SOLUÇÃO DE EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL VIA TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE.

C. H. RODRIGUES DE MOURA[1], C. DA SILVA BATISTA[1]

[1] Universidade Federal do Pará, Faculdade de Engenharia Química
E-mail para contato: carlos.moura@itec.ufpa.br

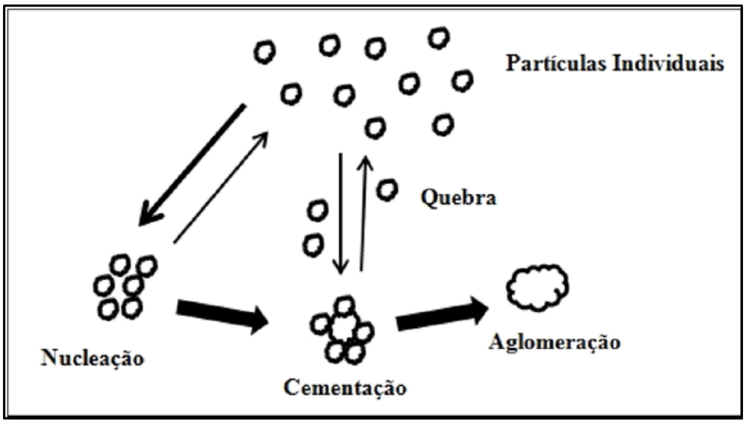
RESUMO – A descrição de uma variedade de processos envolvendo a formação de sistemas particulados requer um entendimento das equações de balanço populacional (PBE). Essas equações buscam prever a evolução da distribuição de uma ou mais propriedades que caracterizam o indivíduo, partículas ou entidades, e a PBE dinâmica é em essência uma equação de balanço de número para descrever essa evolução. O desenvolvimento de métodos para resolver a equação de PB tem sido uma área de investigação ativa ao longo das duas últimas décadas. Para esse trabalho, propõe-se usar a Técnica da Transformada de Laplace na solução de problemas de balanço populacional (PB) com formulações hiperbólicas e não lineares na forma integro-diferencial parcial o qual é raramente tratada analiticamente. A partir da sua resolução, é possível estimar a função densidade de tamanho de partículas, e assim prever o comportamento dinâmico do sistema físico.

1. INTRODUÇÃO

Com vistas de implantar um projeto para uma nova planta química para região Amazônica, é imperioso compreender o processo de precipitação do tri - hidróxido de alumínio (Al(OH)3) no Processo Bayer, já que o mesmo é responsável pela morfologia, granulometria, qualidade da alumina e consequentemente é responsável direto pela qualidade do alumínio primário produzido nas reduções.

A precipitação acontece através de várias etapas, sendo resultado de vários mecanismos, dentre eles a nucleação, cementação, agregação e quebra, conforme mostra a figura 1. Como o processo é rápido, com mistura em várias escalas, desempenha um importante papel na determinação da distribuição de tamanho do cristal final (CSD) e na morfologia dos cristais (MARCHISIO et al., 2002).

Figura 1 – Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração.



O estabelecimento de um modelo de Balanço Populacional (PB) em um sistema de precipitação é geralmente simples. Nas formulações matemáticas são estabelecidos os termos para descrever a aglomeração de cristais, o processo onde os cristais colidem e aderem para formar uma entidade maior, crescimento de cristais pela deposição de soluto da solução, e nucleação. No entanto, a resolução da equação de PB pode ser difícil, especialmente quando a aglomeração está presente. Soluções analíticas existem apenas para casos simples, por exemplo, onde qualquer aglomeração ou o crescimento é o único processo cinético envolvido no sistema. O desenvolvimento de métodos para resolver a equação de PB tem sido uma área de investigação ativa ao longo das últimas duas décadas.

A equação de Balanço Populacional (PBE) dada pela Equação (1) foi proposta por Ilievski (2001) que representa a precipitação com supersaturação constante e núcleo de aglomeração da gibsita (subproduto do processo Bayer em refinaria de alumina) independente do tamanho da partícula.

