



SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Kátia Tavares Campos

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos – Mestrado Profissional, PPGEP/ITEC, da Universidade Federal do Pará, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia de Processos.

Orientador: Clauderino da Silva Batista.

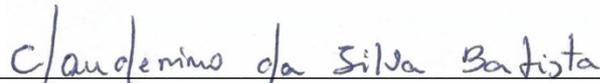
Belém
Dezembro de 2015

**SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A
TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE**

Kátia Tavares Campos

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS – MESTRADO PROFISSIONAL (PPGEP/ITEC) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA DE PROCESSOS.

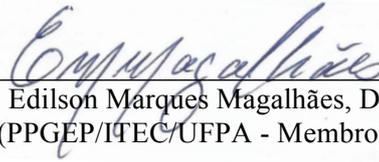
Examinada por:



Prof. Clauderino da Silva Batista, D.Eng.
(PPGEP/ITEC/UFPA - Orientador)



Prof. Emanuel Negrão Macêdo, D.Sc.
(PPGEP/ITEC/UFPA - Membro)



Prof. Edilson Marques Magalhães, D.Eng.
(PPGEP/ITEC/UFPA - Membro)



Prof. Marcelo José Raiol Souza, D.Eng.
(CCNT/UEPA - Membro)

BELÉM, PA - BRASIL

DEZEMBRO DE 2015

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFPA

Campos, Kátia Tavares, 1973-

Solução de Equações de Balanço Populacional Usando a
Técnica da Transformada de Laplace / Kátia Tavares Campos.
- 2015.

Orientador: Clauderino da Silva Batista.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará,
Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em
Engenharia de Processos, Belém, 2015.

1. Transformada de Laplace. 2. Matemática na
engenharia. I. Título

CDD 23.ed.515.723

Este trabalho é dedicado a todos aqueles que colaboraram, direta e indiretamente na elaboração do mesmo. Em particular à minha família, em especial ao meu esposo Jair e às minhas filhas Isa e Luma pela motivação inspiradora.

AGRADECIMENTOS

Ao Criador Universal, pela vida, saúde, capacidade de entendimento...

Ao meu pai Campos que muito me incentivou aos estudos e sempre acreditou no meu potencial.

Ao meu esposo Jair, por sua paciência e motivação inspiradoras.. e às minhas filhas Isa e Luma, pelo carinho dedicado a mim. Os quais estão sempre ao meu lado quando preciso de apoio fraternal, que contribuiu bastante na realização deste Trabalho.

Aos meus colegas de turma e de estudos Geraldo e Kamila, pelo incentivo e colaboração nos experimentos, e especialmente pela amizade.

Ao professor Clauderino, pelo apoio e orientação prestados durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos professores do PPGEF, pelas contribuições acadêmicas prestadas, inclusive nas aulas das disciplinas do curso.

Enfim, à UFPA e ao PPGEF, pelo incentivo à qualificação, o que me oportunizou a obtenção deste título.

Resumo da Dissertação apresentada ao PPGEP/UFPA como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia de Processos (M.Eng.)

SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Kátia Tavares Campos

Dezembro/2015

Orientador: Cláuderino da Silva Batista

Área de Concentração: Engenharia de Processos

Em sistemas particulados, os fenômenos físico-químicos são descritos por meio de equações de balanço populacional (EBP) que governa a função densidade de distribuição de tamanho de partículas, através da qual é possível prever a evolução dessa distribuição no tempo. O presente trabalho propõe a solução de problemas de balanço populacional (BP) com formulação hiperbólica e não linear sob a forma de uma equação íntegro-diferencial parcial pela aplicação da técnica de transformada de Laplace com inversão numérica. Através da solução desse problema é possível estimar a função densidade de distribuição de partículas de volume v e assim prever o comportamento dinâmico do sistema físico espacialmente homogêneo onde ocorre o transporte convectivo e difusivo de partículas com taxa de nascimento e morte. A simulação do modelo abordado foi obtida através de um código computacional em linguagem Fortran 90/95, com a sub-rotina DINLAP, da biblioteca IMSL (1991). Na simulação, os resultados numéricos gerados pela variação no coeficiente de difusão foram comparados entre si para observar os efeitos causados pelo coeficiente difusivo. Além disso, resultados gerados na simulação do modelo do presente trabalho, usando um coeficiente difusivo consideravelmente pequeno, foram comparados com um resultado publicado na literatura, o que mostrou excelente concordância. Tais observações permitiram avaliar a influência do termo difusivo presente na EBP do problema abordado, bem como a aplicabilidade da metodologia usada na solução do problema.

Abstract of Dissertation presented to PPGE/UFPA as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master in Process Engineering (M.Eng.)

SOLUTION OF POPULATION BALANCE EQUATIONS USING THE LAPLACE TRANSFORM TECHNIQUE

Kátia Tavares Campos

December/2015

Advisor: Clauderino da Silva Batista

Research Area: Process Engineering

In particulate systems, physical-chemical phenomena are described by means of population balance equations (EBP), which governs the function of particle size distribution density, through which it is possible to predict the evolution of this distribution in time. This paper proposes the solution of population balance problems (BP) with hyperbolic formulation and not linear in the form of a partial integral-differential equation by applying the transform technique of Laplace with numerical inversion. Through the solution of this problem it is possible to estimate the distribution function of volume density of particles and thus predict the dynamic behavior of spatially homogeneous physical system where the convective and diffusive transport of particles with birth rate and death occurs. The simulation model was addressed obtained through a computer code in Fortran language 90/95, with DINLAP subroutine, the IMSL library (1991). In the simulation, numerical results generated by the variation in the diffusion coefficient were compared to observe the effects caused by the diffusion coefficient. In addition, results generated in the simulation of this working model, using a pretty small diffusion coefficient were compared with published results in the literature, which showed excellent agreement. These observations allowed us to evaluate the influence of the term diffusive present in EBP of the problem addressed, as well as the applicability of the methodology used in solving the problem.

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
1.1 - MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS.....	1
1.2 - CONTRIBUIÇÕES.....	3
1.3 - ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO.....	3
CAPÍTULO 2 - REVISÃO DA LITERATURA	5
2.1 - EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL.....	5
2.2 - APLICAÇÕES EM SISTEMAS PARTICULADOS.....	10
2.3 - METODOLOGIAS DE SOLUÇÕES PARA EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL.....	12
2.3.1 - Método das Características.....	12
2.3.2 - Método da Transformada de Laplace.....	13
2.3.3 - Método da Transformada de Laplace com inversão numérica.....	13
CAPÍTULO 3 - MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO	16
3.1 - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....	16
3.2 - APLICAÇÃO DA TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE.....	17
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO	24
4.1 – ANÁLISE DO MODELO PROPOSTO.....	24
CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES	33
5.1- CONCLUSÕES.....	33
5.2 - SUGESTÕES.....	34
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	35
APÊNDICE I - CÁLCULO DA TRANSFORMADA DE LAPLACE DOS TERMOS DA EQUAÇÃO (3.1a), DESCRITA NO CAPÍTULO 3	41
APÊNDICE II – CÁLCULO DO MOMENTO M_0 PARA O CASO-TESTE ANALISADO	45
APÊNDICE III – SOLUÇÃO DA EDO (3.6f) ATRAVÉS DA TEORIA DE BERNOULLI	47

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Relação entre a função densidade de distribuição de tamanho e o volume da partícula. Fonte: IPT (2007).....	8
Figura 2.2	Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração. Fonte: ILIEVSKI (1991).....	11
Figura 3.1	Fluxograma do algoritmo de solução.....	23
Figura 4.1	Comparação entre os resultados gerados no presente trabalho e os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978) para $\Lambda = \frac{G}{\beta_0 N_0} = 1,0$ e $\alpha = \frac{D_{eff}}{\beta_0 N_0} = 10^{-10}$	26
Figura 4.2	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 0,25 (h), com variações do coeficiente de difusão.....	27
Figura 4.3	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 1,00 (h), com variações do coeficiente de difusão.....	28
Figura 4.4	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 2,00 (h), com variações do coeficiente de difusão.....	29
Figura 4.5	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 4,00 (h), com o coeficiente de difusão $D_{eff} = 10^{-6}$	30
Figura 4.6	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 6,00 (h), com o coeficiente de difusão $D_{eff} = 10^{-6}$	31
Figura 4.7	Comparação da densidade de população gerada no presente trabalho durante o tempo 8,00 (h), com o coeficiente de difusão $D_{eff} = 10^{-6}$	31

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Coeficientes e taxas usados no caso-teste estudado.....	24
-------------------	---	----

NOMENCLATURA

BP	BALANÇO POPULACIONAL
DTP	DENSIDADE DE TAMANHO DE PARTÍCULAS
D	Diâmetro da partícula, μm
D_{eff}	Coefficiente de difusão constante, $\mu m^2 / s$
EBP	EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL
G	Taxa de crescimento linear, $\mu m / s$
$M_0(t)$	Número total de partículas por unidade de volume do fluido, cm^{-3}
N	Numero de partículas, cm^{-3}
N_0	Numero total de partículas no tempo zero, cm^{-3}
$n(D,t)$	Função densidade de distribuição de tamanho
$n(v,t)$	Função densidade de distribuição de tamanho, $\mu m^{-3} cm^{-3}$
S_0	Taxa de nucleação cm^3 / s
t	Tempo, s ou h
v	Volume da partícula cm^3
v_0	Volume da partícula no tempo zero cm^3
\tilde{v}	Volume da partícula cm^3

LETRAS GREGAS

β_0	Coefficiente de coagulação constante, cm^3 / s
α	Relação entre o coeficiente de difusão e a taxa de coagulação
Λ	Relação entre a taxa de crescimento de partículas e a taxa de coagulação
τ	Tempo adimensional

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 – MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS

A obtenção de controle sobre a distribuição do tamanho de partículas (DTP) em um produto é o principal objetivo em muitos processos de engenharia, visto que a DTP muitas vezes determina se o produto é adequado para uma aplicação particular. Em estudos ambientais, a DTP é também de suma importância, uma vez que indica as propriedades do poluente e o nível de risco ao ambiente e à saúde. No entanto, a DTP é profundamente afetada pelo campo de fluxo e turbulência, sobre o qual há um "conjunto de etapas" em processos de formação e de interação de partículas (DI VEROLI e RIGOPOULOS, 2011).

A evolução da DTP é descrito matematicamente via equação de balanço populacional (EBP), também conhecida como equação dinâmica geral (EDG), uma equação de transporte para a distribuição de tamanho da partícula em um espaço de fase compreendendo espaço, tempo, e uma medida de tamanho da partícula tal como raio, diâmetro ou volume. Mecanismos físico-químicos que determinam a DTP incluem nucleação, crescimento/evaporação, agregação e fragmentação. Quando todos estes mecanismos são combinados, a EBP torna-se uma equação integro - diferencial (DI VEROLI e RIGOPOULOS, 2011).

A partir de definições encontradas na literatura para sistemas particulados, observa-se que nesses sistemas, onde se investiga a evolução do comportamento dinâmico de uma população de pequenas partículas, a descrição matemática é uma equação de balanço populacional (EBP), cuja sigla em inglês é PBEs (*Population Balance Equations*), que, segundo ULIANA (2007), apresenta-se genericamente sob a forma de uma equação integro - diferencial parcial, a qual governa a função densidade de distribuição de tamanho de partículas e sua evolução ao longo do tempo, através da qual é possível prever o comportamento dinâmico de uma população de partículas e cuja formulação se descreve em função da ocorrência de interações entre as partículas que têm suas propriedades alteradas, de forma a modificar a distribuição quando ocorrem os seguintes fenômenos: Formação de novas partículas (nucleação), variação

no valor da propriedade (crescimento), divisão de uma partícula para formar outras partículas (quebra) e união de partículas para a formação de uma única partícula (coalescência ou coagulação).

Tais fenômenos são usuais na formulação de uma EBP, sendo que na prática ocorrem também outros fenômenos, como aqueles em que partículas são transferidas através do sistema, devido a processos de difusão e convecção. Segundo a lei de Fick, a difusão de partículas ocorre pela existência de gradientes de concentração de partículas de uma determinada propriedade, situações nas quais se produz um fluxo dessas partículas, o qual tende a homogeneizar a dissolução e uniformizar a concentração. O fluxo homogeneizador é uma consequência estatística do movimento aleatório de partículas. Neste contexto, a solução da BPE geral consiste em determinar a função densidade de tamanho de partículas, através da qual é possível prever o comportamento dinâmico de uma população de partículas (com determinada propriedade) em um determinado sistema físico.

Busca-se, neste trabalho, obter soluções de EBPs, que descrevem variações na distribuição de tamanho de partículas durante os processos de coagulação, crescimento e difusão, pela aplicação da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica. Através dessa solução é possível estimar a função densidade de distribuição de tamanho de partículas, e assim prever o comportamento dinâmico do problema físico abordado que consiste no transporte convectivo e difusivo de partículas com taxa de nascimento e morte.

Na simulação do problema físico abordado foram usadas rotinas do Fortran 90/95 com a sub-rotina DINLAP, da biblioteca IMSL (1991), que executou a inversão numérica da transformada de Laplace. O algoritmo usado na simulação resultou da adaptação de um algoritmo previamente desenvolvido na literatura por BATISTA (2011) e os resultados gerados na simulação do modelo permitiram avaliar a influência do termo difusivo presente na EBP do problema em questão.

Mais especificamente, objetiva-se neste estudo aplicar um método numérico de inversão da transformada de Laplace, juntamente com o método das características e a solução de Bernoulli, na solução de uma EBP sob a forma de uma equação integro-diferencial parcial não linear hiperbólica com taxa de crescimento, coagulação e difusão, no sentido de estimar a função densidade de distribuição tamanho (volume v ou diâmetro D) de partículas, visando a obtenção computacional dos resultados do problema estudado.

1.2– CONTRIBUIÇÕES

Modelos de balanço populacional tiveram importantes aplicações industriais, como: Os processos de polimerização, cujo estudo realizado por MARNANGELO (2010) foi dado enfoque a distribuição de tamanhos de partículas do látex e seus efeitos no produto, visando a produção de um látex de alto teor de sólidos. Os processos de cristalização industrial submetidos à nucleação e crescimento simultâneo, cujo modelo de balanço populacional é resolvido usando o método das características, descrito por MESBAH *et al.* (2009).

