



## **SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL VIA TÉCNICA DA TRANSFORMADA INTEGRAL**

MADSON COSTA VILHENA <sup>1\*</sup>, CLAUDERINO DA SILVA BATISTA <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal do Pará, Faculdade de Engenharia Química

<sup>2</sup> Universidade Federal do Pará, Faculdade de Engenharia Química (Orientador)

\*e-mail: madson7vilhena@gmail.com

**RESUMO** - O balanço populacional tem influência direta em processos dos quais, um dos pontos críticos de qualidade está inserida a distribuição do tamanho das populações, como exemplo tem se a física de aerossóis e cristalização. A técnica da transformada integral, ao simular os efeitos difusivos na população, fornece meios para que seja realizada a resolução da equação íntegro-diferencial do balanço populacional, considerando os principais mecanismos físicos que estão inseridos no meio estudado, como difusão, nucleação, coagulação e crescimento. Sendo que, ao utilizar o método é realizada a resolução do balanço populacional por meio semi-analítico. Os parâmetros de entrada que sofreram variação para fins comparativos foram, número inicial da população ( $N_0$ ), tempo final (tf), iteração de tempo adimensionalizados (IT) e constante da difusão ( $D_{ab}$ ). Pois, a difusão a partir de uma quantidade elevada de partículas por volume apresenta maior impacto na distribuição de partículas. Recebendo como parâmetros de saída os volumes máximos atingidos e densidades de população máximas atingidas. A técnica da transformada integral obteve êxito ao interpretar, os fenômenos relacionados a equação de balanço populacional.

### **INTRODUÇÃO**

A modelagem do balanço populacional permite a previsão da dinâmica das propriedades distribuídas de uma população de indivíduos. Isso é importante quando essas propriedades são uma qualidade crítica de atributo de um sistema de produção (por exemplo, distribuição do tamanho das partículas e composição de partículas).

A estrutura pode ser encontrada no campo da engenharia química desde a década de 1960 e cresceu no final da década de 1990 com o crescimento dos mecanismos computacionais. E vem se desenvolvendo em outros campos de aplicação como a engenharia farmacêutica e biotecnologia.

Os modelos de equilíbrio populacional existem em diferentes formas. Eles podem ser formulados tomando diferentes mecanismos contínuos e discretos, como nucleação,

crescimento, agregação e quebra. Para esses mecanismos, as taxas de processo ou sementes do processo precisam ser definidas.

Além disso, a modelagem do balanço populacional pode incluir uma ou mais propriedades distribuídas e ser incorporado em uma estrutura de dinâmica de fluidos computacionais ou compartimentos espaciais para incluir os efeitos das heterogeneidades espaciais. Recentemente, foi integrado com estocástico e abordagens baseadas em machine learning. Como consequência estes métodos carregam desafios numéricos específicos e computacionais também (MANSOURI *et al.*, 2021).

Em muitos processos como leito fluidizado de spray granulado e granulador de rosca dupla, a distribuição dinâmica do tamanho das partículas envolve a distribuição de uma ou mais propriedades de partículas internas, que podem ser tamanhos ou mudança de umidade em decorrência do mecanismo de

aglomeração. Devido a esse mecanismo, vários tamanhos de partículas são formados no sistema causados pela junção de partículas menores. Para caracterizar uma distribuição de partículas com muitas variáveis internas deve-se utilizar um modelo de balanço populacional de multidimensões (SINGH, 2020).

Atentando-se a isso, é utilizada, para solucionar a equação de balanço populacional, a Técnica Híbrida da Transformada Integral. Técnica na qual consiste em transformar a equação diferencial parcial ou conjunto de equações diferenciais ordinárias, que é truncado em uma ordem e resolvido numericamente (SOUZA, 2009).

### Objetivos

O objetivo geral do presente trabalho é obter solução da equação de Balanço Populacional via Técnica da Transformada Integral.

1-Efetuar o desenvolvimento matemático para o modelo de Balanço Populacional existente na literatura;

2-Utilizar a Técnica da Transformada Integral na a solução do modelo de Balanço de População;

3-Usar a subrotina DIVIPAG da biblioteca do IMSL-FORTRAN para desenvolver um código computacional que irá resolver o modelo matemático numericamente.

