

Resolução Numérica do Problema de Sedimentação Batelada usando o Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica: Avaliação do Tipo de Condição Inicial

Numerical Solution of the Batch Sedimentation Problem using the Tangent of Hyperbola Interface Capturing Method: Evaluation of Initial Condition Type

Fran Sérgio Lobato¹, Flávia Marques Fagundes², João Jorge Ribeiro Damasceno³, Fábio de Oliveira Arouca⁴

RESUMO

A sedimentação é um processo físico que estuda o transporte e a deposição de partículas suspensas em um fluido. Este é um dos fenômenos mais interessantes em engenharia química devido à presença de três regiões distintas (livre de sólidos; concentração de sólidos constante e concentração de sólidos varia do valor inicial até um máximo). Do ponto de vista matemático, este problema é caracterizado por descontinuidades e variações abruptas na concentração de sólidos durante a sua operação. Isto significa que os tradicionais métodos numéricos encontram grandes dificuldades para a integração do modelo. No presente trabalho é avaliado a aplicação do Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica para a simulação de dois estudos de caso clássicos em sedimentação batelada. Para essa finalidade, dois tipos de condições iniciais (Kynch e Diehl) são avaliadas durante a simulação do processo. Os resultados indicam que a metodologia proposta foi capaz de encontrar boas estimativas para os perfis de concentração quando comparado com aqueles reportados pela literatura. Além disso, a escolha do tipo de condição inicial deve estar condicionada a eficiência, ao custo do experimento e o tempo disponível para a simulação.

Palavras-chave: Sedimentação. Captura de Interface por Tangente Hiperbólica. Condição Inicial. Modelagem Matemática.

ABSTRACT

Sedimentation is a physical process that involves the transport and deposition of particles suspended in a fluid. This phenomenon is particularly interesting in chemical engineering due to the presence of three distinct regions: a solid-free, a region with constant solid concentration, and a region where the solid concentration varies from an initial value to a maximum. From a mathematical perspective, this problem is characterized by discontinuities and abrupt variations in solid concentration during the process. These characteristics make it challenging for traditional numerical methods to integrate the model effectively. In this study, the application of the Tangent of Hyperbola Interface Capturing (THINC) method for simulating two classic batch sedimentation case studies is evaluated. For this purpose, two types of initial conditions (Kynch and Diehl) during the simulation are studied. The results show that the proposed methodology provides accurate estimates of concentration profiles when compared to those reported in the literature. Additionally, the choice of initial condition should be based on factors such as efficiency, experimental cost, and the time available for the simulation.

Keywords: Sedimentation. Tangent of Hyperbola Interface Capturing. Initial Condition. Mathematical Modeling.

^{12,3,4}Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia.

¹ Doutor em Engenharia Mecânica. E-mail: fslobato@ufu.br. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7401-4718>

² Doutora em Engenharia Química. E-mail: flaviamfagundes@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2885-334X>

³ Doutor em Engenharia Química. E-mail: damasceno@ufu.br. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8146-2092>

⁴ Doutor em Engenharia Química. E-mail: arouca@ufu.br. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2832-1370>

1. INTRODUÇÃO

A sedimentação é um processo físico (natural ou induzido) que envolve o transporte e a deposição de partículas suspensas em um fluido de grande importância na engenharia química (AGARWAL; LIU, 2015). Este é amplamente estudado na academia e empregado nas indústrias de transformação, com destaque para a petrolífera, onde a operação unitária destaca-se no tratamento de águas residuais, controle de qualidade de fluido de perfuração e processos de separação de fases na produção e refino (SUN et al., 2015). A sedimentação pode ser operada em modo batelada ou contínua, sendo função de fatores como o tamanho, forma e densidade das partículas, bem como das propriedades do fluido. Do ponto de vista físico, neste processo as partículas maiores e mais densas se depositam mais rapidamente, enquanto as partículas menores ou menos densas permanecem suspensas por mais tempo. Além disso, cabe ressaltar que as partículas suspensas em um fluido se movem devido à ação das forças de gravidade e de arrasto gerada pela viscosidade do fluido (AGARWAL; LIU, 2015).