A presente dissertação oferece uma alternativa para a solução de equações de balanço populacional na forma de uma equação integro - diferencial parcial com formulação não linear e hiperbólica através de método numérico de inversão da transformada de Laplace.

1.3– ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

No capítulo introdutório são apresentadas as motivações e objetivos que levaram ao estudo do comportamento dinâmico de uma população de partículas onde estará ocorrendo coagulação, crescimento e difusão.

No Capítulo 2 são apresentadas informações obtidas da literatura sobre problemas de balanço populacional, cuja equação é aplicada em sistemas particulados envolvendo processos físico-químico como a dinâmica de coagulação, nucleação, convecção, difusão, crescimento, entre outros. Tendo em vista as metodologias usadas na solução do problema abordado, foram apresentadas também algumas noções referentes à Técnica da Transformada de Laplace e o Método das Características, bem como a Transformada de Laplace com inversão numérica.

O Capítulo 3 apresenta a formulação matemática do problema para sistemas particulados que envolvem os fenômenos de coagulação, crescimento e difusão, cuja descrição matemática é uma equação integro - diferencial parcial não linear hiperbólica, tendo sido utilizado a Técnica da Transformada de Laplace e o Método das Características na sua resolução.

As discussões sobre os resultados obtidos pela técnica da transformada de Laplace com inversão numérica é apresentada no Capítulo 4, ilustrando-se por meio de gráficos os resultados numéricos gerados na simulação do problema abordado.

Por fim, o Capítulo 5 apresenta as conclusões referentes ao problema abordado, e as sugestões de estudo na continuação em etapas futuras.

CAPÍTULO 2

REVISÃO DA LITERATURA

2.1- EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL

Conforme descrito por PAULIN (2013), a equação do balanço populacional, de um modo geral, é um balanço de entrada e saída de fluxos de uma população dispersa especificada por seu tamanho em um sistema que pode possuir várias dimensões, devendo essa equação ser submetida às condições de contorno e inicial, cujas características são exclusivas para cada estudo de caso. A estrutura do balanço populacional tem sido aceito por algum tempo como a abordagem mais fundamental para a modelagem da dinâmica de partículas, gotículas, ou bolhas em sistemas multifásicos (GIMBUN *et al.*, 2009). Segundo RIGOPOULUS e JONES (2003), em todas essas situações, o objetivo é prever a evolução da distribuição de uma ou mais propriedades que caracterizam o indivíduo, partículas ou entidades, e a PBE dinâmica é em essência uma equação de balanço de número para descrever essa evolução. A evolução dinâmica da distribuição do tamanho de partícula em sistemas particulados é comumente obtida pela solução da equação de balanço populacional (RAMKRISHNA, 2000).

A abordagem de balanço populacional (BP) foi primeiro proposto em 1964 simultaneamente por dois grupos de pesquisadores (RANDOLPH, 1969; HULBURT e KATZ, 1964) que descreveram o comportamento de partículas durante a cristalização, sendo os pioneiros a aplicar o equacionamento do BP a um problema da engenharia química. A formulação estendida do BP que levou em conta a natureza estocástica do comportamento das partículas foi dada por RAMKRISHNA e BORWANKER (1973). No entanto, a fundamentação matemática da EBP geral foi descrita nos trabalhos clássicos de RANDOLPH e LARSON (1988), onde são encontradas aplicações para a cristalização, e no livro de RAMKRISHNA (2000), de forma que a EBP passou a ser estabelecida como uma ferramenta básica na análise de sistemas particulados, sendo atualmente aplicada de forma racional.

Um estudo recente relatado na literatura que aborda a equação de Balanço Populacional envolvendo o termo difusivo consiste no modelo de PAULIN (2013) que usou Balanço Populacional para descrever a desemulsificação de petróleo e água em separador gravitacional. Nesse modelo foi considerado um coeficiente de difusão médio, calculado pela equação de Stokes-Einsten, embora o coeficiente de difusão varie com a altura, tendo em vista que a concentração de água é alterada também em função da altura. Segundo PAULIN (2013), a equação de seu modelo foi utilizada também por STERLING *et al.* (2004) na modelagem da dispersão de óleo em derrames marinhos e por CUNHA (2007) sobre a modelagem matemática da separação gravitacional de emulsões de petróleo.

Segundo STERLING *et al.* (2004), na descrição do balanço populacional em sistemas com fases de distintas massas específicas, onde ocorrem fenômenos como o transporte axial (sedimentação/flotação), a distribuição de tamanho de gotículas é afetada pela difusão ao longo das coordenadas espaciais e pela velocidade de segregação (advecção).

Modelos matemáticos úteis com base em equações de balanço populacional (EBP) têm sido desenvolvidos e implementados para descrever a evolução de sistemas dispersos, tendo em conta sua dinâmica como resultado de um conjunto de eventos tais como a coalescência, quebra, nucleação, sedimentação e crescimento de partículas ou flocos, gotas, bolhas, cristais. Cada evento particular deve ser descrito de acordo com as propriedades da fase dispersa, por exemplo, a taxa de coalescência entre as partículas e a taxa de sedimentação de uma partícula depende de um conjunto de parâmetros incluindo o diâmetro da partícula envolvida, e as propriedades físicas da fase contínua (por exemplo, viscosidade, densidade, temperatura). A resolução do modelo de EBP permitiu prever o número inteiro referente à distribuição de tamanho de partícula de um sistema. (CUNHA *et al.*, 2008)

A EBP basicamente contabiliza as partículas que constituem a fase dispersa numa fase contínua, as quais podem formar-se ou desaparecer do sistema. O número total de partículas de um estado em determinado espaço num sistema pode ser alterado por processo de surgimento de novas partículas (processo de nascimento) e pela extinção das partículas existentes (processo de morte). O surgimento de novas partículas pode ocorrer devido à quebra (divisão), agregação (coalescência) e nucleação de partículas. Da mesma forma a quebra e agregação contribuem também para a extinção das partículas existentes (RAMKRISHNA, 2000).

Para a formulação do BP, é fundamental assumir a existência de um número de densidade para cada ponto da partícula no espaço. Assim, o número de partículas em qualquer região do espaço é obtido através da integração do número da densidade no espaço determinado. A equação de BP é uma equação do número anterior da densidade que pode ser considerado como representante do balanço do número de partículas de um estado particular. A equação é muitas vezes associada a equações de conservação de entidades e de partículas (RAMKRISHNA, 2000).

Processos particulados estão entre os mais comuns em processos químicos. Técnicas para a geração eficiente e precisa de soluções para as equações governantes são necessárias para o projeto e controle destes sistemas. As exigências variam de qualidade da solução e velocidade entre as aplicações, bem como a diversidade de sistemas específicos de uma análise cuidadosa na escolha adequada de técnicas numéricas (MAHONEY e RAMKRISHNA, 2002).

Modelos de balanço populacional resultam geralmente em uma equação íntegro-diferencial parcial, com condição de contorno e raramente admite solução analítica, sendo necessária a utilização de técnicas numéricas (MAHONEY e RAMKRISHNA, 2002).

A evolução das partículas de um sistema é regulada por diversos processos físico-químicos, tais como a coagulação, sedimentação, difusão, convecção, crescimento, deposição, entre outros. A fim de obter o efeito destes fenômenos, é necessário resolver a equação íntegro-diferencial não linear para a função de distribuição de partículas. Em geral, o comportamento dinâmico de um aerossol é descrito em termos da função de distribuição do aerossol, que é dependente de várias variáveis, tais como tempo, tamanho da partícula, posição, composição, forma, morfologia, estado (radioativo ou não radioativo), etc. Uma equação que depende de tempo, espaço e tamanho para a distribuição é denominada a equação de dinâmica geral (ELGARAYHI, 2003).

O aspecto mais importante de partículas de aerossol é, talvez, a sua interação com moléculas de gás. Portanto, é de alguma importância o estudo dos efeitos da condensação e da difusão sobre um aerossol. Há dois princípios pelos quais partículas extremamente pequenas de aerossol podem ser removidas: por ação da gravidade ou forças aerodinâmicas ou pela migração para as superfícies, aderem a estas superfícies e, assim, são removidas. O processo pelo qual estas partículas migram, quer a uma superfície ou outra, é chamado de difusão, e o seu movimento é descrito como

movimento Browniano. A difusão é importante em estudos de aerossol, pois representa o principal efeito dinâmico em partículas muito pequenas (diâmetro inferior a $0,1 \mu m$) e deve ser considerada quando a dinâmica dessas pequenas partículas é estudada. (ELGARAYHI, 2004)

A Figura 2.1 ilustra a relação entre a função densidade de distribuição de tamanho e o volume da partícula. Nessa relação, observa-se graficamente que a função densidade de partículas é maior quando o volume é menor e, devido às colisões entre as partículas, o volume cresce de forma a diminuir a densidade de distribuição de tamanho (BATISTA, 2011).

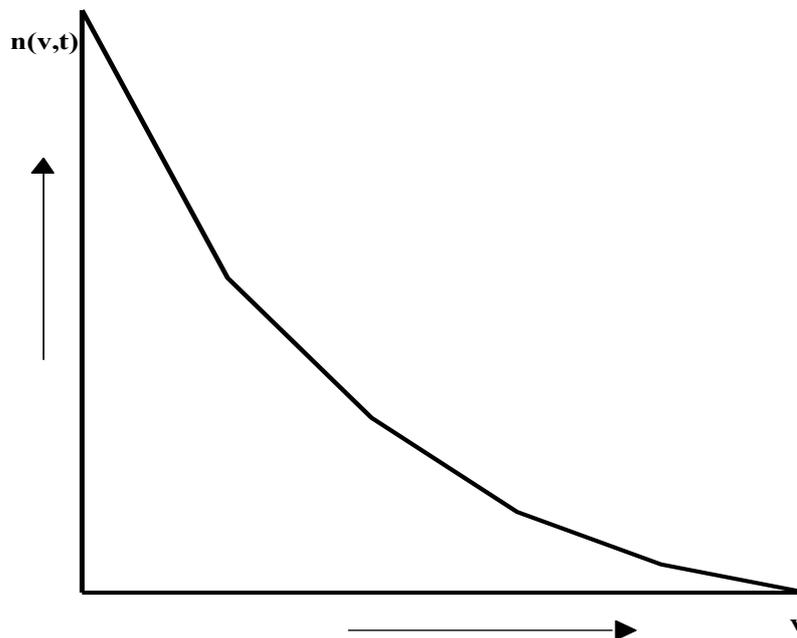


Figura 2.1 - Relação entre a função densidade de distribuição de tamanho e o volume da partícula. Fonte: IPT (2007).

A equação de balanço populacional é obtida através da aplicação de princípios de conservação à função densidade numérica de partículas, $f(\mathbf{x},\mathbf{y},t)$, que é função do vetor contendo as propriedades internas da partícula (\mathbf{x}), de propriedades externas que variam espacialmente (\mathbf{y}), e do tempo (t). Desprezando a dependência funcional das variáveis externas e considerando a distribuição como sendo monovariada em que apenas a quebra e agregação de partículas ocorrem, podemos escrever a EBP como: $\partial f(x,t)/\partial t = Ha(x,t) + Hb(x,t)$. (FERREIRA, 2015)

A EBP é uma equação para descrever a evolução da distribuição de tamanho da partícula de um sistema de partículas polidispersa. É essencialmente uma equação de balanço para uma densidade do número de partículas, a qual é definida em termos das propriedades características com respeito a partículas polidispersas. Normalmente, a

propriedade de interesse é uma medida linear para uma partícula de tamanho L ou volume v . Considera-se, por exemplo, a partícula de tamanho L , a densidade de número $N(L; x, t)$ é então definida como uma distribuição contínua sobre o domínio do volume de partículas, bem como uma função de espaço x e tempo t que representa a concentração para partículas de tamanho $[L, L + \delta L]$ por unidade L . A EBP pode, então, ser escrita como:

$$\frac{\partial N(L; x, t)}{\partial t} + \nabla[uN(L; x, t)] + \frac{\partial}{\partial L} N[G(L, Y)(L; x, t)] = D_p \nabla^2 N(L; x, t) + \dot{w}_N(Y, N) \quad (2.1)$$

Sendo D_p a difusividade das partículas, assumindo o valor constante para todas as partículas. Como se pode ver, a EBP introduz L como uma dimensão adicional para o problema. Mecanismos de crescimento são representados pela taxa de crescimento $G(L, Y)$ que, em geral, depende do tamanho da partícula e do meio ambiente local, isto é, das concentrações da espécie pela qual as partículas estão crescendo. Com isso, pode ser logo visto que o crescimento é um mecanismo convectivo ao longo da dimensão de tamanho da partícula, cuja unidade é m/s. O termo fonte \dot{w}_N pode contribuir para a formação de partículas (nucleação) e outros fenômenos como a agregação ou fragmentação (DI VEROLI e RIGOPOULOS, 2011).

A EBP dada pela equação integro-diferencial parcial Eq.(2.2) a seguir foi proposta por GELBARD e SEINFELD (1978) e utilizada por BATISTA (2011) que a resolveu pelo emprego da técnica de transformada de Laplace com inversão numérica. Segundo GELBARD e SEINFELD (1978), essa equação surge em uma grande variedade de contextos físicos, tais como química coloidal, dinâmica atmosférica de aerossóis, cinética de cristalização e dinâmica de populações biológicas.

O estado espacial e químico para um sistema particulado homogêneo é descrito pela função densidade de partícula para a distribuição de tamanho $n(v, t)$, em que $n(v, t)dv$ é o número de partículas por unidade de volume do fluido numa escala de volume v para $v+dv$. A dinâmica para um sistema similar no qual um indivíduo pode crescer pela adição de material da fase fluida, no qual partículas podem colidir e coagular é descrito pela equação geral do balanço populacional. (GELBARD e SEINFELD, 1978)

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} = \frac{1}{2} \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(v, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} + S[n(v,t), v, t] \quad (2.2)$$

Em que, $I(v,t)=dv/dt$ é a taxa de mudança de volume v pela transferência de material entre partículas e fase fluida, $\beta(v, \tilde{v})$ é o coeficiente de coagulação da partícula para volumes v e \tilde{v} , e Sv é a taxa líquida de adição de partículas novas no sistema. A condição inicial e de contorno requeridas para a Eq. (2.2) foram dadas por:

$$n(v, 0) = \frac{N_0}{v_0} e^{-v/v_0} \quad (2.3)$$

$$n(0, t) = 0 \quad (2.4)$$

2.2 - APLICAÇÕES EM SISTEMAS PARTICULADOS

A estabilidade das emulsões de óleo bruto em água geradas em laboratório foi investigada utilizando um modelo matemático fenomenológico com base na equação de balanço populacional, tendo em conta diferentes fenômenos, tal como a coalescência binária de gotas de água, a coalescência interfacial com a fase água, a difusão da fase dispersa, e sedimentação de gotículas. A equação de balanço populacional (EBP) resultante foi uma equação integro - diferencial parcial não-linear hiperbólica, que para o caso específico exigiu técnicas numéricas para a resolução. A EBP foi convertida em um sistema de equações diferenciais parciais utilizando técnica de pivô fixo de Kumar. (CUNHA *et al.*, 2008).

