meio da interface entre as zonas. Para representar a restrição dos movimentos da fase dispersa na zona compactada, os autores novamente modificaram a força de arrasto com o intuito de inibir o movimento das gotas. Esse novo modificador de arrasto depende da taxa de liberação, Equação 23, de Jeelani e Harland (1985, 1987). A coalescência binária durante a sedimentação foi modelada com o *kernel* de Grimes (2012), que não envolve a colisão devido à turbulência. A interface entre a zona compactada e a dispersa já separada foi modelada de tal forma que quando a concentração da fase dispersa atingisse o valor de 80%, a inversão de fase ocorreria e a concentração da fase dispersa seria de 100%. Contudo, os autores não informaram a técnica numérica empregada para modelar essa inversão de fase. Antes da modelagem do separador contínuo, os autores simularam a separação em batelada de um teste de garrafa para calibrar as variáveis dos submodelos de arrasto na zona compactada e de coalescência. Os dados experimentais e numéricos comparados foram o tempo final de separação e não o perfil das curvas de decaimento, resultando em uma calibração precária. Dessa forma, apenas a constante  $k_{CR}$  da frequência de colisão, das várias presentes no modelo dos autores, foi ajustada.

A partir dos trabalhos publicados na literatura que tratam de simulações da separação gravitacional em CFD, é possível perceber que hipóteses simplificadoras desviam os resultados numéricos dos resultados experimentais. Um resumo dos modelos empregados nos trabalhos apresentados é exposto na Tabela 2. No entanto, essas simplificações se fazem necessárias em razão da complexidade dos fenômenos, o que demanda um elevado custo

computacional. Entre as hipóteses simplificadoras estão, distribuição de tamanho monodispersa, negligência dos efeitos da coalescência (especialmente devido à velocidade de cremagem de gotas de tamanhos diferentes) e do arrasto devido às interações entre as gotas e falta de uma metodologia para representar a DTG com um número reduzido de classes de tamanhos de forma razoável. Apesar de inevitáveis, os erros associados as hipóteses simplificadoras podem ser reduzidas com o emprego adequado dos modelos segundo o regime de escoamento analisado.

Tabela 2 – Modelos Multifásicos, de Turbulência, Balanço Populacional, Coalescência e Arrasto e forma de representar a DTG por autor.

<b>Autores</b>	<b>Multifásico</b>	<b>Turbulência</b>	<b>DTG</b>	<b>Balanço Populacional</b>	<b>Coalescência</b>	<b>Arrasto</b>
Laleh, Svrcek e Monnery (2011)	DPM e VOF-DPM	$k - \varepsilon$	3 Classes Rosin e Rammler			
Laleh, Svrcek e Monnery (2012)	VOF-DPM	$k - \varepsilon$	Rosin e Rammler		Não informado	
Ghaffarkhah e outros (2017)	VOF-DPM	$k - \varepsilon$	3 Classes Rosin e Rammler			
Lu, Lee e Phelps (2007)	Mistura	$k - \varepsilon$	Constante			
Panda e outros (2017)	dois-fluidos	Laminar	Constante			Tsuchiya e outros
Ye e outros (2016)	dois-fluidos	$k - \varepsilon$	Constante			
McCleney e outros (2017)	dois-fluidos	$k - \varepsilon$	Constante			Morsi e Alexander
Oshinowo, Quintero e Vilagines (2017)	dois-fluidos	$k - \varepsilon$	24 Classes	Discreto Não-Homogêneo	Tsouris e Tavlarides; Coulaloglou e Tavlarides	Schiller e Naumann
Grime e outros (2017)					Grimes	Richardson e Zaki
Kharoua, Khezzar e Saadawi (2012a, b)	dois-fluidos	$k - \varepsilon$ de Mistura	Constante			Schiller e Naumann
Kharoua, Khezzar e Saadawi (2013)	dois-fluidos	$k - \varepsilon$	3 Classes Rosin e Rammler	Discreto Homogêneo	Luo	
Abdulkadir e Hernandez-Perez (2010)	dois-fluidos	$k - \varepsilon$	Constante			
Vilagines e Akhras (2010)	dois-fluidos	SST	Constante			
Misra e outros (2017)	dois-fluidos	Laminar	2 Classes, ou 4 Momentos	QMOM	Prince e Blanch, Grimes e Constante	Schiller e Naumann
Panjwani e outros (2015)	dois-fluidos	Laminar	Não informado	Não informado	Grimes	Modificado por Rusche e Issa

## 4. METODOLOGIA

De maneira semelhante aos estudos experimentais, o estudo da separação em separadores contínuos em CFD, que é de grande interesse para várias áreas de indústria, pode ser inicializado com análises do processo de separação em batelada, uma vez que os fenômenos envolvidos são os mesmos. Mesmo sendo experimentos mais simples do que os em separadores contínuos, os experimentos em batelada requerem um elevado grau de instrumentação e equipamentos para a obtenção das informações necessárias para a validação e implementação do modelo numérico, como por exemplo: DTG, tensão superficial, viscosidade e massa específica das fases e a distribuição espacial e temporal de  $\varphi$ , especialmente no que se refere a identificação das interfaces de sedimentação (ou cremagem) e coalescência.

Neste capítulo, a metodologia proposta para modelar a zona de sedimentação (ou cremagem) de uma dispersão de duas fases imiscíveis no regime de Stokes é apresentada. Com o objetivo de verificar e avaliar a metodologia proposta, as simulações foram comparadas com os dados experimentais de Jeelani, Hosig e Windhab (2005), pois, os autores apresentam os dados necessário para implementação e comparação dos resultados experimentais e numéricos.

### 4.1. DADOS EXPERIMENTAIS

Jeelani, Hosig e Windhab (2005) investigaram a separação gravitacional de misturas concentradas, com zona compactada inexistente ou com pequenas dimensões em relação a altura total da mistura. A mistura avaliada consistiu de uma fase aquosa desmineralizada contínua com viscosidade de 1 mPa.s e massa específica de 997 kg/m<sup>3</sup> e uma fase dispersa composta por um óleo vegetal (*rapeseed oil*) com viscosidade de 56,5 mPa.s e massa específica de 914 kg/m<sup>3</sup>, ambos a 25 °C. A tensão superficial média das fases era de 21,40 mN/m também a 25 °C.

O recipiente para o estudo do processo de separação consistiu de uma célula transparente de policarbonato com seção retangular de 40 mm por 66 mm e altura de 360 mm equipado com aparelho de perfil de densidade de raios  $\gamma$  para avaliar a concentração das fases ao longo da altura da célula de separação. A descrição detalhada deste dispositivo pode ser encontrada no trabalho dos autores.

As fases foram misturadas em com o homogeneizadores Polytron de rotação ajustável em um vaso com circulação externa de água para o ajuste termostático. A temperatura foi mantida em 24,5 °C. Após a formação da dispersão, a mistura era transferida para a célula de separação no qual a posição das interfaces de cremagem e coalescência eram registradas de forma visual. A DTG foi analisada com o método de difração a laser com uma amostra de 4 mL recolhida logo após sua formação e estabilização com 50 mL de água desmineralizada contendo 5 % em massa de dodecilsulfato de sódio. Esse processo foi repetido para diferentes rotações do homogeneizador e concentrações de óleo, conforme listado na Tabela 3. O resultado da DTG para cada experimento é exposto na Figura 14.

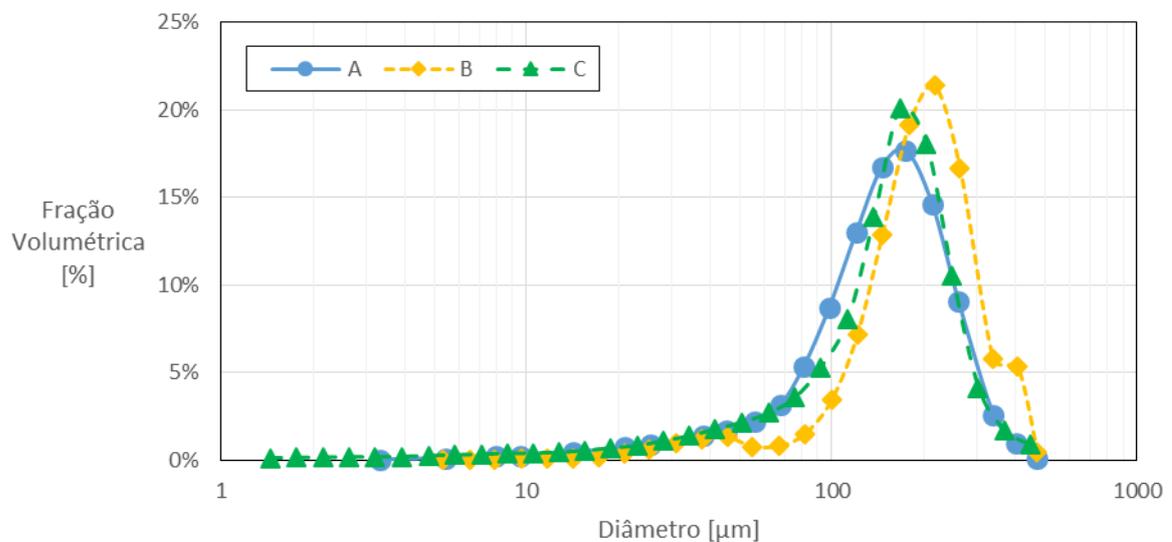
Tabela 3 – Valores experimentais das condições iniciais.

Parâmetros	Experimentos		
	A	B	C
Rotação do homogeneizador [rpm]	2200	1500	1500
Fração Volumétrica da Fase Dispersa, $\varphi$ [%]	39,3	39,4	29,1
Altura da Mistura, $h$ [mm]	283	282	285
Diâmetro Médio de Sauter, $d_{32}$ [ $\mu\text{m}$ ]	105,0	146,0	70,0
Diâmetro Médio em Volume, $d_o$ [ $\mu\text{m}$ ]	156,9	202,4	159,5

Fonte: Jeelani e Hosig e Windhab (2005).

Nota: Dados adaptados pelo autor.

Figura 14 – Distribuição do tamanho de gotas de óleo inicial.



Fonte: Jeelani e Hosig e Windhab (2005).

Nota: Dados adaptados pelo autor.

## 4.2. SOFTWARES

Os principais *softwares* utilizados foram: DesignModeler<sup>®</sup>, Meshing<sup>®</sup> 15.0 e 18.2, Ansys Fluent<sup>®</sup> 15.0 e 18.2 e Ansys CFD-Post<sup>®</sup> 15.0 e 18.2. Além dos modelos já inclusos no Ansys Fluent<sup>®</sup> 15.0 e 18.2, funções definidas pelo usuário, ou UDFs (*user defined functions*), foram escritas em linguagem C para incluir os modelos de coalescência e modificador de arrasto.

## 4.3. MODELAGEM

A modelagem em CFD foi realizada com o modelo multifásico de dois-fluidos acoplados às equações de balanço populacional. A escolha dos modelos de arrasto e coalescência foi baseada na literatura, conforme discutido nos Capítulos de Fundamentação Teórica e Revisão Bibliográfica.

### 4.3.1. Modelagem do Escoamento Multifásico

O escoamento multifásico foi modelado com o modelo E-E de dois-fluidos, visto a elevada concentração da fase dispersa, conforme apresentado nas Equações 50-53, de conservação de massa e quantidade de movimento para a fase contínua e a fase dispersa, respectivamente. Como não há mudança de fase e as fases são imiscíveis e consideradas incompressíveis, a derivada temporal e o fluxo de massa nas equações da continuidade para ambas as fases são zero, Equações 50 e 51. Quanto as equações de conservação de quantidade de movimento, Equações 52 e 53, apenas o fluxo de massa é igual a zero. Além disso, a fonte de quantidade de movimento representada pela força da gravidade é paralela ao eixo vertical da célula de separação. A troca de quantidade de movimento entre as fases foi modelada apenas em função do arrasto das gotas na mistura, Equação 54.

$$\nabla \cdot (\varphi_c \rho_c \mathbf{U}_c) = 0 \quad (50)$$

$$\nabla \cdot (\varphi_d \rho_d \mathbf{U}_d) = 0 \quad (51)$$

$$\frac{\partial(\varphi_c \rho_c \mathbf{U}_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_c \rho_c \mathbf{U}_c \mathbf{U}_c) = -\varphi_c \nabla P - \nabla \cdot (\varphi_c \tau_c) + \varphi_c \rho_c g + \sum_{d=1,}^M F_{dc} \quad (52)$$

$$\frac{\partial(\varphi_d \rho_d \mathbf{U}_d)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_d \rho_d \mathbf{U}_d \mathbf{U}_d) = -\varphi_d \nabla P - \nabla \cdot (\varphi_d \tau_d) + \varphi_d \rho_d g + \sum_{d=1,}^M F_{dc} \quad (53)$$

$$F_{dc} = \frac{3}{4} C_{Dm} \varphi_c \varphi_d \rho_d |\mathbf{U}_d - \mathbf{U}_c|^2 \quad (54)$$

onde  $M$  é o número de classes de tamanhos de gotas.

#### 4.3.2. Modelagem do Arrasto

Como exposto nos Capítulos 2 e 3, o principal modelo de arrasto empregado nas simulações de separação gravitacional é o de Schiller e Naumann (1935). Quanto aos efeitos da concentração da fase dispersa e fluidez das gotas discutidos na Seção 2.2, é necessário avaliar a circulação interna, a deformabilidade e as interações das gotas.

Quanto a circulação interna, ela é negligenciada caso o número de Eötvös seja menor do que 4 e/ou o sistema não seja puro. O número de Eötvös é dado pela Equação 10, e para uma gota com 1,5 mm de diâmetro no sistema estudado no presente trabalho, por exemplo, ele é igual a 0,152. Logo, mesmo que o sistema estudado tenha elevado grau de pureza, o seu número de Eötvös é menor do que 4 e a circulação interna pode ser desprezada.

Quanto a deformação das gotas, ela pode ser avaliada pela Figura 2. Como os números de Reynolds e de Eötvös esperados não devem ultrapassar o valor de 1, os efeitos da deformação também foram desprezados.

Devido a sedimentação de um grande volume de gotas, a fase contínua é deslocada no sentido oposto e esse efeito é indiretamente levando em conta pela definição de fração volumétrica do modelo multifásico de dois-fluidos. Conseqüentemente, um fator de correção para levar em conta o fluxo da fase contínua não é necessário.

Quanto a interação gota-gota, não é considerada pelos modelos tradicionais em CFD. Dessa forma, o fator de correção proposto por Richardson e Zaki (1954) foi empregado para

corrigir o coeficiente de arrasto devido às interações entre as gotas, pois, este leva em conta o regime de escoamento das partículas por meio do expoente  $n$  que é função do número de Reynolds. A velocidade empregada no modelo foi a velocidade calculada pelo *solver* do *software* e o expoente  $n$  foi considerado igual a 4,65 na calibração dos modelos de coalescência (SEADER; HENLEY; ROPER, 2010; RICHARDSON; ZAKI, 1954).

Isto posto, o modelo de arrasto empregado nas simulações é o modelo de Schiller e Naumann (1935) para  $Re < 1000$ , definido pela Equação 14, em conjunto com o modificador de arrasto proposto por Richardson e Zaki (1954), Equação 21, implementado por meio de uma UDF e aplicado até que a fase dispersa fosse considerada como contínua, Equação 55.

$$C_{Dm} = \frac{24(1 + 0,15Re^{0,687})}{Re(1 - \varphi_d)^n} \quad (55)$$

#### 4.3.3. Solução das Equações de Balanço Populacional

A representação da DTG foi feita com as Equações de Balanço Populacional, que na ausência do fenômeno de quebra ficam conforme a Equação 56, em função apenas do modelo de coalescência  $\beta(d_1, d_2, t)$ . A variação dos diâmetros nessa equação influencia diretamente o termo de troca de quantidade de movimento entre as fases, Equação 54. As EBPs foram resolvidas pelo método Discreto Heterogêneo, visto que um campo de velocidade individual de cada classe de tamanho de gota é requerido pelos modelos de coalescência. Apesar de promissor, o método DQMOM na versão atual do *software* empregado permite a modelagem com apenas 3 classes de tamanho de gotas e, portanto, este método não foi empregado nas simulações. Por outro lado, método de classes com o emprego das UDFs permitiu o emprego de até 10 classes, no entanto exige um conhecimento prévio da evolução da DTG. A metodologia para a previsão da DTG futura foi a proposta por Wang e Davis (1996) e empregada por Jeelani e Hosig e Windhab (2005) e será apresentada na Seção seguinte.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(d, t)}{\partial t} + \Delta \cdot (\mathbf{U}_k f(d, t)) \\ = \frac{1}{2} \int_0^{d_1} \beta(d_1 - d_2, d_2, t) f(d_1 - d_2, t) f(d_2, t) dd_2 \\ - \int_0^\infty \beta(d_1, d_2, t) f(d_1, t) f(d_2, t) dd_2 \end{aligned} \quad (56)$$

#### 4.3.4. Modelagem da Coalescência

Os modelos de coalescência foram implementados por meio de funções definidas pelo usuário, ou UDFs, e então interpretadas pelo *software* Ansys Fluent® 15.0 e 18.2. Como discutido na Seção 2.6, os modelos de coalescência se dividem em duas classificações, uma quanto ao mecanismo de colisão e a outra quanto a eficiência de coalescência.

A frequência de colisão foi modelada pela Equação 34 em todos os casos, onde a velocidade característica é a diferença na velocidade de sedimentação de gotas de diâmetros diferentes, obtida diretamente pelo *solver* do *software* utilizado para cada célula do domínio.

Quanto a eficiência de coalescência, três modelos foram selecionados com base na literatura. O primeiro assume uma eficiência constante (LIAO; LUCAS, 2010), o segundo foi o modelo de velocidade de aproximação crítica, Equação 37 (LEHR; MEWES, 2001), e o terceiro o modelo de drenagem do filme da fase contínua para regime laminar com interface deformável parcialmente móvel de Chesters (1991), Equação 49.

Os três modelos de coalescência apresentam parâmetros de ajuste que podem ser calibradas de acordo com o sistema analisado. A calibragem se deu inicialmente para o Experimento A e posteriormente para os Experimentos B e C. No caso da eficiência constante Equação 57, a constante é a própria eficiência ( $\lambda$ ), no modelo de velocidade de aproximação crítica, Equação 58, a variável de ajuste é a velocidade crítica de aproximação das gotas ( $u_{cri}$ ) e por último, no modelo a drenagem, Equação 59, a constante  $C$  pode assumir valores distintos para cada sistema.

$$\beta_{ec}(d_1, d_2) = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2 |u_1 - u_2| \lambda \quad (57)$$

$$\beta_{vc}(d_1, d_2) = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2 \min(|u_1 - u_2|, u_{cri}) \quad (58)$$

$$\beta_{td}(d_1, d_2) = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2 |u_1 - u_2| \exp \left[ -C \left( \frac{\mu_d}{\mu_c} \right) \left( \frac{\mu_c u_{car}}{\sigma} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{8\pi\sigma d_{eq}^2}{C_{Ham}} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (59)$$

A determinação dos parâmetros que melhor se ajustam aos dados experimentais foi realizada por meio da comparação do erro, ou a diferença percentual entre os dados das

curvas de decaimento experimentais e os resultados das curvas de decaimento das simulações, Equação 60. Por fim comparativo, os erros dos modelos numéricos foram comparados com os erros do modelo analítico de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). O erro médio, bem como a raiz do valor quadrático médio dos erros (do inglês *root mean square*, RMS), ou valor eficaz, Equações 61 e 62, respectivamente, também foram calculados e empregados para avaliar o ajuste das curvas numéricas com os dados experimentais.  $j$  é o número de pontos experimentais.

$$Erro = \frac{|Posição da Interface Experimental - Posição da Interface Numérica|}{Altura Inicial da Mistura} \quad (60)$$

$$Erro\ médio = \sum_{i=1}^j \frac{Erro_i}{j} \quad (61)$$

$$RMS = \sqrt{\sum_{i=1}^j \frac{Erro_i^2}{j}} \quad (62)$$

Para o modelo de eficiência constante, não há um procedimento para a determinação do seu parâmetro de ajuste. Dessa forma, o modelo foi calibrado por tentativa e erro, iniciando-se com os valores de 3,0, 5,0, 7,0 e 9,0 % para o Experimento A. Para o modelo de velocidade de aproximação crítica, o valor inicial foi 0,001 m/s, como sugerido por Misra e outros (2017). Segundo Chesters (1991) para o modelo de drenagem do filme o valor da constante  $C$  é próximo de 1. Logo após a determinação dos parâmetros de ajuste dos modelos de coalescência por meio da comparação dos erros em cada ponto experimental, da média destes e do RMS para o Experimento A, os mesmos parâmetros foram empregados nas simulações dos Experimentos B e C, uma vez que as propriedades dos sistemas analisados permanecem as mesmas e apenas a DTG e a fração volumétrica das fases mudam. Dessa forma, esperasse avaliar a aplicabilidade do modelo quando há uma mudança na DTG ou na fração volumétrica das fases.

Segundo Jeelani, Hosig e Windhab (2005), o Experimento C apresentou uma interface de cremagem turva e, portanto, a determinação da posição desta interface de forma visual não foi possível. Assim, os resultados das simulações do Experimento C foram comparados com os dados experimentais apenas para a interface de coalescência e a interface de cremagem

tomada como referência foi a obtida pelo emprego do modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).

#### 4.3.5. Representação da DTG

A distribuição do tamanho de gotas é de grande importância para a representação da separação de dispersões, pois, misturas reais são polidispersas. A representação exata de todos os tamanhos de gotas presentes em uma dispersão real não é viável computacionalmente, visto que uma quantidade demasiada de equações de conservação seria necessária. Logo, a DTG da mistura deve ser representada com um número finito de faixas de tamanhos. Quanto maior o número de faixas de tamanhos, menor é o erro devido à discretização da DTG, no entanto, maior se torna o custo computacional. Assim, de forma semelhante ao teste de malha, um teste de independência do número de classes de tamanhos foi proposto após os testes de malha e passo de tempo. Os testes de discretização foram inicialmente realizados para o Experimento A sem o emprego das UDFs com 3, 4, 6 e 8 classes de tamanhos. Logo após, os testes foram feitos para os Experimentos A e B com o emprego das UDFs de modificador de arrasto e eficiência de coalescência constante e com o método discreto de solução das EBP, conforme a Tabela 4. As UDFs de modificador de arrasto e eficiência de coalescência constante foram empregadas com o expoente  $n$  igual a 4,1 e a eficiência igual a 5,0 %. Um número maior de faixas não foi testado devido a limitação do *software*.

Tabela 4 – Número de faixas de tamanhos de gota verificadas.

DTG inicial	Extras devido à coalescência
3	2
4	3
6	4

Fonte: Autor.

As DTGs exibidas na Figura 14 foram discretizadas por meio da integração numérica, alcançando um resultado semelhante ao da Figura 10. A integração foi realizada com a Quadratura de Gauss-Legendre de integração de polinômios, segundo a Equação 63. Dessa forma, o primeiro passo era aproximar a DTG de uma ou mais funções polinomiais. No

presente estudo, todas as DTG foram aproximadas por 2 polinômios, apresentados no ANEXO A. Pelo método, os limites de integração devem ser -1 e 1, logo a variável  $d$  é substituída por uma variável  $x$ . As raízes do polinômio ortogonal da nova função  $g(x)$ ,  $x_k$ , podem ser aplicadas a Equação 64 para encontrar os valores de  $d_k$  que correspondem aos diâmetros de referência que representam as classes de tamanhos de gotas. Tanto as raízes do polinômio  $g(x)$  e os valores dos pesos  $A$  são tabelados em função do número de classes  $M$ . Esses valores são apresentados na Tabela 5.

$$\int_{d_{menor}}^{d_{maior}} f(d) dd = \int_{-1}^1 g(x) dx \approx \sum_{k=0}^M A_k g(x_k) \quad (63)$$

$$d_k = \frac{d_{max} + d_{min}}{2} + \frac{x_k (d_{max} - d_{min})}{2} \quad (64)$$

Assim, a integral é dada pela Equação 65, onde cada termo do somatório dividido pelo somatório total corresponde fisicamente ao percentual da fração volumétrica da faixa.

$$\int_{d_{menor}}^{d_{maior}} f(d) dd \approx \sum_{k=0}^M A_k f(d_k) \frac{(d_{max} - d_{min})}{2} \quad (65)$$

Tabela 5 – Coeficientes Gauss-Legendre.