## REVISÃO DA LITERATURA

### Balanço Populacional

O tamanho de partículas e a distribuição do tamanho de partículas são peças chave para descrever as propriedades de um catalisador e também de outras partículas ou agregados na natureza. São altamente desejáveis as distribuições de tamanho muito próximas da monodispersa, ou seja, menor ou igual a 15%. Por este motivo, faz-se necessário o controle do tamanho e da distribuição do tamanho de partículas (PSD – Particle Size Distribution), que são objetivos extensivos no meio das nanopartículas e ciência de partículas afins (HANDWERK *et al.*, 2020).

A cristalização é um método de separação sólido-líquido, da qual tem 3 modos de operação em geral como, evaporação do solvente, resfriamento da solução e adição de

um antissolvente a solução. Entretanto, o desempenho da cristalização por antissolvente é estritamente relacionada a eficiência da mistura do antissolvente com a solução, por exemplo uma mistura imprópria pode resultar em uma distribuição de tamanho de cristais (CSD) irregular das partículas preparadas. Para uma aplicação prática, CSD é um importante indicador da qualidade das partículas preparadas, que tem alto impacto nas propriedades do produto final como taxa de filtração, bioavaliabilidade e taxa de desaguamento. Sendo assim, controlar o CSD das partículas se mostra um trabalho importante e desafiador (WU *et al.*, 2020).

Para fazer interpretações físicas do processo de cristalização, deve-se levar em conta diversos fatores que afetam o tamanho dos cristais, assim como o número de partículas. Sendo estes fatores, as entradas e saídas de cristais do sistema que são obtidas analisando os efeitos de formação de novos núcleos sólidos de diâmetro pequeno, crescimento de cristais, quebra e aglomeração dos cristais, solubilização dos núcleos pequenos e entrada e saída de cristais do sistema (ROQUE, 2021).

As equações de balanço populacional estão relacionadas com a modelagem de um sistema composto por contínuos ou discretizados números de entidades com os seus ambientes, geralmente assumidos como sendo uma fase contínua. As entidades podem ser um grupo de sistemas de estados que podem ser descritos por um vetor.

Este vetor contém coordenadas internas que representam as propriedades do sistema escolhido, assim como representa as entidades e as coordenadas externas que descrevem a localização física da entidade escolhida. Por fim, para os processos de cristalização as entidades são os cristais (SHU *et al.*, 2020).

Equação do balanço populacional: A equação do balanço populacional (PBE), é uma equação integro-diferencial hiperbólica caracterizada por um termo não-linear fonte, este termo fonte apresenta um conjunto de vários mecanismos com os quais as partículas de um estado específico podem formar ou desaparecer do sistema. Estes mecanismos são discretos e relativamente instantâneos quando comparados com a escala do sistema, estes

mecanismos são descritos por quebra, agregação, crescimento e nucleação das partículas. A PBE ao descrever estas interações pode descrever o comportamento do sistema incluindo importantes detalhes (ATTARAKIH, 2013). CAMPOS (2015), afirma que, para processos que envolvem fases dispersa e contínua com densidades distintas, favorecendo assim fenômenos de transporte axial (sedimentação/flotação), a distribuição de tamanho de partículas é influenciada pela velocidade de segregação da fase dispersa (advecção) e pelas diferentes concentrações ao longo das coordenadas espaciais (difusão). Sendo, assim para descrever a PBE deve-se descrever também o impacto da difusão no fenômeno.

**Técnica da transformada integral:** A técnica da Transformada Integral consiste em escolher um problema de autovalor auxiliar, e depois um par transformação é desenvolvido, e a equação diferencial parcial inicial se transforma em um sistema infinito de equações diferenciais ordinárias usando operadores, truncamento, e por fim a resolução do sistema de equações diferenciais ordinárias. Através da formulação da inversa é possível obter os potenciais iniciais (SILVA, 2017). Sabendo-se que, a técnica tem caráter híbrido (numérico-analítica) ela oferece ao usuário uma precisão controlada que permitem tolerâncias prescritas pelo usuário que podem ser usadas como resultados de *benchmark*. Esse método utilizado em conjunto com a computação simbólica permite uma considerável redução no tempo dispensado com a formulação matemática e análise de dados (VASCONCELLOS, KNUPP, MARINHO; 2019).

A técnica também foi utilizada com sucesso na solução de problemas inversos de convecção, termicamente em desenvolvimento, em dutos retos de seção transversal em forma de setor circular segundo estudos de OZISIK e APARECIDO (1998, 1999a, b; 2001) e na solução de problemas não lineares unidimensionais de difusão térmica em sólidos, com mudança de fase na fronteira, por DINIZ e APARECIDO (1990), DINIZ *et al.* (1992, 1993), (SOUZA, 2009).

## METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

O modelo que foi estudado conta com a adição do termo difusivo, o qual é apresentado pela Equação 1, usada por CAMPOS (2015), as condições inicial de contorno, são representadas pelas Equações 2 à 4. A técnica da transformada integral foi utilizada como metodologia de solução.

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -\delta_0 \frac{\partial n(v,t)}{\partial v} + D_{ab} \frac{\partial^2 n(v,t)}{\partial v^2} + \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} + -n(v,t) \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \quad (1)$$

$$n(v, 0) = \frac{N_0}{v_0} e^{-\frac{v}{v_0}} \quad (2)$$

$$n(0, t) = 0 \quad (3)$$

$$D_{AB} \frac{\partial n(V, t)}{\partial v} + hn(V, t) = 0 \quad (4)$$

$$M_0 = \int_0^\infty n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (5.a-b)$$

$$N_0 \bar{M}_0 = \frac{2}{2 + (\tau v_0 \beta_0 N_0 / \delta_0)}$$

Para adimensionalizar as equações foram propostas as seguintes definições

$$\eta = \frac{v}{V}; \tilde{\eta} = \frac{\tilde{v}}{V}; n(\eta, \tau) = \frac{n(v, t)v_0}{N_0}; \tau = \delta_0 t / v_0;$$

$$n(\eta - \tilde{\eta}, \tau) = \frac{n(v - \tilde{v}, t)v_0}{N_0}; n(\tilde{\eta}, \tau) = \frac{n(\tilde{v}, t)v_0}{N_0};$$

$$Bi_m = \frac{hV}{D_{ab}} \quad (6.a-g)$$

Aplicando os grupos adimensionais na Equação (1) e nas condições iniciais e de contorno, obtêm-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \tau} + \frac{v_0}{V} \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta} &= \frac{D_{AB} v_0}{V^2 \delta_0} \frac{\partial^2 \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta^2} \\ &+ \frac{\beta_0 N_0}{2 \delta_0} \int_0^v \tilde{n}(\eta - \eta, \tau) n(\eta, \tau) d\tilde{v} \\ &- \frac{\beta_0 N_0 v_0}{\delta_0} \bar{M}_0 \tilde{n}(\eta, \tau) \end{aligned} \quad (7.a)$$

$$\tilde{n}(\eta, 0) = \frac{V}{v_0} \text{Exp} \left( -\eta \frac{V}{v_0} \right) \quad (7.b)$$

$$\tilde{n}(0, \tau) = 0 \quad (7.c)$$

$$\frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta} + \frac{hV}{D_{AB}} \tilde{n}(\eta, \tau) = 0 \quad (7.d)$$

Mudando os limites da integração da equação (7.a), obtêm se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \tau} + \frac{v_0}{V} \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta} &= \frac{D_{AB} v_0}{V^2 \delta_0} \frac{\partial^2 \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta^2} \\ &+ \frac{\beta_0 N_0 V}{2 \delta_0} \int_0^{v/V} \tilde{n}(\eta - \eta, \tau) n(\eta, \tau) d \left( \frac{\tilde{v}}{V} \right) \\ &- \frac{\beta_0 N_0 v_0}{\delta_0} \bar{M}_0 \tilde{n}(\eta, \tau) \end{aligned} \quad (8)$$

Assumindo os seguintes grupos adimensionais:

$$A = \frac{v_0}{V}; B = \frac{D_{AB} v_0}{2V^2 \delta_0}; \quad (9.a-b)$$

$$C = \frac{\beta_0 N_0 V}{2 \delta_0}; D = \frac{\beta_0 N_0 v_0}{\delta_0} \quad (9.c-d)$$

Substituindo as Equações 9.a-d, na Equação 8, logo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \tau} + A \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta} &= B \frac{\partial^2 \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta^2} \\ &+ C \int_0^{v/V} \tilde{n}(\eta - \eta, \tau) n(\eta, \tau) d\eta \\ &- D \bar{M}_0 \tilde{n}(\eta, \tau) \end{aligned} \quad (10)$$