A descrição matemática de um sistema de partículas submetidas simultaneamente à nucleação, crescimento e aglomeração é uma equação de balanço populacional (EBP), que leva a uma equação integro - diferencial parcial não-linear. Problemas são encontrados na solução desta equação, resultante da forma hiperbólica devido ao termo de crescimento e a não-linearidade associada à aglomeração. A busca de uma solução para tal equação consiste essencialmente em se procurar uma descrição de como as partículas são distribuídas por tamanho com o tempo. Em engenharia química, populações de partículas formam uma categoria de sistemas que são referidos

como processos em fase dispersa. Muitos processos de partículas, tal como a cristalização da solução, polimerização em emulsão, o crescimento microbiano, os processos de aerossol e processos de granulação, são muitas vezes descritos adequadamente por equações de balanço populacional (LIU e CAMERON, 2001).

Conforme descrito por MARCHISIO *et al.* (2002), muitos processos químicos envolvem precipitação em uma ou mais etapas-chave da operação global. Segundo DIRKSEN e RING (1991), a precipitação é o resultado de vários mecanismos, ou seja, nucleação, crescimento molecular, e os processos secundários, como a agregação (ou aglomeração) e ruptura, e a força motriz é a supersaturação. A Figura 2.2 abaixo ilustra alguns desses mecanismos.

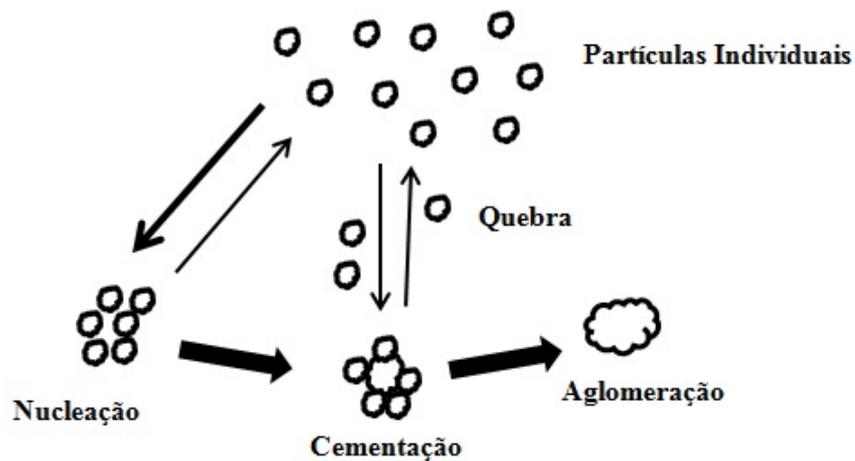


Figura 2.2 - Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração. Fonte: ILIEVSKI (1991).

A nucleação, crescimento e agregação simultâneas de partículas é fundamental para a caracterização de processos como cristalização, precipitação, formação de aerossóis e assim por diante. Uma modelagem rigorosa desses processos é representada por uma equação íntegro-diferencial parcial, conhecida como equação de balanço populacional (PBE). O modelo baseado em estratégias de controle exige que soluções numéricas devam ser obtidas em escala de tempo compatível com a escala de tempo do processo (KUMAR e RAMKRISHNA, 1997).

2.3 - METODOLOGIAS DE SOLUÇÕES PARA EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL

Geralmente os problemas modelados por equações de balanço populacional são resolvidos por métodos numéricos. Conforme descrito por CUNHA (2007), os métodos numéricos encontrados na literatura são classificados em: método dos momentos, método dos resíduos ponderados, métodos estocásticos, métodos híbridos e técnicas de discretização. A escolha do método numérico não é trivial, pois alguns métodos possuem certas restrições para vários equacionamentos de balanço populacional.

Quanto às técnicas de solução analítica, em geral, não são aplicadas a problemas reais que normalmente são complexos. No entanto, essas técnicas são extremamente importantes para a validação de novos métodos numéricos para o balanço populacional, conforme descrito por PAULIN (2013). Somente para os casos mais simples da equação do BP é que temos solução analítica, como em SCOTT (1968) ou em PATIL e ANDREWS (1998) que desenvolveram a resolução analítica considerando que a equação do BP não tinha termos de advecção, difusividade ou acúmulo. (CUNHA, 2007)

Entre as técnicas de solução analítica encontram-se relatadas na literatura o método de aproximações sucessivas, o método das características, o método das gerações sucessivas e o método da transformada de Laplace (SANTOS, 2010).

Segue uma revisão dos aspectos analíticos básicos da técnica da transformada de Laplace e do método das características, tendo em vista a sua utilização na resolução da equação diferencial parcial do problema abordado. Também é apresentada uma noção básica quanto à inversão numérica da transformada de Laplace utilizada para a obtenção dos resultados do problema.

2.3.1 - Método das Características

Segundo BATISTA (2011), o método das características pode ser usado para resolver um problema de valor inicial (PVI) de uma equação diferencial parcial de primeira ordem.

Quando o método das características é aplicado a esta equação, o objetivo é a mudança da coordenada (x,t) para um novo sistema de coordenadas (x_0,s) em que a EDP se torna uma equação diferencial ordinária (EDO) ao longo de certas curvas no plano

$x-t$. Esse tipo de curva $\{[x(s),t(s)]: 0 < s < \infty\}$, ao longo do qual a solução da EDP se reduz a uma EDO, são chamadas curvas características ou apenas características. A nova variável s variará, e a nova variável x_0 será constante ao longo das suas características. A variável irá mudar ao longo da curva inicial, no plano $x-t$ (ao longo da linha em $t=0$) (SARRA, 2002).

2.3.2 - Método da Transformada de Laplace

Oliver Heaviside, quando estudava processos simples para obter soluções de equações diferenciais, vislumbrou um método de cálculo operacional que leva ao conceito matemático da transformada de Laplace, que é um método simples para transformar um problema de valor inicial em uma equação algébrica, de modo a obter uma solução deste PVI de uma forma indireta, sem o cálculo de integrais e derivadas. Pela utilidade deste método nas Engenharias, Matemática, Computação, Física e outras Ciências Aplicadas, o método da transformadas de Laplace representa algo importante neste contexto, sendo muito usadas em diversas situações. (SODRÉ, 2003)

A transformada de Laplace é freqüentemente utilizada em problemas de diversas áreas da matemática aplicada, problema de valor inicial e de contorno de equação diferencial linear (com coeficiente dependente do tempo “*time invariant*”). Ela permite transformar as EDOs (equações diferenciais Ordinárias) em equações algébricas e as EDPs (equações diferenciais Parciais) em equações diferenciais com dimensão espacial menor. (BARRICHELLO, 1988)

Segue a definição da transformada de Laplace, suas propriedades e métodos para a sua determinação (BATISTA, 2011 *apud* SPIEGEL, 1965):

2.3.3 - Método da Transformada de Laplace com inversão numérica

Conforme descrito por BATISTA (2011), a transformada de Laplace de $F(t)$ é uma operação altamente estável no sentido de que pequenas flutuações em $F(t)$ são ponderadas na determinação da área sob uma curva. Além disso, o fator peso, e^{-st} , faz com que o comportamento de $F(t)$ em grandes valores de t seja efetivamente desprezível, a menos que s seja pequeno. Como consequência desses efeitos, uma grande variação de $F(t)$ para grandes valores de t indica uma variação muito pequena de

$f(s)$. Em contrapartida, a transformada inversa de Laplace de uma função é altamente instável. Uma pequena variação em $f(s)$ pode resultar em uma grande variação em $F(t)$.

No entanto, não há em geral, um método numérico completamente satisfatório para inverter a transformada de Laplace. Mas, para funções relativamente suaves, vários métodos são apresentados na literatura. Por exemplo, BELLMAN *et al.* (1966) converteu a transformada de Laplace por uma transformação de Mellin ($x=e^{-t}$) e usou uma quadratura numérica baseada em polinômios de Legendre deslocados. KRYLOV e SKOBLYA (1969) focaram na avaliação da integral de Bromwich, com uma técnica de substituição dos integrandos com polinômios interpolantes de potências negativas e integrou-os analiticamente.

A subrotina INLAP/DINLAP da biblioteca IMSL (1991) calcula a inversa da transformada de Laplace de uma função com valor complexo. Notando que se $F(t)$ é uma função que tende a zero no eixo real negativo, então se pode definir a transformada de Laplace dessa função, supondo-se que para algum valor de s o integrando é absolutamente integrável (BATISTA, 2011).

O cálculo da inversa da transformada de Laplace é baseado na aplicação do algoritmo épsilon para séries de Fourier complexas obtidas como uma aproximação discreta da integral de inversão. Dada uma transformada de valor complexo $L \{F(t)\} = f(s)$, a regra trapezoidal dá a seguinte aproximação para a transformada inversa:

$$G(t) = \left(\frac{e^{\alpha t}}{T} \right) \Re \left\{ \frac{1}{2} f(\alpha) + \sum_{k=1}^{\infty} f \left(\alpha + \frac{ik\pi}{T} \right) \exp \left(\frac{ik\pi t}{T} \right) \right\} \quad (2.5)$$

Esta é a parte real da soma de uma série de potências complexa em $z=\exp(i\pi t/T)$, e o algoritmo acelera a convergência das somas parciais dessa série de potência usando o algoritmo épsilon para calcular as correspondentes diagonais da aproximação de Pade. O parâmetro α é uma estimativa do máximo das partes reais das singularidades de f , e uma escolha errada de α pode dar uma falsa convergência. Mesmo nos casos em que o valor correto de α é desconhecido, o algoritmo tentará estimar um valor aceitável. Assumindo uma convergência satisfatória, o erro de discretização $E=G-F$ satisfaz a seguinte equação.

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2n\alpha T} F(2nT + t) \quad (2.6)$$

Segue-se que se $|F(t)| \leq Me^{\alpha t}$, então se pode estimar a expressão acima para obter ($0 \leq t \leq 2T$):

$$E \leq \frac{Me^{\alpha t}}{e^{2T(\alpha-\beta)} - 1} \quad (2.7)$$

Segundo PACHECO e CREUS (1997), geralmente a aplicação da transformada de Laplace não envolve maiores dificuldades, porém a inversão ou retorno ao domínio da variável t normalmente é de difícil execução analítica. Assim, a alternativa natural é uma abordagem através de métodos numéricos de inversão. Há uma unanimidade entre os pesquisadores quanto a não haver o melhor método de inversão, mas sim o método mais adequado para a classe de função que se quer inverter, mesmo porque a inversão numérica da transformada de Laplace é um processo mal condicionado (BELLMAN *et al.*, 1966).

Em vista disso, métodos numéricos têm sido desenvolvidos já que na maioria dos casos os métodos analíticos são insuficientes. Os melhores métodos numéricos conhecidos para a inversão da transformada de Laplace são baseados na integração numérica da integral de Bromwich ou na expansão da função original numa série de funções ortogonais (BARICHELLO, 1988).

Para a avaliação de diferentes técnicas numéricas de inversão, é preciso observar primeiramente certos critérios, como: aplicação a uma variedade de tipos comuns de problema de inversão; precisão numérica; tempo relativo de computação; dificuldades de programação e implementação, e outros. Consciente, no entanto, que nenhum método é definitivamente superior em todos os critérios (BARICHELLO, 1988)

Vários métodos têm sido descritos na literatura, nos quais a transformada inversa é obtida da integração complexa de inversão pelo uso da quadratura numérica, ou se obtém a inversa como uma expansão em série dos termos de um conjunto de funções linearmente independentes (BARICHELLO, 1988).

CAPÍTULO 3

MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Neste capítulo é apresentado o modelo matemático para o balanço populacional de partículas, que resultou da inclusão de um termo difusivo no modelo proposto por Gelbard e Seinfeld (1978), o qual foi usado por Batista (2011), bem como a aplicação da metodologia de solução do problema em questão.

3.1 – FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A dinâmica para um sistema particulado espacialmente homogêneo descrito pela função $n(v,t)$, em que partículas individuais podem crescer, pela adição de material da fase fluida (ou diminuir pela perda de material), e em que partículas podem colidir e coagular, bem como migrar no fluido pelo processo de difusão, é descrita pela seguinte equação geral de balanço populacional.

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} = D_{eff} \frac{\partial^2 n(v,t)}{\partial v^2} + \frac{1}{2} \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t) d\tilde{v} - \int_0^\infty \beta(v,\tilde{v})n(v,t)n(\tilde{v},t) d\tilde{v} + S[n(v,t),v,t] \quad (3.1a)$$

Cuja condição inicial e de contorno requeridas para a Eq.(3.1a) são dadas por:

$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0} e^{-v/v_0} \quad (3.1b)$$

$$n(0,t) = 0 \quad (3.1c)$$

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial v} = 0 \quad (3.1d)$$

Sendo, N_0 é o número inicial de partícula e v_0 é o volume inicial médio de partícula;

$n(v,t)$ é a função densidade de distribuição de tamanho de partículas, sendo que $n(v,t)dv$ é o número de partículas por unidade de volume do fluido, numa escala de volume v para $v+dv$.

$I(v,t)=dv/dt$ é a taxa de mudança de volume v pela transferência de material entre partículas e fase fluida.

$\beta(v, \tilde{v})$ é o coeficiente de coagulação da partícula para volumes v e \tilde{v} .

D_{eff} é o coeficiente de difusão efetiva.

S_v é a taxa líquida de adição de partículas novas no sistema.

Os termos expressos na Eq.(3.1a) têm as seguintes representações: Primeiro termo – Taxa de acúmulo de partículas de volume (v). Segundo termo – Transporte convectivo de partículas. Terceiro termo – Transporte difusivo de partículas. Quarto termo – Taxa de aparecimento de novas partículas numa escala de tamanho ($v, v+dv$) devido a colisão e conseqüente coalescência, agregação de duas partículas de volumes ($v - \tilde{v}$) e (\tilde{v}) para formar partículas de volume (v) (assumindo conservação de volume durante a coagulação). Quinto termo - Taxa de desaparecimento de partículas na escala de tamanho ($v, v+dv$) pela colisão e conseqüente coalescência, agregação com outras partículas do sistema. Sexto termo (último) – Representa todas as fontes e sumidouros de partículas.