Número de Faixas, $M$	$x_k$	$A$
2	-0,5773503	1
	0,5773503	1
3	-0,7745967	0,55555
	0,000000	0,88888
	0,7745967	0,55555
4	-0,8611363	0,34785
	-0,339981	0,65215
	0,339981	0,65215
	0,8611363	0,34785

Fonte: Autor.

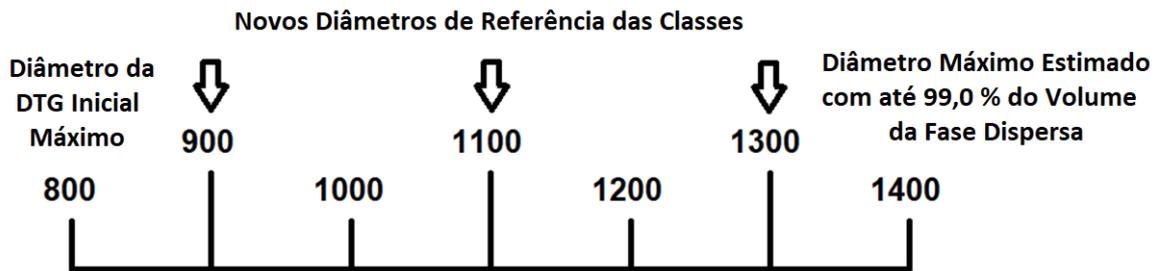
Além das gotas inicialmente presentes na mistura, as gotas futuras, aquelas que nascerão devido à coalescência, também precisam ser levadas em conta quando o método discreto é utilizado. O diâmetro médio pode ser estimado por um polinômio de terceiro grau com coeficientes obtidos por meio de curva de decaimento do teste de garrafa (WANG; DAVID, 1996). O diâmetro médio ao longo do tempo é dado pela Equação 66, onde  $c_0 = 1$ ,  $c_1 = 6t_m/t_f(t_f - 3t_m)$ ,  $c_2 = -3(t_m + t_f)/t_f^2(t_f - 3t_m)$  e  $c_3 = 2/t_f^2(t_f - 3t_m)$ . Sendo que  $t_f$  é o tempo final de separação e  $t_m$  é o tempo no qual a velocidade de sedimentação é máxima, ou seja, no ponto de inflexão.

$$d = d_0\{c_0 + c_1t + c_2t^2 + c_3t^3\} \quad (66)$$

Assim, o perfil da distribuição do tamanho de gotas no ponto de inflexão, quando o tamanho médio é máximo, foi estimado em duas etapas. Primeiro, os diâmetros iniciais foram multiplicados por um fator até que o diâmetro médio se tornasse igual ao estimado pela Equação 66 no ponto de inflexão. Segundo, a integral da nova distribuição é dada pela multiplicação da Equação 65 na condição inicial pela porcentagem de fase dispersa ainda presente na região de sedimentação que pode ser obtida pelas curvas de decaimento.

Por fim, os diâmetros pivôs das classes extras foram determinados da seguinte maneira: a faixa de tamanho entre o diâmetro máximo previsto pelo procedimento descrito no parágrafo anterior e o maior diâmetro da distribuição original foi dividida em partes iguais. O número de divisões depende do número de faixas extras. Por exemplo, se o diâmetro máximo estimado é de 1400  $\mu\text{m}$  e o diâmetro máximo da DTG inicial é 800  $\mu\text{m}$  e as novas gotas serão representadas por 3 classes, os diâmetros de referência dessas classes serão 900, 1100 e 1300  $\mu\text{m}$ , como exemplificado no Figura 15. Para evitar que a largura das classes extras se tornasse demasiadamente grande e, por conseguinte, perdessem a capacidade de representar os novos diâmetros, os maiores tamanhos de gota estimados no ponto de inflexão pelo procedimento descrito no parágrafo anterior com fração volumétrica acumulada inferior a 1,0 % foram ignorados. Dessa forma, caso a estimativa do maior tamanho de gota na Figura 15 fosse de 1700  $\mu\text{m}$ , mas as gotas com diâmetros até 1400  $\mu\text{m}$  representassem 99,0% do volume da fase dispersa no ponto de inflexão, as gotas com tamanhos entre 1700 e 1400  $\mu\text{m}$  não seriam levadas em conta na determinação dos pivôs das novas classes descrito acima.

Figura 15 – Exemplificação da determinação dos diâmetros de referência das classes extras.



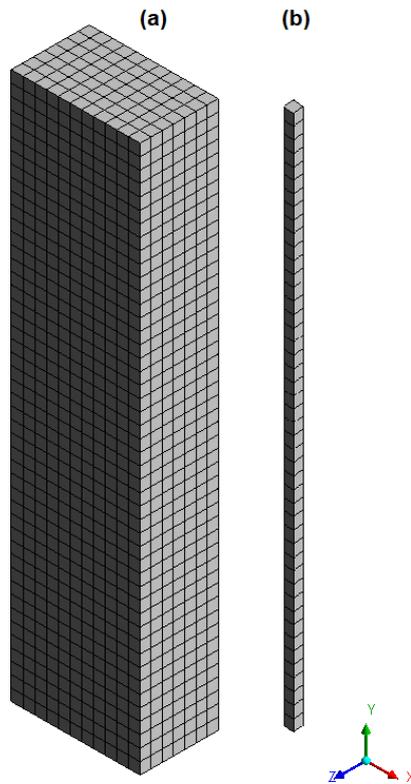
Fonte: Autor.

#### 4.3.6. Geometria em CAD

Como o termo fonte nas equações de conservação de quantidade de movimento, ou seja, a força da gravidade, é paralelo ao eixo vertical da célula de separação e a velocidade inicial das gotas é zero, as componentes do vetor velocidade no plano normal a aceleração da gravidade continuarão iguais a zero ao longo da simulação com o modelo de dois-fluidos. Além disso, como as gotas estão no regime de Stokes, o gradiente de velocidade nas regiões próximas as paredes foi desprezado e a condição de contorno de simetria foi empregada. Isto posto, e com o propósito de reduzir o custo computacional, as simulações foram realizadas em uma geometria unidimensional (DAMIAN, 2007; LATSA, 1999) que consistiu em uma coluna de elementos com altura total igual à altura dos experimentos de acordo com a Tabela 3, exemplificada na Figura 16.

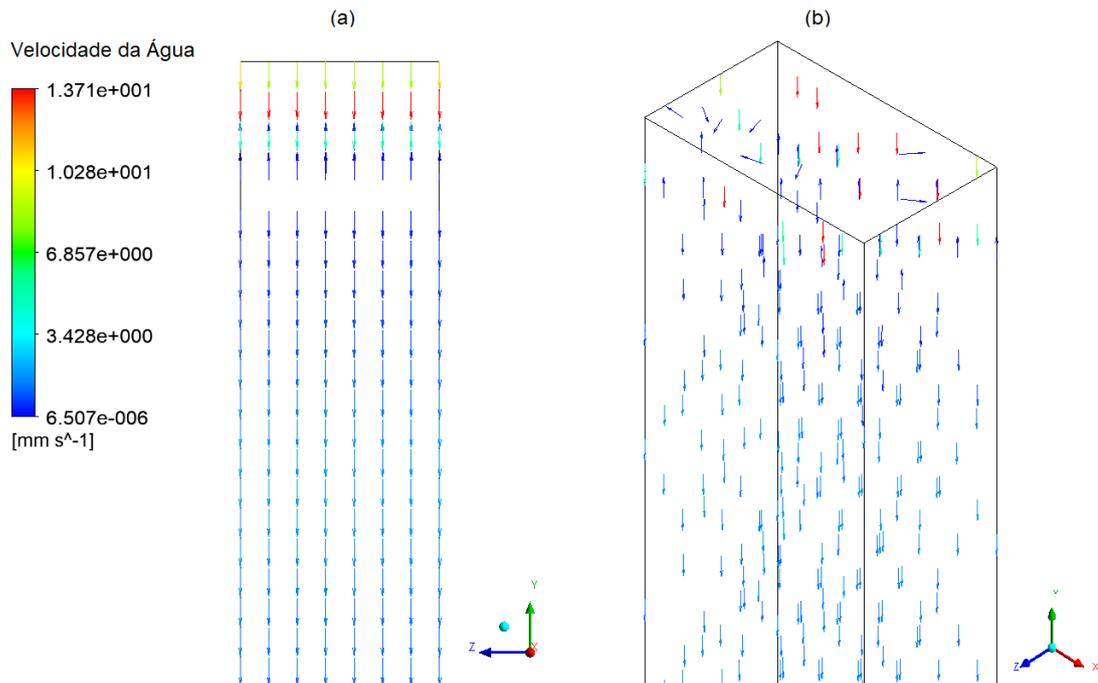
A validade dessa análise em 1D é demonstrada na Figura 17, na qual o vetor velocidade da fase contínua na geometria em 3D com uma malha quadrilateral com elementos de 6 mm de comprimento na vista lateral, Figura 17a, e na vista isométrica, Figura 17b. Assim, com exceção de alguns vetores na superfície superior da célula, todos os vetores estão na direção vertical, paralela à aceleração da gravidade, sugerindo que uma malha com apenas uma coluna de elementos pode ser empregada para representar a célula de separação.

Figura 16 – Geometria da célula de separação em 3D (a) e 1D (b) na malha com elementos de 6 mm.



Fonte: Autor.

Figura 17 – Vetores resultantes do campo de velocidade na malha de 6 mm na vista lateral (a) e vista isométrica (b) da célula de separação em 3D.



Fonte: Autor.

#### 4.3.7. Malha e Passo de Tempo

Além da necessidade de verificação da independência da malha nos resultados das simulações, a independência do passo de tempo precisou ser verificada concomitantemente. Todas as malhas são estruturadas e formadas por elementos retangulares com diferentes dimensões, conforme apresentadas na Tabela 6. Todas as malhas foram verificadas para os passos de tempo de 0,01; 0,005 e 0,001 segundos.

Tabela 6 – Malhas e Passos de Tempos empregados para verificação da independência destes nos resultados das simulações.

Tamanho do Elemento	Número de Células	Número de Nós
4 mm	70	284
6 mm	46	188
8 mm	35	144
10 mm	27	112

Fonte: Autor.

Os testes para definir o tamanho dos elementos da malha e o passo de tempo foram primeiramente realizados para as condições do Experimento A (Tabela 3) sem a inclusão das UDFs com modelos de coalescência e modificador de arrasto. Os perfis das interfaces de sedimentação com 90, 80 e 70 % v/v de fase contínua foram então comparados até o tempo de 60s. Logo após, as UDFs de modificador de arrasto e eficiência constante foram incluídas com modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954) aplicado com  $n$  igual a 3 até que a fração volumétrica da fase dispersa atingisse o valor de 75% (conforme proposto por Jeelani e Hosig e Windhab (2005)), onde, teoricamente, a fase dispersa se tornaria contínua. A eficiência de coalescência foi de 1,5 %. Os valores de  $n$  e  $\lambda$  foram definidos apenas para comparar os resultados dos perfis do modificador de arrasto e da fração volumétrica da fase contínua ao longo da altura da célula de separação em diferentes malhas, e não para representar o processo de separação com os valores dos coeficientes apropriados.

#### 4.4. MODELOS E EQUAÇÕES EMPREGADAS

Os modelos empregados nas simulações, bem como suas equações, são resumidos e apresentados na Tabela 7. Em seguida, na Figura 18 é apresentado um diagrama relacionando

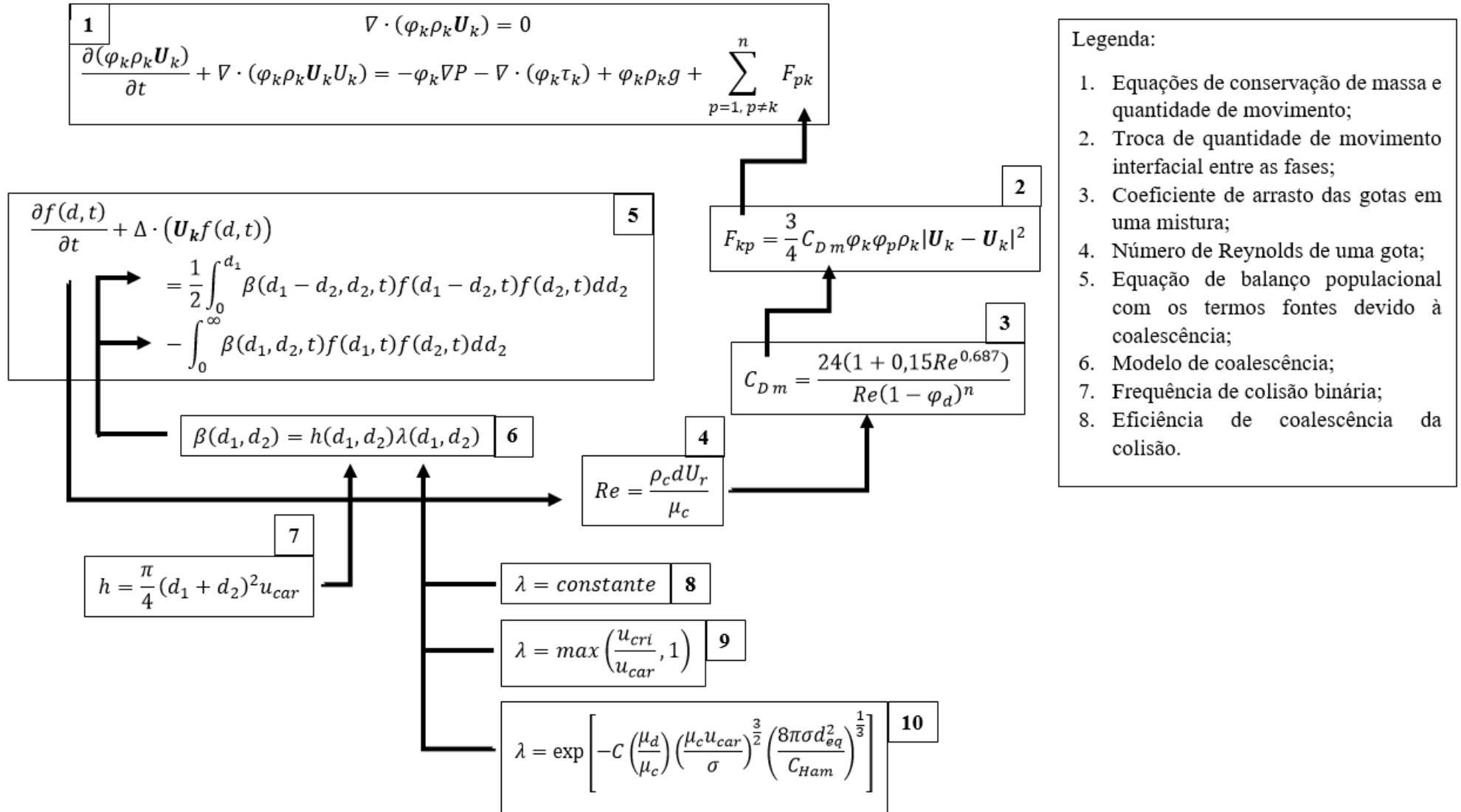
as equações de conservação de massa e quantidade de movimento com as equações de balanço populacional e os modelos de arrasto e coalescência utilizados na metodologia proposta para modelar a separação gravitacional de dois líquidos imiscíveis.

Tabela 7 - Modelos empregados nas simulações.

<b>Fenômeno</b>	<b>Modelo</b>	<b>Equação</b>
Discretização da DTG	Gauss-Legendre	$\int_{d_{menor}}^{d_{maior}} f(d) dd \approx \sum_{k=0}^M A_k f(d_k) \frac{(d_{max} - d_{min})}{2}$
Variação da DTG com o tempo	Wang e Davis (1996)	$d = d_0 \{c_0 + c_1 t + c_2 t^2 + c_3 t^3\}$
Modificador de Arrasto	Richardson e Zaki (1954)	$\frac{1}{(1 - \varphi_d)^{4,65}}$
	<i>Kernel de coalescência</i>	$\beta(d_1, d_2) = h(d_1, d_2) \lambda(d_1, d_2)$
	Frequência de colisão	$h(d_1, d_2) = \frac{\pi}{4} (d_1 + d_2)^2  u_1 - u_2 $
Coalescência	Eficiência constante	$\lambda = constante$
	Velocidade de aproximação crítica	$\lambda = \max\left(\frac{u_{cri}}{u_{car}}, 1\right)$
	Tempo de drenagem do filme	$\lambda(d_1, d_2) = \exp\left[-C \left(\frac{\mu_d}{\mu_c}\right) \left(\frac{\mu_c u_{car}}{\sigma}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{8\pi\sigma d_{eq}^2}{C_{Ham}}\right)^{\frac{1}{3}}\right]$

Fonte: Autor.

Figura 18 – Diagrama com a relação das equações de conservação com os modelos de arrasto e coalescência empregados na modelagem.



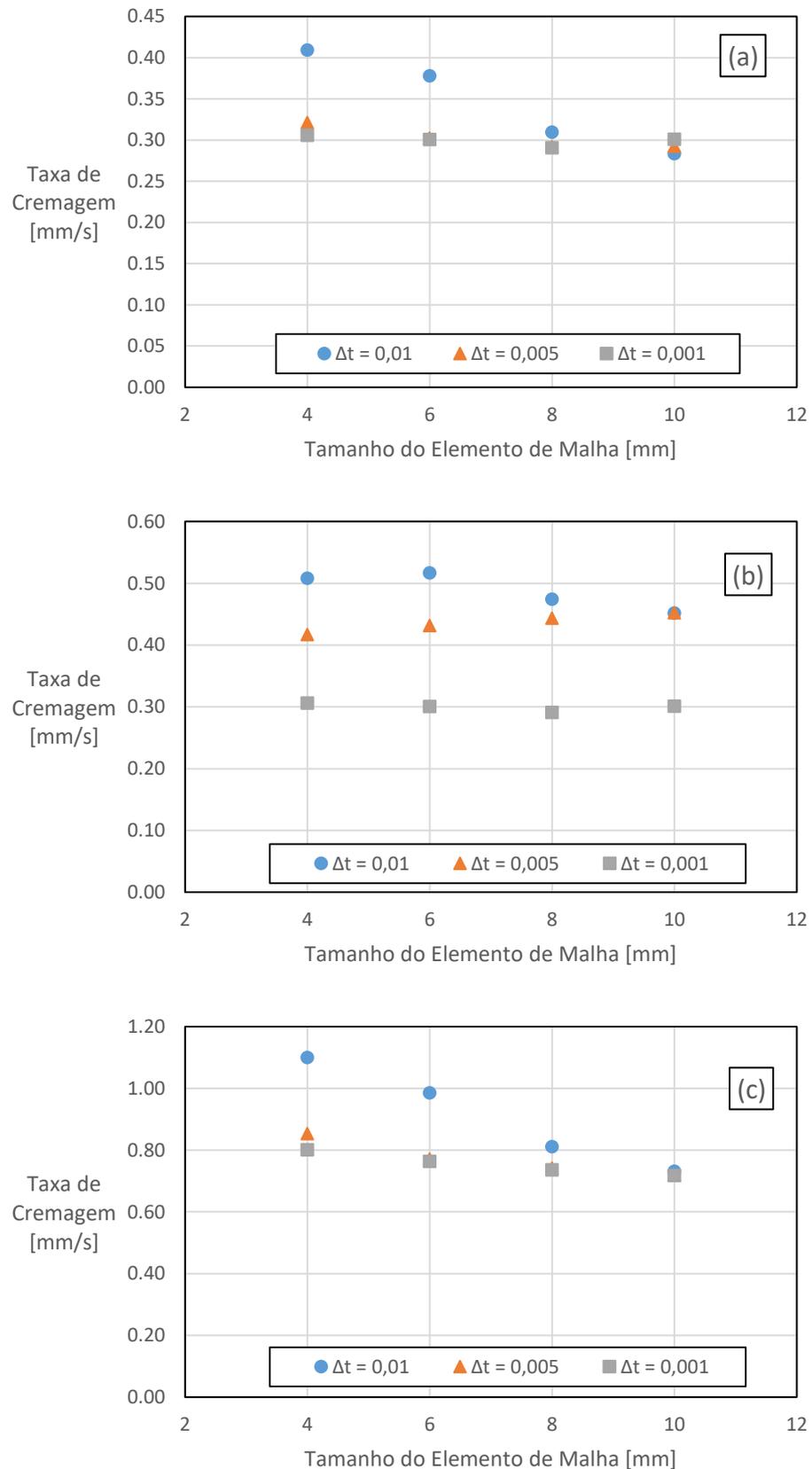
## 5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O objetivo deste Capítulo é apresentar ao leitor os resultados alcançados com o modelo numérico empregado para modelar a zona de cremagem laminar de uma separação gravitacional em batelada. Este Capítulo se inicia com os resultados dos testes de malha e passo de tempo, nos quais a independência das simulações quanto a estes parâmetros foi verificada. Logo após, os resultados da discretização da DTG foram apresentados e discutidos na Seção 5.2. Por fim, os resultados obtidos com o emprego das funções definidas pelo usuário para modelar os mecanismos governantes de cremagem (ou sedimentação) e coalescência foram comparados com os dados experimentais de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) a fim de discutir e avaliar a validade e aplicabilidade dos modelos em diferentes condições iniciais. A definição da fração volumétrica na fase dispersa de interface de coalescência é uma importante informação de entrada do modelo numérico, uma vez que é ela que determinar a faixa de aplicação do modificador de arrasto, este que por sua vez influencia na taxa cremagem. Assim, jugou-se necessário a inclusão da Seção 5.3.2, que discute a definição da interface de coalescência dos experimentos B e C (que não dispõe do perfil de concentração experimental), entre as Seções que discutem a calibração dos modelos de coalescência, visto que os mecanismos de cremagem e coalescência, que além de concomitantes, têm influência mútua.

### 5.1. TESTE DE TAMANHO DO ELEMENTO DA MALHA E PASSO DE TEMPO

As taxas de cremagem das interfaces com 90, 80 e 70% v/v de  $\varphi_c$  para o Experimento A são apresentadas na Figura 19 para as diferentes malhas e passos de tempo. Como pode ser observado, a independência da malha não pôde ser determinada apenas com base na Figura 19, mas somente a independência do passo de tempo, que no valor de 0,001 s proporcionou uma taxa de cremagem das diferentes interfaces praticamente independente do tamanho dos elementos da malha.

Figura 19 – Taxa de cremagem das interfaces de 90 (a), 80 (b) e 70% (c) (v/v) de concentração de fase contínua parametrizadas com diferentes malhas com elementos com tamanhos de 4, 6, 8 e 10 mm.