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -G\frac{\partial n(v,t)}{\partial v} + \frac{\beta}{2}\int_0^v n(\overline{v},t)n(v-\overline{v},t)d\overline{v} - \beta n(v,t)\int_0^\infty n(\overline{v},t)d\overline{v} \tag{1}$$

Sujeito as seguintes condições inicial e de contorno:

$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0}e^{-v/v_0} \tag{1.a}$$

$$n(0,t) = 0 \tag{1.b}$$

Na Equação (1) acima, o termo G=dv/dt, é a taxa de crescimento de partículas de volume v, n(v,t) é a função número de densidade cristalina, $\beta(v,\tilde{v})$ é o coeficiente de coagulação para partículas de volume v e $\tilde{v}$. O primeiro termo do lado direito está relacionado à taxa de crescimento de partículas por transferência de material para partículas individuais, o segundo representa o acúmulo de partículas na escala de tamanho (v,v+dv) pela colisão de duas partículas $v-\tilde{v}$ e para formar uma partícula de volume (assumindo conservação de volume durante a coagulação), o terceiro representa a taxa de perda na escala de tamanho de partícula (v,v+dv) pela colisão com todas as outras partículas.

2. METODOLOGIA

A técnica da Transformada de Laplace é uma ferramenta poderosa na determinação de soluções de equações diferenciais ordinárias com condições iniciais. O operador $\mathcal{L}$ é um operador integral (linear) que remove derivadas, transformando EDOs em equações algébricas simples. A transformada de Laplace é definida por uma integral variando de zero a infinito. A seguir algumas particularidades da transformada de Laplace (RAINVILLE, 1964; BALDINO, 1979):

I) Definição da transformada de Laplace: Seja F(t) uma função de t definida para t>0. Então, a transformada de Laplace de F(t) é representada por é definida por:

$$\mathcal{L}\left\{F(t)\right\} = f(s) = \int_0^\infty e^{-st} F(t)dt \tag{2}$$

II) Notação: Se uma função de t é indicada em termos de uma letra maiúscula, tal como F(t), G(t), Y(t), etc., a transformada de Laplace da função é denominada pela letra minúscula correspondente, isto é, f(s), g(s), y(s), etc. Em outros casos, um til (~) pode ser usado para denotar a transformada de Laplace.

III) Condições suficientes para existência da transformada de Laplace: Teorema: Se F(t) é seccionalmente contínua em todo intervalo finito $0 \le t \le N$ e de ordem exponencial γ para $t>N$, então sua transformada de Laplace *f(s)* existe para todo $s>\gamma$.

IV) Métodos para encontrar transformadas de Laplace: Há vários métodos disponíveis para determinar transformadas de Laplace, como indicado na seguinte lista: Método direto, Método das séries, Método das equações diferenciais, Método em relação a um parâmetro, Diferenciação em relação a um parâmetro, Métodos diversos, Uso de tabelas.

V) A transformada inversa de Laplace: Se a transformada de Laplace de uma F(t) é *f(s)*, isto é, se $\mathcal{L}\left\{F(t)\right\} = f(s)$, então F(t) é chamada transformada inversa de Laplace de *f(s)* e escreve-se simbolicamente $F(t) = \mathcal{L}^{-1}\left\{f(s)\right\}$, onde é chamado operador da transformada inversa de Laplace.

VI) Métodos para encontrar transformadas inversas de Laplace: Método das frações parciais, Método das séries, Método das equações diferenciais, Diferenciação em relação a um parâmetro, Métodos diversos usando os teoremas acima, Uso de tabelas, A fórmula complexa de inversão.

