



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
CENTRO TECNOLÓGICO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

Murilo Zucatelli Elias

**Previsão da Distribuição do Tamanho de Gotas
em escoamento de Emulsões por Modelo de
Balanço Populacional: Simulação Numérica e
Experimentos**

Vitória, ES

2025

Murilo Zucatelli Elias

**Previsão da Distribuição do Tamanho de Gotas em
Escoamento de Emulsões por Modelo de Balanço
Populacional: Simulação Numérica e Experimentos**

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

Universidade Federal do Espírito Santo – UFES

Centro Tecnológico

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Rogério Ramos

Vitória, ES

2025

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

E42p Elias, Murilo Zucatelli, 1998-
Previsão da distribuição do tamanho de gotas em escoamento de emulsões por modelo de balanço populacional: simulação numérica e experimentos / Murilo Zucatelli Elias. - 2025. (recurso não paginado). : il.

Orientador: Rogério Ramos.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Emulsão. 2. Escoamento multifásico. 3. Dinâmica dos fluidos. 4. Válvulas. I. Ramos, Rogério. II. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. III. Título.

CDU: 621




PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
CENTRO TECNOLÓGICO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO


Previsão da Distribuição do Tamanho de Gotas em Escoamento de Emulsões por Modelo de Balanço Populacional: Simulação Numérica e Experimentos

MURILO ZUCATELLI ELIAS


COMISSÃO EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 **ROGERIO RAMOS**
Data: 20/03/2025 16:33:32-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Rogério Ramos
(Orientador – PPGEM/UFES)

Documento assinado digitalmente
 **RENATO DO NASCIMENTO SIQUEIRA**
Data: 19/05/2025 19:48:38-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Renato do Nascimento Siqueira
(Examinador Interno – PPGEM/UFES)

Documento assinado digitalmente
 **PAULO LARANJEIRA DA CUNHA LAGE**
Data: 20/03/2025 18:51:24-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Paulo Laranjeira da Cunha Lage
(Examinador Externo – COPPE/UFRJ)

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito Santo como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Vitória/ES, 20 de março de 2025

Dedico este trabalho aos meus amados pais, Zenilda e José Francisco, pelo amor e apoio incondicional; aos meus queridos irmãos, Alex e Alice, que sempre acreditaram em mim; e àqueles que me acompanham diariamente.

Agradecimentos

Expresso minha eterna gratidão aos meus amados pais, Zenilda e José. Sem o apoio incondicional, reconhecimento e confiança que sempre depositaram em mim, não teria sido possível trilhar o caminho da vida acadêmica e vivenciar a experiência de uma Universidade. Este trabalho é, acima de tudo, fruto do esforço e dedicação que tiveram ao longo de toda uma vida para me proporcionar uma educação de qualidade, sempre fundamentada no amor e no respeito ao próximo. Seu exemplo de resiliência e generosidade será para sempre minha maior inspiração.

Aos meus irmãos, Alex e Alice, meu agradecimento especial. A nossa união e partilha são bens inestimáveis, e sou imensamente grato pelo apoio e cuidado que me deram ao longo dos anos, especialmente durante o período em que estive longe de casa. Saber que sempre posso contar com vocês foi essencial para minha trajetória, tornando os desafios mais leves e as conquistas ainda mais significativas.

Ao meu orientador, Rogério Ramos, expresso meu profundo reconhecimento pela dedicação e comprometimento com o desenvolvimento deste trabalho. A cada reunião, pude aprender e evoluir com seus ensinamentos. Agradeço por confiar em mim, por fornecer o suporte necessário e por criar um ambiente propício ao aprendizado e à pesquisa. Sua orientação e incentivo foram fundamentais para minha formação e para a concretização deste estudo.

Aos meus colegas de laboratório, Rayane, Ligia, Ulisses e Felipe, sou grato por toda a colaboração e companheirismo ao longo deste percurso. As trocas de conhecimento, as discussões e o apoio mútuo foram essenciais para o desenvolvimento deste trabalho. Mais do que colegas, formamos uma equipe que compartilhou desafios, aprendizados e momentos de crescimento.

A todos os professores que, direta ou indiretamente, contribuíram para minha formação, meu sincero agradecimento.

Por fim, agradeço a todos aqueles que, de alguma forma, fizeram parte dessa caminhada, seja com palavras de incentivo, apoio ou simplesmente acreditando no meu potencial. Este trabalho é também um reflexo da influência e do suporte que recebi ao longo dos anos.

*“Por um mundo onde sejamos socialmente iguais, humanamente diferentes e totalmente
livres!”*

(Rosa Luxemburgo)

Resumo

Durante a produção de petróleo, o cisalhamento e a turbulência no escoamento fragmentam as gotas de água presentes, promovendo a formação de emulsões estáveis de água em óleo (A/O). Este trabalho investiga os processos de quebra e coalescência de gotas em emulsões A/O por meio de experimentos laboratoriais e modelagem baseada em balanço populacional. Os estudos foram realizados no circuito de escoamento do NEMOG/UFES, com foco no impacto das restrições impostas por válvulas gaveta sobre a distribuição de tamanho de gotas (DTG). Os modelos da literatura publicados por Coualoglou e Tavlarides (CT) e de Mitre et al. (CEM) foram aplicados para simular os fenômenos observados, ajustando parâmetros para otimizar as previsões em relação aos dados experimentais. Os resultados mostraram que a válvula localizada no início do circuito induziu predominantemente eventos de quebra, resultando em uma redução moderada no tamanho médio das gotas. Em contraste, a válvula posicionada posteriormente, apresentou maior variabilidade na DTG, associada ao aumento significativo de eventos de coalescência, especialmente em concentrações volumétricas da fase dispersa acima de 15% v/v. Os modelos implementados mostraram boa capacidade de prever a DTG para frações volumétricas de água de 5%, 10% e 15% v/v. O modelo CEM demonstrou melhor desempenho global, mesmo utilizando parâmetros originais, mas subestimou os efeitos de coalescência em altas concentrações de água dispersa, com erros médios $\bar{\psi}$ inferiores a 40% para a primeira válvula e 16% para a segunda considerando a distribuição. As previsões do diâmetro médio de De Brouckere apresentaram erros médios $\bar{\psi}$ inferiores a 23% para a primeira válvula e 9% para a segunda. Já o modelo CT apresentou limitações na descrição completa dos eventos de coalescência, exigindo ajustes adicionais em condições de elevada concentração de fase dispersa. Fatores como a fração volumétrica e a distribuição heterogênea da energia turbulenta foram identificados como críticos para a melhoria das previsões. A análise de sensibilidade revela que os parâmetros associados à quebra e colisão de gotas (C_b e C_c) têm maior influência no erro de previsão, enquanto o parâmetro de eficiência de coalescência (C_e) mostrou impacto marginal. Os resultados experimentais corroboraram parcialmente as previsões dos modelos, com erros médios e máximos comparáveis aos obtidos na literatura. O erro máximo no diâmetro médio volumétrico ($D_{[4,3]}$) foi de 25,6%, reforçando a necessidade de avanços nos submodelos de coalescência e dissipação de energia para aprimorar a precisão das simulações.

Palavras-chaves: Emulsão. Quebra de gotas. Água em óleo. Escoamento multifásico.

Abstract

During oil production, shear and turbulence in the flow progressively break water droplets, leading to the formation of stable water-in-oil (W/O) emulsions. This study investigated the droplet breakup and coalescence dynamics in W/O emulsions through laboratory experiments and population balance modeling. The research was conducted using the NEMOG/UFES flow circuit, focusing on the impact of gate valve restrictions on the droplet size distribution (DSD). The Coualoglou and Tavlarides (CT) and Mitre et al.(CEM) published models were applied to simulate the observed phenomena, with parameter adjustments to optimize predictions against experimental data. Results showed that the MV-01 valve, located at the circuit's inlet, predominantly induced droplet breakup, causing a moderate reduction in the mean droplet size. In contrast, the downstream MV-02 valve exhibited greater variability in DSD due to a significant increase in coalescence events, particularly at dispersed phase concentrations exceeding 15% v/v. The implemented models effectively predicted the DSD for water volume fractions of 5%, 10%, and 15% v/v. The CEM model demonstrated superior overall performance, even with its original parameters, although it underestimated coalescence effects at high dispersed-phase concentrations. With mean errors $\bar{\psi}$ of approximately 40% for MV-01 and 16% for MV-02 when considering the distribution. Predictions of the mean droplet diameter, De brouckere, yielded mean errors $\bar{\psi}$ below 23% for MV-01 and 9% for MV-02. The CT model showed limitations in fully describing coalescence phenomena, requiring additional adjustments under severe conditions. Factors such as water volume fractions and the heterogeneous distribution of turbulent energy were identified as critical for improving predictions. Sensitivity analysis revealed that breakup and collision parameters (C_b and C_c) had the most significant influence on prediction errors, whereas the coalescence efficiency parameter (C_e) had a negligible impact. Experimental results partially corroborated model predictions, with average and maximum errors comparable to those reported in the literature. The maximum error in the predicted volume-weighted mean droplet diameter ($D_{[4,3]}$) was 25.6%, highlighting the need for advancements in submodels for coalescence and energy dissipation to enhance simulation accuracy.

Keywords: Emulsion. Droplet Breakup. Water/oil. Multiphase flow.

Produção científica durante o mestrado

Artigo publicados

PETRONI, M. H. O.; CORONA, R. R.B.; SAD, C. M. S.; RAMOS, R.; CASTRO, J. M.; FRANCO, L. G.; SILVA, M.; **ELIAS, M. Z.**; CASTRO, E. V. R. Role of asphaltenes and resins at the interface of petroleum emulsions (W/O): A literature review. *Geoenergy Science and Engineering*, v. 239, p. 212932, 2024. <<https://doi.org/10.1016/j.geoen.2024.212932>>

Resumos em congresso

ELIAS, M. Z.; FRANCO, L. G.; CORONA, R. R. B.; KEMPIN JUNIOR, E.; ROBERTI, J. T. A.; RAMOS, R. A comparison of droplet breakage in W/O emulsion flow induced by pumping and gas pressurization. 2023. International Congress of Mechanical Engineering - COBEM 2023/ABCM, Florianópolis/SC.

FRANCO, L. G.; **ELIAS, M. Z.**; CORONA, R. R. B.; KEMPIN JUNIOR, E.; ROBERTI, J. T. A.; RAMOS, R.; SIQUEIRA, R. Pressure drop analysis in emulsions flow. 2023. International Congress of Mechanical Engineering - COBEM 2023/ABCM, Florianópolis/SC

CASTRO, J. M.; CORONA, R. R. B.; SAD, C. M. S.; PETRONI, M. H. O.; FRANCO, L. G.; **ELIAS, M. Z.**; KEMPIN JUNIOR, E.; ROBERTI, J. T. A.; RAMOS, R.; MARTINS JUNIOR, E. C. Homogeneidade e estabilidade de emulsões modelo (A/O) com diferentes tensoativos para simular emulsões de petróleo em ensaios laboratoriais. 62º Congresso Brasileiro de Química/ABQ, 2023, Natal/RN.

PETRONI, M. H. O.; CORONA, R. R. B.; SAD, C. M. S.; CASTRO, J. M.; FRANCO, L. G.; **ELIAS, M. Z.**; RAMOS, R.; KEMPIN JUNIOR, E.; ROBERTI, J. T. A.; MARTINS JUNIOR, E. C. Avaliação da tensão superficial e interfacial de um óleo com tensoativos para a formulação de emulsão (A/O) modelo similar ao petróleo médio. 62º Congresso Brasileiro de Química/ABQ, 2023, Natal/RN.

CORONA, R. R. B.; SAD, C. M. S.; PETRONI, M. H. O.; CASTRO, J. M.; FRANCO, L. G.; KEMPIN JUNIOR, E.; ROBERTI, J. T. A.; **ELIAS, M. Z.**; RAMOS, R.; MARTINS

JUNIOR, E. C. Estudo do envelhecimento e reutilização de emulsão modelo A/O em testes de escoamento por batelada. 62º Congresso Brasileiro de Química/ABQ, 2023, Natal/RN.

CREMONINI, M. L.; CORONA, R. R. B.; **ELIAS, M. Z.**; MARTINS, R. S.; RAMOS, R. Análise numérica de diferentes geometrias de tanques agitados por turbinas Rushton para a produção de emulsões. IV Congresso Brasileiro de Fluidodinâmica Computacional - CBCFD, 2024, Vitória – ES.

ELIAS, M. Z.; MACIEL, R. S.; FRANCO, L. G.; CORONA, R. R. B.; PEREIRA, F. A. R.; LOUREIRO, B. V.; RAMOS, R. Avaliação da adesão de carbonato de cálcio em elementos de completção através da abordagem CFD. 21º Edição do Rio Oil and Gas, Rio de Janeiro, 2024.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Exemplo de malha geométrica $v_{i+1} = sv_i$ onde os pivôs são $x_i = (v_{i+1} + v_i)/2$	38
Figura 2 – Representação esquemática do mecanismo de quebra por processo de corte.	42
Figura 3 – Representação esquemática de superfícies não deformáveis e superfícies deformáveis de partículas fluidas.	48
Figura 4 – Representação esquemática de interfaces de contato imóveis, parcialmente móveis e totalmente móveis de partículas fluidas.	48
Figura 5 – Produção científica anual.	55
Figura 6 – Países dos autores correspondentes. MCP: publicações de múltiplos países, SCP: publicações de único país.	56
Figura 7 – Nuvens de palavras mais frequentes presentes no texto dos trabalhos encontrados.	57
Figura 8 – Diagrama esquemático do circuito de escoamento de emulsão.	58
Figura 9 – Esquema de operação do vaso de pressão para realização do teste.	60
Figura 10 – Fotografia de trecho do circuito, montado e operante.	61
Figura 11 – Dispositivo extrator instalado antes do medidor de vazão.	62
Figura 12 – Protótipo de ANM no circuito utilizando uma válvula gaveta e um atuador elétrico.	62
Figura 13 – Choke, válvula MV-02, representada pela válvula gaveta.	63
Figura 14 – Emulsão água-óleo, fotomicrografia e distribuição obtida por laser.	65
Figura 15 – Croqui esquemático da válvula MV-01 no circuito com as cotas em metros.	70
Figura 16 – Parâmetro K obtido em todos os testes com a válvula MV-01 100% aberta.	72
Figura 17 – Croqui esquemático da válvula MV-02 no circuito com as cotas em metros.	72
Figura 18 – Queda de pressão na válvula MV-01 para cada abertura em todos os testes feitos.	73
Figura 19 – Queda de pressão na válvula MV-02 para cada abertura em todos os testes feitos.	73
Figura 20 – Coeficiente de perda na válvula, ξ , para cada abertura em todas as campanhas experimentais.	75
Figura 21 – Fluxograma da implementação do algoritmo numérico de solução da equação de balanço populacional.	78
Figura 22 – Quantidade relativa de partículas para o caso de pura quebra.	80
Figura 23 – Densidade numérica para o caso de pura quebra no tempo $t = 1000$ s.	81

Figura 24 – Densidade numérica para o caso de pura quebra nos tempos $t = 300$ e 1000 s e $M = 50$	81
Figura 25 – Quantidade relativa de gotículas para o caso de apenas coalescência.	83
Figura 26 – Densidade numérica para o caso de apenas coalescência.	83
Figura 27 – Densidade numérica para o caso de apenas coalescência em tempos distintos.	84
Figura 28 – Comparativo da quantidade relativa de polímeros entre a solução analítica e numérica para o caso de quebra coalescência em tempos distintos.	85
Figura 29 – Comparação entre os tipos de distribuição, numérico e volumétrico	86
Figura 30 – Classes utilizadas pelo equipamento analisador de partícula.	88
Figura 31 – Teste de identificação 71, Weber 6,04 e Aberturas 100, 15 e 12, Tab. 3, com todas as pressões no circuito.	90
Figura 32 – Resultados experimentais de todos os testes da Tabela 3 para o diâmetro d_{v90} após a válvula MV-01.	92
Figura 33 – Resultados experimentais para a razão de diâmetro $D_{[4,3]}$ antes e após a válvula MV-01. Marcadores: abertura da válvula MV-01 por cor, concentração de H2O por forma)	93
Figura 34 – Resultados experimentais de todos os testes da Tabela 3 para a razão de diâmetro $D_{[4,3]}$ antes e após a válvula MV-02.	94
Figura 35 – Resultados experimentais para o diâmetro d_{v90} após a válvula MV-02, todos os testes feitos da Tabela 3.	95
Figura 36 – Relação entre o maior diâmetro de gota presente na emulsão, $d_{max} = d_{v99}$, a jusante da válvula MV-01 e a escala de comprimento de Kolmogorov.	98
Figura 37 – Relação entre o maior diâmetro de gota presente na emulsão, $d_{max} = d_{v99}$, a jusante da válvula MV-02 e a escala de comprimento de Kolmogorov.	99
Figura 38 – Teste de convergência da solução em termos do erro médio, $\bar{\psi}$, para o modelo CT Liao.	100
Figura 39 – Teste de sensibilidade da solução quanto ao parâmetro de comprimento de dissipação utilizando o modelo CT Liao.	101
Figura 40 – Erro relativo de todos os testes da Tabela 3, ψ Eq. 5.6, para a DTG após a válvula MV-01.	102
Figura 41 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo CT Liao do teste 80A10W3, Tab. 8.	102
Figura 42 – DTG simulada após a válvula MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes de Coualaloglou e Tavlarides (1977).	104
Figura 43 – DTG simulada após a válvula MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes de Liao e Lucas (2009).	104
Figura 44 – DTG simulada após as válvulas MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes otimizadas.	106

Figura 45 – Pior resultado para a DTG predita após as válvulas MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes otimizadas.	107
Figura 46 – Erro relativo, ψ , na MV-01 para diferentes concentrações utilizando os parâmetros otimizadas.	108
Figura 47 – Média do diâmetro médio $D_{[4,3]}$ experimental para todos os testes com fase dispersa 15% e Weber de 3. MV1: montante da válvula MV-01 e JV1, jusante da válvula MV-01.	109
Figura 48 – Média do diâmetro médio $D_{[4,3]}$ experimental para todos os testes realizados na linha principal em cada extrator. Montante e jusante da válvula MV-01, extrator 2 e 3. Montante e jusante da MV-02, extrator 5 e 6.	110
Figura 49 – Vista frontal e de seção de corte de uma modelagem da válvula gaveta 3/4 polegadas utilizada no circuito.	111
Figura 50 – Teste de convergência da solução em termos do erro médio, $\bar{\psi}$, para o modelo do Mitre.	112
Figura 51 – Teste de sensibilidade da solução quanto ao parâmetro de comprimento de dissipação utilizando o modelo do Mitre na MV-01.	113
Figura 52 – Erro relativo ψ na MV-01 para diferentes concentrações utilizando os parâmetros otimizadas por Mitre et al. (2014).	114
Figura 53 – Erro relativo ψ na MV-02 para diferentes concentrações utilizando os parâmetros otimizadas por Mitre et al. (2014).	114
Figura 54 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM S1 do teste 61A12W4 com 5% de água.	116
Figura 55 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM S1 do teste 79A10W4 com 15% de água.	117
Figura 56 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o modelo CCE S1.	119
Figura 57 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o modelo CCE S3.	119
Figura 58 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o modelo CEM S1.	120
Figura 59 – DTG simulada na MV-01, teste 63A10W6.	121
Figura 60 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o pior caso, teste 66A12W2.	121
Figura 61 – DTG simulada após a válvula MV-02 para o melhor caso na concentração de 20%, teste 85A13W20.	124
Figura 62 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM S1 do teste 81A12W7 com 15% de água.	127
Figura 63 – DTG simulada após a válvula MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM variando C_c no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	127
Figura 64 – DTG simulada após a válvula MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM variando C_b no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	128

Figura 65 – DTG simulada após a válvula MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM variando ζ no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	129
Figura 66 – Gráfico de Pareto dos efeitos padronizados na válvula MV-01 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	130
Figura 67 – Gráfico de Pareto dos efeitos padronizados na válvula MV-02 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	130
Figura 68 – Efeitos principais válvula MV-01 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	132
Figura 69 – Efeitos principais válvula MV-02 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.	132

Lista de tabelas

Tabela 1 – Massa específica do óleo, água e da emulsão em kg/m^3	64
Tabela 2 – Viscosidade do óleo, água e da emulsão em cP.	64
Tabela 3 – Matriz de testes realizados na linha principal com a configuração de abertura das válvulas MV-01 e MV-02. Cada número de código identifica o teste e sua posição na tabela a condição de retirada de amostras nos extratores.	68
Tabela 4 – Dados da regressão do modelo de queda de pressão na válvula.	74
Tabela 5 – Exemplo para as diferentes formas de representar distribuições de partículas.	87
Tabela 6 – Sensores e quantidade de amostras.	91
Tabela 7 – Diâmetro médio d_{v90} comparativo entre jusante da válvula MV-01 e montante da válvula MV-01.	94
Tabela 8 – Matriz de testes selecionados da linha principal com a configuração de abertura das válvulas MV-01 e MV-02.	96
Tabela 9 – Análise de escala de turbulência a jusante da válvula MV-01 e 02.	97
Tabela 10 – Constantes para o modelo de Coualaloglou e Tavlarides.	99
Tabela 11 – Erro médio na MV-01 [%] para diferentes constantes do modelo.	103
Tabela 12 – Erro médio na MV-02 [%] para diferentes constantes do modelo.	103
Tabela 13 – Comparativo das constantes otimizadas do modelo de Coualaloglou e Tavlarides.	105
Tabela 14 – Erro na predição da DTG para válvula MV-01 e MV-02 em diferentes frações de fase dispersa do modelo CT com constantes otimizadas.	108
Tabela 15 – Constantes originais do modelo de Mitre sem intervalo de confiança.	112
Tabela 16 – Erro médio [%] para diferentes constantes do modelo na MV-01.	115
Tabela 17 – Erro médio [%] para diferentes constantes do modelo na MV-02.	116
Tabela 18 – Erro na predição da DTG para válvula MV-01 e MV-02 em diferentes frações de fase dispersa do modelo de Mitre et al. (2014) com quebra binária.	122
Tabela 19 – Erro na predição da DTG para válvula MV-01 e MV-02 em diferentes frações de fase dispersa do modelo de Mitre et al. (2014) apenas coalescência.	123
Tabela 20 – Constantes originais do modelo de CEM S1 e intervalo de confiança.	125
Tabela 21 – Matriz de planejamento fatorial composto para m_i das constantes do modelo de Mitre.	126

Lista de abreviaturas e siglas

ANM	Árvore de Natal Molhada
A/O	Água em Óleo
BP	Balanco Populacional
CFD	Computational Fluid Dynamics (Dinâmica de Fluidos Computacional)
CEM	Coalescence Efficiency Model (Modelo de Eficiência de Coalescência)
CCE	Constant Coalescence Efficiency
CMC	Concentração Micelar Crítica
DTG	Distribuição do Tamanho de Gotas
DNS	Direct Numerical Simulation (Simulação Numérica Direta)
DPM	Discrete Phase Model (Modelo de Fase Discreta)
DDSD	Daughter Drop Size Distribution (distribuição de tamanho de gotas filhas)
EXT	Extrator
HPH	High Pressure Homogenizer (homogeneizadores de alta pressão)
IC	Intervalo de Confiança
MOC	Método de Classes
MOM	Método de Momentos

Lista de símbolos

A	Constante de Hamaker, J
A_b	Abertura de válvula, [adim.]
A_t	Área da seção transversal do tubo, m ³
$a(v, v')$	Taxa de coalescência entre gotas de volume v e v' , s ⁻¹
$a(d, d')$	Taxa de coalescência entre gotas de diâmetro d e d' , s ⁻¹
$b(v)$	Taxa de quebra de gotas de volume v , s ⁻¹
$b(d)$	Taxa de quebra de gotas de diâmetro d , s ⁻¹
B_b	Termo fonte de nascimento por quebra, s ⁻¹
B_c	Termo fonte de nascimento por coalescência, s ⁻¹
C_b	Constante de quebra
C_c	Constante de coalescência
C_e	Constante de eficiência de coalescência
C_ϵ	Constante de quebra
Ca	Número de capilaridade, [adim.]
Ca_{crit}	Número de capilaridade crítico, [adim.]
Ca_{eq}	Número de capilaridade do diâmetro equivalente, [adim.]
d	Diâmetro de gota, m
D_b	Termo fonte de morte por quebra, s ⁻¹
D_c	Termo fonte de morte por coalescência, s ⁻¹
$D_{[m,n]}$	Diâmetro médio de gota, m
DI	Diâmetro interno, m
e	Erro do intervalo de confiança
E_v	Energia cinética de um vórtice, J
Er	Erro relativo, [adim.]
F	Força, N
f_i	Frequência absoluta da presença de partículas da classe i , [adim.]
f_n	Frequência numérica (Quantidade/[Quantidade total])
f_v	Frequência volumétrica (Volume/[Volume total])

G	Taxa de cisalhamento, s^{-1}
g	Aceleração gravitacional, ms^{-2}
h	Comprimento do orifício de passagem na válvula, m
H	Curvatura média de uma gota, m
h_f	Espessura de filme interfacial na ruptura do filme, m
h_i	Espessura de filme interfacial no início do contato, m
k	Energia cinética turbulenta, J/kg
L_{diss}	Comprimento de dissipação, m
M	Número de classes de discretização da DTG, [adim.]
m_g	Massa de uma gota da fase dispersa, m
\dot{m}	Vazão mássica, kg/s
N_i	Concentração numérica de partículas, m^{-3}
n	Densidade numérica de partículas, m^{-6}
n_a	Número de amostras, [adim.]
P	Pressão estática, Pa
$P(v v')$	Densidade de probabilidade de gotas de tamanho v geradas a partir de gotas de tamanho v'
Q	Vazão volumétrica da fase contínua, m^3/s
Re_{max}	Número de Reynolds máximo do escoamento, [adim.]
Re_p	Número adimensional de Reynolds, [adim.]
St_k	Número de Stokes, [adim.]
s	Desvio padrão amostral,
T	Temperatura, °C
t	Tempo, s
U	Velocidade média na seção transversal do escoamento, m/s
u'	Velocidade de flutuação turbulenta, m/s
v	Volume de gota, m^3
V_{diss}	Volume de dissipação, m^3
We	Número adimensional de Weber, [adim.]
We_c	Weber crítico do modelo de quebra de gotas, [adim.]

Letras Gregas:

β	Razão de raios no espaço anular, [adim.]
β_0, β_1	Constantes de regressão linear
δ	Função delta de Dirac, [adim.]
ε	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, m^2/s^3
γ	Função de atribuição aos pivôs da malha a partir da quebra de gotas,
$\lambda(d,d')$	Eficiência de coalescência entre gotas de tamanho d e d'
λ_k	Escala de comprimento de Kolmogorov, m
μ	Viscosidade dinâmica, Pa.s
∇	Operador Del
ν	Viscosidade cinemática, m^2/s
∂	Derivada parcial
ϕ	Concentração volumétrica da fase dispersa, [adim.]
ψ	Erro relativo da distribuição, [adim.]
σ	Tensão interfacial, N/m
ρ	Massa específica, kg/m^3
τ	Tensão de cisalhamento, Pa
$\theta(d,d')$	Taxa de colisão entre gotas de tamanho d e d'
ς	Quantidade de gotas filhas geradas na quebra, [adim.]
ξ	Coefficiente de perda na válvula, [adim.]

Subscritos:

c	Fase contínua
d	Fase dispersa
e	Emulsão
g	Gota
i	Intervalo de classe de gotas i
res	Residência
w	Parede

Sumário

1	INTRODUÇÃO	22
1.1	Objetivos	24
2	REFERENCIAL TEÓRICO	25
2.1	Mecanismo de quebra de gotas	26
2.2	Quebra de gotas em restrições em escoamento turbulento	28
3	ABORDAGEM DE BALANÇO POPULACIONAL	31
3.1	Equação de balanço populacional	32
3.2	Solução das equações de balanço populacional	35
3.3	Mecanismos de quebra de partículas fluidas	39
3.4	Modelagem da quebra	42
3.4.1	Modelagem da quebra por Coualaloglou e Tavlarides (C&T)	42
3.4.2	Modelagem da quebra por Mitre	43
3.5	Modelagem da distribuição de tamanho de gotas filhas	45
3.5.1	Modelos estatísticos	45
3.6	Modelagem da coalescência	46
3.6.1	Modelagem da coalescência por Coualaloglou e Tavlarides	46
3.6.2	Modelagem da coalescência por Mitre	48
3.7	Quebra de gotas em restrições utilizando balanço populacional	50
3.8	Modelagem da quebra no regime viscoso	52
3.9	Experimentos de gota individual	54
3.10	Estudo bibliométrico da aplicação de balanço populacional em sistemas água e óleo	55
4	METODOLOGIA EXPERIMENTAL	58
4.1	Preparação e caracterização da emulsão	63
4.2	Condições de operação e procedimento experimental	66
4.3	Queda de pressão nas válvulas	70
5	METODOLOGIA NUMÉRICA	76
5.1	Implementação numérica	77
5.2	Validação numérica	78
5.2.1	Apenas quebra	79
5.2.2	Apenas coalescência	82
5.2.3	Quebra e coalescência	84

5.3	Discretização da DTG	85
5.4	Recurso computacional	88
6	RESULTADOS	90
6.1	Análise dos resultados experimentais	90
6.2	Modelos de quebra e coalescência de Coualoglou e Tavlarides	99
6.3	Otimização dos parâmetros dos modelos de quebra e coalescência de Coualoglou & Tavlarides	105
6.4	Modelos de quebra e coalescência de Mitre	110
6.5	Avaliação da sensibilidade quanto às constantes do modelo	124
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	133
	REFERÊNCIAS	135

1 Introdução

A quebra e a coalescência de gotículas/partículas desempenham um papel fundamental em escoamentos multifásicos, que ocorre em muitos setores industriais (RAMKRISHNA; SINGH, 2014). Na indústria petrolífera, escoamentos dispersos de água e óleo são encontrados na linha de produção devido à extração conjunta do reservatório, formando emulsões estabilizadas por agentes tensoativos naturais, como resinas e asfaltenos (PETRONI et al., 2024). Esses agentes são adsorvidos na superfície das gotas, reduzindo a tensão interfacial e formando um filme interfacial rígido que dificulta a ruptura e a drenagem, consequentemente dificultando a separação das fases imiscíveis.

Emulsões estáveis formadas no processo de produção são indesejadas para a indústria de petróleo e gás, pois oneram o processo de separação de fases (óleo/gás/água), bem como o refino do hidrocarboneto. Stewart e Arnold (2011) demonstraram as técnicas e produtos químicos aplicados para desestabilizar e separar emulsões, aumentando o consumo de insumos e o custo de manutenção das refinarias, devido à agressividade desses produtos químicos.

Ademais, emulsões líquido-líquido também são formuladas e utilizadas em diversos outros setores industriais, incluindo cuidados pessoais (cosméticos) (??), domiciliares (tintas, purificadores de ambiente) (??) e alimentícios (produtos lácteos, sorvetes) (??). Um dos atributos críticos mais importante em emulsões é a distribuição de tamanho das gotículas (DTG), que impacta nas características de reologia, aparência e estabilidade. Essa última, está relacionada a fatores físico-químicos, sendo um dos principais o tamanho da gota da fase dispersa (FRANZOL; REZENDE, 2015). A DTG de uma emulsão é resultado das condições de escoamento e repercute significativamente na predição da fração de óleo, do gradiente de pressão, do nível de óleo na água produzida (Teor de Óleo e Graxa - TOG) e da vida útil dos equipamentos, devido à incidência de corrosão (emulsão água em óleo) (GAO; GU; GUO, 2003).

A produção de petróleo no Brasil é predominantemente *offshore*, realizada em plataformas instaladas em águas marítimas. Os reservatórios de extração estão localizados a muitos quilômetros de distância do continente, em águas profundas e ultraprofundas. É necessário que o hidrocarboneto extraído do reservatório alcance a plataforma para, posteriormente, ser transportado para o continente através de navios petroleiros, como as Unidades Flutuantes de Produção, Armazenamento e Transferência (FPSO) (GOMES, 2012).

Do reservatório até o leito marinho são cerca de 2 quilômetros (km) de distância, em que o fluido escoar por tubulações e equipamentos tais como Permanente Downhole

Gauge (PDG, equipamento para medição e controle de pressão e temperatura do poço). No leito marinho, um destaque é dado ao equipamento “Árvore de Natal Molhada” ou ANM, é um manifold submarino composto por um conjunto de válvulas, linhas de escoamento e sistema de controle, que conecta as tubulações da saída do poço ao início da linha de escoamento (flowline).

Parte da água produzida na recuperação forma emulsões (ABDEL-AAL; AGGOUR; FAHIM, 2015). O cisalhamento e a turbulência no escoamento ao longo da linha de produção de petróleo fragmentam as gotas da fase dispersa em tamanhos progressivamente menores, até que o tamanho máximo de estabilidade seja atingido, ponto em que as gotas se tornam estáveis e não se rompem mais. Logo, há variação da DTG de emulsões ao longo da linha de produção desde a saída do fluido do reservatório até a chegada no navio-plataforma. Entretanto, por limitações operacionais para retirada de amostras ao longo da linha de produção de petróleo e gás, desde o reservatório até a montante da Válvula Choke, a DTG de emulsões não é conhecida na linha de produção. Consequentemente, apesar da literatura indicar a quebra de gotas de emulsões ao longo da linha de produção, não se sabe qual impacto individual e combinado das tubulações e equipamentos diversos (bombas, válvulas) da linha de produção na DTG. A identificação de zonas no percurso onde pequenas gotas são formadas é vital para otimizar o processo de separação das fases (DAVIES; NILSEN; GRAMME, 1996).

Em relação à fluidodinâmica do processo, as características físicas do fluido no início da linha de extração de petróleo ainda são desconhecidas. Nesse contexto, o circuito de escoamento de emulsão localizado no laboratório NEMOG/UFES realiza estudos em escala laboratorial da evolução da DTG sujeita à trechos horizontais, verticais, inclinados e acidentes de linha (bombas, joelhos e válvulas) (KEMPIN et al., 2022). O fluido é uma emulsão meta-estável que simula o comportamento de uma emulsão água-em-óleo do Pré-sal brasileiro como descrito por Corona et al. (2023).

A modelagem por balanço populacional é uma ferramenta fundamental para a compreensão de processos multifásicos, pois permite correlacionar propriedades mesoscópicas do meio com o comportamento dinâmico de partículas, gotas ou bolhas. Essa abordagem possibilita descrever a evolução temporal e espacial de características da população de interesse, como o diâmetro médio, por meio da consideração de fenômenos como nucleação, quebra e coalescência. A predição da distribuição de tamanho de gotas (DTG), por exemplo, é essencial em diversos processos físicos, químicos e biológicos, uma vez que influencia diretamente a eficiência e o controle de operações industriais. No contexto da produção de petróleo, a modelagem de balanço populacional torna-se especialmente relevante, permitindo prever a dinâmica de gotículas sob diferentes condições operacionais e contribuir significativamente para o entendimento e a otimização do escoamento multifásico em sistemas complexos (RAMKRISHNA, 2000).

Por fim, entender e modelar o processo de quebra causado por uma obstrução de tubulação em uma emulsão líquido-líquido é relevante para prever a distribuição do tamanho das partículas e melhorar, por exemplo, o processo de separação entre óleo e água.

1.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho é investigar o escoamento bifásico de água dispersa em óleo e os aspectos quantitativos da quebra e coalescência de gotículas em uma obstrução ocasionada por válvula do tipo gaveta.

Os objetivos específicos que devem ser alcançados por meio deste trabalho são:

- Analisar a quebra de gota de emulsões de água em óleo com fração volumétrica entre 1% a 20% v/v no circuito de emulsões do NEMOG/UFES.
- Aplicar a modelagem de balanço populacional lagrangeano 1-dimensional homogêneo sem nucleação pelo método de classes com pivô fixo.
- Avaliar os modelos de quebra e coalescência disponíveis na literatura para os resultados experimentais obtidos.
- Comparar a variação de DTG em duas válvulas idênticas em posições distintas na linha de escoamento mas sujeitas às mesmas configurações de obstrução durante o teste.
- Realizar uma análise de sensibilidade das constantes do conjunto de modelos que resultarem o melhor desempenho em descrever os resultados experimentais.

2 Referencial teórico

Nesta seção, serão discutidos os principais trabalhos sobre quebra e coalescência de gotas, tanto utilizando a abordagem de balanço populacional (BP) quanto no desenvolvimento de modelos mecanicistas envolvidos. Esses trabalhos abrangem diferentes finalidades, como a produção/formulação de emulsões, a separação das fases por coalescência, a avaliação de desempenho de dispositivos petroquímicos, entre outros.

Atualmente, há grandes esforços nas simulações bifásicas com balanço populacional, essencial na modelagem multifásica Euler-Euler (E-E), onde todas as fases são tratadas como contínuas interpenetrantes, sem separação clara. Essa abordagem usa termos fontes para modelar quebra e coalescência, necessitando de modelos de frequência de quebra e coalescência, distribuição do tamanho das gotas filhas, que são gotas formadas após a quebra de uma gota, e a modelagem da quantidade de gotas formadas após a quebra (LIAO; LUCAS, 2009; LIAO; LUCAS, 2010).

O estudo de Coualoglou e Tavlarides (1977) é um dos trabalhos mais importantes e pioneiros na modelagem de quebra e coalescência de gotas em sistemas multifásicos, utilizando um tanque de mistura. Os modelos empíricos que foram propostos foram e continuando sendo amplamente aplicados na abordagem de BP. Nesse artigo, os autores propuseram um modelo mecanicista para descrever os processos de quebra e coalescência em escoamentos turbulentos, aplicável à sistemas de dispersão líquido-líquido e cuja abordagem permanece influente em várias áreas (COULALOGLOU; TAVLARIDES, 1977).

Aplicação em estudos sobre emulsificação em escoamentos (ESKIN et al., 2021), coalescência em escoamentos horizontais (AMOOEY; AMIRI, 2019), impacto da adsorção de surfactantes (MAINDARKAR; HOOGLAND; HENSON, 2015; GUAN; YANG; NIGAM, 2020), partículas sólidas em emulsão Pickering (SIVA; HO, 2022; FRUNGIERI; BRIESEN, 2023) e formulação de emulsões em tanques agitados (LIU et al., 2017; HOHL; RÖHL; KRAUME, 2023). Além disso, essas pesquisas têm aplicações práticas na indústria petroquímica, como em separadores gravitacionais (OSHINOWO; VILAGINES, 2020), precipitadores eletrostáticos (ARYAFARD et al., 2016; KAKHKI; FARSI; RAHIMPOUR, 2016), hidrociclones tangenciais (LI; HUANG, 2017) e axiais (XING et al., 2022), válvulas de mistura em processos de dessalgação (MITRE et al., 2014) e filtros coalescentes (MAZUMDAR; JAMMORIA; ROY, 2017).

Para complementar esses estudos experimentais, a revisão de Liao e Lucas (2009) é fundamental ao fornecer uma análise detalhada dos principais modelos de quebra de gotas, examinando suas bases físicas, limitações e aplicabilidade em diferentes regimes de escoamento. Posteriormente, Liao e Lucas (2010) ampliaram a revisão para incluir os

modelos de coalescência, discutindo como fatores como a tensão superficial, o campo de escoamento e as interações entre gotas influenciam a coalescência.

2.1 Mecanismo de quebra de gotas

Na interface entre dois fluidos, uma diferença de pressão surge por efeito da resultante da interação na superfície, essa variação é modelada pela equação de Young-Laplace, considerando uma superfície de espessura zero, como:

$$\Delta P = P_{interno} - P_{externo} = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.1)$$

gotas esféricas onde $R_1 = R_2$, a equação se torna:

$$\Delta P = \sigma \frac{2}{R} = \sigma \frac{4}{d} \quad (2.2)$$

onde ΔP é a diferença de pressão, do exterior menos o interior, R é o raio de curvatura média, σ a tensão interfacial e d é o diâmetro da gota.

Estudos conceituais sobre a quebra de gotículas advém das primeiras observações feitas com os trabalhos de Kolmogorov (1949) e Hinze (1955), que estabeleceram uma teoria de quebra pela introdução da razão adimensional entre tensões atuantes na gota (τ) e a tensão interfacial (σ/d), de modo que, dois grupos adimensionais surgem:

$$We = \tau / (\sigma/d) \quad (2.3)$$

$$N_{vi} = \mu_d / \sqrt{\rho_d \sigma d} \quad (2.4)$$

onde τ pode ser uma tensão viscosa ou uma pressão dinâmica da fase contínua. N_{vi} é o grupo adimensional viscoso e se relaciona com o efeito da viscosidade do fluido da gota na deformação. Se a tensão atuante for a pressão dinâmica com tensões viscosas desprezíveis, a razão adimensional de Weber é dada por:

$$We = \rho_c U^2 d / \sigma \quad (2.5)$$

onde U é a velocidade relativa da gota ao fluido circundante.

Para prever a DTG em escoamento disperso, diversos modelos relacionando a taxa de quebra e a taxa de coalescência foram desenvolvidos para aplicação da modelagem de balanço populacional. A maioria dos modelos expressa a taxa de quebra como uma função de probabilidade de quebra e no tempo característico dado pelo espectro de turbulência. A turbulência pela teoria de Kolmogorov, representada por vórtices de tamanhos λ , transfere energia dos maiores para os menores vórtices. O diâmetro do menor vórtice é chamado de escala de comprimento de Kolmogorov, λ_k , sendo equivalente à:

$$\lambda_k = \left(\frac{\nu_c^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.6)$$

onde ε é a taxa de dissipação de energia local. A teoria de Kolmogorov-Hinze (HINZE, 1955) sugere que a ruptura da gota é influenciada apenas por vórtices com comprimento igual ou menor ao da gota. A teoria sugere dois regimes de turbulência, inercial e viscoso. Gotas com diâmetro maiores que a escala de comprimento do vórtice estão no regime inercial, onde as tensões interfaciais, oriundas da pressão capilar, são balanceadas pelas tensões inerciais (pressão dinâmica dada por flutuações turbulentas) e as tensões viscosas podem ser ignoradas. No regime viscoso turbulento o diâmetro da gota é menor que a escala do comprimento do vórtice e o diâmetro máximo das gotas, d_{max} , é determinado pelo balanço entre as forças viscosas contra a pressão capilar da gota. Para distinguir o regime, o tamanho dos menores vórtices deve ser determinado, de acordo com a Equação 2.6. A mudança no regime depende não apenas do tamanho dos menores vórtices, mas também da viscosidade da fase contínua e do tamanho máximo estável de gota (d_{max}) na dispersão (VANKOVA et al., 2007). Na condição inercial, o número de Weber crítico pode ser definido como sendo:

$$We_{crit} = \rho_c \overline{u'^2} d_{max} / \sigma \quad (2.7)$$

onde $\overline{u'^2}$ é o valor médio do quadrado da diferença de velocidade em todo o fluido em uma distância d_{max} . Na hipótese de turbulência isotrópica, Hinze (1955) sugere que a energia cinética é composta de flutuações que estão na escala de comprimento de onda dada pela lei de distribuição de energia de Kolmogorov (1949), assim:

$$\overline{u'^2} = C_1 (\varepsilon d)^{2/3} \quad (2.8)$$

onde C_1 é uma constante, ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e d o diâmetro da gota. Dessa forma, quando o grupo viscoso é desprezível ($N_{vi} \ll 1$), We_{crit} pode ser ajustado para um valor constante e assim, o diâmetro máximo estável de gota pode ser obtido substituindo a expressão 2.8 em 2.7:

$$d_{max} = C (\sigma / \rho_c)^{3/5} \varepsilon^{-2/5} \quad (2.9)$$

Hinze aplicou esse modelo mecanicista para a predição do máximo diâmetro estável nos dados experimentais e obteve uma constante $C = 0,725$ com desvio padrão de 0,315, para sistema disperso com concentração de 0,9% a 4,8%. Segundo o modelo, a probabilidade de ruptura aumenta conforme aumenta a razão entre a tensão turbulenta que age sobre a gota, e a energia superficial que busca mantê-la esférica, ou seja, atingindo um número de Weber acima de um valor crítico, a quebra ocorrerá. Entretanto, Hinze argumenta que, uma vez que a deformação da gota pode ser descrita por dois grupos adimensionais, um valor crítico de Weber deverá ser função do grupo viscoso e dependente do tipo de deformação e escoamento em torno da gota.

Depois do trabalho do Hinze, outros autores propuseram correlações similares do modelo mecanicista de diâmetro máximo/médio e outros tentaram estender a aplicação do

modelo de Hinze, como para diferentes razões de viscosidades (DAVIES, 1985; VANKOVA et al., 2007) e obstruções, principalmente os que produzem uma taxa de dissipação de energia não homogênea no espaço (PERCY; SLEICHER, 1983; PAOLINELLI; RASHEDI; YAO, 2018; ZANDE; BROEK, 1998). O modelo de Hinze é válido para a subfaixa inercial, e considera que apenas tensões inerciais atuam como mecanismo de quebra ($\lambda_k < d_{max} < 0,1$ do diâmetro do tubo).

2.2 Quebra de gotas em restrições em escoamento turbulento

Restrições em escoamento interno, sejam válvulas ou mesmo obstruções puramente cilíndricas produzem diversas zonas de recirculação e formação de uma *vena contracta*, caracterizando um escoamento complexo de ser modelado. Estudando uma dispersão de água em querosene após um orifício circular em um tubo, Scott, Hayes e Holland (1958) sugeriram uma correlação empírica entre a área interfacial da população de gotas, A , a queda de pressão através do orifício, ΔP e a fração da fase dispersa ϕ , considerando até 20% v/v.

$$A = 282\phi^{0,847}(C_0^2\Delta P)^{0,735} \quad (2.10)$$

onde C_0 seria o coeficiente de descarga do orifício. De maneira semelhante, Percy e Sleicher (1983) realizaram experimentos com gotas individuais e derivaram a probabilidade de quebra como uma função do diâmetro da gota, variando as velocidades e as proporções de restrição do tubo. Eles definiram um diâmetro de gota correspondente a uma fração f de gotas quebradas, d_f , onde d_0 é o diâmetro para 0% de gotas quebradas e d_{100} para 100%.

$$d_f = C_f \sqrt{\frac{D_o\sigma}{\Delta P_{max}}} \quad (2.11)$$

com $C_f = 0,32 + 2,8f$. Seus resultados mostraram que d_f era uma função linear da escala de comprimento característico $L_o = \sqrt{D_o\sigma/\Delta P_{max}}$, onde D_o é o diâmetro do orifício e ΔP_{max} é a máxima diferença de pressão através do orifício. Resultados semelhantes foram obtidos por Zande e Broek (1998) para uma faixa muito menor de comprimento característico L_o , ou seja, maior taxa de dissipação e identificaram um valor maior de C_f para a estimativa de d_{100} . Essa diferença pode ser devido à faixa de parâmetros de escoamento entre ambos os estudos, como a maior viscosidade da fase dispersa no trabalho de Van der Zande e Van den Broek (1998).

Avaliando os efeitos da geometria da válvula Choke no processo de quebra, utilizada no controle de produção de óleo e gás, Muntinga (1998) mostra que a quebra não é um evento estacionário, e as gotas precisam de um tempo de residência na região de dissipação maior que o tempo necessário para a ruptura completa. Assim, a não homogeneidade na distribuição da dissipação de energia, dado pela análise das diferentes geometrias, se mostrou um fator crucial, onde gotas podem não se chocar com vórtices com energia suficiente para gerar uma ruptura.