A Eq. (3.1a) pode ser escrita também em termos do diâmetro da partícula (assumindo partículas esféricas), através das definições dadas pelas Eqs. (3.2a-d) abaixo, que determinam a conversão do volume v para o diâmetro D .

$$n(D,t) = (\pi D^2 / 2) n(v,t) \quad D_0 = (6v_0 / \pi)^{1/3} \quad \tilde{v} = v / v_0 \quad \tilde{D} = D / D_0 \quad (3.2a-d)$$

3.2 – APLICAÇÃO DA TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Para resolver o modelo matemático para sistema particulado descrito pela equação integro - diferencial parcial (3.1a), a técnica da transformada de Laplace foi empregada, bem como o Método das Características e o Teorema de Bernoulli.

Para este caso, considerou-se: $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$ (coagulação constante), $I(v, t) = Gv$ (crescimento linear), D_{eff} (coeficiente de difusão constante) e $S[n(v, t), v, t] = 0$ (sem adição de partículas novas no sistema).

Assim, a Eq.(3.1a) toma a forma:

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + G \frac{\partial(vn(v, t))}{\partial v} = D_{eff} \frac{\partial^2 n(v, t)}{\partial v^2} + \frac{1}{2} \int_0^v \beta_0 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \beta_0 n(v, t) M_0(t) \quad (3.3)$$

Onde, $M_0(t)$ é o momento de ordem zero. Conforme descrito por Ramabhadran *et al.* (1976), $M_0(t)$ é o número total de partículas presentes na distribuição $n(v, t)$, sendo definido por (Veja o cálculo do momento $M_0(t)$ no Apêndice II):

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (3.4)$$

Os seguintes grupos adimensionais foram usados por Gelbard e Seinfeld (1978) e serão aplicados às Eqs. (3.1) na comparação do modelo do presente trabalho com o da literatura:

$$\Lambda = \frac{G}{\beta_0 N_0} \quad \tau = M_0 \beta_0 t \quad \frac{D_{eff}}{\beta_0 N_0} = \alpha \quad (3.5.a-c)$$

Aplicando-se a Transformada de Laplace na Eq.(3.3), a fim de remover a variável independente v , obtém-se (ver detalhes no apêndice I):

$$L \left[\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} \right] = \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} \quad (3.6a)$$

$$L \left[G \frac{\partial(vn(v, t))}{\partial v} \right] = -Gs \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial s} \quad (3.6b)$$

$$L \left[D_{eff} \frac{\partial^2 n(v,t)}{\partial v^2} \right] = D_{eff} s^2 \bar{n}(s,t) \quad (3.6c)$$

$$L \left[\frac{\beta_0}{2} \int_0^{v/2} n(v-\tilde{v},t) n(\tilde{v},t) d\tilde{v} \right] = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.6d)$$

$$L \left[\beta_0 n(v,t) M_0(t) \right] = \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.6e)$$

$$L \left[n(v,0) \right] = L \left[\frac{N_0}{v_0} e^{-v/v_0} \right] = \bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s+(1/v_0)} \quad (3.6f)$$

Em que, $\bar{n}(s,t) = L \left[n(v,t) \right]$

Portanto, a Equação Diferencial Transformada é escrita como:

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - Gs \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = D_{eff} s^2 \bar{n}(s,t) + \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) - \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t)$$

Agrupando os termos semelhantes, resulta:

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - Gs \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) + [D_{eff} s^2 - \beta_0 M_0(t)] \bar{n}(s,t) \quad (3.7a)$$

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s+(1/v_0)} \quad (3.7b)$$

As Eqs. (3.7a) e (3.7b) acima, ambas transformadas por Laplace, formam um PVI (Problema de Valor Inicial), dado pela EDP (Equação Diferencial Parcial) e sua distribuição inicial, respectivamente.

Sendo a EDP, Eq.(3.7a), uma equação diferencial do tipo hiperbólica, a mesma é resolvida analiticamente pelo Método das Características mostrado a seguir, a fim de transformá-la em uma EDO (Equação Diferencial Ordinária):

Considera-se inicialmente a seguinte parametrização:

$$\bar{n} = \bar{n}(s, t) \text{ e, então: } \bar{n} = \bar{n}[s(\xi), t(\xi)] \quad (3.8a,b)$$

Onde, na Eq.(3.8b) aplica-se a regra da cadeia para a obtenção da derivada total da Eq.(3.7a) em relação a ξ , mostrada a seguir:

$$\frac{d\bar{n}}{d\xi} = \frac{ds}{d\xi} \frac{\partial \bar{n}}{\partial s} + \frac{dt}{d\xi} \frac{\partial \bar{n}}{\partial t} \quad (3.8c)$$

Assim, comparando-se a Eq.(3.8c), acima, com a EDP transformada, Eq.(3.7a), é possível deduzir que:

$$\frac{dt}{d\xi} = 1; \quad \frac{ds}{d\xi} = -Gs \quad (3.8d-e)$$

Sendo ambas, por definição, as equações características da Eq.(3.7a).

Substituindo-se as Eqs.(3.8d,e) acima, na EDP transformada, Eq.(3.7a), da qual o lado esquerdo se reduz a $\frac{d\bar{n}(s,t)}{dt}$, resultando na EDO abaixo:

$$\frac{d\bar{n}(s,t)}{dt} + [\beta_0 M_0(t) - D_{eff} s^2] \bar{n}(s,t) = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.9a)$$

Ou seja, a EDP transformada, Eq.(3.7a), reduziu-se na EDO (3.9a) descrita acima, cuja distribuição inicial é resolvida a seguir:

Considera-se, inicialmente, que $t = \xi$, em decorrência da Eq.(3.8d).

Da Eq.(3.8e), $\frac{ds}{dt} = -Gs$, segue que $s = s_0 \exp(-Gt)$. Logo, $s_0 = s \exp(Gt)$, a qual é substituída na distribuição inicial transformada, Eq. (3.7b), obtendo-se a seguinte expressão para a distribuição inicial da EDO:

$$\bar{n}(s, 0) = \frac{(N_0/v_0)}{s \exp(Gt) + (1/v_0)} \quad (3.9b)$$

Assim, em resumo, temos um PVI dado pelas Eqs.(3.9a) e (3.9b), ou seja, pela EDO e sua distribuição inicial, respectivamente.

Resolvendo a EDO, Eq.(3.9a), pelo Teorema de Bernoulli (ver resolução no Apêndice III), resulta:

$$\bar{n}(s, t) = \frac{\exp[D_{eff}s^2t]}{(2 + N_0\beta_0t)^2 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{\exp[D_{eff}s^2t]}{N_0\beta_0(2 + N_0\beta_0t)} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \left[\ln(2 + N_0\beta_0t) \right] \right\} \right\}} \quad (3.10a)$$

Segue o calculo para a obtenção do valor da constante C:

Calculando-se a Eq.(3.10a) em t=0, tem-se:

$$\bar{n}_0 = \frac{1}{4 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{1}{2N_0\beta_0} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \ln(2) \right\} \right\}} \quad (3.10b)$$

Como a Eq.(3.10b) acima é equivalente à distribuição inicial $\bar{n}_0 = \frac{(N_0/v_0)}{s \exp(Gt) + (1/v_0)}$

dada pela Eq.(3.9b), segue a igualdade:

$$\frac{(N_0/v_0)}{s \exp(Gt) + (1/v_0)} = \frac{1}{4 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{1}{2N_0\beta_0} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \ln(2) \right\} \right\}} \quad (3.11a)$$

Rearranjando a Eq.(3.11a) acima a fim de obter a expressão em C:

$$C = \frac{(v_0 s \exp(Gt) + 1)}{4N_0} + \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{1}{2N_0\beta_0} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \ln(2) \right\} \quad (3.11b)$$

A Eq.(3.10a), com a expressão de C, dada pela Eq.(3.11b), representa a transformada de Laplace da função $n(v,t)$. Para o retorno à função original $n(v,t)$, aplica-se então a inversa da transformada de Laplace na Eq. (3.10a), obtendo:

$$n(v,t) = \frac{1}{(2+N_0\beta_0 t)^2} L^{-1} \left\{ \frac{\exp[D_{eff}s^2 t]}{\left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left[-\frac{\exp[D_{eff}s^2 t]}{N_0\beta_0(2+N_0\beta_0 t)} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \ln(2+N_0\beta_0 t) \right] \right\}} \right\} \quad (3.12)$$

Representando a Eq.(3.12) em termos do diâmetro da partícula, através da conversão do volume v para o diâmetro D , pela aplicação das equações (3.2a) e (3.2b), resulta:

$$n(D,t) = \frac{3D^2}{(2+N_0\beta_0 t)^2} L^{-1} \left\{ \frac{\exp[D_{eff}s^2 t]}{\left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left[-\frac{\exp[D_{eff}s^2 t]}{N_0\beta_0(2+N_0\beta_0 t)} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \ln(2+N_0\beta_0 t) \right] \right\}} \right\} \quad (3.13a)$$

Sendo,

$$C = \frac{(D_0^3 s \exp(Gt) + 1)}{4N_0} + \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{1}{2N_0\beta_0} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] \ln(2) \right\} \quad (3.13b)$$

As Eqs.(3.13a) e (3.13b) podem também ser expressa na forma adimensional pela aplicação das Eqs. (3.5b) e (3.5c), o que resulta:

$$n(D,t) = \frac{3D^2}{(2+\tau)^2} L^{-1} \left\{ \frac{\exp\left[\alpha \frac{N_0}{M_0} s^2 \tau\right]}{\left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{\exp\left[\alpha \frac{N_0}{M_0} s^2 \tau\right]}{N_0 \beta_0 (2+\tau)} + \frac{\alpha s^2}{N_0 \beta_0} \exp[-2\alpha s^2] [\ln(2+\tau)] \right\} \right\}} \right\} \quad (3.14a)$$

$$C = \left(\frac{D_0^3 s \exp\left(\alpha \frac{N_0}{M_0} \tau\right) + 1}{4N_0} \right) + \frac{\beta_0}{2} \left\{ -\frac{1}{2N_0 \beta_0} + \frac{\alpha s^2}{N_0 \beta_0} \exp[-2\alpha s^2] \ln(2) \right\} \quad (3.14b)$$

Tendo em vista a necessidade de inversão na Eq. (3.13), com a Eq. (3.13b), será empregado o método de solução que consiste na aplicação da transformada de Laplace com inversão numérica, para a obtenção da solução do modelo abordado, e assim estimar a função $n(D,t)$. Os resultados do algoritmo de solução para o método numérico empregado são apresentados e discutidos no próximo capítulo.

A seguir o fluxograma do algoritmo de solução que foi usado na simulação do problema físico.

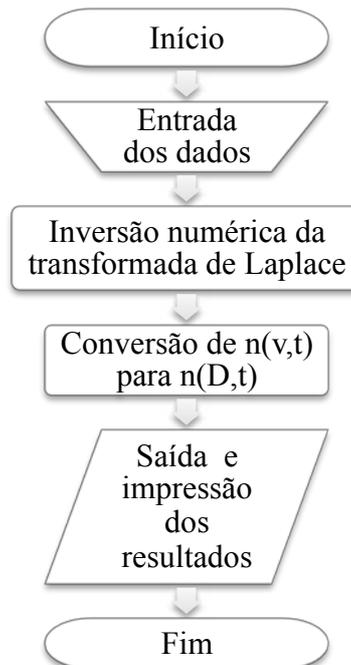


Figura 3.1 - Fluxograma do algoritmo de solução.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para estimar a função densidade de distribuição de tamanho de partículas $n(D,t)$ e assim obter a solução do modelo matemático abordado, aplicou-se a inversão numérica da transformada de Laplace na solução do modelo, o qual foi implementado em um código computacional em linguagem Fortran 90/95 que usou a sub-rotina DINLAP, com tolerância igual a 10^{-4} , e o resultado foi gerado em um notebook com processador Intel(R) CORE(TM) i5 de 2.30 GHz.

A transformada de Laplace da função $n(v,t)$ foi obtida pela aplicação da técnica na equação diferencial parcial do modelo em relação ao volume, com os seguintes coeficientes de coagulação $\beta(v,\tilde{v}) = \beta_0$ e difusão D_{eff} , ambos constantes, tendo sido empregados também o Método das Características e a solução de Bernoulli na equação diferencial.

Para a reprodução dos pontos obtidos e a projeção das curvas apresentadas, utilizou-se o software Grapher 9.

4.1 – ANÁLISE DO MODELO PROPOSTO

Para ilustrar o comportamento dos resultados da solução do problema abordado, foram apresentados gráficos, que foram usados para ilustrar também as comparações desses resultados com os da solução via elementos finitos publicados na literatura por GELBARD e SEINFELD (1978).

Para a simulação do problema unidimensional abordado, foi analisada uma hipótese que considera os parâmetros mostrados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1- Coeficientes e taxas usados no caso-teste.

$\beta(v,\tilde{v})$	I_v	$S_v(n_v, v, t)$	$D_{eff}(n, v)$
β_0	Gv	0	D_{eff}

Assim, a hipótese em análise consiste em considerar a ocorrência de crescimento linear (Gv), coagulação com coeficiente de coagulação constante (β_0) e difusão com coeficiente difusivo constante (D_{eff}).

Na simulação do problema foram assumidos os seguintes valores para os parâmetros: $G = 2,4 \mu m / h$ e $\beta_0 = 4,6 \cdot 10^{-7} cm^3 / h$, os quais foram estimados no modelo de precipitador publicado por Li *et al.*,(2000), sendo que para D_{eff} (difusão) foram atribuídos diferentes valores em cada instante de tempo. Para a condição inicial foram assumidos: $N_0 = 2 \cdot 10^6 cm^{-3}$ e $v_0 = 1 cm^3$.

O caso teste em estudo será discutido a seguir e seus resultados são ilustrados através dos gráficos representados pelas Figuras 4.2 a 4.7, para cada instante de tempo: $t = 0,25h$, $t = 1,00h$, $t = 2,00h$, $t = 4,00h$, $t = 6,00h$ e $t = 8,00h$, com variações do coeficiente de difusão $D_{eff} (\mu m^2 / h)$, cujos valores foram: 10^{-10} , 10^{-8} , 10^{-6} , 10^{-4} e 10^{-2} .