Para representar a solução homogênea de problema inicial, define-se um problema de autovalor auxiliar, na forma:

$$\frac{d^2 X(\beta_i, \eta)}{d\eta^2} + \beta_i^2 X(\beta_i, \eta) = 0 \quad (11.a)$$

$$X(\beta_i, 0) = 0 \quad (11.b)$$

$$\frac{dX(\beta_i, \eta)}{d\eta} + B_{i_m} X(\beta_i, \eta) = 0 \quad (11.c)$$

Considerando que  $\tilde{n}(\eta, \tau)$  possa ser expressa em termos da autofunção  $X(\beta_i, \eta)$  pela fórmula inversa:

$$\tilde{n}(\eta, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i X(\beta_i, \tau) \quad (12)$$

Os coeficientes  $C_i$  podem ser determinados utilizando a ortogonalidade das funções próprias, dadas como:

$$\begin{aligned} \int_0^1 X(\beta_i, \eta) X(\beta_j, \eta) d\eta &= \\ &= \begin{cases} 0 & j \neq i \\ N(\beta_i) & j = i \end{cases} \end{aligned} \quad (13)$$

Para determinar os coeficientes  $C_i$  integra se os dois lados da Equação 12 com o operador  $\int_0^1 X(\beta_j, \eta) d\eta$  e utiliza se a Equação 13.

$$C_i = \frac{1}{N(\beta_i)} \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \tilde{n}(\eta, \tau) d\eta \quad (3.14.a-d) \quad (14)$$

Substituindo a Equação 14 na Equação 12, tem-se:

$$\tilde{n}(\eta, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{X(\beta_i, \eta)}{N(\beta_i)} \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \tilde{n}(\eta, \tau) d\eta \quad (15)$$

Equação da inversão:

$$\tilde{n}(\eta, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{X(\beta_i, \eta) \bar{n}(\beta_i, \tau)}{N(\beta_i)} \quad (16)$$

Equação da transformada:

$$\bar{n}(\beta_i, \tau) = \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \tilde{n}(\eta, \tau) d\eta \quad (17)$$

Solução do problema auxiliar:

$$X(\beta_i, \eta) = A \cos(\beta_i \eta) + B \sin(\beta_i \eta) \quad (18)$$

Usando a Equação 18 na Equação 11.b, obtêm-se a autofunção:

$$X(\beta_i, \eta) = \sin(\beta_i, \eta) \quad (19)$$

Substituindo a Equação 18 na Equação 11.c, obtêm-se o autovalor:

$$\beta_i \cos(\beta_i) + B i_m \sin(\beta_i) = 0 \quad (20)$$

Onde a norma de integração é:

$$N(\beta_j) = \int_0^1 X(\beta_i, \eta) X(\beta_i, \eta) d\eta = \frac{1}{2} \frac{(\beta_i^2 + B i_m^2) + B i_m}{\beta_i^2 + B i_m^2} \quad (21)$$

Multiplicando a Equação 10 por  $X(\beta_i, \eta)$  e integrando no intervalo fechado  $[0, 1]$  em  $\eta$ :

$$\begin{aligned} & \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \tau} d\eta + \\ & A \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \frac{\partial \tilde{n}(\eta, \tau)}{\partial \eta} d\eta = \\ & -B \beta_i^2 \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \tilde{n}(\eta, \tau) d\eta + \\ & C \int_0^1 \left[ X(\beta_i, \eta) \tilde{n}(\eta, \tau) \int_0^{\eta=1} \tilde{n}(\tilde{\eta}, \tau) d\tilde{\eta} \right] d\eta + \\ & -D \bar{M}_0 \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \tilde{n}(\eta, \tau) d\eta \end{aligned} \quad (22)$$

A partir das fórmulas da transformada e da inversão, aplicadas na Equação 22, obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{n}(\beta_i, \tau)}{\partial \tau} + \\ & A \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \frac{\partial \left[ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{X(\beta_j, \eta) \bar{n}(\beta_j, \tau)}{N(\beta_j)} \right]}{\partial \eta} d\eta = \\ & = -B \beta_i^2 \bar{n}(\beta_i, \tau) + \\ & C \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\bar{n}(\beta_k, \tau) \bar{n}(\beta_j, \tau)}{N(\beta_k) N(\beta_j)} * \\ & \int_0^1 X(\beta_i, \eta) X(\beta_j, \eta) X(\beta_k, \eta) d\eta \int_0^{\eta=1} 1 d\tilde{\eta} + \\ & -D \bar{M}_0 \bar{n}(\beta_i, \eta) \end{aligned} \quad (23)$$