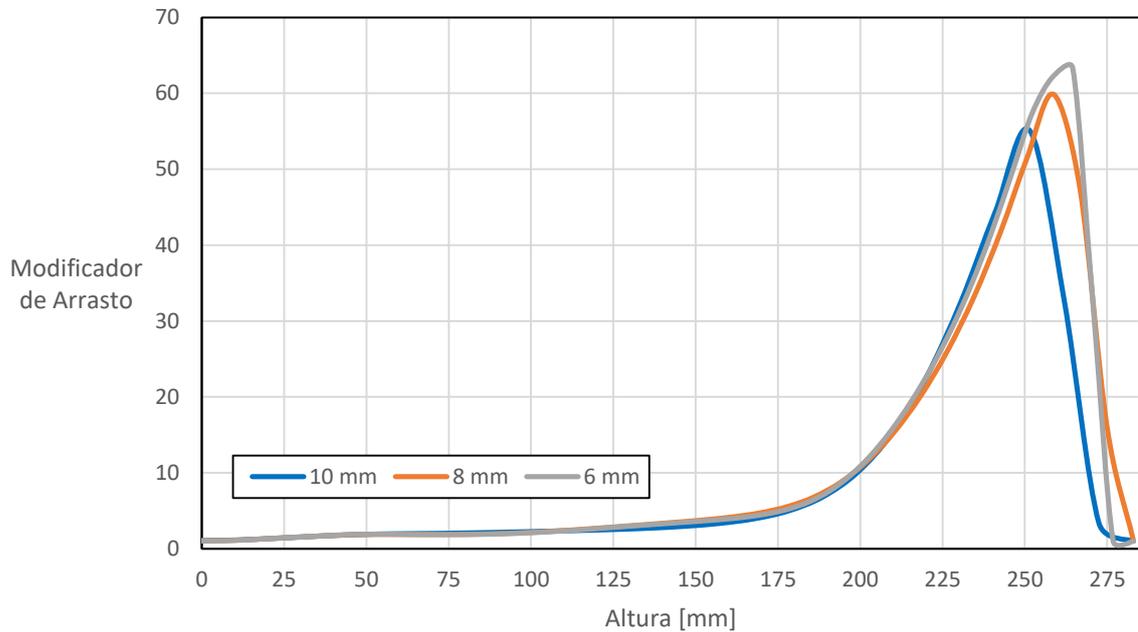
Fonte: Autor.

O modelo de dois-fluidos assume que as partículas da fase dispersa são grandes o suficiente para serem consideradas como um meio contínuo e pequenas o suficiente em relação ao escoamento macroscópico para serem consideradas dispersas. Logo, o tamanho mínimo dos elementos da malha deve ser observado. Assim, além de elevar o custo computacional, quanto mais refinada a malha, mais próximo do tamanho das gotas da fase dispersa os seus elementos se tornam. Como consequência, é provável que as interações das simulações tendam a não convergir (ENWALD; PEIRANO; ALMSTEDT, 1996). Das malhas analisadas, a malha com elementos de 4 mm de dimensão apresentou um certo grau de instabilidades (os resíduos das interações não atingiram o valor pré-estabelecido de  $10^{-3}$ ), portanto, a sua escolha foi descartada, uma vez que a inclusão das funções de coalescência e do modificador de arrasto por meio das UDFs iria apenas agravar tais problemas.

Dessa forma, a escolha da malha se resume em avaliar o equilíbrio entre a resolução do escoamento e a estabilidade das simulações. O perfil do valor do modificador de arrasto ao longo da altura da célula de separação é apresentado na Figura 20. O modificador de Richardson e Zaki (1954) com o expoente  $n$  igual a 3 foi aplicado até a fração volumétrica da fase dispersa de 75 % (v/v). Na interface de coalescência, o modificador de arrasto deve ser igual a 64 (Equação 21), e logo após, na fase oleosa contínua, igual a 1. Assim, mesmo que a taxa de cremagem para o passo de tempo de 0,001 s seja virtualmente igual para as três malhas, é possível perceber que a resolução da malha de 6 mm é melhor do que as de 8 e 10 mm. Isso é demonstrado pelo fato de que as malhas de 8 e 10 mm não permitiram ao modificador de arrasto atingir o valor de 64, além de uma transição mais gradual no valor do modificador através da interface de coalescência.

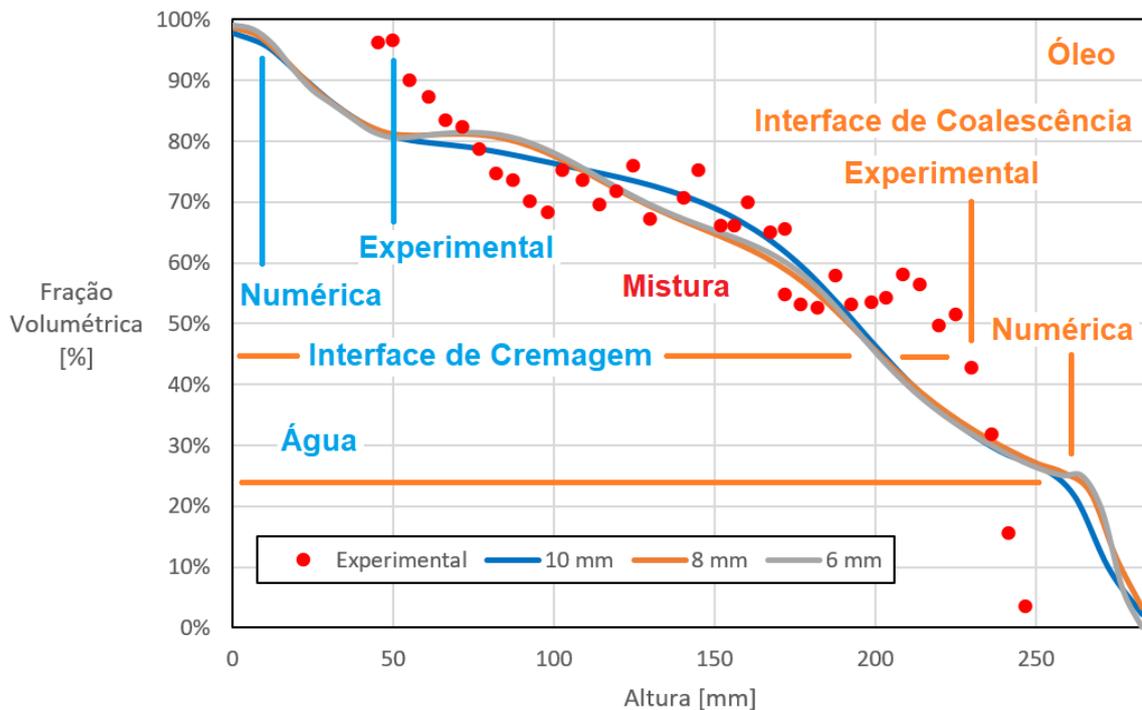
Os perfis da fração volumétrica da fase contínua experimental e numéricos com as malhas de 6, 8 e 10 mm são apresentados na Figura 21. O perfil com a malha de 10 mm se distanciou do perfil com as malhas de 6 e 8 mm, indicando que mesmo que a taxa de cremagem aparente ser independente da malha, o perfil de fração volumétrica é dependente da malha. Mesmo com o emprego das UDFs, a taxa de cremagem continuou sendo independente da malha para o passo de tempo de 0,001 s, visto que as posições das interfaces de cremagem e coalescência coincidem para as malhas de 6, 8 e 10 mm.

Figura 20 – Perfil do modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954) com  $n$  igual a 3 aplicado até a interface de coalescência com 75% de fração volumétrica de fase dispersa para as malhas de 6, 8 e 10 mm.



Fonte: Autor.

Figura 21 - Perfil da fração volumétrica da fase contínua no tempo de 2 min experimental e numérico com as malhas de 6, 8 e 10 mm.



Fonte: Autor.

Como era esperado, a malha com 6 mm apresentou a melhor resolução do perfil de  $\varphi_c$ , Figura 21. Ademais, como é possível perceber na Figura 21, o perfil numérico de  $\varphi_c$  não concordou com o perfil experimental obtido por Jeelani, Hosig e Windhab (2005). A interface entre a zona de cremagem e a segunda fase homogênea (interface de coalescência) é melhor representada pela fração volumétrica de 55% e não de 75% como sugerido por Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e empregado no modelo numérico da Figura 21. Segundo a Equação 21, quanto maior a fração volumétrica da fase dispersa na interface de coalescência, maior é o valor máximo do modificador de arrasto, o que influencia na taxa de cremagem das gotas e no perfil da fração volumétrica das fases. O valor de 75% foi sugerido por ser o fator de empacotamento de esfera rígidas. No entanto, é possível que as gotas coalesçam com sua fase homogênea e deixem a mistura em uma região de fração volumétrica menor do que 75%, uma vez que a zona densamente compactada não é formada no presente estudo. Assim, com base na Figura 21, o modificador de arrasto aplicado nas simulações daqui em diante será inicialmente aplicado até que a concentração da fase dispersa atinja o valor de 55%. Contudo, esse valor é para os dados experimentais do Experimento A e deve ser analisado para Experimentos B e C, com diferentes DTGs e fração volumétrica.

Como a geometria utilizada nas simulações é 1D e, portanto, o número de elementos de malha é pequeno, entre 27 a 70, o custo computacional não foi critério determinante para a escolha da malha. Contudo, quando a modelagem for realizada para um separador contínuo, o tamanho dos elementos será um importante critério para a escolha da malha. Assim, com o objetivo de comparar a influência do tamanho dos elementos de malha no tempo de simulação, a Tabela 8 mostra o tempo total em horas e minutos, bem como o aumento percentual no tempo de simulação em relação ao tempo da malha de 10 mm, para completar as simulações nas condições da Figura 21 com as malhas de 10, 8 e 6 mm. Houve um aumento significativo, de 52%, no tempo de processamento da malha de 10 mm para a de 8 mm. No entanto, o acréscimo no tempo de simulação da malha de 8 mm para a de 6 mm foi de apenas 4 %, indicando uma possível convergência do tempo de simulação. Assim, a escolha da malha de 6 mm em detrimento da malha de 8 mm não ocasionou um aumento significativo do custo computacional das simulações.

Tabela 8 – Tempo de processamento para a simulação  $n$  igual a 3 e  $\lambda$  igual a 1,5 % até o tempo de 2 min com as malhas de 10, 8 e 6 mm.

<b>Malha</b>	<b>Tempo [h:min]</b>	<b>Tempo Percentual em Relação a Malha de 10 mm [%]</b>
10 mm	08:17	-
8 mm	12:34	+ 52
6 mm	13:04	+ 58

Fonte: Autor

Isto posto, apesar da taxa de sedimentação ter se mostrado independente da malha para o passo de tempo de 0,001 s, a malha selecionada foi a com elementos de 6 mm de dimensão, pois, as malhas de 8 e 10 mm não foram capazes de representar nem o modificador de arrasto nem o perfil de fração volumétrica de forma adequada, e os elementos da malha de 4 mm são de tamanho muito pequeno para os diâmetros de gotas estudados. Além disso, houve melhora nos resultados nos perfis de fração volumétrica e modificador de arrasto, uma vez que o aumento no tempo de processamento com o emprego da malha de 6 mm é de apenas 4 % em relação ao tempo da malha de 8 mm.

## 5.2. DISCRETIZAÇÃO DA DTG E TESTE DO NÚMERO DE CLASSES

Os polinômios empregados na quadratura para representação da DTG inicial, Figura 14, são apresentados no APÊNDICE – A. Cada DTG foi modelada por dois polinômios, um para os tamanhos de gotas menores e um para os tamanhos de gotas maiores. O resultado da discretização da DTG inicial do Experimento A com o emprego de UDFs em 3, 4, 6 e 8 classes de tamanhos de partículas é exposto na Tabela 9. A integral da discretização dessa distribuição, segundo a Figura 14, é de aproximadamente 31,71. Assim, é possível perceber que quanto maior o número de classes, mais próximas a integração numérica se torna da integral da distribuição original.

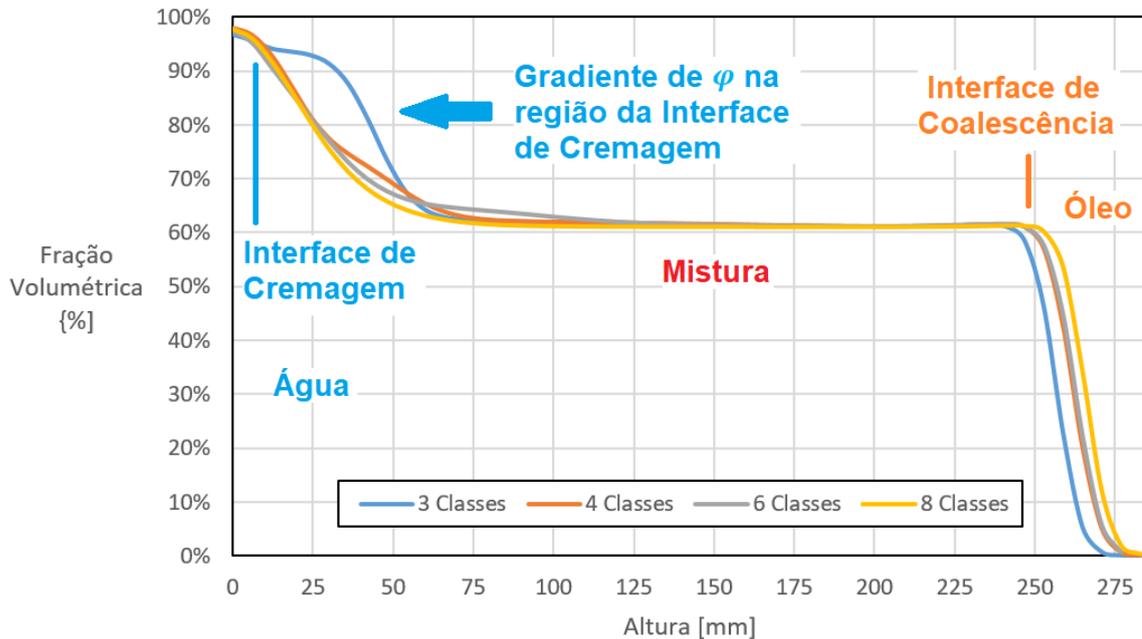
Tabela 9 – Discretização da DTG do Experimento A com 3, 4, 6 e 8 classes de tamanho.

N. de Clas.	D. de Ref. [ $\mu\text{m}$ ]	F. Vol. [%]	N. de Clas.	D. de Ref. [ $\mu\text{m}$ ]	F. Vol. [%]
3	55.9	10,17	4	39.6	34,79
	236.6	86,26		138.7	40,88
	417.3	3,57		237.3	51,71
Integral	28,59		407.5	3,93	
8	15.2	5,19	Integral	33,68	
	59.9	4,59		22.7	1,25
	118.3	22,79		89.1	16,47
	163.0	16,50	6	155.6	26,29
	195.43	26,81		208.2	39,90
	272.3	23,65		322.4	14,6
	372.5	4,49		436.6	1,49
		449.4	0,66	Integral	31,21
Integral	31,43				

Fonte: Autor.

O perfil de  $\varphi_c$  sem o emprego das UDFs com 3, 4, 6 e 8 classes iniciais é apresentado na Figura 22 para o Experimento A. Como pode ser observado, a representação da DTG inicial para esse experimento pode ser realizada com 4 classes de tamanhos, uma vez que o emprego de apenas 3 classes apresentou um resultado discrepante, especialmente na região do gradiente de concentração na zona cremagem (Figura 22) que surge devido à presença das menores gotas que se separam mais lentamente. Essa discrepância é devida à quantidade insuficiente de classes empregadas na representação da DTG com 3 faixas de tamanho. Além disso, o perfil da fração volumétrica com 6 e 8 classes de tamanhos iniciais não se distanciou consideravelmente do obtido com 4 classes de tamanhos, o que mostra que para o Experimento A uma discretização mais refinada da DTG (com mais de 4 faixas de tamanho) não é necessária. Deve-se ainda considerar a necessidade de inclusão das classes extras, e no *software* utilizado há um limite de 10 classes de tamanhos com o emprego das UDFs.

Figura 22 – Perfil da fração volumétrica da fase contínua no tempo de 60s para o Experimento A e sem o emprego das UDFs na malha de 6 mm com 3, 4, 6 e 8 faixas de tamanhos para representar a DTG inicial.



Fonte: Autor.

Logo após, os testes do número de faixas foram realizados com o emprego das UDFs para os Experimentos A e B com 4 e 6 faixas de tamanhos para representar a DTG inicial e 2, 3 e 4 faixas extras para a considerar a coalescência. Um número maior de faixas não foi testado devido a limitações do *software*. Para analisar a quantidade de faixas de tamanhos extras necessárias para prever a formação de gotas maiores em função da coalescência, conforme requerido pelo Método Discreto, a discretização da DTG das novas gotas foi realizada conforme discutido na Seção 4.3.4. A estimativa do diâmetro médio de Sauter da mistura e a porcentagem da fase dispersa ainda presente na mistura quando a separação atinge o ponto de inflexão, bem como o tempo no qual o ponto de inflexão ocorre podem ser visualizadas na Tabela 10, conforme dados de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). Os diâmetros das novas classes para os testes de número de classes extras para os Experimentos A e B estão contidos na Tabela 11.

Tabela 10 – Estimativa do diâmetro médio de Sauter e porcentagem da fase dispersa ainda presente na dispersão no ponto de inflexão.

<b>Experimento</b>	<b>Diâmetro Médio [<math>\mu\text{m}</math>]</b>	<b>Porcentagem da Fase Dispersa ainda Presente na Mistura [%]</b>	<b>Tempo do Ponto de Inflexão [min]</b>
A	325,0	49,0	2,90
B	367,0	43,0	2,25
C	182,0	47,1	7,0

Fonte: adaptado de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).

Tabela 11 – Diâmetros de referência para o Experimento A e B com 2, 3 e 4 classes de tamanhos de partículas extras.

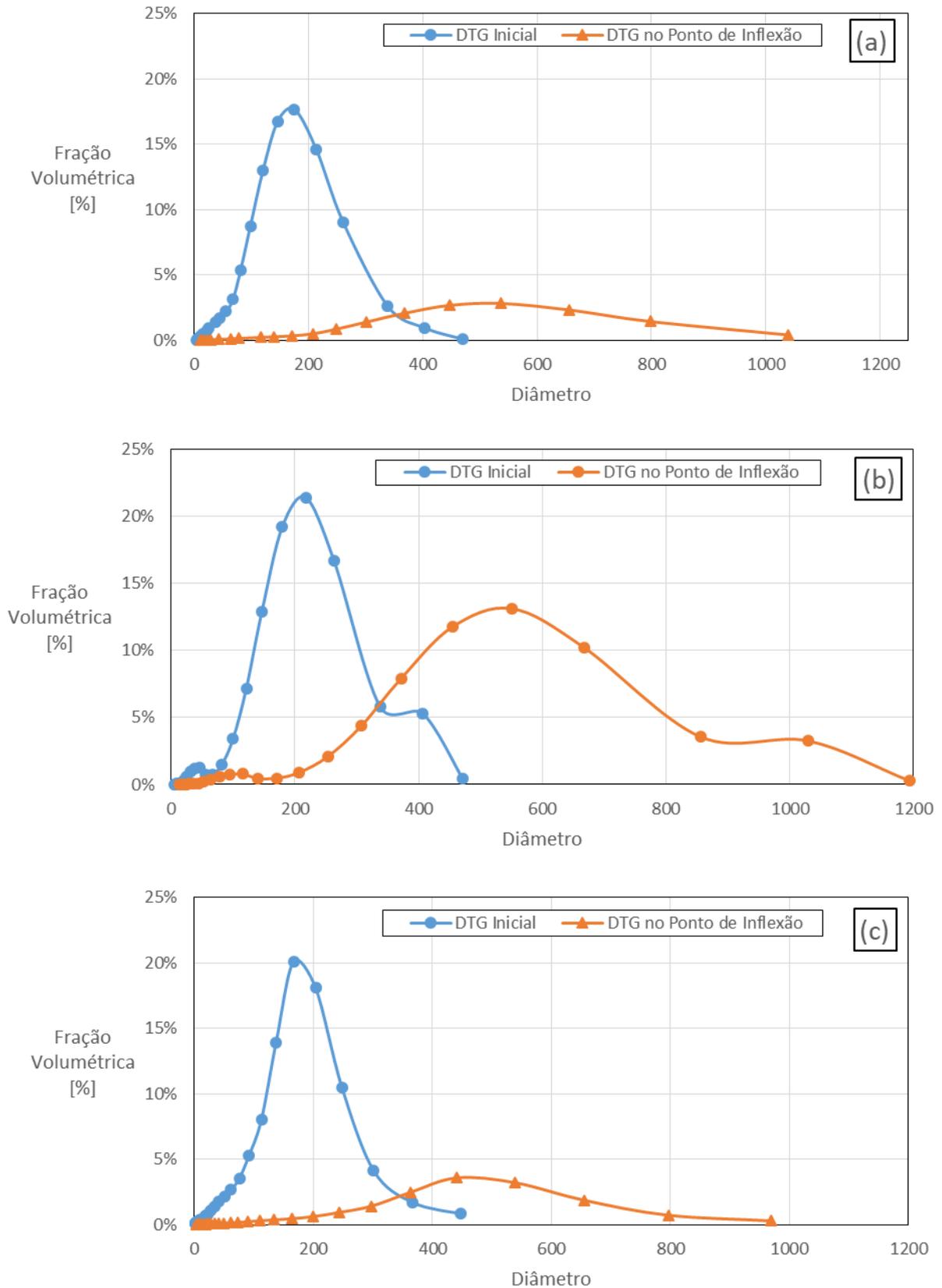
<b>Número de Classes Extras</b>	<b>Diâmetros das Classes Extras</b>	<b>Diâmetros das Classes Extras</b>
	<b>Exp. A [<math>\mu\text{m}</math>]</b>	<b>Exp. B [<math>\mu\text{m}</math>]</b>
2	611,98; 896,22	991,53; 1293,55
3	564,60; 754,10; 943,60	941,19; 1142,54; 1343,89
4	540,91; 683,04; 825,6; 967,28	916,02; 1067,03; 1218,5; 1369,6

Fonte: Autor.

A comparação da DTG inicial e a estimativa no ponto de inflexão são mostradas na Figura 23 para todos os experimentos.

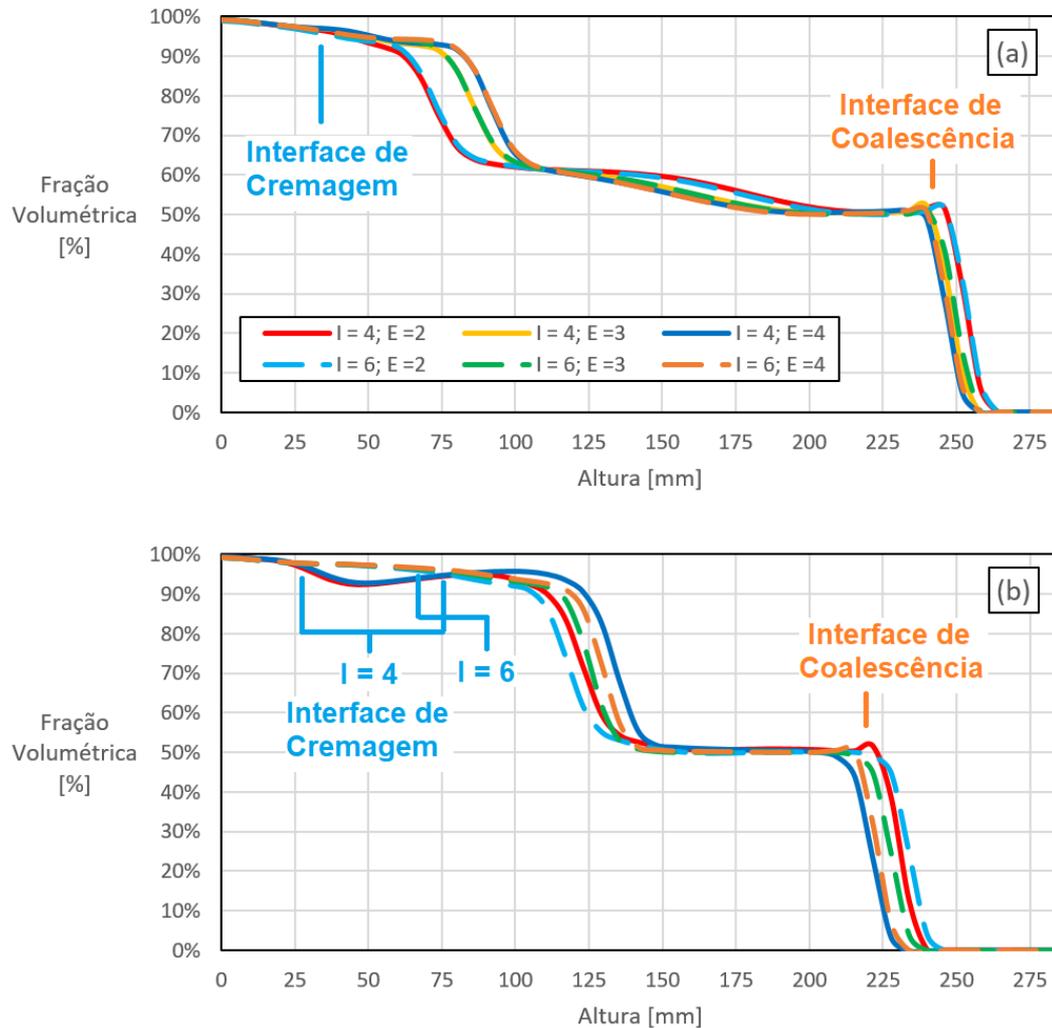
O resultado do teste do número de faixas iniciais e extras com o emprego das UDFs é exposto na Figura 24 para o tempo de 120s (Experimento A) e 100s (Experimento B). Para o Experimento A, a DTG inicial com 4 ou 6 faixas de tamanhos não apresentou diferenças significativas nos resultados (como previsto no resultado da Figura 22), contudo, como pode ser visualizado na Figura 24b, essa diferença é significativa para o Experimento B. Ademais, com base na Figura 24, 4 classes extras de tamanho foram necessárias para levar em conta a coalescência. Como um número maior de classe não pode ser verificado, os resultados dos testes do número de classes sugerem o emprego de 6 classes de tamanhos para representar a DTG inicial e 4 classes para representar as novas gotas formadas pela coalescência.