Considerando orifícios circulares como similares à válvulas chokes, [Zande et al. \(1999\)](#) demonstraram uma correlação entre o diâmetro máximo estável de gota com a dissipação média de energia por unidade de massa a jusante da restrição. seguindo a correlação:

$$d_{max} \propto \bar{\varepsilon}^{-2/5} \quad (2.12)$$

onde $\bar{\varepsilon}$ é a dissipação média no volume.

[Galinat et al. \(2005\)](#) investigaram diferentes níveis de turbulência utilizando placas de orifício concêntricas e foi observado que a quebra de gotas era ocasionada pela alta turbulência na região anular após a placa e o diâmetro médio proporcional ao inverso da raiz quadrada da queda de pressão, mesma relação funcional do modelo da equação 2.11. Os testes avaliaram número de Weber, diâmetro de gota, taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ε e tensão interfacial. As gotas de heptano de 1,5 a 3 mm imersas em água, com razão de viscosidade de 0,5, foram sujeitas à doze condições de escoamento, variando o diâmetro do orifício e a velocidade da fase contínua. O resultados obtidos mostram que conforme aumenta o número de Weber, a probabilidade de ruptura e o número de gotas filhas aumentam, enquanto o tamanho das gotas filhas diminui. Distribuições multimodais de gotas filhas ocorreram em números de Weber baixos e moderados por causa de fragmentações assimétricas.

Em estudo mais recente, [Galinat et al. \(2007\)](#) observaram que a intensidade da quebra dependeu principalmente de ε , avaliada através da queda de pressão, mas também influenciada pela concentração da fase dispersa e da probabilidade das gotas de passarem pela região de intensa turbulência.

Em válvulas, significativa redução do tamanho de gotas ocorre na Choke, a literatura dispõe de trabalhos envolvendo também válvulas de completção de reservatório, entre outras. As geometrias internas são comumente complexas e propiciam um escoamento que induzem a ação de mecanismos de quebra por meio do cisalhamento e turbulência a jusante da restrição ([MUNTINGA, 1998](#)).

Aplicando modelos mecanicistas para prever o diâmetro máximo estável de gota de óleo em água, [Azevedo \(2016\)](#) sugere que a taxa média de dissipação de energia não é uma boa aproximação para todos os casos estudados, dada as restrições de orifícios circulares avaliadas, necessitando considerar taxas de dissipação de energia locais para melhorar as previsões.

Continuando nessa mesma linha de avaliação de modelos mecanicistas, [Paolinelli, Rashedi e Yao \(2018\)](#) avaliaram restrição tipo válvula globo em um sistema água em óleo sem surfactantes. Consideraram modelos de quebra no regime turbulento, por cisalhamento simples e extensional. As correlações turbulentas subestimam ou superestimam a quebra a depender de algumas condições, entretanto, os modelos de cisalhamento simples e

extensional não fornecem predição satisfatória para os casos avaliados.

Também utilizando água em óleo, porém com surfactantes, [Silva, Medronho e Barca \(2019\)](#) fizeram uso de um aparato para criar quedas de pressão localizadas. Três modelos de quebra de gotas foram comparados com os resultados experimentais. O modelo de Hinze, Eq. 2.9, não previu adequadamente os resultados experimentais, mas se ajusta razoavelmente bem quando a constante proporcional original é alterada de -0.4 para -0.42. Com o aumento da concentração da fase dispersa ocorre o aumento do diâmetro máximo das gotas, devido à supressão da turbulência e/ou ao fenômeno de coalescência.

O trabalho de [Mitre et al. \(2014\)](#) investiga a quebra e coalescência de gotas em emulsões água em óleo ao escoarem por elementos semelhantes a válvulas, utilizando modelos de balanço populacional para simular a distribuição de tamanho de gotas. Os autores desenvolveram e validaram modelos que consideram os efeitos da turbulência e das propriedades físicas das fases envolvidas. Os resultados mostraram que a dissipação de energia turbulenta influencia significativamente o tamanho das gotas, e que a coalescência é afetada pela concentração da fase dispersa e pelas características do escoamento.

3 Abordagem de Balanço Populacional

Este capítulo dá continuidade ao referencial teórico, com foco na descrição da abordagem de balanço populacional. Sistemas multifásicos dispersos são formados por entidades separadas, como partículas/cristais, gotas e bolhas, podendo assumir dispersão homogênea em uma fase contínua. Esses sistemas são comumente encontrados em várias indústrias, incluindo química, bioquímica, farmacêutica e aeroespacial. Aqui, o termo partícula será utilizado como gênero de outras entidades, como bolhas e gotas.

As propriedades características da fase dispersa mudam no espaço e no tempo devido a vários processos, como colisões, agregação/coalescência, quebra, nucleação, dissolução/evaporação e transferência de massa e calor (SHIEA et al., 2020). Em consequência disso, essas propriedades apresentam polidispersão, situação que deve ser levada em consideração na simulação desses sistemas (CROWE et al., 2011).

Os modelos baseados em correlações de Weber ou outros adimensionais das condições de operação para relacionar a um diâmetro médio são simples de aplicar, entretanto, geralmente apenas fornecem informações de diâmetros médios (diâmetro de Sauter, por exemplo, como em Schmitt et al. (2021) e Hinze (1955)). Apesar da solução da equação de balanço populacional ter um esforço computacional maior, ela fornece vantagens decisivas, como as distribuições numéricas dessas entidades completas e transientes, a área interfacial, entre outras. Uma vantagem adicional é a facilidade na implementação e modificação de submodelos para descrever os processos de quebra e coalescência. (ROEHL et al., 2023).

Abordagens computacionais comuns empregadas na análise desse campo, podem ser divididas em três grupos principais: modelos de rastreamentos de interface totalmente resolvidos (como o popular volume de fluido, VOF), modelo Lagrangeano de massa pontual (Modelagem de fase discreta, do inglês Discrete Phase Model - DPM), e modelos Euleriano-Euleriano (SHIEA et al., 2020). As equações de balanço populacional permitem ao modelo Euleriano-Euleriano contar com o efeito da polidispersidade e os efeitos de interação partícula-partícula. Estes termos nas respectivas equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, determinam a taxa de mudança de fase e o grau de troca de quantidade de movimento e térmica entre as fases, portanto, devem ser modelados com precisão para escoamentos multifásicos (YEOH; CHEUNG; TU, 2014).

A aplicação balanço populacional para prever a distribuição do tamanho das gotas de sistemas líquido/líquido agitados foi demonstrada com eficácia no trabalho de Coualaloglou e Tavlarides (1977), validando seus próprios submodelos propostos com dados experimentais por variação da velocidade do agitador e para pequenas frações de fase dispersa ($0,025 < \phi < 0,15$).

3.1 Equação de balanço populacional

A população de uma fase dispersa é uma distribuição contínua, no tempo e na posição física no espaço, caracterizada pela distribuição de densidade numérica (n). A distribuição de densidade numérica depende das coordenadas internas e externas. As primeiras se referem às propriedades da fase dispersa e as segundas à posição no espaço físico (RAMKRISHNA, 2000). As partículas são consideradas aleatoriamente distribuídas no espaço de estados da partícula, que incluem as coordenadas internas e externas. A formulação é fundamentada na existência de n em cada ponto do espaço de coordenadas. O número de partículas em qualquer região do espaço de estados é obtido integrando a densidade numérica sobre a região desejada.

A mudança nas coordenadas externas se refere ao movimento através do espaço físico e a mudança nas coordenadas internas se refere ao movimento no espaço de propriedades.

A equação de balanço populacional define a evolução de n para as propriedades de interesse, que podem ser velocidade, tamanho, composição, temperatura, grau de polimerização, etc. A escolha das propriedades depende do sistema em questão e do nível de detalhe que se almeja alcançar. A função n é tomada como sendo contínua, define a distribuição de partículas por unidade de volume do espaço de estado no tempo t .

Seja \mathbf{x} o vetor de coordenadas internas da fase dispersa (x_1, x_2, \dots, x_n) pertencente a um espaço Ω_x , \mathbf{r} o vetor de coordenadas externas (x, y, z) pertencente ao espaço Ω_r e \mathbf{y} o vetor variáveis da fase contínua, denota-se um estado $\mathbf{z} = [\mathbf{x}, \mathbf{r}]$, onde, dado um ponto arbitrário no espaço de fase \mathbf{z} , $n(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)$ define a distribuição de densidade numérica média de elementos no volume infinitesimal $d\mathbf{x}d\mathbf{r}$ em torno desse ponto no tempo t ($t > 0$) (RAMKRISHNA, 2000). Quando os elementos variam de uma maneira determinística, a uma velocidade $\dot{\mathbf{R}}$ no espaço físico e a uma velocidade $\dot{\mathbf{X}}$ no espaço de propriedades internas, considerando a coordenada interna como contínua, a equação de balanço populacional é dada por:

$$\frac{\partial n(\mathbf{z}, t|\mathbf{y})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{z}, t, \mathbf{y})n(\mathbf{z}, t|\mathbf{y})) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{z}, t, \mathbf{y})n(\mathbf{z}, t|\mathbf{y})) = S_n(\mathbf{z}, t|\mathbf{y}) \quad (3.1)$$

A notação acima segue a definição dada em Ramkrishna e Singh (2014), detalhes do desenvolvimento da modelagem pode ser encontrado em Ramkrishna (2000) e Yeoh, Cheung e Tu (2014).

Os termos à esquerda contam para a mudança local na densidade numérica com o tempo, advecção nas coordenadas externas e internas, respectivamente. O termo à direita conta para os processos de nascimento e morte das partículas, ou seja, um termo fonte que se atribui à quebra e coalescência. A notação n é simplificada aqui para descrever apenas a população de gotas de um tipo de fase dispersa. Para diferentes populações interagindo, n se torna n_1 para distinguir as partículas de diferentes populações. De acordo

com [Ramkrishna e Singh \(2014\)](#), $|\mathbf{y}$ se refere a um argumento condicional na densidade numérica denotando a dependência do ambiente mas sem ser uma distribuição em \mathbf{y} .

Integrando a distribuição de densidade numérica sobre o espaço de estado da partícula (interno e externo), obtemos a quantidade total de partículas no sistema:

$$\int_{\Omega_r} \int_{\Omega_x} n(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}) dV_x dV_r \quad (3.2)$$

onde dV_x e dV_r são volumes infinitesimais no espaço de coordenadas internas e externas, respectivamente.

Dependendo do sistema de fases a ser modelado, a escolha de variáveis internas pode ser monovariada (unidimensional), como volume ($\mathbf{x} = v$), diâmetro ou massa das partículas, ou multivariada, como diâmetro, cadeia de agregado ou grau de cobertura (surfactante na superfície de uma gota).

Neste trabalho, a variável interna utilizada será monovariada (um grupo) e será considerado o volume da gota. Além disso, considerando o caso especial, onde não há alteração de massa da partícula (ausência de crescimento de partículas, $\dot{X}(\mathbf{z}, t, \mathbf{y}) = 0$), a equação de transporte para a densidade numérica de partículas, Eq. 3.1, se reduz à ([YEOH; CHEUNG; TU, 2014](#)):

$$\frac{\partial n(v, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\dot{\mathbf{R}}(v, \mathbf{r}, t) n(v, \mathbf{r}, t)) = S_n(v, \mathbf{r}, t) \quad (3.3)$$

sendo que \mathbf{y} foi omitido para simplificação.

Alterações na distribuição de tamanhos de gotas podem ser calculadas utilizando o balanço de nascimento e morte de gotículas de um determinado tamanho, formadas ou destruídas a partir dos fenômenos de quebra e coalescência ([COULALOGLOU; TAVLARIDES, 1977](#); [LIAO; LUCAS, 2009](#); [LIAO; LUCAS, 2010](#); [HOHL; RÖHL; KRAUME, 2023](#)). O termo fonte da Equação 3.3 é definido como sendo uma contribuição de cada uma dessas parcelas:

$$S_n(v, \mathbf{r}, t) = B_c - D_c + B_b - D_b \quad (3.4)$$

na qual B_c e B_b são funções que simbolizam a taxa de surgimento de partículas (B do inglês *Birthing*) devido à coalescência (subscrito c) e quebra (subscrito b), respectivamente, e os termos D_c e D_b , a taxa de desaparecimento de partículas (D do inglês *Death*) devido à agregação e quebra, respectivamente. No caso da fração de fase dispersa é uniformemente distribuída no domínio e distribuição de densidade numérica é independente das coordenadas externas, ou seja:

$$n(v, t) = \frac{1}{V_r(\Omega_r)} \int_{\Omega_r} n(v, \mathbf{r}, t) dV_r \quad (3.5)$$

onde $V_r(\Omega_r)$ é o volume do domínio Ω_r . Assim, a equação de balanço populacional pode ser simplificada para sua forma zero-dimensional:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = S_n(v, t) = B_c - D_c + B_b - D_b \quad (3.6)$$

Seguindo o desenvolvimento proposto por [Ramkrishna \(2000\)](#), as funções de quebra podem ser modeladas a partir de parâmetros determinísticos como frequência de quebra $b(v)$, um número médio de partículas na quebra de uma partícula de volume v' denotado por $\zeta(v')$, e uma distribuição de tamanho para os fragmentos de quebra de uma partícula de volume v' , dada por $P(v|v')$, todos assumidos como independentes do tempo. O número de partículas de volume v desaparecendo por quebra por unidade de tempo é representado como:

$$D_b = b(v)n(v,t) \quad (3.7)$$

O termo fonte para as partículas que surgem devidos aos processos de quebra é representado como:

$$B_b = \int_v^\infty \zeta(v')b(v')P(v|v')n(v',t)dv' \quad (3.8)$$

na qual contabiliza a produção de partículas de volume v pela quebra de partículas de volume v' , dado que $v' > v$. A função de probabilidade $P(v|v')$ herda certas propriedades das leis de conservação que devem limitar o processo de quebra:

$$\int_0^{v'} P(v|v')dv = 1 \quad (3.9)$$

$$P(v|v') = 0, \text{ se } v \geq v' \quad (3.10)$$

$$v' \geq \zeta(v') \int_0^{v'} vP(v|v')dv \quad (3.11)$$

A primeira condição estabelecida é a de normalização. A Equação 3.10 assegura a conservação de massa, o volume de uma gota filha não pode ser maior que a da gota mãe. A equação 3.11 expressa a conservação de volume na qual a soma dos volumes de todos os fragmentos resultantes da quebra não pode ultrapassar o volume da partícula mãe. Se a quebra for binária, $\zeta(v') = 2$, a função $P(v|v')$ deve atender à condição de simetria $P(v' - v|v') = P(v|v')$, ou seja, uma partícula de volume v , formado a partir da mãe v' , automaticamente implica que a outra possui volume $v' - v$, portanto, as probabilidades desses dois eventos devem ser iguais ([RAMKRISHNA, 2000](#)).

A agregação deve ocorrer pelo menos entre duas partículas, na derivação dos termos fontes desse trabalho, apenas a coalescência binária é adotada como sendo relevante. Essa hipótese se restringe a sistemas suficientes diluídos e à ausência de coagulação ou outras formas de agregação entre gotas. [Ramkrishna \(2000\)](#) define a probabilidade de uma partícula de volume v e outra de volume v' coalescerem em um intervalo de tempo dt como sendo $a(v, \mathbf{r}, v', \mathbf{r}', t)dt$. Aplicando a uniformidade espacial da população:

$$a(v, v') = \frac{1}{V_r(\Omega_r)} \int_{\Omega_r} dV_r \int_{\Omega_r} a(v, \mathbf{r}, v', \mathbf{r}', t)dV_r \quad (3.12)$$

$a(v, v')$ tem as dimensões do volume espacial por unidade de tempo. Temos partículas de volume $v - v'$ agregando-se com partículas de volume v' para produzir partículas de

volume v . O volume v' varia entre 0 e v , também o faz $v - v'$, de modo que cada par no conjunto $\{[v - v', v']; 0 < v' < v\}$ é considerado duas vezes na integração. Assim, o termo fonte para o surgimento de novas partículas é definido como:

$$B_c = \frac{1}{2} \int_0^v a(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv' \quad (3.13)$$

na qual B_C representa a taxa de formação de partículas de volume v por agregação de partículas menores. O termo $1/2$ é uma correção para desconsiderar os pares. As gotas de volume $v - v'$ e v' coalescem e formam uma partícula de volume v , aqui $v' < v$. O termo sumidouro para a modelagem do desaparecimento devido à coalescência é dado por:

$$D_c = \int_0^\infty a(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' \quad (3.14)$$

Contando os processos de quebra e coalescência descritos acima, a equação de balanço populacional 3.6 toma a forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v a(v - v', v') n(v - v', t) n(v', t) dv' \\ & - \int_0^\infty a(v, v') n(v, t) n(v', t) dv' \\ & + \int_v^\infty \varsigma(v') b(v') P(v|v') n(v', t) dv' \\ & - b(v) n(v, t) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Esse processo, contado a partir de somas algébricas possuem a necessidade de serem independentes um do outro, ou seja, os mecanismos que regem os processos de quebra e coalescência não devem apresentar interferências mútuas. Uma descrição mais detalhada da formulação e desenvolvimento dessas equações pode ser encontrada em [Ramkrishna \(2000\)](#).

3.2 Solução das equações de balanço populacional

A equação integro-diferencial de balanço populacional pode ser resolvida aplicando o método de classes (MOC), método de momentos (MOM), quadratura numérica entre outros, de modo que permita resolver para um número finito e fixo de equações algébricas. A eficácia dessas abordagens reside na possibilidade de alcançar soluções rápidas para características específicas da população, como diâmetro médio, concentração volumétrica e interfacial entre outros, sendo estas potencialmente pertinentes a uma determinada aplicação.

Nas aplicações, certas propriedades da população de partículas podem ser mais significativas do que outras, quer porque controlam a qualidade do produto, quer porque são mais fáceis de medir para efeitos de controle.

Uma abordagem prática para resolver o balanço populacional é resolver os momentos da distribuição. Os momentos de ordem k da distribuição da densidade numérica em termos de volume são definidos como:

$$m_k = \int_0^{\infty} v^k n(v,t) dv \quad (3.16)$$

dados que, em $k = 0$, corresponde a concentração numérica de partículas, ou número total de partículas por unidade de volume, $N(t)$. Por outro lado, $k = 1$, denota a fração volumétrica local das partículas, $\phi(t)$. Nesse caso, se refere à duas quantidades que são homogêneas no espaço físico (independentes de \mathbf{r}), por outro lado, quando dependentes do espaço físico, $N(\mathbf{r}, t)$ e $\phi(\mathbf{r}, t)$ são necessárias nas simulações CFD para o conhecimento da população no espaço físico. A transformação de momentos pode ser mais útil em certas aplicações de controle de processo e qualidade de sistemas particulados do que o conhecimento da densidade numérica das partículas, por serem mais fáceis de medir (RAMKRISHNA, 2000).

Para resolver as integrais unidimensionais, é necessário definir limites para o domínio do volume das partículas e particionar esse domínio em subintervalos, $\{v_1, \dots, v_M, v_{M+1}\}$ com $M + 1$ classes de volumes e M intervalos (classes), com cada intervalo $I_i = [v_i, v_{i+1})$. Assim, é possível definir um momento seccional ou discreto de ordem zero, N_i , que representa o número total de partículas na classe i (tamanho v_i a v_{i+1}), por unidade de volume:

$$N_i(t) = \int_{v_i}^{v_{i+1}} n(v,t) dv \quad (3.17)$$

Do mesmo modo, a fração volumétrica de fase dispersa de gotas da classe i é conhecida pela correlação:

$$\phi_i = N_i \bar{v}_i \quad (3.18)$$

onde \bar{v}_i é o volume médio, pivô, do intervalo de classe. A fração volumétrica total da fase dispersa é então definida a partir da forma discreta como:

$$\phi = \sum_{i=1}^M \phi_i \quad (3.19)$$

As equações de transporte em aplicações CFD e dependentes do espaço, são comumente escritas em termos das frações de volume da classe i , f_i , limitado de zero a um com soma igual à unidade:

$$f_i = \frac{\phi_i}{\phi}, \quad 0 < f_i < 1, \quad \sum f_i = 1 \quad (3.20)$$

Com a aplicação dessa discretização na equação 3.15, as integrais são substituídas por somatórios de integrais em cada subintervalo e, assim, é denominado método das

classes (MOC - do inglês Method of Classes). Mesmo assim, outros métodos discretos devem ser aplicados para reescrever o lado direito da Equação 3.15 em termos da variável N_i , para isso é adotada a densidade numérica como sendo:

$$n(v,t) = \sum_{j=1}^M N_j \delta(v - x_j) \quad (3.21)$$

onde x_j é denominado pivô, que concentra a distribuição do intervalo nesse ponto. Assim, a equação de balanço populacional 3.15, na forma dos volumes discretizados, pode ser reescrita de acordo com Ramkrishna (2000):

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} N_j \sum_{(x_j+x_k) \in I_i} N_k a_{k,j} - N_i \sum_{j=1}^M N_j a_{i,j} \\ & + \sum_{j=i}^M \varsigma_j b_j N_j \int_{v_i}^{v_{i+1}} P(v|x_j) dv - b_i N_i \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde o primeiro termo do lado direito é zero em $i = 1$ e o terceiro é zero em $i = M$, sendo M o número de classes de discretização da DTG. Nessa equação, foram utilizados as seguintes abreviações:

$$a_{i,j} \equiv a(x_i, x_j), \quad b_j \equiv b(x_j), \quad \varsigma_j \equiv \varsigma(x_j) \quad (3.23)$$

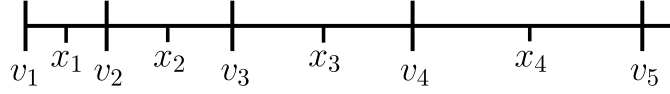
Duas formulações foram implementadas numericamente, por motivos de comparação e validação do algoritmo, a primeira utiliza subintervalos uniformes, $x_{i+1} - x_i = c$, onde c é uma constante para qualquer i . A segunda utiliza subintervalos geométricos, proposto por Kumar e Ramkrishna (1996). A primeira abordagem permite escrever x_i como sendo igual a ix_1 , mantendo a consistência na coalescência na ocorrência de atribuição à outro pivô, por exemplo a coalescência de uma partícula de tamanho x_j com uma de x_k produz $x_j + x_k = (j+k)x_1 = x_{k+j}$. Essa formulação, proposta por Hidy e Brock (1970), é definida como:

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} N_{i-j} N_j a_{j,i-j} - N_i \sum_{j=1}^M N_j a_{i,j} + \sum_{j=i}^M \varsigma_j P_{i|j} b_j N_j - b_i N_i \quad (3.24)$$

para $i = [1, \dots, M]$. $P_{i|j}$ é uma abreviação de $P(x_i|x_j)$. Como dito, essa formulação demanda uma malha uniforme, onde a quebra e coalescência sempre resulta em uma atribuição absoluta à um pivô existente na malha, como exemplo, a quebra binária de uma gotícula de volume x_4 pode gerar contribuições à densidade numérica que são integralmente atribuídas aos pivôs da malha $\{x_2, x_2\}$ e/ou $\{x_1, x_3\}$.

Os analisadores de distribuição de partículas utilizam de uma malha geométrica, $v_{i+1} = sv_i$, com s podendo ser 1,5, 2 ou mesmo irracionais. Um esquema é ilustrado na Figura 1, x' s são os pivôs dos intervalos de classe.

Figura 1 – Exemplo de malha geométrica $v_{i+1} = sv_i$ onde os pivôs são $x_i = (v_{i+1} + v_i)/2$



Fonte: Autor.

Na malha geométrica, processos como coalescência e quebra produzem partículas que estão entre esses tamanhos pivotais e devem ser reatribuídos para que se conserve a massa total da fase dispersa. Essa reatribuição deve ser feita com o devido cuidado para preservar o cálculo preciso dos momentos de interesse da aplicação. [Kumar e Ramkrishna \(1996\)](#) propõe uma atribuição parcial aos pivôs mais próximos gerados a partir dos termos fontes de quebra e coalescência. Em um volume v gerado entre x_i e x_{i+1} , é atribuído uma parte ao volume x_i denominado $\gamma_i^{(i)}(v)$, onde o sobrescrito, (i) , denomina o intervalo de origem da partícula e o subscrito sua atribuição, e a outra parte é atribuída à x_{i+1} , denominada $\gamma_{i+1}^{(i)}(v)$.

$$\gamma_i^{(i)}(v) = \frac{v^{r_1} x_{i+1}^{r_2} - v^{r_2} x_{i+1}^{r_1}}{x_i^{r_1} x_{i+1}^{r_2} - x_i^{r_2} x_{i+1}^{r_1}} \quad \gamma_{i+1}^{(i)}(v) = \frac{v^{r_2} x_i^{r_1} - v^{r_1} x_i^{r_2}}{x_i^{r_1} x_{i+1}^{r_2} - x_i^{r_2} x_{i+1}^{r_1}} \quad x_i \leq v < x_{i+1} \quad (3.25)$$

Da mesma forma, em um volume v gerado entre x_{i-1} e x_i , a atribuição aos pivôs mais próximos é dada por:

$$\gamma_{i-1}^{(i-1)}(v) = \frac{v^{r_2} x_i^{r_1} - v^{r_1} x_i^{r_2}}{x_{i-1}^{r_1} x_i^{r_2} - x_{i-1}^{r_2} x_i^{r_1}} \quad \gamma_i^{(i-1)}(v) = \frac{v^{r_1} x_{i-1}^{r_2} - v^{r_2} x_{i-1}^{r_1}}{x_{i-1}^{r_1} x_i^{r_2} - x_{i-1}^{r_2} x_i^{r_1}} \quad x_{i-1} \leq v < x_i \quad (3.26)$$

Em suma, o pivô x_i recebe atribuição tanto de $\gamma_i^{(i)}(v)$ quanto de $\gamma_i^{(i-1)}(v)$. A preservação do número de partículas e da massa é garantida quando $r_1 = 0$ e $r_2 = 1$. Dessa maneira, [Kumar e Ramkrishna \(1996\)](#) reescreve a equação 3.22 para os novos termos fontes que consideram essa reatribuição aos pivôs:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \sum_{x_{i-1} \leq (x_j + x_k) \leq x_i}^{j \geq k} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{jk}\right) [\gamma_i^{(i-1)}(x_j + x_k) a_{k,j} N_j N_k] \\ & + \sum_{x_i \leq (x_j + x_k) \leq x_{i+1}}^{j \geq k} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{jk}\right) [\gamma_i^{(i)}(x_j + x_k) a_{k,j} N_j N_k] \\ & - N_i \sum_{j=1}^M a_{i,j} N_j + \sum_{j=i}^M N_j \zeta_j b_j \pi_{0,i,j} - b_i N_i \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde o termo $\gamma_i^{(i-1)}(x_j + x_k)$ é a função $\gamma_i^{(i-1)}(v)$ avaliada em $v = x_j + x_k$, igualmente para $\gamma_i^{(i)}(x_j + x_k)$. O termo $\pi_{0,i,j}$ é dado por:

$$\pi_{r,i,j} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} v^r \gamma_i^{(i-1)}(v) P(v|x_j) dv + \int_{x_i}^{x_{i+1}} v^r \gamma_i^{(i)}(v) P(v|x_j) dv \quad (3.28)$$

onde $r = r_1$ e $r_1 = 0$. O primeiro termo do lado direito é zero para $i = 1$ e o segundo é zero para $i = M$. O somatório presente na equação 3.27 é feito apenas para a condição em que

$j \geq k$, para pares de valores de j e k que estão sujeitos à condição $x_{i-1} \leq (x_j + x_k) \leq x_i$ ou $x_i \leq (x_j + x_k) \leq x_{i+1}$, ou seja, que geram termos fontes para N_i .

Os termos que modelam coalescência na equação 3.27 recuperam a equação de Hidy e Brock (1970), 3.24, quando uma malha uniforme é utilizada. Além disso, é possível utilizar malha discreta junto com uma malha contínua ou um refinamento seletivo e genérico nessa aproximação. A formulação de classes geométricas será aplicada para modelar a quebra e coalescência desse trabalho no objetivo de observar os mesmos efeitos dos resultados experimentais.

3.3 Mecanismos de quebra de partículas fluidas

Em sistemas gás-líquido e líquido-líquido, mecanismos de transferência de massa, quantidade de movimento e energia desempenham papel fundamental em projeto e otimização de equipamentos e processos em inúmeras aplicações industriais. Interações entre partículas/gotículas e a área interfacial entre as fases afetam a performance desses mecanismos, e necessitam ser entendidos pela distribuição dos diferentes tamanhos das partículas. Desta forma, entender os processos que levam à quebra e coalescência é fundamental (YEOH; CHEUNG; TU, 2014).

Em modelagem de sistemas multifásicos, modelo multi-fluido são empregados numa abordagem Euleriana-Euleriana, de menor custo computacional, porém, com demanda maior por modelagem matemática. Esses modelos precisam contabilizar os mecanismos citados anteriormente, que são dependentes de área interfacial e distribuição de tamanho da fase dispersa, de modo que o modelo de balanço populacional deve ser empregado.

Para o entendimento da distribuição de tamanho em sistemas multifásicos, o fechamento dos termos fontes da equação 3.15 deve ser feito. Dessa maneira, a criação e destruição das partículas necessitam de modelos fenomenológicos para definir as taxas de coalescência e quebra de partículas e modelos para prever as interações com o campo ao redor e entre si. A modelagem das taxas de nascimento e morte para essas classificações de escoamentos multifásicos é extremamente desafiadora devido à complexidade da física envolvida (YEOH; CHEUNG; TU, 2014).

A quebra de gotas é influenciada pela hidrodinâmica da fase contínua e pelas interações interfaciais. A gota em uma fase contínua está sujeita a tensões normais e tangenciais que competem com a tensão superficial e viscosa do fluido interno, que tenta manter a gota coesa (KOLMOGOROV, 1949; HINZE, 1955). Para quebrar uma gota, uma quantidade de energia deve ser consumida para primeiro deformar a gota e depois romper a sua interface, gerando um aumento da área interfacial nas gotas filhas.

Mecanismos de quebra de gotas em escoamentos turbulentos foram descritos por

Liao e Lucas (2009) em seu artigo de revisão sobre modelos de quebra. Os autores identificaram quatro mecanismos:

1. Flutuação turbulenta e colisão
2. Tensão cisalhante viscosa
3. Processo de corte
4. Instabilidade interfacial.

Esse trabalho irá abordar alguns dos modelos típicos para frequência de quebra que são empregados em escoamentos turbulentos. Dado que, o campo de escoamento contínuo na maioria dos casos é turbulento. A flutuação turbulenta é arbitrariamente assumida como o mecanismo de quebra dominante e os efeitos da força viscosa, velocidade relativa e instabilidade interfacial sobre os fenômenos de quebra são geralmente negligenciados sem qualquer validação adicional (LIAO; LUCAS, 2009).

Flutuação turbulenta e colisão

No que diz respeito ao mecanismo de flutuação turbulenta e colisão, Liao e Lucas (2009) distingue pelo menos cinco critérios ou casos na literatura.

- (a) Energia cinética turbulenta da partícula maior que um valor crítico;
- (b) Flutuação de velocidade ao redor da superfície da partícula maior do que um valor crítico;
- (c) Energia cinética turbulenta do vórtice que atinge a partícula maior que um valor crítico;
- (d) Força inercial do vórtice maior que a força interfacial da menor partícula filha;
- (e) Combinação dos critérios (c) e (d).

Considerando flutuação turbulenta e colisão, esse mecanismo é o mais estudado e desenvolvido. De acordo com Liao e Lucas (2009), flutuações de pressão turbulenta ao longo da superfície ou colisões entre partículas e vórtices é a causa principal de quebra nesse mecanismo. A oscilação gerada promove instabilidade na superfície da gota, deformando e levando a um afinamento até culminar na fragmentação em duas ou mais partículas.

Se tratando da hipótese de energia cinética turbulenta da partícula maior que um valor crítico. A premissa básica é que uma gota deformada oscilante quebrará se sua energia cinética, transmitida pelas colisões gota-vórtice, for maior que sua energia de superfície. O

modelo mais estudado é o de [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#), na qual, a distribuição de energia cinética é determinada por uma função normal.

O critério de flutuação de velocidade ao redor da superfície da partícula maior do que um valor crítico, parte da hipótese de que a oscilação e a quebra de uma gota são induzidas pela diferença nas flutuações de velocidade entre pontos próximos à superfície da gota.

O critério de energia cinética turbulenta do vórtice que atinge a partícula maior que um valor crítico é o que possui mais atenção e foco na literatura. Nesse critério, [Prince e Blanch \(1990\)](#) determinaram a frequência de quebra por um produto entre a frequência de colisão e a eficiência de colisão dos vórtices com a gota, supondo turbulência homogênea e isotrópica.

Tensão cisalhante viscosa

De acordo com [Liao e Lucas \(2010\)](#), as forças de cisalhamento viscosas na fase contínua causam um gradiente de velocidade ao redor da interface e deformam a partícula de fluido, levando à quebra.

No caso viscoso, o mecanismo de ruptura pode ser expresso como um equilíbrio entre tensões definido em termos do número capilar $Ca = \tau_v/\tau_s$, onde τ_v são as tensões viscosas externas e τ_s a superficial. Um número capilar acima de um valor crítico promove a ruptura da partícula.

Processo de corte

O processo de corte é um mecanismo que se torna pronunciado à medida que as partículas aumentam. De acordo com [Liao e Lucas \(2010\)](#), o processo de corte é caracterizado por um número de pequenas partículas cisalhadas de uma grande, o que também é denominado de ruptura erosiva. Em escoamento altamente viscosos, o corte é determinado pelo equilíbrio entre a força de cisalhamento viscoso e a tensão superficial nas bordas da bolha cap/slug. A borda da bolha é instabilizada e rompida na presença de velocidade relativa alta o suficiente, gerando pequenas e inúmeras bolhas.

Figura 2 – Representação esquemática do mecanismo de quebra por processo de corte.



Fonte: Adaptado de [Ishii e Hibiki \(2005\)](#).

Instabilidade interfacial

A instabilidade interfacial é um mecanismo predominante na ausência de escoamento da fase contínua, como por exemplo em quebra de bolhas ascendentes em meio líquido ou mesmo gotas caindo em um gás ou líquido imiscível estacionário. Nessas condições em que um fluido de baixa massa específica é acelerado em um de alta, é gerada uma instabilidade de Rayleigh-Taylor.

3.4 Modelagem da quebra

Esse tópico irá abordar o desenvolvimento dos modelos de quebra que foram aplicados para prever os resultados experimentais obtidos, dentre eles o modelo de quebra proposto por [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#), o de [Mitre et al. \(2014\)](#).

3.4.1 Modelagem da quebra por Coulaloglou e Tavlarides (C&T)

O modelo fenomenológico de [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#) considera a quebra em um escoamento turbulento, a base do modelo consiste na suposição de que a gota irá se fragmentar quando o choque com vórtices turbulentos transmitir mais energia cinética do que a energia superficial da gotícula. Assume isotropia e distribuição normal da energia cinética turbulenta, além do mais, o movimento das gotas filhas é o mesmo dos vórtices turbulentos. A taxa de quebra é definida como sendo:

$$b(v) = \left(\frac{1}{\text{Tempo de quebra}} \right) (\text{Fração de gotas quebrando}) \quad (3.29)$$

A fração de quebra é assumida como sendo proporcional à fração de gotas que possuem energia cinética turbulenta maior que a tensão superficial. Considerando uma energia superficial da gota $E_s = \sigma d^2$, a fração de gotas quebrando é proporcional à fração de vórtices com velocidades acima de uma velocidade de flutuação.

$$\left(\frac{\text{Fração de gotas quebrando}}{\text{gotas quebrando}} \right) \approx \exp \left(-\frac{E_s}{E_v} \right) \quad (3.30)$$

a equação assume a mesma distribuição de energia cinética para a gota e para o vórtice, tendo em vista que vórtices com escalas de comprimento maiores que d apenas arrastam as gotículas sem ocorrência de quebra. A energia cinética média de um vórtice é então aproximada como sendo:

$$\overline{E_v} = C \rho_d d^3 \overline{u^2}(d) \quad (3.31)$$

onde C é uma constante. Aqui $\overline{u^2}(d)$ é a média dos quadrados da velocidade relativa entre dois pontos separados por uma distância d no subintervalo inercial, dado por (KOLMOGOROV, 1949):

$$\overline{u^2}(d) = C(\varepsilon d)^{2/3} \quad (3.32)$$

O tempo de quebra é assumido como sendo equivalente ao tempo de deslocamento do centro de massa de duas gotas por quebra binária em um campo de escoamento turbulento, assim:

$$\left(\frac{1}{\text{Tempo de quebra}} \right) \approx \frac{\varepsilon^{1/3}}{d^{2/3}} \quad (3.33)$$

Reorganizando as equações acima e assumindo a velocidade turbulenta $\overline{u^2}(d)$ na faixa inercial de turbulência, a taxa de quebra $b(v)$ é dada por:

$$b(v) = C_1 d^{-2/3} \varepsilon^{1/3} \exp\left(-\frac{C_2 \sigma}{\rho_d \varepsilon^{2/3} d^{5/3}}\right) \quad (3.34)$$

Coulaloglou e Tavlarides (1977) reformularam a expressão original para contabilizar a atenuação das partículas nas intensidades turbulentas locais em altas frações de fase dispersa. Reescrevendo as constantes de quebra C_1 e C_2 como C_b e C_ε , respectivamente, a expressão toma a forma:

$$b(v) = C_b \frac{d^{-2/3} \varepsilon^{1/3}}{1 + \phi} \exp\left(-\frac{C_\varepsilon \sigma (1 + \phi)^2}{\rho_d \varepsilon^{2/3} d^{5/3}}\right) \quad (3.35)$$

3.4.2 Modelagem da quebra por Mitre

Mitre et al. (2014) desenvolveram modelos de quebra e coalescência de gotículas para um sistema de emulsão água em óleo sem a presença de surfactantes, eles otimizaram as constantes do modelo para resultados experimentais da quebra em um elemento que simula uma válvula de mistura que compõe um sistema de dessalinização, com geometria similar à de uma válvula globo. Os parâmetros dos modelos propostos foram obtidos com a implementação da equação de balanço populacional unidimensional integrada ao longo das linhas de corrente. Os modelos são escritos em termos do diâmetro da gota, e nesse caso, a implementação será feita pelo volume e sua relação é dada pela aproximação a uma gota esférica:

$$d = \left(\frac{6v}{\pi}\right)^{1/3} \quad (3.36)$$

A modelagem da frequência de quebra, $b(v)$, é realizada a partir da composição dos modelos de [Martínez-Bazán, Montanes e Lasheras \(1999\)](#) para escala inercial e de [Cristini et al. \(2003\)](#) para gotas sub-Kolmogorov em turbulência isotrópica. O primeiro foi desenvolvido analisando experimentalmente bolhas de ar injetadas em um escoamento turbulento totalmente desenvolvido, por outro lado, o segundo foi desenvolvido a partir do estudo via simulação numérica da deformação e a ruptura de gotas em um escoamento turbulento isotrópico. O modelo de [Cristini et al. \(2003\)](#) é dado por:

$$b(d) = C_b \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu_c}} Ca^3 \quad (3.37)$$

válido para $Ca > Ca_{crit}$, onde $Ca_{crit} = 1/Re$ e C_b é obtido por simulação DNS como sendo $0,148 \pm 0,015$. C_b é a constante de quebra ajustada para diferentes condições experimentais e Ca é o número de capilaridade, definido para uma turbulência isotrópica como sendo:

$$Ca = \frac{\mu_c \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu_c}} d}{2\sigma} \quad (3.38)$$

Já o modelo original de [Martínez-Bazán, Montanes e Lasheras \(1999\)](#) é dado por:

$$b(d) = C_b \frac{\sqrt{\beta (\varepsilon d)^{2/3} - \frac{2We_c \sigma}{\rho_c d}}}{d}, \quad d > d_{c,mb} \quad (3.39)$$

para diâmetro, d , maior que o diâmetro crítico de Martínez-Bazán $d_{c,mb}$, por outro lado, se menor, $b(d) = 0$. O valor de $We_c = 6$ é calculado por [Martínez-Bazán, Montanes e Lasheras \(1999\)](#), qualquer diferença quanto ao valor mais adequado de We_c pode ser compensado pela constante ajustada de C_b . O número de Weber nesse modelo é definido como sendo:

$$We = \frac{\rho_c \beta (\varepsilon d)^{2/3} d}{2\sigma} \quad (3.40)$$

onde $\beta = 8,2$. O diâmetro crítico é definido como sendo:

$$d_{c,mb} = \left(\frac{2We_c \sigma}{\rho_c \beta} \right)^{3/5} \varepsilon^{-2/5} \quad (3.41)$$

[Mitre et al. \(2014\)](#) reescreveram o modelo de [Cristini et al. \(2003\)](#) para toda a faixa de diâmetros de gotas como:

$$b(d) = \begin{cases} \frac{C_b}{d} \sqrt{\beta (\varepsilon d)^{2/3} - \frac{2We_c \sigma}{\rho_c d}}, & \text{se } d > d_l \\ C_b \frac{63,927}{We_c^{11/5}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu_c}} Ca^{2,2} \left(\frac{d}{2\lambda_k} \right)^{4/5}, & \text{se } d < d_l \text{ e } Ca > Ca_{crit} \\ 0, & Ca < Ca_{crit} \end{cases} \quad (3.42)$$

sendo o diâmetro d_l , o diâmetro de transição contínua entre os modelos, obtido como sendo:

$$d_l = \left(\frac{3}{2} \right)^{6/5} d_{c,mb} \quad (3.43)$$

Mitre et al. (2014) propõe um modelo simplificado para o regime turbulento viscoso, onde as gotas são menores do que a escala de comprimento de Kolmogorov:

$$b(d) = \begin{cases} C_b \frac{63,927}{We_c^{11/5}} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu_c}} Ca^{2,2} \left(\frac{d}{2\lambda_k}\right)^{4/5}, & \text{se } Ca > Ca_{crit}; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.44)$$

onde λ_k é o comprimento de Kolmogorov, ε é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta [m^2/s^3], e ν_c a viscosidade cinemática da fase contínua.

Mitre et al. (2014) modelam o número de capilaridade crítico supondo que a probabilidade de ruptura da menor gota depende do tempo de residência no volume de dissipação da válvula, t_{res} , e da interação com vórtices turbulentos de maior energia. Essa dependência é expressa em termos do número de Reynolds máximo, Re_{max} , definido a partir da máxima velocidade do escoamento e do número de Stokes utilizando a escala de tempo de Kolmogorov, St_k :

$$Ca_{crit} = C_{ca} St_k Re_{max}^{-C_{Re}} \quad (3.45)$$

onde o número de Stokes, $St_k = t_{res}/\sqrt{\nu_c/\varepsilon}$, relaciona o tempo de residência com a escala de tempo turbulenta. A constante de capilaridade, obtida pelo autor utilizando o diâmetro mínimo de gota atingível à jusante da válvula é de $C_{ca} = 1.65 \times 10^{-4}$ e a constante $C_{Re} = 3/20$.

3.5 Modelagem da distribuição de tamanho de gotas filhas

A probabilidade do tamanho das gotas que são formadas durante a quebra, $P(v_i|v_j)$, necessita ser conhecida. Esse tamanho é determinado a partir do perfil da distribuição das gotas filhas geradas de uma quebra, e pode ser aproximado com a aplicação de modelos estatísticos, fenomenológicos ou empíricos (COULALOGLOU; TAVLARIDES, 1977; ZHOU et al., 2019; TSOURIS; TAVLARIDES, 1994; MAAß et al., 2011).

3.5.1 Modelos estatísticos

Modelos estatísticos são aplicados com a premissa de que os tamanhos de gotas filhas são aleatórios e assumem uma probabilidade definida por algum modelo estatístico. Seja normal, beta, delta ou uniforme.

No caso de partículas filhas geradas terem um perfil de distribuição normal, Valentas, Bilous e Amundson (1966) definiu uma normal truncada como sendo:

$$P(v_i, v_j) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(v_j - \bar{v})^2}{2\sigma^2}\right] \quad (3.46)$$

com uma distribuição com valor médio $\mu = v_i/\zeta$, variância σ^2 , onde $\sigma = \bar{v}/c$. c é a tolerância. ζ é a quantidade de gotas geradas.

Coulaloglou e Tavlarides (1977) modelam os tamanhos das gotas formadas após a quebra assumindo uma representação por uma função de densidade normal advinda da equação genérica 3.46. Supõe-se que duas gotas desiguais se formam, $\varsigma = 2$, com tolerância $c = 3$ escolhida de modo que mais de 99,6% das gotas formadas fiquem dentro da faixa de volume de 0 a v_i . Resultando em:

$$P(v, v') = \frac{2,4}{v'} \exp \left[\frac{-4,5(2v - v')^2}{(v')^2} \right] \quad (3.47)$$

Já Mitre et al. (2014) adota uma distribuição de gotas filhas uniforme não binária, com ς gotas geradas na quebra, que é um parâmetro do modelo a ser ajustado. Assim, ς gotas de volume v são geradas a partir da quebra de uma gota v'

$$P(v, v') = \delta \left(v - \frac{v'}{\varsigma} \right) \quad (3.48)$$

O termo δ se refere à função delta de Dirac e o modelo satisfaz a conservação de massa, definidas nas equações 3.9, 3.10 e 3.11, se referindo à normalização e conservação de massa.

Experimentos de escoamento laminar mostram que múltiplas gotas filhas podem ser formadas a partir de uma única gota mãe (STONE, 1994). Para esse propósito, Raikar et al. (2010) utiliza uma distribuição uniforme com ς gotas geradas na quebra a partir do produto da lei de potência da distribuição generalizada de Hill–Ng (HILL; NG, 1996):

$$P(v, v') = \varsigma(\varsigma - 1) \left(1 - \frac{v}{v'} \right)^{\varsigma-2} \quad (3.49)$$

3.6 Modelagem da coalescência

O modelo proposto por Chesters (1991) para a frequência de coalescência é muito explorado por diferentes autores na literatura, o autor propõe a correlação:

$$a(d, d') = \theta(d, d') \lambda(d, d') \quad (3.50)$$

onde $\theta(d, d')$ e $\lambda(d, d')$ é a frequência de colisão e a eficiência de coalescência, respectivamente.