Na simulação do modelo abordado, foram utilizados diferentes números de pontos de malha, de forma que o número de pontos usado foi dado conforme o coeficiente difusivo considerado. Assim, para os valores de coeficiente de difusão: 10^{-10} , 10^{-8} , 10^{-6} , 10^{-4} e 10^{-2} , o número de pontos foram iguais a: 91, 91, 101, 141 e 101, respectivamente. Pois, a obtenção de curvas suavizadas consistiu em um refinamento adequado, mediante a escolha de um determinado numero de pontos de malha.

Antes de discutir os resultados obtidos no presente trabalho, segue a Figura 4.1 que ilustra graficamente as comparações dos resultados obtidos no modelo abordado com os publicados na literatura por GELBARD e SEINFELD (1978), via elementos finitos, nos instantes $\tau = 0,25$; $\tau = 1,0$ e $\tau = 2,0$. Para essa comparação, foram usados parâmetros adimensionais que tiveram os seguintes valores: $\Lambda = \frac{G}{\beta_0 N_0} = 1$ e

$$\alpha = \frac{D_{eff}}{\beta_0 N_0} = 10^{-10} \text{ (tendendo a zero), sendo que } \tau = M_0 \beta_0 t.$$

Quanto às condições iniciais, foram considerados: $N_0 = 1 cm^{-3}$ e $v_0 = 1 cm^3$. Tendo sido utilizado 81 pontos da malha, para esses dados.

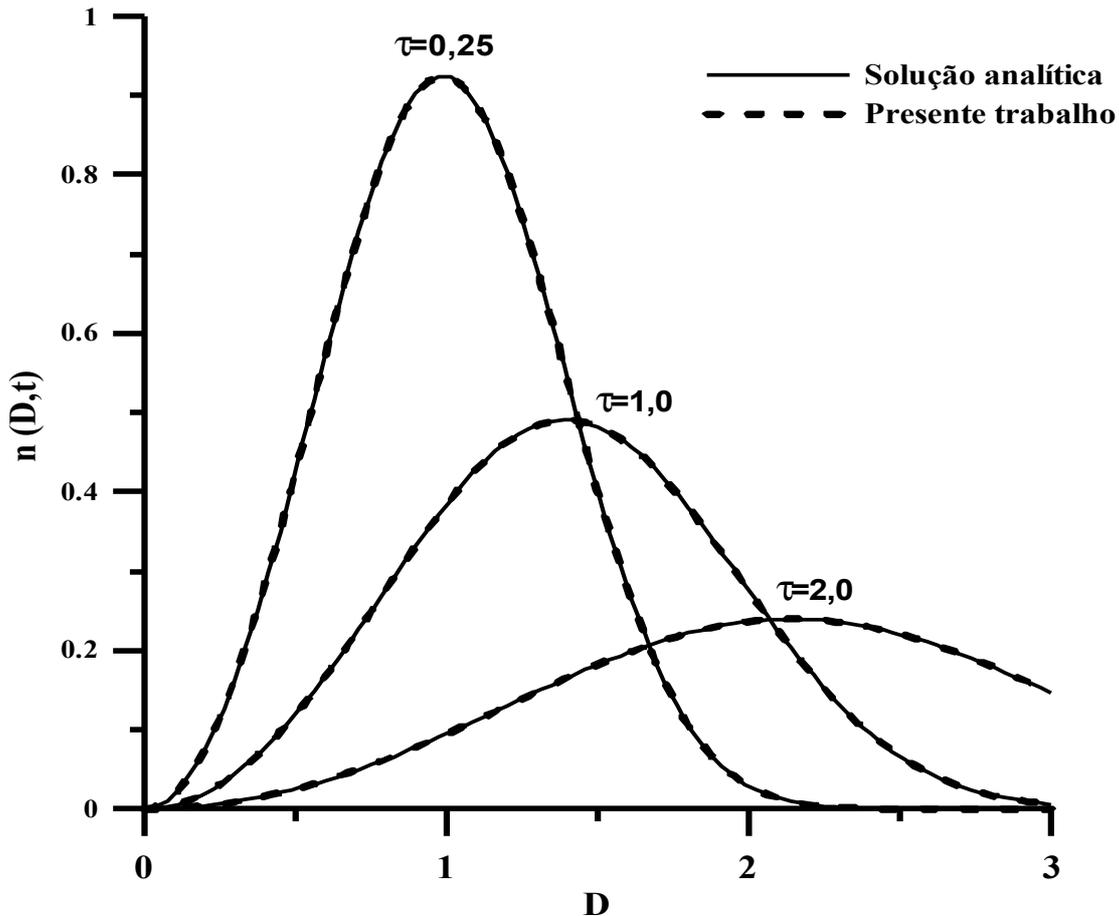


Figura 4.1 - Comparação entre os resultados gerados no presente trabalho e os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978) para $\Lambda = \frac{G}{\beta_0 N_0} = 1,0$ e $\alpha = \frac{D_{eff}}{\beta_0 N_0} = 10^{-10}$.

Nos três tempos analisados, observa-se que houve excelente concordância entre os resultados obtidos no presente trabalho com os resultados da literatura. Isso é devido ao coeficiente de difusão com o valor suficientemente baixo $D_{eff} = 10^{-10} \mu m^2 / h$, de forma que este não influencie nos resultados do modelo do presente trabalho.

Observa-se também que quando o tempo aumenta a densidade de tamanho de partículas diminui e o diâmetro aumenta, com significativa taxa de aumento. Segundo Batista (2011), isso é devido à colisão entre partículas para formar corpos maiores, cujo aumento do diâmetro é descrito pela taxa de crescimento considerada em ambos os modelos.

As Figuras 4.2, 4.3 e 4.4 ilustram graficamente o comportamento da densidade de população $n(D,t)$, respectivamente, nos instantes $t=0,25h$, $t=1,0h$ e $t=2,0h$, com as

variações do coeficiente de difusão (em $\mu\text{m}^2 / \text{h}$): $D_{\text{eff}} = 10^{-10}$, $D_{\text{eff}} = 10^{-8}$, $D_{\text{eff}} = 10^{-6}$, $D_{\text{eff}} = 10^{-4}$ e $D_{\text{eff}} = 10^{-2}$.

A Figura 4.2 mostra, no instante $t=0,25\text{h}$, o comportamento da função $n(D,t)$ com o coeficiente de difusão variando em $D_{\text{eff}} = 10^{-10} \mu\text{m}^2 / \text{h}$, $D_{\text{eff}} = 10^{-8} \mu\text{m}^2 / \text{h}$, $D_{\text{eff}} = 10^{-6} \mu\text{m}^2 / \text{h}$. Neste instante, observa-se graficamente que o diâmetro das partículas e a densidade de população destas não variaram com a variação do coeficiente de difusão considerado para este instante.

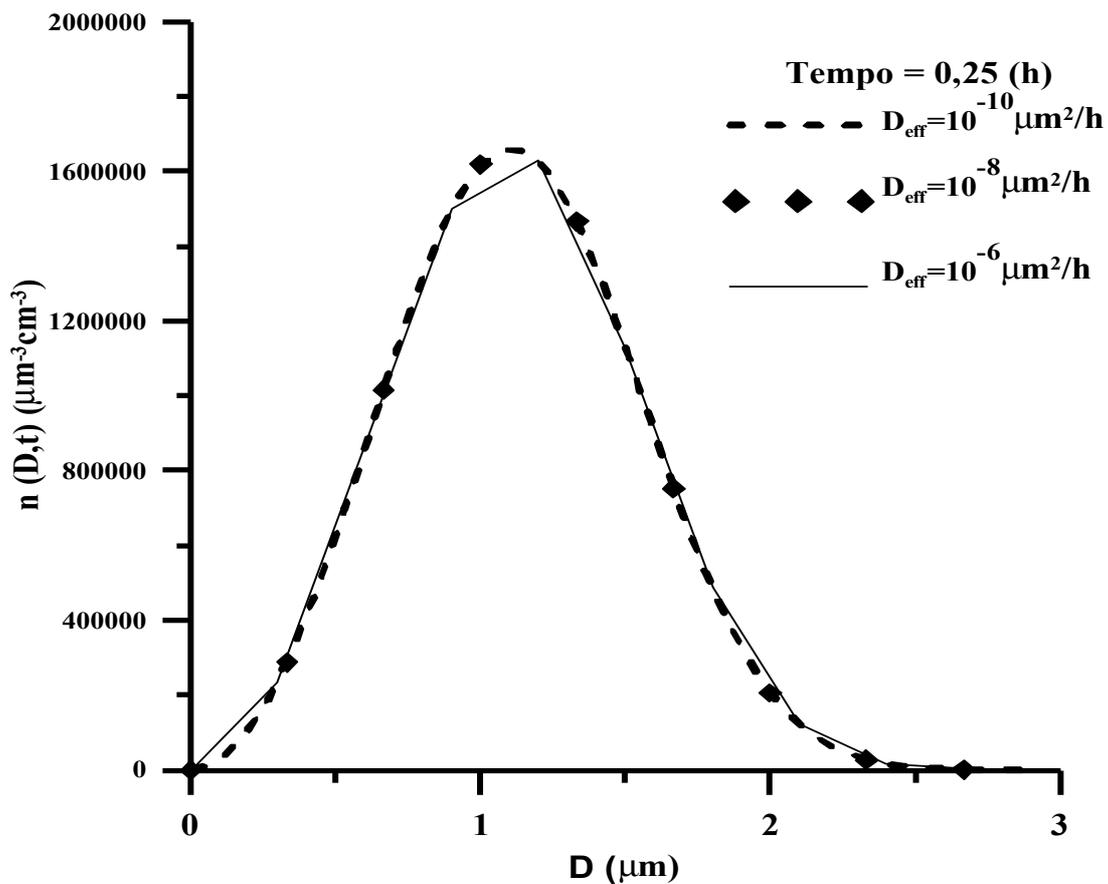


Figura 4.2 - Comparação da densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 0,25 (h), com variações do coeficiente de difusão.

No fenômeno ocorrido no instante $t = 0,25\text{h}$, não houve efeitos difusivos relevante sobre as partículas e o comportamento dinâmico das mesmas, de forma que neste instante não houve crescimento significativo das partículas e também a densidade de população não teve alteração considerável.

A Figura 4.3 mostra o comportamento da função $n(D,t)$ no instante $t = 1,00\text{h}$ com a variação do coeficiente de difusão de valores (em $\mu\text{m}^2 / \text{h}$): $D_{\text{eff}} = 10^{-10}$,

$D_{eff} = 10^{-8}$, $D_{eff} = 10^{-6}$ e $D_{eff} = 10^{-4}$, sendo que essa variação não influenciou significativamente no comportamento dinâmico das partículas e assim a função $n(D,t)$ se manteve graficamente inalterada também neste instante.

A análise física do fenômeno ocorrido neste instante é semelhante ao observado no instante anterior $t = 0,25h$, pois não houve efeitos difusivos significativos sobre o comportamento dinâmico das partículas.

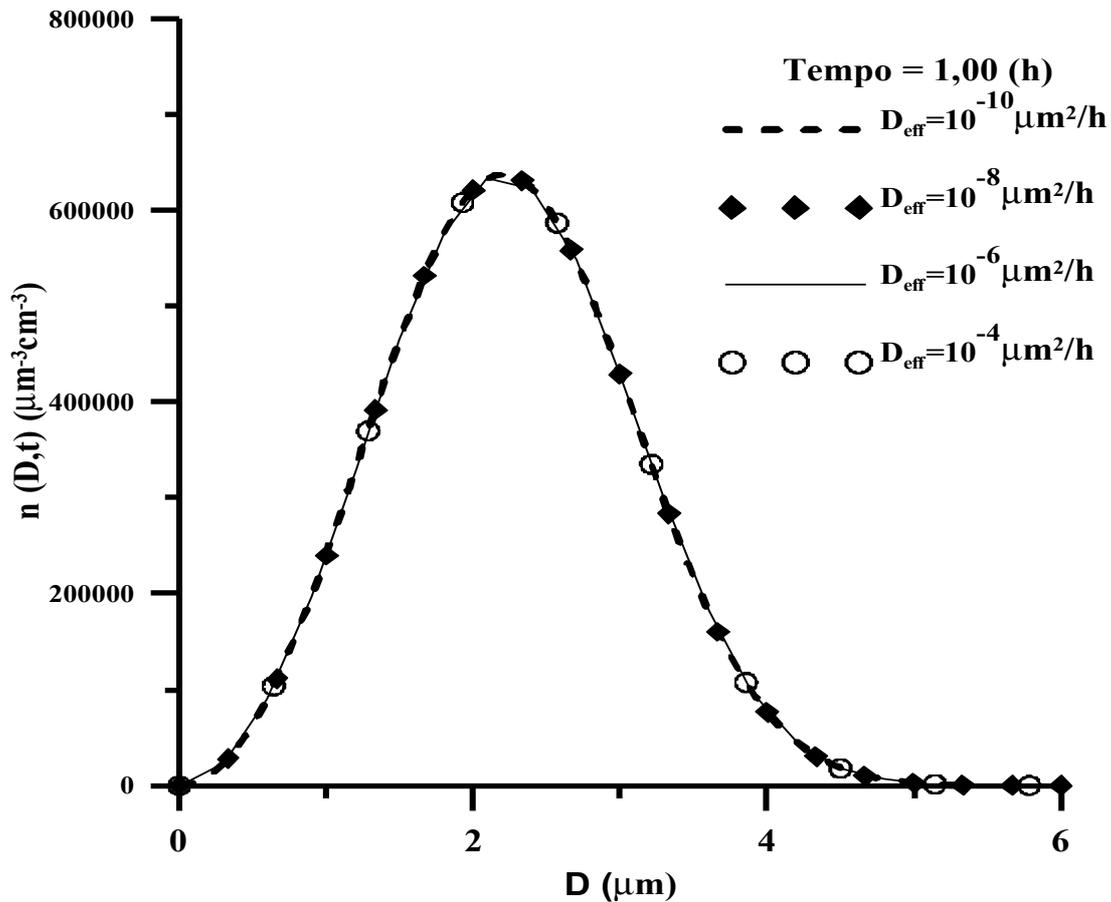


Figura 4.3 - Comparação da densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 1,00 (h), com variações do coeficiente de difusão.