Figura 23 – DTG inicial e estimativa no ponto de inflexão para os Experimentos A (a), B (b) e C (c).



Fonte: Autor.

Figura 24 – Perfil da fração volumétrica da fase com o emprego das UDFs com 4 e 6 classes de tamanhos iniciais (I) e 2, 3 e 4 tamanhos extras (E). (a) Experimento A com o tempo de 120s e (b) Experimento B com o tempo de 100s.



Fonte: Autor.

Essa diferença entre a quantidade de classes necessárias para representar a DTG inicial do Experimento B provavelmente é devido ao fato da DTG desse experimento ser praticamente tri modal, o que o diferencia dos outros experimentos. Assim, a modelagem do Experimento B com 4 faixas de tamanhos apresentou perfil de concentração (com uma ondulação na região da interface entre a mistura e a fase contínua já separada) diferente do visualizado no Experimento A. Essa ondulação pode dificultar a obtenção das curvas de decaimento numéricas. Por exemplo, se a interface entre a mistura e a fase contínua já separada fosse definida em 92% de fase contínua para o Experimento B, no tempo de 100s (Figura 24) essa interface poderia ser definida em duas alturas, uma em cerca de 25 mm e

outra em 50 mm. Logo, uma quantidade maior de faixas de tamanho se faz necessária para a adequada representação do ao seu perfil tri modal.

Se o número de classes para representar a DTG inicial tende a modificar o perfil de concentração das fases, o número de classes para levar em conta as gotas que surgirão no processo de coalescência tem o efeito de deslocar a curva do perfil de concentração. Isso ocorre porque quanto maior o número de classes extras, mais próximo os diâmetros de referência das classes ficam, assim, o surgimento das novas gotas acontece num menor espaço de tempo. Para exemplificar, caso o maior diâmetro máximo da DTG inicial seja 500  $\mu\text{m}$  e o menor diâmetro das gotas extras seja 650  $\mu\text{m}$ , haverá um tempo para que as primeiras gotas de 650  $\mu\text{m}$  surjam no modelo numérico (para que sua fração volumétrica seja maior que 0,0001 %). No entanto, se um número maior de classes for utilizado para as gotas extras e o tamanho mínimo cair para 600  $\mu\text{m}$ , o tempo para que a sua fração volumétrica atinja o valor mínimo de 0,0001 % será menor e, portanto, as novas gotas serão formadas mais rapidamente, aumentando o diâmetro médio da mistura e acelerando a separação.

É possível perceber também que a curva com 4 classes extras está mais próxima da curva com 3 classes do que a com 3 classes da de 2 classes extras. Logo, há uma tendência de convergência na posição das curvas de concentração com o aumento do número de classes extras. Dessa forma, mesmo que uma simulação com 6 classes de tamanhos iniciais e 5 ou 6 classes extras pudesse ser feita, o seu resultado provavelmente seria próximo ao da curva com 4 classes extras, o que sugere que esse número de classes é uma quantidade razoável para representar as novas gotas.

Como pode ser observado na Tabela 12, as integrais das DTG (Figura 14) e das integrais numéricas pela Quadratura de Gauss-Legendre com 6 classes de tamanhos são razoavelmente precisas para todos os experimentos. A comparação de forma gráfica entre as DTGs experimentais dos Experimentos A, B e C e sua forma discretizada com 6 classes de tamanhos pelo método Gauss-Legendre é apresentada na Figura 25. Assim, com base na Tabela 12 e na Figura 25 é possível perceber que tanto a integral total da distribuição (Tabela 12) quanto o perfil da distribuição (Figura 25) podem ser estimados de maneira satisfatória pela integração numérica de Gauss-Legendre e que o número mínimo de classes requerido para representação da DTG é função do perfil da distribuição, ou seja, quanto mais complexo esse perfil (na sequência mono modal, bimodal, tri modal e etc.) maior é o número de classe requerido. O resultado das discretizações das DTGs iniciais e das classes extras de tamanho de todos os experimentos são apresentados nas Tabelas 13 e 14 respectivamente.

Tabela 12 – Integral da DTG original segundo os dados da Figura 14 e o integral pela Quadratura de Gauss-Legendre com 4 classes de tamanho para os Experimentos A, B e C.

<b>Integral</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>
Original	31,71	39,42	29,36
Quadratura	31,21	38,81	30,80

Fonte: Autor.

Tabela 13 - Discretização das DTGs iniciais com 6 classes de tamanho com diâmetros de referência ( $d_k$ ) e fração volumétrica ( $\varphi_k$ ) de cada classe.

<b>Experimento A</b>		<b>Experimento B</b>		<b>Experimento C</b>	
$d_k$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\varphi_k$ [%]	$d_k$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\varphi_k$ [%]	$d_k$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\varphi_k$ [%]
22,67	0,49	34,40	0,58%	20,09	0,31%
89,14	6,44	134,24	11,33%	84,15	2,95%
155,61	10,28	234,08	14,11%	148,21	7,12%
208,19	15,60	286,56	6,43%	198,45	13,88%
322,40	5,71	367,07	4,95%	307,02	4,42%
436,62	0,58	447,58	2,00%	415,58	0,43%

Fonte: Autor.

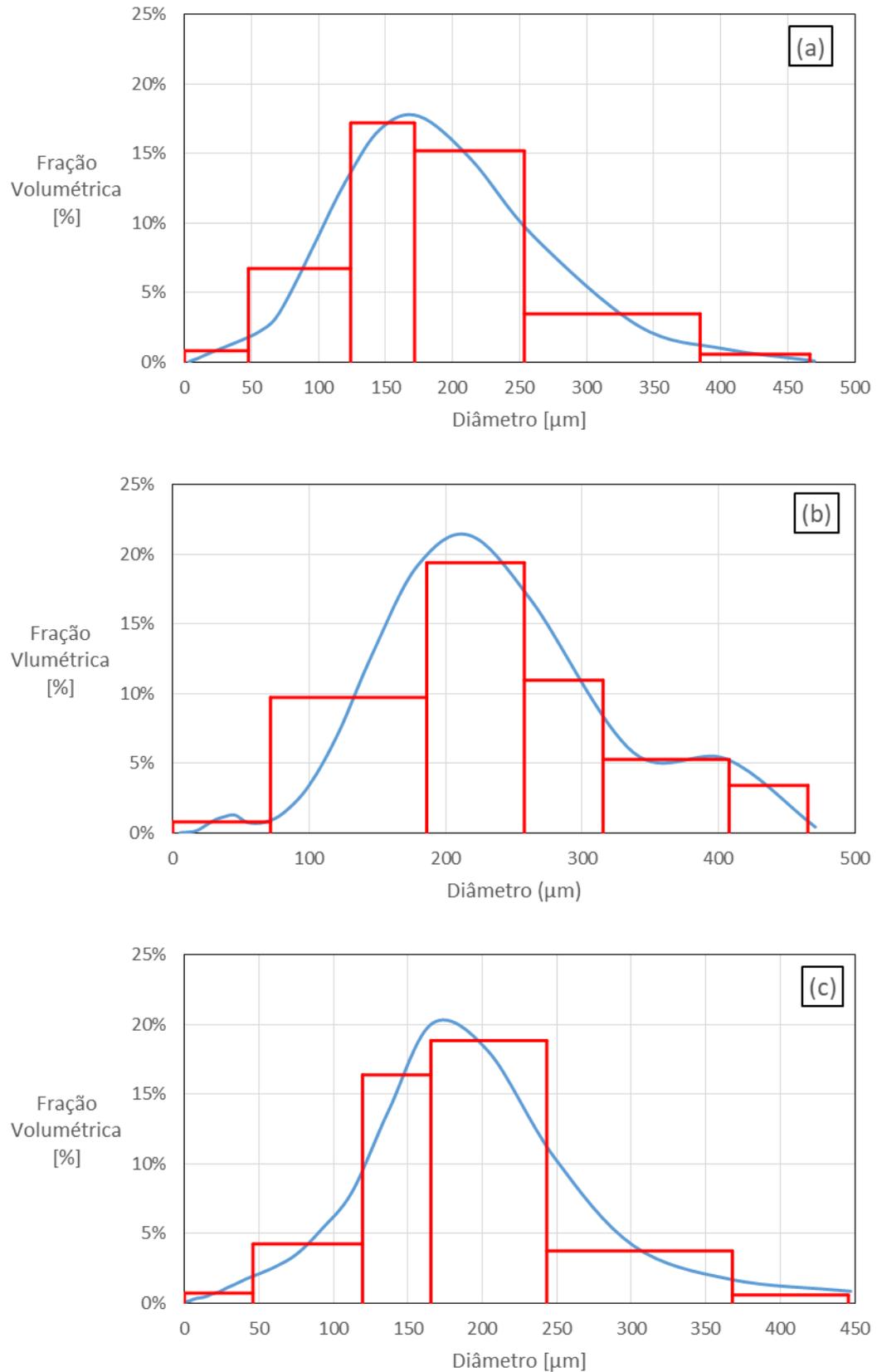
Tabela 14 - Diâmetros de referência para os Experimentos A, B e C com 4 classes de tamanhos de partículas extras.

<b>Experimento</b>	<b>Diâmetro das Classes Extras</b> <b>[<math>\mu\text{m}</math>]</b>
A	540,91; 683,04; 825,6; 967,28
B	561,42; 742,22; 923,03; 1103,84
C	512,44; 642,98; 773,51; 904,04

Fonte: Autor.

Logo, o número mínimo de classes, tanto para a DTG inicial quanto para as gotas futuras, pode ser determinado por teste semelhantes aos testes de malha nos quais o número de classes é aumentado até que não haja mais mudanças significativas nos resultados das simulações, como exposto na Figura 24. Assim, os resultados dos testes de número de classes indicaram que 6 classes são necessárias para representar a DTG inicial e 4 classes para representar as novas gotas, nascidas do processo de coalescência.

Figura 25 – DTGs experimentais e discretizadas dos Experimentos A, B e C com 6 classes de tamanho.



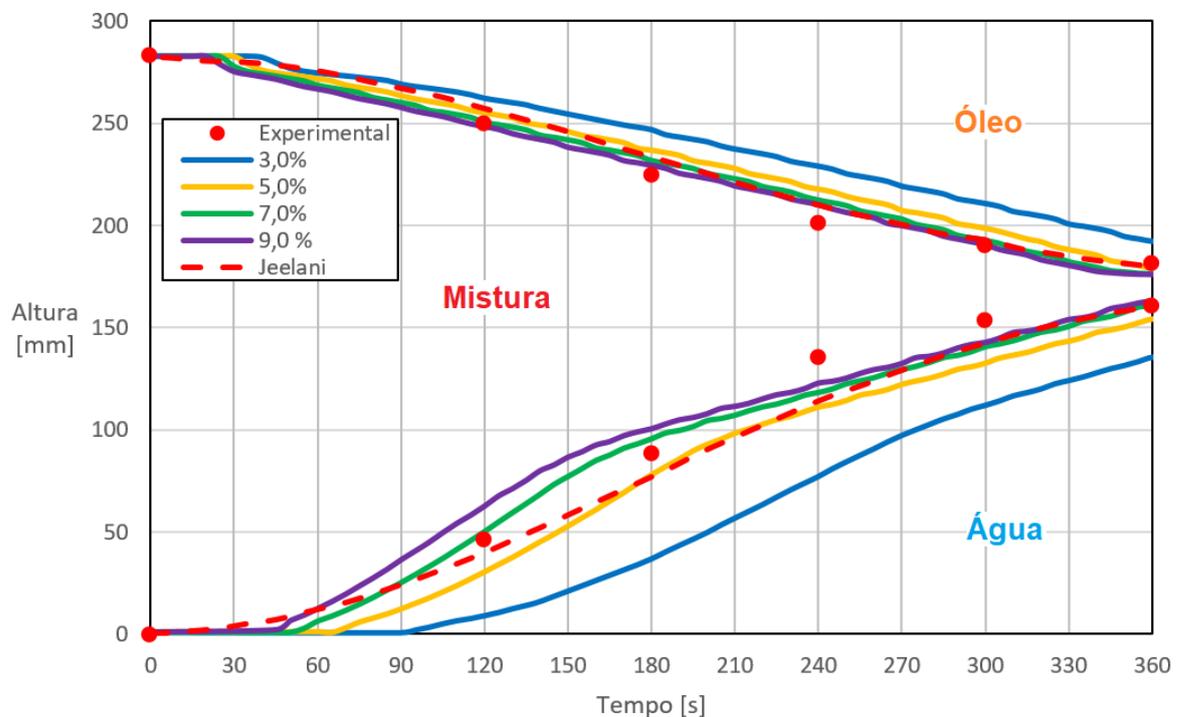
Fonte: Autor.

### 5.3. CALIBRAÇÃO DOS MODELOS DE COALESCÊNCIA

#### 5.3.1. Eficiência Constante

As curvas de decaimento para o Experimento A com o modelo de eficiência de coalescência constante com os valores iniciais de 3,0, 5,0, 7,0 e 9,0 % são apresentadas na Figura 26. Como é possível perceber na figura, as eficiências de 7,0 e 9,0 % apresentaram curvas de decaimento próximas aos dados experimentais e uma análise apenas visual do ajuste das eficiências segunda a Figura 26 seria arbitrária e levantaria dúvidas sobre qual eficiência se ajustou melhor aos dados experimentais. Isso porque aparentemente a curva de 9,0 % apresentou uma interface de coalescência mais próxima dos dados experimentais, mas a curva de 7,0 % se ajustou melhor a interface de cremagem.

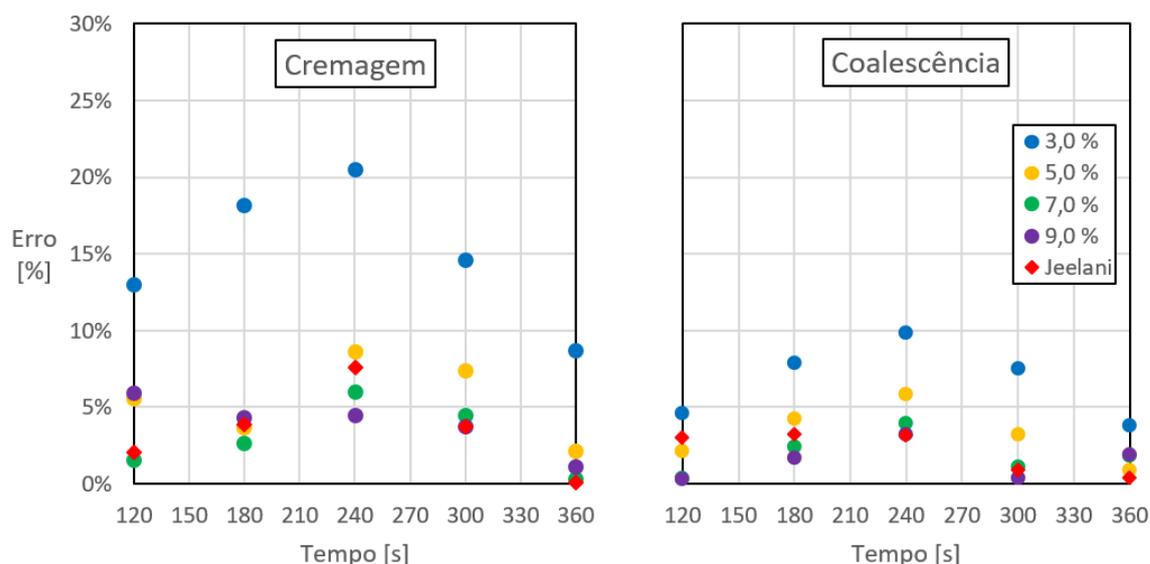
Figura 26 – Curvas de decaimento para o Experimento A com o modelo de eficiência de coalescência constante para os valores de 3,0, 5,0 e 7,0 % e do modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).



Fonte: Autor.

Deste modo, para se obter um quantitativo do ajuste, os erros percentuais obtidos do modelo numérico de eficiência de coalescência constante em relação a cada ponto experimental para o Experimento A são expostos na Figura 27 para as interfaces de cremagem e coalescência, definidas em 5 e 55% de fração volumétrica da fase dispersa, respectivamente. O erro médio e o valor eficaz de todos os erros (ambas as interfaces) para a eficiência de 7,0 % foram de 2,47 % e 8,57, respectivamente, e para a eficiência de 9,0 % de 2,70% e 9,17, respectivamente. O ajuste da eficiência de 7,0 % é ligeiramente melhor do que o ajuste da eficiência de 9,0 % e, portanto, foi selecionado como a eficiência de coalescência calibrada do Experimento A. As eficiências de 3,0, 5,0, 7,0 e 9,0 % foram definidas aleatoriamente, de forma que o ajuste de 7,0 % foi determinado por tentativa e erro. Logo, um ajuste mais fino poderia ser obtido também por tentativa e erro de valores entre 7,0 e 9,0 %, no entanto, os erros obtidos com essa eficiência são de mesma ordem dos erros do modelo analítico de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e, portanto, foram considerados aceitáveis. Isso porque o objetivo é verificar se os mesmos parâmetros podem ser empregados para os Experimentos B e C com um ajuste (erros) de mesma ordem, e não necessariamente obter um ajuste ótimo.

Figura 27 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e eficiência de coalescência constante para os valores de 3,0, 5,0 e 7,0 % para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento A.



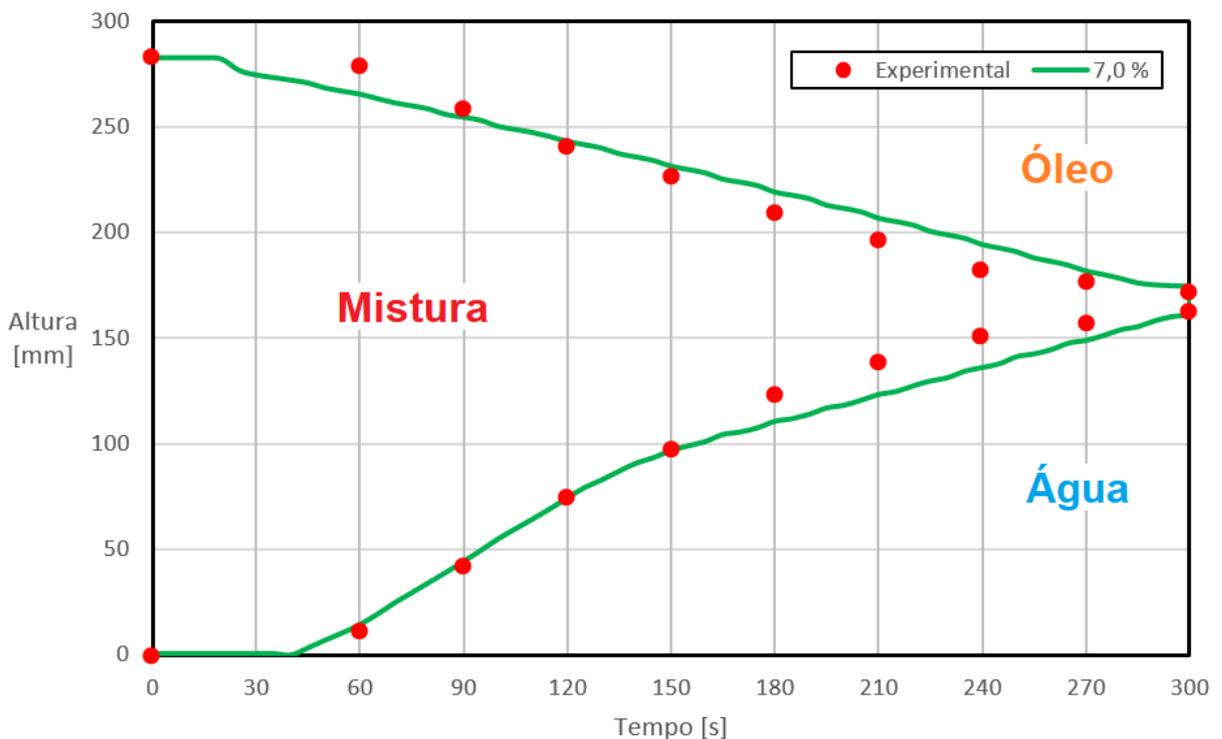
Fonte: Autor.

Salienta-se que os autores não apresentam os erros associados as medidas experimentais, o que torna o ajuste preciso do modelo desnecessário. Estima-se que os erros

numérico em relação aos dados experimentais sejam da mesma ordem de grandeza. Esses erros podem estar associados com a variação da porcentagem das fases nas interfaces, a posição das interfaces que foram definidas de forma visual por Jeelani, Hosig e Windhab (2005), representação da DTG com um pequeno número de classes de tamanhos, previsão da evolução da DTG devido à coalescência.