3.6.1 Modelagem da coalescência por Coulaloglou e Tavlarides

Coulaloglou e Tavlarides (1977) modelaram a coalescência de gotículas considerando o produto dos mecanismos descritos na equação 3.50. A modelagem da frequência de colisão assume turbulência isotrópica local análoga à colisão entre moléculas na teoria cinética de gases, de modo que:

$$\theta(v, v') = \left(\frac{9\pi}{2} \right)^{1/3} \left(v^{1/3} + v'^{1/3} \right)^2 \left[\overline{u^2}(v) + \overline{u^2}(v') \right]^{1/2} \quad (3.51)$$

onde $\overline{u^2}(v)$ e $\overline{u^2}(v')$ são as média quadráticas das flutuações de velocidades das gotas de volume v e v' . Coualoglou e Tavlarides (1977) define $\overline{u^2}$ apenas para a sub-faixa inercial de turbulência:

$$\overline{u^2}(v) = C\varepsilon^{2/3}v^{2/9} \quad (3.52)$$

Já para a eficiência de coalescência de colisão binária, $\lambda(v, v')$, a hipótese adotada leva em consideração o tempo de contato de duas gotas se chocando, τ , em relação ao tempo de coalescência, t . O autor utiliza o modelo de Ross and Curl que considera τ uma variável aleatória normalmente distribuída, além disso, simplifica o modelo assumindo um tempo de drenagem não distribuído mas com tempo de contato aleatório, de modo que a seguinte expressão é adotada:

$$\lambda(v, v') = \exp(-\bar{t}/\bar{\tau}) \quad (3.53)$$

onde a barra representa a média. Coualoglou e Tavlarides (1977) estimam o tempo de coalescência, tempo para a drenagem do filme interfacial, em um modelo sem considerar forças de Van der Waals ou de dupla camada elétrica e estimam o tempo de contato, τ , considerando o período característico da flutuação de velocidade em um vórtice de tamanho $d + d'$, de modo que:

$$\bar{\tau} = \frac{(d + d')^{2/3}}{\varepsilon^{1/3}} \quad (3.54)$$

O tempo de coalescência ou drenagem, modelado considerando gotículas deformáveis com interfaces imóveis, é obtido pela suposição da força que comprime as gotas ser considerada proporcional à diferença quadrática média da velocidade em ambas as extremidades do vórtice, desse modo:

$$\bar{t} = \frac{\mu_c \rho_c \varepsilon^{2/3} (d + d')^{2/3}}{\sigma^2} \left(\frac{1}{h_f^2} - \frac{1}{h_i^2} \right) \left(\frac{dd'}{d + v} \right)^4 \quad (3.55)$$

onde h_i e h_f são as espessuras de filme interfacial no início do contato e na ruptura do filme, respectivamente. A diferença é assumida como constante e é atribuída a uma constante C_e . Substituindo as equações 3.54 e 3.55 na equação 3.53, e adotando o volume da gota pela transformação $v = d^3$, a eficiência de coalescência é dada por:

$$\lambda(v, v') = \exp \left(\frac{-C_e \mu \rho \varepsilon}{\sigma^2 (1 + \phi)^3} v_{ratio}^4 \right) \quad (3.56)$$

que é associado ao raio equivalente das gotas, r e r' , se chocando, aqui, escrito em termos da razão de volume v_{ratio} , dada por:

$$v_{ratio} = \frac{v^{1/3} v'^{1/3}}{v^{1/3} + v'^{1/3}} = \left(\frac{4\pi}{3} \right) \frac{rr'}{r + r'} \quad (3.57)$$

Assim, a frequência de quebra no volume da gota é obtida substituindo as equações 3.56 e 3.51 na equação 3.50. Considerando um amortecimento da coalescência dado pela

fração de fase dispersa, $(1 + \phi)$, o modelo coalescência de [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#) é escrito como:

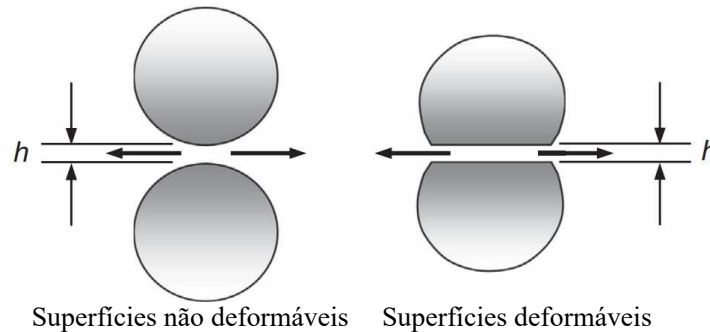
$$a(v, v') = C_c(v^{1/3} + v'^{1/3})^2(v^{2/9} + v'^{2/9})^{1/2} \frac{\varepsilon^{1/3}}{(1 + \phi)} \exp\left(-\frac{C_e \mu_c \rho_c \varepsilon}{\sigma^2(1 + \phi)^3} v_{ratio}^4\right) \quad (3.58)$$

O modelo possui duas constantes de ajuste, C_c e C_e .

3.6.2 Modelagem da coalescência por Mitre

Tratando da modelagem da coalescência que ocorre a jusante de válvulas, [Mitre et al. \(2014\)](#) propõe a aplicação de dois modelos com base no trabalho de [Chesters \(1991\)](#) (Eq. 3.50), que se diferenciam em duas abordagens para a caracterização do filme interfacial das gotas, o que determina a eficiência de coalescência, $\lambda(d, d')$. A Figura 3 ilustra as hipóteses do comportamento da superfície das gotas e a Figura 4 o comportamento da interface no momento da drenagem do filme interfacial. Dependendo da hipótese do comportamento da superfície e da drenagem, um dos quatro modelos alternativos para a eficiência de coalescência pode ser aplicado: interface rígida (imóvel), deformável interface parcialmente móvel, deformável interface imóvel ou deformável interface móvel.

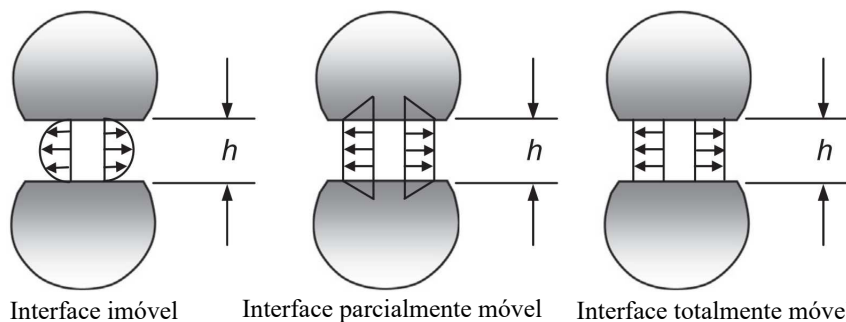
Figura 3 – Representação esquemática de superfícies não deformáveis e superfícies deformáveis de partículas fluidas.



Superfícies não deformáveis Superfícies deformáveis

Fonte: Adaptado de [Yeoh, Cheung e Tu \(2014\)](#).

Figura 4 – Representação esquemática de interfaces de contato imóveis, parcialmente móveis e totalmente móveis de partículas fluidas.



Interface imóvel Interface parcialmente móvel Interface totalmente móvel

Fonte: Adaptado de [Yeoh, Cheung e Tu \(2014\)](#).

Dentre as quatro abordagens avaliadas por [Mitre et al. \(2014\)](#), apenas duas mostraram bons resultados para as gotículas de água em óleo na escala sub-Kolmogorov:

- Superfície não deformável e a interface imóvel;
- Superfície deformável interface parcialmente móvel.

As suposições de superfície deformável interface móvel e superfície deformável interface imóvel foram dadas como insatisfatórias para os casos analisados pelo autor.

De acordo com [Chesters \(1991\)](#) a frequência de colisão pode ser modelada como sendo um produto entre a área transversal formada pelas gotas, S , e a velocidade relativa entre as gotas, u_r , de modo que:

$$\theta(d, d') = C_c S u_r = C_c \frac{\pi}{4} (d + d')^2 \frac{u_g + u_{g'}}{2} \quad (3.59)$$

C_c é um parâmetro ajustável do modelo e u_g é a velocidade de uma gota g . [Chesters \(1991\)](#) propõe um modelo para a velocidade característica de forma que:

$$u_g = \begin{cases} d \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}}, & \text{se } d < \lambda_k; \\ (\varepsilon d)^{1/3}, & \text{se } d \geq \lambda_k. \end{cases} \quad (3.60)$$

Assim, em uma distribuição de gotas na escala sub-Kolmogorov, $d < \lambda_k$, a frequência de colisão das gotas se torna:

$$\theta = C_c \frac{\pi}{8} (d + d')^3 \sqrt{\varepsilon/\nu_c} \quad (3.61)$$

A eficiência de coalescência para interfaces rígidas é dada por:

$$\lambda = \exp \left[-C_e \frac{1}{4} \ln \left(\frac{h_i}{h_f} \right) \right] \quad (3.62)$$

onde h_i e h_f é espessura inicial e crítica (final) do filme interfacial, respectivamente, tamanhos esses característicos do processo de drenagem do filme. O tamanho crítico pode ser modelado como sendo:

$$h_f = \left(\frac{A d_{eq}}{16\pi\sigma} \right)^{1/3} \quad (3.63)$$

onde d_{eq} é o diâmetro equivalente no contato entre duas gotas, dado por:

$$d_{eq} = \frac{2}{d^{-1} + d'^{-1}} \quad (3.64)$$

O parâmetro $A = 6 \times 10^{-21}$ é a constante de Hamaker (10^{-19} a 10^{-20} J), é adotado por [Mitre et al. \(2014\)](#) por estar numa faixa central da interação água-água em uma fase contínua de hidrocarbonetos, o erro nesse parâmetro foi compensado na estimativa da

constante de eficiência de coalescência C_e . Como a espessura inicial da gota, h_i é de difícil obtenção, é considerado uma incógnita e assim a eficiência de coalescência foi tomada como constante e atribuída à C_e . É adotado $\lambda = 1$ para realizar o cálculo. Esse modelo de interface rígida, em conjunto com a frequência de coalescência dada na equação 3.61, será referido como CCE (Constant Coalescence Efficiency).

Na segunda abordagem, empregando o modelo deformável interface parcialmente móvel, a eficiência de coalescência resulta em (CHESTERS, 1991):

$$\lambda = \exp\left(-C_e \frac{\sqrt{3}}{8} \frac{\mu_d}{\mu_c} Ca_{eq}^{3/2} \frac{d_{eq}}{h_f}\right) \quad (3.65)$$

onde o número de capilaridade equivalente, Ca_{eq} é definido da mesma forma que a equação 3.38, porém, utilizando o diâmetro equivalente d_{eq} :

$$Ca_{eq} = \frac{\mu_c \sqrt{\varepsilon/\nu} d_{eq}}{2\sigma} \quad (3.66)$$

Esse modelo dado pelo conjunto principal de equações 3.61, 3.63, 3.65 e 3.66, será referido como CEM (Coalescence Efficiency Model).

3.7 Quebra de gotas em restrições utilizando balanço populacional

Como relatado nos trabalhos descritos na Seção 2, agora volta-se à análise da literatura com um enfoque mais aprofundado na abordagem de balanço populacional. Diferentemente dos modelos mecanicistas para um diâmetro máximo estável de gota, resolver a distribuição ou algum momento de ordem superior, como diâmetro médio ou fração volumétrica no espaço e no tempo, requer a utilização de técnicas de mecânica dos fluidos computacional (CFD) com equações adicionais de transporte para a densidade numérica de partículas ou outros parâmetros relacionados (Balanço Populacional - BP). Para investigar o transporte de gotículas de fluido ou a mudança transiente dos padrões de escoamento, os mecanismos e a dinâmica de coalescência e quebra devem ser cuidadosamente estudados (LIAO; LUCAS, 2009). Por isso, a modelagem das funções núcleo de quebra e coalescência são fundamentais na aplicação do BP. Uma variedade de modelos foi proposta para a frequência de quebra, função de distribuição de tamanho de gotas filhas (daughter drop size distribution - DDS), frequência de colisão e eficiência de coalescência no problema de coalescência, respectivamente.

Sistemas de produção de emulsão como os homogeneizadores de alta pressão (HPH) possuem canais estreitos e promovem um alto cisalhamento, sendo comumente utilizados para formulação de emulsão. Raïkar et al. (2009) investigaram emulsões O/A com surfactante não iônico Pluronic F-68 em um HPH, considerando apenas quebra e assumindo coalescência desprezível. Os autores adotaram quebra binária e utilizaram duas funções de

quebra mecanicísticas: uma baseada em colisões de gotas com vórtices turbulentos e outra em cisalhamento turbulento. O modelo é eficaz em diferentes condições de formulação e operação, mas apresenta limitações ao prever mudanças de pressão no homogeneizador, possivelmente pela correlação empírica entre a pressão e a taxa de dissipação de energia não ser adequada.

Posteriormente, considerando o mesmo sistema disperso e modelagem da quebra, Raikar et al. (2010) consideraram uma DDS uniformemente distribuída (Função Beta com $\alpha = 1$) com 20 gotas geradas na quebra, o que mostrou previsões superiores em comparação com modelos de quebra binária. Os autores destacam a necessidade de considerar a recoalescência (gotas quebradas coalescem por insuficiência de cobertura interfacial de surfactante).

Estudando uma válvula de mistura para dessalgação de óleo, Mitre et al. (2014) modelaram a equação de balanço populacional com formulação Lagrangeana. Eles propuseram um novo modelo de quebra para dissipação de gotas na faixa turbulenta viscosa de 0,1–100 μm e estimaram os parâmetros do modelo utilizando o método de regressão ortogonal. Usaram um modelo de quebra de gotas na subescala inercial ($d > \lambda_k$) modificado para levar em conta tamanhos de gotas semelhantes à escala de comprimento de Kolmogorov, uma vez que, a maioria das gotas geradas eram menores do que esta magnitude.

Integrando CFD-PB para avaliar um HPH com sistema disperso O/A e 1% m/m de Pluronic F68, Dubbelboer et al. (2014) modelaram a quebra e recoalescência de gotas subdividindo o domínio em compartimentos para assegurar a quase homogeneidade da taxa de dissipação de energia. Esse método melhorou os resultados em 65% utilizando funções de Coualoglou e Tavlarides (1977) para frequência de quebra e recoalescência e um modelo de DDS uniformemente distribuído com 20 gotas geradas após a quebra, assim como Raikar et al. (2010). O autor sugere que o modelo de compartimentos pode ser uma alternativa eficaz ao acoplamento direto de CFD com balanços populacionais e destaca a necessidade de validação em diferentes condições hidrodinâmicas.

Nessa mesma linha de integração CFD-PB, Becker et al. (2014) propuseram uma estrutura de acoplamento para quebra em regime turbulento, com modelo fenomenológico para uma ampla gama de aplicações e geometrias, que pode ser implementada de forma fácil e econômica. Os autores aplicaram a estrutura, juntamente com um modelo de taxa de quebra proposto para altas viscosidades de fase dispersa em um sistema O/A em um HPH com diferentes quedas de pressão e viscosidade de fase dispersa.

Variações de modelos mostraram ser capazes de contabilizar a adsorção de emulsificantes. Håkansson et al. (2013) modelaram as três principais interações coloidais durante a emulsificação (quebra, recoalescência de gotículas e adsorção de macro-emulsificante molecular) tratando a adsorção como um processo baseado em colisão, e assumiu que a recoalescência é proporcional à fração da superfície da gota que não é coberto pelo emulsificante. Eles posteriormente estenderam este trabalho para incluir a redistribuição do emulsificante com

mudanças na DTG usando um modelo PBM bivariado. No entanto, em contraste com os emulsificantes Pickering¹, que são frequentemente polidispersos (tamanhos variados), este modelo é específico para um emulsificante monodisperso.

Maindarkar, Bongers e Henson (2013) implementaram efeitos do surfactante com um balanço de massa e incluíram efeitos da concentração livre de surfactante na tensão interfacial e da cobertura superficial de gotículas na probabilidade de coalescência. A DTG predita, considerando um sistema O/A, apresenta concordância com os resultados experimentais para diferentes tipos e concentrações de surfactantes e frações de óleo.

Posteriormente, Maindarkar, Hoogland e Henson (2015) desenvolveram um novo modelo equação de balanço populacional (PBE - do inglês *Population Balance Equation*) para previsões DTG mais precisas tanto no “regime limitado de surfactante” quanto no “regime rico em surfactante” com um único conjunto de parâmetros ajustáveis. Para isso, os autores reformularam duas funções de quebra para se comportarem adequadamente em relação ao tamanho da gota. Substituíram a viscosidade de fase contínua constante por uma viscosidade de emulsão calculada. Reformularam as funções de quebra de gota e coalescência para se comportarem adequadamente em relação ao teor de óleo e substituíram o modelo de balanço de adsorção de surfactante por um modelo dinâmico independente do tamanho.

Guan, Yang e Nigam (2020) abordaram emulsificação em homogeneizadores de alta pressão (HPHs). Os autores utilizaram um modelo PB zero-dimensional que considera a taxa de dissipação turbulenta heterogênea, obtido com simulação CFD em diferentes concentrações volumétricas. Este modelo é sensível aos parâmetros do submodelo de quebra. Os autores avaliaram o efeito da adsorção de surfactantes na emulsão, aplicaram submodelos de quebra e coalescência ajustados pela distribuição de fração de volume de dissipação de energia ao invés da taxa média de dissipação turbulenta ou dissipação total de energia. As predições se mostraram muito sensíveis aos parâmetros do modelo de quebra, necessitando de investigações futuras para aperfeiçoamento.

3.8 Modelagem da quebra no regime viscoso

Mecanismos de quebra de gotículas diferentes dos mencionados acima também podem estar presentes, predominantemente quando as gotas são menores que o comprimento de Kolmogorov. O alto cisalhamento e a aceleração gerados na restrição da válvula podem dominar o tamanho máximo da gotícula e precisam ser considerados. Podem ocorrer situações em que efeitos turbulentos, de cisalhamento e extensionais atuam concomitantemente, avaliar qual é o mecanismo de quebra dominante não é trivial, pois podem levar a tamanhos máximos de gotículas semelhantes, dependendo das características locais (PAOLINELLI;

¹ Líquidos imiscíveis estabilizados por partículas sólidas, que podem ser de origem orgânica ou inorgânica.

RASHEDI; YAO, 2018). Fundamental estudo sobre a quebra de gotas em escoamento laminar foi realizado por Taylor (1934) e Tomotika e Taylor (1936). Em um escoamento de Couette, a deformação da gota a transforma em elipsoide, sendo determinada pelo Weber generalizado:

$$We = \frac{\mu_c G d f(\lambda)}{\sigma} \quad (3.67)$$

onde G é o gradiente de velocidade máximo na fase contínua. Foi observado que a quebra é dependente da razão de viscosidade das fases, sendo que uma gota com razão $\mu_d/\mu_c > 20$ não quebra em um escoamento de Couette. Porém, em outros tipos de escoamento, a quebra pode ocorrer. Assim $f(\lambda)$ é uma função que conta para a razão entre as viscosidades dinâmicas, $\lambda = \mu_d/\mu_c$. Em dispersões água em óleo, a função $f(\lambda)$ pode ser tomada como sendo igual a 1, tendo em vista que $1 < f(\lambda) < 1,1$ quando $0 < \lambda < 1$, respectivamente. Valores críticos de número capilar (Ca) para quebra em cisalhamento simples foram obtidos empiricamente como uma função da razão de viscosidade λ (GRACE†, 1982).

A quebra de gotículas em cisalhamento simples é caracterizada por meio do número capilar crítico definido por GRACE† (1982) como:

$$Ca_{crit} = \frac{\mu_c G d_{max} f(\lambda)}{2\sigma} \quad (3.68)$$

onde d_{max} é o máximo diâmetro que pode resistir à quebra dada a taxa de cisalhamento G . A quebra de gotículas em escoamento extensional também pode ser avaliada por meio de um número capilar crítico:

$$Ca_{crit} = \frac{\mu_c \dot{\epsilon} d_{max}}{2\sigma} \quad (3.69)$$

onde $\dot{\epsilon}$ é a taxa extensional ou gradiente de velocidade extensional da fase contínua. O número capilar crítico para quebra em escoamento hiperbólico extensional pode ser várias vezes menor do que para cisalhamento simples, dependendo da razão de viscosidade λ . GRACE† (1982) apresenta os resultados obtidos da capilaridade crítica para diferentes razões de viscosidade da composição da emulsão e para as duas formas de cisalhamento básicas (simples e extensional).

Cristini et al. (2003) e Vankova et al. (2007) descreveram um modelo de quebra em escoamento turbulento viscoso (regime Sub-Kolmogorov). No estudo de Vankova et al. (2007), testes experimentais foram feitos para validar o modelo com fase contínua (água) e um pouco de glicerina controlando a viscosidade. A fase dispersa foi usada um óleo mineral (95 mPa.s). Vankova et al. (2007) modificaram o tempo de quebra no modelo de Coualoglou e Tavlarides (1977), introduzindo uma dependência do número de Reynolds de partículas $Re_p = \rho_p v_p d / \mu_p$, para contabilizar o efeito da viscosidade da gota no tempo de quebra.

3.9 Experimentos de gota individual

Dispersões densas de gotículas, ou seja, muitas gotas consideradas simultaneamente sem levar em conta a identidade individual de cada uma são comumente avaliadas na literatura. Esses estudos possuem o objetivo de observar a fase dispersa em diferentes espaços e intervalos de tempo como uma densidade de distribuição, sendo que, a partir de dados experimentais, é possível validar os resultados numéricos e ajustar modelos de quebra e coalescência, como em [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#).

Por outro lado, alguns experimentos consideram apenas uma ou algum conjunto controlado de gotas, como o trabalho de [Herø et al. \(2021\)](#), onde é possível validar modelos para eventos de quebra e coalescência individualmente. Esses estudos são importantes para a formulação dos modelos utilizados na equação de balanço populacional, dada a necessidade da identificação sobre quando e com que frequência gotas de determinado tamanho se quebram sujeitas a um determinado campo de tensão, quantas gotículas são geradas após a quebra e quais os tamanhos e probabilidades para o evento.

Ainda nesse sentido, mas fixando apenas a taxa de dissipação ε , [Andersson e Andersson \(2006\)](#) observaram a quebra de gotas de 1 mm em um misturador estático com água como fase contínua. Os resultados indicam que o tempo de quebra de gotas de dodecano e octano são inversamente proporcionais à taxa de dissipação ε , mas não definiram nenhum modelo de quebra específico.

[Maaß e Kraume \(2012\)](#) mostraram que o tempo de quebra de uma gota foi consistente com o modelo proposto por [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#) escoando em um canal de uma única pá de impelidor tipo Rushton, mimetizando um tanque reator agitado, em diferentes valores de ε e tamanhos de gotas e sua influência no tempo e probabilidade de quebra. Em seus experimentos, as gotas variaram o tamanho na ordem de 0,54 a 3,1 mm, sendo água a fase contínua e petróleo e tolueno como fases dispersas.

Complementando, gotas individuais de petróleo, tolueno n-dodecano e 1-octanol, foram avaliadas em um tanque agitado por [Solsvik e Jakobsen \(2015\)](#). Água destilada como fase contínua e gotas injetadas entre 0.6 e 4 mm, os autores avaliaram o tempo de quebra dependentes do tamanho da gota mãe e aplicaram a definição de quebra em cascata, quando o evento cessa apenas quando gotas filhas estáveis são formadas. Foi observado que eventos de quebra múltipla e não iguais ocorreram com mais frequência do que a quebra binária porém a probabilidade de quebra binária aumentou com a diminuição do tamanho da gota mãe.

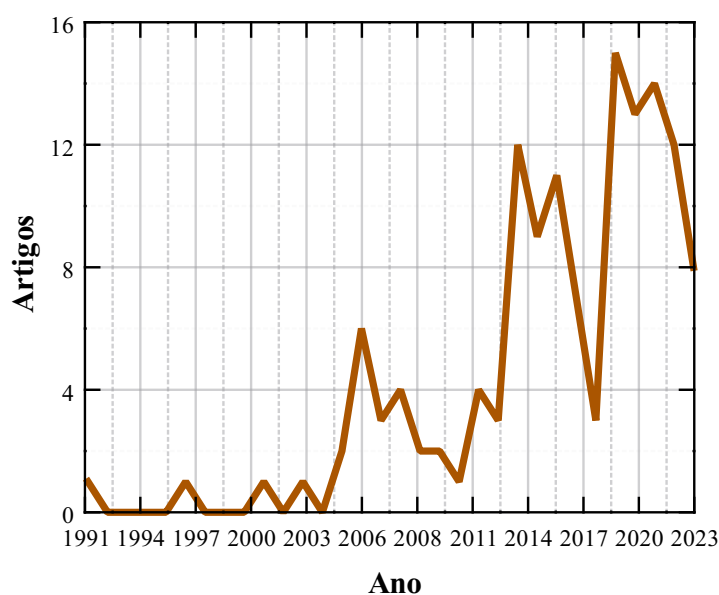
[Herø et al. \(2021\)](#) investigaram experimentalmente a quebra de gotas individuais de octanol em água em um canal com diferentes níveis de turbulência, usando imagens de alta velocidade e sem a presença de surfactantes. Avaliaram o tempo de quebra, a probabilidade de quebra, o número médio de gotas filhas e sua distribuição de tamanho.

Os autores comparam dois tipos de definições de evento de quebra: a definição de quebra inicial, que considera o evento terminado quando a gota mãe se fragmenta pela primeira vez, e a definição de quebra em cascata. Os autores mostraram que o nível de turbulência afeta as funções de quebra, e que os modelos existentes na literatura não são universais e precisam de mais dados experimentais para serem validados.

3.10 Estudo bibliométrico da aplicação de balanço populacional em sistemas água e óleo

Uma pesquisa bibliográfica foi realizada no ano de 2023, a partir da seguinte intersecção do conjunto de palavras: “droplet”, “size”, “water”, “oil”, “break” e “population balance”. Os dados mostram o crescimento da produção científica anual em relação ao tema abordado, Figura 5.

Figura 5 – Produção científica anual.

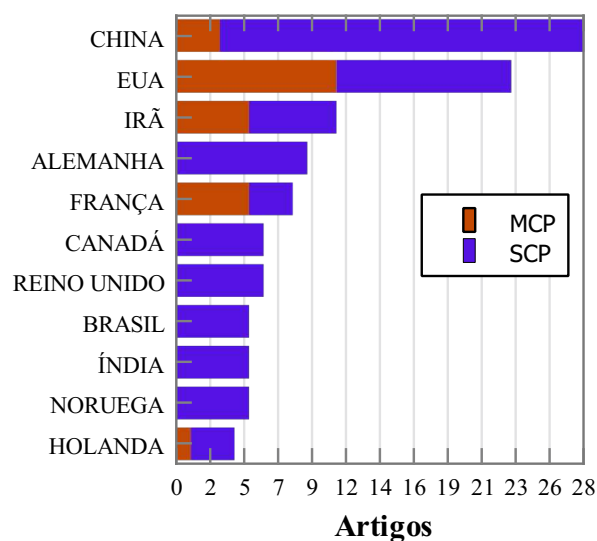


Fonte: Autor.

A Figura 6 mostra os 11 países mais destacados em publicações revisadas por pares. A interação entre os países é destacada em vermelho, e, atualmente, o Brasil apresenta contribuições significativas na área, com potencial para aprimorar a cooperação acadêmica internacional. Um total de 75 artigos foram pré-selecionados que mostram aderência à esse tema. Do total, pouco mais de 25% dos artigos foram publicados no jornal acadêmico *Chemical Engineering Science*.

Coalescência (*coalescence*) foi o tópico mais abordado, conforme ilustrado na nuvem de palavras-chave obtida da pesquisa bibliográfica, Figura 7. Isso se deve às inúmeras

Figura 6 – Países dos autores correspondentes. MCP: publicações de múltiplos países, SCP: publicações de único país.



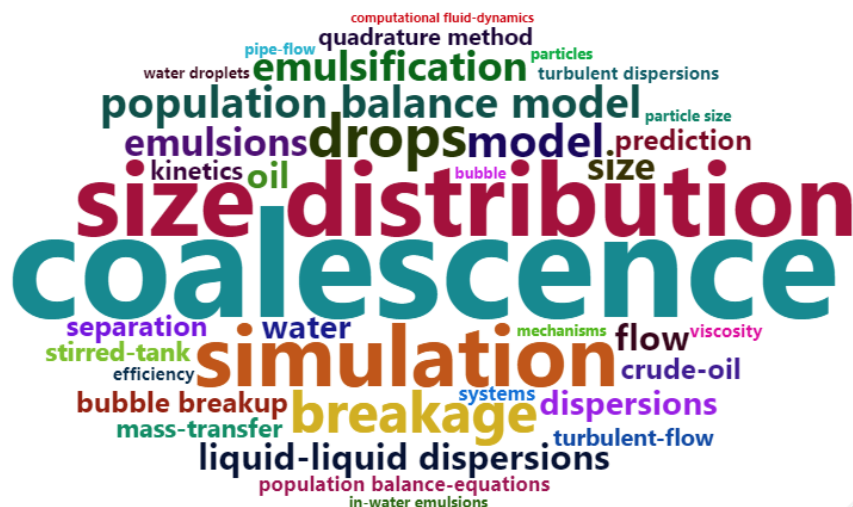
Fonte: Autor.

contribuições para aplicar e desenvolver melhores modelos de predição do processo de coalescência que ocorrem, principalmente, nos separadores petroquímicos. Por outro lado, a quebra (*breakage*) é menos estudada utilizando balanço populacional, sendo muito ligada à produção de emulsão, seja fluidos modelo de petróleo, alimentos ou produtos farmacêuticos. Grande parte do processo de quebra promovido por bombas, válvulas e tanques misturadores é avaliado com modelos mecanicistas ou empíricos que correlacionam a dissipação de energia com tamanho médio ou máximo das gotas.

Os modelos de previsão de diâmetro médio ou máximo das gotas são aplicáveis a casos muito específicos para os quais eles foram desenvolvidos. Porém, os fenômenos físicos observados são úteis para a construção de modelos estatísticos e mecanicistas mais robustos.

Entre os trabalhos mais recentes encontrados na literatura, alguns serão mencionados devido à contribuição com a análise dos resultados experimentais deste trabalho. Se tratando de um regime de quebra inercial, [Castellano et al. \(2018\)](#) utilizou as funções de Coualoglou e Tavlarides para estimar as frequências de quebra e coalescência das gotas. Os parâmetros do modelo foram ajustados usando dados experimentais de uma emulsão de água em óleo em um reator agitado mecanicamente. Os parâmetros otimizados globalmente pelo autor forneceram taxa de quebra menor, porém, uma taxa de coalescência muito maior, quando comparado com as constantes originais de Coualoglou e Tavlarides [1977](#). Os autores propõe utilizar a função de densidade de probabilidade da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ε , obtida por CFD, para calcular termos fontes médio no volume, em vez de usar um valor médio ($\bar{\varepsilon}$).

Figura 7 – Nuvens de palavras mais frequentes presentes no texto dos trabalhos encontrados.



Fonte: Autor.

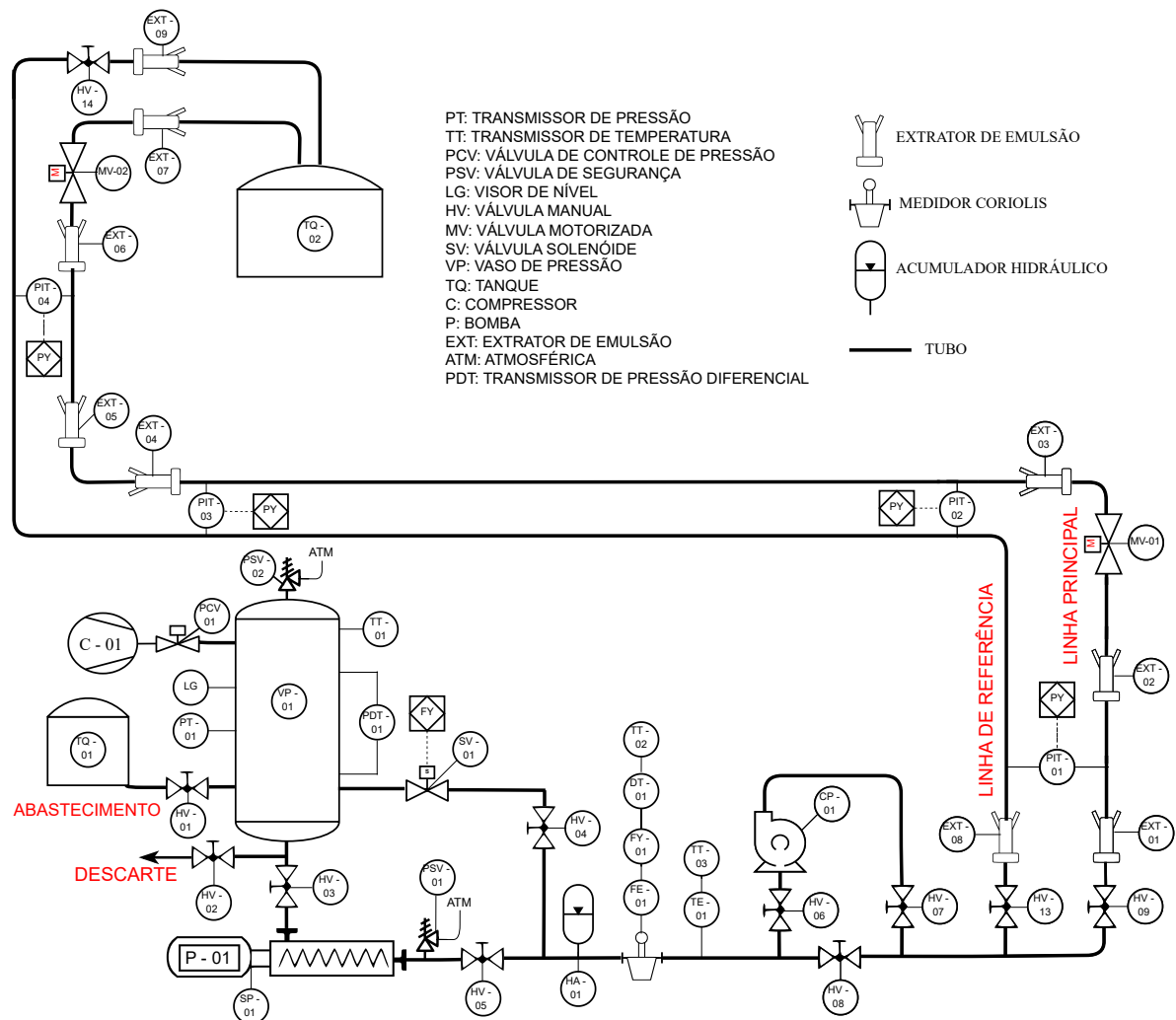
Hohl, Röhl e Kraume (2023) avaliaram um sistema em tanque agitado sem surfactante e mostra que a viscosidade da fase dispersa afeta significativamente a taxa de quebra e coalescência das gotas, bem como a forma da DTG. O estudo avalia o desempenho dos modelos proposto por Alopaeus (2022), considerando interfaces parcialmente móveis, e compara diferentes formas de distribuição de tamanho de gotas filhas na precisão da simulação. O modelo pode descrever bem o efeito da viscosidade da fase dispersa na DTG, mas precisa ser melhorado para considerar o efeito da fração da fase dispersa e da taxa de dissipação de energia. Dado os modelos de distribuição de gotas filhas avaliados, Gauss (COULALOGLOU; TAVLARIDES, 1977), Beta (MAAß et al., 2011), Bimodal (MAAß et al., 2011) e Zhou (ZHOU et al., 2019), o modelo de Tsouris (TSOURIS; TAVLARIDES, 1994) representou melhor os resultados experimentais.

Roehl et al. (2023) desenvolveram um modelo modificado de eficiência de coalescência baseado no modelo de drenagem de filme, que considera a energia de desorção necessária para desprender uma partícula da interface, representando uma barreira energética contra a coalescência. Modelos estabelecidos na literatura falharam em prever o processo de drenagem com influencia das partículas. Os autores validam o modelo modificado com dados experimentais de dispersões A/O agitadas.

4 Metodologia experimental

O circuito de escoamento de emulsões está localizado no Núcleo de Estudos em Escoamento e Medição de Óleo e Gás - NEMOG, na Universidade Federal do Espírito Santo (UFES). O diagrama de processo e instrumentação (P&ID) do circuito é mostrado na Figura 8. Um tanque de polietileno de 500 L (TQ-01) é utilizado para armazenamento, homogeneização e amostragem de emulsões. Ele enche um vaso de pressão de 750 L (VP-01) antes do início do experimento por gravidade, através de içamento feito com o auxílio de uma talha elétrica. Nesse procedimento, a DTG armazenada produzida não é significativamente alterada por cisalhamento, como foi avaliado entre os tanques.

Figura 8 – Diagrama esquemático do circuito de escoamento de emulsão.



Fonte: Autor.

O vaso de pressão VP-01 é utilizado tanto para armazenagem quanto para promover o escoamento durante o teste e por isso é equipado com sensores de pressão (PT-01, Warme WTP 4010), sensor de temperatura (TT-01, Zurich T.420.I.H) e fornecimento de ar comprimido, se necessário, de um compressor de parafuso de 30 CV (C-01, Chiaperini COPA 30 G2) controlado por meio de uma válvula globo (PCV-01, Samson 3241).

O escoamento pode ser promovido por dois métodos independentes. O primeiro é a bombeamento mecânico, usando a bomba helicoidal P-01 (modelo Helibombas 2HT-32), acionada por um motor elétrico de 4 CV acoplado a um inversor de frequência para acionamento em velocidade variável (modelo WEG CFW500). Nesse caso, as válvulas HV-03 e HV-05 são abertas e HV-(01, 02, 04) são mantidas fechadas. A tomada inferior do vaso está conectada com a aspiração da bomba de deslocamento positivo, o que garante que essa opere afogada. A jusante da bomba os tubos são feitos de aço inoxidável, com diâmetro interno de 20,95 mm (3/4" Schedule 40).

O segundo método é pressurizando o VP-01 com ar comprimido, que permanece meio cheio de emulsão, de modo que se abra as válvulas SV-01 e HV-4 mantendo HV-(01, 02, 03, 05) fechadas. Assim, a bomba P-01 é contornada e o escoamento tem sua saída lateral no vaso para a linha de teste. A válvula de controle de pressão PCV-01 controla a entrada de ar manter a vazão desejada em regime permanente. O esquema relatado, pode ser visualizado na Figura 9.

Sensores são utilizados ao longo do circuito para monitoramento e controle da planta, sendo assim, a vazão é medida pelo medidor de vazão Coriolis FT-01 (MicroMotion 2700). Um sensor de pressão PT-02 (Microsensor M20) mede a pressão na saída da bomba. Após o medidor de vazão Coriolis, a temperatura do fluido é medida pelo sensor TT-03 (Zurich T.420.I.H).

O circuito inclui também um acumulador hidráulico (HA-01, Ciltech) para atenuar as flutuações de pressão da bomba, que também é mantido operando para o escoamento induzido pelo tanque de pressão. Embora a bomba tenha características de proporcionar menor flutuação de pressão e, as flutuações de pressão do compressor sejam reduzidas pelo volume de ar dentro do vaso, ainda assim, ocorrem flutuações de pressão que o acumulador reduz significativamente. A Figura 10 esquematiza em detalhe a disposição dos componentes do vaso de pressão.

O equipamento CP-01 é uma bomba centrífuga que compõe a seção de teste, no entanto, não será utilizada para promover o escoamento, mas somente agitar o fluido a fim de representar os efeitos cisalhantes de uma bomba centrífuga submersa. Esse aparelho foi instalado em um desvio dedicado, permitindo avaliação de seus efeitos apenas quando desejado. A jusante do aparelho, há uma curva suave composta por mangote que se conecta a duas linhas de escoamento paralelas: uma é a linha principal, com os acidentes de linha, e a outra é a linha de referência, sem acidentes.

Figura 9 – Esquema de operação do vaso de pressão para realização do teste.



Fonte: Autor.

As duas linhas integram a seção de teste e tem seu início após o medidor de vazão Coriolis, no primeiro trecho vertical ascendente de tubulação (referência e principal). Essa seção representa um poço de produção vertical e tem 2,7 metros de comprimento. Na parte inferior, há um sensor de pressão manométrica (PIT-01, modelo Yokogawa EJA530E). Em seguida, uma seção inclinável ± 10 graus em relação à horizontal de 9,7 metros de comprimento representa uma flowline (KEMPIN *et al.*, 2022). A pressão manométrica é monitorada por 2 sensores de pressão, localizados no início e no final desta seção (PIT-02 e PIT-03, modelo Yokogawa EJA530E). O segundo trecho vertical ascendente representa um riser e tem 3,0 metros de comprimento. No final desta seção, há um sensor de pressão manométrica (PIT-04, modelo Yokogawa EJA530E). No final da seção do riser, o fluido escoava através de uma mangueira para o tanque superior de emulsão (TQ-02), para armazenamento temporário da emulsão após o teste.

A linha sem acidentes simula a quebra mínima das gotas para um trecho de poço até a plataforma. Já a linha com acidentes contempla todos os elementos presentes na simulação do poço real, além de apresentar versatilidade para instalação de outros tipos de acidentes de linha. Este trecho é utilizado para avaliar o efeito na DTG durante a linha de extração. Ambas as linhas podem operar com as duas maneiras de promover o escoamento.

Ao longo do circuito, há locais específicos destinados à investigação do fenômeno

Figura 10 – Fotografia de trecho do circuito, montado e operante.



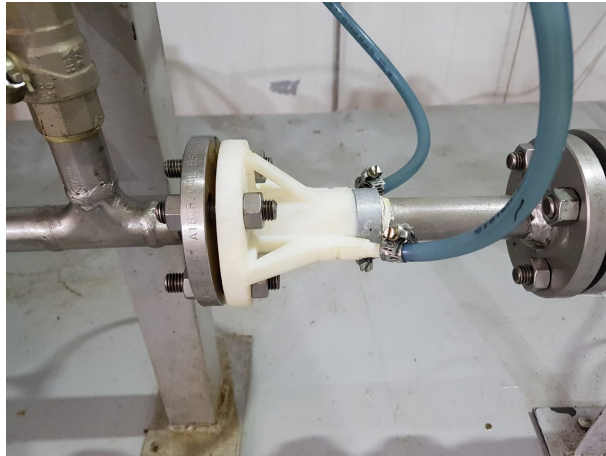
Fonte: Autor.

de quebra das gotas. Assim, a emulsão é amostrada na linha por meio de dispositivos extratores (EXT-01 à 09, entre outros instalados ao longo da seção de teste) que direcionam uma amostra da emulsão através de suas saídas laterais para a análise da DTG antes e depois dos acessórios do tubo (válvulas, curvas, bomba, trecho horizontal). Essas peças especiais foram modeladas em software CAD e fabricada por meio de manufatura aditiva em um equipamento Stratasys nome Objet30 Pro. O equipamento utiliza tecnologia Poly-jet construindo protótipos de resina fotopolimérica com resolução de 30 micras por camada e 100 micras de acurácia dimensional, variando dependendo da orientação de deposição, segundo a própria fabricante. A aquisição de dados e o controle da planta são integrados em um sistema de supervisão baseado na plataforma NI LabView.

A linha principal conta com 6 extratores instalados e operados, possibilitando avaliar as características da emulsão em diferentes locais do circuito que incluem o início do poço (EXT-01 e 02), ANM (EXT-02 e 03), flowline (EXT-03 e 04), riser (EXT-05 e 06) e válvula choke (EXT-06 e 07). Apenas o EXT-05 não foi utilizado nos testes conduzidos na linha principal. A Figura 11 mostra um extrator que foi instalado antes do medidor de vazão Coriolis, utilizado para avaliar a diferença da indução do escoamento pela bomba e vaso de pressão.

As duas saídas do extrator são conectadas a uma válvula, de modo que permita

Figura 11 – Dispositivo extrator instalado antes do medidor de vazão.



Fonte: Autor.

a extração controlada nos momentos certos e sincronizados, garantindo a renovação do fluido do sistema de coleta pelo descarte inicial e cuidado no manuseio da amostra para realizar a avaliação da DTG no equipamento a laser.

Na extremidade do primeiro trecho vertical que representa o poço, foi instalada uma simulação de uma árvore de natal molhada (ANM), MV-01, composta por uma válvula gaveta atuada eletricamente, conforme disposto na Figura 12.

Figura 12 – Protótipo de ANM no circuito utilizando uma válvula gaveta e um atuador elétrico.

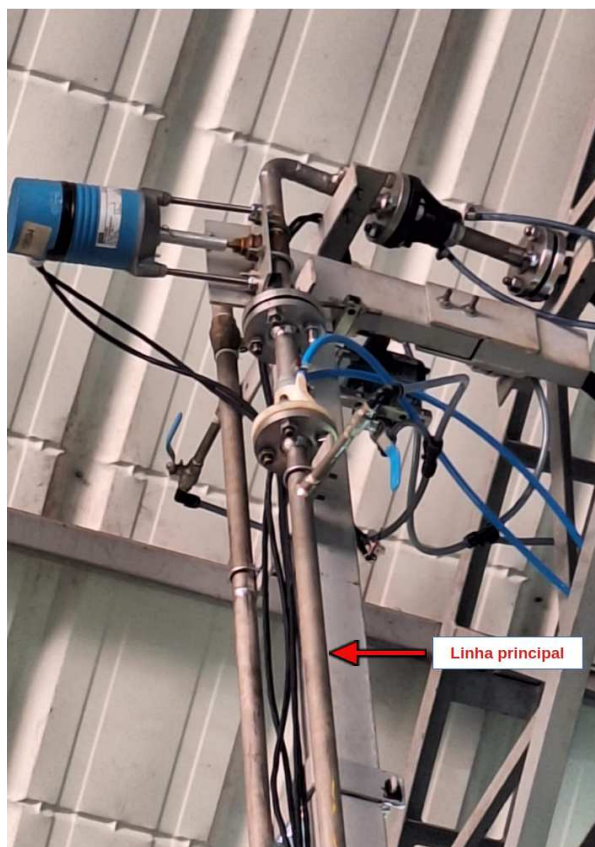


Fonte: Autor.

Após a ANM, tem-se a flowline e, no fim dela, o riser. No final do riser há a válvula

choke, MV-02, representada pela mesma válvula gaveta da Figura 12, sua instalação no circuito é apresentada na Figura 13. Todos os testes realizados na linha principal, que serão matéria no desenvolvimento desse trabalho, foram feitos com a utilização da válvula gaveta para representar a choke, a motivação é fundamentada na limitação da faixa de operação da planta para que operasse com uma geometria mais restritiva, como a válvula agulha.

Figura 13 – Choke, válvula MV-02, representada pela válvula gaveta.



Fonte: Autor.

4.1 Preparação e caracterização da emulsão

As emulsões são preparadas no laboratório de emulsões do Núcleo de Estudos em Escoamento e Medição de Óleo e Gás (NEMOG), na Universidade Federal do Espírito Santo (UFES). Elas são compostas por óleo mineral (Mobil AW-68) com 0,1% v/v do tensoativo Triton X-114 como fase contínua e água deionizada com 35 g/L de NaCl como fase dispersa, seguindo a metodologia desenvolvida por [Corona et al. \(2023\)](#). Após a preparação de cada fase, água e óleo são misturados em bateladas em um tanque de 50 L por agitação mecânica utilizando o Ultra Turrax T65. Cada teste requer 400 L de emulsões, que é posteriormente reciclado. Assim, a caracterização da emulsão é um processo importante. As distribuições dos tamanhos de gotas (DTGs) produzidas são

bimodais e apresentam um alto período de estabilidade para o tamanho das gotículas entre 1 a 300 micras, com separação de no máximo 10% de volume de fase dispersa emulsionada em 48 horas (CORONA et al., 2023). Para modificações na fração de água, é realizada uma nova homogeneização para que a emulsão se torne metaestável.

São objetos de caracterização: a tensão interfacial, massa específica, viscosidade dinâmica, fração de água e distribuição do tamanho de gotas, da emulsão em si e das fases individuais quando aplicável. A massa específica, da fase contínua ρ_c , da fase dispersa ρ_d e da emulsão ρ_e foi medida em uma faixa de temperatura entre 20°C e 36°C utilizando o analisador digital Anton Paar DSA5000M, seguindo a norma ASTM D5002-19 (2019).