3. RESULTADOS

Para resolver o modelo matemático dado pela equação íntegro diferencial parcial proposto por RAMABHADRAN et al. (1976), a técnica da transformada de Laplace foi empregada. Para este caso, considerou-se a taxa de coagulação constante ($\beta = \beta_0$) e taxa de condensação linear:

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + G\frac{\partial[vn(v,t)]}{\partial v} = D_{ab}\frac{\partial^2 n(v,t)}{\partial v^2} + \frac{\beta}{2}\int_0^v n(\overline{v},t)n(v-\overline{v},t)d\overline{v} - \beta n(v,t)\int_0^\infty n(\overline{v},t)d\overline{v} \tag{3.1}$$

Com as seguintes condições de contorno e inicial:

$$n(0,t) = 0$$
$$\frac{\partial n(\mathrm{v},\mathrm{t})}{\partial v} = 0 \tag{3.1.a,c}$$
$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0}e^{-v/v_0}$$

Aplicando a transformada de Laplace em cada termo da Equação (3.1), a fim de remover a variável independente v, obtém-se:

$$\mathrm{L}\left[\frac{\partial n(v,t)}{\partial t}\right] = \frac{\partial \overline{n}(\mathrm{s},t)}{\partial t}\ ;\ \mathrm{L}\left[\frac{\partial[vn(v,t)]}{\partial v}\right] = -s\frac{d\overline{n}(s,t)}{ds} \tag{3.2.a,b}$$

$$\mathrm{L}\left[\frac{\partial^2 n(v,t)}{\partial v^2}\right] = s^2\overline{n}(s,t) \tag{3.2.c}$$

$$\mathrm{L}\left[\int_0^v n(\overline{v},t)n(v-\overline{v},t)d\overline{v}\right] = \overline{n}(s,t)^2 \tag{3.2.d}$$

$$\mathrm{L}\left[n(v,t)\right] = \overline{n}(s,t) \tag{3.2.e}$$

Portanto, a equação diferencial transformada para este caso, a partir dos resultados das Equações (3.2), juntamente com a condição inicial, dada pela Eq. (3.1.c), também transformada, são escritas como:

$$\frac{\partial \overline{n}(\mathrm{s},t)}{\partial t} - Gs\frac{\partial n(\mathrm{s},t)}{\partial s} = D_{ab}s^2\overline{n}(s,t) + \frac{\beta_0}{2}\overline{n}(s,t)^2 - \beta Mo(t)n(\mathrm{s},t) \tag{3.3}$$

$$n(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s+(1/v_0)} \tag{3.4}$$

O momento de ordem zero $Mo(t)$ que aparece na Eq. (3.3) é obtido a partir da sua definição usual sendo dado por (RAMABHADRAN et al., 1976):

$$Mo(t) = \int_0^\infty n(v,t)dv = \frac{2N_0}{2+\beta_0 N_0 t} \tag{3.5}$$

Rearranjando,

$$\frac{\partial \overline{n}(\mathrm{s},t)}{\partial t} - Gs\frac{\partial n(\mathrm{s},t)}{\partial s} = (D_{ab}s^2 - \beta Mo)\overline{n}(s,t) + \frac{\beta_0}{2}\overline{n}(s,t)^2 \tag{3.6}$$

Resolvendo a Equação (3.6) através do método das características:

$$\frac{ds}{d\eta} = \frac{ds}{dt} = -Gs \tag{3.7.a}$$

$$s_0 = s\exp(Gt) \tag{3.7.b}$$

$$\frac{\partial \overline{n}(\mathrm{s},t)}{\partial t} = (D_{ab}s^2 - \beta Mo)\overline{n}(s,t) + \frac{\beta_0}{2}\overline{n}(s,t)^2 \tag{3.7.c}$$

Substituindo a Eq. (3.9.b) na Eq. (3.4), obtém-se a condição inicial:

$$\overline{\mathrm{n}}(s,0) = \frac{\left(N_0/v_0\right)}{s\exp(Gt) + \left(1/v_0\right)} \tag{3.9.d}$$

Resolvendo a Eq. (3.9.c) pelo teorema de Bernoulli e usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.9.d), resulta:

$$\overline{n}(s,t) = \frac{2\beta_0 N_0{}^2}{2\beta_0 N_0^2 C e^{-D_{ab}s^2 t}(2+\beta_0 N_0 t)^2 - e^{\frac{-2D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0} - D_{ab}s^2 t}(2+\beta_0 N_0 t)\left(\varphi\right)} \tag{3.7.e}$$