Na Figura 4.4 é ilustrado o comportamento da função $n(D,t)$ no instante $t = 2,00h$, cujo coeficiente difusivo (em $\mu m^2 / h$) variou em: $D_{eff} = 10^{-10}$, $D_{eff} = 10^{-8}$, $D_{eff} = 10^{-6}$, $D_{eff} = 10^{-4}$ e $D_{eff} = 10^{-2}$. Assim como ocorreu nos dois instantes anteriores $t = 0,25h$ e $t = 1,00h$, também neste instante a variação do coeficiente de difusão não influenciou variando não influenciou na função $n(D,t)$.

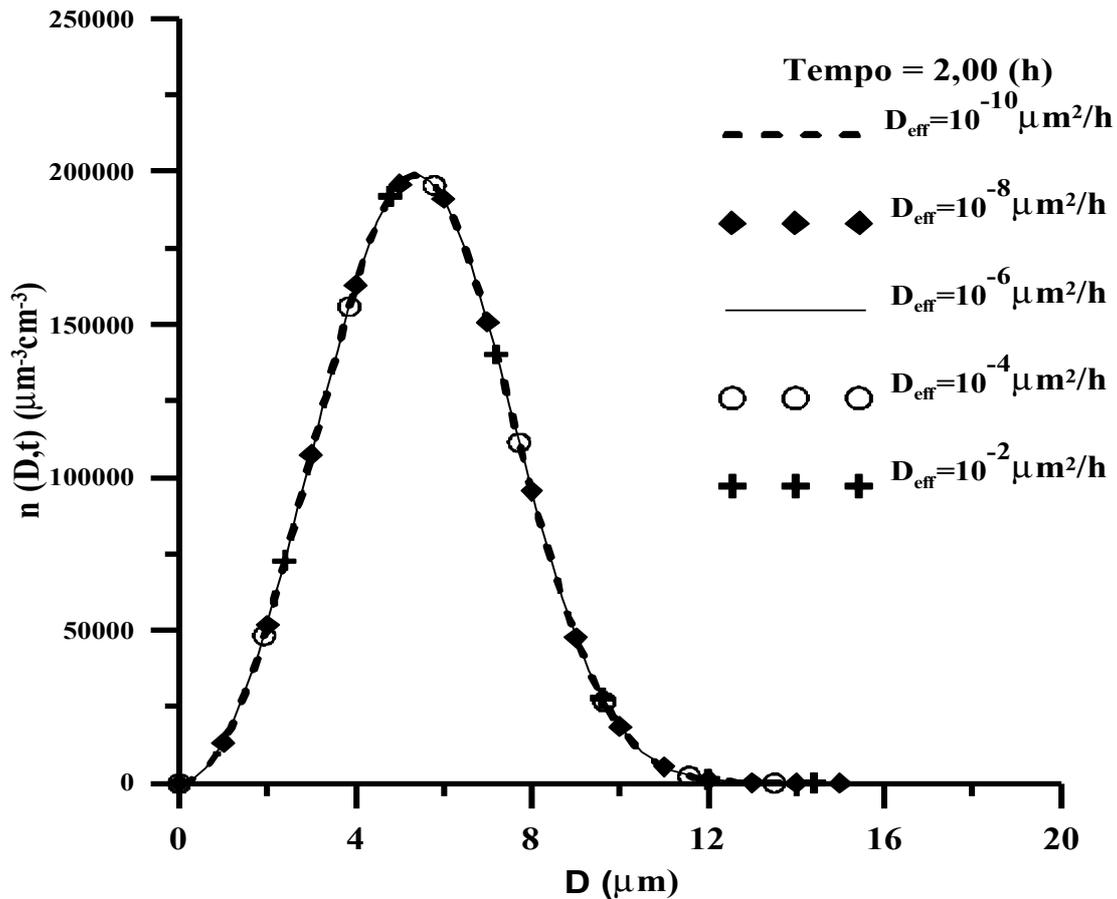


Figura 4.4 - Comparação da densidade de população gerada no presente trabalho durante o intervalo de tempo 2,00 (h), com variações do coeficiente de difusão.

Observa-se, porém, que conforme o tempo aumentou de $t = 0,25h$ a $t = 2,00h$, o diâmetro das partículas aumentou e diminuiu a densidade de população, sem uma influência significativa da variação do coeficiente difusivo utilizado no modelo. O aumento no diâmetro foi causado pelas colisões entre partículas, e ocorreu principalmente devido à taxa de crescimento considerada no modelo do presente trabalho.

Nos gráficos das Figuras 4.5, 4.6 e 4.7, que mostram o comportamento da densidade de população, respectivamente, nos instantes $t = 4,0h$; $t = 6,0h$ e $t = 8,0h$, foi usado somente o coeficiente de difusão $D_{eff} = 10^{-6} \mu m^2 / h$, pois ao variar o coeficiente de difusão, a função $n(D,t)$ não teve nenhuma variação, para cada um desse instante de tempo fixado.

O comportamento da função $n(D,t)$ em $t = 4,0h$; $t = 6,0h$ e $t = 8,0h$ é ilustrado para observar que mesmo sem nenhuma influência da variação do coeficiente difusivo

sobre a densidade de população, em cada um desses instantes fixados, o diâmetro das partículas continuaram aumentando quando o tempo aumentou e então a densidade de população continuou diminuindo. Tendo esse aumento do diâmetro ocorrido somente devido ao modelo considerar a taxa de crescimento, pois o coeficiente de difusão considerado para estes instantes não influenciou na função $n(D,t)$.

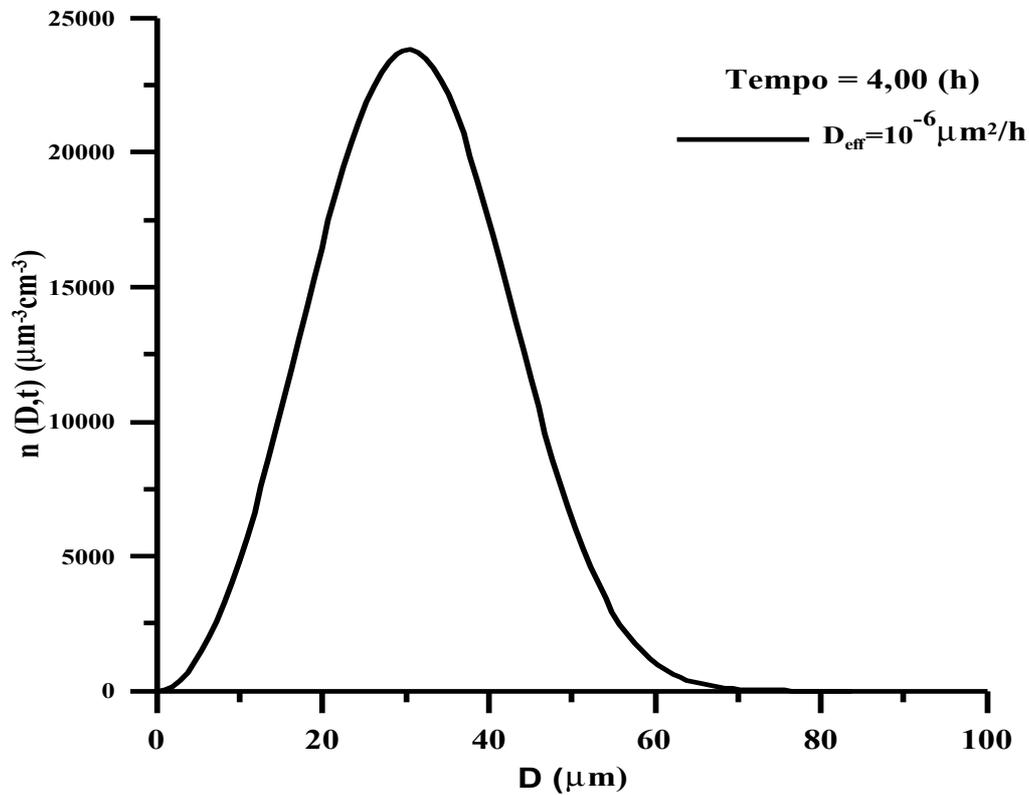


Figura 4.5 - Densidade de população gerada no presente trabalho durante o tempo 4,00 (h), com o coeficiente de difusão $D_{\text{eff}} = 10^{-6}$.

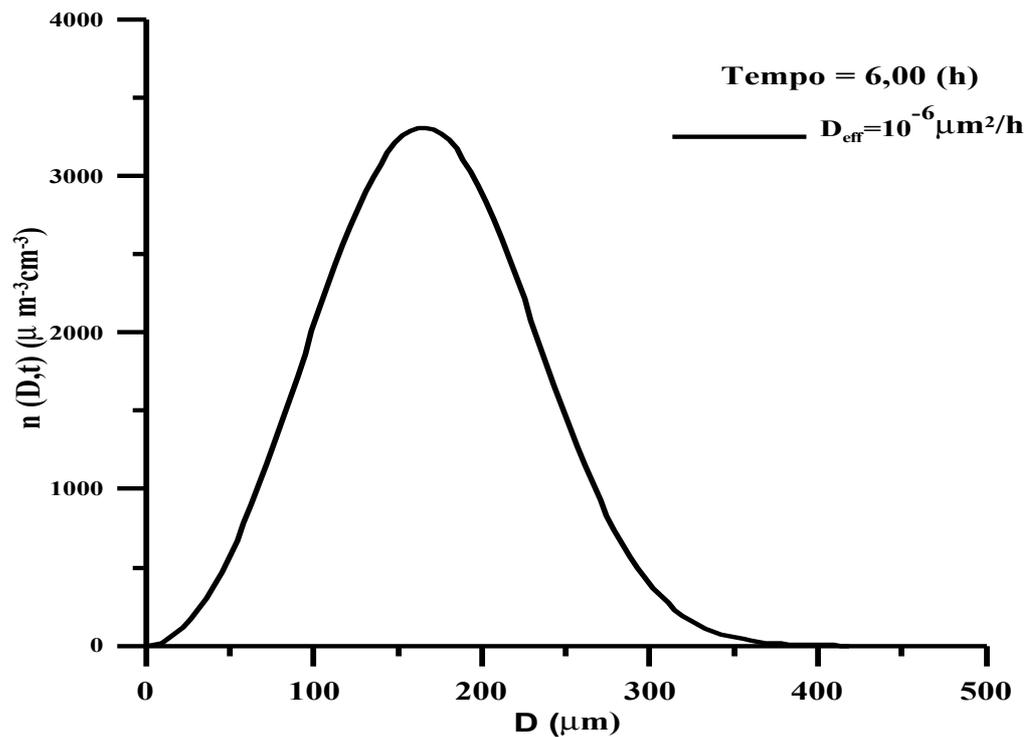


Figura 4.6 - Comparação da densidade de população gerada no presente trabalho durante o tempo 6,00 (h), com o coeficiente de difusão $D_{\text{eff}} = 10^{-6}$.

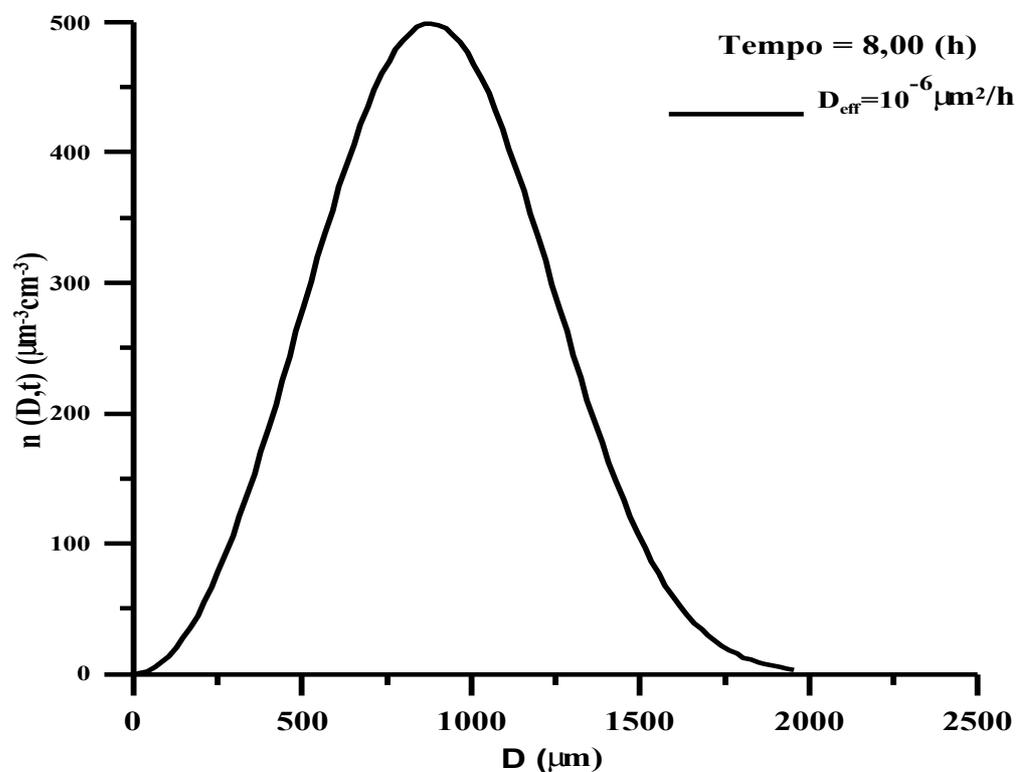


Figura 4.7 - Comparação da densidade de população gerada no presente trabalho durante o tempo 8,00 (h), com o coeficiente de difusão $D_{\text{eff}} = 10^{-6}$.

De uma forma geral, analisando graficamente a comparação dos resultados obtidos neste trabalho com os da literatura, observa-se que houve excelente concordância gráfica entre tais resultados. Pois, para essa comparação, o coeficiente difusivo considerado no modelo do presente trabalho teve valor suficientemente pequeno, de forma a não influenciar em sua densidade de população.

Analisando os resultados obtidos no presente trabalho, para o instante fixado $t = 0,25h$, observa-se que não houve variação significativa na densidade de população $n(D,t)$, quando variou o coeficiente de difusão, embora graficamente a função $n(D,t)$ não tenha variado para este instante. O fenômeno ocorrido em $t = 0,25h$ é análogo ao ocorrido nos instantes fixados $t = 1,0h$ e $t = 2,0h$. Quanto aos resultados obtidos para o instante fixado $t = 4,0h$, a densidade de população neste instante não teve nenhuma variação, quando o coeficiente de difusão variou, da mesma forma que ocorreu nos instantes fixados $t = 6,0h$ e $t = 8,0h$.