Tendo em vista a variabilidade das leituras de massa específica da emulsão, devido à dificuldade de manter estável durante a medição de massa específica pelo densímetro de tubo em U oscilante, as propriedades na simulação são aplicadas a partir da interpolação nas leituras de temperatura. Para isso, a massa específica da mistura, ρ_e , é expressa em função da massa específica da água ρ_d e do óleo ρ_c , ponderadas pelas respectivas frações volumétricas de água, ϕ , e de óleo $(1 - \phi)$ conforme Equação 4.1 (CROWE et al., 2011).

$$\rho_e = \rho_d\phi + \rho_c(1 - \phi) \quad (4.1)$$

O comportamento funcional da temperatura é medido e está apresentado na Tabela 1. Uma função linear é estabelecida para ρ_e considerando as variáveis independentes ϕ e T .

Tabela 1 – Massa específica do óleo, água e da emulsão em kg/m³.

Temperatura [°C]	Água	Óleo	Emulsão água em óleo [% v/v]				
			1	5	10	15	20
20	1022,4	872,77	874,26	880,25	887,73	895,2	902,7
36	1017,17	862,73	864,28	870,45	878,18	885,9	893,62

Fonte: Autor

As viscosidades dinâmicas da fase contínua, μ_c , da fase dispersa, μ_d , e da mistura, μ_e , são avaliadas usando geometria de cilindro coaxial de dupla folga com curvas de fluxo a 25°C e 35°C utilizando o reômetro HAAKE MARS 60, de acordo com a norma ASTM D4402 (2015). São aplicadas taxas de cisalhamento entre 1 a 3000 s⁻¹, totalizando 600 medidas dinâmicas de viscosidade para cada amostra. As viscosidades dinâmicas são apresentados na Tabela 2 para diferentes concentrações de água.

Tabela 2 – Viscosidade do óleo, água e da emulsão em cP.

Temperatura [°C]	Água	Óleo	Emulsão água em óleo [% v/v]				
			1	5	10	15	20
25	1	132	122	136	155	174	180,2
35	0,8	80	75,6	86	94,6	104,4	110,4

Fonte: Autor

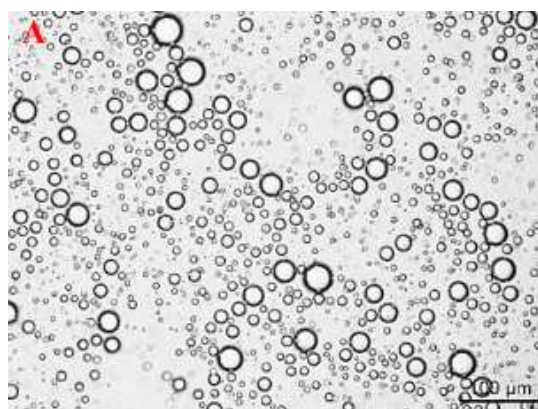
Da mesma forma, uma função linear é estabelecida para μ_e considerando as variáveis independentes ϕ e T . A tensão interfacial (σ) entre o óleo e a água salina é obtida pelo método de gota pendente usando o Tensiômetro SEO (modelo MT da Phoenix). A tensão interfacial obtida para a emulsão foi de 4,5 mN/m à 25 °C.

Para cada amostra de emulsão, a concentração volumétrica de água é medida por titulação potenciométrica, de acordo com a norma ASTM D4377-00 (2000), utilizando reagente de Karl Fischer em um titulador Metrohm (modelo 870 Titrando) com eletrodo duplo de platina.

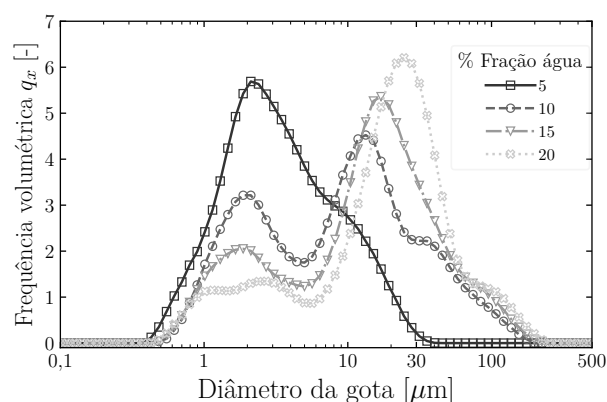
A DTG das emulsões é obtida por duas técnicas, a primeira pela tecnologia de difração a laser em um analisador Bettersizer modelo ST (fabricante AcilWeber) e isoparafina como meio dispersante. O equipamento emprega técnica de espalhamento de luz de baixo ângulo por difração do laser para medição da DTG e mede na faixa de 0,1 a 1000 μm . Para determinar a DTG são utilizados os seguintes parâmetros do equipamento: a potência do laser deverá ser maior que 65% e o grau de obscuridade em aproximadamente 10%.

O segundo método é medir os tamanhos e a forma das gotas a partir de fotomicrografia em lâmina de vidro. Um microscópio óptico de luz polarizada realiza a aquisição das imagens. Para calibração do sistema óptico foi utilizado uma lâmina micrométrica. As fotomicrografias obtidas foram analisadas no software de ImageJ. A Figura 14a ilustra a DTG obtida no tanque de armazenamento TQ-01 após a homogeneização da emulsão, já a Figura 14b apresenta a DTG em termos de frequência volumétrica da análise de laser das amostras em concentrações de 5 a 20 % v/v de água retiradas no extrator EXT-01.

Figura 14 – Emulsão água-óleo, fotomicrografia e distribuição obtida por laser.



(a) Fotomicrografia da emulsão no tanque de abastecimento.



(b) Distribuição de frequência volumétrica.

Fonte: Autor.

4.2 Condições de operação e procedimento experimental

A condição de operação está definida pelo número de Weber (We), que é o parâmetro adimensional considerado para similaridade entre o circuito e a simulação de uma linha de produção em escala real. Neste trabalho, o escoamento na seção de teste esteve no regime laminar em todos os casos analisados. A máxima taxa de cisalhamento a que a gota pode estar sujeita ocorre próxima à parede da tubulação, onde a tensão de cisalhamento é dada por $\tau_w = \mu_c G_{max}$. G_{max} pode ser estimada pela seguinte expressão:

$$G_{max} \approx \frac{f \rho_c U^2}{2\mu_c} \quad (4.2)$$

onde f é o fator de atrito de Fanning. Em um escoamento laminar, $f = 16/Re$ e a taxa de cisalhamento máxima pode ser aproximada para:

$$G_{max} = \frac{8U}{D} \quad (4.3)$$

A partir da Equação 3.68 o número de capilaridade pode ser reescrito como sendo:

$$Ca_{crit} = \frac{4\mu_c U d_{max}}{\sigma D} \quad (4.4)$$

onde $f(\lambda) \approx 1$, U a velocidade média do escoamento e D o diâmetro interno da tubulação.

O escoamento induzido pela bomba também promove flutuações de velocidade locais complexas devido à sua geometria helicoidal do rotor, o que pode promover a quebra das gotas. Quando a gota é deformada por forças de pressão dinâmica, a deformação é causada por variação de velocidade numa distância igual ao do tamanho da gota. Neste caso, a força exercida é dada por $F = \rho_c U^2$. Assumindo que as gotas inicialmente em repouso são aceleradas para a velocidade do escoamento da tubulação, a velocidade relativa U pode, no máximo, ser aproximada como a velocidade média do escoamento, assim, o número de Weber do experimento é definido como:

$$We = \frac{\rho_c U^2 d_g}{\sigma} \quad (4.5)$$

onde d_g é o diâmetro da gota. Nesse caso, é utilizado o diâmetro representativo médio $D_{[4,3]}$. Definido como sendo:

$$D_{[m,n]} = \left(\frac{\sum f_n d^m}{\sum f_n d^n} \right)^{\frac{1}{m-n}} \quad (4.6)$$

sendo $m = 4$ e $n = 3$, f_n a frequência numérica da distribuição. Para examinar o comportamento da quebra das gotas, são conduzidos testes no circuito com o escoamento de emulsão caracterizada, ou seja, a distribuição do tamanho de gotas e as propriedades físicas relevantes são medidas a priori, como a massa específica, a viscosidade dinâmica e

a tensão superficial. A condição de operação é encontrada rearranjando a Equação 4.5 e adequando as unidades, resultando em:

$$\dot{m} = \frac{We \sigma^{0,5} \pi D^2}{\rho_e d_g} \frac{1}{4} 60 \rho_e \quad (4.7)$$

em que \dot{m} é vazão mássica [kg/min].

A matriz experimental de testes é preparada com 5 níveis de concentração de água, 5 níveis de percentual de abertura das válvulas MV-01 e MV-02, atuadas em conjunto para a mesma abertura, e 10 níveis de número de Weber, nem todas as condições foram possíveis de serem realizadas experimentalmente, logo, a análise de planejamento fatorial não foi possível. As concentrações nominais de água são selecionadas para 1, 5, 10, 15, 20% H₂O (v/v). Os números de Weber da emulsão foram variados, dependeram da concentração volumétrica, devido ao aumento do diâmetro médio de gotas com o aumento da concentração, o que inviabilizou valores de Weber menores, isso se deve ao fato de que vazões baixas não possibilitaram a realização da amostragem de fluido, pois a elevada perda de carga nos canais do extrator impossibilitou obter volume de emulsão necessária para as análises no tempo hábil de 1 minuto por coleta. A Tabela 3 resume as condições avaliadas. Os números são a identificação da batelada de escoamento, com o Weber na linha e nas colunas a concentração e a abertura de válvula no momento de extração para análise de DTG.

Tabela 3 – Matriz de testes realizados na linha principal com a configuração de abertura das válvulas MV-01 e MV-02. Cada número de código identifica o teste e sua posição na tabela a condição de retirada de amostras nos extratores.

Weber	Abertura de válvula																		
	5% H ₂ O				10% H ₂ O				15% H ₂ O				20% H ₂ O						
	100	20	15	12	10	100	15	12	10	100	15	12	10	100	15	13	12	11	10
1	59	59	59	55 57	56														
2	53	53	53	58	58	66	66	66	70										
3	60	60	60	55 57	56	65	65	65	69	78	78	78	80						
4	53	53	53	61	61	64	64	64	68	77	77	77	79						
5	49	49	49	55 57		67	67	67		74	74	74							
6,04	50	50	50	51	62	63	63	63		73	73	73		82	82	82		86	
7	51	51	54			71	71	71		75	75	75		86		86			
10	52	52	52							81	81	81							
15														83	83	83		87	
20														84	84	84		88	
														88		88			
														85	85	85			

Fonte: Autor

A emulsão pré-preparada é armazenada no tanque TQ-01, em seguida, é realizada a homogeneização por agitação mecânica, três amostras em profundidades diferentes, superfície, meio e fundo, são retiradas para análise de DTG por difração a laser. A DTG dessas 3 amostras são avaliadas quanto ao valor médio de $D_{[4,3]}$ e o desvio padrão, não excedendo 20% da média, o teste prossegue para a próxima etapa. Aprovado, o tanque TQ-01 é içado por uma talha elétrica e as válvulas manuais são abertas para que a emulsão escoe por gravidade para o vaso de pressão, VP-01. O tempo entre o abastecimento completo do vaso de pressão e o início do escoamento não excede 30 minutos.

Dado o início do escoamento, a primeira extração de amostra ocorre em 1 minuto, pelo menos, após as estabilizações da pressão, vazão e massa específica em toda a linha de teste. Dessa forma, é garantida a renovação completa do fluido que permanece na tubulação do circuito e dos extratores, que são abertos para drenagem nesse tempo até a

realização da primeira coleta. Durante o escoamento e imediatamente após a retirada das alíquotas é feito a análise de DTG por difração a laser e microscopia ótica.

Para todos os testes programados e realizados, foram realizadas 3 ou 4 extrações e análises de DTG em cada extrator na mesma batelada para testar a repetitividade do processo (até transferir toda a emulsão de VP-01 para TQ-02) em diferentes condições de vazão e abertura das válvulas.

Condição de vazão variável:

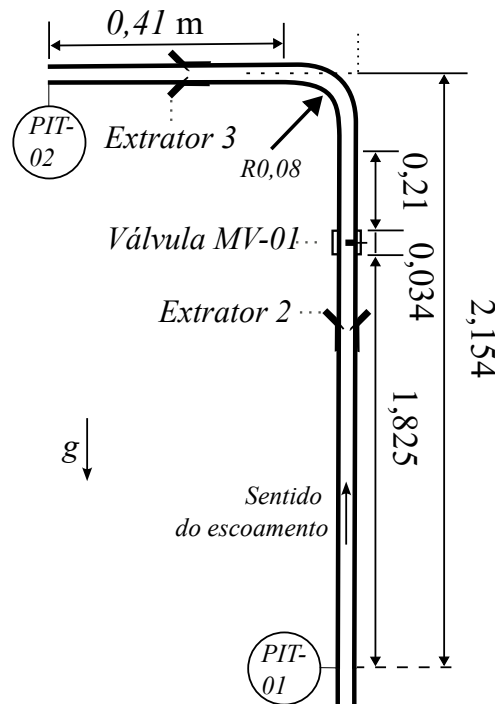
1. O escoamento inicia sempre com a menor vazão.
2. Após a estabilização das pressões manométricas e da massa específica (cerca de 1 minuto), a primeira amostra de emulsão é retirada nos extratores.
3. A vazão é então aumentada para atingir o próximo nível de Weber.
4. Aguarda-se um intervalo de 3 a 4 minutos para alcançar o regime permanente.
5. No último minuto desse intervalo, os extratores são abertos e a coleta é realizada ao final da contagem.
6. O procedimento é repetido progressivamente até atingir o último nível de Weber.

Condição de vazão fixa e abertura das válvulas variáveis (Batelada):

1. O teste sempre inicia com as válvulas totalmente abertas (100%).
2. Após a estabilização das pressões manométricas e da massa específica (cerca de 1 minuto), a primeira amostra de emulsão é retirada nos extratores.
3. O fechamento das válvulas ocorre de forma gradual e direta (Essa abordagem minimiza os efeitos de histerese do atuador elétrico e da válvula, além de compensar folgas no obturador (gaveta)).
4. Alterado a posição da válvula, aguarda-se um intervalo de 3 a 4 minutos para alcançar o regime permanente.
5. No último minuto desse intervalo, os extratores são abertos e a coleta é realizada ao final da contagem.
6. O procedimento é repetido progressivamente até atingir o último nível de abertura pretendido.

Para cada amostra de emulsão, realizam-se três medições de distribuição do tamanho de gotas na equipamento a laser. Em cada DTG, são relatados erros aleatórios e repetitividade das leituras.

Figura 15 – Croqui esquemático da válvula MV-01 no circuito com as cotas em metros.



Fonte: Autor.

A Tabela 3 referencia a identificação do teste apenas pelo número. Será adotado um código que identifica a condição de extração de amostra da linha de escoamento como sendo dependente do número do teste, da abertura de válvula (A) e do número de Weber (W), como exemplo, a amostra obtida no teste com identificação de número 60, com 5% de fase dispersa, Weber de 3,0 e abertura de válvula de 20% será referenciada como **60A20W3**. Nesse mesmo teste, a abertura de válvula em 15% também foi realizada para coleta e análise da DTG, referência 60A15W3.

4.3 Queda de pressão nas válvulas

A Figura 15 apresenta um esboço (representação sem escala) da região de teste da linha principal da MV-01, mostrando os medidores e indicadores de pressão PIT 01 e 02. Os índices mantêm a mesma notação referenciada no P&ID do circuito completo, Figura 8.

Com base na representação anterior, determina-se a queda de pressão permanente causada pela atuação da válvula, ΔP_p , da seguinte maneira:

$$\Delta P_p = (P_1 - P_2) - (\Delta P_{\Delta y} + \Delta P_L + \Delta P_{curva}) \quad (4.8)$$

onde P_1 e P_2 são as pressões medidas por PIT-01 e 02, respectivamente. O termo $\Delta P_{\Delta y}$ conta para a queda de pressão hidrostática (gravitacional) e ΔP_L para os efeitos de atrito viscoso. Com o escoamento interno em tubo com seção transversal circular, em regime

laminar, ou seja, $Re < 2300$, as relações de Bernoulli, Darcy-Weisbach e Borda-Belanger (CENGEL; CIMBALA, 2015) são aplicadas e a queda de pressão aproximada pela seguinte relação algébrica:

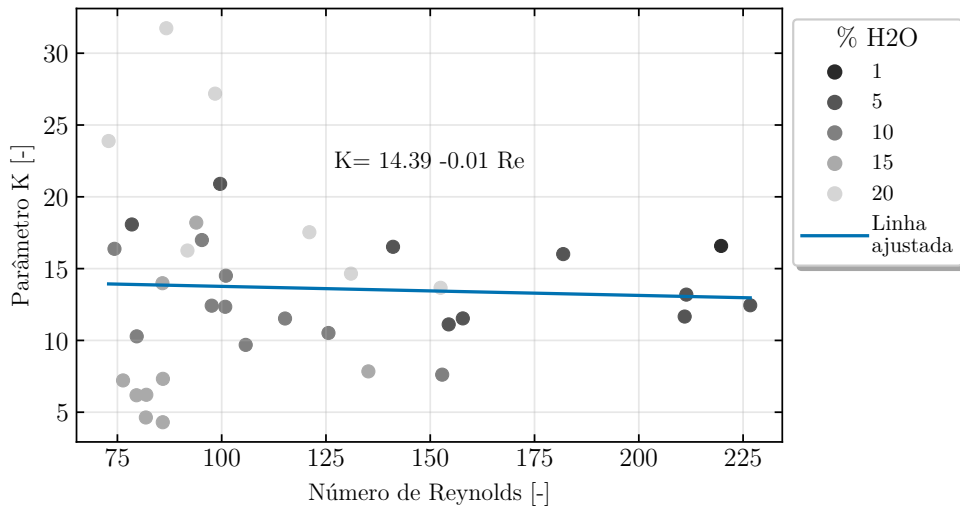
$$\Delta P_p = (P_1 - P_2) - \left(\rho_e g \Delta y + \frac{128 L \mu_m Q}{\pi D^4} + K \frac{\rho_e \bar{U}^2}{2} \right) \quad (4.9)$$

O comprimento interno, de trechos retos é de $L = 2,479$ m. A partir das cotas apresentadas determina-se a queda de pressão permanente provocada pela atuação da válvula. Com a válvula totalmente aberta a queda de pressão e dissipação de energia é desprezível.

No ajuste do parâmetro K , Eq. 4.9, foi utilizado a abertura da válvula em 100%. Nesse cenário, ΔP_p é considerado zero. A massa específica da emulsão, ρ_e , foi calculada a partir da correlação dada pela Equação 4.1, onde as respectivas massas específicas dependem da temperatura do fluido. O erro associado a essa correlação é no máximo de 1,4%. A viscosidade da emulsão, medida experimentalmente (Tab. 2), foi interpolada com base na temperatura e na concentração volumétrica de água, garantindo que todos os testes válidos para as análises deste trabalho mantiveram a emulsão como um sistema disperso e homogêneo. Assume-se um erro associado à vazão volumétrica, dado que os extratores foram mantidos abertos durante os testes.

Com a equação simplificada, o parâmetro K também contabiliza a queda de pressão causada por elementos de conexão da tubulação e pelos dispositivos extratores. Os dados medidos com a válvula totalmente aberta (100%) foram utilizados para estimar um parâmetro K para cada teste. Conseqüentemente, a queda de pressão permanente, dada pela equação 4.9, é calculada para cada posição de abertura. Nos testes em que não houve medição de DTG com a válvula totalmente aberta, um modelo de regressão de primeira ordem para K com o número de Reynolds do escoamento como variável independente forneceu uma correlação útil ($R^2 = 0,354$), Figura 16. Os dados para esse modelo incluíram todos os K estimados anteriormente. O modelo para K funciona para baixo Reynolds pois sua contribuição na queda de pressão total é muito baixa e, por isso, uma correlação com R^2 baixo de 0,35 não influencia significativamente na estimativa de queda de pressão total.

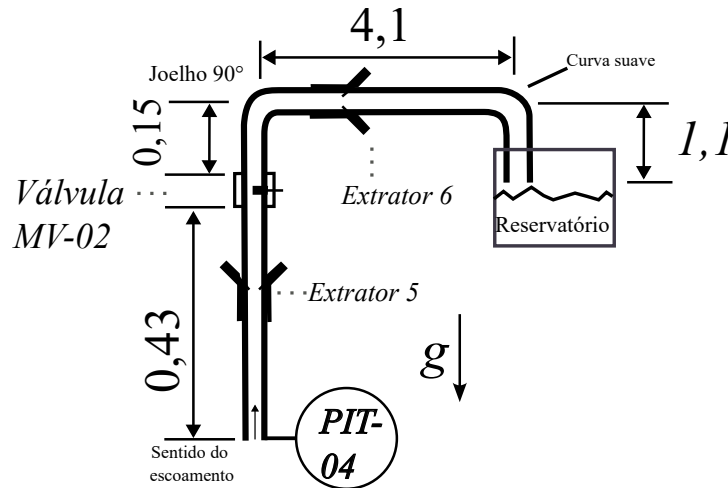
Figura 16 – Parâmetro K obtido em todos os testes com a válvula MV-01 100% aberta.



Fonte: Autor.

O croqui esquemático, sem escala para a válvula MV-02, é apresentado na Figura 17. O comprimento interno é dado por $L = 0,615$ m em um trecho $DI = 20,95$ mm e $L = 4,1$ m em um trecho de $DI=19$ mm. A variação potencial gravitacional é dada pela cota $\Delta y \approx 0,48$ m. A variável P_1 da Equação 4.9 é dada pela pressão medida em PIT-04 e P_2 é zero manométrico.

Figura 17 – Croqui esquemático da válvula MV-02 no circuito com as cotas em metros.

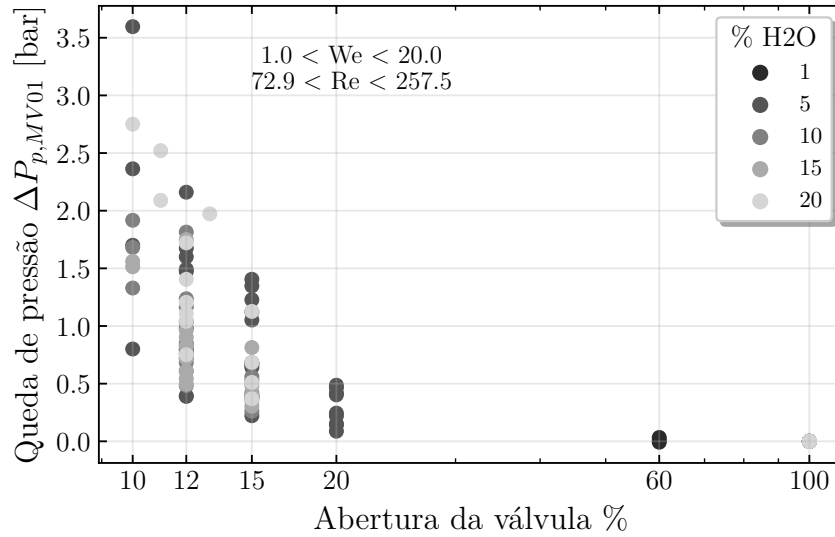


Fonte: Autor.

A queda de pressão permanente obtida na válvula a partir do modelo da Equação 4.9 é obtida para as duas válvulas MV-01 e MV-02, sendo ilustradas nas Figuras 18 e 19, respectivamente.

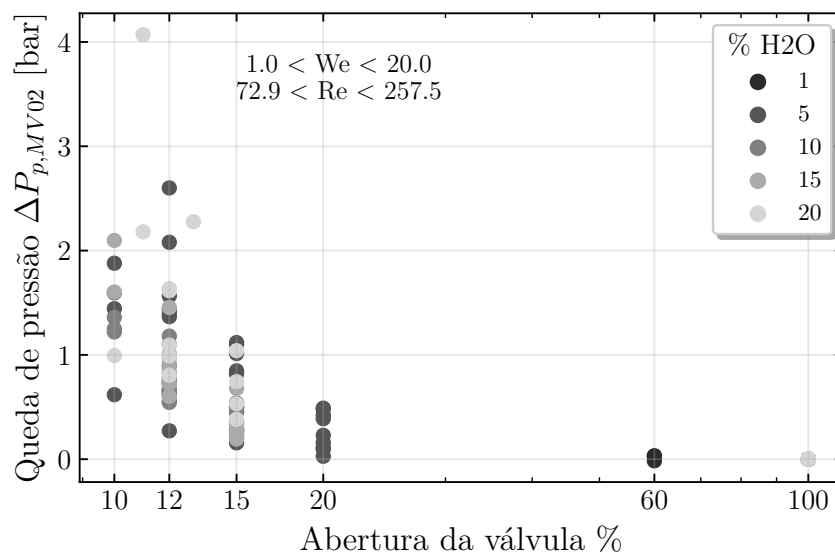
Entre as diferentes abordagens para prever o comportamento da queda de pressão nas válvulas MV-01 e MV-02, um modelo que se mostrou mais adequado, é proposto da

Figura 18 – Queda de pressão na válvula MV-01 para cada abertura em todos os testes feitos.



Fonte: Autor.

Figura 19 – Queda de pressão na válvula MV-02 para cada abertura em todos os testes feitos.



Fonte: Autor.

seguinte forma:

$$\frac{2\Delta P_p}{\rho U^2} = \xi \quad (4.10)$$

onde ξ é o coeficiente de perda na válvula. Tomando ξ como sendo uma relação da abertura da válvula, a queda de pressão pode ser dada por:

$$\Delta P_p = \frac{\rho U^2}{2} \exp(\beta_0) \exp(\beta_1 \log(A_b)) \quad (4.11)$$

Os parâmetros β_0 e β_1 puderam ser estimados utilizando uma regressão linear das variáveis transformadas:

$$Y = \log\left(\frac{2\Delta P_p}{\rho U^2}\right) = \beta_0 + \beta_1 \log(A_b) \quad (4.12)$$

O resultado do ajuste é apresentado na Tabela 4, considerando o intervalo de confiança (IC) de 95%. O coeficiente de perda na válvula é dado na Figura 20. Para a abertura se aproximando de 10%, que é uma condição quase totalmente fechada, a diferença entre o modelo e os dados experimentais é maior. Por ser uma geometria de abertura rápida, acima de 60% de abertura, a queda de pressão é desprezível.

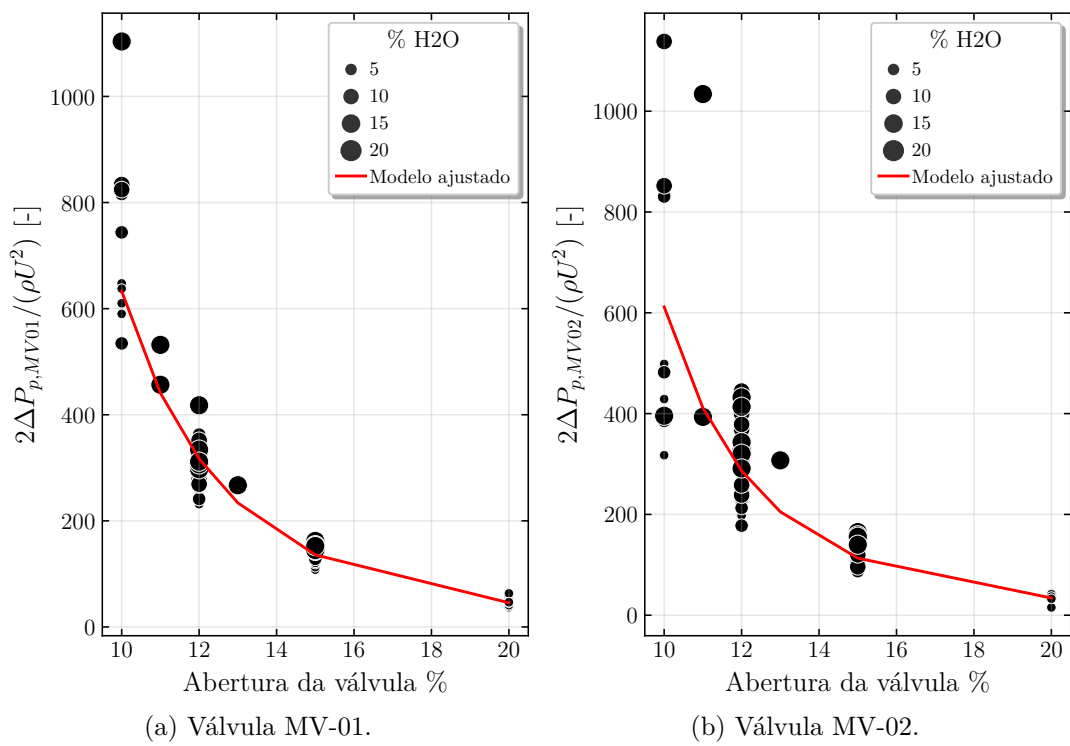
Tabela 4 – Dados da regressão do modelo de queda de pressão na válvula.

Válvula	β_0 (IC)	Erro padrão β_0	β_1 (IC)	Erro padrão β_1
MV-01	15,2 (14,737, 15,633)	0,225	-3,79 (-3,966, -3,621)	0,410
MV-02	16 (15,185, 16,814)	0,087	-4,16 (-4,476, -3,848)	0,158

Fonte: Autor

Os modelos ajustados para a queda de pressão nas válvulas apresentaram elevado poder explicativo, com coeficientes de determinação R^2 de 95,7% para a válvula MV-01 e 89,1% para a válvula MV-02. Esses valores indicam que uma grande proporção da variação na perda de carga pode ser explicada pela variação na área de abertura A_b . Além disso, os resíduos do ajuste apresentaram distribuição aproximadamente normal, o que valida o uso do modelo de regressão linear. Os testes t para os coeficientes β_0 e β_1 resultaram em valores de p (p-valores) significativamente menores que 0,05 (i.e., $P > |t| = 0$), indicando que ambos os coeficientes são estatisticamente diferentes de zero com 95% de confiança. Portanto, os parâmetros estimados são estatisticamente significativos, confirmando a validade do modelo proposto.

Figura 20 – Coeficiente de perda na válvula, ξ , para cada abertura em todas as campanhas experimentais.



Fonte: Autor.

5 Metodologia numérica

Este tópico descreve o método de obtenção dos parâmetros dimensionais da região de interesse para a análise numérica através do método de balanço populacional unidimensional. A região de interesse (volume de controle) é composta por válvulas gaveta, tanto a MV-01 quanto a MV-02, representando a árvore de natal molhada, que é referenciada como ANM no circuito (Figuras 8 e 12) e a choke (Figuras 8 e 13), respectivamente. A partir da queda de pressão permanente na válvula, ΔP_p , é definida a taxa de dissipação de energia cinética média na válvula, $\bar{\epsilon}$, como sendo igual a:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\Delta P_p Q}{\rho_o V_{diss}} \quad (5.1)$$

A taxa de dissipação média é utilizada na estimativa das frequências de quebra e coalescência dos modelos apresentados anteriormente. O volume de dissipação homogêneo, V_{diss} , pode ser escrito em termos de um comprimento de dissipação, L_{diss} :

$$V_{diss} = A_t L_{diss} \quad (5.2)$$

O volume ou o comprimento de dissipação são critérios que diferem em diversas abordagens da literatura. O comprimento da região após a obstrução, como abordado e comparado por Guan, Yang e Nigam (2020), é um exemplo dessas variações. O cálculo de dissipação de energia considera um volume ou comprimento específico de dissipação. Zande (2000), aplicando simulações computacionais, observou que esta zona de dissipação poderia ser de 4,1 a 5,4 vezes o diâmetro do tubo com a existência de uma taxa de dissipação de energia não homogênea a jusante de uma placa de orifício. Além disso, considerando as zonas de recirculação como regiões não efetivas para dissipação, o volume efetivo de dissipação diminui. Silva, Medronho e Barca (2019) adotaram um comprimento de dissipação de 2,5 vezes o diâmetro hidráulico como referência. Paolinelli, Rashedi e Yao (2018) estudando a quebra em uma válvula gaveta adotaram 6 diâmetros da tubulação para a completa recuperação da pressão, baseado em dados experimentais. Nesse trabalho, será utilizado o valor de 5 diâmetros internos de tubulação para o comprimento de dissipação.

A solução da equação de balanço populacional é obtida até o tempo de residência das gotículas na região de dissipação a jusante da válvula, calculada da forma:

$$t_{res} = V_{diss}/Q \quad (5.3)$$

Com base na definição de erro presente no trabalho de Maindarkar, Hoogland e Henson (2015), a função objetivo pode ser definida de duas formas, a primeira através de

uma função erro relativo para cada distribuição obtida experimentalmente ψ_e ,

$$\psi_e = \frac{\sum_{i=1}^M [f_v(v_i)_{sim} - f_v(v_i)_{exp}]^2}{\sum_{i=1}^M [f_v(v_i)_{exp}]^2} \quad (5.4)$$

onde M é o número de classes e $f_v(v_i)$ é a frequência volumétrica da classe i para os resultados preditos pela simulação (*sim*) e para os resultados obtidos experimentalmente (*exp*). Definido desse modo, ψ_e é um erro quadrático relativo, sempre positivo. A segunda forma consiste em definir uma função erro que aponte para se a distribuição predita está à esquerda ou à direita da distribuição experimental, de modo a estabelecer se a simulação subestima ou superestima a quebra, a métrica utilizada será o diâmetro médio característico $D_{[m,n]}$:

$$Er_e = \frac{D_{[m,n]sim} - D_{[m,n]exp}}{D_{[m,n]exp}} \quad (5.5)$$

O valor padrão adotado será de $D_{[4,3]}$, diâmetro médio de De Brouckere ([ASTM, 1992](#)). Assim, a partir das duas métricas de cálculo de erro, podem ser calculados erros acumulados e erros médios de todas as predições de DTG. Dada a quantidade total de experimentos válidos sendo considerados N_e , o erro acumulado é:

$$\psi = \sum_{e=1}^{N_e} \psi_e \quad (5.6)$$

$$Er = \sum_{e=1}^{N_e} Er_e \quad (5.7)$$

Já para as funções erro relativo médio de todas as distribuições de tamanho de gota, definimos o erro relativo global da distribuição $\bar{\psi}$ e o erro global do diâmetro médio \bar{Er} como sendo:

$$\bar{\psi} = \psi / N_e \quad (5.8)$$

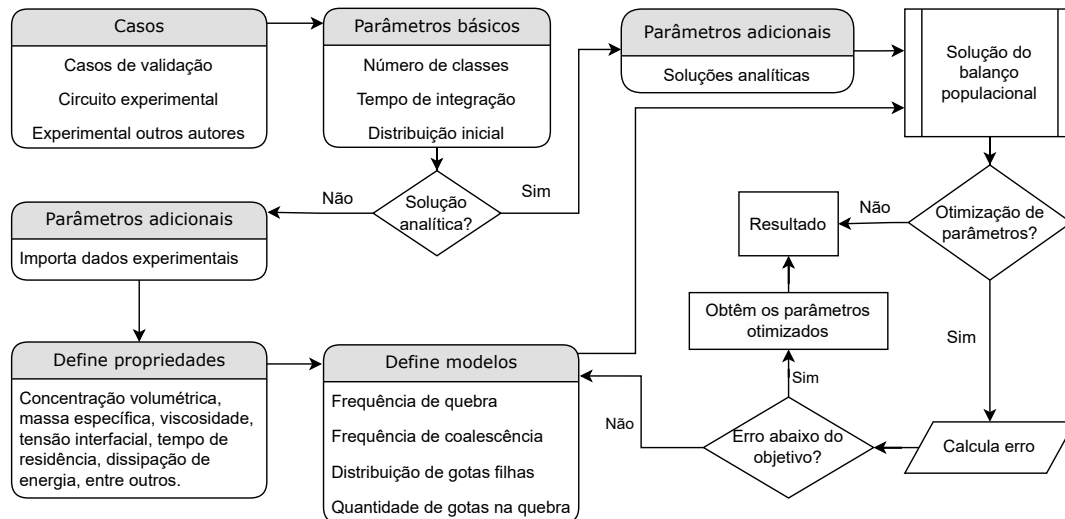
$$\bar{Er} = Er / N_e \quad (5.9)$$

5.1 Implementação numérica

O sistema de equações algébricas descrito em [3.24](#) (malha uniforme) e [3.27](#) (malha geométrica) é implementado numericamente em linguagem de programação Python, versão 3.10.13, fazendo uso de operações de dados vetorizados para um melhor desempenho na resolução do sistema. O repositório contendo a biblioteca criada para este propósito pode ser encontrado online na plataforma Github ([ELIAS, 2022](#)). Para a resolução do sistema de equações, dado que é um problema de valor inicial, é empregada a ferramenta de resolução de sistema de equação diferencial ordinário *solve_ivp* com método Runge-Kutta implícito (Radau) da biblioteca Scipy. Essa ferramenta apresentou melhor estabilidade durante as simulações quando comparada aos outros métodos disponíveis.

A estruturação do algoritmo numérico é exemplificado na Figura 21. Os casos implementados se dividem entre casos de validação, do próprio circuito experimental e de dados experimentais de outros autores, quando disponíveis.

Figura 21 – Fluxograma da implementação do algoritmo numérico de solução da equação de balanço populacional.



Fonte: Autor.

Rotinas de otimização de parâmetros multiobjetivo dos modelos de termos fontes foram implementadas, o que permite a estimativa das constantes que minimizem o erro global e a avaliação de diferentes modelos de quebra e coalescência. A otimização multiobjetivo foi implementada para as constantes dos modelos de quebra e coalescência com o objetivo de minimizar o erro quadrático médio, foi utilizado o módulo Pymoo (Python Multi-Objective Optimization) com método NSGA2 (DEB et al., 2002), porém, não contempla o escopo desse trabalho, podendo ser estudado futuramente.

Também foram avaliadas otimização global com único objetivo utilizando evolução diferencial e SHGO (Simplicial Homology Global Optimization) (ENDRES; SANDROCK; FOCKE, 2018) para minimizar a função erro relativo, dado pela Equação 5.6.

5.2 Validação numérica

Para validar os resultados obtidos neste estudo, foram considerados casos de validação distintos, utilizando soluções analíticas de equações diferenciais, ajustando os modelos de quebra e coalescência para corresponder à mesma equivalência. O primeiro caso investigado envolve apenas o fenômeno de quebra de gotículas, resolvido analiticamente (ZIFF; MCGRADY, 1985). Em seguida, foi analisado um caso específico de coalescência

(SCOTT, 1968). Por fim, um cenário que combina tanto quebra quanto coalescência foi abordado e comparado com a solução analítica (BLATZ; TOBOLSKY, 1945).

5.2.1 Apenas quebra

Considerando um caso de pura quebra, o modelo de balanço populacional descrito em 3.15, é simplificado para:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \int_v^\infty \varsigma(v')P(v|v')b(v')n(v', t)dv' - b(v)n(v, t) \quad (5.10)$$

Nessa forma, a equação se assemelha à equação cinética de fragmentação para um sistema contínuo resolvida analiticamente por Ziff e McGrady (1985). Dada uma frequência de quebra, b , proporcional ao volume da entidade, seja uma gota ou um monômero, e uma distribuição gerada após a quebra, $P(v|v')$, uniforme, ou seja:

$$b(v) = v^2 \quad (5.11)$$

$$P(v|v') = 1/v' \quad (5.12)$$

v' se refere ao volume da gota que quebra, a evolução da densidade numérica é obtida para o caso de quebra binária, $\varsigma(v') = 2$, a equação 5.10 é reduzida a:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = 2 \int_v^\infty v'n(v', t)dv' - v^2n(v, t) \quad (5.13)$$

Ziff e McGrady (1985) propõe resoluções analíticas com diferentes funções de taxa de quebra, o autor avalia o processo de fragmentação, focado na despolimerização (quebra das cadeias poliméricas). O autor utiliza de um sistema contínuo para descrever a evolução de distribuição de tamanhos descrito por uma equação cinética:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = -c(x, t) \int_0^x F(y, x - y)dy + 2 \int_x^\infty c(y, t)F(x, y - x)dv' \quad (5.14)$$

onde $c(x, t)$ é a concentração de polímeros de tamanho x e $F(x, y)$ é a taxa na qual um polímero de tamanho $(x + y)$ se quebra em tamanhos x e y . Para o caso de quebra, em que a taxa $F(x, y) = x + y$, ou seja, proporcional ao tamanho de toda a cadeia polimérica que irá se romper, assim, o autor simplifica a equação para:

$$\frac{\partial c(x, y)}{\partial t} = 2 \int_x^\infty yc(y, t)dy - x^2c(x, y) \quad (5.15)$$

o que é similar à equação 5.13, quando $y = v'$ e $x = v$. Dada uma condição inicial monodispersa reformulada, $n(v, 0) = \delta(v - v_0)$, onde v_0 é o tamanho da gota inicialmente. A solução analítica reformulada é dada por:

$$n(v, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } v > v_0 \\ \delta(v - v_0)e^{-tv_0^2} & \text{se } v = v_0 \\ 2tv_0e^{-tv^2} & \text{se } v < v_0 \end{cases} \quad (5.16)$$

O número total de partículas é obtido da solução analítica pela integração nas coordenadas internas:

$$N(t) = \int_0^\infty n(v,t)dv = e^{-tv_0^2} + \int_0^{v_0} 2tv_0e^{-tv^2} dv \quad (5.17)$$

A malha utilizada para a resolução pelo método de [Hidy e Brock \(1970\)](#), 3.24, é uniforme, com:

$$v_k = v_0 + k(v_{max} - v_0)/M \quad (5.18)$$

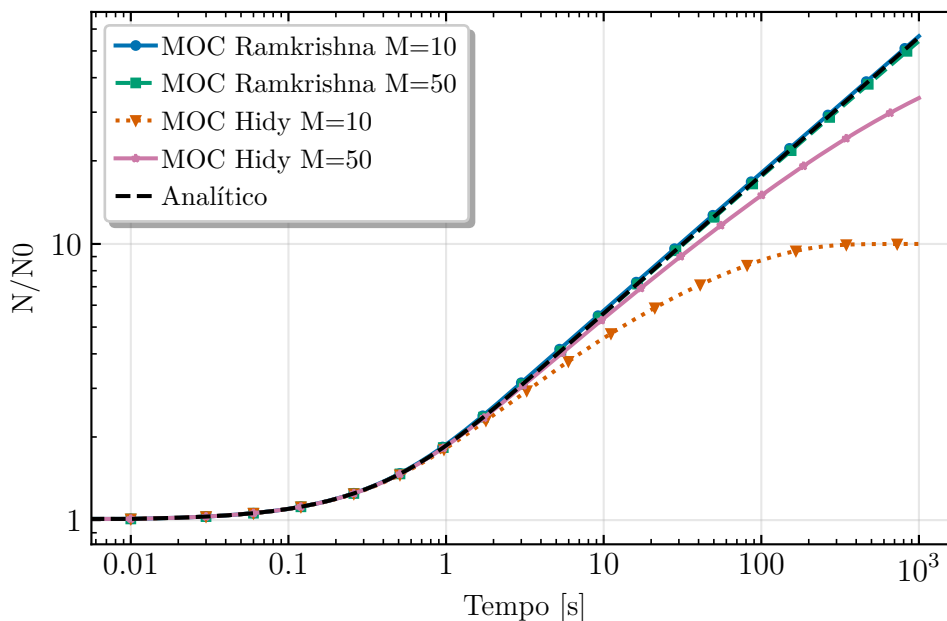
onde v_0 é adotado como sendo 1×10^{-5} , M é o número de classes e $k = 1, 2, \dots, M$. Com quantidade de gotas iniciais igual a 1, ou seja, $N_k(t = 0) = 1$, além disso, $v_{max} = 1$. Por outro lado, a malha utilizada no método de classes geométricas, Equação 3.27, é dada por:

$$v_k = v_{min} \left(\frac{v_{max}}{v_{min}} \right)^{k/M} \quad (5.19)$$

onde v_{min} nesse caso é o volume mínimo de 1×10^{-3} , sem unidades. O passo de tempo utilizado na integração foi de 0,01 s.

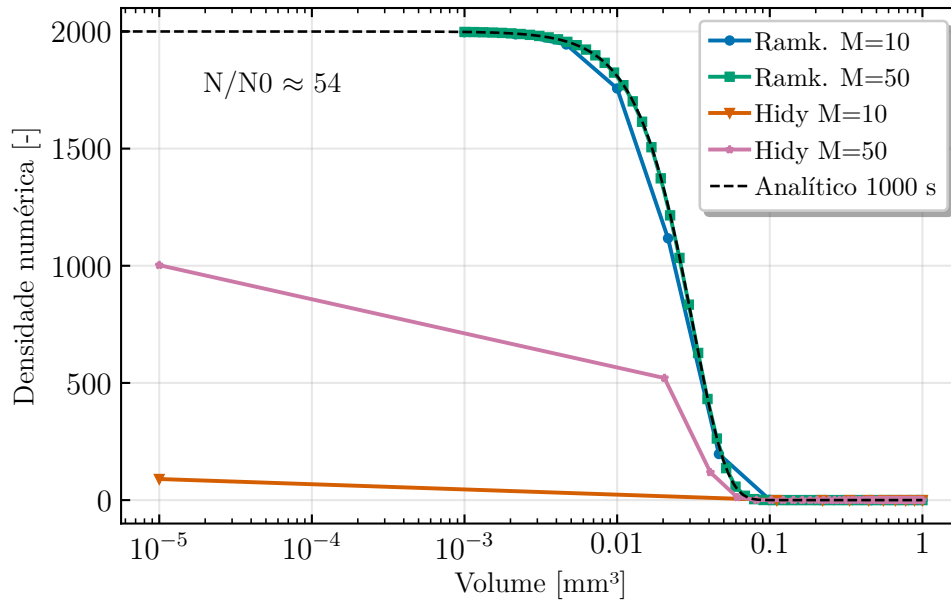
A Figura 22 ilustra a solução analítica para a quantidade relativa de polímeros por unidade de volume pelo tempo, para os dois casos de discretização do método de classes detalhados anteriormente, malha geométrica de [Kumar e Ramkrishna \(1996\)](#) e malha uniforme de [Hidy e Brock \(1970\)](#). Esse último, apresenta densidade numérica abaixo do previsto, Figura 23, enquanto que para a malha geométrica, as menores classes, nos diâmetros menores, garantem boa concordância com o resultado analítico, mesmo para uma quantidade de classes discretizadas relativamente baixo, $M = 10$.

Figura 22 – Quantidade relativa de partículas para o caso de pura quebra.



Fonte: Autor. Ramkrishna: [Kumar e Ramkrishna \(1996\)](#). Hidy: [Hidy e Brock \(1970\)](#).

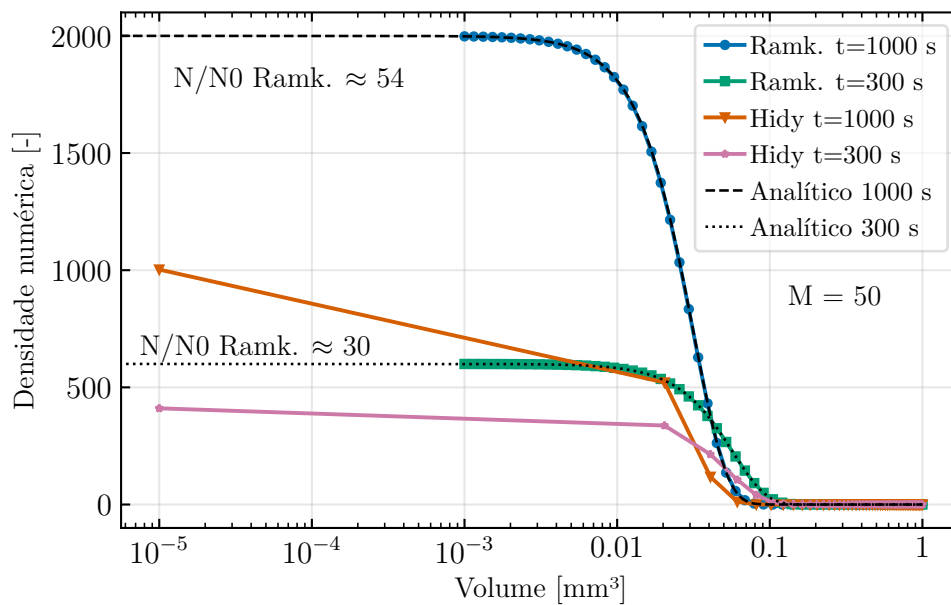
Figura 23 – Densidade numérica para o caso de pura quebra no tempo $t = 1000$ s.