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial \bar{n}(\beta_i, \tau)}{\partial \tau} + \\ & A \sum_{j=1}^{\infty} \bar{n}(\beta_j, \tau) \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \frac{X'(\beta_j, \eta)}{N(\beta_j)} d\eta = \\ & = -(B \beta_i^2 + D \bar{M}_0) \bar{n}(\beta_i, \tau) + \\ & C \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\bar{n}(\beta_j, \tau) \bar{n}(\beta_k, \tau)}{N(\beta_j) N(\beta_k)} * \\ & \int_0^1 X(\beta_i, \eta) X(\beta_j, \eta) X(\beta_k, \eta) d\eta \\ & \bar{n}(\beta_i, 0) = \int_0^1 X(\beta_i, \eta) \exp\left(-\frac{\eta V}{v_0}\right) d\eta \end{aligned} \right. \quad (24.a,b)$$

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para resolução dos modelos matemáticos com a técnica da transformada integral, foram desenvolvidos códigos computacionais em linguagem Fortran, sendo que estes códigos foram executados em um computador com processador Ryzen 3 3200g de 3.8Ghz. Sendo que, foi-se utilizada a sub-rotina DIVPAG da biblioteca IMSL (1991), com tolerância  $10^{-6}$ . Essa sub-rotina é apropriada para a solução de problemas de equações diferenciais com problema de valor inicial, como ocorre neste trabalho.

### Análise do Número de Partículas ( $N_0$ )

As equações diferenciais ordinárias foram resolvidas seguindo o parâmetro de NT = 100 (número de intervalos em  $\tau$ ) onde foram variados os valores de  $N_0$ , assim adequou-se os valores de tempo e volume final das partículas

para que houvesse melhor visualização dos resultados.

Na Figura 1 estão sendo apresentados os resultados da técnica utilizada, com iterações utilizadas de  $\tau$  para IT = 2, 3 e 4. Utilizando os seguintes parâmetros iniciais de  $N_0 = 1,0 \text{ cm}^{-3}$ ,

$$v_0 = 1 \text{ cm}^3, \beta_0 = 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{h}, V = 4 \mu\text{m}^3$$

$$D_{ab} = 10^1 \mu\text{m}^6 \text{h}^{-1}, h = 1 (\mu\text{m}^3 \text{h}^{-1}) \text{ sendo o grupo}$$

adimensional  $A = \frac{v_0}{V}$ , Biot mássico de  $10^{-1}$ ,

avalia-se um comportamento base para um valor unitário de quantidade de partículas com tempo de 1h.

Ao analisar a figura 4.1 observa-se o crescimento da função densidade de tamanho de partícula em função do nascimento das partículas (representando assim uma taxa de nascimento superior à taxa de morte), porém ao atingirem seus valores máximos, enfrentando os contínuos fenômenos de difusão e convecção de partículas a função densidade tem uma diminuição, isso ocorre, porque, as partículas se agregaram aos corpos de maior volume. Pode-se observar que os fenômenos apresentam crescimento nos volumes finais obtidos conforme ocorreram mudanças nas iterações (IT) utilizadas para  $\tau$ , ou seja quanto maior a iteração avaliada maiores volumes finais puderam ser obtidos.

Analisando os dados do gráfico obtido pode-se observar as variações dos volumes máximos alcançados de acordo com o crescimento de Iterações utilizadas, sendo para 2 um  $V_{\text{máx}} = 2,44 \mu\text{m}^3$ ; IT = 3 um  $V_{\text{máx}} = 2,76 \mu\text{m}^3$ ; e com o maior IT = 4 tem-se um  $V_{\text{máx}} = 3,04 \mu\text{m}^3$ .

Nota-se também os picos de densidade obtidos nas IT = 2, 3 e 4 respectivamente de 1,3; 0,87; 0,65 ( $\mu\text{m}^{-3} \text{cm}^{-3}$ ).