Onde,

$$\varphi = -\beta_0 e^{\frac{-D_{ab}s^2(2+\beta_0 N_0 t)}{\beta_0 N_0}} N_0 + D_{ab}s^2(2+\beta_0 N_0 t)\,\mathrm{Ei}\left[\frac{D_{ab}s^2(2+\beta_0 N_0 t)}{\beta_0 N_0}\right] \tag{3.7.f}$$

Então em *t = 0* têm-se

$$C = \frac{2\beta_0 N_0\left(v_0 s e^{gt} + 1\right) + 2e^{\frac{-2D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0}}\left(-\beta_0 e^{\frac{-2D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0}} N_0 + 2D_{ab}s^2\,\mathrm{Ei}\left[\frac{2D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0}\right]\right)}{8\beta_0 N_0^2} \tag{3.7.g}$$

Substituindo a Equação (3.7.g) na Equação (3.7.e), chega-se na Equação (3.8) abaixo:

$$n(s,t) = {(8\beta_0 e^{-D_{ab}s^2 t} N_0^{\,2})}\Big/{(2+N_0\beta_0 t)} \left(2\beta_0 N_0 \left(2 + 2e^{-\frac{D_{ab}s^2(4+N_0\beta_0 t)}{\beta_0 N_0}} + N_0\beta_0 t - e^{\frac{-4D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0}} (2+\beta_0 N_0 t) + e^{gt} s(2+\beta_0 N_0 t) v_0 \right) + 4D_{ab} e^{-\frac{2D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0}} s^2 (2+\beta_0 N_0 t) \left(Ei\left[\frac{2D_{ab}s^2}{\beta_0 N_0}\right] + - Ei\left[\frac{D_{ab}s^2(2+N_0\beta_0 t)}{\beta_0 N_0}\right] \right) \right) \tag{3.10}$$

4. CONCLUSÃO

Para a solução dos modelos matemático, aplicou-se a técnica da transformada de Laplace nas equações diferenciais parciais em relação ao volume com o coeficiente de coagulação constante ($\beta = \beta_0$). Além do método das características, a solução de Bernoulli foi utilizada para a solução do modelo de balanço populacional. O próximo passo será desenvolver códigos computacionais em linguagem Fortran 90/95 para estimar a função densidade de partículas, n(v,t). Resultados numéricos serão obtidos e comparados com os disponíveis na literatura para sistemas particulados, o que vai nos permitir uma avaliação crítica da presente metodologia de solução.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BALDINO, R. R., 1979, Transformada de Laplace, Ed. McGraw-Hill do Brasil, LTDA.

BATISTA, C. S., 2011, Solução de equações de balanço populacional usando a técnica da transformada de Laplace e filtro de partículas, Tese – UFPA. Instituto de Tecnologia.

ILIEVSKI, D., 1991, Modelling $Al(OH)_3$ Agglomeration during Butch and Continuos Precipitation in Supersaturated Caustic Aluminate Solutions, Thesis Doctor, University of Queensland, July.

ILIEVSKI, D., 2001, “Development and Application of a Constant Supersaturation, Semi-Batch Crystalliser for Investigating Gibbsite Agglomeration”, ***Journal of Crystal Growth,*** vol. 233, pp 846–862.

MARCHISIO, D. L., BARRESI, A. A., GARBERO, M., 2002, “Nucleation, Growth, and Agglomeration in Barium Sulfate Turbulent Precipitation”, ***AIChE Journal,*** Vol. 48, No. 9, pp. 2039 – 2050.

RAINVILLE, E. D. 1964, ***Elementary Differential Equations***, Macmillan Company, Third Edition, New York.

RAMABHADRAN T.E., PETERSON, T.W. and SEINFELD, J.H., 1976, Dynamics of Aerosol Coagulation, J. AIChe 22 nº 05.