Fonte: Autor. Ramk: Kumar e Ramkrishna (1996). Hidy: Hidy e Brock (1970).

A Figura 24 apresenta a densidade numérica em dois tempos distintos, de 300 e 1000 s, a quantidade relativa de polímero evolui de 30 para 54, considerando a discretização feita com 50 classes.

Figura 24 – Densidade numérica para o caso de pura quebra nos tempos $t = 300$ e 1000 s e $M = 50$.



Fonte: Autor. Ramk: Kumar e Ramkrishna (1996). Hidy: Hidy e Brock (1970).

5.2.2 Apenas coalescência

Scott (1968) apresenta soluções analíticas para três casos envolvendo coalescência entre duas gotas, frequência constante, soma dos volumes, e produto dos volumes, para condições iniciais de distribuição gaussiana e discreta. O autor resolve uma equação cinética similar a Ziff e McGrady (1985), porém, considerando apenas coalescência entre gotas.

A comparação com os resultados analíticos será feita para o terceiro caso. A condição inicial será a mesma da usada por Kumar e Ramkrishna (1996), uma função densidade numérica de gotas gaussiana dada por:

$$n(v, t = 0) = \frac{N_0}{v_2} \left(\frac{v}{v_2} \right) e^{-v/v_2} \quad (5.20)$$

onde N_0 é quantidade inicial de gotas no domínio, v_2 é uma constante. Dado o modelo de frequência de coalescência constante:

$$a(v, v') = C \quad (5.21)$$

a equação de balanço populacional é reduzida a:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = \frac{C}{2} \int_0^v n(v - v', t) n(v', t) dv' - C \int_0^\infty n(v, t) n(v', t) dv' \quad (5.22)$$

Nesse caso, Scott (1968) fornece o resultado analítico para a quantidade de gotículas por unidade de volume como sendo:

$$N(t) = \frac{N_0}{2 + T} \quad (5.23)$$

$$T = CN_0 t \quad (5.24)$$

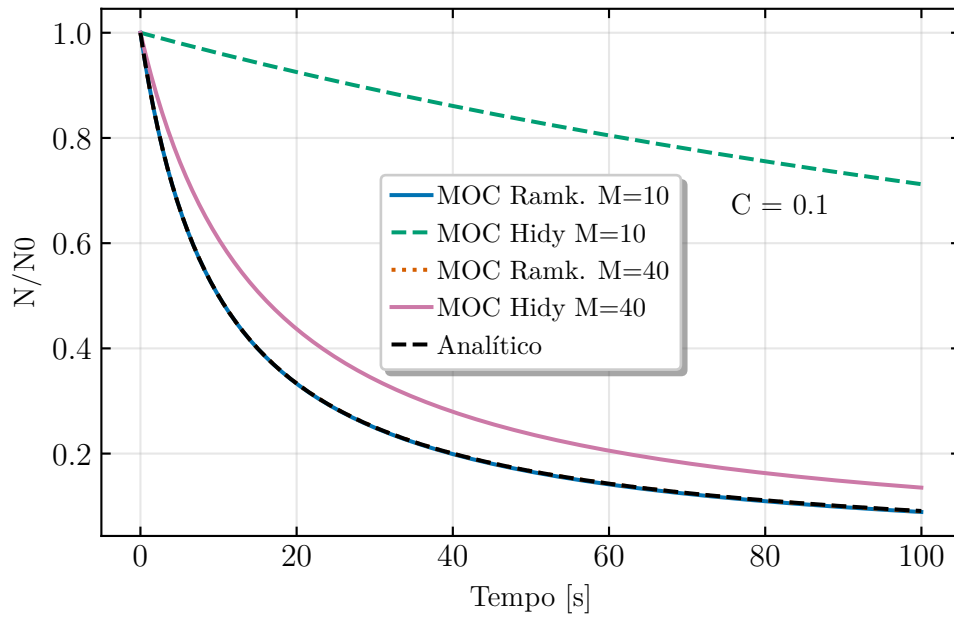
e para a função densidade numérica, a solução fornecida é:

$$n(v, t) = \frac{N_0}{\bar{v}} \frac{4e^{-2x}}{x(T + 2)^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2x)^{2(k+1)}}{\Gamma(2(k+1))} \left(\frac{T}{T + 2} \right)^k \quad (5.25)$$

onde $x = v/\bar{v}$, $\bar{v} = 2v_2$ é o volume médio. A malha de discretização uniforme é dada da mesma forma do caso anterior, Equação 5.18, com v_0 igual a 0,5. A malha geométrica segue a mesma correlação dada na Equação 5.19, com $v_{min} = 1 \times 10^{-4}v_0$, v_{max} é mantido constante em 50, o número inicial de gotas $N_0 = 2$, e $v_2 = 0,5$.

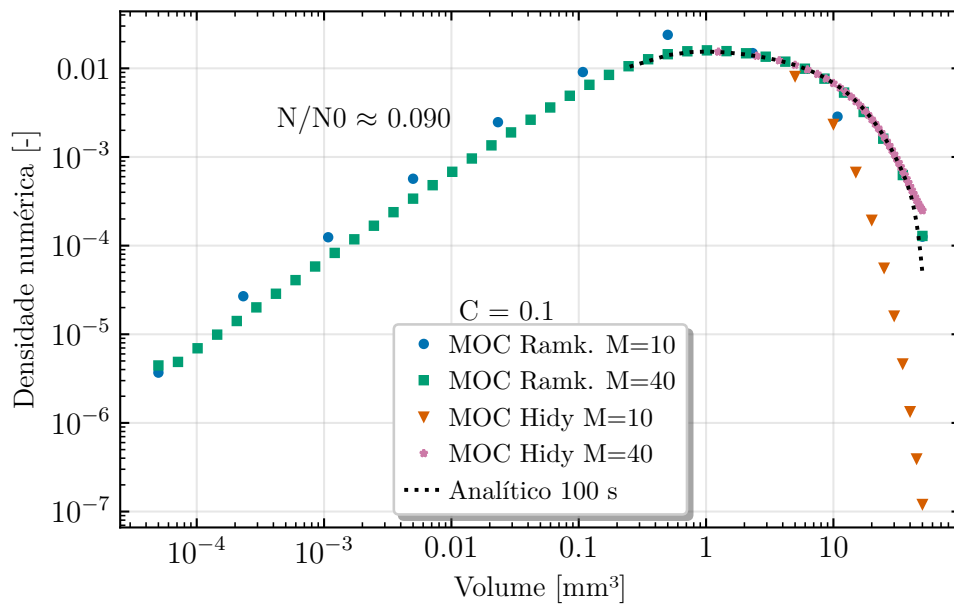
A quantidade relativa de gotículas por unidade de volume é ilustrada na Figura 25, a malha uniforme apresenta uma predição acima da quantidade analítica para classes de até 40. A densidade numérica das gotas em $t = 100$ s é ilustrada na Figura 26, as densidades numéricas para gotículas menores são previstas com bastante precisão, mesmo com uma malha grosseira. Por outro lado, os maiores desvios são observados nos maiores tamanhos, onde a densidade reduz drasticamente.

Figura 25 – Quantidade relativa de gotículas para o caso de apenas coalescência.



Fonte: Autor.

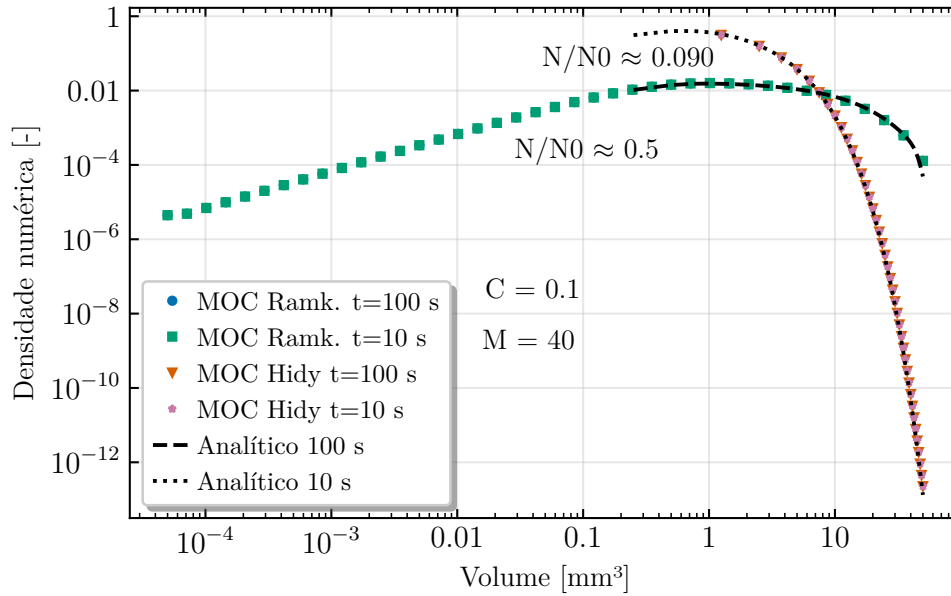
Figura 26 – Densidade numérica para o caso de apenas coalescência.



Fonte: Autor.

Por fim, a Figura 27 apresenta a densidade numérica das gotas em diferentes tempos, $t = 10$ e 100 s para um número de classes igual a 40 e constante de coalescência de 0,1.

Figura 27 – Densidade numérica para o caso de apenas coalescência em tempos distintos.



Fonte: Autor.

5.2.3 Quebra e coalescência

Nessa última etapa de validação do método numérico, quebra e coalescência serão modeladas juntas. [Blatz e Tobolsky \(1945\)](#) resolve analiticamente um modelo cinético de quebra e agregação de polímeros (polimerização-despolimerização) através da equação:

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{k_c}{2} \sum_{j=1}^{i-1} N_j N_{i-j} - k_f N_i \sum_{j=1}^{\infty} N_j - k_b(i-1)N_i + 2k_b \sum_{j=i+1}^{\infty} N_j \quad (5.26)$$

onde k_c e k_b são constantes de coalescência e quebra, respectivamente.

Em uma unidade de monômero, $i = 1$, o nascimento devido à polimerização e a morte devido à despolimerização são iguais a zero. Os autores forneceram uma solução analítica dado o conjunto de equações para uma população inicial de monômeros N_0 . A identificação das funções dos termos fonte leva aos seguintes parâmetros:

$$a(v, v') = k_c, \quad b(v) = k_b(v-1), \quad \zeta(v) = 2, \quad P(v|v') = \frac{\delta(v-iv_*)}{v'-1}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (5.27)$$

onde v_* é o volume de uma unidade de monômero e δ a função delta de Dirac. O termo k_c é adotado como sendo 1,0, $k_b = 0,25$.

[Blatz e Tobolsky \(1945\)](#) propõe uma solução pro conjunto de equações dependente

do tempo, em $t = \infty$ a quantidade de polímeros presentes no sistema é

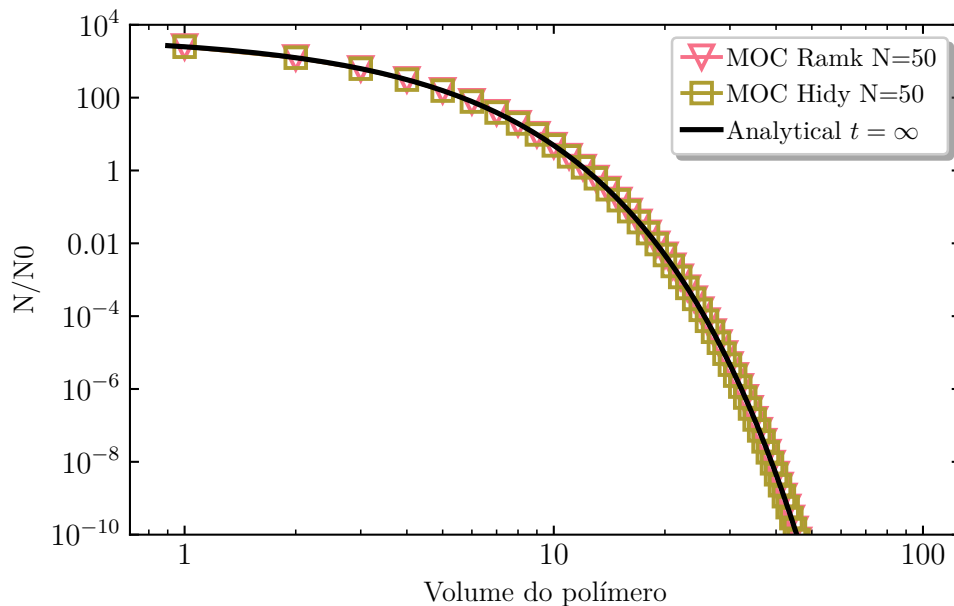
$$\frac{N_0 - N_\infty}{N_0} = \frac{1}{K + (K^2 - 1)^{1/2}} \quad (5.28)$$

e

$$K = 1 + k_b/k_c \quad (5.29)$$

N_0 define a quantidade inicial de partículas no domínio, adotado aqui como sendo $N_0 = 10000$. A malha utilizada é a malha uniforme para os dois métodos de discretização, dada pela Equação 5.18, com $v_0 = 1$ e $v_{max} = 100$. A densidade inicial é dada por $N = N_0\delta(v_0 - 1)$, ou seja, tamanho uniforme de polímero, concentrado em v_0 . A Figura 28 ilustra um comparativo entre a discretização de Hidy e Brock (1970) e de Kumar e Ramkrishna (1996) no tempo $t = 1000$ s. Um total de 50 classes são utilizadas para obter esse resultado.

Figura 28 – Comparativo da quantidade relativa de polímeros entre a solução analítica e numérica para o caso de quebra coalescência em tempos distintos.



Fonte: Autor.

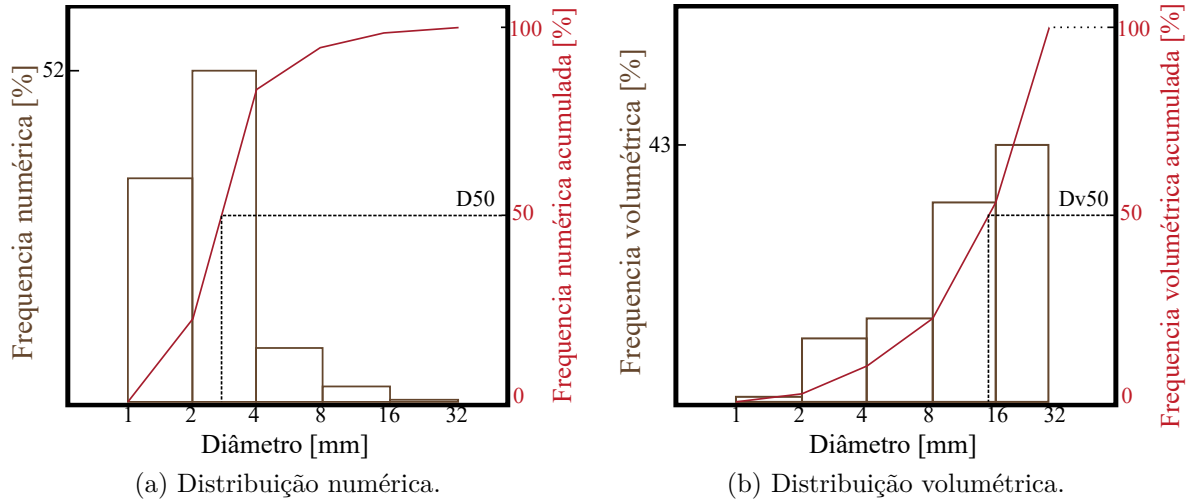
5.3 Discretização da DTG

Os aparelhos analisadores de tamanhos e formas de partículas ou gotículas fornecem respostas baseadas em classes de tamanho, isso significa que não é possível saber a quantidade exata de gotículas de tamanho d num sistema, mas pode-se conhecer a quantidade existente entre o tamanho d_i e d_{i+1} .

Frequentemente, os dados são relatados na forma de histogramas de frequência em relação ao tamanho das partículas. A altura da barra do histograma representa a

quantidade relativa (por exemplo, número ou volume) de material em uma classe de tamanho, como é ilustrado nas Figuras 29a e 29b, para uma distribuição com base no número e no volume das partículas, respectivamente. Ademais, a representação do número e do volume relativo também pode ser representado em uma frequência acumulada, em vermelho, com isso, é direto observar diâmetros médios que se distingue em D_{50} ou D_{n50} e D_{v50} nas duas bases de cálculo.

Figura 29 – Comparação entre os tipos de distribuição, numérico e volumétrico



Fonte: Autor.

Isto permite uma boa comparação com outros dados se forem utilizadas as mesmas classes de tamanho. A comparação direta para dados com classes de tamanho diferentes é obtida por transformação das coordenadas. Esta mesma desvantagem também torna a comparação de dados laboriosa, se os dados procederem de dois instrumentos ou técnicas com classes de tamanho diferentes, o que normalmente é o caso. Alguns outros diâmetros médios característicos podem ser calculados, a depender da finalidade da aplicação, a correlação utilizada é dada por:

$$D_{[m,n]} = \left(\frac{\sum f_n d^m}{\sum f_n d^n} \right)^{\frac{1}{m-n}} \quad (5.30)$$

onde f_n a frequência numérica da dispersão de gotículas no domínio, como exemplificado na Figura 29a.

Seja f_i , o número de partículas da classe i num determinado volume amostral $Z \ 1 \times 10^6 \text{ mm}^3$. A Tabela 5 relaciona esses parâmetros com a concentração numérica e a densidade numérica, com as mesmas classes da ilustrada na Figura 29, dado pela correlação:

$$N_i = f_i/Z \quad (5.31)$$

$$n = \frac{f_i}{(Z\Delta V)} \quad (5.32)$$

onde dV é o intervalo volumétrico da classe, por exemplo. O volume v é calculado considerando o volume médio da classe, ou seja, $\bar{v}_i = 0,5(v_{i+1} + v_i)$, e as gotas são consideradas esféricas, assim, o volume é calculado como $v = \pi d^3/6$.

Tabela 5 – Exemplo para as diferentes formas de representar distribuições de partículas.

Classe	f_i	\hat{f}_i [%] $f_i/\sum_j f_j$	\bar{v} [mm ³]	$f_{v_i} = f_i\bar{v}_i$ [mm ³]	\hat{f}_{v_i} [%] $f_i\bar{v}_i/\sum_j f_j\bar{v}_j$	N_i f_i/Z [mm ⁻³]	n $N_i/\Delta V$ [mm ⁻⁶]
1-2	400	35,2	2,36	942,48	0,84	4E-04	1,09E-04
2-4	600	52,9	18,85	11309,73	10,12	6E-04	2,05E-05
4-8	100	8,8	150,80	15079,64	13,49	1E-04	4,26E-07
8-16	30	2,6	1206,37	36191,15	32,38	3E-05	1,60E-08
16-32	5	0,4	9650,97	48254,86	43,17	5E-06	3,33E-10
Soma	1135	100		111777,8	100		

Fonte: Autor

A ISO 9276-1 2014 recomenda o uso da distribuição numérica normalizada, \hat{n} . É obtida da normalização da distribuição numérica n . Nesse caso, a área da barra do histograma (altura multiplicada pela largura) representa a frequência relativa de material na classe de tamanho i por unidade de volume.

A distribuição que pode ser informada pelo analisador de partículas utilizado na obtenção dos resultados experimentais desse trabalho se distingue em três bases: numérica, volumétrica ou superficial. Na base numérica é descrita a quantidade de partículas presente na classe pela quantidade total de partículas na fase dispersa, nesse sentido, \hat{f}_i . Da mesma forma, na base volumétrica, denomina o volume ocupado pela classe pelo volume total da fase dispersa, \hat{f}_{v_i} .

Os dados obtidos para o desenvolvimento desse trabalho estão na base volumétrica, \hat{f}_{v_i} , logo, uma correlação deve transformar-los para a concentração numérica N_i . Assumindo que \hat{f}_{v_i} da amostra de volume Z representa bem a distribuição $n(v,t)$, temos:

$$\hat{f}_{v_i} = \frac{\phi_i}{\phi} \quad (5.33)$$

assim, combinando com a Equação 3.18, a correlação é dada por:

$$N_i = \frac{\hat{f}_{v_i}\phi}{\bar{v}_i} \quad (5.34)$$

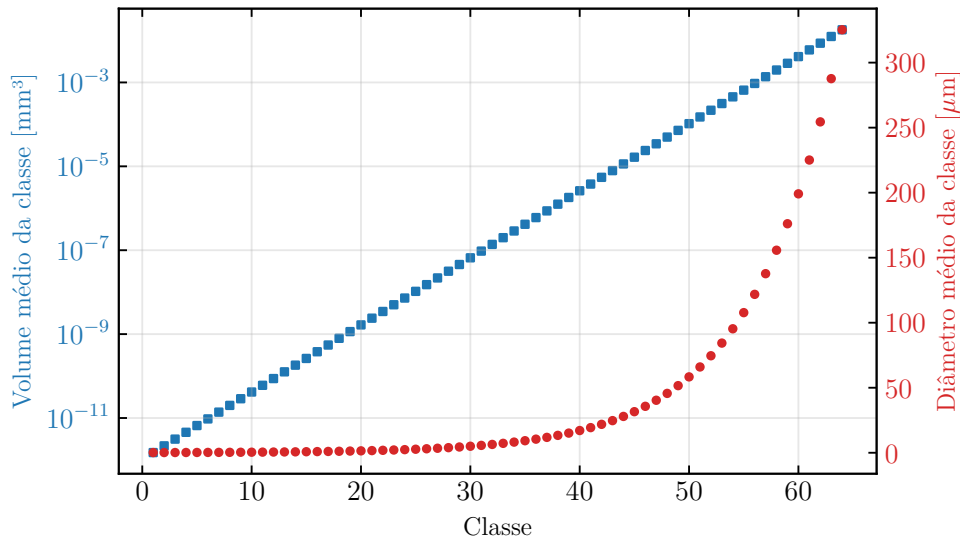
O analisador utilizado para esse trabalho é o Bettersizer ST, o equipamento realiza medições de 0,05 a 1500 μm com 84 classes ($M = 84$). Essas classes são representadas pelo pivô $x_k = 0,5(v_k + v_{k+1})$, definidas pela relação geométrica $v_{k+1}/v_k \approx 1,445125$, $k = 0, \dots, M$ e $v_0 = 7,87 \times 10^{-5} \mu m^3$ ($d_0 \approx 0,053 \mu m$). Assim, um modelo de ajuste para as classes

utilizadas pelo equipamento pode ser dado por:

$$v_k = 1,445^k v_0 \quad (5.35)$$

A técnica de pivô fixo com malha geométrica, proposta por Kumar e Ramkrishna (1996), foi utilizada na solução da PBE. Um total de 64 classes de tamanho de 0,14 a 325,2 μm foi utilizado na discretização, totalizando um sistema de 64 equações diferenciais ordinárias não lineares (EDO) no tempo. As classes reduzidas ajudam a ganhar tempo nas simulações, tendo em vista que as menores e maiores classes não tiveram frequência volumétrica maior que zero em todas as observações experimentais. O volume médio e o diâmetro médio de cada classe do dispositivo é ilustrado na Figura 30.

Figura 30 – Classes utilizadas pelo equipamento analisador de partícula.



Fonte: Autor.

Essas classes são implementadas na resolução dos modelos para os pivôs $x_i = 0,5(v_{i+1} + v_i)$, vide Figura 1.

5.4 Recurso computacional

Todas as simulações foram realizadas com o seguinte hardware e software disponível:

- Processador Intel® Core™ i9-12900KF 4.30Ghz (max 4.6Ghz) 16 núcleos
- Memória RAM 64GB 4x16GB 2666MHz DDR4 DIMM
- Placa de vídeo NVIDIA GeForce® GTX 1660
- SSD Kingston 1024GB

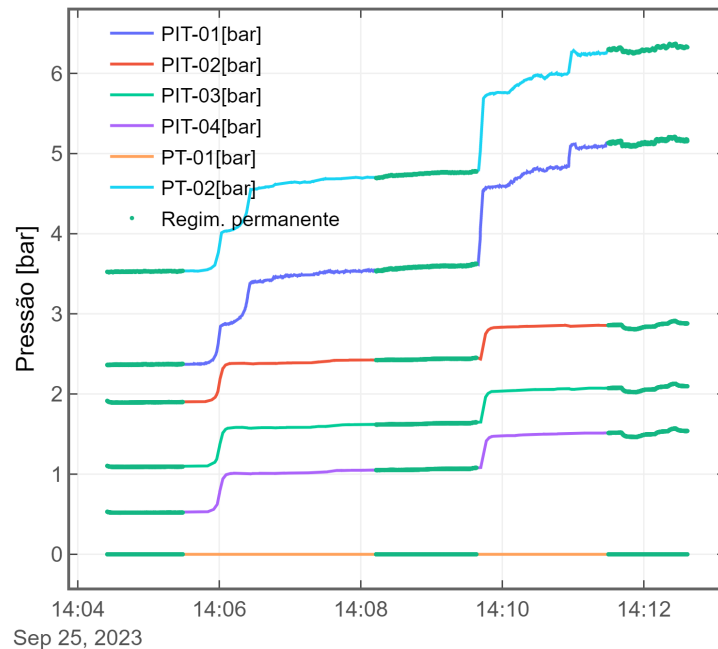
- Disco rígido HD ST2000DM001 Seagate® 2TB
- Windows 11 64 bits
- Python versão 3.10.12

6 Resultados

6.1 Análise dos resultados experimentais

O gráfico da Figura 31 ilustra o comportamento das medidas de pressão no teste de identificação 71, conforme codificado na Tabela 3. Além disso, a figura destaca em verde as leituras experimentais consideradas em regime permanente sobre as curvas de pressão. Essas leituras correspondem a cerca de um minuto de escoamento estável antes de qualquer mudança na configuração, como vazão ou posição de abertura de válvula. Os regimes permanentes serão denominados marcos, representando os períodos de retirada de amostras do circuito. No exemplo apresentado, há três marcos em um único teste. Com uma taxa de amostragem de 6 Hz, obtêm-se 360 leituras dos medidores durante o regime permanente. As avaliações serão feitas com os dados em regime permanente e para saber se a amostra é representativa, uma análise do tamanho da amostra é inicialmente realizada.

Figura 31 – Teste de identificação 71, Weber 6,04 e Aberturas 100, 15 e 12, Tab. 3, com todas as pressões no circuito.



Fonte: Autor.

A verificação do tamanho da amostra é feita utilizando cálculo de tamanho de amostra considerando um erro estatístico do intervalo de confiança da média amostral. Considera-se que a amostra é suficientemente grande (número de amostras $n_a > 30$), com

distribuição normal em torno da média. O intervalo de confiança é dado por:

$$IC(1 - \alpha) = \left(\bar{x} - Z_{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{s}{\sqrt{n_a}}, \bar{x} + Z_{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{s}{\sqrt{n_a}} \right) \quad (6.1)$$

onde $Z_{1-\frac{\alpha}{2}}$ é o valor crítico da distribuição normal padrão ou número de desvios-padrão da média. Com uma margem de erro do IC, e , equivalente a:

$$e = Z_{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{s}{\sqrt{n_a}} \quad (6.2)$$

O tamanho da amostra é dado por:

$$n_a = \frac{s^2}{e^2} Z_{1-\frac{\alpha}{2}}^2 \quad (6.3)$$

Adotando uma margem de erro e correspondente a 1% da média durante o período de 1 minuto de amostragem, determina-se a quantidade mínima de amostras necessárias para cada variável. Esse cálculo considera todas as medições realizadas nos 41 testes da linha principal, Tabela 3, com 1 minuto de amostragem no regime permanente de cada condição de abertura de válvula e número de Weber, e é dado na Tabela 6. O valor de $Z_{1-\alpha/2}^2$ obtido da tabela de distribuição normal padrão, dado $\alpha = 5\%$ é igual a $Z_{0.975} = 1,96$.

Tabela 6 – Sensores e quantidade de amostras.

Identificação do sensor	Número de amostras
TIT-01 [°C]	0,2
TIT-02 [°C]	1,0
PT-01 [bar]	-
PT-02 [bar]	43,3
PIT-01 [bar]	57,0
PIT-02 [bar]	161,1
PIT-03 [bar]	247,2
PIT-04 [bar]	391,4
FT-01 [kg/min]	1,3
Massa específica [kg/m ³]	0,05

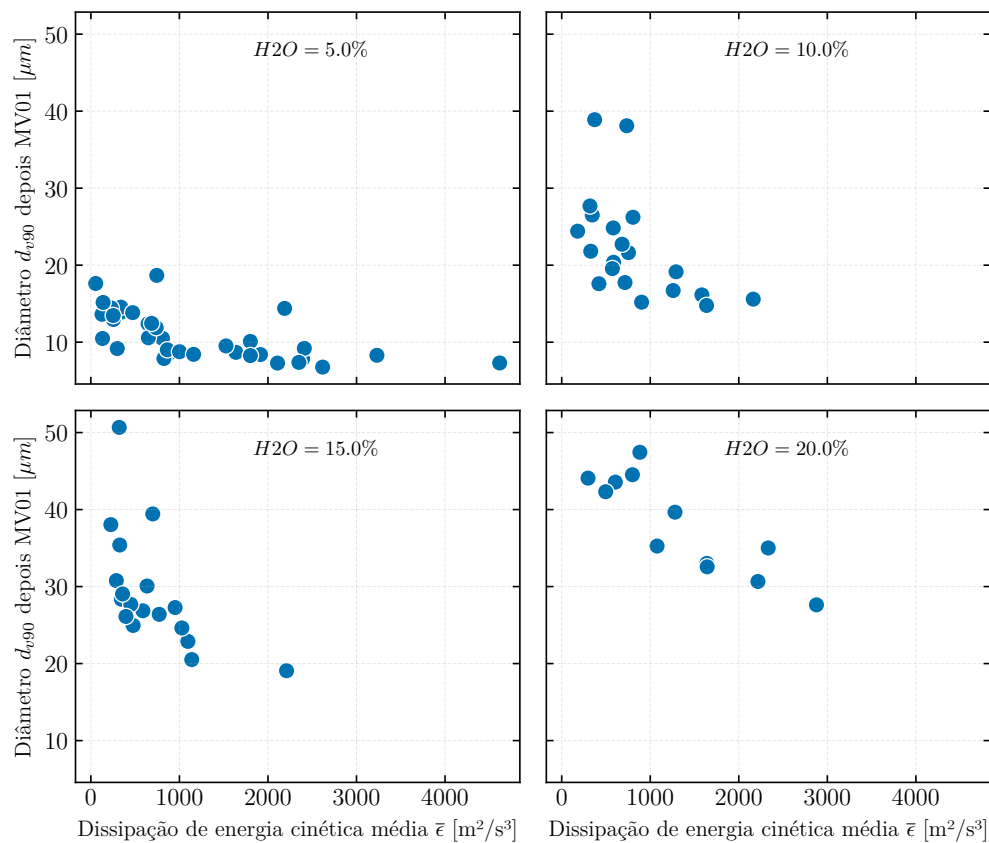
Fonte: Autor

Com uma quantidade de marcos avaliados de 126 (médias de cada propriedade dos sensores), número que representa a quantidade de retiradas de amostras ao longo dos 41 testes da linha principal. A maior amostragem presente é o da leitura de PIT-04, que opera em uma pressão mais baixa mas um desvio padrão que é relativamente próximo dos demais (0,015 bar para todos os sensores de pressão). Dessa forma, utilizar os valores

médios provenientes de 1 minuto de regime permanente é aceitável para realizar as análises subsequentes, dado que a máxima quantidade de amostras necessárias, definido 1% de margem de erro e 5% de nível de significância no intervalo de confiança, foi de 391 amostras para a maior quantidade de amostras, e no cálculo da média é utilizado 360.

Isso posto, a Figura 32 apresenta o d_{v90} pela taxa de dissipação de energia cinética média, $\bar{\epsilon}$, Eq. 5.1, obtida no extrator EXT-03, ou seja, após escoar pela obstrução da válvula MV-01. Cada marcador no gráfico representa o diâmetro médio de 3 análises a partir de uma retirada de amostra em uma determinada condição hidrodinâmica de escoamento, os gráficos são separados pela concentração volumétrica da fase dispersa devido ao seu impacto no diâmetro médio de gota.

Figura 32 – Resultados experimentais de todos os testes da Tabela 3 para o diâmetro d_{v90} após a válvula MV-01.



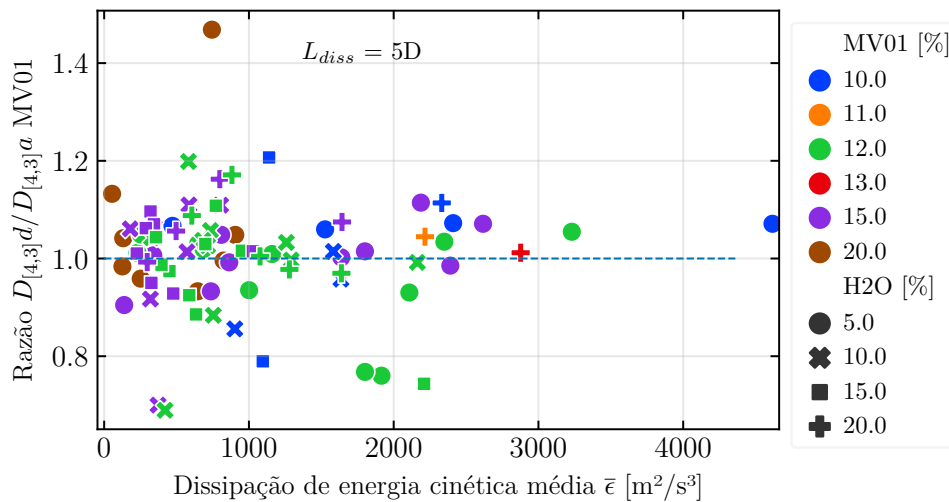
Fonte: Autor.

A estimativa da energia cinética turbulenta dissipada é feita utilizando a Equação 5.1 com o comprimento de dissipação de 5 vezes o diâmetro da tubulação. Essa estimativa será analisada com mais detalhes nos modelos apresentados nas Figuras 39 e 51. Alterar esse volume de dissipação não altera o padrão de distribuição dos dados. De acordo com os resultados experimentais de Silva, Medronho e Barca (2019), a correlação entre o diâmetro máximo, utilizando d_{n90} , e a taxa de dissipação é descrita como $d_{max} \propto \bar{\epsilon}^{-0,42}$. Esses dados

abrangem taxas de dissipação elevadas, na escala inercial e com uma faixa muito mais ampla, variando entre $10000 < \varepsilon < 310000 \text{ W/kg (m}^2/\text{s}^3)$.

A Figura 33 apresenta a razão do diâmetro característico da distribuição, $D_{[4,3]}$, antes e após a passagem pela válvula MV-01, $D_{[4,3]a}$ e $D_{[4,3]d}$ respectivamente, obtida nos extratores EXT-02 e 03. Os resultados sugerem que a obstrução da válvula não altera significativamente o $D_{[4,3]}$, apresentando variações em torno de 1, indicando tanto quebra quanto coalescência.

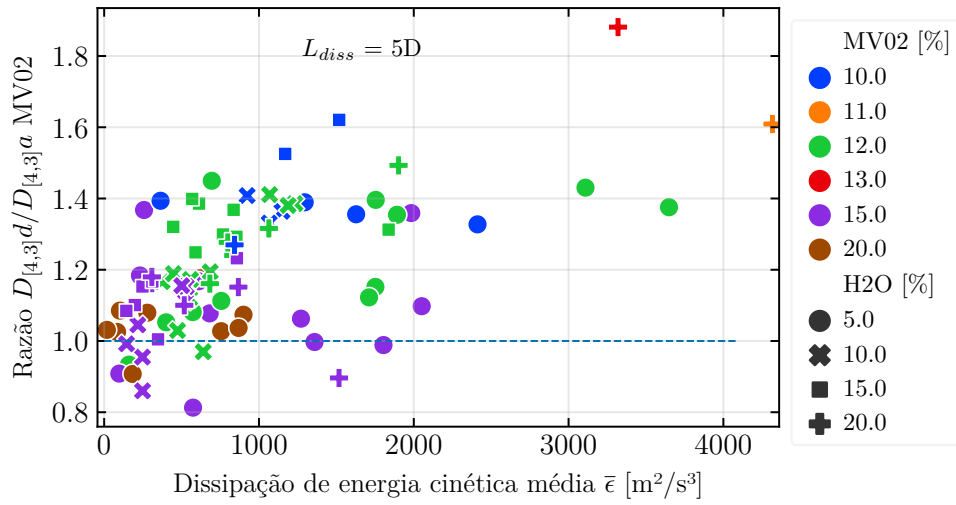
Figura 33 – Resultados experimentais para a razão de diâmetro $D_{[4,3]}$ antes e após a válvula MV-01. Marcadores: abertura da válvula MV-01 por cor, concentração de H2O por forma)



A variação do diâmetro médio ficou em torno da unidade, não apresenta correlação com Reynolds, Weber, taxa de dissipação de energia ou abertura de válvula. A maior parte dos experimentos não houve quebra na passagem pela válvula MV-01, mesmo explorando os limites de capacidade do circuito experimental.

Já a Figura 34 ilustra a razão do diâmetro característico da distribuição, $D_{[4,3]}$, obtido na amostra do extrator EXT-05 e 06, ou seja, antes e depois de passar pela obstrução da válvula MV-02. A válvula MV-02 é um bom coalescedor de gotas. A DTG chega à montante da válvula MV-02 com um diâmetro médio em média 25% maior do que a jusante da MV-01, o que contribui para uma maior taxa de coalescência, o que pode ser visto através da Tabela 7, onde $\overline{d_{v90}}$ é a média na concentração de fase dispersa. A Figura 35 apresenta os resultados do diâmetro médio d_{v90} depois da válvula MV-02 em função da dissipação de energia cinética média na válvula.

Figura 34 – Resultados experimentais de todos os testes da Tabela 3 para a razão de diâmetro $D_{[4,3]}$ antes e após a válvula MV-02.



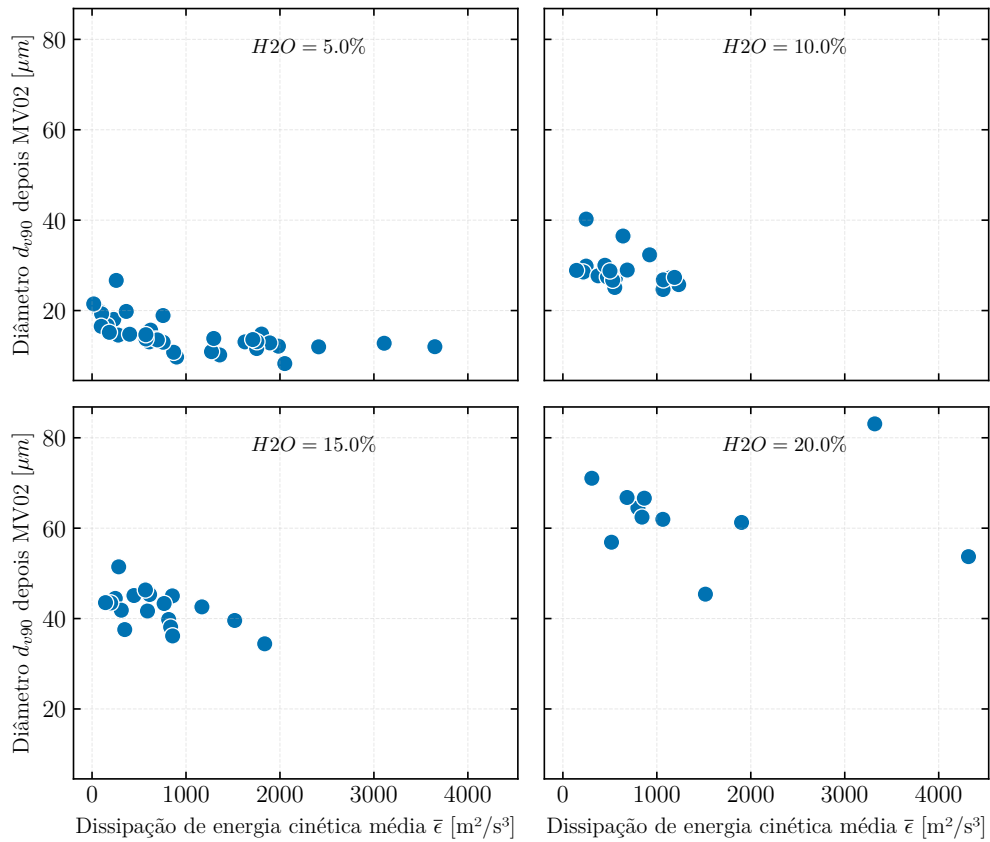
Fonte: Autor.

Tabela 7 – Diâmetro médio d_{v90} comparativo entre jusante da válvula MV-01 e montante da válvula MV-01.

H2O v/v %	MV-01 $\overline{d_{v90}d}$	MV-02 $\overline{d_{v90}a}$
5	10,9	14,5
10	22,2	28,8
15	29,3	42,2
20	38,5	63,1

Fonte: Autor.

Figura 35 – Resultados experimentais para o diâmetro d_{v90} após a válvula MV-02, todos os testes feitos da Tabela 3.



Fonte: Autor.

A razão de viscosidade μ_d/μ_c nos experimentos varia entre 0,007 e 0,008. Nesta faixa, GRACE† (1982) identificou que o número de capilaridade crítico, Eq. 4.4, em escoamentos cisalhantes simples (Couette) é aproximadamente $Ca_{crit} \approx 2$, enquanto em escoamentos extensionalmente irrotacionais, o valor crítico é cerca de $Ca_{crit} \approx 0,4$. Nos testes, o número de capilaridade, dado a partir da relação em 4.4, é avaliado para os diâmetros máximos a montante das válvulas (considerando $d_{max} = d_{v99}$). Para a válvula MV-01 o número de capilaridade máximo de cada teste ficou entre 0,25 e 1,0. Por outro lado, para a válvula MV-02, ficou entre 0,1 e 0,35, abaixo do crítico considerando os dois tipos de cisalhamento de fluido. O número de capilaridade máximo na MV-02 ainda é menor que o crítico diminuindo a intensidade da quebra, explicando o maior diâmetro das gotas gerado na MV-02. Na MV-01, os fenômenos de quebra e coalescência ocorrem em intensidades similares pouco afetando o diâmetro das gotas.

Um total de 31 testes que apresentaram redução no diâmetro médio $D_{[4,3]}$ estão listados na Tabela 8, R_{D43} é a razão entre o diâmetro $D_{[4,3]}$ a jusante e montante. Esses testes incluem diferentes frações volumétricas da fase dispersa e variadas aberturas de válvula, proporcionando uma ampla gama de DTGs para a avaliação dos modelos de quebra e coalescência de gotas.

Tabela 8 – Matriz de testes selecionados da linha principal com a configuração de abertura das válvulas MV-01 e MV-02.

Identificação do teste	H2O v/v %	Abertura MV-01 e MV-02 %	MV-01 R_{D43}
50A20W6	5	20	0,932
52A15W10	5	15	0,985
52A20W10	5	20	0,995
54A15W4	5	15	0,992
55A12W5	5	12	0,930
55A12W3	5	12	0,935
58A20W2	5	20	0,983
59A15W1	5	15	0,904
60A15W3	5	15	0,932
60A20W3	5	20	0,958
61A12W4	5	12	0,760
62A12W4	5	12	0,767
63A15W6	10	15	0,699
64A12W4	10	12	0,883
65A15W3	10	15	0,917
66A12W2	10	12	0,689
67A12W5	10	12	0,996
69A10W3	10	10	0,957
70A10W2	10	10	0,855
71A12W6	10	12	0,992
74A12W5	15	12	0,885
74A15W5	15	15	0,950
75A15W6	15	15	0,928
77A12W4	15	12	0,924
78A12W3	15	12	0,974
79A12W4	15	12	0,987
80A10W3	15	10	0,789
81A12W7	15	12	0,743
82A15W6	20	15	0,992
84A12W15	20	12	0,969
87A12W10	20	12	0,977

Fonte: Autor

Testes iniciais com modelos de quebra e coalescência de [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#), apresentaram taxa de quebra muito acima do observado experimentalmente, modelos desenvolvidos para o regime turbulento de dissipação de energia inercial superestimam a quebra observada no regime viscoso ou laminar, dito isso, uma análise da turbulência à jusante da válvula é realizada seguindo uma metodologia similar a de [Mitre et al. \(2014\)](#) com base no modelo espectral de turbulência descrito no trabalho do [Pope \(2000\)](#). O objetivo é situar os maiores diâmetros de gotas presentes na emulsão com relação às menores escalas de dissipação de energia turbulenta, a escala de Kolmogorov.

Nos trechos retos do circuito, o escoamento permaneceu laminar em todas as

rodadas experimentais. Contudo, após a restrição imposta pelas válvulas, é esperado que o comportamento laminar seja perturbado, gerando turbulência localizada imediatamente a jusante. Uma análise detalhada das escalas de turbulência, apresentada na Tabela 9, destaca os casos extremos de taxa de dissipação de energia, ϵ . A maior taxa de dissipação tende a ocorrer nas menores aberturas de válvula, 10%, e o inverso também é verdadeiro, nesse caso para uma abertura de 20%, porém para as aberturas mais baixas, o limite de operação do circuito impõe uma restrição na vazão e assim, a maior taxa de dissipação de energia observada foi para a abertura de 15% para a válvula MV-01.

Tabela 9 – Análise de escala de turbulência a jusante da válvula MV-01 e 02.