Em todos os instantes do processo, a densidade de população diminuiu quando o tempo aumentou devido ao aumento do diâmetro das partículas, mesmo não havendo influência do coeficiente difusivo sobre a função $n(D,t)$. Tendo o aumento do diâmetro ocorrido pela taxa de crescimento considerada no modelo.

Analisando fisicamente, observa-se que nos instantes iniciais do processo, de $t = 0,25h$, $t = 1,0h$ e $t = 2,0h$, em que as partículas têm menor diâmetro, a variação da densidade de população, embora não tenha sido significativa, é um fenômeno explicado pelo fato de partículas menores serem mais sujeitas aos efeitos difusivos, pois, conforme descrito por Elgarayhi *et al.* (2004), a difusão representa o principal efeito dinâmico em partículas muito pequenas.

Assim, a variação da densidade de população de partículas pequenas, nos instantes iniciais do processo, mesmo não tendo sido significativa, ocorreu por influência da difusão que afeta principalmente a população de partículas de menor tamanho, embora essa variação não seja visível graficamente.

Quanto aos resultados obtidos para os instantes seguintes $t = 4,0h$; $t = 6,0h$ e $t = 8,0h$, em que as partículas haviam aumentado de tamanho, a densidade de população não teve nenhuma variação, devido a estas partículas serem menos afetadas pela difusão.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

5.1 – CONCLUSÕES

Os resultados obtidos neste trabalho permitiram avaliar a influência do termo difusivo presente na equação de balanço populacional que foi empregada no problema físico abordado, de transporte convectivo e difusivo de partículas com taxa de nascimento e morte, cuja solução foi obtida pela técnica da transformada de Laplace com inversão numérica que mostrou assim a sua aplicabilidade na solução desse problema.

Os resultados gerados pela inversão numérica da transformada de Laplace, a qual foi executada pela subrotina DINLAP da biblioteca IMSL (1989), foram comparados variando-se o coeficiente de difusão em cada instante de tempo do processo. A partir dessas comparações, foi observado que o coeficiente difusivo não influenciou sobre a densidade de população do modelo abordado.

Também foram gerados resultados da transformada de Laplace com inversão numérica usando um coeficiente difusivo suficientemente pequeno, de forma que não influencie nos resultados do presente trabalho. Esses resultados tiveram excelente concordância quando comparados com dados da literatura, confirmando assim a validade da metodologia de solução utilizada para resolver o problema do presente trabalho.

Para a visualização dos resultados referentes às comparações descritas acima, foi analisado o comportamento dos gráficos gerados na simulação do modelo do presente trabalho. Esses mecanismos alternativos foram suficientes para a interpretação dos resultados, e assim a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica mostrou-se capaz de fornecer resultados satisfatórios para o problema abordado.

5.2 – SUGESTÕES

Como sugestões para a continuação deste trabalho, propõem-se comparar os resultados do modelo de balanço populacional abordado por inversão numérica da Transformada de Laplace com os resultados por Transformada de Laplace e por Transformada de Integral.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAMOWITZ, M., STEGUN, I. A., 1965, *Handbook of Mathematical Functions*, U.S. National Bureau of Standards, Washington, D. C.

ALEXOPOULOS, A. H., ROUSSOS, A.I., KIPARISSIDES, C., 2004, “Part I: Dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes undergoing combined particle growth and aggregation”, *Chemical Engineering Science*, vol. 59, pp. 5751 – 5769.

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

BARICHELLO, L. B., 1988, *Inversão Numérica da Transformada de Laplace por Polinômios Trigonometricos e de Leguerre*, Dissertação – UFRGS, Brasil.

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

BELLMAN, R., KALABA, R. E., LOCKETT, J. A., 1966, Numerical inversion of the Laplace transform. *American Elsevier*, New York.

CRUMP, K. S., 1976, “Numerical inversion of Laplace transforms using a Fourier series approximation”, *Journal of the Association for Computing Machinery*, v. 23, pp. 89-96.

CUNHA, E. P. R., 2007, **Modelagem matemática da separação de emulsões de petróleo**. Universidade Tiradentes - UNIT, Aracaju, SE-Brasil.

CUNHA, R. E. P. *et al*, 2008, “*Mathematical Modeling of the Destabilization of Crude Oil Emulsions Using Population Balance Equation*” Universidade Tiradentes - UNIT, Aracaju, SE-Brasil.

DE HOOG, F.R., KNIGHT, J. H., STOKES, A. N., 1982, “An improved method for numerical inversion of Laplace transforms”, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, v. 3, pp. 357-366.

DIRKSEN, J. A. RING, T. A., 1991, “Fundamentals of Crystallization: Kinetics Effect of Particle Size Distribution and Morphology”, *Chem Eng Sci.*; vol. 46, pp. 2389-2427.

DI VEROLI, G. Y. and RIGOPOULOS, S., 2011, “Modeling of aerosol formation in turbulent jet with the transported population balance equation-probability density function approach” *School of Mechanical, Aerospace and Civil Engineering, The University of Manchester, Manchester M60 1QD, United Kingdom.*

DRAKE, R. L., 1972, “A general mathematical survey of the coagulation equation”, in *Topics in Current Aerosol Research, Part 2 (3)* (Edited by G. M. Hidy and J. R. Brock), p. 201. Pergamon, New York.

ELGARAYHI, A., 2003, “Exact Solutions of the Aerosol Dynamic Equation in Spherical Geometry”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 77, pp. 211–217.

ELGARAYHI, A., 2004, “General Solutions of the Aerosol Dynamic Equation: Growth and Diffusion Processes”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 86, pp. 371–378.

FERREIRA, G. G. S.; LAGE, P. L. C.; SILVA, L. F. L. R.(2015), “Avaliação do método DQST na solução da equação de balanço populacional”, UFRJ- Programa de Engenharia Química – COPPE, Brasil.

GELBARD, F., SEINFELD, J. H., 1978, “Numerical Solution of the Dynamic Equation for Particulate Systems”, *Journal of computational physics*, vol. 28, 357-375

GIMBUN, J., NAGY, Z., K., RIELLY C., D. “Simultaneous Quadrature Method of Moments for the Solution of Population Balance Equations, Using a Differential Algebraic Equation Framework”, *UniVersiti Malaysia Pahang, Malaysia*.

HULBURT, H. M., KATZ, S., 1964, “Some Problems in Particle Technology: A Statistical Mechanical Formulation”, *Chemical Engineering Science*, vol.19, pp. 555-574.

ILIEVSKI, D., 1991, *Modelling Al(OH)₃ Agglomeration during Batch and Continuous Precipitation in Supersaturated Caustic Aluminate Solutions*, Thesis Doctor, University of Queensland, July.

IMSL LIBRARY, 1991, Math/Lib, Houston, TX.

INSTITUTO DE PESQUISA TECNOLÓGICA (IPT), 2007, “*Tecnologia da Cristalização*”, Apostila.

JONAS, A. G., 2002, *Crystallization Process System*, Butterworth-Heinemann.

KRYLOV, V. I., SKOBLYA, N. S., 1969, *Handbook of numerical inversion of Laplace transforms*. Translated by D. Louvish, Jerusalem: Israel Program for Scientific Translation.

KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1997, “On the Solution of Population Balance Equations by Discretization-III. Nucleation, Growth and Aggregation of Particles”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, no. 24, pp. 4659-4679.

LI, T. S., ROHL, A. L., ILIEVSKI, D., 2000, “Modelling non-stationary Precipitation Systems: sources of error and their propagation”, *Chemical Engineering Science*, vol. 55 pp. 6037-6047.

LITSTER, J. D., SMIT, D. J., HOUNSLOW, M. J., 1995, “Adjustable Discretized Population Balance for Growth and Aggregation”, *AIChE J.*, 41, 591 – 603.

LIU, Y., CAMERON, I. T., 2001, “A New Wavelet-Based Method for the Solution of the Population Balance Equation”, *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp.5283–5294.

MAHONEY, A. W.; RAMKRISHNA, D., 2002, “Efficient Solution of Population Balance Equations with Discontinuities by Finite Elements”, *Chemical Engineering Science*, vol. 57, pp. 1107 – 1119.

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

MARCHISIO, D. L.; RIVAUTELLA, L.; BARRESI, A. A., 2006a, “Design and Scale-Up of Chemical Reactors for Nanoparticle Precipitation”, *AIChE Journal*, Vol. 52, No. 5, pp. 1877 – 1887.

MARINANGELO, G. Copolimerização em emulsão de estireno e acrilato de butila com alto teor de sólidos: Estudo experimental e modelagem Matemática do processo em reator semicontínuo. Tese (doutorado). Escola Politécnica da USP, São Paulo, 2010.

MESBAH, A., KRAMERB, H.J.M., HUESMANA, A.E.M., VAN DEN HOF, PM.J., 2009. “A control oriented study on the numerical solution of the population balance equation for crystallization processes” *Chemical Engineering Science*, vol. 64, p. 4262 - 4277

PATIL, D. P.; ANDREWS, J. R. G., 1998. Analytical solution to continuous population balance model describing floc coalescence and breakage – a special case. *Chemical Engineering Science*, 53 (3), p. 599-601.

PAULIN, B. 2013, “Balanço populacional aplicado ao estudo da desemulsificação de petróleo e água em separador gravitacional” Dissertação – Universidade Federal do Paraná, Brasil.

PACHECO, A. R., CREUS, G. J., 1997, “Análise viscoelástica de Estruturas Laminadas Mediante Empleo da Inversão Numérica da Transformada de Laplace”, *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo e Desenhos em Engenharia*, vol. 13,4, pp 455 – 465.

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

RAMABHADRAN, T. E., PETERSON, T. W., SEINFELD, J. H., 1976, “Dynamics of Aerosol Coagulation and Condensation”, *AIChE*, vol. 22, nº 5.

RAMKRISHNA, D. 2000, “Population Balances – Theory and applications to particulate systems in engineering”. Academic Press, New York.

RAMKRISHNA, D., 1985, “The Status of Population Balances”, *Chemical Engineering Communications*, vol.3, pp.49-95.

RAMKRISHNA, D., BORWANKER, J. D., 1973, “A Puristic Analysis of Population Balance_I,” *Chem. Eng., Sci.*, 28, 1423.

RANDOLPH, A. D. 1969, “Effect of Crystal Breakage on Crystal Size Distribution from a mixed suspension Crystallizer”, *Industrial and Engineering Chemistry, Fundamentals*, vol. 8, pp. 58-69.

RANDOLPH, A. D., LARSON, M. A., 1988, *Theory of Particulate Processes*, Second Ed., New York: Academic Pres.

RIGOPOULOS, S., JONES, A. G., 2003, “Finite-Element Scheme for Solution of the Dynamic Population Balance Equation”, *AIChE Journal*, Vol. 49, No. 5, pp. 1127 – 1139.

SARRA, S. A., 2002, “The Method of Characteristics with applications to Conservation Laws”.

SANTOS, F. P., 2010 . Resolução da equação de balanço populacional pelo método de quadratura direta baseado em momentos generalizados. COPPE/UFRJ.

SCOTT, W. T., 1968, “Analytic Studies of Cloud Droplet Coalescence I”, *J. Atmos. Sci.*, vol. 25, pp. 54 – 65.

SILVA JUNIOR, A. F., 2012, “Método dos volumes finitos para equação de convecção e difusão em uma dimensão espacial”, Dissertação – UFF, Brasil

SÓDRE, U., 2003, “Transformadas de Laplace”, Notas de aulas, material compilado no dia 6 de Maio.

SPIEGEL, M. R., 2009, *Schaum's Outline of Theory and Problems of Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, McGraw-Hill.

STERLING, M. C.; BONNER, J. S.; PAGE, C. A.; FULLER, C. B.; ERNEST, A. N. S.; AUTENRIETH, R. L., 2004, **Modeling crude oil droplet – Sediment aggregation in nearshore waters**. *Environmental Science Technology*, v. 38, p. 4627-4634.

ULIANA, M., 2007, “Solução de equação de balanço populacional pelo método de classes com aplicação a processo de polimerização em suspensão”, Dissertação – USP, Brasil.

APÊNDICE I

CÁLCULO DA TRANSFORMADA DE LAPLACE DOS TERMOS DA EQUAÇÃO (3.1a), DESCRITA NO CAPÍTULO 3

Termo 1

$$L \left[\frac{\partial(n(v,t))}{\partial t} \right] = \int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial(n(v,t))}{\partial t} dv = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv = \frac{\partial}{\partial t} \bar{n}(s,t) dt \quad (I.1a)$$

$$\text{Onde, por definição, } \bar{n}(s,t) = \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv \quad (I.1b)$$

Termo 2

$$L \left[G \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} \right] = \int_0^{\infty} e^{-sv} G \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} dv \quad (I.2)$$

Aplicando-se a integração por partes na integral acima,

$$u = e^{-sv} \quad (I.3a)$$

$$du = -s e^{-sv} dv \quad (I.3b)$$

$$dv = G \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} dv \quad (I.3c)$$

$$v = \sigma_1 vn(v,t) \quad (I.3d)$$

$$L \left[G \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} \right] = \left[G e^{-sv} n(v,t) v \right]_0^{\infty} + sG \int_0^{\infty} e^{-sv} vn(v,t) dv \quad (I.3e)$$

Quando $v \rightarrow \infty$, $n(v,t) \rightarrow 0$, ou seja, devido a colisões entre as partículas, o volume cresce, de forma que a função densidade de distribuição de tamanho diminui pela ocorrência da perda de partículas para o corpo que esta aumentando de volume, logo:

$$L \left[G \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} \right] = sG \int_0^{\infty} e^{-sv} vn(v,t) dv \quad (I.4a)$$

$$\text{Sabendo-se que, } \bar{n}(s,t) = \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv \quad (I.4b)$$

E, derivando a Eq. (I.4b) em função de s, logo

$$\frac{d\bar{n}(s,t)}{ds} = - \int_0^{\infty} e^{-sv} vn(v,t) dv \quad (I.4c)$$

Substituindo-se a Eq. (I.4c) na Eq. (I.4a), obtém:

$$L \left[G \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} \right] = -sG \frac{d\bar{n}(s,t)}{ds} \quad (I.5)$$

Termo 3

$$L \left[D_{eff} \frac{\partial^2(n(v,t))}{\partial v^2} \right] = D_{eff} \int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial^2(n(v,t))}{\partial v^2} dv \quad (I.6)$$

Efetuada uma integração por parte na integral da eq.(I.6) acima

$$\int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial^2(n(v,t))}{\partial v^2} dv = \left[e^{-sv} \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} \right]_0^{\infty} + s \int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} dv = - \frac{\partial n}{\partial v} \Big|_{v=0} + s \int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} dv \quad (I.7)$$

$$\text{Onde, } \left[e^{-sv} \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} \right]_0^{\infty} = - \frac{\partial n}{\partial v} \Big|_{v=0}.$$

Pois, quando $v \rightarrow \infty$, $e^{-sv} \rightarrow 0$. E, quando $v \rightarrow 0$, $e^{-sv} \rightarrow 1$.