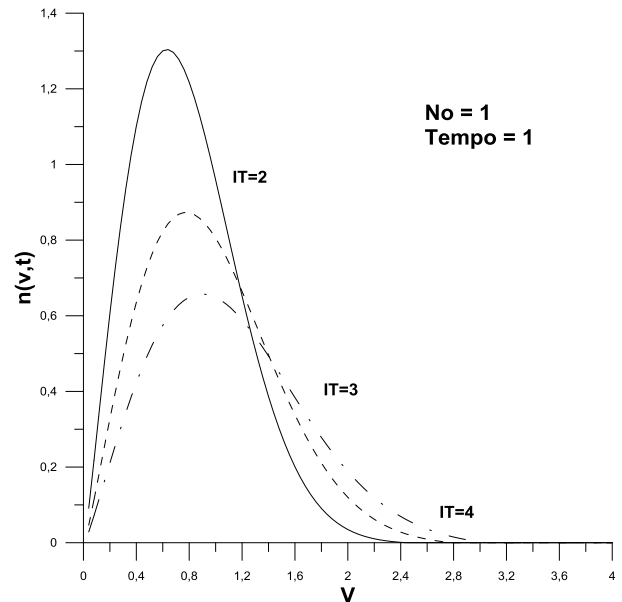


Figura 1: Densidades de população e volume, para tempo de 1h.

Na figura 4.2 ocorrem também as variações de IT = 2; 3; 4. Porém, este gráfico apresenta um  $N_0 = 10$ , o tempo usado para essa análise foi de 5h.

Neste segundo caso, como houve aumento da população inicial ocorreu também o aumento da densidade atingindo picos maiores como no IT = 2, 3 e 4 foram obtidos picos de 3,03; 2,04; 1,5 ( $\mu\text{m}^{-3} \text{cm}^{-3}$ ) respectivamente na densidade da população.

Como consequência do aumento da densidade de população ocorreu também um aumento dos volumes para IT, 2, 3 e 4, obtendo os valores finais de volume máximo respectivamente; 4,9; 6,1 e 7,2 ( $\mu\text{m}^3$ ).

Sendo que, IT maior apresentará maiores valores de volume final, porém o pico de densidade será menor, pois o tempo aumentou, permitindo assim que os fenômenos de convecção e difusão, proporcionem uma aglomeração de população com maior rapidez.

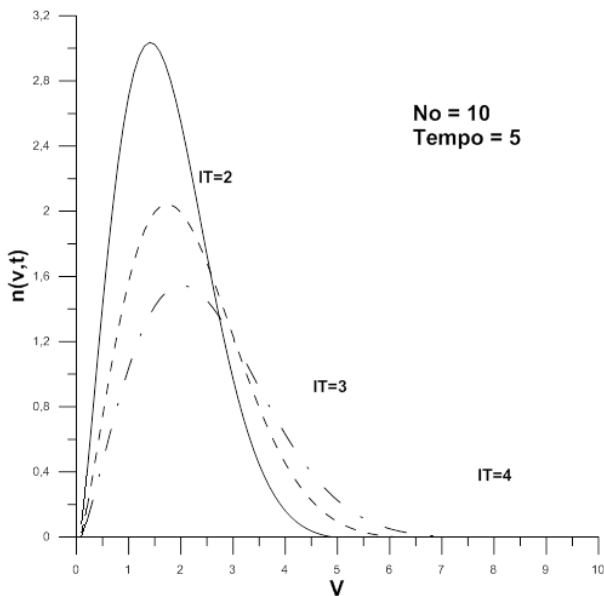


Figura 4.2: Densidades população e volume para tempo de 5h.

### Efeitos do Aumento de Tempo e Densidade

O correu a variação do tempo final das simulações divididos em 3 tempos com distância de 10h entre eles, no terceiro, quarto e quinto casos o número de populações testadas foram de  $10^3$ ,  $10^5$  e  $10^7$  e além disso o coeficiente de difusividade utilizados foi de  $D_{ab} = 10^2 \mu m^6 h^{-1}$ , pois os efeitos difusivos se tornam muito mais relevantes devido ao aumento da densidade de população inicial.

A Figuras 3, mostra os resultados para o a densidade de população inicial  $10^3$  e tempo de 30h.