Variável	MV-01		MV-02	
	49A15W5	59A20W1	49A15W5	87A11W10
Weber	5	1	5	10
ϕ v/v [%]	5	5	5	20
MV-01 [%]	15	20	15	10
MV-02 [%]	15	20	15	10
ΔP 10^5 [Pa]	1,228	0,087	1,228	4,07
w [kg/min]	29,17	10,19	29,17	17,3
U [m/s]	1,62	0,567	1,62	0,97
U_{max} [m/s]	10,8	2,8	10,8	8,78
h [mm]	3,1	4,19	3,1	2,30
u' [m/s]	2,16	0,567	2,16	1,75
ϵ [m ² /s ³]	2187,88	54,59	1804,2	4317,1
k [m ² /s ²]	7,02	0,48	7,0	4,6
λ_k [μ m]	195,4	490,6	205,1	168,52
L_e [mm]	8,5	6,1	10,3	2,3
Re_{Le}	152,9	29	185,4	32,7
Re_λ	31,9	13,9	35,16	14,7
L_{11}/L_e [mm]	0,77	1,12	0,75	1,09
L_{11} [mm]	6,62	6,9	7,74	2,52
Re_T	97	26	113,8	29,2

Fonte: Autor

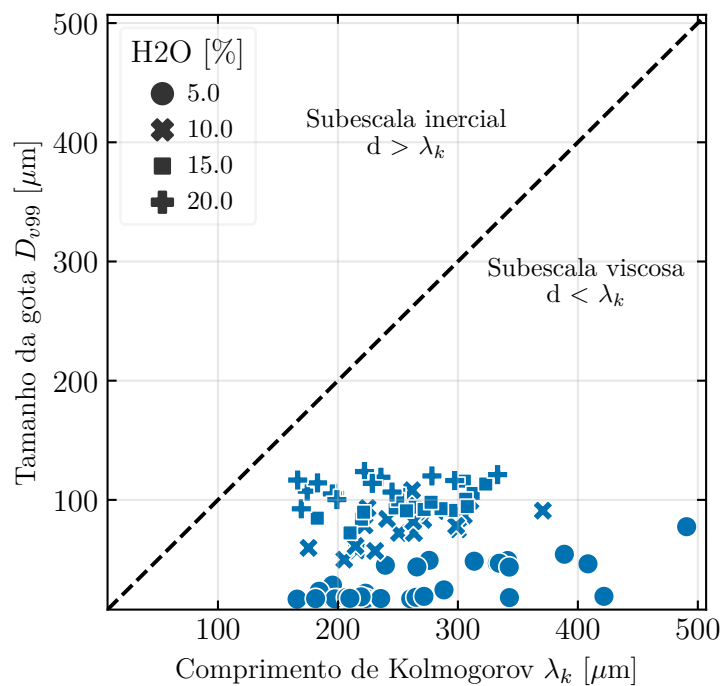
A variável h é a altura do orifício de passagem de fluido pela válvula, variando de 0 a D , proporcional à abertura da válvula. u' é a flutuação de velocidade estimada a jusante como sendo 20% da velocidade máxima do jato gerado pela restrição. Para um escoamento incompressível, podemos aproximar a velocidade máxima pela seguinte expressão:

$$U_{max} = U \frac{D^2}{h^2} \quad (6.4)$$

Sendo D o diâmetro da tubulação. Com base no modelo espectral de Pope (2000), se as gotas apresentam diâmetro menor do que o comprimento de Kolmogorov, λ_k [μ m], e o número de Reynolds de Taylor, Re_λ , é menor do que 30, isso tem várias implicações importantes. O número de Reynolds na escala de Taylor é um parâmetro que caracteriza

a intensidade da turbulência em relação aos efeitos viscosos. Valores baixos sugerem que os efeitos viscosos dominam, podendo existir quebra se o número de capilaridade for superior ao crítico, $Ca > Ca_{crit}$. As gotas estão em um regime onde a dissipação de energia é dominada pelos efeitos viscosos. Com as gotas menores do que o comprimento de Kolmogorov, que representa a menor escala de turbulência, onde a viscosidade domina, elas não são significativamente afetadas pelas flutuações turbulentas maiores. A Figura 36 ilustra o diâmetro máximo de gota, d_{v99} , presente na emulsão a jusante da válvula MV-01 pela escala de comprimento.

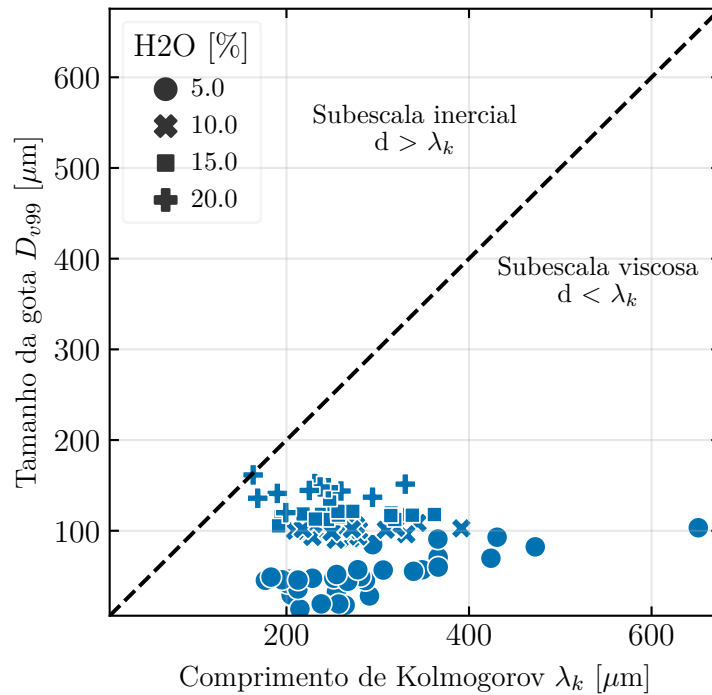
Figura 36 – Relação entre o maior diâmetro de gota presente na emulsão, $d_{max} = d_{v99}$, a jusante da válvula MV-01 e a escala de comprimento de Kolmogorov.



Fonte: Autor.

Um número de Reynolds na escala de Taylor menor do que 30 indica que o escoamento está em um regime de baixa turbulência. A subescala inercial realmente não existe na válvula MV-01, e o mesmo resultado é obtido na válvula MV-02, com um modesto deslocamento dos dados em direção à subescala inercial, como pode ser visto na Figura 37. Portanto, não existe a subescala inercial, o que implica a implementação de modelos desenvolvidos para a faixa de dissipação turbulenta.

Figura 37 – Relação entre o maior diâmetro de gota presente na emulsão, $d_{max} = d_{v99}$, a jusante da válvula MV-02 e a escala de comprimento de Kolmogorov.



Fonte: Autor.

6.2 Modelos de quebra e coalescência de Coualoglou e Tavlarides

Nesta subseção, será avaliada a implementação do modelo de Coualoglou e Tavlarides (CT). O modelo é aplicado às escalas inerciais de quebra e, portanto, já se espera que a taxa de quebra obtida apresente valores significativamente superiores aos observados experimentalmente. A modelagem é composta pelas equações de frequência de quebra (3.35), frequência de coalescência (3.58) e função de distribuição das gotas filhas (3.47), considerando quebra binária $\zeta = 2$.

Inicialmente, serão atribuídas constantes disponíveis na literatura para o modelo proposto, conforme detalhado na Tabela 10.

Tabela 10 – Constantes para o modelo de Coualoglou e Tavlarides.

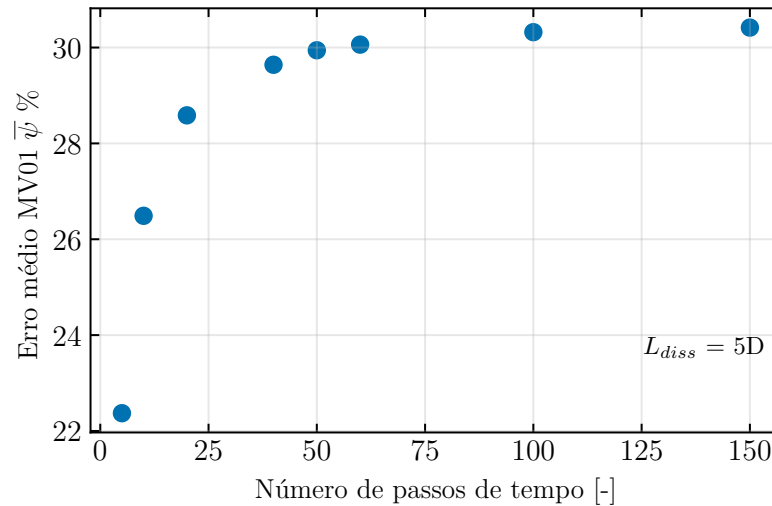
Referência	C_b	C_ϵ	C_c	C_e
CT 1977 (COULALOGLOU; TAVLARIDES, 1977)	0,4	0,08	2,8E-6	1,83E9
CT Liao (LIAO; LUCAS, 2009)	0,00481	0,08	2,8E-6	1,83E9

Fonte: Autor

Foram realizados testes de convergência da solução. A Figura 38 apresenta os resultados do cálculo do erro médio na MV-01 $\bar{\psi}$ para diferentes discretizações tempo-

rais da equação de balanço populacional. O refinamento do passo de tempo exibiu um comportamento assintótico, sendo que 100 passos de tempo foram suficientes para obter resultados numéricos independentes da discretização temporal.

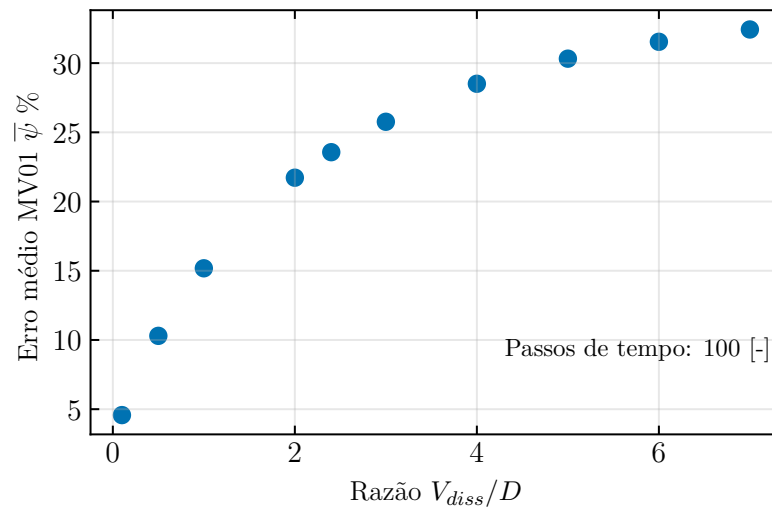
Figura 38 – Teste de convergência da solução em termos do erro médio, $\bar{\psi}$, para o modelo CT Liao.



Fonte: Autor.

De maneira semelhante, foi realizada uma avaliação da sensibilidade da resposta da simulação em relação ao parâmetro de comprimento de dissipação utilizando o modelo CT de Liao. A Figura 39 mostra o quão crítico é a determinação de V_{diss} , o comportamento quase assintótico se deve ao aumento do tempo de integração promovendo o equilíbrio entre a taxa de quebra e a taxa de coalescência. O erro crescente com o aumento de L_{diss} pode ser explicado pelo fato de que o aumento do volume de dissipação prolonga o tempo de residência das gotas, submetendo-as aos processos de quebra e coalescência alterando a DTG significativamente. Como o modelo de CT Liao, com as constantes avaliadas, prevê taxas de quebra muito superiores às observadas experimentalmente (como será discutido adiante), o erro aumenta proporcionalmente. Os testes de sensibilidade foram realizados utilizando 100 passos de tempo.

Figura 39 – Teste de sensibilidade da solução quanto ao parâmetro de comprimento de dissipação utilizando o modelo CT Liao.

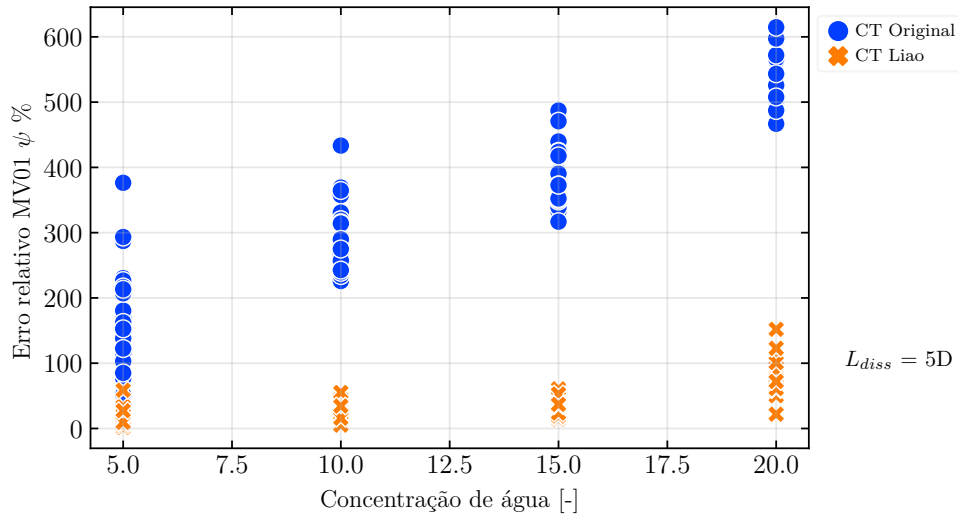


Fonte: Autor.

As estimativas de erro também tendem a crescer com o aumento da concentração da fase dispersa, como mostrado na Figura 40 para a válvula MV-01. Esse comportamento é semelhante e apresenta magnitude de erro próxima à obtida para a válvula MV-02. Com o aumento da concentração da fase dispersa ϕ , a taxa de coalescência prevista pelo modelo CT (3.58) aumenta, porém a taxa de quebra cresce de forma significativamente mais acentuada devido à relação proporcional ao fator $(1 + \phi)^2$. Isso resulta em estimativas de taxas de quebra excessivamente elevadas, não observadas experimentalmente, considerando os dados obtidos na escala de dissipação à jusante da válvula.

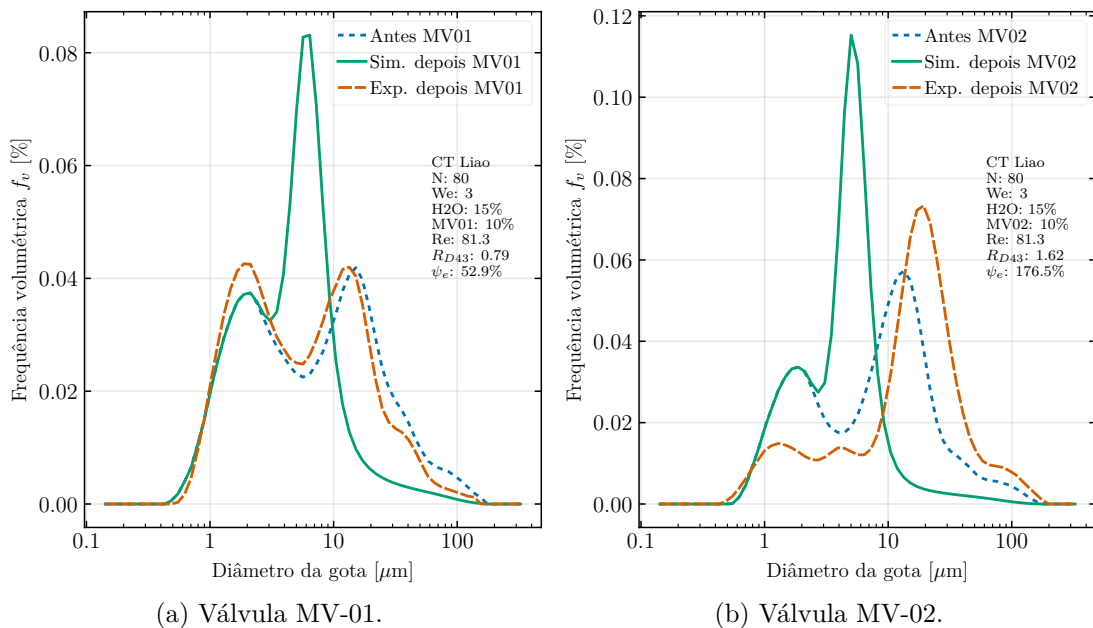
Um exemplo dos resultados obtidos pode ser observado nas Figuras 41a e 41b, referentes às válvulas MV-01 e MV-02, respectivamente, com 15% de água. A curva simulada é representada pela linha contínua verde, enquanto as curvas experimentais são indicadas pelas linhas tracejadas: tracejado curto azul para a montante e tracejado longo laranja para a DTG à jusante da válvula.

Figura 40 – Erro relativo de todos os testes da Tabela 3, ψ Eq. 5.6, para a DTG após a válvula MV-01.



Fonte: Autor.

Figura 41 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo CT Liao do teste 80A10W3, Tab. 8.



Fonte: Autor.

Assim, resumindo os resultados obtidos para os dois modelos em indicadores sintetizados, as Tabelas 11 e 12 apresentam uma comparação dos erros, expressos em porcentagem, para diferentes constantes do modelo aplicadas às válvulas MV-01 e MV-02, respectivamente. As colunas das tabelas estão organizadas em duas seções principais: CT Liao e CT Original. Como mencionado anteriormente, o modelo de quebra na subescala inercial não é adequado para a escala de dissipação de energia, onde essa subescala não

existe, resultando em uma distribuição muito menor do que a obtida fisicamente. A métrica \overline{Er} , Eq. 5.9, apresenta valores negativos, indicando que a distribuição simulada à jusante das válvulas está deslocada à esquerda dos resultados experimentais, ou seja, com redução do diâmetro médio. Esse deslocamento se intensifica com o aumento da concentração da fase dispersa, alcançando -47,5% no CT Liao para a MV-01 e -55,4% para a MV-02. Além disso, os erros relativos médios são maiores na válvula MV-02 do que na MV-01, o que se deve ao fato de o modelo não predizer satisfatoriamente o fenômeno de coalescência observado na segunda válvula.

Tabela 11 – Erro médio na MV-01 [%] para diferentes constantes do modelo.

ϕ % v/v	CT Liao			CT Original		
	$\overline{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %	$\overline{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %
5	9,6	58,6	-23,4	150,9	376,4	-50,6
10	28,5	55,2	-34,6	297,1	432,9	-71,8
15	32,5	60,7	-34,5	386,6	487,0	-75,6
20	81,8	151,9	-47,5	536,1	614,7	-85,1

Fonte: Autor

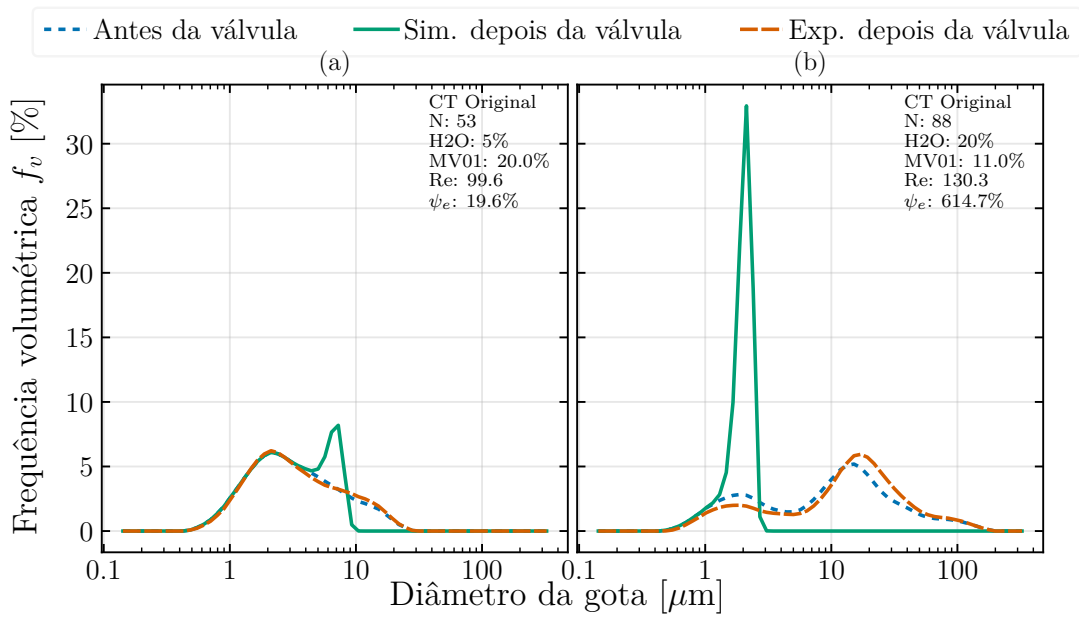
Tabela 12 – Erro médio na MV-02 [%] para diferentes constantes do modelo.

ϕ % v/v	CT Liao			CT Original		
	$\overline{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %	$\overline{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %
5	27,4	85,1	-31,8	229,5	457,9	-60,0
10	58,1	137,5	-42,2	393,8	486,4	-77,6
15	89,9	176,5	-49,3	473,2	504,2	-83,1
20	106,5	202,6	-55,4	574,0	637,3	-90,1

Fonte: Autor

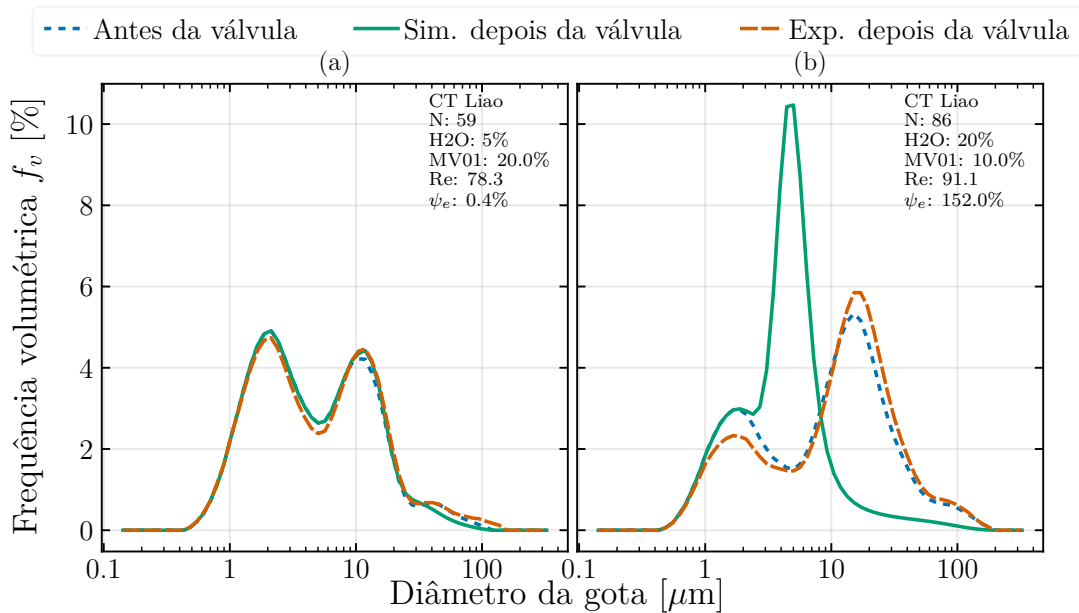
Por fim, as Figuras 42 e 43 apresentam a DTG predita para a válvula MV-01 pelos modelos CT Original e CT Liao, respectivamente. Os resultados indicam que a taxa de quebra prevista é muito superior à observada experimentalmente. A constante de quebra menor, relatada na revisão de Liao e Lucas (2009), forneceu resultados melhores, porém ainda não satisfatórios.

Figura 42 – DTG simulada após a válvula MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes de [Coulaloglou e Tavlarides \(1977\)](#).



Fonte: Autor.

Figura 43 – DTG simulada após a válvula MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes de [Liao e Lucas \(2009\)](#).



Fonte: Autor.

6.3 Otimização dos parâmetros dos modelos de quebra e coalescência de Coualoglou & Tavlarides

Um ajuste das constantes do modelo CT descrito na seção anterior é realizado pela implementação de um cálculo iterativo utilizando o método de otimização numérica global SHGO (Simplicial Homology Global Optimization), disponível no Python Scipy (VIRTANEN et al., 2020), para ajustar os parâmetros com os dados experimentais. A função objetivo minimiza o erro entre os resultados simulados e os experimentais através da média dada na Equação 5.4. Para cada conjunto de parâmetros testados, o método resolve o balanço populacional e retorna as métricas necessárias para a avaliação da função objetivo.

O método SHGO foi escolhido devido à sua capacidade de realizar uma busca global eficiente antes de refinar as soluções localmente, demonstrando ser uma abordagem eficaz para o ajuste global. A configuração incluiu a definição de 200 pontos iniciais de amostragem, com limites mínimo e máximo estabelecidos para as 4 constantes no intervalo entre 10^{-6} e 10^{11} , respectivamente. O método de amostragem inicial adotado foi a sequência de Sobol, que gera números quase aleatórios de baixa discrepância.

A otimização foi realizada apenas para a válvula MV-01, para cada um de 16 testes selecionados aleatoriamente, com 100 passos de tempo e comprimento de dissipação L_{diss} igual a 5 diâmetros. Nessas avaliações, o comprimento de dissipação foi mantido constante. Contudo, existem resultados, como os apontados por Mitre et al. (2014) e Guan, Yang e Nigam (2020), que indicam que o volume de dissipação dependente das propriedades do escoamento, incluindo a não homogeneidade da dissipação de energia, melhora a predição da simulação do balanço populacional.

As médias das constantes obtidas estão apresentadas na Tabela 13. Observou-se um aumento das constantes de quebra C_b e C_c da Equação 3.35, porém, como a taxa de quebra é inversamente proporcional a C_c e sua alteração foi de 5 ordens de magnitude, o efeito resultante foi a redução da taxa para todos os diâmetros das gotículas. Além disso, a taxa de coalescência apresentou um leve aumento, resultando em uma variação quase nula da concentração numérica das gotas ao longo do tempo de integração. Isso reduziu o erro médio das simulações na válvula MV-01, dado que, na maioria dos casos experimentais, foi observado pouca alteração no diâmetro médio, cerca de $\pm 20\%$ de variação.

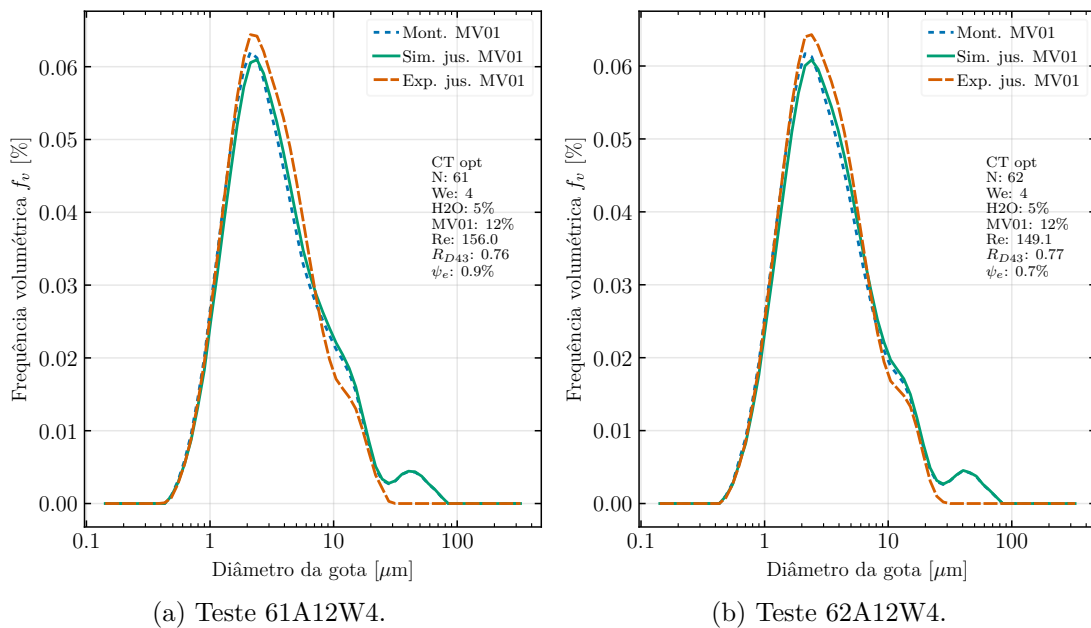
Tabela 13 – Comparativo das constantes otimizadas do modelo de Coualoglou e Tavlarides.

Referência	C_b	C_c	C_d	C_e
CT 1977 (COULALOGLOU; TAVLARIDES, 1977)	0,4	0,08	2,8E-6	1,83E9
CT Otimizado	3,6	1,4E3	1,8E-4	1,4E10

Fonte: Autor

A Figura 44 apresenta dois dos melhores resultados de simulação em casos onde houve redução do diâmetro médio das gotas na passagem pela MV-01. Os resultados simulados apresentam erros, ψ , inferiores a 1% em comparação à DTG obtida a jusante, com abertura de válvula de 12% para ambos os casos e uma redução do $D_{[4,3]}$ em aproximadamente 0,77. Esses dois casos referem-se a concentrações de água de 5%. Apesar de serem os melhores resultados, o modelo ajustado ainda não consegue prever adequadamente a quebra das gotas com diâmetro superior a 30 micras na passagem pela válvula.

Figura 44 – DTG simulada após as válvulas MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes otimizadas.



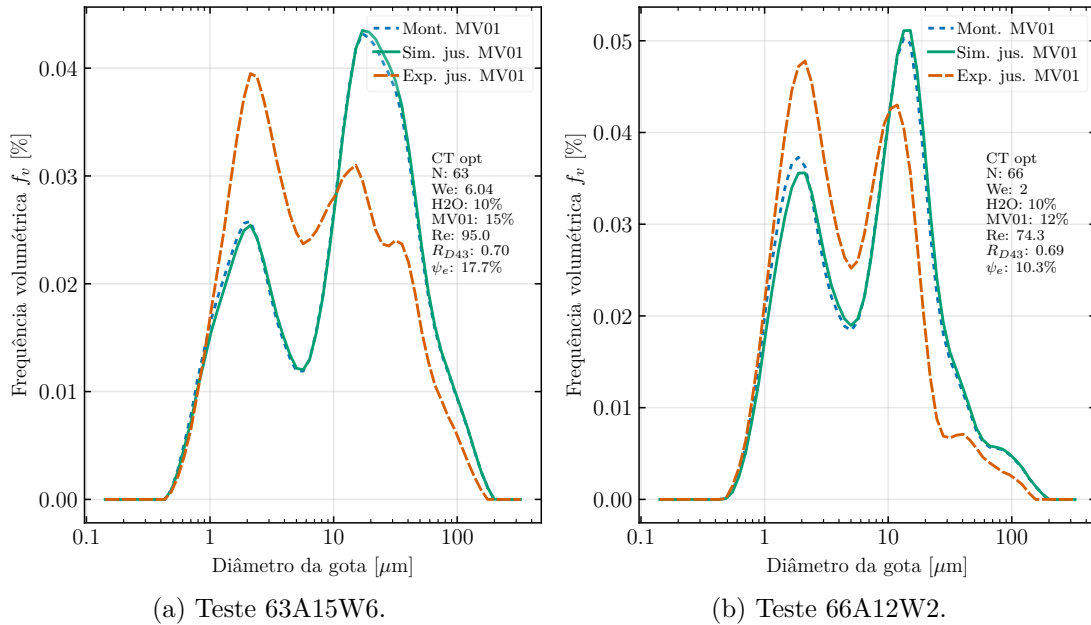
Fonte: Autor.

O resultado da Figura 44a é bastante similar ao apresentado na Figura 44b. Esses testes possuem uma diferença temporal de 5 dias entre suas realizações, tendo sido submetidos ao mesmo processo de homogeneização, com os mesmos parâmetros de número de Weber e abertura de válvula. A taxa de dissipação de energia também é muito próxima, com valores de 1915 e 1800 m^2/s^3 , respectivamente, apresentando uma diferença de aproximadamente 7%.

A Figura 45 ilustra dois dos piores resultados de simulação, que ocorreram nos casos com as maiores reduções do diâmetro médio das gotas na passagem pela MV-01. Nesses casos, os erros simulados, ψ , ultrapassam 10% em relação à DTG obtida a jusante, com redução do $D_{[4,3]}$ em aproximadamente 0,7, ambos referentes a concentrações de água de 10%. É importante ressaltar que, embora o erro ainda seja relativamente baixo quando comparado aos resultados do modelo anterior, a métrica de cálculo do erro e seu uso como função objetivo não se mostrou ideal. Isso ocorre porque a métrica não atribui maior peso

aos casos em que a DTG sofre mudanças significativas. Dessa forma, o uso de simulações com um único objetivo se revelou pouco adequado para esse fim.

Figura 45 – Pior resultado para a DTG predita após as válvulas MV-01 utilizando o modelo CT com as constantes otimizadas.

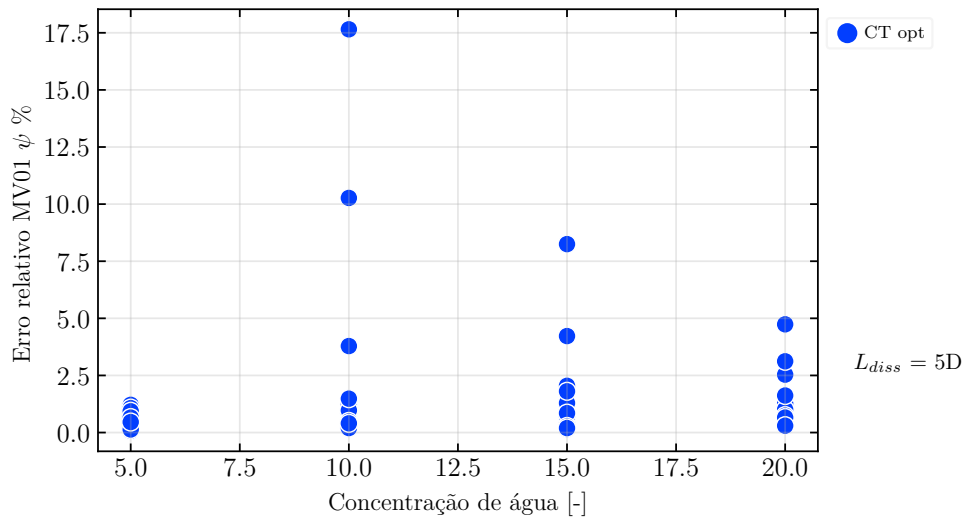


Fonte: Autor.

Sumarizando os resultados para as diferentes concentrações de água, a Figura 46 apresenta a distribuição do erro ψ em função da concentração de água para todos os testes na MV-01. Os erros obtidos são independentes da concentração da fase dispersa, mas dependentes da variação do diâmetro médio, uma vez que o modelo não consegue representar satisfatoriamente os casos com maior quebra de gotas. Esse comportamento pode ser atribuído ao fato de que, entre os 16 testes utilizados para otimização, apenas 3 apresentaram uma quebra significativa, redução do diâmetro médio das gotas. Esses casos resultaram em constantes de otimização muito distintas dos demais, mas não influenciaram significativamente as constantes médias calculadas para todos os testes, como mostrado na Tabela 13. Além disso, o modelo não incorpora ajustes que expliquem de forma consistente os resultados experimentais obtidos.

Para a válvula MV-02, um comparativo dos erros médio e máximo é apresentado na Tabela 14. Os erros médios obtidos são, em média, 10 vezes superiores aos da MV-01, devido à observação de intensa coalescência, que o modelo otimizado não consegue prever satisfatoriamente, uma vez que a otimização foi realizada exclusivamente para a válvula MV-01. Para reduzir os erros de simulação na MV-02 a valores próximos aos obtidos na MV-01, o parâmetro de coalescência C_c precisaria ser ajustado para $C_c = 10^{-2}$, em vez de $1,8 \times 10^{-4}$, devido à significativa coalescência observada em todos os testes. Na MV-02, o

Figura 46 – Erro relativo, ψ , na MV-01 para diferentes concentrações utilizando os parâmetros otimizados.



Fonte: Autor.

erro mostra forte dependência da concentração volumétrica, alcançando até 45% de erro máximo para frações volumétricas de água próximas a 20%.

Tabela 14 – Erro na predição da DTG para válvula MV-01 e MV-02 em diferentes frações de fase dispersa do modelo CT com constantes otimizadas.

ϕ % v/v	CT Otimizado MV-01			CT Otimizado MV-02		
	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %
5	0,4	1,2	2,1	4,1	14,9	-9,6
10	2,1	17,6	6,6	4,7	13,5	-10,5
15	1,4	8,2	6,2	8,4	24,9	-17,8
20	1,3	4,8	-2,1	11,1	44,8	-18,3

Fonte: Autor

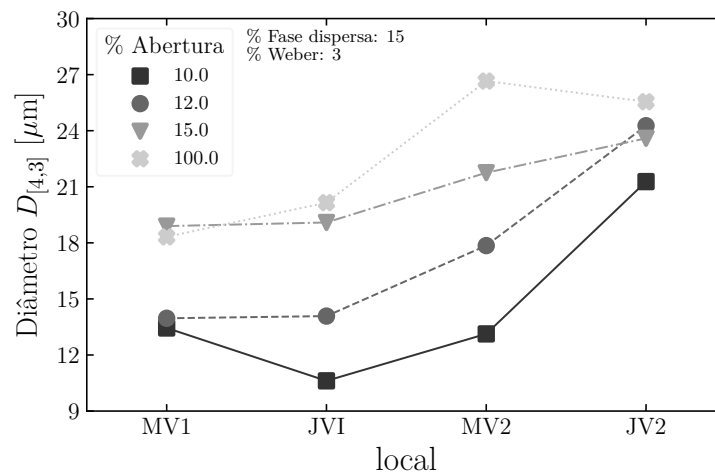
As gotas coalescem ao longo da linha de escoamento, chegando à válvula MV-02 com diâmetros maiores do que os observados a montante da MV-01. Isso pode ser constatado na Figura 47 e na Figura 48. Embora gotas maiores possam favorecer uma maior redução do diâmetro médio pela quebra, a coalescência predominante foi observada. A Figura 47 apresenta os valores de diâmetro médio medidos a montante e jusante das válvulas MV-01 e MV-02. Foi identificado que, nos casos com menor abertura de válvula, ocorre maior coalescência a jusante da válvula MV-02. Comparando os resultados entre JV1 (jusante da MV-01) e MV2 (montante da MV-02), observa-se em todos os testes que há coalescência significativa ao longo da linha de escoamento.

Esses resultados sugerem que a taxa de dissipação de energia na válvula MV-02

pode ser mais baixa do que na MV-01 e/ou que o método de extração tenha exercido uma influência significativa nos resultados experimentais. Apesar dos dispositivos extratores terem sido testados e verificados para garantir uma velocidade de escoamento inferior à da linha principal, esses fatores ainda podem ter contribuído para as discrepâncias observadas. Essas constatações indicam a necessidade de investigações e análises adicionais para uma melhor compreensão dos resultados.

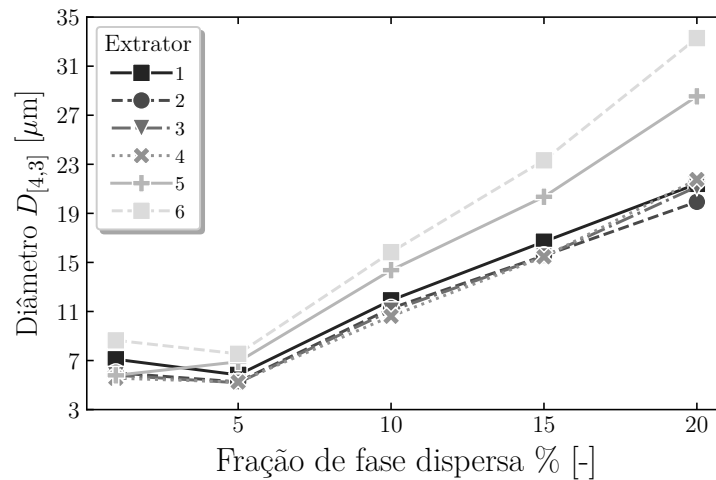
A Figura 48 apresenta o diâmetro médio das gotas em função da fração de fase dispersa e dos locais de extração ao longo do circuito. O ponto 1 está mais próximo do vaso de pressão (reservatório inferior), enquanto o ponto 6 representa o final do circuito, no reservatório superior. Observa-se uma tendência de aumento do diâmetro médio com o aumento da fração de fase dispersa, o que era esperado. Além disso, nota-se um maior deslocamento vertical das curvas para frações mais elevadas de fase dispersa. Os extratores 5 e 6, localizados a montante e jusante da válvula MV-02, já no fim do circuito, apresentam os maiores diâmetros médios, evidenciando a ocorrência de coalescência ao longo do escoamento.

Figura 47 – Média do diâmetro médio $D_{[4,3]}$ experimental para todos os testes com fase dispersa 15% e Weber de 3. MV1: montante da válvula MV-01 e JV1, jusante da válvula MV-01.



Fonte: Autor.

Figura 48 – Média do diâmetro médio $D_{[4,3]}$ experimental para todos os testes realizados na linha principal em cada extrator. Montante e jusante da válvula MV-01, extrator 2 e 3. Montante e jusante da MV-02, extrator 5 e 6.



Fonte: Autor.

6.4 Modelos de quebra e coalescência de Mitre

Tendo em vista os resultados dos modelos de quebra na subescala inercial, esta seção discutirá os resultados obtidos pela aplicação de uma modelagem para a subescala viscosa.

A implementação dos modelos de quebra e coalescência com as constantes originais de Mitre foi realizada utilizando dois cenários para a eficiência de coalescência: uma eficiência constante ($\lambda = 1$, CCE), representada pela Equação 3.61, e uma eficiência modelada para interfaces móveis (CEM), conforme a Equação 3.65. O modelo de quebra foi mantido o mesmo para ambas as abordagens de coalescência, sendo definido pela Equação 3.44. Para a aplicação dos modelos, foram consideradas duas abordagens distintas, conforme discutido por Mitre et al. (2014), que se diferenciam na forma de estimativa dos parâmetros por meio de otimização. Essas abordagens são descritas a seguir:

- S1: Os erros experimentais nas variáveis explicativas não são considerados.
- S3: Os erros experimentais nas variáveis explicativas são considerados e o volume de dissipação é estimado (variável explicativa).

Há ainda uma terceira abordagem, S2, que considera as variáveis explicativas com volume de dissipação constante. Contudo, esta abordagem não será considerada, pois os valores médios obtidos são próximos ao modelo CCE da abordagem S1. A principal diferença observada no S2 está nos intervalos de confiança, que são cerca de 10 vezes maiores devido à presença de erros nas variáveis explicativas. Já na abordagem S3, os

intervalos de confiança são significativamente menores, uma vez que os valores otimizados para o volume de dissipação foram considerados, resultando em maior precisão (MITRE et al., 2014).

Para esse trabalho, como a região de escoamento da válvula difere de um retângulo, como pode ser visto na modelagem CAD da Figura 49, formando uma lúnula ou meia-lua, o Reynolds máximo é definido como sendo:

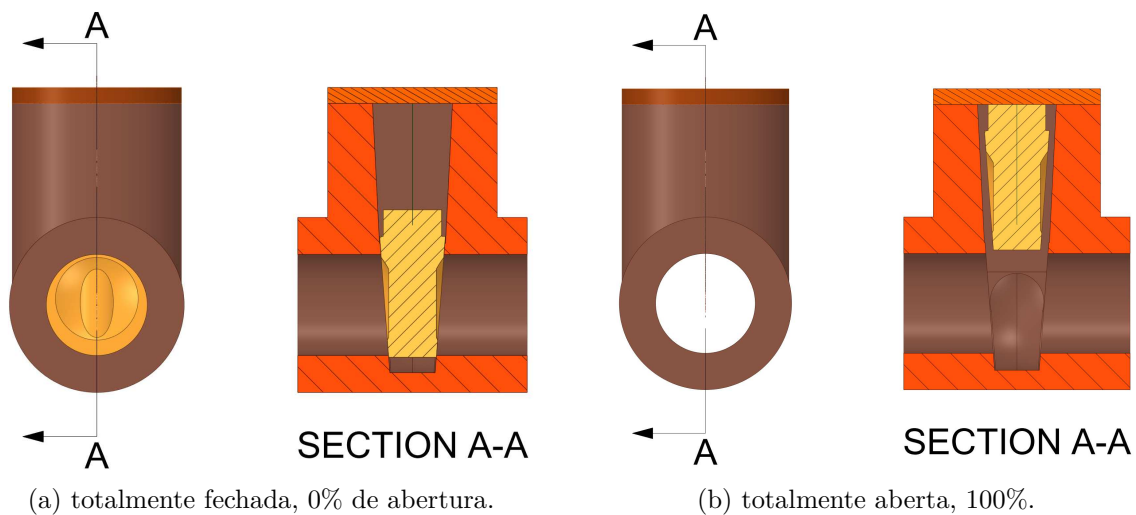
$$Re_{max} = \frac{VD_h}{\nu_e} = \frac{4Q}{\nu_e P} \quad (6.5)$$

onde D_h é o diâmetro hidráulico da abertura da válvula e P é o perímetro da região de passagem de fluido, ou seja, a área formada na intersecção do círculo no diâmetro da tubulação e a área do obturador da válvula. Aproximando a região do obturador da válvula gaveta para o mesmo diâmetro interno da válvula, D , o perímetro pode ser facilmente obtido por geometria analítica como sendo:

$$P = \pi D - 2D \arccos(A_b) \quad (6.6)$$

sendo A_b a abertura percentual da válvula, variando de 0 a 1 (100%). Quando a abertura de válvula é 0, o perímetro é 0, quando a abertura é 100%, $\arccos(1) = 0$ e o perímetro equivale a πD .

Figura 49 – Vista frontal e de seção de corte de uma modelagem da válvula gaveta 3/4 polegadas utilizada no circuito.



Fonte: Autor.

Como mencionado, os parâmetros de S3 utilizaram as estimativas do volume de dissipação da válvula fornecidas pelo algoritmo de otimização realizado por Mitre et al. (2014). Em vez de aproximar o volume de dissipação por um modelo, como o da Equação 5.2, as constantes são obtidas através de uma otimização desse volume, de forma que o erro da simulação em relação aos dados experimentais seja minimizado. Os dados originais

estão dispostos na Tabela 15. Entre os parâmetros aplicados, a quantidade de gotas gerada na quebra, ς , variou entre 26 e 32,7.

Tabela 15 – Constantes originais do modelo de Mitre sem intervalo de confiança.

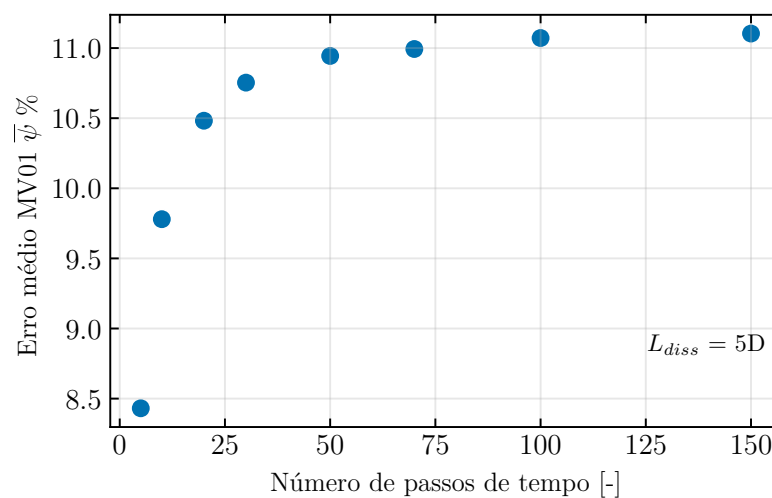
Modelo	$10^2 C_b$	$10^2 C_c$	$10^2 C_e$	ς
Mitre CCE S1	0,98	1,0	-	26,0
Mitre CCE S3	1,08	1,88	-	32,7
Mitre CEM S1	0,81	0,9	1,0	31,2

Fonte: Mitre et al. (2014)

De modo similar, foram realizados testes de convergência da solução. A Figura 50 apresenta os resultados do cálculo do erro médio na MV-01, $\bar{\psi}$. Observa-se um comportamento assintótico no refinamento do passo de tempo, sendo que 100 passos de tempo são suficientes para obter um resultado numérico independente da discretização temporal.