Substitui-se a eq.(I.7) na integral da eq.(I.6), resulta:

$$L \left[D_{eff} \frac{\partial^2 (n(v,t))}{\partial v^2} \right] = D_{eff} \left\{ -\frac{\partial n}{\partial v} \Big|_{v=0} + s \int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} dv \right\} \quad (I.8)$$

Em seguida, prossegue-se efetuando novamente a integração por parte na integral da eq.(I.8), ou seja:

$$\int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} dv = \left[e^{-sv} n(v,t) \right]_0^{\infty} + s \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv = -n(0,t) + s \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv \quad (I.9)$$

Onde, $\left[e^{-sv} n(v,t) \right]_0^{\infty} = -n(0,t)$

Pois, quando $v \rightarrow \infty$, $e^{-sv} \rightarrow 0$. E, quando $v \rightarrow 0$, $e^{-sv} \rightarrow 1$

Substitui-se a eq.(I.9) na integral da eq.(I.8), resulta:

$$L \left[D_{eff} \frac{\partial^2 (n(v,t))}{\partial v^2} \right] = D_{eff} \left\{ -\frac{\partial n}{\partial v} \Big|_{v=0} + s \left(-n(0,t) + s \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv \right) \right\}$$

Pelas condições de contorno, $n(0,t) = 0$ e $\frac{\partial n}{\partial v} \Big|_{v=0} = 0$, logo

$$L \left[D_{eff} \frac{\partial^2 (n(v,t))}{\partial v^2} \right] = D_{eff} \left\{ s^2 \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv \right\}$$

Da definição $\bar{n}(s,t) = \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv$, resulta:

$$L \left[D_{eff} \frac{\partial^2 (n(v,t))}{\partial v^2} \right] = D_{eff} s^2 \bar{n}(s,t) \quad (I.9)$$

Termo 4

$$\mathcal{L}\left[\frac{\beta_o}{2}\int_0^{v/2}n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]=\int_0^\infty e^{-sv}\left[\int_0^{v/2}n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv \quad (\text{I.10a})$$

$$\mathcal{L}\left[\int_0^{v/2}n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]=\frac{1}{2}\int_0^\infty e^{-sv}\left[\int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv \quad (\text{I.10b})$$

Da fórmula 32.15 do livro Spiegel (página 162)

$$f(s)h(s)=\int_0^t F(u)H(t-u)du \quad (\text{I.10c})$$

Admitindo $f(s)=h(s)$, logo

$$\mathcal{L}\left[\int_0^{v/2}n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]=\frac{1}{2}\bar{n}(s,t)^2 \quad (\text{I.11})$$

Termo 5

$$\mathcal{L}\left[\beta_o n(v,t)M_o(t)\right]=\beta_o M_o(t)\int_0^\infty e^{-sv}n(v,t)dv=\beta_o M_o(t)\bar{n}(s,t) \quad (\text{I.12})$$

$$\bar{n}(s,t)=\int_0^\infty e^{-sv}n(v,t)dv$$

APÊNDICE II

CÁLCULO DO MOMENTO M_0 PARA O CASO-TESTE ANALISADO

B - CALCULO DO MOMENTO M_0 COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO E TAXA DE CRESCIMENTO PARA $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$.

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(v, t) dv \quad (\text{B.1.1})$$

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + G \frac{\partial(vn(v, t))}{\partial v} = D_{eff} \frac{\partial^2 n(v, t)}{\partial v^2} + \frac{1}{2} \int_0^v \beta_0 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v, t) \int_0^\infty \beta_0 n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \quad (\text{B.1.2a})$$

$$\int_0^\infty \left\{ \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + G \frac{\partial(vn(v, t))}{\partial v} = D_{eff} \frac{\partial^2 n(v, t)}{\partial v^2} + \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v, t) \beta_0 \int_0^\infty n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right\} dv \quad (\text{B.1.2b})$$

Portanto

$$\frac{dM_0(t)}{dt} + G \int_0^\infty \frac{\partial(vn(v, t))}{\partial v} dv = \int_0^\infty D_{eff} \frac{\partial^2 n(v, t)}{\partial v^2} dv + \int_0^\infty \left[\frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] dv - \beta_0 M_0(t) \int_0^\infty n(v, t) dv \quad (\text{B.1.2c})$$

Resolvendo o segundo termo do lado direito da Eq. (B.1.2c)

$$I = \int_0^\infty \left[\int_0^v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] dv \quad (\text{B.1.3a})$$

Mudando a ordem de integração da Eq. (B.1.3.a)

$$I = \int_0^\infty n(\tilde{v}, t) \left[\int_{\tilde{v}}^\infty n(v - \tilde{v}, t) dv \right] d\tilde{v} \quad (\text{B.1.3b})$$

$$dv d\tilde{v} = |J| dud\tilde{u} \quad (\text{B.1.4a})$$

$$u = v - \tilde{v} \quad (\text{B.1.4b})$$

$$\tilde{u} = \tilde{v} \quad (\text{B.1.4c})$$

$$v = u + \tilde{v} = u + \tilde{u} \quad (\text{B.1.4d})$$

$$|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial v}{\partial u} & \frac{\partial v}{\partial \tilde{u}} \\ \frac{\partial \tilde{v}}{\partial u} & \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{u}} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \quad (\text{B.1.4e})$$

logo

$$I = \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) \left[\int_0^\infty n(u, t) du \right] d\tilde{u} \quad (\text{B.1.5a})$$

$$I = \left[\int_0^\infty n(\tilde{u}, t) d\tilde{u} \right] \left[\int_0^\infty n(u, t) du \right] \quad (\text{B.1.5b})$$

$$I = M_0^2(t) \quad (\text{B.1.5c})$$

Substituindo a Eq. (B.1.5c) na Eq. (B.1.2c), logo

$$\frac{dM_0(t)}{dt} + Gvn(v, t) \Big|_0^\infty = D_{eff} \frac{\partial n(v, t)}{\partial v} \Big|_0^\infty + \frac{\beta_0}{2} M_0^2(t) - \beta_0 M_0^2(t) \quad (\text{B.1.6a})$$

quando $v \rightarrow \infty$, $\bar{n}(v, t) \rightarrow cte$ e $\frac{\partial n(v, t)}{\partial v} \rightarrow 0$, tem-se:

$$\frac{dM_0(t)}{dt} = -\frac{\beta_0}{2} M_0^2(t) \quad (\text{B.1.6b})$$

Resolvendo a Eq. (B.1.6b) para $t = 0$ e $M_0(0) = N_0$, logo

$$M_0(t) = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (\text{B.1.6c})$$

APÊNDICE III

SOLUÇÃO DA EDO (3.6f) ATRAVÉS DA TEORIA DE BERNOULLI

$$\frac{d\bar{n}}{dt} + (\beta_0 M_o(t) - D_{eff} s^2) \bar{n} = \frac{\beta_0}{4} \bar{n}^2 \quad (C.1)$$

Hipóteses para a solução de uma equação de Bernoulli:

$$n = 2 \quad (C.2a)$$

$$p^*(t) = (1-n)p(t) = (D_{eff} s^2 - \beta_0 M_o(t)) \quad (C.2b)$$

$$q^*(t) = (1-n)q(t) = -\frac{\beta_0}{2} \quad (C.2c)$$

$$z = \bar{n}^{(1-n)} = \bar{n}^{(-1)} = \frac{1}{\bar{n}} \quad (C.2d)$$

Cálculo do fator de integração:

$$\mu^* = e^{\int p^*(t) dt} = e^{\int (D_{eff} s^2 - \beta_0 M_o(t)) dt} = e^{D_{eff} \int s^2 dt} e^{-\beta_0 \int M_o(t) dt} \quad (C.3a)$$

Onde

$$e^{D_{eff} \int s^2 dt} = e^{D_{eff} s^2 t} \quad (C.3b)$$

e

$$e^{-\beta_0 \int M_o(t) dt} = e^{-\beta_0 \int \frac{2N_0}{2+N_0\beta_0 t} dt} = e^{-2\ln(2+N_0\beta_0 t)} = \frac{1}{(2+N_0\beta_0 t)^2} \quad (C.3c)$$

De forma que,

$$\mu^* = e^{D_{\text{eff}} \int s^2 dt} e^{-\beta_0 \int Mo(t) dt} = e^{D_{\text{eff}} s^2 t} \cdot \frac{1}{(2 + N_0 \beta_0 t)^2} \quad (\text{C.3d})$$

$$\text{Logo, } \mu^* = \frac{e^{D_{\text{eff}} s^2 t}}{(2 + N_0 \beta_0 t)^2} \quad (\text{C.3e})$$

Solução geral:

$$z = \frac{C + \int q^*(t) \mu^* dt}{\mu^*} \quad (\text{C.4a})$$

Substituindo a Eq.(C.2c) e Eq.(C.3e) na Eq.(C.4a), obtem-se:

$$z = C e^{-D_{\text{eff}} s^2 t} (2 + N_0 \beta_0 t)^2 - e^{-D_{\text{eff}} s^2 t} (2 + N_0 \beta_0 t)^2 \frac{\beta_0}{2} \int \frac{e^{D_{\text{eff}} s^2 t}}{(2 + N_0 \beta_0 t)^2} dt \quad (\text{C.4b})$$

Ou,

$$z = e^{-D_{\text{eff}} s^2 t} (2 + N_0 \beta_0 t)^2 \left[C - \frac{\beta_0}{2} \int \frac{e^{D_{\text{eff}} s^2 t}}{(2 + N_0 \beta_0 t)^2} dt \right] \quad (\text{C.4c})$$

Cálculo da integral: $\int \frac{e^{D_{\text{eff}} s^2 t}}{(2 + N_0 \beta_0 t)^2} dt$, onde: $u = 2 + N_0 \beta_0 t$; $du = N_0 \beta_0 dt$

$$\int \frac{e^{D_{\text{eff}} s^2 t}}{(2 + N_0 \beta_0 t)^2} dt = \int \frac{e^{\frac{D_{\text{eff}} s^2 (u-2)}{N_0 \beta_0}}}{N_0 \beta_0 u^2} du = \frac{e^{\frac{-2D_{\text{eff}} s^2}{N_0 \beta_0}}}{N_0 \beta_0} \int \frac{e^{\frac{D_{\text{eff}} s^2 u}{N_0 \beta_0}}}{u^2} du \quad (\text{C.5a})$$

Calculo da integral: $\int e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}} \frac{1}{u^2} du$, expressa na Eq. (C.5a), usando o método de integração por partes,

$$\int e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}} \frac{1}{u^2} du = -\frac{e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}}}{u} + \frac{D_{eff}s^2}{N_0\beta_0} \int e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}} \frac{1}{u} du \quad (C.5b)$$

Substituindo-se (C.5b) em (C.5a), resulta:

$$\int \frac{e^{D_{eff}s^2t}}{(2+N_0\beta_0t)^2} dt = \frac{e^{\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}}}{N_0\beta_0} \left\{ -\frac{e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}}}{u} + \frac{D_{eff}s^2}{N_0\beta_0} \int e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}} \frac{1}{u} du \right\} \quad (C.5c)$$

Ou,

$$\int \frac{e^{D_{eff}s^2t}}{(2+N_0\beta_0t)^2} dt = \frac{e^{\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}}}{N_0\beta_0} \left\{ -\frac{e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}}}{u} + \frac{D_{eff}s^2}{N_0\beta_0} \ln(u) \right\} \quad (C.5d)$$

Onde, $\int e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}} \frac{1}{u} du$ foi substituída aqui pela aproximação $\ln(u)$.

(Esta aproximação decorre do emprego da seguinte integral exponencial sendo

representada pela expansão em série: $\int \frac{e^{ax}}{x} dx = \ln(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ax)^n}{n.n!}$)

Ou seja,

Substituindo-se a Eq. (C.5d) na Eq.(C.4c):

$$z = e^{-D_{eff}s^2t} u^2 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \frac{e^{\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}}}{N_0\beta_0} \left\{ -\frac{e^{\frac{D_{eff}s^2u}{N_0\beta_0}}}{u} + \frac{D_{eff}s^2}{N_0\beta_0} \ln(u) \right\} \right\} \quad (C.6a)$$

Onde, $u = 2 + N_0\beta_0 t$

Ou,

$$z = e^{-D_{eff}s^2 t} u^2 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left[-\frac{e^{\frac{D_{eff}s^2(u-2)}{N_0\beta_0}}}{N_0\beta_0 u} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} e^{\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}} \ln(u) \right] \right\} \quad (C.6b)$$

Da expressão $z = \frac{1}{\bar{n}}$, obtém-se \bar{n} , com a substituição de $u = 2 + N_0\beta_0 t$ na Eq.(C.4i):

$$\bar{n} = \frac{e^{D_{eff}s^2 t}}{(2 + N_0\beta_0 t)^2 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left[-\frac{e^{D_{eff}s^2 t}}{N_0\beta_0(2 + N_0\beta_0 t)} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} e^{\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}} [\ln(2 + N_0\beta_0 t)] \right] \right\}} \quad (C.7a)$$

Ou,

$$\bar{n} = \frac{\exp[D_{eff}s^2 t]}{(2 + N_0\beta_0 t)^2 \left\{ C - \frac{\beta_0}{2} \left[-\frac{\exp[D_{eff}s^2 t]}{N_0\beta_0(2 + N_0\beta_0 t)} + \frac{D_{eff}s^2}{(N_0\beta_0)^2} \exp\left[\frac{-2D_{eff}s^2}{N_0\beta_0}\right] [\ln(2 + N_0\beta_0 t)] \right] \right\}} \quad (C.7b)$$