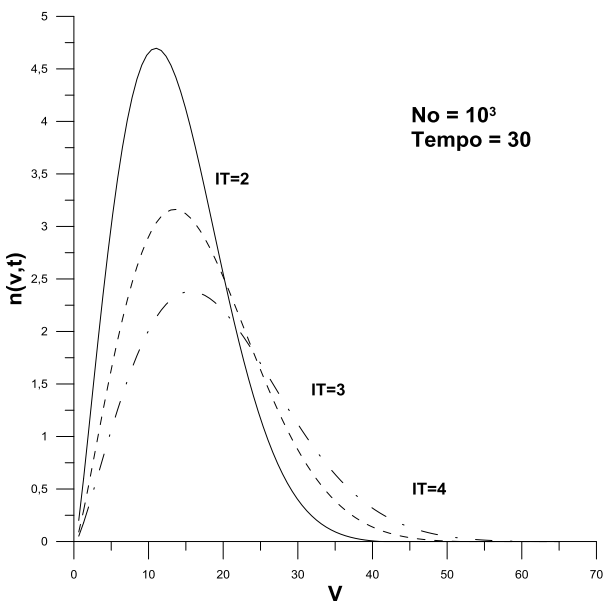


Figura 3: Densidade de população inicial e volume, para tempo final de 30h.

Na Figura 4, observa se os resultados para a densidade de população inicial  $10^5$  e tempo de 100h.

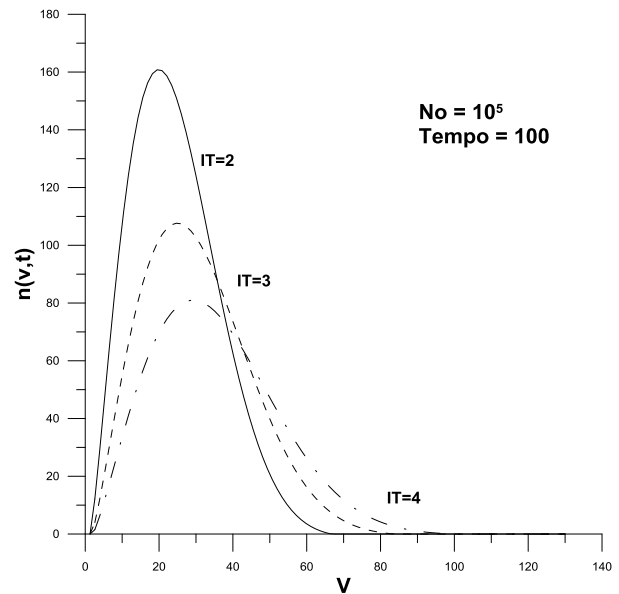


Figura 4: Densidade de população e volumes para o tempo final de 100h.

Ao analisar os resultados obtidos pode-se observar que ao aumentar o tempo de processo também se aumenta os volumes finais.

Demonstrando assim que a simulação consegue ter compreensão dos efeitos do aumento de tempo final de processo acerca dos mecanismos de quebra e coagulação, pois havendo um tempo maior de processo a formação de volumes maiores de agregados ocorrerá de forma mais eficiente.

Novamente, os tempos adimensionais demonstram que ao serem aumentados também influenciam inversamente nas curvas de densidade de população e diretamente nos volumes finais de processo.

### CONCLUSÃO

A técnica da transformada integral obteve êxito ao interpretar, os fenômenos relacionados a equação do balanço populacional. Sendo que, nos dados obtidos pode-se compreender os efeitos de alterações em determinadas camadas físicas volume, densidade de população, tempo e número de partículas.

Portanto, ao obter bons resultados com a Técnica da Transformada Integral, passa a ser

uma alternativa a resolução da equação do balanço populacional, com um código computacional em linguagem FORTRAN.

Utilizar a biblioteca IMSL (1991) para resolução de equações diferenciais, para obter os resultados, conclui-se que, a partir da análise dos gráficos desenvolvidos, houveram boas e relevantes simulações do processo de precipitação crescimento de partículas englobando os principais fenômenos envolvidos nele.

## NOMENCLATURA

$M_0(t)$  - Número total de partículas em qualquer tempo,  $\text{cm}^{-3}$ ;

$N_0$  - Número total de partículas no tempo zero,  $\text{cm}^{-3}$ ;

$n(v,t)$  - Função densidade de distribuição de tamanho,  $\mu\text{m}^{-3}\text{cm}^{-3}$ ;

$v$  - Volume da partícula,  $\mu\text{m}^{-3}$ ;

$v_0$  - Volume da partícula no início,  $\mu\text{m}^{-3}$ ;

$\tilde{v}$  - Volume da partícula,  $\mu\text{m}^{-3}$ ;

$D_{ab}$  - Coeficiente de difusão,  $\mu\text{m}^6\text{h}^{-1}$ ;

$B_i$  - Número de Biot mássico;

$h$  - Coeficiente de convecção,  $\mu\text{m}^3\text{h}^{-1}$ ;