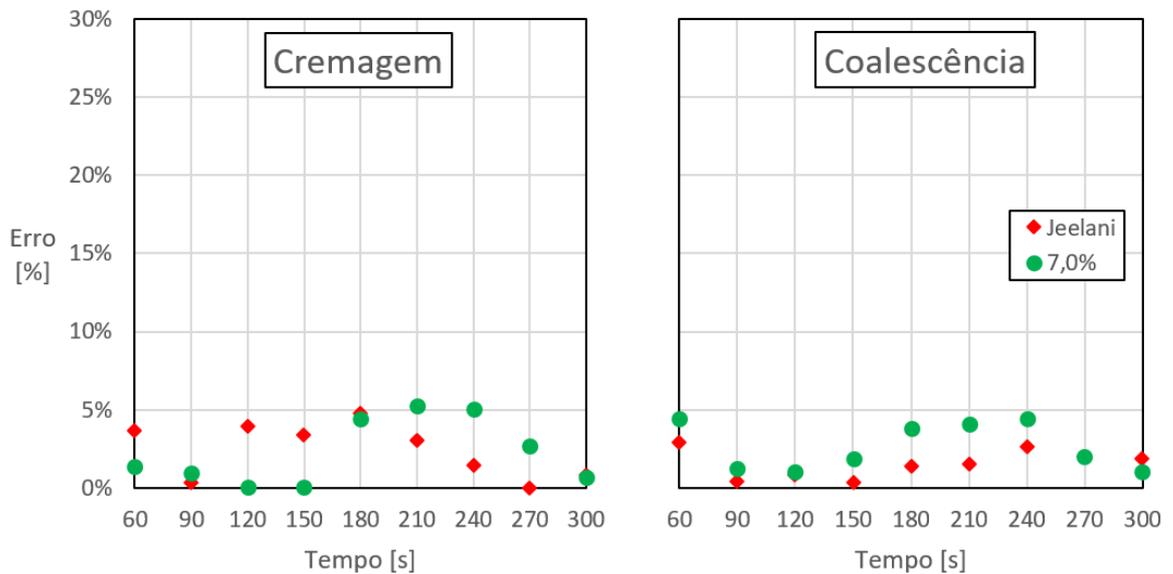
Isto posto, o modelo de eficiência de coalescência constante foi empregado para o Experimento B com o valor de 7,0%. O resultado da curva de decaimento e dos erros em relação aos dados experimentais são expostos nas Figuras 28 e 29 para as interfaces de cremagem e coalescência com 5 e 55 % de fase dispersa. Assim, é possível inferir pelos resultados que a eficiência de coalescência é constante para um sistema disperso composto pelos mesmos líquidos, mas com diferentes DTGs.

Figura 28 - Curva de decaimento para o Experimento B com o modelo de eficiência de coalescência constante para o valor de 7,0 %.



Fonte: Autor.

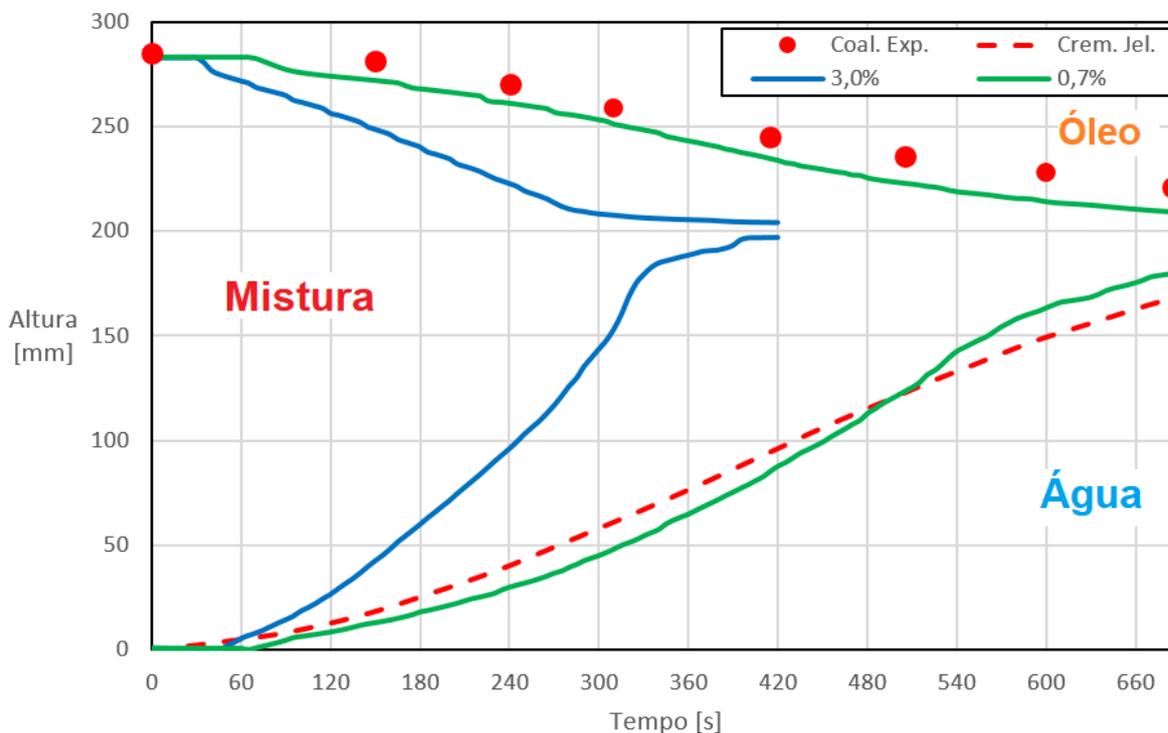
Figura 29 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e eficiência de coalescência constante para o valor de 7,0 % para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento B.



Fonte: Autor.

O emprego da mesma eficiência de coalescência nas simulações dos Experimentos A e B sugere que o modelo não precisa ser recalibrado quando há uma mudança na DTG inicial. Contudo, o resultado do emprego da eficiência de coalescência de 7,0% e interfaces de 5 e 55% para o Experimento C não apresentou resultados satisfatórios, como pode ser visto na Figura 30. Mesmo uma eficiência de 3,0 %, um valor muito baixo para o Experimento A proporcionou uma velocidade de separação significativamente maior do que a obtida no Experimento C. Por meio de uma análise de tentativa e erro a eficiência de coalescência que apresentou um resultado satisfatório para o Experimento C foi de 0,7% (Figura 30), dez vezes menor do que a empregada nos Experimentos A e B.

Figura 30 - Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de eficiência de coalescência constante para os valores de 0,7 e 3,0%.



Fonte: Autor.

Essa diferença significativa na aplicação do modelo de eficiência constante para os experimentos com fração volumétrica da fase dispersa inicial de 40% (A e B) e com 30% (C) pode indicar uma limitação do modelo de coalescência, ou seja, que o valor da eficiência constante muda com a fração volumétrica inicial da mistura. No entanto, essa diferença pode estar relacionada com o emprego do modificador de arrasto e com definição da interface de coalescência e não com o modelo de coalescência, conforme discutido na próxima seção.

### 5.3.2. Modificador de Arrasto e a Interface de Coalescência

A taxa de cremação é função do modificador de arrasto e este é função do expoente  $n$  e da fração volumétrica da fase dispersa na interface de coalescência. Quanto ao expoente  $n$ , a sua análise aprofundada foge do escopo desta dissertação e, portanto, o seu valor padrão de 4,65 foi aplicado. O perfil de concentração da fase contínua experimental é disponível somente para o Experimento A, o qual foi utilizado para estimar a fração volumétrica de 55% de fase dispersa na interface de coalescência (Figura 21). Assim, essa definição de interface não é necessariamente válida para os Experimentos C e B. Segundo a Tabela 3 e a Figura 14,

apesar de o diâmetro médio em volume do Experimento C ser próximo ao do Experimento A, aquele contém um número maior de gotas menores, de 1 a 10  $\mu\text{m}$ , fazendo com que o diâmetro médio de Sauter seja significativamente menor. A razão  $d_0/d_{32}$  para os Experimentos A e B é de 1,49 e 1,39, respectivamente, enquanto que para o Experimento C é de 2,28. Assim, como é possível inferir que como as menores gotas preenchem as lacunas entre as maiores gotas, a fração volumétrica máxima atingida no Experimento C pode ser maior do que nos Experimentos A e B. Para o Experimento B, a razão  $d_0/d_{32}$  indica que a interface de coalescência é próxima a 55%, pois o seu fator de empacotamento é próximo ao do Experimento A e, portanto, os resultados numéricos para o Experimento B foram satisfatórios. Assim, cabe agora estimar o valor da fração volumétrica da fase dispersa na interface de coalescência para o Experimento C e em seguida obter o resultado numérico do emprego do modelo de coalescência calibrado pelo Experimento A. A nova interface de coalescência foi estimada com base na taxa de liberação, ou coalescência, nesta interface.

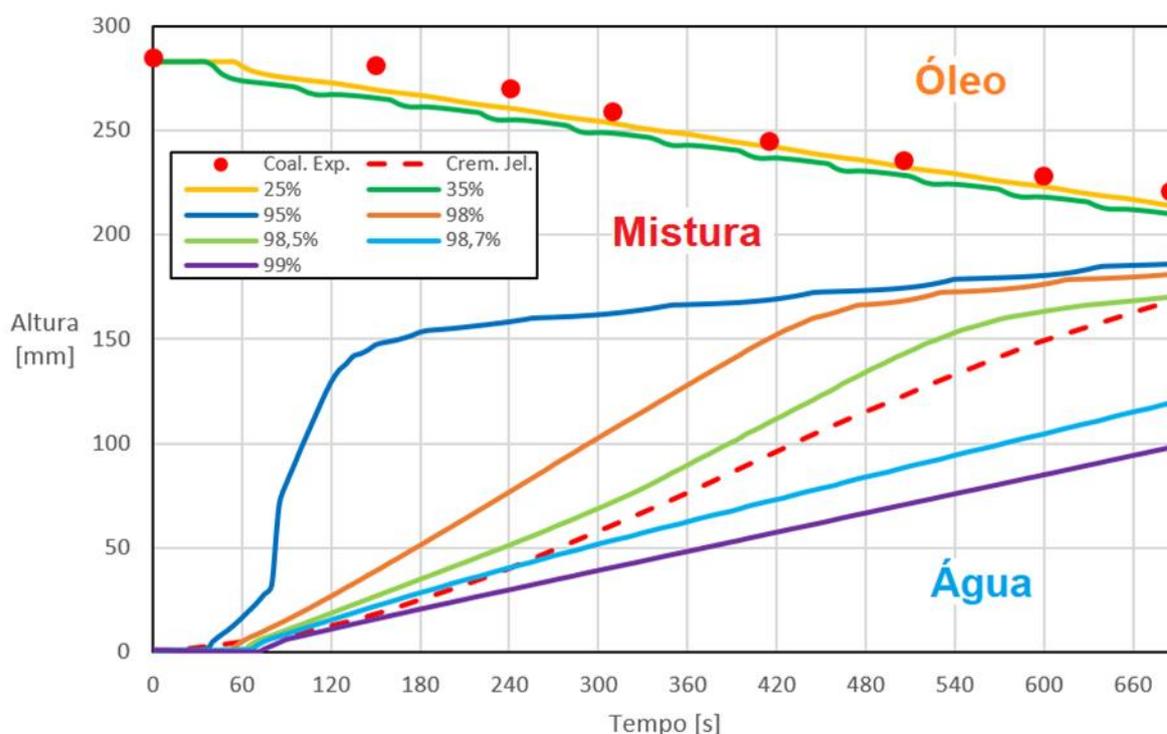
Com base na Equação 20 de Richardson e Zaki (1954), a velocidade de sedimentação em uma mistura é dada pela multiplicação da velocidade terminal de Stokes, que é função do diâmetro médio, vezes o modificador de arrasto devido às interações entre as gotas, que é função da fração volumétrica apenas. Como o diâmetro médio das duas DTGs são semelhantes e, portanto, a velocidade terminal de Stokes também, a taxa de cremagem na interface é função da fração volumétrica, que foi definida da seguinte maneira. A taxa de coalescência das gotas com sua fase homogênea por unidade de volume ( $\psi$ ), ou a inclinação da curva experimental da interface de coalescência para os três primeiros pontos dos Experimentos A e C são 0,4006 e 0,1384 mm/s, respectivamente. Dividindo a taxa de coalescência pela fração volumétrica da fase dispersa na interface, a velocidade média das gotas na interface de coalescência é obtida. Para o Experimento A, a velocidade média é estimada em 0,7284 mm/s. Igualando essa velocidade a Equação 67:

$$\frac{\psi}{\varphi_{d,i}} = U_{ST}(1 - \varphi_{d,i})^n \quad (67)$$

Resolvendo a Equação 67 para o Experimento A,  $U_{ST}$  na interface é cerca de 29,85 mm/s. Aplicando o mesmo valor de  $U_{ST}$  agora para o Experimento C e resolvendo para  $\varphi_{d,i}$ , a concentração da fase dispersa estimada na interface de coalescência é cerca de 65%.

Assim, a nova análise foi realizada com a eficiência de coalescência de 7,0% mas a interface de coalescência em 65% de fração volumétrica da fase dispersa, conforme a Figura 31. Como a interface de cremagem experimental era turva e não pôde ser determinada experimentalmente nem seu valor numérico estimado (como em 5% de fase dispersa para os Experimentos A e B), várias interfaces de cremagem com diferentes frações volumétrica foram plotadas concomitantemente com o modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) que serviu como base para uma estimativa da interface de cremagem.

Figura 31 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de eficiência de coalescência constante 7,0% e o modificador de arrasto aplicado até 65% de concentração da fase dispersa.



Fonte: Autor.

Logo, a mesma eficiência de coalescência, 7,0 %, pode ser empregada para todos os Experimentos, independentemente da DTG e da fração volumétrica inicial. A diferença percentual média e o valor eficaz são apresentados nas Tabelas 15 e 16 para o modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e para o modelo de eficiência de coalescência constante igual a 7,0 %, respectivamente, para os Experimentos A, B e C. Assim, é possível perceber que o modelo de eficiência constante possibilitou um erro de mesma ordem que o modelo de

Jeelani, Hosig e Windhab (2005) para os Experimento B e C utilizando a calibração do Experimento A.

Tabela 15 – Erro médio e valor eficaz dos erros com o modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) para os Experimentos A, B e C.

<b>Experimento</b>	<b>Interface</b>	<b>Erro Médio</b>	<b>RMS</b>
A	Coalescência	2,14%	6,97
	Cremagem	3,48%	12,09
B	Coalescência	1,55%	5,04
	Cremagem	2,39%	8,19
C	Coalescência	1,22%	4,08

Fonte: Autor.

Tabela 16 – Erro médio e valor eficaz dos erros com o modelo de eficiência de coalescência constante igual a 7,0 % para os Experimentos A e B.

<b>Experimento</b>	<b>Interface</b>	<b>Erro Médio</b>	<b>RMS</b>
A	Coalescência	1,95%	6,51
	Cremagem	2,98%	10,23
B	Coalescência	2,67%	8,56
	Cremagem	2,30%	8,62
C	Coalescência 25%	2,24 %	7,02
	Coalescência 35%	3,99%	11,64

Fonte: Autor.

Assim sendo, o modelo de eficiência constante pode ser empregado com o mesmo valor para diferentes experimentos, indicando que a eficiência de coalescência permanece constante para um mesmo sistema disperso, mesmo que a DTG e a fração volumétrica das fases mudem. A importância dessa característica é que a eficiência de coalescência empregada na modelagem de um separador contínuo pode ser obtida a partir de um teste de garrafa, pois o sistema fluido é o mesmo. Logo, uma vez que o modelo de eficiência constante é calibrado para a curva de decaimento do teste de garrafa, como no Experimento A, esse valor pode ser usado no separador contínuo.

Outro ponto importante é a definição das interfaces, especialmente no que tange a aplicação do modificador de arrasto, como demonstrado na Experimento C. A obtenção da concentração nas interfaces de forma experimental não é simples, podendo dificultar a implementação dos modelos numéricos empregados nas simulações.

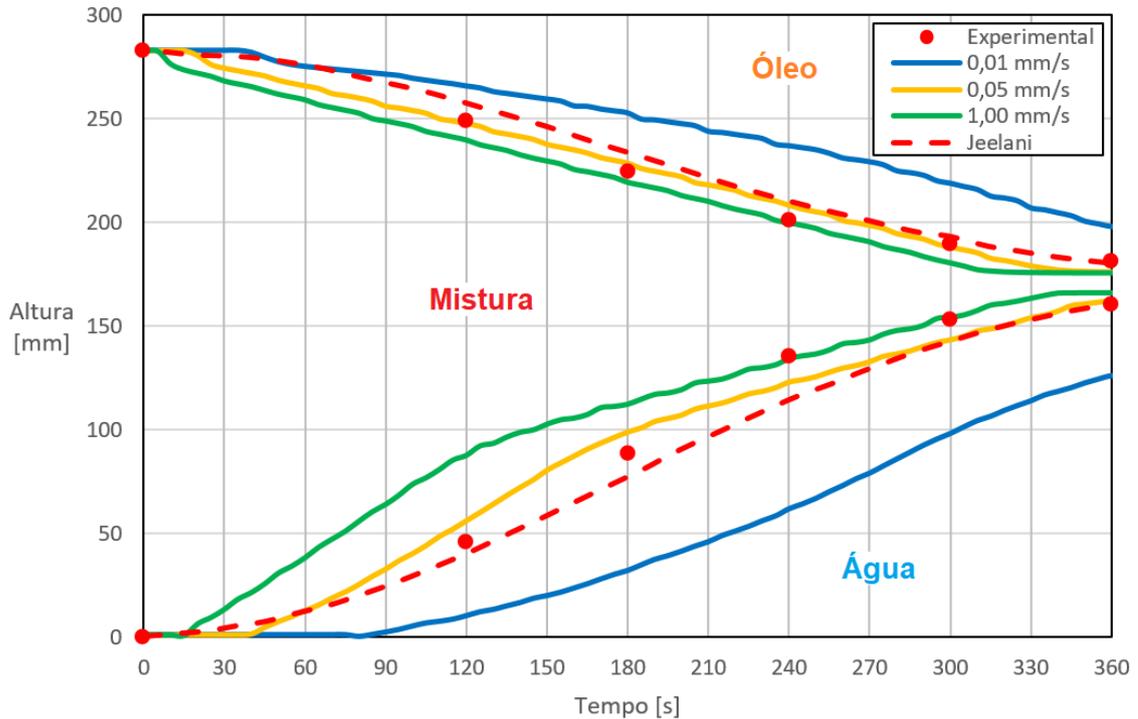
### 5.3.3. Velocidade de Aproximação Crítica

As curvas de decaimento para o Experimento A com o modelo de velocidade de aproximação crítica com os valores iniciais de 1,0, 0,05 e 0,01 mm/s são apresentadas na Figura 32. Dessa forma, a exceção da simulação inicial com velocidade crítica de 1,0 mm/s, as outras velocidades foram empregadas por tentativa e erro, de forma semelhante às eficiências no modelo de eficiência constante. Assim, por meio de uma análise visual da Figura 32, a velocidade crítica obtida nesse processo de calibração foi de cerca de 0,05 mm/s, no entanto, os erros entre os valores experimentais e numéricos precisam ser analisados para definir de maneira quantitativa que o ajuste da curva de 0,05 mm/s está na faixa do erro obtido por Jeelani, Hosig e Windhab (2005).

Os erros percentuais entre os dados experimentais e os resultados da aplicação do modelo de velocidade crítica com 1,0, 0,05 e 0,01 mm/s e do modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) para as interfaces de cremagem e coalescência podem ser vistos na Figura 33. Assim, uma vez calibrado para o Experimento A, o modelo de velocidade de aproximação crítica será empregado na modelagem dos Experimentos B e C com o valor de 0,05 mm/s, de forma semelhante ao modelo de eficiência de coalescência constante.

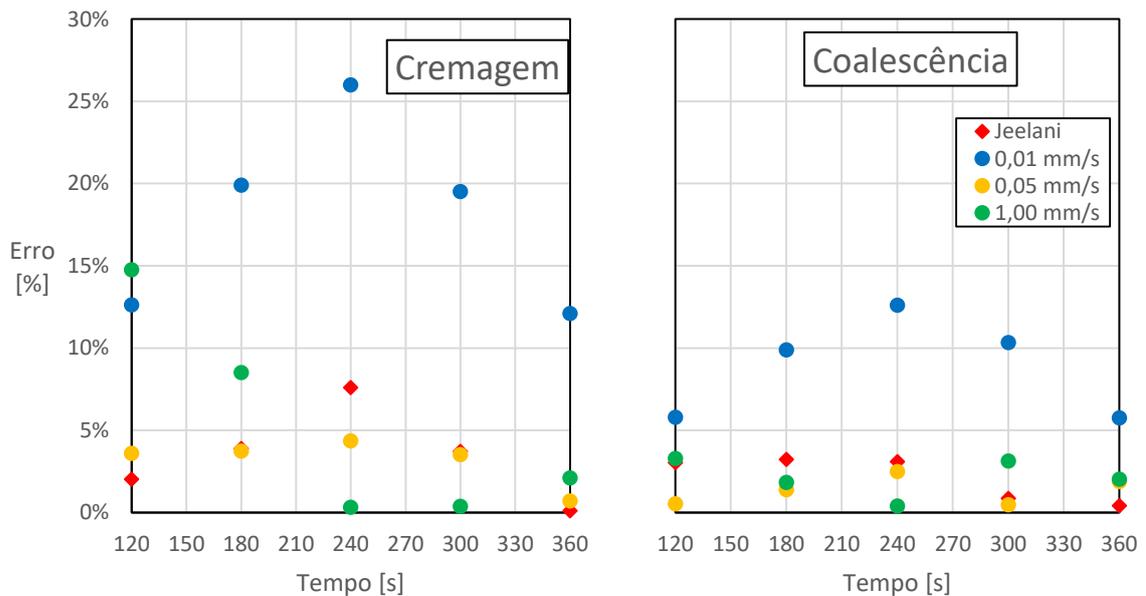
Logo após, o modelo de velocidade de aproximação crítica calibrado para 0,05 mm/s foi empregado para modelar o Experimento B. O resultado da curva de decaimento e dos erros foram satisfatórios, conforme pode ser visto nas Figuras 34 e 35.

Figura 32 - Curvas de decaimento para o Experimento A com o modelo de velocidade de aproximação crítica para as velocidades de 1,0, 0,05 e 0,01 mm/s.



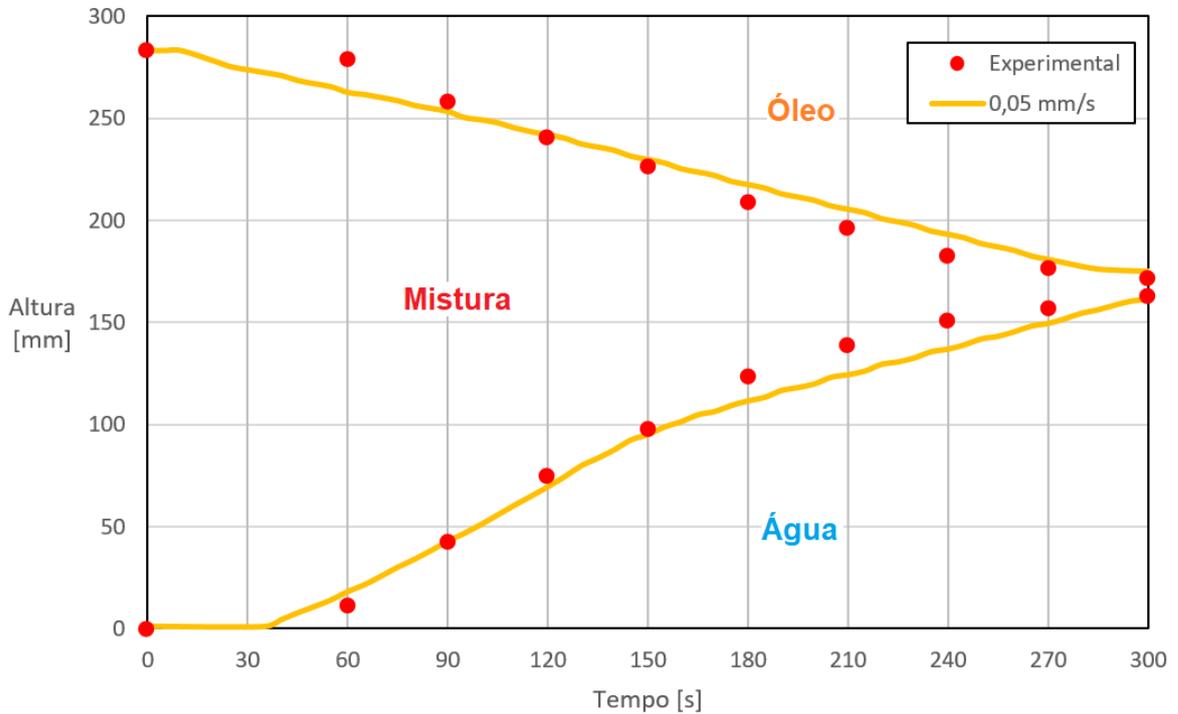
Fonte: Autor.