Uma das principais vantagens desta operação unitária é sua eficiência e custo em comparação com outros processos de separação como a filtração e a centrifugação. Além disso, é importante observar que a sedimentação não requer o uso de produtos químicos adicionais, o que reduz os custos de operação. Em termos de requisitos energéticos, esta operação unitária é um processo passivo que aproveita a gravidade, diferentemente de outros processos de separação. Isso a torna uma alternativa mais eficiente em termos de energia, especialmente para o tratamento de grandes volumes de fluido. Por outro lado, entre as suas limitações pode-se citar a baixa eficiência no tratamento de partículas muito pequenas ou pouco densas, já que o tempo requerido para a separação é excessivamente longo, o que pode inviabilizar o processo. O tamanho do tanque de sedimentação requerido para o tratamento de volumes significativos também pode ser um impeditivo para a sua aplicabilidade. Finalmente, embora o processo seja simples, pode ser necessário monitoramento contínuo para garantir a separação adequada das partículas. Isso pode envolver a manutenção de condições ideais no fluido, como viscosidade e temperatura, além do controle das características da suspensão, como a concentração de sólidos (AGARWAL; LIU, 2015; SUN et al., 2015; HILGERT et al., 2024).

Do ponto de vista matemático, a simulação do modelo que representa o processo de sedimentação configura um grande desafio. Isso se deve à complexidade do fenômeno, que envolve interações entre partículas, forças externas, turbulência, efeitos de

compactação, além da presença de descontinuidades e variações abruptas nas concentrações de sólidos (BÜRGER; CONCHA, 1998; BÜRGER et al., 2000, 2004; TAO et al., 2017). Neste caso, os tradicionais métodos como Diferenças Finitas, Volumes Finitos e Elementos Finitos podem enfrentar sérias dificuldades relacionadas à precisão e ao tratamento de descontinuidades (KURGANOV; TADMOR, 2000).

Para superar ou minimizar o impacto dessas dificuldades, métodos numéricos com esquemas de alta resolução para lidar com termos não lineares convectivos-difusivos têm sido propostos nas últimas décadas. De forma geral, o objetivo deste tipo de abordagem é lidar com descontinuidades e variações abruptas nos termos diferenciais presentes em equações diferenciais (ordinárias ou parciais). O primeiro esquema reportado para esta finalidade foi o proposto por Lax–Friedrichs (1954). Desde então, várias outras estratégias numéricas têm sido desenvolvidas com este objetivo. Esquemas baseados na Diminuição da Variação Total (TVD - *Total Variation Diminishing*) e centrados no *upstream* para satisfazer a lei de conservação como o MUSCL (*Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Law*), podem lidar com descontinuidades sem oscilações numéricas ao introduzir limitadores de fluxo, embora geralmente sofram com dissipação numérica excessiva (VAN LEER; 1979). Nessyahu e Tadmor (1990) propuseram um esquema central que oferece maior resolução do que o desenvolvido por Lax–Friedrichs, todavia mantendo a simplicidade da abordagem sem a necessidade de um *solver* do tipo Riemann. Liu et al. (1994) propuseram um novo esquema de captura de choques denominado de WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*). O objetivo é usar uma combinação convexa de todos os pontos para atingir a propriedade essencialmente não oscilatória, além de melhorar a precisão em uma ordem. Como resultado, esses esquemas são baseados em empregar médias de volumes de controles (células) e em uma discretização temporal do tipo Runge-Kutta de diminuição da variação total. Bürger e Concha (1998) propuseram um esquema numérico baseado em um método de diferenças centrais não oscilatório combinado com um limitador de fluxo para o tratamento de termos convectivos. Kurganov e Tadmor (2000) introduziram uma nova família de técnicas numéricas denominadas de Esquemas Centrais de Alta Resolução cuja finalidade é conservar a simplicidade de ser independente da estrutura do problema, enquanto desfruta de viscosidade numérica muito mais baixa em comparação com as abordagens propostas por Lax–Friedrichs (1954) e Nessyahu e Tadmor (1990). A ideia principal por trás desses esquemas centrais é o uso de informações mais precisas sobre as velocidades locais de propagação.