$\beta_0$  - Coeficiente de coagulação constante,  $\text{cm}^3\text{h}^{-1}$ ;

$\beta(v + \tilde{v})$  - Coeficiente de coagulação variável,  $\text{cm}^3\text{h}^{-1}$ ;

$\tau$  - Tempo adimensional

$n(\eta, \tau)$  - Função densidade de distribuição adimensionalizada;

$\eta$  - Volume adimensional da partícula;

$\tilde{\eta}$  - Volume adimensional da partícula;

$\delta_0$  - Coeficiente de crescimento/condensação volumétrico  $\text{cm}^3\text{h}^{-1}$ .

## REFERÊNCIAS

ATTARAKIH, Menwer. Integral formulation of the population balance equation: application to particulate systems with particle growth. *Computers & Chemical Engineering*, [S.L.], v. 48, p. 1-13, jan. 2013. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.08.001>.

CAMPOS, K. T. Solução de equações de balanço populacional usando a técnica da transformada de Laplace. 2015. 50 f. Dissertação (Programa de Pós-graduação em Engenharia de Processos), Universidade Federal do Pará, Belém, 2015.

DINIZ, A.J.; APARECIDO, J.B. Analytical solution to ablation problem with transient heat flux, In: NATIONAL THERMAL SCIENCE MEETING, 1990, Itapema. National... Itapema: S.n. 1990. p.329-333.

DINIZ, A.J.; CAMPOS-SILVA, J.B.; APARECIDO, J.B.; ZAPAROLI, E.L. Thermal protection in sphere using ablation process. In: NORTH-NORTHEAST CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING, 2., 1992, João Pessoa. Proceedings of the... João Pessoa: S.n., 1992. p.9-16.

DINIZ, A.J.; APARECIDO, J.B.; ZAPAROLI, E.L. Solution to thermal problem with nonlinear couplings, In: BRAZILIAN CONGRESS OF MECH. ENG., 12., 1993, Brasília. Proceedings of the... Brasília: UnB, 1993. p. 577-580.

HANDWERK, Derek R. *et al.* Particle Size Distributions via Mechanism-Enabled Population Balance Modeling. *The Journal Of Physical Chemistry C*, [S.L.], v. 124, n. 8, p. 4852-4880, 14 fev. 2020. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b11239>.

MANSOURI, Seyed Soheil; BRIESEN, Heiko; GERNAEY, Krist V.; NOPENS, Ingmar. Special Issue on "Recent Advances in Population Balance Modeling". *Processes*, [S.L.], v. 9, n. 1, p. 122, 8 jan. 2021. MDPI AG. <http://dx.doi.org/10.3390/pr9010122>.

SILVA, Lucas Coelho da et al. Solução do problema de Graetz conjugado em um duto ortotrópico por transformada integral. 2017.

SINGH, Mehakpreet; SINGH, Randhir; SINGH, Sukhjit; WALKER, Gavin; MATSOUKAS, Themis. Discrete finite volume approach for multidimensional agglomeration population balance equation on unstructured grid. *Powder*



Technology, [S.L.], v. 376, p. 229-240, out. 2020. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2020.08.022>.

SOUZA, Luís Henrique Gazeta de. Aplicação da transformada integral generalizada no escoamento potencial em contrações. 2009.123.f. Dissertação (Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica), Universidade Estadual Paulista, São Paulo, 2009.

ROQUE, Bruna Fernanda de Sousa. Modelagem, simulação e análise de um cozedor contínuo de açúcar (CVP) para massa B aplicado em usinas brasileiras. 2021. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2021. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/14213>.

SHU, Yi D. et al. Considering nucleation, breakage and aggregation in morphological population balance models for crystallization processes. Computers & Chemical Engineering, [S.L.], v. 136, p. 106781, maio 2020. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106781>.

VASCONCELLOS, J. F. M.; KNUPP, D. C.; MARINHO, G. M. Uma Comparação entre o Método de Volumes Finitos e a Técnica da Transformada Integral Generalizada para a Solução de uma Equação de Difusão Bidimensional. Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão (ISSN: 2525-4782), v.4, n.3, 2019.

WU, Bin *et al.* Antisolvent crystallization intensified by a jet crystallizer and a method for investigating crystallization kinetics. Chemical Engineering Science, [S.L.], v. 211, p. 115259, jan. 2020. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2019.115259>.