Figura 33 - Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e velocidade de aproximação crítica para as velocidades de 1,0, 0,05 e 0,01 mm/s para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento A.



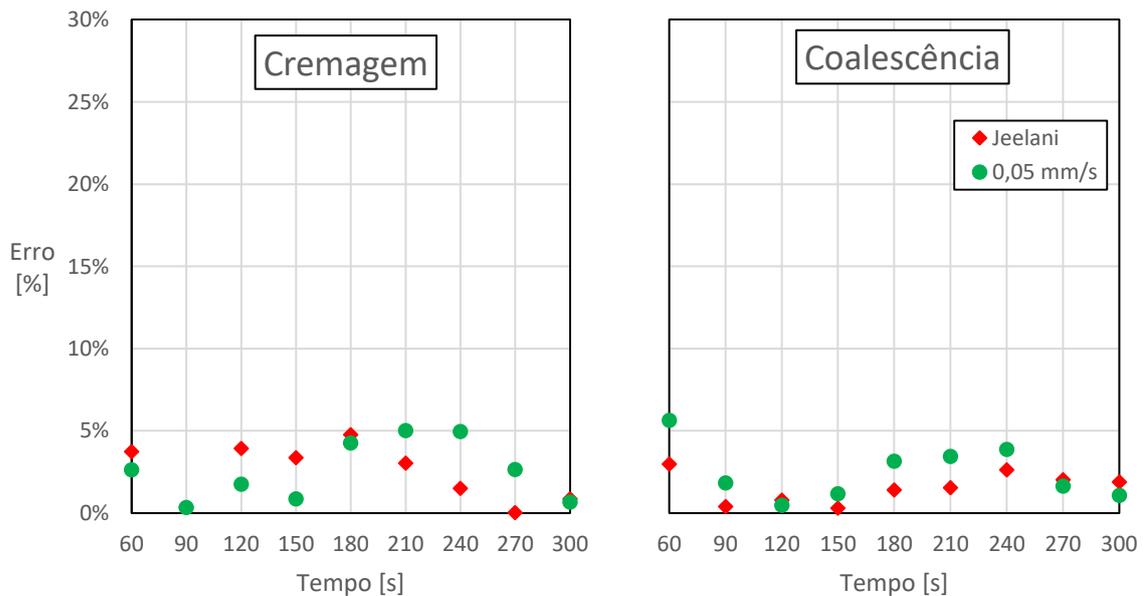
Fonte: Autor.

Figura 34 - Curvas de decaimento para o Experimento B com o modelo de velocidade de aproximação crítica para a velocidade de 0,05 mm/s.



Fonte: Autor.

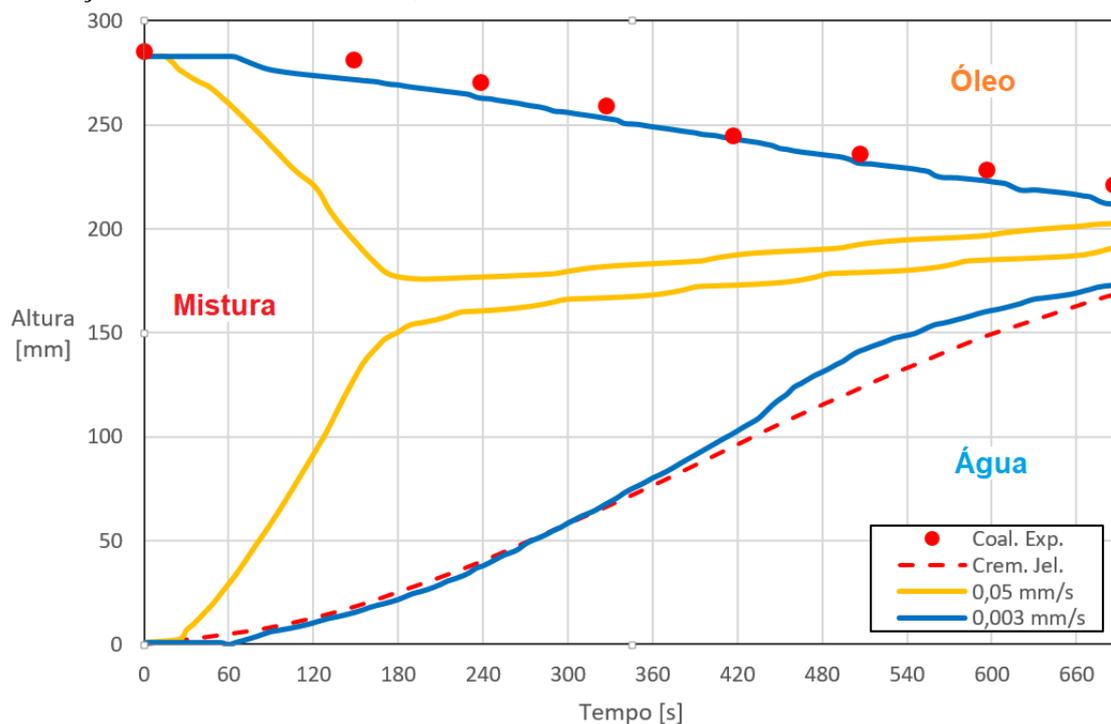
Figura 35 - Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e velocidade de aproximação crítica para a velocidade de 0,05 mm/s para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento B.



Fonte: Autor.

No entanto, a velocidade crítica de 0,05 mm/s não se adequou ao Experimento C com a interface de coalescência definida em 55% como nos Experimentos A e B. Para essa definição de interface de coalescência a velocidade crítica foi calibrada em 0,003 mm/s, valor muito distante do obtido para os Experimentos A e B (Figura 36).

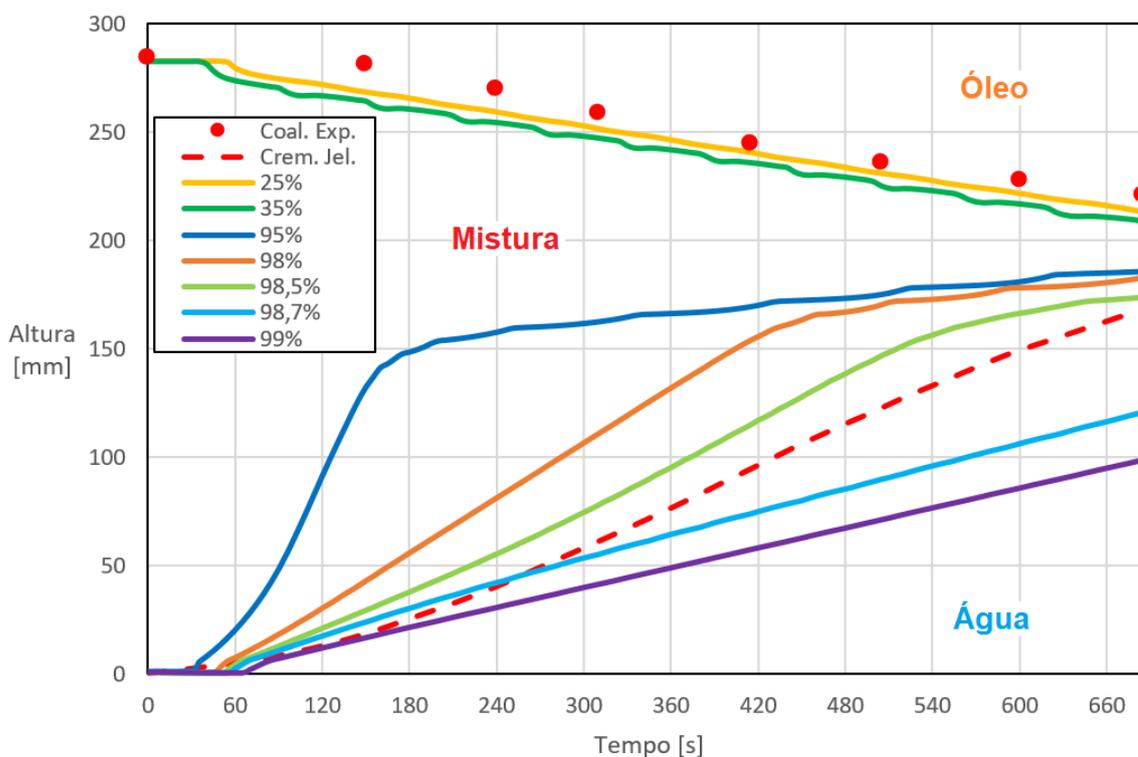
Figura 36 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de velocidade de aproximação crítica com valor de 0,003mm/s.



Fonte: Autor.

Assim, uma nova simulação foi realizada com a velocidade de aproximação crítica definida igual a 0,05 mm/s e a interface de coalescência definida em 65% de fração volumétrica da fase dispersa. O resultado da nova curva de decaimento pode ser visto na Figura 37, com interfaces de cremagem e coalescência com diferentes frações volumétrica. Portanto, esses resultados corroboram com a hipótese assumida para o modelo de eficiência constante de que a diferença entre os experimentos com fração volumétrica inicial de 40% (A e B) e 30% (C) não é uma limitação do modelo de coalescência e que o valor de 4,65 do parâmetro  $n$  do modificador de arrasto é adequado para o sistema estudado, mas que a concentração da interface de coalescência é influenciada pela fração volumétrica inicial e deve ser redefinida quando a fração volumétrica mudar, como feito na simulação da Figura 37.

Figura 37 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de velocidade de aproximação crítica iguala 0,05 mm/s e o modificador de arrasto aplicado até 65% de concentração da fase dispersa.



Fonte: Autor.

A diferença percentual média e a raiz quadrada do somatório dos quadrados das diferenças são apresentadas na Tabela 17 para o modelo de velocidade crítica igual a 0,05 mm/s para os Experimentos A, B e C, respectivamente.

Tabela 17 - Erro médio e quadrado das diferenças com o modelo de velocidade de aproximação igual a 0,05 mm/s para os Experimentos A e B.

Experimento	Interface	Erro Médio	RMS
A	Coalescência	1,36%	4,45
	Cremagem	3,19%	9,72
B	Coalescência	2,47%	8,28
	Cremagem	2,56%	8,73
C	Coalescência 25%	2,67%	8,06
	Coalescência 35%	4,39%	12,69

Fonte: Autor.

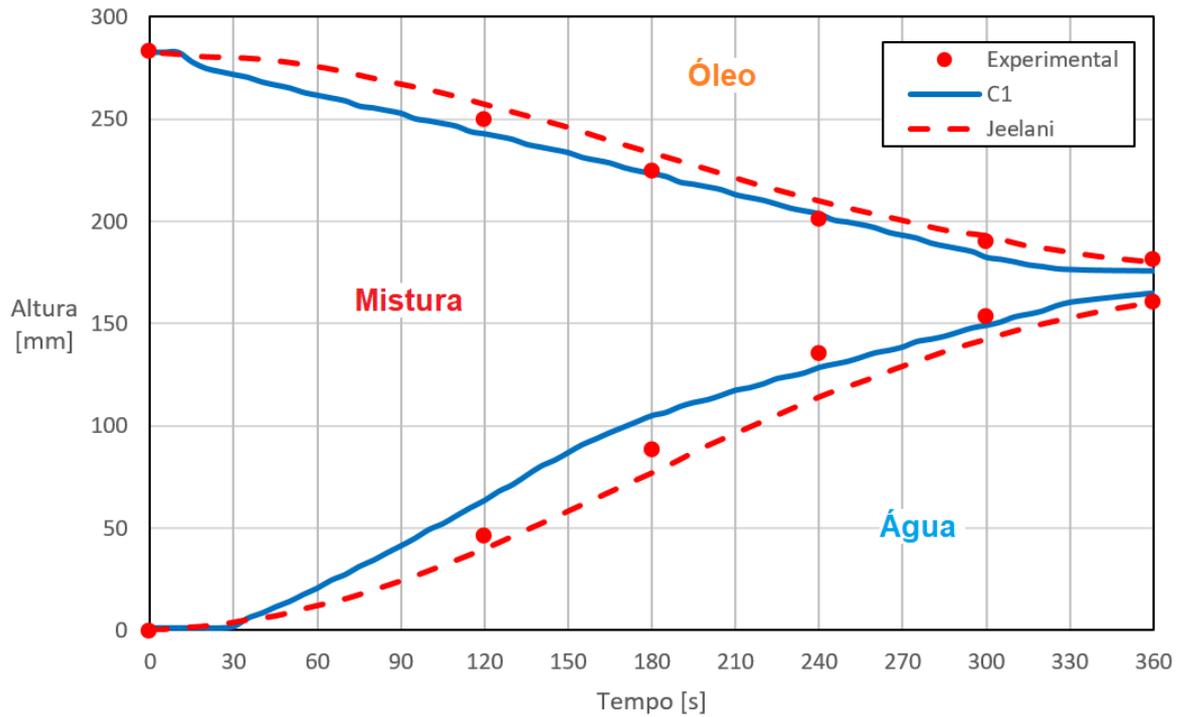
De forma semelhante ao modelo de eficiência de coalescência constante, o mesmo parâmetro empregado no Experimento A também pode ser empregado nos Experimentos B e C, sem a necessidade de recalibração (com exceção da interface de coalescência para o Experimento C), indicando que a velocidade de aproximação crítica é função das características dos líquidos, como massa específica, viscosidade e tensão superficial, e não da DTG e da fração volumétrica. Assim, o modelo de velocidade de aproximação crítica poderia ser aplicado na modelagem de um separador contínua com a velocidade crítica obtida por meio da modelagem da curva de decaimento de um teste de garrafa.

#### **5.3.4. Tempo de Drenagem do Filme**

A curva de decaimento com o modelo de tempo de drenagem do filme para o Experimento A com a constante de ajuste  $C$  igual a 1 (como proposto originalmente por Chester (1991)) é mostrada na Figura 38. O como pode ser observado o resultado do modelo do tempo de drenagem do filme com seu coeficiente padrão foi satisfatório e, portanto, não necessitou ser calibrado por tentativa erro como nos modelos de eficiência constante e velocidade de aproximação crítica. A Figura 39 expõe os erros em relação aos dados experimentais para o Experimento A, que como pode ser observado são da mesma ordem de grandeza do modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).

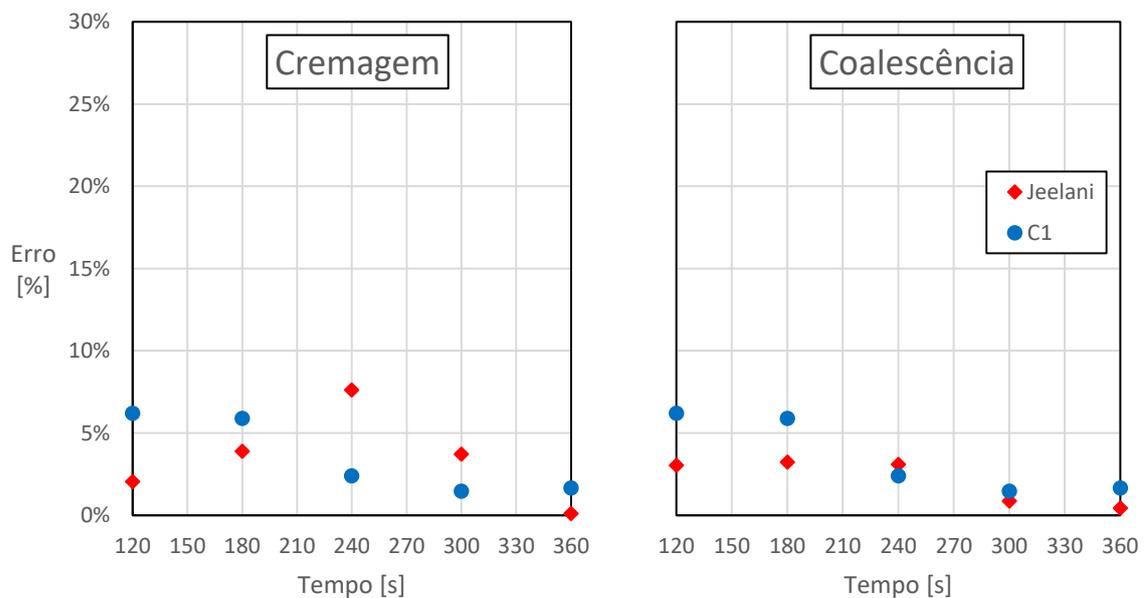
Também de forma semelhante aos outros modelos de coalescência, o parâmetro de ajuste empregado para o Experimento A apresentou bons resultados quando empregado Experimento B, como pode ser visualizado nos resultados das Figuras 40 e 41 que representam a curva de decaimento com os modelos de tempo de drenagem do filme para o Experimento B e o erro em relação aos dados experimentais, respectivamente.

Figura 38 – Curva de decaimento para o Experimento A com o modelo de tempo de drenagem do filme com C igual 1.



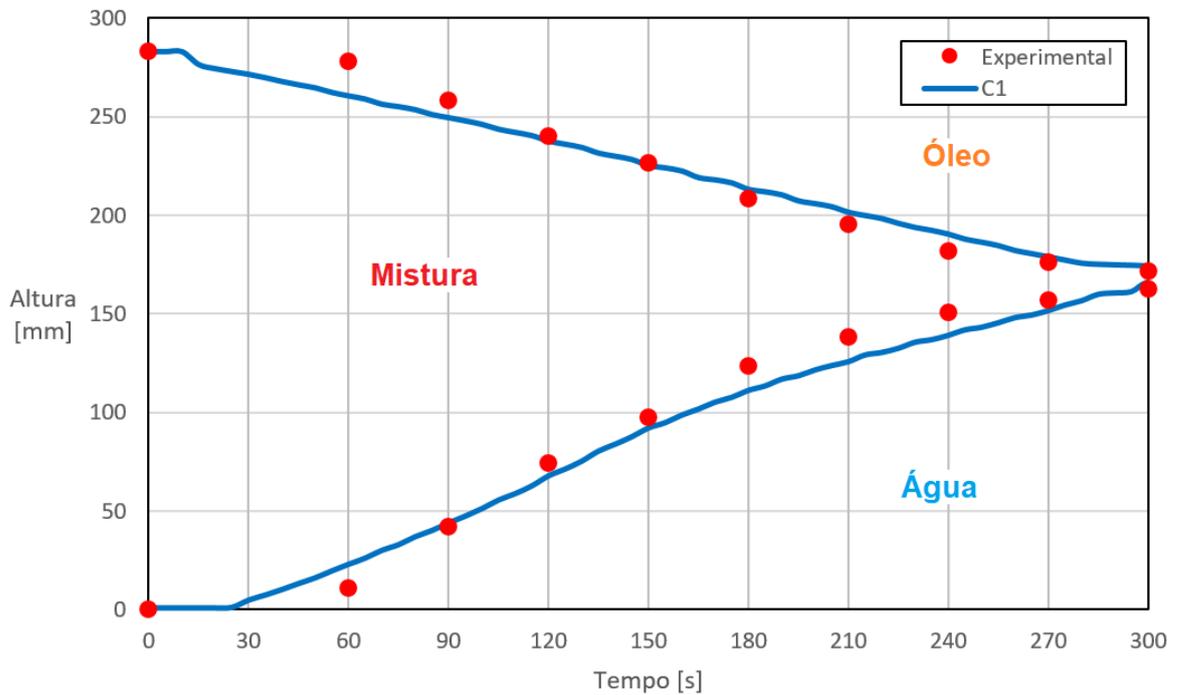
Fonte: Autor.

Figura 39 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e tempo de drenagem do filme com C igual 1 para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento A.



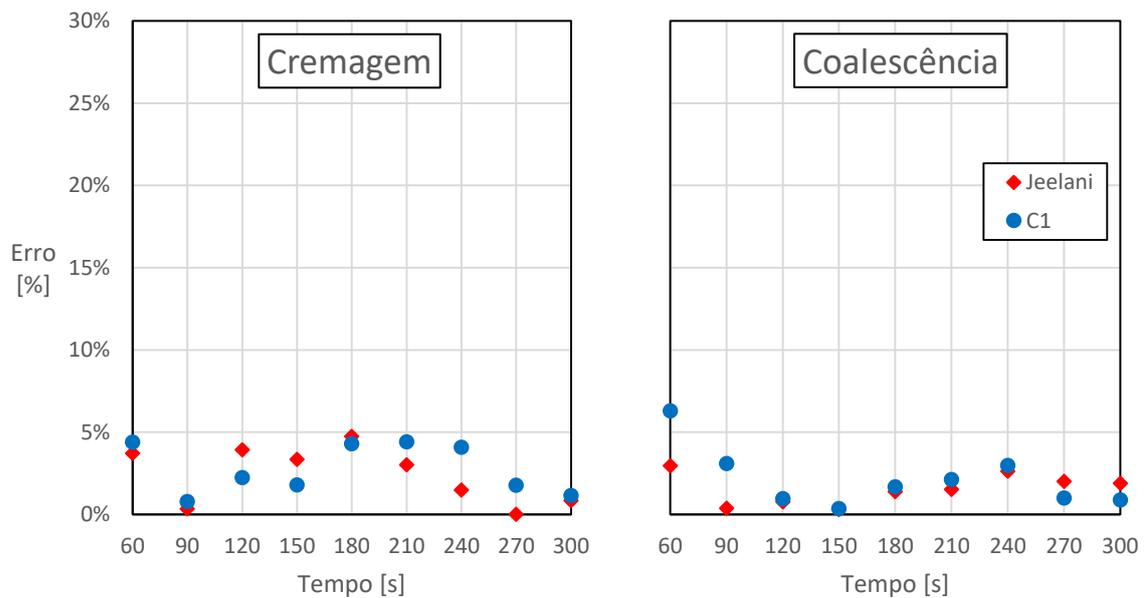
Fonte: Autor.

Figura 40 – Curva de decaimento para o Experimento B com o modelo de tempo de drenagem do filme com C igual 1.



Fonte: Autor.

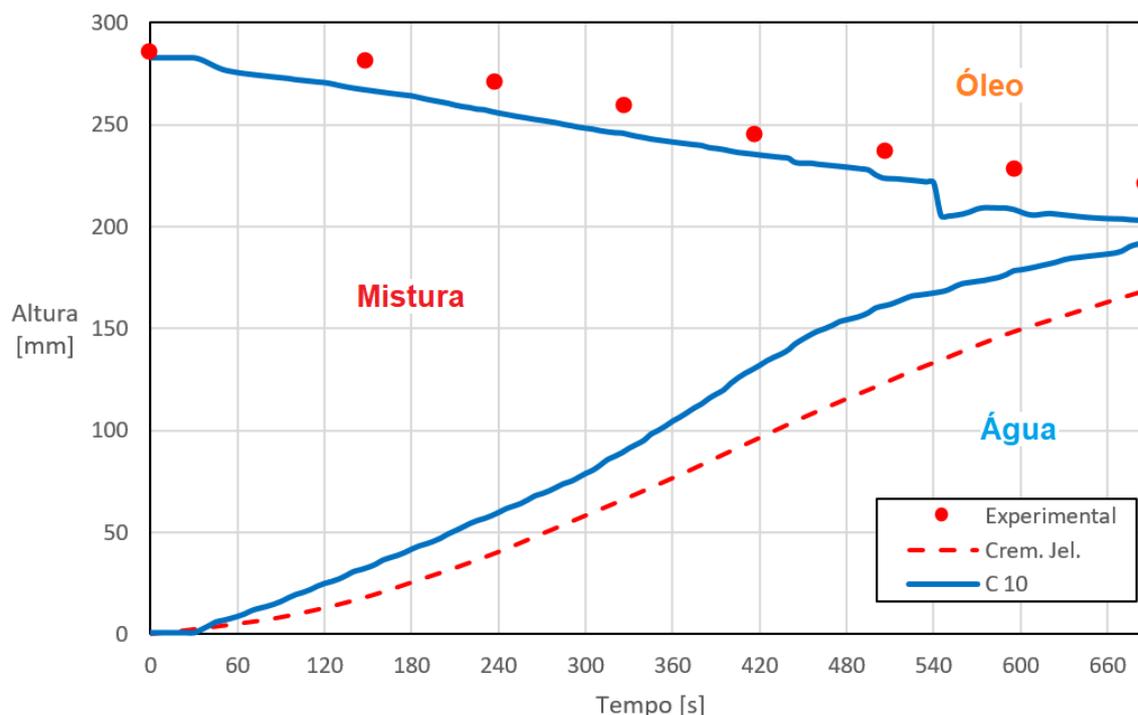
Figura 41 – Erro percentual entre os dados experimentais e os modelos de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) e tempo de drenagem do filme com C igual 1 para as interfaces de cremagem e coalescência do Experimento B.