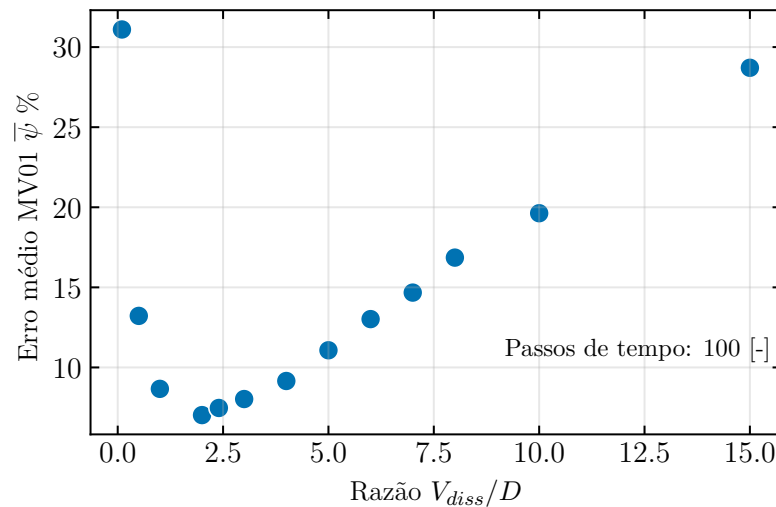
Na avaliação da sensibilidade da resposta da simulação em relação ao parâmetro de comprimento de dissipação, apresentada na Figura 51, observa-se um mínimo em torno de 2,4. Similar ao comportamento previamente analisado, o aumento do erro pode ser explicado pelo maior volume de dissipação, que aumenta o tempo de residência das gotas e conseqüentemente avanço temporal da quebra e coalescência das gotas. Esse fenômeno provoca uma quebra mais intensa do que a observada experimentalmente. Para os resultados do teste de sensibilidade, foi utilizada uma discretização com 100 passos de tempo.

Figura 50 – Teste de convergência da solução em termos do erro médio, $\bar{\psi}$, para o modelo do Mitre.



Fonte: Autor.

Figura 51 – Teste de sensibilidade da solução quanto ao parâmetro de comprimento de dissipação utilizando o modelo do Mitre na MV-01.

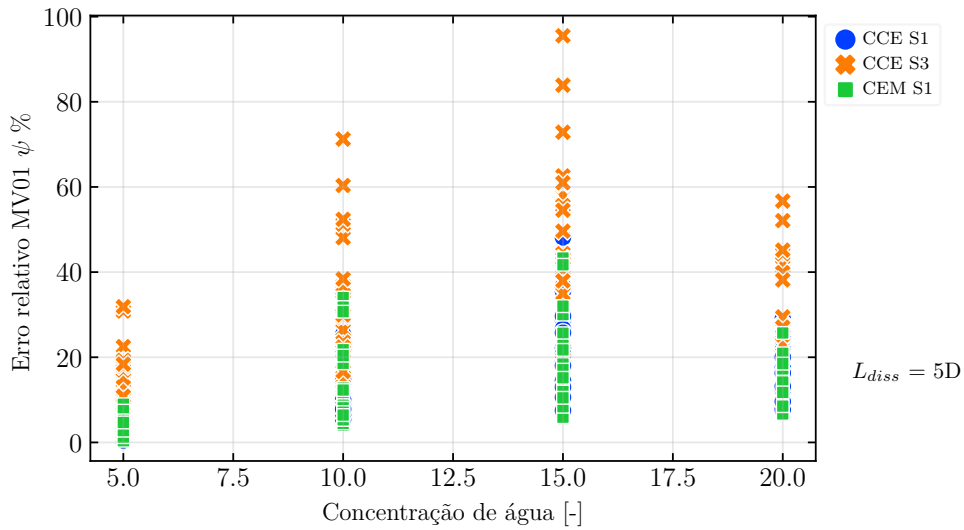


Fonte: Autor.

A Figura 52 apresenta os erros relativos dos modelos na predição da DTG para a válvula MV-01, considerando diferentes constantes para todos os testes experimentais válidos. O modelo com os parâmetros de CCE S3 apresenta o pior desempenho em comparação aos demais, o que pode ser atribuído ao valor mais elevado da constante do modelo de frequência de colisão entre gotas (C_c), de 0,0188. Por outro lado, a Figura 53 ilustra os erros relativos dos modelos na predição da DTG para a válvula MV-02. Em geral, os erros são menores na MV-02 do que na MV-01, exceto para casos com concentração de água de 20%.

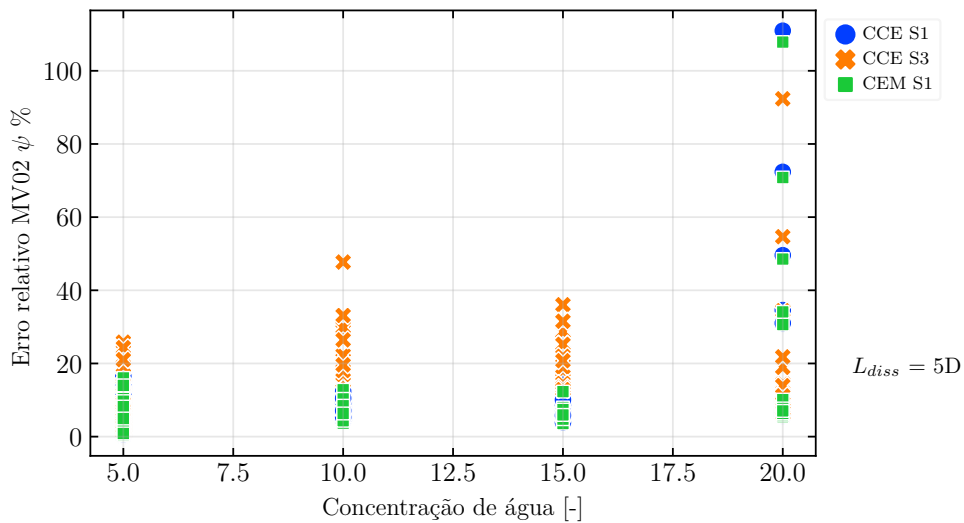
No caso da MV-02, Figura 53, os modelos aplicados conseguem prever a coalescência observada experimentalmente, o que explica os erros mais baixos em comparação à MV-01. Contudo, em casos específicos com 20% de água, o desempenho do modelo CCE S3 também é inferior, pois a coalescência experimentalmente observada é maior do que a DTG simulada pelos modelos, resultando em uma razão $D_{[4,3]}$ de até 1,8, não reproduzida de forma adequada.

Figura 52 – Erro relativo ψ na MV-01 para diferentes concentrações utilizando os parâmetros otimizados por Mitre et al. (2014).



Fonte: Autor.

Figura 53 – Erro relativo ψ na MV-02 para diferentes concentrações utilizando os parâmetros otimizados por Mitre et al. (2014).



Fonte: Autor.

A Tabela 16 resume os erros dos modelos na predição da DTG na MV-01 em indicadores sintetizados. Ela apresenta uma comparação dos erros para diferentes constantes do modelo, expressos em porcentagem. As colunas da tabela são organizadas em três seções principais, cada uma representando diferentes constantes dos modelos.

Tabela 16 – Erro médio [%] para diferentes constantes do modelo na MV-01.

ϕ % v/v	CCE S1			CCE S3			CEM S1		
	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\bar{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\bar{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\bar{Er} %
5	3,4	10,8	12,2	10,3	31,9	29,4	2,8	8,8	10,8
10	15,9	36,2	15,6	36,5	71,2	50,5	13,7	34,1	13,1
15	23,0	48,1	24,1	53,4	95,5	70,7	21,0	43,3	22,7
20	16,8	29,0	1,7	37,0	56,7	31,4	15,2	25,7	-0,4

Fonte: Autor.

O modelo CCE S3, como mencionado anteriormente, apresenta um erro relativo elevado e um valor positivo maior para o erro médio ($Er\%$) do diâmetro $D_{[4,3]}$, o que indica que ele superestima a coalescência entre as gotas. Por outro lado, o modelo CCE S1, que não leva em consideração os erros experimentais nas variáveis explicativas (como volume de dissipação de energia, vazão, queda de pressão, distribuição de gotas e temperatura média), apresenta erros médios e máximos ($\psi\%$ e $\psi_{max}\%$) mais baixos em comparação ao CCE S3. No entanto, o modelo CEM, que utiliza uma modelagem da eficiência de coalescência e assume que a superfície das gotas é deformável, com o filme interfacial sendo drenado de forma parcialmente móvel, supera o modelo CCE. Este último, por sua vez, assume uma interface imóvel.

A Tabela 17 resume os erros dos modelos na predição da DTG na válvula MV-02. Assim como na válvula MV-01, o modelo CEM apresentou em média melhores resultados para as predições. Os erros médios negativos indicam que os modelos subestimam a coalescência observada experimentalmente, principalmente para a concentração de 20% de água. Para as concentrações de 10 e 15% de água, os resultados do modelo CEM S1 são melhores para a válvula MV-02 do que para a MV-01, sem apresentar um aumento monotônico dos erros com o aumento da concentração de água. Os erros maiores para a concentração de 20% podem ser explicados pelo fato de o modelo subestimar o efeito positivo da taxa de coalescência com o aumento da concentração da fase dispersa. Esse efeito foi observado experimentalmente pela dificuldade de manter a homogeneidade da emulsão nessa concentração.

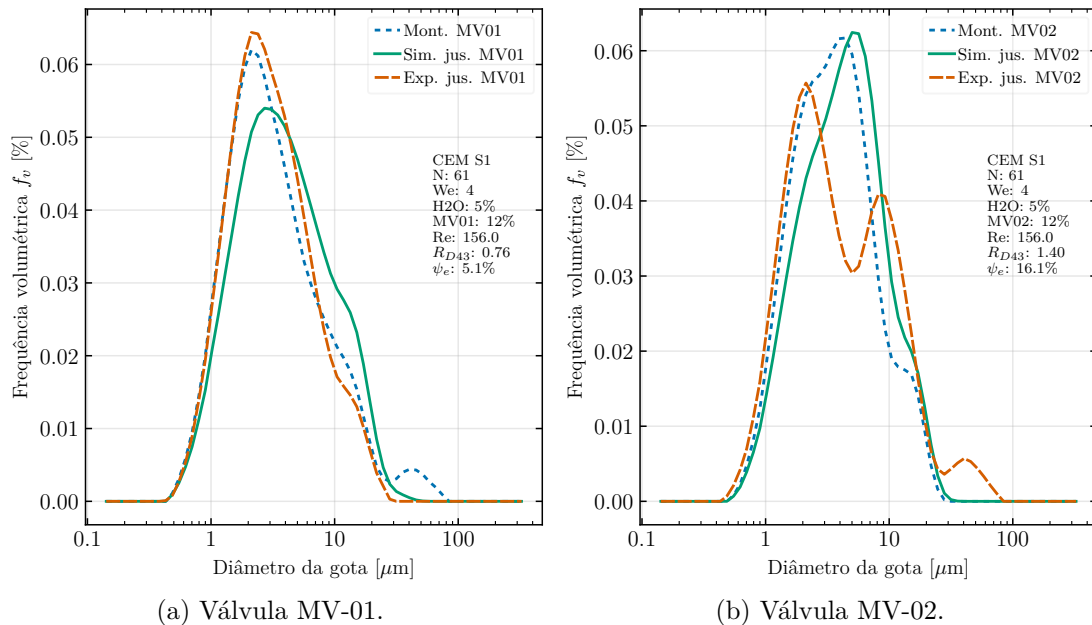
Tabela 17 – Erro médio [%] para diferentes constantes do modelo na MV-02.

ϕ % v/v	CCE S1			CCE S3			CEM S1		
	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %
5	5,4	16,5	-2,6	9,5	25,81	10,5	5,0	16,05	-3,5
10	7,6	12,4	-5,7	22,9	47,7	19,8	6,8	12,8	-7,1
15	7,2	14,5	-5,9	22,1	36,1	23,0	6,2	12,3	-8,3
20	27,3	110,9	-28,8	23,2	92,3	-13,6	26,9	107,8	-29,8

Fonte: Autor.

O modelo CEM consegue prever satisfatoriamente a quebra das gotas acima de 30 micras na passagem pela válvula MV-01, como pode ser visto na Figura 54a, utilizando o modelo CEM S1. Embora nem todos os casos experimentais resultem em uma fração de volume de uma dada classe que vá para zero, os modelos preveem uma redução significativa na faixa de 30 micras. No entanto, como mostrado na Figura 54b para uma concentração de 5% de água, a coalescência observada após a válvula MV-02 é DTG simulada pelo modelo, dado que ocorre um deslocamento para a direita da linha contínua verde, mas a coalescência para as gotas maiores que 30 micras não é adequadamente prevista.

Figura 54 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM S1 do teste 61A12W4 com 5% de água.

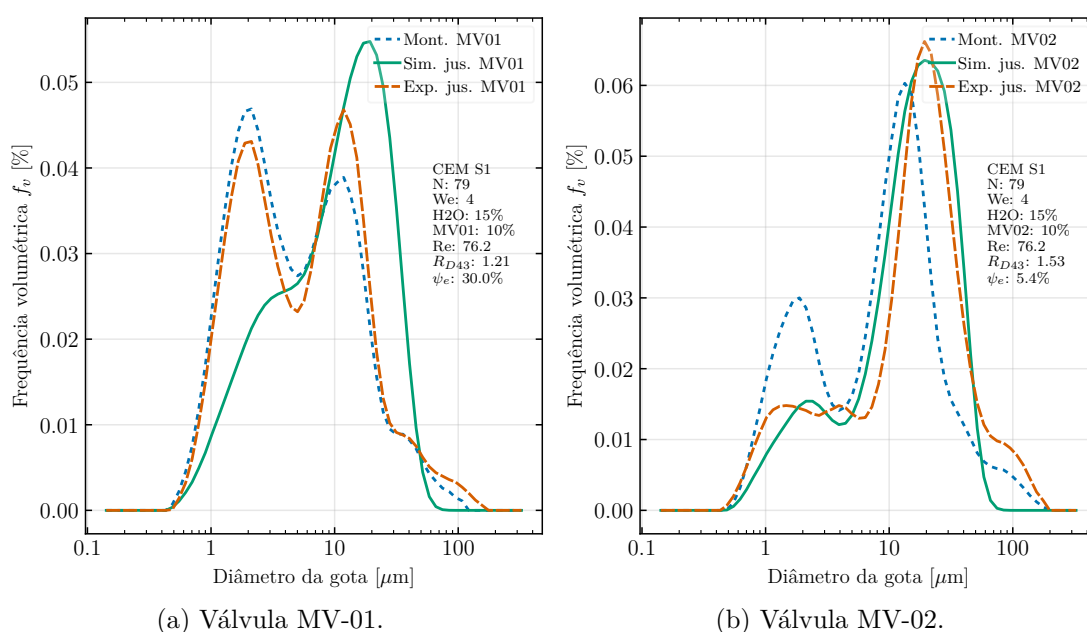


Fonte: Autor.

Aumentando a concentração de fase dispersa aumenta o diâmetro máximo que a simulação prediz, na qual, para 15% de água, o modelo prevê uma coalescência ainda maior que não é observada na válvula MV-01, como pode ser exemplificado pela Figura

55a. Esse fato contribui para que o erro Er aumente na válvula MV-01 com o aumento da concentração de água exceto para 20%. Já para a válvula MV-02, como pode ser visto na Figura 55b, a coalescência observada é melhor capturada pelo modelo nessa faixa de concentração de água, porém, a quebra inexistente das gotas maiores é uma predição de todas as simulações para essa concentração. Os resultados simulados na válvula MV-02 apresentam melhor concordância com os dados experimentais, mas possui a limitação de não prever segundos picos de frequência ou picos de gotas grandes, como mostrado nas Figuras 54b e 55b.

Figura 55 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM S1 do teste 79A10W4 com 15% de água.



Fonte: Autor.

A estabilidade da emulsão óleo em água pela presença de surfactantes não iônicos foi investigada por Liu et al. (2017). Nesse estudo, o autor utilizou o surfactante não iônico Tween 80, enquanto o presente trabalho utilizou o Triton X-114, também um surfactante não iônico, mas em um sistema água em óleo. Liu et al. (2017) sugere que o aumento da frequência de ruptura pode ser causado por uma redução dramática da tensão interfacial e pela supressão da eficiência de coalescência devido a uma interface imobilizada, resultante da atuação dos surfactantes.

Os resultados deste trabalho indicam que o modelo de interface parcialmente móvel (CEM) tem desempenho superior, em comparação com os modelos de interface imóvel (CCE). No entanto, Liu recomenda o uso do modelo de interface parcialmente móvel para concentrações de surfactante abaixo da concentração micelar crítica (CMC) e o modelo de interface imóvel para concentrações acima da CMC, pois ambos os modelos mostraram

boa concordância com as distribuições de tamanho de gota (DTGs) medidas em todas as concentrações de surfactante testadas.

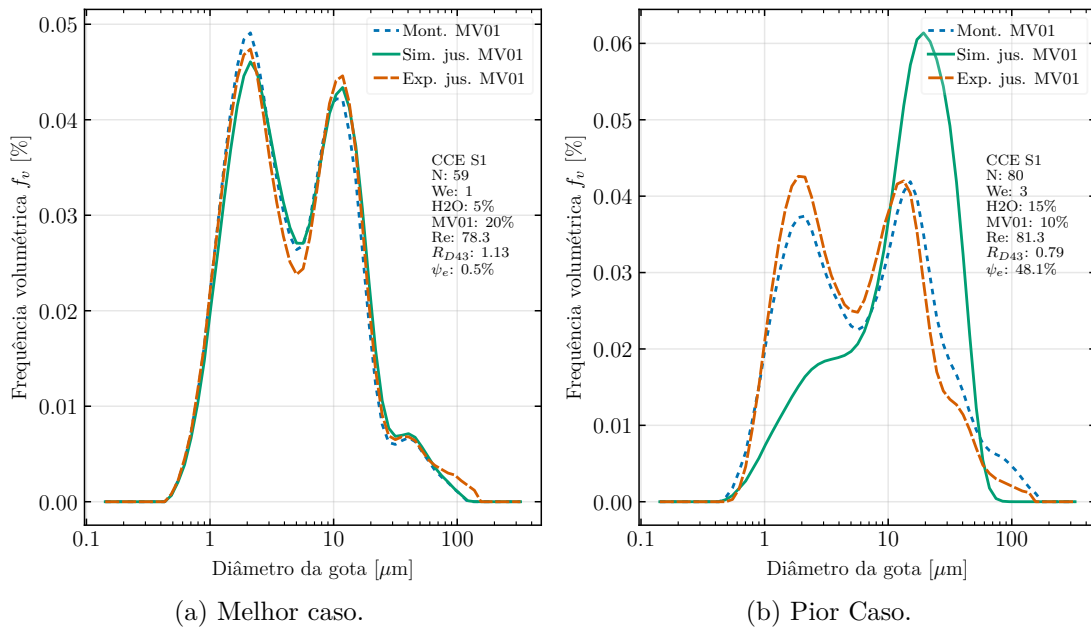
Em resumo, os resultados sugerem que o modelo CEM apresenta um desempenho superior em termos de erros médios e máximos, para as duas válvulas em comparação com os modelos CCE S1 e CCE S3. Isso pode ser atribuído à capacidade do modelo de considerar a deformação da superfície das gotas e a drenagem parcial do filme interfacial, o que é fundamental em sistemas emulsificados com surfactantes.

A dificuldade dos modelos de quebra e coalescência em lidar com a concentração e viscosidade da fase dispersa foi destacada em [Hohl, Röhl e Kraume \(2023\)](#), que sublinha a complexidade de modelar a distribuição de gotas geradas pela quebra. Nesse estudo, foi utilizado um modelo de quebra uniforme, em que todas as gotas filhas são iguais, gerando aproximadamente 30 gotas. As estimativas de erro foram menores para baixas concentrações da fase dispersa. Além disso, o modelo aplicado ao regime de quebra viscosa subestima menos o impacto causado pela concentração volumétrica do que outros modelos testados.

A aplicação de modelos de regime de turbulência inercial tende a apresentar erros crescentes à medida que a concentração volumétrica aumenta. Uma otimização numérica para minimizar os erros desses modelos resultou em frequências de quebra com 5 ordens de magnitude abaixo do que era originalmente previsto.

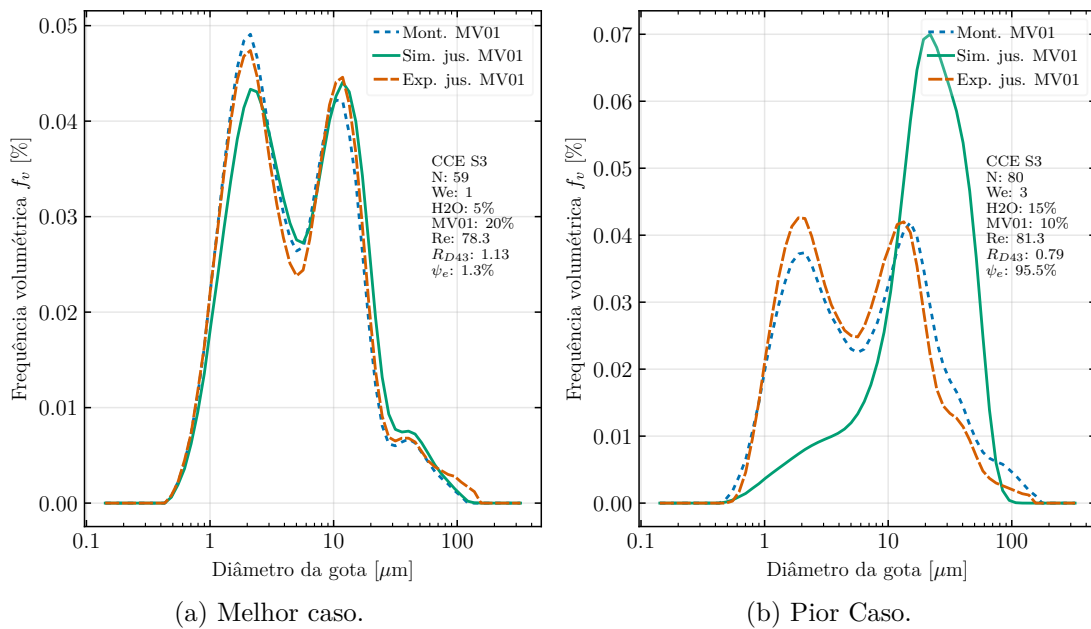
A Figura 56 apresenta as curvas de DTG, destacando tanto o melhor quanto o pior caso do modelo CCE S1. A Figura 57 ilustra os exemplos dos melhores e piores casos do modelo CCE S3. Já a Figura 58 mostra o melhor e o pior caso do modelo CEM S1, permitindo uma comparação visual dos resultados. É evidente que, embora os melhores e piores casos de cada modelo variem, os resultados para esses casos são muito similares, o que sugere que os modelos são relativamente consistentes em suas previsões.

Figura 56 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o modelo CCE S1.



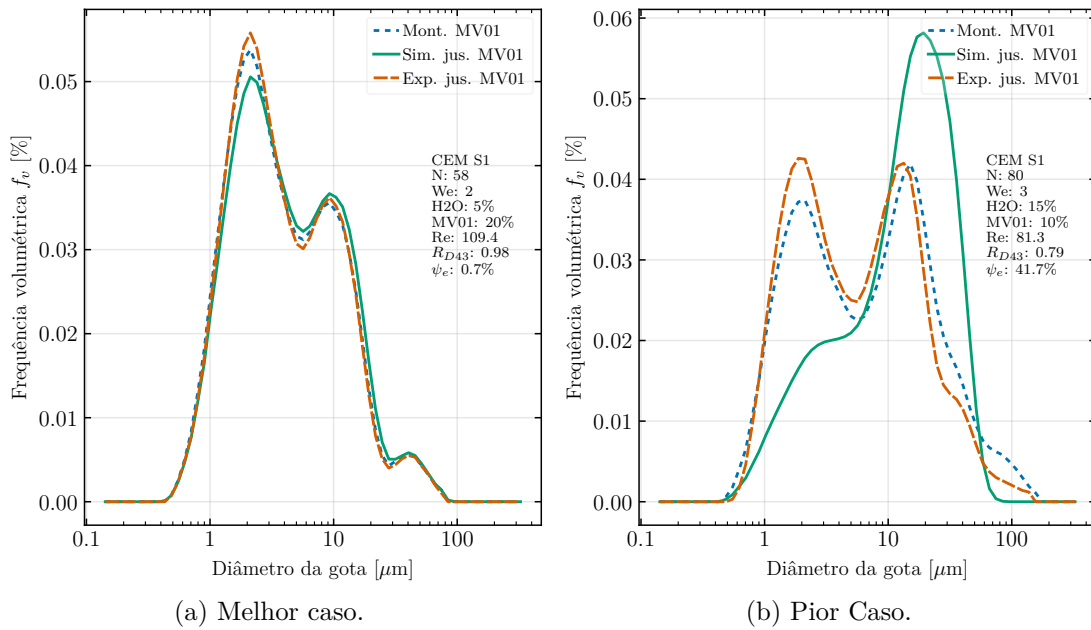
Fonte: Autor.

Figura 57 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o modelo CCE S3.



Fonte: Autor.

Figura 58 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o modelo CEM S1.



Fonte: Autor.

As Figuras 59 e 60 apresentam casos em que há majoritariamente quebra de gotas na passagem pela válvula MV-01. O parâmetro R_{D43} ajuda a verificar essa quebra, sendo a razão entre o diâmetro médio de jusante e o de montante, com um valor de 0,7. Nesse caso, com uma concentração volumétrica de 10%, o erro da simulação da evolução da DTG é de 34% e 31%, respectivamente, quando comparada à correlação entre a distribuição de jusante e a simulação (linha contínua verde). Esse resultado demonstra que os parâmetros de quebra e coalescência estão desbalanceados para a emulsão desse trabalho.

Figura 59 – DTG simulada na MV-01, teste 63A10W6.

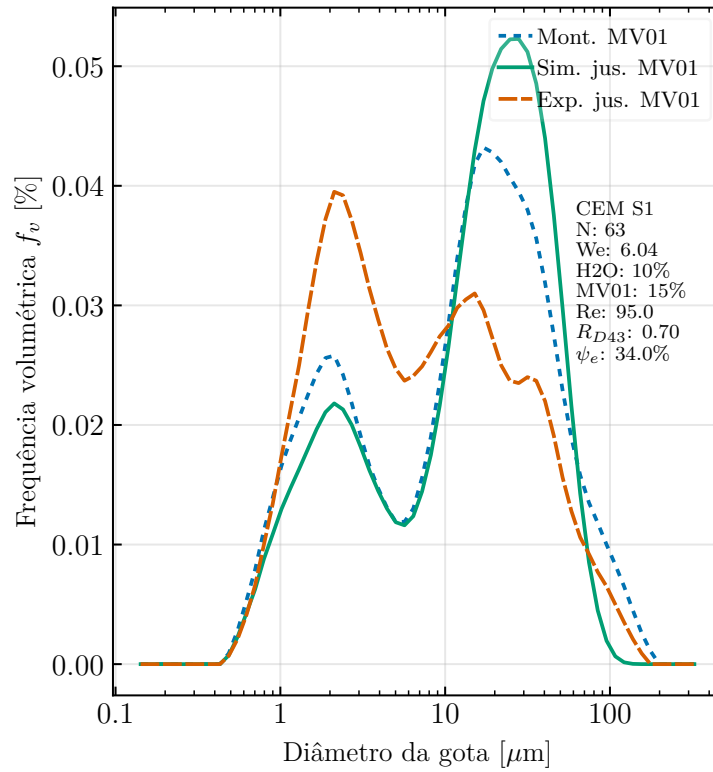
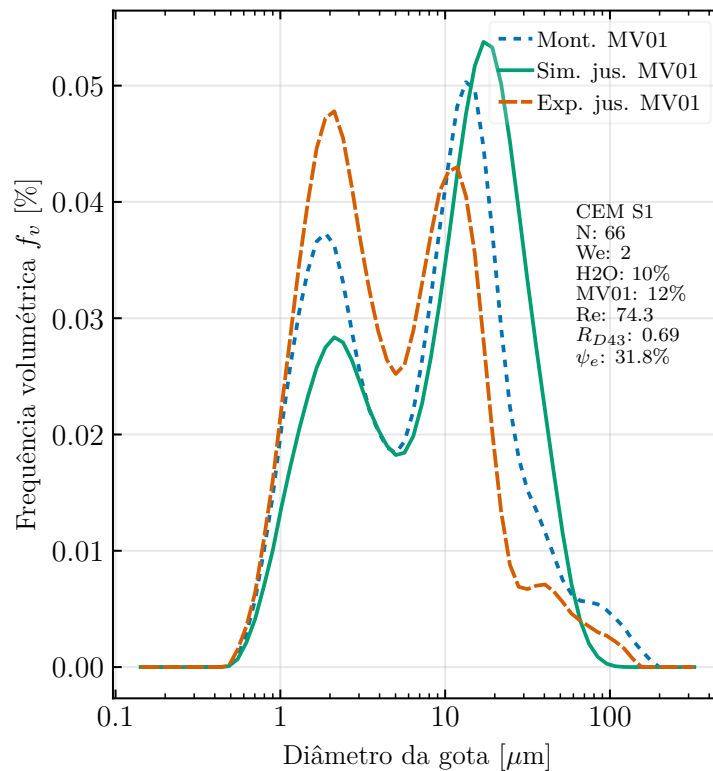


Figura 60 – DTG simulada após a válvula MV-01 para o pior caso, teste 66A12W2.



A não existência de gotas com diâmetros entre 30 e 100 micras a jusante foi estimada satisfatoriamente pelos modelos de quebra, como mostrado nos resultados experimentais. Mesmo para o pior caso do modelo CCE S1, assim como para o pior caso do modelo CEM S1, a redução das gotas com diâmetro entre 10 e 110 micras foi adequadamente prevista. No entanto, os modelos de coalescência tendem a superestimar a coalescência, resultando na redução da frequência de gotas com diâmetros entre 1 e 10 micras. A interação entre esses dois fenômenos provoca um aumento na população de gotas ao redor de 10 micras, um comportamento não observado nas análises a jusante.

Os resultados experimentais indicam que os modelos aplicados apresentam diferentes graus de precisão e limitações, especialmente sob condições de altas concentrações volumétricas e na presença de surfactantes. Embora os modelos apresentem erros, esses erros médios e máximos possuem a mesma ordem de magnitude dos resultados obtidos por [Mitre et al. \(2014\)](#), que forneceram os erros em termos de diâmetros médios da distribuição, assim como o erro relativo (Er) calculado para o $D_{[4,3]}$. O erro máximo de [Mitre et al. \(2014\)](#) na predição do diâmetro médio $D_{[4,3]}$ de seus resultados experimentais foi de 25,6%. Esses resultados sugerem que, embora os modelos sejam úteis para a previsão da distribuição de tamanho de gotas, especialmente na redução de gotas maiores que 30 micras, ainda existem limitações, principalmente no que diz respeito à coalescência, que demanda modelagem mais adequada para refletir a dinâmica observada experimentalmente.

Além das constantes originais, outras tentativas de predição dos resultados experimentais foram realizadas, considerando que a quantidade de gotas geradas na quebra variou de 26 a 30. Simulações envolvendo quebra binária também foram testadas, com $\zeta = 2$. A Tabela 18 sumariza os resultados obtidos para essa modelagem. Os erros observados para a modelagem com quebra binária foram maiores do que os resultados obtidos com as constantes originais, devido ao fato de o modelo prever uma quantidade excessiva de coalescência. Isso ocorre porque, na quebra binária, os diâmetros das gotas geradas são maiores do que aqueles obtidos no modelo de quebra não binária.

Tabela 18 – Erro na predição da DTG para válvula MV-01 e MV-02 em diferentes frações de fase dispersa do modelo de [Mitre et al. \(2014\)](#) com quebra binária.

ϕ % v/v	CEM MV-01			CEM MV-02		
	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\overline{Er} %
5	2,7	9,2	14,6	4,6	14,6	0,2
10	14,2	32,8	30,9	8,0	15,5	6,3
15	27,4	77,8	46,0	17,8	46,4	11,7
20	79,0	170,3	41,8	51,9	92,4	5,9

Fonte: Autor

O erro \overline{Er} para a válvula MV-02 é bem baixo, menor do que para as constantes

originais, pois esse modelo acerta mais o valor do diâmetro médio. Entretanto, a DTG predita passa a tomar uma forma bem diferente da DTG obtida experimentalmente.

Outra tentativa foi aplicar a modelagem apenas da coalescência, seguindo o modelo CEM S1, com as constantes da Tabela 15 para C_c e C_e , porém com taxa de quebra zero. A Tabela 19 fornece os erros dessa modelagem aplicada aos testes experimentais.

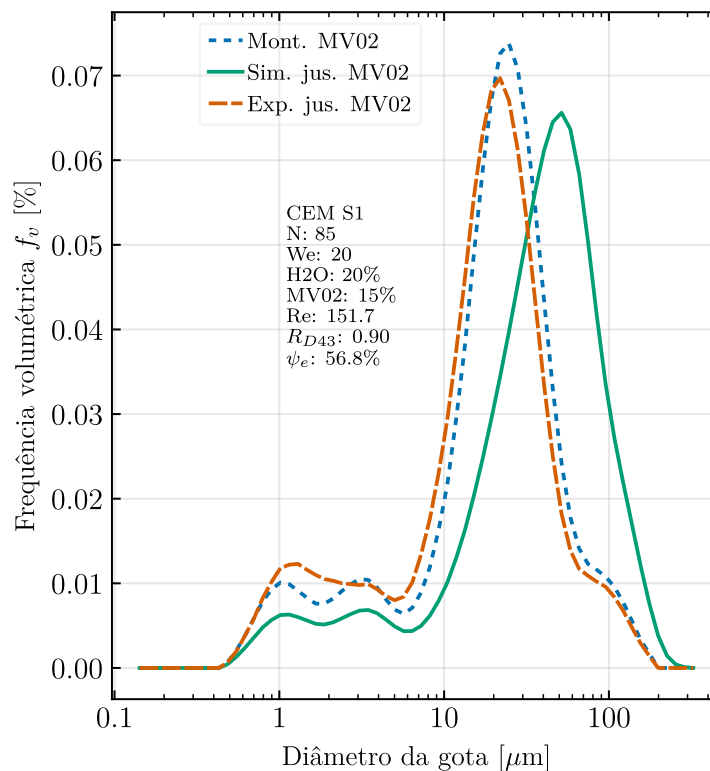
Tabela 19 – Erro na predição da DTG para válvula MV-01 e MV-02 em diferentes frações de fase dispersa do modelo de Mitre et al. (2014) apenas coalescência.

ϕ % v/v	MV-01			MV-02		
	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\bar{Er} %	$\bar{\psi}$ %	ψ_{max} %	\bar{Er} %
5	2,6	8,7	16,5	4,5	14,6	1,9
10	11,5	28,0	46,4	6,3	10,4	18,4
15	19,1	46,3	70,0	11,1	27,8	31,4
20	42,7	88,7	99,5	30,6	57,3	56,1

Fonte: Autor

O modelo possui melhor desempenho para a válvula MV-02 do que para a válvula MV-01, mas no geral, é pior do que o modelo com quebra e coalescência. Seu desempenho poderia ser aprimorado se as constantes fossem otimizadas para reduzir o erro. Como exemplo, a Figura 61 mostra o melhor resultado para a DTG predita na válvula MV-02 do modelo de apenas coalescência, na concentração de água de 20%.

Figura 61 – DTG simulada após a válvula MV-02 para o melhor caso na concentração de 20%, teste 85A13W20.



Fonte: Autor.

6.5 Avaliação da sensibilidade quanto às constantes do modelo

Um dos principais desafios na modelagem e aplicação do balanço populacional está relacionado à definição e à implementação dos modelos de quebra e coalescência. Esses fenômenos são altamente complexos e dependem de uma série de variáveis que influenciam o comportamento das gotas em emulsões líquido-líquido. A dificuldade experimental em medir com precisão as condições que promovem quebra e coalescência torna essa tarefa ainda mais desafiadora. Hankasson (2020), em sua revisão abrangente sobre a medição de fenômenos de quebra em emulsificação, destaca a importância de entender os limites experimentais e as incertezas associadas a essas medições.

Com base nesses desafios, esta seção investiga a sensibilidade do modelo CEM S1 de Mitre em relação às constantes otimizadas apresentadas pelo autor. Como justificado, o trabalho de Mitre fornece constantes com intervalo de confiança de 95%, mas não discute diretamente o impacto disso nos erros de predição do modelo, o que será avaliado nesta análise.

Conforme apresentado na Tabela 15, as constantes médias utilizadas no modelo CEM S1 foram simuladas inicialmente sem considerar os intervalos de confiança. As

constantes otimizadas incluem C_c com um valor médio de 0,90E-2 e intervalo de confiança (IC) de 0,47E-2, C_e como constante de 1, C_b com um valor médio de 0,81E-2 e IC de 0,31E-2, e ζ com valor de 31,2 e IC de 9,5.

Para quantificar a variabilidade, define-se ζ como a razão entre o intervalo de confiança e o valor médio de cada constante. Os resultados detalhados estão apresentados na Tabela 20, e indicam que o ζ para C_b pode atingir até 75% quando erros experimentais (S2) são considerados. Por esse motivo, essa variação é adotada para os testes de sensibilidade, enquanto que, para C_e , que não foi otimizado por Mitre et al. (2014), tratado como uma constante, utiliza-se um ζ de 50%.

Tabela 20 – Constantes originais do modelo de CEM S1 e intervalo de confiança.

Constante	Média	IC da média	Valor adotado de ζ %
$10^2 C_b$	0,81	$\pm 0,31$	75
$10^2 C_c$	0,9	$\pm 0,47$	52,2
$10^2 C_e$	1,0	-	-
ζ	31,2	$\pm 9,5$	30,4

Fonte: Mitre et al. (2014)

Os testes de sensibilidade são realizados modificando-se as constantes do modelo CEM, C_{CEM} , de acordo com um fator $m_i \zeta$ conforme a equação:

$$C_i = C_{CEM} \left(1 + \frac{m_i \zeta_i}{2} \right) \quad (6.7)$$

onde m_i varia de -2 a 2. A Tabela 21 apresenta o planejamento fatorial composto (Box-Wilson Central Composite Design) utilizado, com 4 fatores, 2 níveis, 1 ponto central e $\alpha = 2$ para a variável m_i . Essa abordagem permite avaliar de forma sistemática o impacto das variações sobre a resposta do modelo, identificando regiões de maior sensibilidade, permitindo uma melhor compreensão das limitações do modelo e possibilitando a calibração mais precisa de suas constantes.

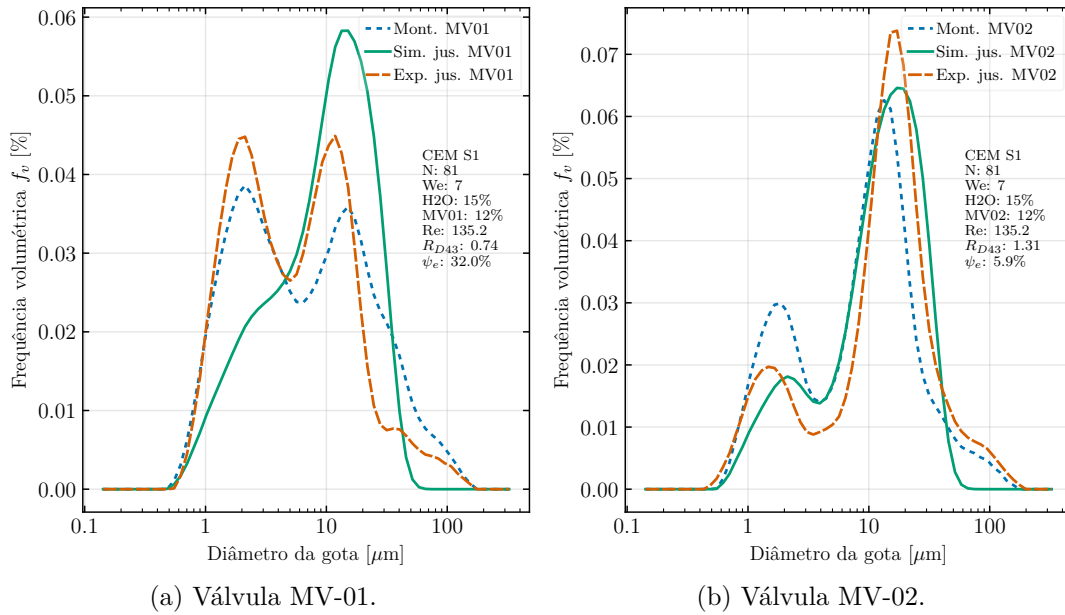
Será analisado apenas o teste 81A12W7, disposto na Tabela 8, com 15% de água e variação de $D_{[4,3]}$ de 0,743 para a MV-01 e 1,31 para a MV-02. O resultado para o modelo CEM S1 original está disposto na Figura 62 para as duas válvulas. Na MV-01 há a predição de uma coalescência e um erro relativo ψ_e de 32%, já na MV-02 há uma boa correlação com o resultado experimental, com erro ψ_e de apenas 5,9%.

Tabela 21 – Matriz de planejamento fatorial composto para m_i das constantes do modelo de Mitre.

i	C_c	C_e	C_b	ς
1	-1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1
3	-1	1	-1	-1
4	1	1	-1	-1
5	-1	-1	1	-1
6	1	-1	1	-1
7	-1	1	1	-1
8	1	1	1	-1
9	-1	-1	-1	1
10	1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1
12	1	1	-1	1
13	-1	-1	1	1
14	1	-1	1	1
15	-1	1	1	1
16	1	1	1	1
17	-2	0	0	0
18	2	0	0	0
19	0	-2	0	0
20	0	2	0	0
21	0	0	-2	0
22	0	0	2	0
23	0	0	0	-2
24	0	0	0	2
25	0	0	0	0

Fonte: Autor

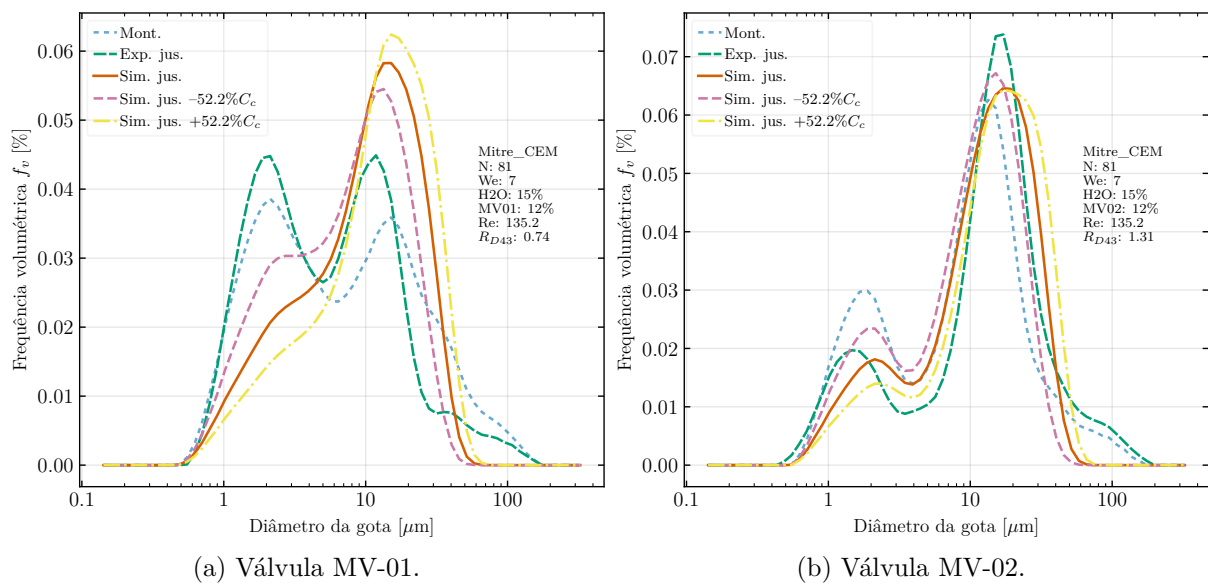
Figura 62 – DTG simulada após as válvulas MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM S1 do teste 81A12W7 com 15% de água.



Fonte: Autor.

A Figura 63 apresenta as distribuições de tamanho de gotas (DTG) obtidas para as válvulas MV-01 e MV-02, considerando a variação da constante de coalescência C_c . Os resultados são comparados com os testes da matriz de experimentos para os índices $i = 17$ e $i = 18$, avaliando-se diferentes variações no coeficiente C_c de $\pm 52,2\%C_c$.

Figura 63 – DTG simulada após a válvula MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM variando C_c no teste 81A12W7 de concentração de 15%.

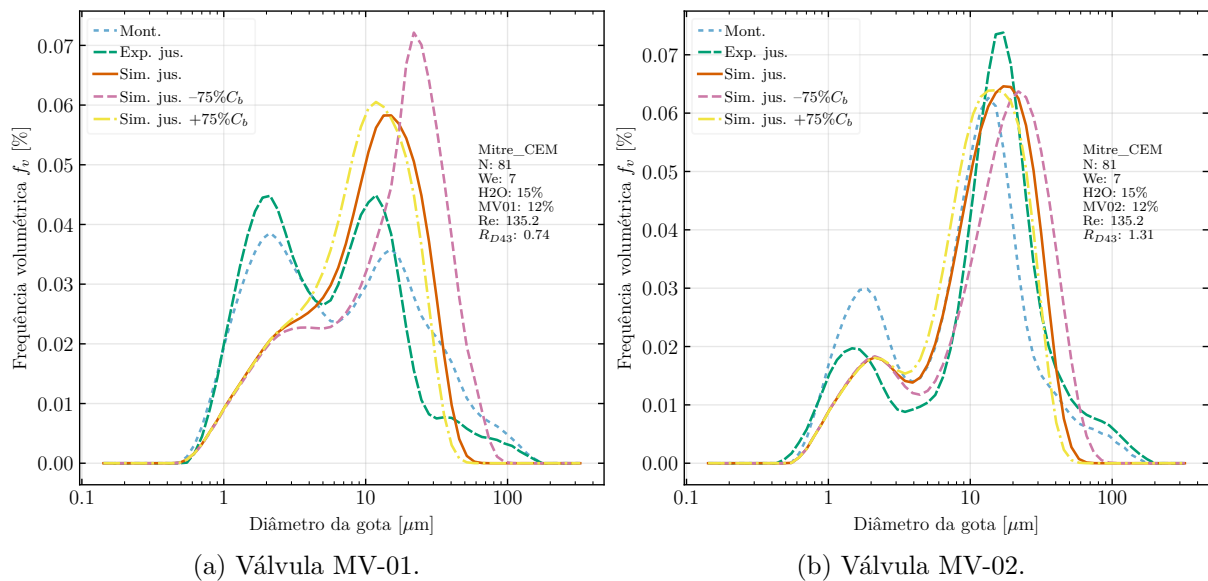


Fonte: Autor.

Observa-se que, ao reduzir o valor da constante C_c em 52,2%, o erro ψ na predição para a válvula MV-01 diminui de 32,0% para 13,3%. Em contrapartida, para a válvula MV-02, o erro apresenta um aumento de 6,0% para 8,3% com essa mesma redução, evidenciando um impacto significativamente menor neste último caso.

A Figura 64, por sua vez, apresenta os resultados das DTG obtidas para as mesmas válvulas, considerando a variação da constante de quebra C_b em $\pm 75\%C_b$, 2 vezes a incerteza a 95%. Neste caso, os resultados foram comparados com os testes para os índices $i = 20$ e $i = 21$.

Figura 64 – DTG simulada após a válvula MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM variando C_b no teste 81A12W7 de concentração de 15%.