Fonte: Autor.

Como mostrado na Figura 42, o ajuste da constante C no valor de 1 com as definições de interface de coalescência utilizadas nos Experimentos A e B não apresentaram um resultado satisfatório para o Experimento C. Por tentativa e erro, o valor de C igual a 10 apresentou um resultado próximo dos dados experimentais, contudo, esse valor está muito distante do sugerido por Chester (1991), indicando que a aplicação do modelo para o caso do Experimento C seria fora de sua faixa de aplicação. Outro aspecto importante notado na Figura 42 é que a modelagem do Experimento C apresentou problemas de convergência, propylene em razão do valor discrepante de C, como pode ser notado na curva de coalescência no tempo de 545 s.

Figura 42 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de tempo de drenagem com C igual a 10 e interface de coalescência igual a 55% de fase dispersa.

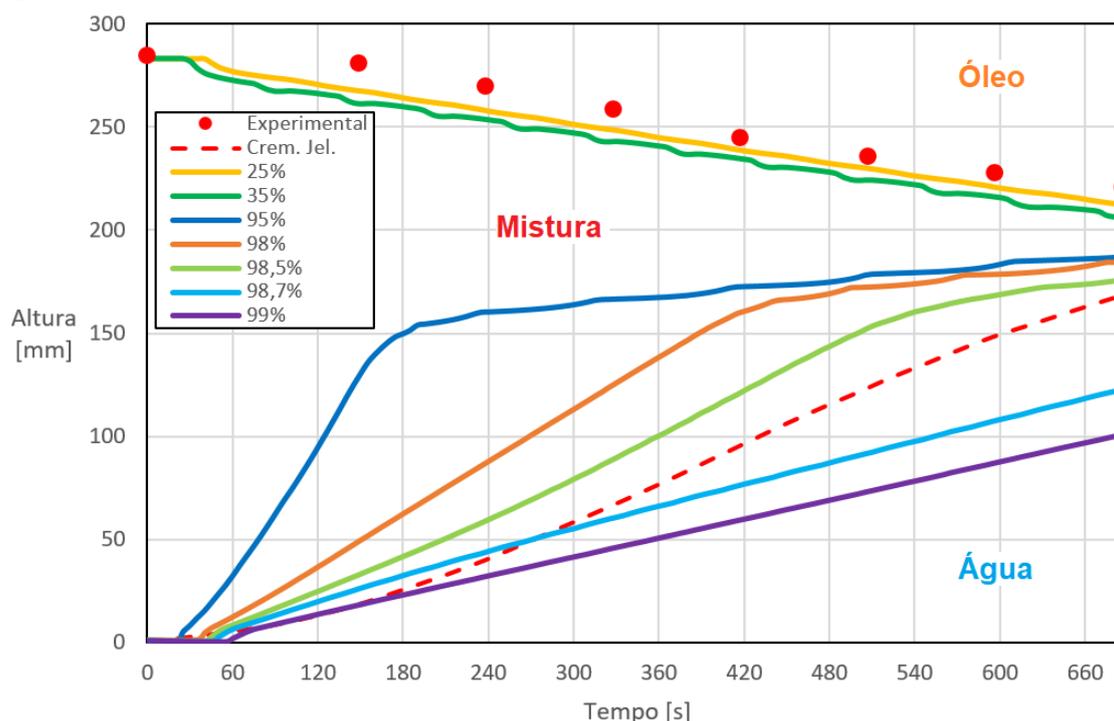


Fonte: Autor.

Contudo, seguindo a análise de que a fração volumétrica inicial tem influência sobre a determinação da interface de coalescência e, portanto, do emprego do modificador de arrasto, o Experimento C foi modelado com C igual a 1 e com a interface de coalescência igual a 65% de fração volumétrica da fase dispersa. O resultado é exposto na Figura 43. Mais uma vez, o novo resultado numérico foi coerente com os dados experimentais, o que ressalta a importância da definição das interfaces e que a DTG e a fração volumétrica não têm

influência sobre os parâmetros do *kernel* de coalescência, sendo estes função das propriedades dos fluidos como tensão superficial, massa específica e viscosidade, por exemplo.

Figura 43 – Curva de decaimento para o Experimento C com o modelo de tempo de drenagem do filme com C igual a 1 e o modificador de arrasto aplicado até 65% de concentração da fase dispersa.



Fonte: Autor.

O erro médio e o RMS para os Experimentos A, B e C são apresentados na Tabela 18, respectivamente. Mais uma vez os erros são da mesma ordem de grandeza dos obtidos por Jeelani, Hosig e Windhab (2005), contudo, com a vantagem de o modelo ter sido empregado com o coeficiente padrão, removendo o processo de calibração. Essa vantagem provavelmente decorre do fato de o modelo do tempo de drenagem do filme levar em conta parâmetros como a tensão superficial e a viscosidade das fases. Além disso, os resultados também mostraram que a escolha do modelo do tempo de drenagem do filme entre gotas deformáveis e com interface parcialmente móvel foi adequada.

Tabela 18 – Erro médio e quadrado das diferenças com o modelo do tempo de drenagem do filme com C igual a 1 para os Experimentos A e B.

<b>Experimento</b>	<b>Interface</b>	<b>Erro Médio</b>	<b>RMS</b>
A	Coalescência	1.61%	5,08
	Cremagem	3.53%	11,60
B	Coalescência	2.16%	7,81
	Cremagem	2.78%	8,83
C	Coalescência 25%	3,23%	9,56
	Coalescência 35%	5,03%	14,56

Fonte: Autor.

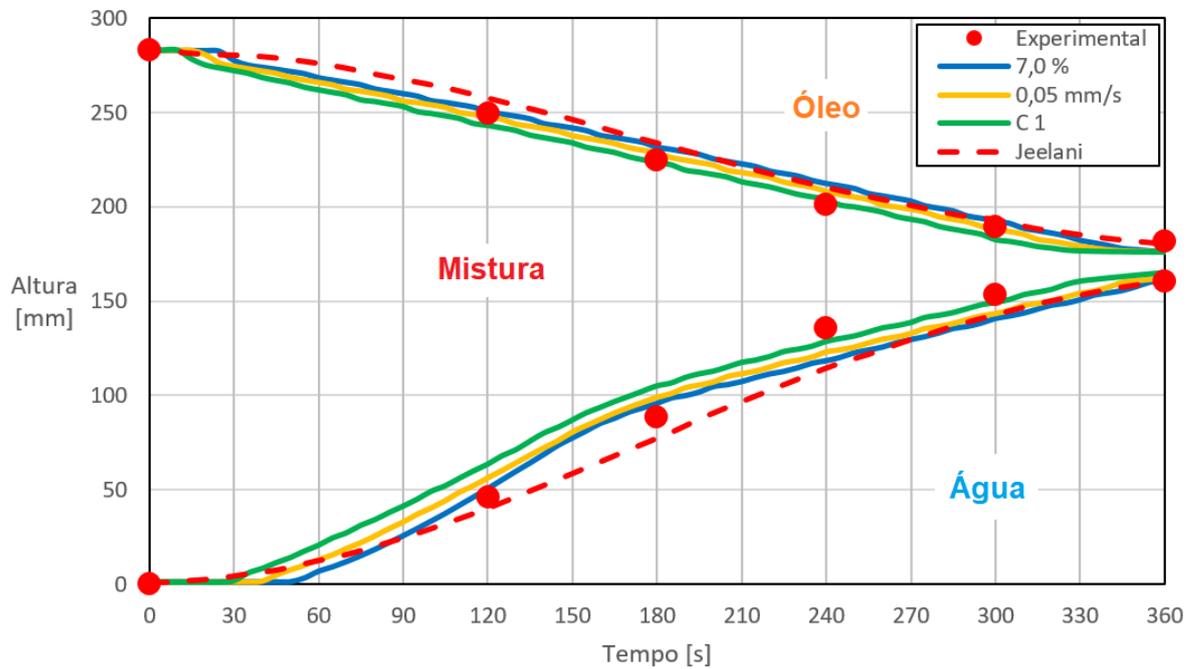
### 5.3.5. Comparação Entre os Modelos de Coalescência

As Figuras 44, 45 e 46 apresentam as curvas de decaimento para os Experimentos A, B e C, respectivamente, com os modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica e tempo de drenagem do filme ajustados em 7,0 %, 0,05 mm/s e C igual a 1, respectivamente, além do modelo analítico de Jeelani, Hosig e Windhab (2005). Para o Experimento A os modelos numéricos apresentaram curva de decaimento com perfis semelhantes e um ponto de inflexão na curva da interface de cremagem em um tempo diferente do obtido pelo modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).

No Experimento B, as curvas de decaimento dos modelos numéricos apresentaram resultados mais próximos, contudo, os perfis das curvas de cremagem não foram tão semelhantes como no Experimento A. É possível perceber também que o modelo do tempo de drenagem constante apresentou um resultado próximo ao do modelo analítico de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).

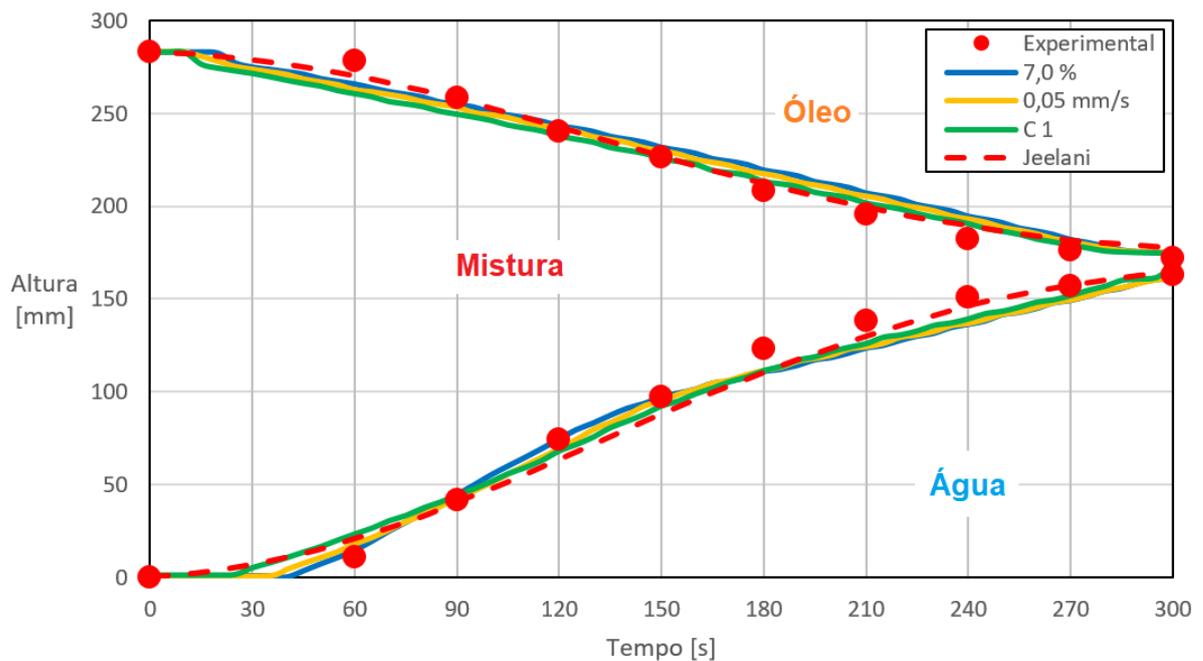
As curvas de decaimento do Experimento C também apresentaram resultados próximos para os três modelos de coalescência, contudo, o modificador de arrasto foi empregado em uma maior faixa de concentração da fase dispersa (até 65%) e as interfaces de coalescência e cremagem são mostradas para os valores de 35, 98 e 99% de fase dispersa.

Figura 44 – Curvas de decaimento experimental do Experimento A dos modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica, tempo de drenagem do filme e de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).



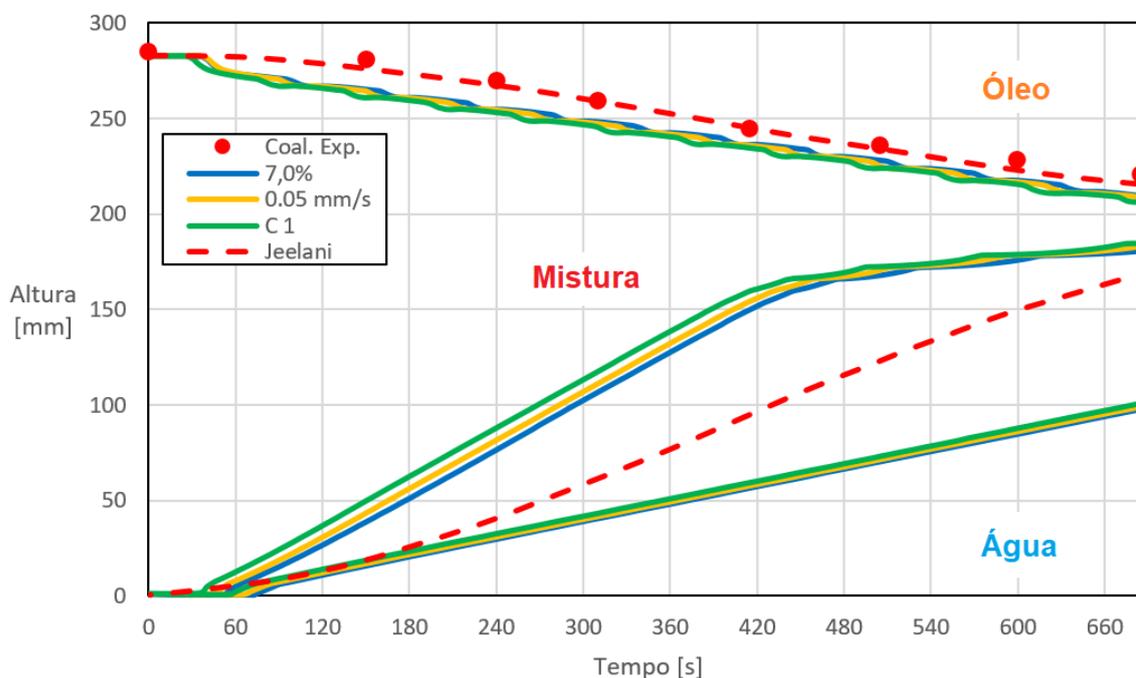
Fonte: Autor.

Figura 45 – Curvas de decaimento experimental do Experimento B dos modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica, tempo de drenagem do filme e de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).



Fonte: Autor.

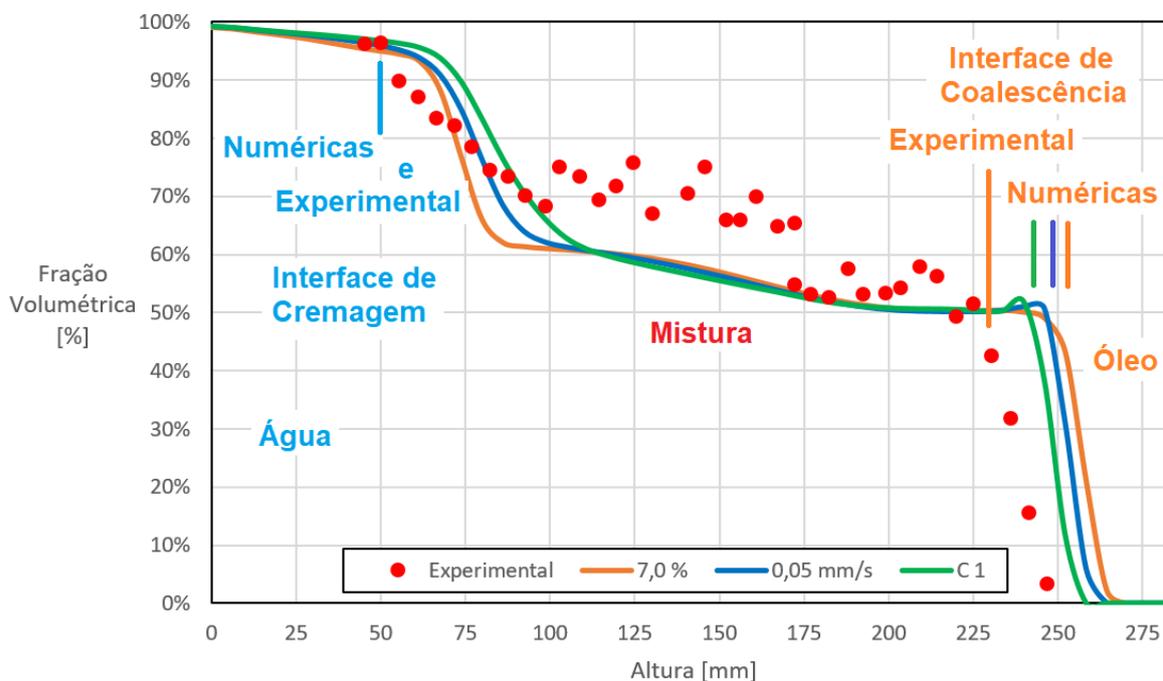
Figura 46 – Curvas de decaimento experimental do Experimento C dos modelos de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica, tempo de drenagem do filme e de Jeelani, Hosig e Windhab (2005).



Fonte: Autor.

Os perfis computacionais e experimental da fração volumétrica da fase contínua no tempo de 120 s ao longo da altura da célula de separação para o Experimento A, bem como as interfaces de cremagem e coalescência numérica e experimentais são apresentados na Figura 47. As simulações sem o modificador de arrasto e a coalescência apresentam um perfil de concentração das fases na região da mistura praticamente constante (Figura 22), contudo, em uma mistura real esse perfil varia ao longo da altura do separador. Essa variação ao longo da altura da célula de separação foi razoavelmente prevista com os modelos numéricos de modificador de arrasto e coalescência empregados. Outro ponto é que o gradiente de concentração na interface de coalescência é muito mais acentuado, ou seja, a transição da mistura para a segunda fase contínua ocorre repentinamente, diferentemente do que ocorre na interface de cremagem. Ambos os gradientes (transição da mistura para as fases separadas nas interfaces de cremagem e coalescência) foram representados nas simulações. Assim, além da curva de decaimento, o perfil de fração volumétrica também foi estimado com razoável precisão pelos modelos numéricos.

Figura 47 – Perfil de fração volumétrica da fase contínua para o Experimento A no tempo de 2 min experimental e dos modelos coalescência calibrados de eficiência constante, velocidade de aproximação crítica e tempo de drenagem do filme.



Fonte: Autor.

Isto posto, os modelos de coalescência apresentaram resultados semelhantes e os resultados não apontam qual modelo foi mais preciso, pois, estes podem, por tentativa e erro, serem calibrados de maneira mais refinada. Contudo, o modelo do tempo de drenagem do filme com interface parcialmente móvel não precisou ser calibrado, posto que ele é o modelo mais completo (fenomenológico) levando em conta as propriedades das fases, diferentemente dos outros modelos que são baseados em coeficientes empíricos. Todos modelos foram capazes de modelar a separação dos sistemas líquidos dos Experimentos A, B e C com precisão razoável, de mesma ordem do modelo de Jeelani, Hosig e Windhab (2005) utilizado como padrão. Entretanto, devido à aproximação feita para estimar a concentração da fase dispersa na interface de coalescência para o experimento C, os erros numéricos para esse experimento foram maiores. Caso a calibragem para os modelos de eficiência constante e velocidade de aproximação crítica não fosse realizada, a dinâmica da separação não teria sido prevista, resultando em valores muito distantes do tempo final de separação e do perfil das curvas de decaimento em relação aos dados experimentais.

Todos os modelos puderam ser empregados com os mesmos parâmetros de ajuste para todos os experimentos, sugerindo que a aplicação destes em um separador contínuo em

regime transite pode ser feita com base em um teste de garrafa. Porém, é preciso verificar se a aplicação dos modelos em um separador contínuo depois da calibração por meio de um teste da garrafa realmente é válida, visto os resultados de Misra e outro (2017), no qual o modelo de eficiência constante não apresentou bons resultados quanto empregado para modelar a eficiência de separação de um separador contínuo.

Outro ponto importante é que os resultados próximos alcançados com três modelos de coalescência indicam que no regime de escoamento estudado ( $Re < 1$ ), colisões suaves favorecem a coalescência, como proposto nos modelos de velocidade de aproximação crítica e tempo de drenagem do filme com interface deformável. Desta forma, não é possível determinar se em faixa diferente do número de Reynolds os modelos de coalescência apresentariam resultados diferentes. As hipóteses assumidas na modelagem do arrasto que consideraram as gotas rígidas (formato esférico e sem recirculação interna) e a influência da fração volumétrica no arrasto também se mostraram satisfatórias. Contudo, atenção especial deve ser dada na identificação da concentração volumétrica nas interfaces, principalmente a interface de coalescência que tem impacto direto sobre a aplicação do modificador de arrasto e, conseqüentemente, o mecanismo de cremagem.

## 6. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

A zona de cremagem laminar de uma separação gravitacional em batelada no regime de Stokes foi modelada em CFD. A modelagem incluiu a influência da DTG, da fração volumétrica da fase dispersa e da taxa de coalescência, por meio de três modelos de coalescência induzida devido à diferença de velocidade de cremagem de gotas com tamanhos diferentes, na dinâmica da separação. Os três modelos de coalescência analisados foram o de eficiência constante, o da velocidade de aproximação crítica e o do tempo de drenagem do filme de gota deformável com interface parcialmente móvel. Como resultado da análise concluiu-se que:

- A metodologia para modelagem da separação gravitacional em CFD seguiu a seguinte ordem de execução: representação da DTG, seleção de modelos multifásicos com o método de solução das equações de balanço populacional, implementação das UDFs e ajuste dos parâmetros dos modelos de coalescência;
- Os parâmetros dos modelos de coalescência dependem das propriedades dos líquidos, como por exemplo a viscosidade, a massa específica e tensão superficial;
- Uma vez calibrados para um sistema de dois líquidos, os parâmetros de ajuste dos modelos de coalescência podem ser aplicados para diferentes condições iniciais, ou seja, diferentes frações volumétricas e DTGs iniciais;
- Na condição de escoamento analisada, regime de Stokes, as colisões das gotas são suaves, sugerindo assim uma equivalência dos modelos nesse regime de escoamento;
- A faixa de fração volumétrica de aplicabilidade dos modelos é de 30 a 40%, sendo que não é possível afirmar que a modelagem é adequada fora dessa faixa;
- O modelo de drenagem do filme com interface parcialmente móvel não precisou ser calibrado, pois este assume em sua formulação parâmetros do escoamento e das fases, enquanto que os modelos de eficiência constante e velocidade de aproximação crítica precisam ter suas constantes empiricamente ajustadas por tentativa e erro;
- A versão do modelo do tempo de drenagem com interface parcialmente móvel foi adaptada para modelar as colisões induzidas devido à diferença de velocidade de cremagem das gotas;
- Além das curvas de decaimento, o perfil de fração volumétrica também foi representado de forma satisfatória;

- O erro médio máximo em relação aos dados experimentais foi de 5,03%;
- O modificador de arrasto de Richardson e Zaki (1954) se mostrou adequado para modelar a influência da fração volumétrica da fase dispersa na restrição do movimento das gotas e, conseqüentemente, na taxa de cremagem;
- A definição das interfaces de cremagem e coalescência é importante para a análise dos resultados;
- A fração volumétrica na interface de coalescência parece ser função do fator de empacotamento das gotas, que é função do grau de dispersão destas;
- A DTG inicial foi adequadamente discretizada pela Quadratura de Gauss-Legendre, bem como a sua evolução com o modelo de Wang e Davis (1996);
- O número de classes requerido para representar a DTG parece ser função do perfil da DTG (por exemplo: monomodal, bimodal e trimodal).
- Uma vez que os parâmetros de ajuste dos modelos de coalescência dependem apenas das propriedades dos líquidos, há a possibilidade da aplicação destes em um separador contínuo; no entanto, resultados de Misra e outros (2017) para o modelo de eficiência constante não concordou com os dados experimentais;

Por fim, como sugestões de trabalhos futuros:

- Inclusão da modelagem da zona densamente compactada;
- Estudo mais aprofundado de outros modelos de modificador de arrasto;
- Aplicação do modelo em separadores contínuos;
- Emprego do DQMOM para solução da EBP;
- Emprego de um algoritmo otimizador para determinação dos parâmetros de ajuste dos modelos de coalescência.