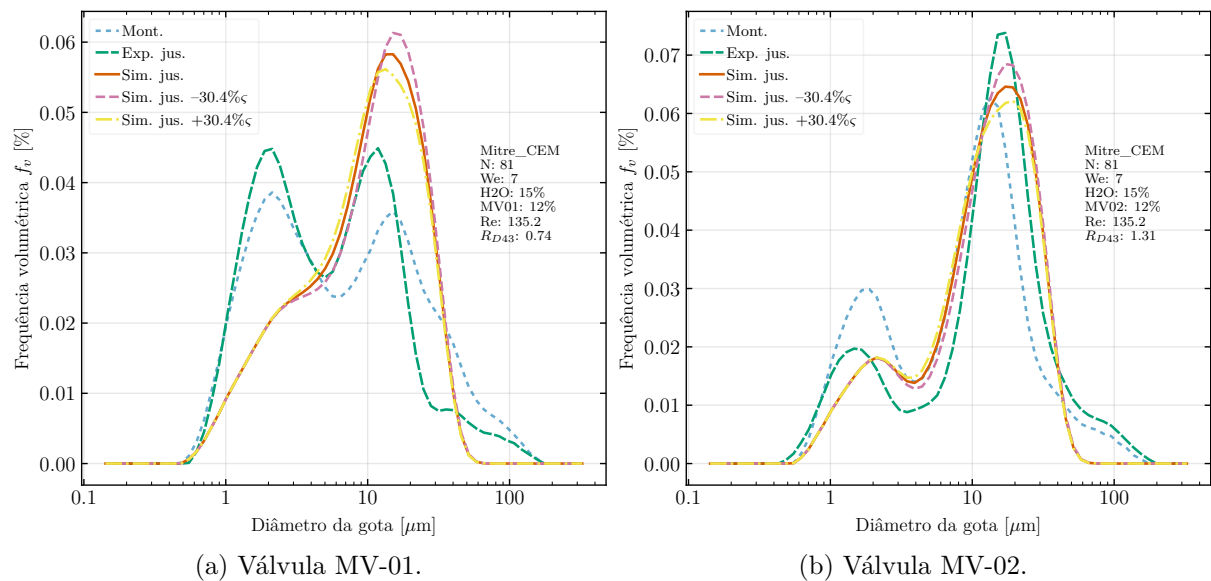


Fonte: Autor.

Para a válvula MV-01, observa-se que ao aumentar C_b em 75%, o erro na predição diminui de 32,0% para 28,0%. Entretanto, ao reduzir C_b nessa mesma proporção, o erro aumenta substancialmente para 69,9%. Na válvula MV-02, diferentemente, o erro aumenta em ambas as variações de C_b , passando de 6,0% para 9,2% ao aumentar a constante e de 6,0% para 12,3% ao diminuí-la.

A Figura 65 apresenta os resultados das distribuições de tamanho de gotas (DTG) obtidas nas válvulas MV-01 e MV-02, considerando a variação da constante ζ em $\pm 30,4\%\zeta$. Os resultados são comparados com os parâmetros dos índices $i = 23$ e $i = 24$.

Figura 65 – DTG simulada após a válvula MV-01 e 02 utilizando o modelo Mitre CEM variando ζ no teste 81A12W7 de concentração de 15%.



Fonte: Autor.

Para a válvula MV-01, observa-se um comportamento semelhante ao da constante de quebra, porém com um efeito significativamente menor. Ao aumentar ζ em 30,4%, o erro na predição diminui de 32,0% para 29,0%. No entanto, diferentemente do observado com a constante de quebra, a redução de ζ nessa mesma proporção leva a um aumento do erro para 36,0%.

Na válvula MV-02, o comportamento é distinto, com o erro diminuindo ligeiramente à medida que ζ é reduzida, passando de 6,0% para 5,3% com o aumento da constante e de 6,0% para 6,9% com a diminuição.

Esses resultados mostram como a variação da constante ζ influencia as previsões do modelo de forma diferenciada entre as válvulas, destacando a importância da calibração individual para melhorar a precisão da predição.

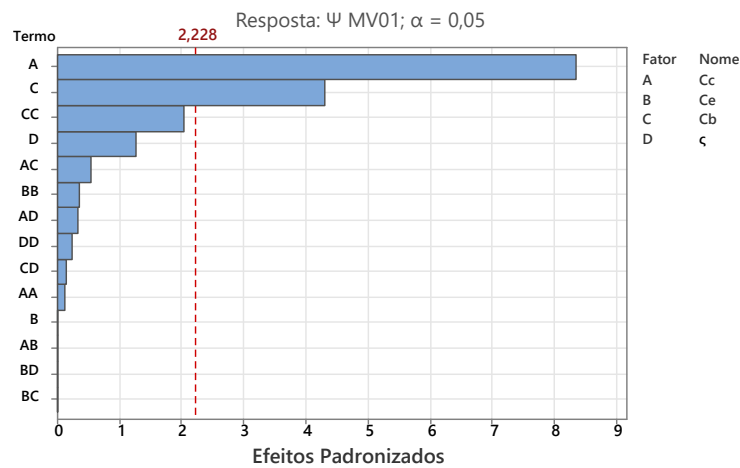
As Figuras 66 e 67 apresentam os gráficos de Pareto dos efeitos padronizados para as válvulas MV-01 e MV-02, respectivamente, utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7, com concentração de 15%. Esses gráficos avaliam a significância estatística dos fatores (C_c , C_e , C_b , ζ) e suas interações, indicando quais termos possuem maior influência nas respostas Ψ para cada válvula.

Na Figura 66, referente à válvula MV-01, os fatores mais significativos, com valores de efeito padronizado acima do limite de significância ($\alpha = 0,05$, linha vermelha pontilhada), são A (C_c), C (C_b) e CC ($C_c \times C_c$). O fator C_c é o mais influente, destacando a importância da constante de coalescência na predição da DTG para esta válvula. Os demais fatores e interações possuem efeitos estatisticamente insignificantes, sugerindo menor relevância no

ajuste do modelo para a válvula MV-01.

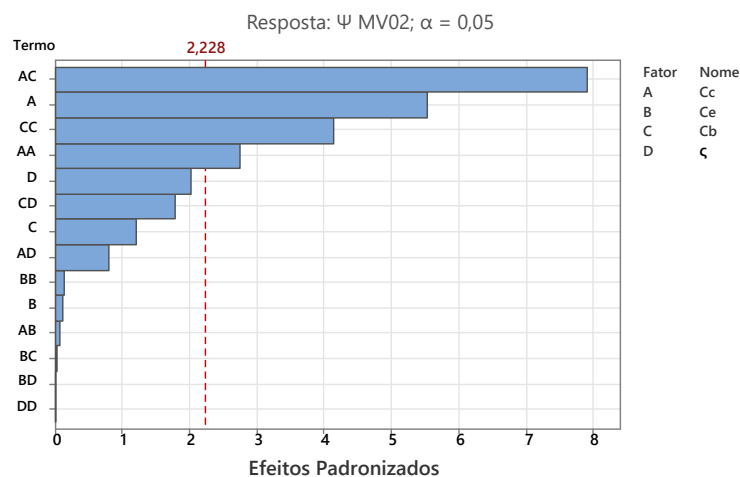
Por outro lado, na Figura 67, correspondente à válvula MV-02, o padrão de significância é diferente. O termo mais influente é AC ($C_c \times C_b$), seguido por A (C_c) e CC ($C_c \times C_c$), que também estão acima do limite de significância. Neste caso, observa-se que a interação entre C_c e C_b desempenha um papel mais importante, indicando uma maior complexidade nas interações entre os parâmetros para a válvula MV-02.

Figura 66 – Gráfico de Pareto dos efeitos padronizados na válvula MV-01 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.



Fonte: Autor.

Figura 67 – Gráfico de Pareto dos efeitos padronizados na válvula MV-02 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.



Fonte: Autor.

Comparando as duas válvulas, verifica-se que C_c (A) é um fator crítico em ambos os casos, mas a válvula MV-02 apresenta uma dependência mais pronunciada de interações, como AC , que não é significativa para a MV-01. Além disso, a constante de quebra (C_b)

tem maior relevância em interações no caso da válvula MV-02, enquanto na MV-01 seu efeito individual (C) é mais destacado.

Essas diferenças reforçam a necessidade de calibração individualizada dos parâmetros do modelo Mitre CEM para cada tipo de válvula, ou usar PB-CFD para analisar o modelo de Favero, Silva e Lage (2015) em várias válvulas, uma vez que os fatores influentes variam significativamente entre os dispositivos com a mesma configuração mas sujeitas a tamanhos de gotas ligeiramente diferentes (diâmetro em média 25% maior a montante da MV-02 do que na MV-01, como mencionado anteriormente).

Por fim, as Figuras 68 e 69 apresentam os gráficos dos efeitos principais das constantes de quebra (C_b) e coalescência (C_c) para as válvulas MV-01 e MV-02, respectivamente, utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7. Os gráficos demonstram como a variação positiva de cada constante em $\zeta_i/2$ impacta proporcionalmente o erro da predição (ψ).

Para a válvula MV-01, os efeitos principais encontrados foram: $C_c = 10,35$, $C_e = 0,02$, $C_b = -5,34$ e $\zeta = -1,57$. Já para a válvula MV-02, os valores foram: $C_c = 1,1$, $C_e = 0,022$, $C_b = -0,23$ e $\zeta = 0,39$. Esses resultados indicam que C_e possui um efeito desprezível no intervalo analisado para ambas as válvulas, com impactos quase insignificantes no erro proporcional.

Observa-se que ζ apresenta um comportamento divergente entre as válvulas. Para a MV-02, o efeito é positivo, indicando que o aumento na constante ζ em $\zeta/2$ resulta em um incremento de 0,4% no erro. Em contrapartida, para a MV-01, o impacto é negativo, com uma magnitude de -1,6%, mostrando que a redução dessa constante tende a diminuir o erro na predição da válvula. Já C_c , C_e e C_b exibem comportamentos similares para ambas as válvulas, porém com magnitudes significativamente maiores para a MV-01, evidenciando a maior sensibilidade dessa válvula às variações nos parâmetros do modelo.

Os resultados obtidos para os valores ótimos das variáveis codificadas (m_i) foram: -2 para C_c , 2 para C_e , -0,5 para C_b e -2 para ζ . A partir dessas condições, o modelo prediz um erro (ψ) de 4,15 para a MV-02 e de 10,1 para a MV-01.

Além disso, a análise detalhada dos efeitos principais evidencia a não linearidade nas respostas associadas a C_b e C_c . Essa característica explica a complexidade na busca por um mínimo global utilizando métodos de otimização multiobjetivo. A interação e a não linearidade dos principais fatores dificultam o ajuste do modelo e a identificação de configurações que minimizem simultaneamente o erro para ambas as válvulas.

Figura 68 – Efeitos principais válvula MV-01 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.

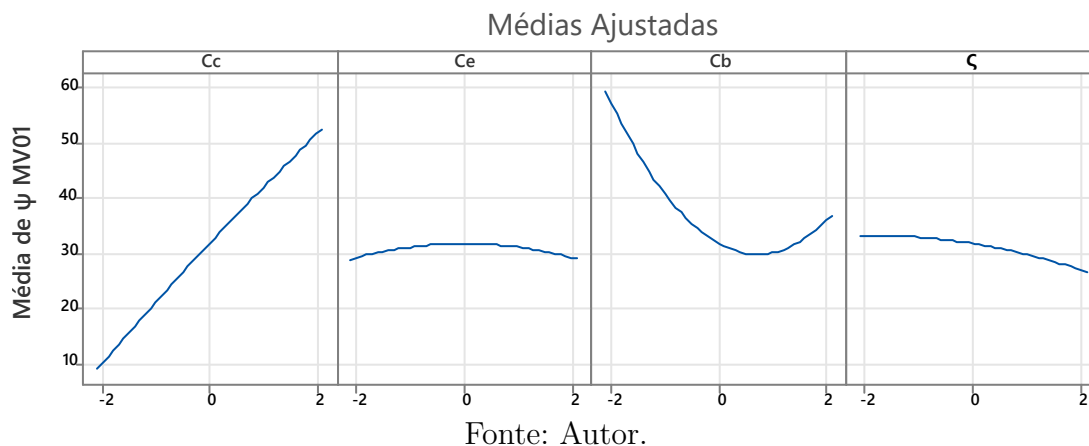
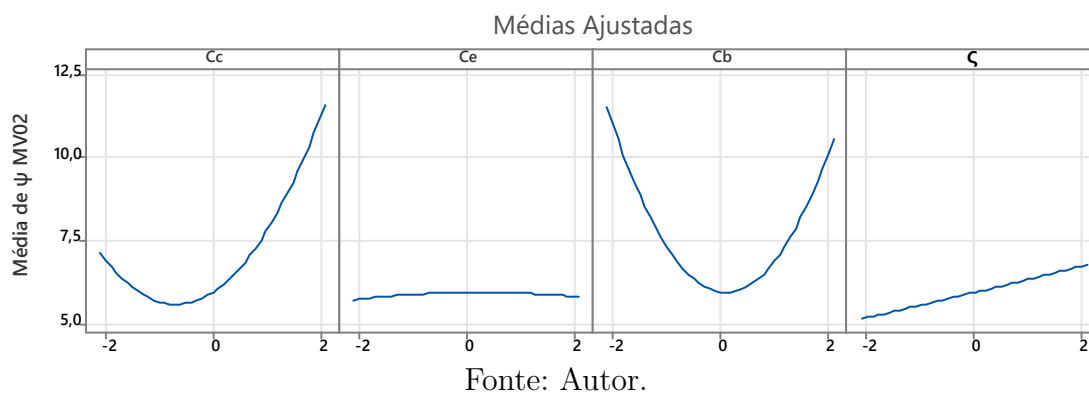


Figura 69 – Efeitos principais válvula MV-02 utilizando o modelo Mitre CEM no teste 81A12W7 de concentração de 15%.



Esses resultados destacam a influência das constantes C_c e C_b nos modelos preditivos para diferentes configurações de válvulas, evidenciando a necessidade de ajustes específicos para cada caso. Ao correlacionar esses dados com os gráficos de Pareto apresentados anteriormente (Figuras 66 e 67), os resultados sugerem a necessidade de uma calibração específica para cada válvula, considerando as diferenças nos fatores predominantes e suas interações. A MV-01 e a MV-02, sendo válvulas idênticas de mesmo fabricante, apenas estando em locais diferentes do circuito apresentaram diferenças observáveis no impacto na emulsão. A MV-01 apresenta maior sensibilidade a C_c individualmente, enquanto a MV-02 promoveu coalescência na maioria dos experimentos, demonstrando uma dependência maior de interações entre os parâmetros, como $C_c \times C_b$.

7 Considerações finais

Este trabalho investigou o escoamento bifásico água-em-óleo e os mecanismos de quebra e coalescência de gotas em uma obstrução causada por uma válvula do tipo gaveta. Através de experimentos e modelagem, buscou-se quantificar os efeitos hidrodinâmicos sobre a distribuição de tamanho de gotas (DTG) e avaliar a aplicabilidade dos modelos disponíveis na literatura.

A análise experimental foi conduzida para frações volumétricas de água entre 1% e 20% v/v, utilizando o circuito de emulsões do NEMOG/UFES. Os resultados mostraram que, para concentrações inferiores a 15%, a quebra de gotas foi o mecanismo predominante, enquanto para concentrações superiores a 15%, a coalescência passou a desempenhar um papel mais significativo, afetando a DTG final. Portanto, o primeiro objetivo específico foi cumprido, pois os efeitos da fração volumétrica da fase dispersa sobre a quebra de gotas foram caracterizados.

A modelagem da evolução da DTG foi realizada por meio do balanço populacional lagrangeano 1-D estacionário, implementado pelo método de classes com pivô fixo. Esse método permitiu a simulação da dinâmica de gotas dentro das válvulas, considerando diferentes condições operacionais. Assim, o segundo objetivo específico também foi atendido, com a implementação e aplicação da modelagem proposta.

A abordagem de balanço populacional mostrou-se eficaz para descrever a evolução da distribuição de tamanho de gotas em escoamentos água-em-óleo. Os modelos implementados permitiram prever a dinâmica de quebra e coalescência em condições operacionais específicas, correlacionando propriedades físicas e hidrodinâmicas do fluido às mudanças na DTG. O modelo de Coualaloglou e Tavlarides (CT) foi aplicado tanto com suas constantes originais quanto com ajustes, mas apresentou limitações na descrição completa do fenômeno de coalescência, especialmente em condições com elevadas concentrações da fase dispersa. Por outro lado, a adaptação do modelo CEM (Coalescence Efficiency Model, de [Mitre et al. \(2014\)](#)) na válvula gaveta demonstrou melhor desempenho nas predições, cobrindo uma ampla gama de condições experimentais, mesmo com as constantes originais. Ainda assim, subestimou os efeitos da coalescência em situações onde a fração volumétrica de água dispersa era elevada, tendo em vista que o modelo foi desenvolvido e otimizado para teores de água menores que 15%. Dessa forma, o terceiro objetivo específico foi alcançado, pois os modelos foram avaliados e suas limitações discutidas.

A válvula MV-01, localizada no início do circuito, apresentou impacto moderado na redução do tamanho médio das gotas devido à predominância de eventos de quebra. Já a válvula MV-02, instalada em uma posição posterior no circuito, teve um impacto

mais expressivo na DTG, refletindo maior variabilidade nos tamanhos das gotas. Tal efeito decorreu do aumento significativo de eventos de coalescência em condições de altas concentrações da fase dispersa de água, o que reforça a importância de considerar a posição das restrições geométricas no sistema ao analisar a evolução da DTG. Esse comportamento foi consistente com as previsões dos modelos mecânicos e com o aumento da energia turbulenta local. Dessa forma, o quarto objetivo específico foi atendido, pois a variação da DTG entre as válvulas foi comparada e discutida.

Em concentrações volumétricas elevadas de água (acima de 15%), os eventos de coalescência passaram a dominar sobre os de quebra, dada as taxas de cisalhamento imposta, indicando a necessidade de reformulações ou inclusão de novos parâmetros nos modelos existentes. A presença de surfactantes e a não-homogeneidade na distribuição de energia turbulenta são fatores críticos que afetam a precisão das previsões e a modelagem utilizada mostrou-se menos eficiente em prever a DTG em condições de elevada fração de fase dispersa.

A análise dos gráficos de Pareto e dos efeitos principais das constantes de quebra (C_b), de colisão (C_c) e eficiência de coalescência (C_e) indicou que os parâmetros C_c e C_b possuem maior influência na predição do erro ψ , enquanto C_e demonstrou um efeito insignificante no intervalo avaliado. No caso da válvula MV-02, o fator ς apresentou efeito positivo, indicando que o aumento na quantidade de gotas na quebra resulta em maior erro na predição, enquanto para a MV-01 o efeito foi inverso. Assim, o quinto objetivo específico também foi cumprido, pois a sensibilidade dos modelos às constantes foi analisada.

As previsões dos modelos se aproximam parcialmente dos resultados experimentais, apresentando erros médios e máximos da mesma ordem de magnitude daqueles obtidos por [Mitre et al. \(2014\)](#) em suas análises originais. O erro máximo na predição do diâmetro médio volumétrico ($D_{[4,3]}$) foi de 25,6%, o que evidencia a necessidade de ajustes adicionais nas constantes do modelo para melhorar sua precisão.

Este trabalho contribui para a compreensão dos mecanismos de quebra e coalescência em sistemas bifásicos homogêneos. Recomenda-se a investigação de modelos híbridos que incorporem explicitamente os efeitos de surfactantes e barreiras interfaciais, além de análises detalhadas sobre o impacto de restrições geométricas complexas no comportamento da DTG.

Referências

- ABDEL-AAL, H.; AGGOUR, M.; FAHIM, M. *Petroleum and Gas Field Processing*. *Petroleum and Gas Field Processing*. [S.l.]: Marcel Dekker, 2015. Citado na página 23.
- ALOPAEUS, V. Modeling surfactant and drop size dynamics in polydisperse liquid-liquid systems with population balances. *Chemical Engineering Science*, v. 248, p. 117269, 2022. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250921008344>>. Citado na página 57.
- AMOOEY, A.; AMIRI, E. O. Computational fluid dynamic simulation of dispersed oil-water flow with new drop coalescence model. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, Isfahan University of Technology, v. 12, n. 1, p. 119 – 126, 2019. ISSN 17353572. Cited by: 1; All Open Access, Gold Open Access, Green Open Access. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85058650308&doi=10.29252/2fjafm.75.253.28896&partnerID=40&md5=03de22913ff4d6722da2c3444ebc2aab>>. Citado na página 25.
- ANDERSSON, R.; ANDERSSON, B. On the breakup of fluid particles in turbulent flows. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 52, n. 6, p. 2020–2030, 2006. Citado na página 54.
- ARYAFARD, E.; FARSI, M.; RAHIMPOUR, M.; RAEISSI, S. Modeling electrostatic separation for dehydration and desalination of crude oil in an industrial two-stage desalting plant. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Taiwan Institute of Chemical Engineers, v. 58, p. 141 – 147, 2016. ISSN 18761070. Cited by: 30. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84953837536&doi=10.1016%2fj.jtice.2015.06.028&partnerID=40&md5=553328395578cd7ef352203daa8cb4ea>>. Citado na página 25.
- ASTM, E. 799-03 standard practice for determining data criteria and processing for liquid drop size analysis. In: *American Society for Testing and Materials*. [S.l.: s.n.], 1992. Citado na página 77.
- AZEVEDO, P. N. *Quebra de Gotas no Escoamento Turbulento Através de um Orifício*. Dissertação (Mestrado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2016. Citado na página 29.
- BECKER, P. J.; PUEL, F.; DUBBELBOER, A.; JANSSEN, J.; SHEIBAT-OTHMAN, N. Coupled population balance-cfd simulation of droplet breakup in a high pressure homogenizer. *COMPUTERS & CHEMICAL ENGINEERING*, PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD, THE BOULEVARD, LANGFORD LANE, KIDLINGTON, OXFORD OX5 1GB, ENGLAND, v. 68, p. 140–150, SEP 4 2014. ISSN 0098-1354. Citado na página 51.
- BLATZ, P.; TOBOLSKY, A. Note on the kinetics of systems manifesting simultaneous polymerization-depolymerization phenomena. *The journal of physical chemistry*, ACS Publications, v. 49, n. 2, p. 77–80, 1945. Citado 2 vezes nas páginas 79 e 84.

CASTELLANO, S.; SHEIBAT-OTHMAN, N.; MARCHISIO, D.; BUFFO, A.; CHARTON, S. Description of droplet coalescence and breakup in emulsions through a homogeneous population balance model. *CHEMICAL ENGINEERING JOURNAL*, ELSEVIER SCIENCE SA, PO BOX 564, 1001 LAUSANNE, SWITZERLAND, v. 354, p. 1197–1207, DEC 15 2018. ISSN 1385-8947. Citado na página 56.

CENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. *Mecânica dos fluidos-3*. [S.l.]: Amgh Editora, 2015. Citado na página 71.

CHESTERS, A. Modelling of coalescence processes in fluid-liquid dispersions: a review of current understanding. *Chemical engineering research and design*, v. 69, n. A4, p. 259–270, 1991. Citado 4 vezes nas páginas 46, 48, 49 e 50.

CORONA, R. R.; SAD, C. M.; SILVA, M. da; CASTRO, E. V. de; QUINTELA, E. F.; RAMOS, R. Selecting a model fluid with properties similar to crude oil to test the formation of w/o emulsions. *Geoenergy Science and Engineering*, Elsevier, v. 221, p. 111265, 2 2023. ISSN 2949-8910. Citado 3 vezes nas páginas 23, 63 e 64.

COULALOGLOU, C.; TAVLARIDES, L. Description of interaction processes in agitated liquid-liquid dispersions. *Chemical Engineering Science*, v. 32, n. 11, p. 1289–1297, 1977. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250977850239>>. Citado 20 vezes nas páginas 12, 25, 31, 33, 41, 42, 43, 45, 46, 47, 48, 51, 53, 54, 56, 57, 96, 99, 104 e 105.

CRISTINI, V.; BŁAWZDZIEWICZ, J.; LOEWENBERG, M.; COLLINS, L. R. Breakup in stochastic stokes flows: sub-kolmogorov drops in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 492, p. 231–250, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 53.

CROWE, C.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. et al. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. [S.l.]: CRC Press, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 64.

D4377-00, A. Standard test method for water in crude oils by potentiometric karl fischer titration. *ASTM international, West Conshohocken, PA*, 2000. Citado na página 65.

D4402, A. Standard test method for measuring the viscosity of mold powders above their melting point using a rotational viscometer. *ASTM international, West Conshohocken, PA*, 2015. Citado na página 64.

D5002-19, A. Standard test method for density and relative density of crude oils by digital density analyzer. *Manual on Hydrocarbon Analysis, 6th Edition*, p. 778–778–5, 2019. Citado na página 64.

DAVIES, G.; NILSEN, F.; GRAMME, P. The formation of Stable Dispersions of Crude oil and Produced Water: The Influence of Oil Type, Wax & Asphaltene Content. SPE Annual Technical Conference and Exhibition, p. SPE–36587–MS, 10 1996. Disponível em: <<https://doi.org/10.2118/36587-MS>>. Citado na página 23.

DAVIES, J. Drop sizes of emulsions related to turbulent energy dissipation rates. *Chemical Engineering Science*, v. 40, n. 5, p. 839–842, 1985. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250985850363>>. Citado na página 28.

DEB, K.; PRATAP, A.; AGARWAL, S.; MEYARIVAN, T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 6, n. 2, p. 182–197, 2002. Citado na página 78.

DUBBELBOER, A.; JANSSEN, J.; HOOGLAND, H.; MUDALIAR, A.; MAINDARKAR, S.; ZONDERVAN, E.; MEULDIJK, J. Population balances combined with computational fluid dynamics: A modeling approach for dispersive mixing in a high pressure homogenizer. *CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE*, PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD, THE BOULEVARD, LANGFORD LANE, KIDLINGTON, OXFORD OX5 1GB, ENGLAND, v. 117, p. 376–388, SEP 27 2014. ISSN 0009-2509. Citado na página 51.

ELIAS, M. Z. *pyPB*. 2022. Disponível em: <<https://github.com/MuriloZucatelli/pyPB>>. Citado na página 77.

ENDRES, S. C.; SANDROCK, C.; FOCKE, W. W. A simplicial homology algorithm for lipschitz optimisation. *Journal of Global Optimization*, Springer, v. 72, p. 181–217, 2018. Citado na página 78.

ESKIN, D.; MA, S. M.; TAYLOR, S.; ABDALLAH, W. Modeling droplet dispersion in a turbulent tubing flow at a high droplet holdup. *Chemical Engineering Research and Design*, Institution of Chemical Engineers, v. 168, p. 71 – 83, 2021. ISSN 02638762. Cited by: 1. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85101214100&doi=10.1016%2fj.cherd.2021.01.026&partnerID=40&md5=1d60064a7bad7a66828491209e8c2d01>>. Citado na página 25.

FAVERO, J. L.; SILVA, L. F. L.; LAGE, P. L. Modeling and simulation of mixing in water-in-oil emulsion flow through a valve-like element using a population balance model. *Computers & Chemical Engineering*, Elsevier, v. 75, p. 155–170, 2015. Citado na página 131.

FRANZOL, A.; REZENDE, M. C. Estabilidade de emulsões: um estudo de caso envolvendo emulsionantes aniônico, catiônico e não-iônico. *Polímeros*, SciELO Brasil, v. 25, n. spe, p. 1–9, 2015. Citado na página 22.

FRUNGIERI, G.; BRIESEN, H. A population balance model for the flow-induced preparation of pickering emulsions. *Chemical Engineering Research and Design*, Institution of Chemical Engineers, v. 189, p. 694 – 706, 2023. ISSN 02638762. Cited by: 1; All Open Access, Bronze Open Access. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85143855694&doi=10.1016%2fj.cherd.2022.11.037&partnerID=40&md5=5412ff4dd254b4e8bdc76a7760c3004c>>. Citado na página 25.

GALINAT, S.; MASBERNAT, O.; GUIRAUD, P.; DALMAZZONE, C.; NOÏK, C. Drop break-up in turbulent pipe flow downstream of a restriction. *Chemical Engineering Science*, Elsevier Ltd, v. 60, n. 23, p. 6511 – 6528, 2005. ISSN 00092509. Cited by: 105. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-27444437044&doi=10.1016%2fj.ces.2005.05.012&partnerID=40&md5=98b083f376bb7ffd75c7adc2f78b8525>>. Citado na página 29.

GALINAT, S.; TORRES, L. G.; MASBERNAT, O.; GUIRAUD, P.; RISSO, F.; DALMAZZONE, C.; NOÏK, C. Breakup of a drop in a liquid–liquid pipe flow through an orifice. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 53, n. 1, p. 56–68, 2007. Citado na página 29.

- GAO, H.; GU, H.-Y.; GUO, L.-J. Numerical study of stratified oil–water two-phase turbulent flow in a horizontal tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 46, n. 4, p. 749–754, 2003. Citado na página 22.
- GOMES, J. S. *New Technologies in the Oil and Gas Industry*. [S.l.]: BoD–Books on Demand, 2012. Citado na página 22.
- GRACE†, H. P. Dispersion phenomena in high viscosity immiscible fluid systems and application of static mixers as dispersion devices in such systems. *Chemical Engineering Communications*, Taylor & Francis, v. 14, n. 3-6, p. 225–277, 1982. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00986448208911047>>. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 95.
- GUAN, X.; YANG, N.; NIGAM, K. D. Prediction of droplet size distribution for high pressure homogenizers with heterogeneous turbulent dissipation rate. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, American Chemical Society, v. 59, n. 9, p. 4020 – 4032, 2020. ISSN 08885885. Cited by: 8. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85081540680&doi=10.1021%2fac.1c33601a000>>. Citado 4 vezes nas páginas 25, 52, 76 e 105.
- HÅKANSSON, A.; INNINGS, F.; TRÄGÅRDH, C.; BERGENSTÅHL, B. A high-pressure homogenization emulsification model—improved emulsifier transport and hydrodynamic coupling. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 91, p. 44–53, 2013. Citado na página 51.
- HERØ, E. H.; FORGIA, N. L.; SOLSVIK, J.; JAKOBSEN, H. A. Single oil drop breakage in water: Impact of turbulence level in channel flow. *Chemical Engineering Science: X*, Elsevier Ltd, v. 12, 2021. ISSN 25901400. Cited by: 0; All Open Access, Hybrid Gold Open Access. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85123120454&doi=10.1016%2fj.cesx.2021.100111&partnerID=40&md5=07e7aed9dc400bc6afc4cfc99a131a3e>>. Citado na página 54.
- HIDY, G.; BROCK, J. *The Dynamics of Aerocolloidal Systems*. Pergamon Press, 1970. (Dynamics of Aerocolloidal Systems). ISBN 9780080066134. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=L-MJAQAIAAJ>>. Citado 5 vezes nas páginas 37, 39, 80, 81 e 85.
- HILL, P. J.; NG, K. M. Statistics of multiple particle breakage. *AIChE Journal*, v. 42, n. 6, p. 1600–1611, 1996. Disponível em: <<https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690420611>>. Citado na página 46.
- HINZE, J. O. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 1, n. 3, p. 289–295, 1955. Citado 4 vezes nas páginas 26, 27, 31 e 39.
- HOHL, L.; RÖHL, S.; KRAUME, M. Drop size distributions as a function of dispersed phase viscosity: Experiments and modeling. *Chemical Engineering and Technology*, John Wiley and Sons Inc, v. 46, n. 6, p. 1260 – 1270, 2023. ISSN 09307516. Cited by: 0; All Open Access, Hybrid Gold Open Access. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85149261394&doi=10.1002%2fcat.202200589&partnerID=40&md5=89d81d01df48386a2f872d01d29fbb2c>>. Citado 4 vezes nas páginas 25, 33, 57 e 118.

ISHII, M.; HIBIKI, T. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2005. Citado na página 42.

KAKHKI, N. A.; FARSI, M.; RAHIMPOUR, M. Effect of current frequency on crude oil dehydration in an industrial electrostatic coalescer. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Taiwan Institute of Chemical Engineers, v. 67, p. 1 – 10, 2016. ISSN 18761070. Cited by: 17. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84994885311&doi=10.1016%2fj.jtice.2016.06.021&partnerID=40&md5=7f72b5e79929a7a0dcbc9bcae85269ee>>. Citado na página 25.

KEMPIN, E.; ROBERTI, J. T.; FRANCO, L. G.; RAMOS, R. Engineering aspects on flow similarity for design water-in-oil emulsion circuit. *Lecture Notes in Mechanical Engineering*, Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, p. 255–265, 2022. ISSN 21954364. Disponível em: <https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-93456-9_23>. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 60.

KOLMOGOROV, A. On the breakage of drops in a turbulent flow. v. 66, p. 825–828, 1949. Citado 4 vezes nas páginas 26, 27, 39 e 43.

KUMAR, S.; RAMKRISHNA, D. On the solution of population balance equations by discretization—i. a fixed pivot technique. *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, p. 1311–1332, 1996. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250996884892>>. Citado 7 vezes nas páginas 37, 38, 80, 81, 82, 85 e 88.

LI, C.; HUANG, Q. Analysis of droplet behavior in a de-oiling hydrocyclone. *Journal of Dispersion Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 38, n. 3, p. 317–327, 2017. Citado na página 25.

LIAO, Y.; LUCAS, D. A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions. *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 15, p. 3389–3406, 2009. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250909002759>>. Citado 8 vezes nas páginas 12, 25, 33, 40, 50, 99, 103 e 104.

LIAO, Y.; LUCAS, D. A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles. *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 10, p. 2851–2864, 2010. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000925091000093X>>. Citado 3 vezes nas páginas 25, 33 e 41.

LIU, N.; WANG, W.; TIAN, Y.; WU, C.; GONG, J. Experimental and numerical study for drop size distribution in oil-water dispersions with nonionic surfactant tween 80. *Experimental Thermal and Fluid Science*, Elsevier Inc., v. 89, p. 153 – 165, 2017. ISSN 08941777. Cited by: 6. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85027554711&doi=10.1016%2fj.expthermflusci.2017.08.007&partnerID=40&md5=2b2c9b4c3c5a4fe2b3d938d0f325730e>>. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 117.

MAASS, S.; KRAUME, M. Determination of breakage rates using single drop experiments. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 70, p. 146–164, 2012. Citado na página 54.

MAAß, S.; BUSCHER, S.; HERMANN, S.; KRAUME, M. Analysis of particle strain in

stirred bioreactors by drop breakage investigations. *Biotechnology Journal*, v. 6, n. 8, p. 979–992, 2011. Disponível em: <<https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/biot.201100161>>. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 57.

MAINDARKAR, S. N.; BONGERS, P.; HENSON, M. A. Predicting the effects of surfactant coverage on drop size distributions of homogenized emulsions. *Chemical Engineering Science*, Elsevier Ltd, v. 89, p. 102 – 114, 2013. ISSN 00092509. Cited by: 45. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84871779358&doi=10.1016%2fj.ces.2012.12.001&partnerID=40&md5=d18a5a248559543041b436103f8245e7>>. Citado na página 52.

MAINDARKAR, S. N.; HOOGLAND, H.; HENSON, M. A. Predicting the combined effects of oil and surfactant concentrations on the drop size distributions of homogenized emulsions. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Elsevier B.V., v. 467, p. 18 – 30, 2015. ISSN 09277757. Cited by: 47. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84913529655&doi=10.1016%2fj.colsurfa.2014.11.032&partnerID=40&md5=5099e8534573451b416ebbebe1318e43>>. Citado 3 vezes nas páginas 25, 52 e 76.

MARTÍNEZ-BAZÁN, C.; MONTANES, J.; LASHERAS, J. C. On the breakup of an air bubble injected into a fully developed turbulent flow. part 1. breakup frequency. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 401, p. 157–182, 1999. Citado na página 44.

MAZUMDAR, M.; JAMMORIA, A. S.; ROY, S. Effective rates of coalescence in oil–water dispersions under constant shear. *Chemical Engineering Science*, Elsevier Ltd, v. 157, p. 255 – 263, 2017. ISSN 00092509. Cited by: 5. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84950327383&doi=10.1016%2fj.ces.2015.11.037&partnerID=40&md5=00a5d45ad659b0995d2c939f03d0f5de>>. Citado na página 25.

MITRE, J. F.; LAGE, P. L.; SOUZA, M. A.; SILVA, E.; BARCA, L. F.; MORAES, A. O.; COUTINHO, R. C.; FONSECA, E. F. Droplet breakage and coalescence models for the flow of water-in-oil emulsions through a valve-like element. *Chemical Engineering Research and Design*, Institution of Chemical Engineers, v. 92, n. 11, p. 2493 – 2508, 2014. ISSN 02638762. Cited by: 30. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84912097798&doi=10.1016%2fj.cherd.2014.03.020&partnerID=40&md5=366c5479bb864d47e29aee004f26de24>>. Citado 23 vezes nas páginas 13, 15, 25, 30, 42, 43, 44, 45, 46, 48, 49, 51, 96, 105, 110, 111, 112, 114, 122, 123, 125, 133 e 134.

MUNTINGA, J. Study of turbulent break-up of oil droplets in choke valves. 1998. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.

OSHINOWO, L. M.; VILAGINES, R. D. Modeling of oil–water separation efficiency in three-phase separators: Effect of emulsion rheology and droplet size distribution. *Chemical Engineering Research and Design*, Institution of Chemical Engineers, v. 159, p. 278 – 290, 2020. ISSN 02638762. Cited by: 18. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85084817568&doi=10.1016%2fj.cherd.2020.02.022&partnerID=40&md5=2c3219a20db04c449a6ecd48494e8472>>. Citado na página 25.

PAOLINELLI, L.; RASHEDI, A.; YAO, J. Characterization of droplet sizes in large scale oil–water flow downstream from a globe valve. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 99, p. 132–150, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 28, 29, 53 e 76.

PERCY, J. S.; SLEICHER, C. A. Drop breakup in the flow of immiscible liquids through an orifice in a pipe. *AIChE Journal*, v. 29, p. 161–164, 1983. Citado na página 28.

PETRONI, M. H. O.; CORONA, R. R.; SAD, C. M.; RAMOS, R.; CASTRO, J. M.; FRANCO, L. G.; da Silva, M.; ELIAS, M. Z.; CASTRO, E. V. Role of asphaltenes and resins at the interface of petroleum emulsions (w/o): A literature review. *Geoenergy Science and Engineering*, v. 239, p. 212932, 2024. ISSN 2949-8910. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2949891024003026>>. Citado na página 22.

POPE, S. B. *Turbulent Flows*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780511840531. Citado 2 vezes nas páginas 96 e 97.

PRINCE, M. J.; BLANCH, H. W. Bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 36, n. 10, p. 1485–1499, 1990. Citado na página 41.

RAIKAR, N. B.; BHATIA, S. R.; MALONE, M. F.; HENSON, M. A. Applications of population balance equation modeling to pharmaceutical emulsions. In: *2009 35TH ANNUAL NORTHEAST BIOENGINEERING CONFERENCE*. 345 E 47TH ST, NEW YORK, NY 10017 USA: IEEE, 2009. p. 197. ISBN 978-1-4244-4362-8. 35th Annual Northeast Bioengineering Conference, Cambridge, MA, APR 03-05, 2009. Citado na página 50.

RAIKAR, N. B.; BHATIA, S. R.; MALONE, M. F.; MCCLEMENTS, D. J.; ALMEIDA-RIVERA, C.; BONGERS, P.; HENSON, M. A. Prediction of emulsion drop size distributions with population balance equation models of multiple drop breakage. *COLLOIDS AND SURFACES A-PHYSICOCHEMICAL AND ENGINEERING ASPECTS*, ELSEVIER SCIENCE BV, PO BOX 211, 1000 AE AMSTERDAM, NETHERLANDS, v. 361, n. 1-3, p. 96–108, MAY 20 2010. ISSN 0927-7757. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 51.

RAMKRISHNA, D. *Population balances: Theory and applications to particulate systems in engineering*. [S.l.]: Elsevier, 2000. Citado 6 vezes nas páginas 23, 32, 34, 35, 36 e 37.

RAMKRISHNA, D.; SINGH, M. R. Population balance modeling: Current status and future prospects. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, v. 5, n. 1, p. 123–146, 2014. PMID: 24606333. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-chembioeng-060713-040241>>. Citado 3 vezes nas páginas 22, 32 e 33.

ROEHL, S.; HOHL, L.; STOCK, S.; ZHAN, M.; KOPF, T.; KLITZING, R. von; KRAUME, M. Application of population balance models in particle-stabilized dispersions. *NANOMATERIALS*, v. 13, n. 4, FEB 2023. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 57.

SCHMITT, P.; SIBIRTSEV, S.; HLAWITSCHKA, M. W.; STYN, R.; JUPKE, A.; BART, H.-J. Droplet size distributions of liquid-liquid dispersions in centrifugal pumps. *Chemie Ingenieur Technik*, Wiley Online Library, v. 93, n. 1-2, p. 129–142, 2021. Citado na página 31.

SCOTT, L. S.; HAYES, W. B.; HOLLAND, C. D. The formation of interfacial area in immiscible liquids by orifice mixers. *AIChE Journal*, v. 4, p. 346–350, 1958. Citado na página 28.

SCOTT, W. T. Analytic studies of cloud droplet coalescence i. *Journal of Atmospheric Sciences*, American Meteorological Society, Boston MA, USA, v. 25, n. 1, p. 54–65, 1968. Disponível em: <https://journals.ametsoc.org/view/journals/atsc/25/1/1520-0469_1968_025_0054_asocdc_2_0_co_2.xml>. Citado 2 vezes nas páginas 79 e 82.

SHIEA, M.; BUFFO, A.; VANNI, M.; MARCHISIO, D. Numerical methods for the solution of population balance equations coupled with computational fluid dynamics. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, v. 11, n. 1, p. 339–366, 2020. PMID: 32250650. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-chembioeng-092319-075814>>. Citado na página 31.

SILVA, F. S.; MEDRONHO, R. A.; BARCA, L. F. Experimental study of water droplet break up in water in oil dispersions using an apparatus that produces localized pressure drops. *Oil & Gas Science and Technology—Revue d'IFP Energies nouvelles*, EDP Sciences, v. 74, p. 1, 2019. Citado 3 vezes nas páginas 30, 76 e 92.

SIVA, S. P.; HO, Y. K. Modeling the adsorption of polydispersed cellulose nanocrystal on emulsion oil droplets during their simultaneous breakage and coalescence. *INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH*, v. 61, n. 11, p. 3983–4000, MAR 23 2022. ISSN 0888-5885. Citado na página 25.

SOLSVIK, J.; JAKOBSEN, H. A. Single drop breakup experiments in stirred liquid-liquid tank. *CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE*, PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD, THE BOULEVARD, LANGFORD LANE, KIDLINGTON, OXFORD OX5 1GB, ENGLAND, v. 131, p. 219–234, JUL 28 2015. ISSN 0009-2509. Citado na página 54.

STEWART, M.; ARNOLD, K. E. *Surface production operations, volume 1: design of oil handling systems and facilities*. [S.l.]: Elsevier, 2011. v. 1. Citado na página 22.

STONE, H. A. Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 26, n. 1, p. 65–102, 1994. Citado na página 46.

TAYLOR, G. I. The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, v. 146, n. 858, p. 501–523, 1934. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1934.0169>>. Citado na página 53.

TOMOTIKA, S.; TAYLOR, G. I. Breaking up of a drop of viscous liquid immersed in another viscous fluid which is extending at a uniform rate. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, v. 153, n. 879, p. 302–318, 1936. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1936.0003>>. Citado na página 53.

TSOURIS, C.; TAVLARIDES, L. L. Breakage and coalescence models for drops in turbulent dispersions. *AIChE Journal*, v. 40, n. 3, p. 395–406, 1994. Disponível em: <<https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690400303>>. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 57.

VALENTAS, K. J.; BILOUS, O.; AMUNDSON, N. R. Analysis of breakage in dispersed phase systems. *Industrial & engineering chemistry fundamentals*, ACS Publications, v. 5, n. 2, p. 271–279, 1966. Citado na página 45.

VANKOVA, N.; TCHOLAKOVA, S.; DENKOV, N. D.; IVANOV, I. B.; VULCHEV, V. D.; DANNER, T. Emulsification in turbulent flow: 1. mean and maximum drop diameters in inertial and viscous regimes. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 312, n. 2, p. 363–380, 2007. ISSN 0021-9797. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979707003803>>. Citado 3 vezes nas páginas 27, 28 e 53.

VIRTANEN, P.; GOMMERS, R.; OLIPHANT, T. E.; HABERLAND, M.; REDDY, T.; COURNAPEAU, D.; BUROVSKI, E.; PETERSON, P.; WECKESSER, W.; BRIGHT, J.; van der Walt, S. J.; BRETT, M.; WILSON, J.; MILLMAN, K. J.; MAYOROV, N.; NELSON, A. R. J.; JONES, E.; KERN, R.; LARSON, E.; CAREY, C. J.; POLAT, İ.; FENG, Y.; MOORE, E. W.; VanderPlas, J.; LAXALDE, D.; PERKTOLD, J.; CIMRMAN, R.; HENRIKSEN, I.; QUINTERO, E. A.; HARRIS, C. R.; ARCHIBALD, A. M.; RIBEIRO, A. H.; PEDREGOSA, F.; van Mulbregt, P.; SciPy 1.0 Contributors. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*, v. 17, p. 261–272, 2020. Citado na página 105.

XING, L.; JIANG, M.; ZHAO, L.; GAO, J.; LIU, L. Design and analysis of de-oiling coalescence hydrocyclone. *Separation Science and Technology (Philadelphia)*, Taylor and Francis Ltd., v. 57, n. 5, p. 749 – 767, 2022. ISSN 01496395. Cited by: 3. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85109010663&doi=10.1080%2f01496395.2021.1945102&partnerID=40&md5=5bc8a68946935de4f80996329e764e53>>. Citado na página 25.

YEOH, G. H.; CHEUNG, C. P.; TU, J. Chapter 3 - population balance approach—a generic framework. In: YEOH, G. H.; CHEUNG, C. P.; TU, J. (Ed.). *Multiphase Flow Analysis Using Population Balance Modeling*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2014. p. 69–90. ISBN 978-0-08-098229-8. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080982298000036>>. Citado 5 vezes nas páginas 31, 32, 33, 39 e 48.

ZANDE, M. J. *Droplet break-up in turbulent oil-in-water flow through a restriction*. Tese (Doutorado) — TU Delft, 2000. Citado na página 76.

ZANDE, M. J. Van der; BROEK, W. Van den. Break-up of oil droplets in the production system. p. 2–4, 1998. Citado na página 28.

Effect of Flow Through a Choke Valve on Emulsion Stability, SPE Annual Technical Conference and Exhibition de *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, (SPE Annual Technical Conference and Exhibition, SPE Annual Technical Conference and Exhibition). SPE-56640-MS p. Disponível em: <<https://doi.org/10.2118/56640-MS>>. Citado na página 29.

ZHOU, H.; YU, X.; JING, S.; ZHOU, H.; LAN, W.; LI, S. Measurement of droplet breakage in a pump-mixer. *Chemical Engineering Science*, v. 195, p. 23–38, 2019. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250918308121>>. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 57.

ZIFF, R. M.; MCGRADY, E. The kinetics of cluster fragmentation and depolymerisation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 18, n. 15, p. 3027, 1985. Citado 3 vezes nas páginas 78, 79 e 82.