## REFERÊNCIAS

- ABDEL-ALL. H. K.; AGGOUR. M.; FAHIM. M. A. **Petroleum and Gas Field Processing**. Marcel Dekker INC. New York. 2003.
- ABDULKADIR, M.; HERNANDEZ-PEREZ, V., The Effect of Mixture Velocity and Droplet Diameter on Oil-water Separator using Computational Fluid Dynamics (CFD). **International Journal of Chemical. Molecular. Nuclear. Materials and Metallurgical Engineering**, v. 4, n. 1, p. 1-9, 2010. DOI: scholar.waset.org/1999.2/6990.
- ABEYNAIKE, A. et al.. The experimental measurement and modelling of sedimentation and creaming for glycerol/biodiesel droplet dispersions. **Chemical Engineering Science**, v. 79, p. 125-13., 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2012.05.036>.
- ASHGRIZ. N.; POO. J. Y. Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 221. p. 183-204. 1990.
- ANSYS FLUENT 18.2. **Theory guide**. ANSYS. Inc. 2018.
- BARNEA. E.; MIZRAHI. J. A Generalized Approach to the Fluid Dynamics of Particulate Systems: Part 1. General Correlation for Fluidization and Sedimentation in Solid Multiparticle Systems. **The Chemical Engineering Journal**. v. 5. p. 171-189. 1973. DOI: [https://doi.org/10.1016/0300-9467\(73\)80008-5](https://doi.org/10.1016/0300-9467(73)80008-5).
- BATCHELOR, G. K.. **An Introduction to Fluid Dynamics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- BEHZADI, A.; ISSA, R. I.; RUSCHE, H. Modelling of dispersed bubble and droplet flow at high phase fractions. **Chemical Engineering Science**, v. 59, p. 759-770, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2003.11.018>.
- CHESTERS, A. K.: The Modelling Of Coalescence Processes In Fluid-Liquid Dispersions: A Review Of Current Understanding. **Institution of Chemical Engineering**, v. 69. p. 259-270. 1991.
- CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles. Drops. and Particles**. New York: Academic Press Inc, 1978. ISBN 0-12-176950-X.
- COULALOGLOU, C. A.; TAVLARIDES, L. L. Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions. **Chemical Engineering Science**, v. 32, p. 1289-1297, 1977. DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(77\)85023-9](https://doi.org/10.1016/0009-2509(77)85023-9).
- CROWE, C. T.; MICHAELIDES, E. E. Basic Concepts and Definitions. In\_\_\_\_: CROWE. C. T. **Multiphase Flow Handbook**, Boca Raton: Taylor & Francis, 2006. cap. 1. p. 24-25.
- DAMIAN, R. B. **ACOPLAMENTO DE BALANÇO POPULACIONAL À SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS POLIDISPERSOS**. 2007. 105 f. Dissertação (Mestre em Ciências em Engenharia

Química) – Programas de Pós-Graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.

- de ARAUJO, J. F. M. **Estudo dos Modelos de Quebra e Coalescência para Escoamentos Polidispersos**. 2006. Dissertação (Mestrado em Ciências em Engenharia Química) - Pós-Graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro. 2006.
- DIN, G. U. et al.. Modeling of a two-phase countercurrent pulsed sieve plate extraction column - A hybrid CFD and radiotracer RTD analysis approach. **Separation and Purification Technology**, v. 73, p. 302-309, 2010. DOI: 10.1016/j.seppur.2010.04.017.
- ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. E. Eulerian Two-Phase Flow Theory Applied to Fluidization. **International Journal of Multiphase Flow**. v. 22, p. 21-66, 1996. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(96\)90004-X](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(96)90004-X).
- FAGHRI, A.; ZHANG, Y. **Transport Phenomena In Multiphase Systems**. Academic Press. 2006.
- FAVERO, J. L.; SILVA, L. F. L. R.; LAGE, P. L. C., Modeling and simulation of mixing in water-in-oil emulsion flow through a valve-like element using a population balance model. **Computers & Chemical Engineering**, v. 75, p. 155-170, 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.01.017>.
- FRISING, T.; NOÏK, C.; DALMAZZONE, C. The Liquid/Liquid Sedimentation Process: From Droplet Coalescence to Technologically Enhanced Water/Oil Emulsion Gravity Separators: A Review. **Journal of Dispersion Science and Technology**, v. 27, p. 1035-1057, 2006. DOI: 10.1080/01932690600767098.
- FRISING, T. et al., Contribution of the sedimentation and coalescence mechanisms to the separation of concentrated water-in-oil emulsions. **Journal of Dispersion Science and Technology**, v. 29, n. 6, p. 827–834, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1080/01932690701781501>.
- GHAFFARKHAH, A. et al., Application of CFD for designing conventional three-phase oilfield separator. **Egyptian Journal of Petroleum**, v. 26, p. 413-420, 2017. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ejpe.2016.06.003>.
- GOMES, E. F.; GUIMARÃES, M. M. L.; RIBEIRO, L. M. Numerical modelling of a gravity settler in dynamic conditions. **Advances in Engineering Software**, v. 38, p. 810–817, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.advensoft.2006.08.033>.
- GRIMES, B.A. Population balance model for batch gravity separation of crude oil and water emulsions. Part I: Model formulation. **Journal of Dispersion Science and Technology**, v. 33, p. 578–590, 2012a. DOI: <https://doi.org/10.1080/01932691.2011.574946>.
- GRIMES, B.A. et al., Population Balance Model for Batch Gravity Separation of Crude Oil and Water Emulsions. Part II: Comparison to Experimental Crude Oil Separation Data. **Journal of Dispersion Science and Technology**. v. 33. p. 591-598. 2012b. DOI: <https://doi.org/10.1080/01932691.2011.574950>.

- HENSCHKE, M.; SCHLIEPER, L. H.; PFENNIG, A. Determination of a coalescence parameter from batch-settling experiments. **Chemical Engineering Journal**, v. 85, p. 369-378, 2002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(01\)00251-0](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(01)00251-0).
- JEELANI, S. A. K.; HARTLAND, S., Prediction of Steady State Height from Batch Settling Dispersion Data. **AIChE**, v. 35, n. 5, p. 711-720, 1985. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690310503>.
- JEELANI, S. A. K.; HARTLAND, S., Choice Of Model For Predicting Height In Liquid/Liquid Gravity The Dispersion Settlers From Batch Settling Data. **Chemical Engineering Science**, v. 42, n. 8, p. 1927-1938, 1987. DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(87\)80139-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(87)80139-2).
- JEELANI, S. A. K.; HARTLAND, S. Prediction of Sedimentation and Coalescence Profiles in a Decaying Batch Dispersion. **Chemical Engineering Science**, v. 49, n. 3, p. 2421-2429, 1988. DOI: [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(88\)85176-5](https://doi.org/10.1016/0009-2509(88)85176-5).
- JEELANI, S. A. K.; PANDIT, A.; HARTLAND, S. Factors Affecting the Decay of Batch Liquid-Liquid Dispersions. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 68, p. 924-931, 1990. DOI: <https://doi.org/10.1002/cjce.5450680605>.
- JEELANI, S. A. K.; HARTLAND, S. Effect of Dispersion Properties on the Separation of Batch Liquid-Liquid Dispersions. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 37, p. 547-554, 1998. DOI: 10.1021/ie970545a.
- JEELANI, S. A. K.; HOSIG, R.; WINDHAB, E. J. Kinetics of Low Reynolds Number Creaming and Coalescence in Droplet Dispersions. **AIChE Journal**, v. 51, n. 1, p. 149-161, 2005. DOI: 10.1002/aic.10283.
- KAMP, A. M.; CHESTERS, A. K. Bubble coalescence in turbulent flows: A mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity bubbly pipe flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 27, p. 1363-1396, 2001. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(01\)00010-6](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(01)00010-6).
- KANG, W. et al., Flocculation, coalescence and migration of dispersed phase droplets and oil-water separation in heavy oil emulsion. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 81, p. 177-181, 2012. DOI:10.1016/j.petrol.2011.12.011.
- KERDOUSS, F. et al., Two-phase mass transfer coefficient prediction in stirred vessel with a CFD model. **Computers & Chemical Engineering**, v. 32, p. 1943-1955, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2007.10.010>.
- KHAROUA, N.; KHEZZAR, L.; SAADAWI, H.. Application of CFD to Debottleneck Production Separators in a Major Oil Field in the Middle East. In: SPE ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION, 158201, 2012a, San Antonio, USA.
- KHAROUA, N.; KHEZZAR, L.; SAADAWI, H.. Using CFD to Model the Performance of Retrofit Production Separator in Abu Dhabi. In: SPE ABU DHABI INTERNATIONAL PETROLEUM CONFERENCE AND EXHIBITION, 161521, 2012b, Abu Dhabi, UAE

- KHAROUA, N.; KHEZZAR, L.; SAADAWI, H., CFD Modelling of a Horizontal Three-Phase Separator: A Population Balance Approach. **American Journal of Fluid Dynamics**. v. 4, n. 3, p. 101-118, 2013. DOI: 10.5923/j.ajfd.20130304.03.
- KIM. W. K.; LEE. K. L. Coalescence Behavior of Two Bubbles in Stagnant Liquids. **J. of Chem. Eng. of Japan**. v. 20. 1987.
- KUMAR, A.; HARTLAND, S. Gravity Settling in Liquid/Liquid Dispersions. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 63, p. 368-376, 1985. DOI: <https://doi.org/10.1002/cjce.5450630303>.
- KYNCH, G. J. A Theory of Sedimentation. **Trans. Faraday Soc**, v. 48, p. 166-176, 1951. DOI :10.1039/TF9524800166.
- LALEH, A. P.; SVRCEK, W. Y.; MONNERY, W. D. Computational Fluid Dynamics Simulation of Pilot-Plant-Scale Two-Phase Separators. **Chem. Eng. Technol**, v. 34, n. 2, p. 296-306, 2011.
- LALEH. A. P.; SVRCEK. W. Y.; MONNERY. W. D. Computational Fluid Dynamics Simulation of Pilot-Plant-Scale Two-Phase Separators-Part I: A Realistic Simulation. **Oil and Gas facilities**. SPE-162212. 2012. DOI: <https://doi.org/10.1002/ceat.201000302>.
- LATSA, M. et al., Two-phase modeling of batch sedimentation. **Applied Mathematical Modelling**, v. 23, n. 12, p. 881-897, 1999. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(99\)00016-5](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(99)00016-5).
- LEHR, F.; MEWES, D. A transport equation for the interfacial area density applied to bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 1159-1166, 2001. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(00\)00335-3](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(00)00335-3).
- LEHR, F.; MILIES, M.; MEWES, D. Bubble-Size Distributions and Flow Fields in Bubble Columns. **Fluid Mechanics and Transport Phenomena**, v. 48, n. 11, p. 246-2443, 2002. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690481103>.
- LIAO. Y.; LUCAS. D. A Literature Review on Mechanisms and Models for the Coalescence Process of Fluid Particles. **Chemical Engineering Science**., v. 65, p. 2851-2864, 2010. DOI:10.1016/j.ces.2010.02.020.
- LOBO. L.; IVANOV. I.; WASAN. D. Dispersion Coalescence: Kinetic Stability of Creamed Dispersions. **AIChE**. v. 39. n. 2. p. 322-334. 1993. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690390212>.
- LU, Y.; LEE, J. M.; PHELPEES, D. Effect of Internals Baffles on Volumetric Utilization of an FWKO – A CFD Evaluation. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition. 109944. Anaheim. CA. USA. 2007.
- LUO, H. **Coalescence, Breakup and Liquid Circulation in Bubble Column Reactors**. 1993. Tese de Doutorado – Norwegian Institute of Technology. Trondheim. Noruega.1993.

- LUO, H.; SVENDSEN, H. F. Theoretical Model for Drop and Bubble Breakup in Turbulent Dispersions. **AICHE Journal**, v. 42, n. 5, p. 1225-1233, 1996. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690420505>.
- MANNING, F. S.; THOMPSON, R. E. Oilfield Processing Volume Two: Crude Oil. Ed. PennWell Books, Tulsa, Oklahoma, 1995. ISBN10 0-87814-354-8.
- MARCHISIO, D. L. et al., Quadrature Method of Moments for Population-Balance Equations. **AICHE Journal**, v. 49, n. 5, p. 1266-1276, 2003. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690490517>.
- MARCHISIO, D. L.; VIGIL, R. D.; FOX, R. O. Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. **Journal of Colloid and Interface Science**. v. 258. p. 322-334. 2003. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0021-9797\(02\)00054-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9797(02)00054-1).
- MCCLENEY, A. B. et al., Modeling of a Full-Scale Horizontal Liquid-Liquid Separator under Conditions of Varying Flow Rate, Water Cut, and Viscosity with Experimental Validation. In: SPE Offshore Technology Conference, 27762, 2017, Houston, Texas, USA.
- MCGRAW, R. Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments. **Aerosol Science and Technology**, v. 27, p. 255-265, 1997. DOI: <https://doi.org/10.1080/02786829708965471>.
- MILIOLI, F. E.; MILIOLI, C. C. Modelagem de Dois Fluidos do Escoamento Gás-Sólido em Reatores de Leito Fluidizado Circulante. In: RODRIQUEZ, O. M. H. **Escoamento Multifásico**, v. 1, 1ª ed., Rio de Janeiro: ABCM. 2011.
- MITRE, J. F. et al., Droplet breakage and coalescence models for the flow of water-in-oil emulsions through a valve-like element. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 92, p. 2493-2508, 2014. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2014.03.020>.
- MISRA, A. et al., Simulating separation of a multiphase liquid-liquid system in a horizontal settler by CFD. **Chemical Engineering Science**, v. 167, p. 242-250, 2017. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2017.03.062>.
- MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J. An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems. **J. Fluid Mech**, v. 55, n2, p. 193-208, 1972.
- NADIV, C.; SEMIAT, R. Batch Settling of Liquid-Liquid Dispersion. **Ind. Eng. Chem. Res**, v. 34, p. 2427-2435, 1995. DOI: 10.1021/ie00046a026.
- NIECKELE, A. O. Métodos Computacionais para Escoamento Multifásico. In: RODRIQUEZ, O. M. H. **Escoamento Multifásico**. v. 1, 1ª ed., Rio de Janeiro: ABCM. 2011. p. 6.1-6.65.
- NOÏK, C.; PALERMO, T.; DALMAZZONE, C. Modeling of Liquid/Liquid Phase Separation: Application to Petroleum Emulsions. **Journal of Dispersion Science and Technology**, v. 34, p. 1029-1042, 2013. DOI: 0.1080/01932691.2012.735929.
- OSHINOWO, L. M.; QUINTERO, C. G.; VILAGINES, R. D. CFD and Population Balance Modeling of Crude Oil Emulsions in Batch Gravity Separation – Comparison to

- Ultrasound Experiments. **Journal of Dispersion Science and Technology**, v. 7, n. 5, p. 665-575, 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/01932691.2015.1054508>.
- PALERMO, T. et al., Liquid-Liquid Separation in Gravitational Subsea Separators. In: SPE Offshore Technology Conference, 22458, 2011, Rio de Janeiro, Brazil.
- PANDA, S. K. et al. Numerical simulations of liquid-liquid flow in a continuous gravity settler using OpenFOAM and experimental verification. **Chemical Engineering Journal**. v. 310, p. 120-133, 2017. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2016.10.102>.
- PANJWANI, B. et al.. Dense Packed Layer Modeling in Oil-Water Dispersions: Model Description, Experimental Verification and Code Demonstration. **Journal of Dispersion Science and Technology**, v. 36, p. 1527-1537, 2015. DOI: 10.1080/01932691.2014.1003221.
- PRINCE. M. J.; BLANCH. H. W. Bubble Coalescence and Break-Up in Air-Sparged Bubble Columns. **AIChE Journal**. v. 36. n. 10. p. 1485-1499. 1990. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.690361004>.
- RAMKRISHNA, D. **Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering**. ACADEMIC PRESS, 2000. ISBN: 0-12-576970-9.
- RANADE, V. V. **Computational flow modeling for chemical reactor engineering**. India: Academic Press, 2002.
- RICHARDSON, J. F.; ZAKI, W. N. Sedimentation and Fluidisation: Part I. **Trans IChemE**, v. 32, p. S82-S100. 1954.
- ROSA, E. S. Apêndice D. In: \_\_\_\_\_ **Escoamento Multifásico Isotérmico: Modelos de multifluidos e de mistura**. Porto Alegre: Bookman, 2012, p. 217-234.
- ROUDSARI, S. F. et al., CFD modeling of the mixing of water in oil emulsions. **Computers & Chemical Engineering**, v. 45, p. 124-136, 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.06.013>.
- RUSCHE, H.; ISSA, R. I. The Effect of Voidage on the Drag Force on Particles, Droplets and Bubbles in Dispersed Two-Phase Flow. In: JAPANESE EUROPEAN TWO-PHASE FLOW MEETING, 2000, Tsukuba, Japan.
- SCHILLER, L.; NAUMANN, A. A drag coefficient correlation. **VDI Zeitung**. v. 77, n 318, p. 51. 1935.
- SEADER, J. D., HENLEY, E. J., ROPER, D. K., Separation Process Principles: Chemical and Biochemical Operations. 3a ed. John Wiley & Sons, Inc. 2010, USA.
- SILVA, L. F. L .R; DAMIAN, R. B.; LAGE, P. L. C. Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages. **Computers & Chemical Engineering**, v. 32, p. 2933-2945, 2008. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2008.03.007.
- SIMMONS, M.; J. H.; WILSON, J. A.; AZZOPARDI, B. J. Interpretation of the Flow Characteristics of a Primary Oil–Water Separator from the Residence Time Distribution. **Institution of Chemical Engineers**, v. 80, p. 471-481, 2002.

- SIMMONS, M. J. H. et al., Residence Time Distributions and Flow Behaviour within Primary Crude Oil–Water Separators Treating Well-Head Fluids. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 82, n. A10, p. 1383–1390, 2004. DOI: <https://doi.org/10.1205/cerd.82.10.1383.46735>.
- SOUZA, W. J. et al., Effect of Water Content, Temperature and Average Droplet Size on the Settling Velocity of Water-in-Oil Emulsions. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 32, n. 2, p. 455–464, 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/0104-6632.20150322s00003323>.
- TSUCHIYA, K et al., Suspension viscosity and bubble rise velocity in liquid-solid fluidized beds. **Chem. Eng. Sci.**, v. 52, p. 3053-3066, 1997. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(97\)00127-9](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(97)00127-9).
- VILAGINES, R. D.; AKHRAS, A. R., Three-Phase Flows Simulation for Improving Design of Gravity Separation Vessels. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition. 134090, 2010, Florence, Italy.
- WANG, H.; DAVIS, R. H., Experiments on phase separation of dilute dispersions of coalescing drops. **Journal of Colloid and Interface Science**. v. 181, p. 93-98, 1996. DOI: <https://doi.org/10.1006/jcis.1996.0359>.
- WANG, T.; WANG, J.; JIN, Y. Population Balance Model for Gas-Liquid Flows: Influence of Bubble Coalescence and Breakup Models. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 44, p. 7540-7549, 2005. DOI: 10.1021/ie0489002.
- WANG, T.; WANG, J.; JIN, Y. A CFD–PBM Coupled Model for Gas–Liquid Flows. **AIChE Journal**, v. 52, n. 1, p. 125-140, 2006. DOI: 10.1002/aic.10611.
- WARREN, K. W. Emulsion Treating. In: ARNOLD, K. E. **Facilities and Construction Engineering**, v. 3. Richardson, TX, USA: Society of Petroleum Engineers. 2007.
- WHITE, F. M. **Fluid mechanics**, ed. 7, McGraw-Hill Higher Education. p. 488. 2010.
- YE, S. et al., PIV measurement and CFD simulation of liquid-liquid flow of a settler in rare earths solvent extraction mixer-settler. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 62, p. 568-576, 2016. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2016.07.014>.
- ZEMEL, B.; BOWMAN, R. W., Residence Time Distribution in Gravity Oil-Water Separators. **Society of Petroleum Engineering of AIME**, p. 275-282, 1978. DOI: <https://doi.org/10.1205/cerd.82.10.1383.46735>.
- ZHANG, H. et al., Simulation on water and sand separation from crude oil in settling tanks based on the particle model. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 156, p. 366-372, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2017.06.012>.

## APÊNDICE – A

Polinômios representativos das DTGs iniciais.

Exp.	Faixa de Tam. de Gotas	Polinômio Representativo
A	3,3 – 174,9 $\mu\text{m}$	$1,38913 \times 10^{-13} \times d^6 - 6,24801 \times 10^{-11} \times d^5 + 8,87706 \times 10^{-9} \times d^4$ $- 3,76127 \times 10^{-7} \times d^3 + 1,45303 \times 10^{-6} \times d^2 + 5,10273 \times 10^{-4} \times d$ $- 1,74831 \times 10^{-3}$
	174,9 – 469,8 $\mu\text{m}$	$3,39169 \times 10^{-13} \times d^5 - 6,48912 \times 10^{-10} \times d^4 + 4,77505 \times 10^{-7}$ $\times d^3 - 1,66096 \times 10^{-4} \times d^2 + 2,62515 \times 10^{-2} \times d + 1,33659$
B	5,3 – 263,1 $\mu\text{m}$	$2,76275 \times 10^{-14} \times d^6 - 1,69018 \times 10^{-11} \times d^5 + 2,94508 \times 10^{-9} \times d^4$ $- 5,70458 \times 10^{-8} \times d^3 - 1,42591 \times 10^{-5} \times d^2 + 8,7456 \times 10^{-4} \times d + 6,2996$ $\times 10^{-3}$
	263,1 – 471,0 $\mu\text{m}$	$-71329 \times 10^{-8} \times d^4 + 8,1535 \times 10^{-5} \times d^2 - 3,1036 \times 10^{-2} \times d - 3,9872$
C	1,4 – 166,8 $\mu\text{m}$	$-1,15277 \times 10^{-11} \times d^5 + 4,12416 \times 10^{-9} \times d^4 - 4,43931 \times 10^{-7}$ $\times d^3 + 2,16305 \times 10^{-5} \times d^2 + 3,89985 \times 10^{-6} \times d + 1,51485 \times 10^{-3}$
	166,8 – 447,2 $\mu\text{m}$	$1,94434 \times 10^{-12} \times d^5 - 3,19215 \times 10^{-9} \times d^4 + 2,04597 \times 10^{-6} \times d^3 -$ $6,34273 \times 10^{-4} \times d^2 + 9,34232 \times 10^{-2} \times d - 5,00973$

Fonte: Autor.