Xiao et al. (2005) propuseram um esquema simples e prático denominado de Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica (THINC - *Tangent of Hyperbola Interface Capturing*) para identificar interfaces móveis ou fronteiras livres em simulações multi-físicas modeladas por equações diferenciais. Este esquema utiliza a função tangente hiperbólica para calcular o fluxo numérico da função de fração volumétrica, fornecendo uma solução conservativa e sem oscilações, mesmo para interfaces extremamente distorcidas ou de complexidades arbitrárias (XIAO et al., 2005). Bürger et al. (2008) introduziram uma nova família de esquemas numéricos para lidar com problemas diferenciais com fluxos descontínuos usando uma abordagem MUSCL combinada com uma discretização temporal Runge-Kutta para alcançar precisão de segunda ordem. Diehl (2007) estimou a função de fluxo de sedimentação em batelada para uma suspensão ideal a partir de apenas dois experimentos considerando o Método de Godunov. Bürger et al. (2009; 2020) e Wang et al. (2010) propuseram o esquema *Engquist-Osher* com extrapolação e funções limitadoras de fluxo para resolver equações convectivas não lineares. Bürger et al. (2013) propuseram um método numérico robusto para controlar descontinuidades baseado no uso de relações constitutivas considerando o Método de Godunov. Esta mesma abordagem numérica foi utilizada por Diehl (2015) para identificar relações constitutivas em problemas não lineares com termos convectivos e difusivos aplicados à sedimentação. Similarmente, Rocha et al. (2020) determinaram equações constitutivas para o processo de sedimentação para cada uma das regiões de interesse (separadamente).

Diante do que foi apresentado, o presente trabalho tem por objetivo avaliar a aplicabilidade do Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica (THINC) para resolver o problema de sedimentação batelada. Assim, deseja-se verificar se a referida abordagem numérica é capaz de lidar com as descontinuidades nas interfaces, bem como garantir a precisão e estabilidade da solução durante a integração do modelo diferencial parcial. Além disso, também será avaliada a influência do tipo de condição inicial (Kynch ou Diehl) em dois estudos de caso clássicos reportados pela literatura especializada.

Esta contribuição é organizada como segue. A Seção 2 apresenta, de forma sucinta, o processo de sedimentação, com foco em sua modelagem matemática. A Seção 3 apresenta uma breve descrição da estratégia THINC. A Seção 4 apresenta os resultados numéricos considerando dois estudos de caso. Finalmente, as conclusões são apresentadas na última seção.

2. Modelagem Matemática do Processo de Sedimentação Batelada

Como mencionado anteriormente, o processo de sedimentação batelada é um fenômeno complexo que descreve como as partículas sólidas suspensas em um líquido ou em um gás se depositam na base de um recipiente (sedimentador). Esse processo ocorre devido à ação da gravidade, que faz com que as partículas mais pesadas se depositem mais rapidamente que as mais leves. A duração deste processo pode variar de horas a dias ou até semanas, dependendo do tamanho e da densidade das partículas envolvidas (AGARWAL; LIU, 2015; SUN et al., 2015; HILGERT et al., 2024).

D'Ávila (1978) descreve o fenômeno da sedimentação batelada ao longo do tempo $t \neq 0$ como um problema de fronteira móvel, onde descontinuidades se movem através do espaço, delimitando três regiões distintas: (i) região livre de sólidos (Região I: a concentração volumétrica local da fase sólida (ε_s) é igual a zero); (ii) região de sedimentação livre (Região II: ε_s é igual à concentração volumétrica inicial (ε_{s0}); e (iii) região de compressão (Região III: a concentração volumétrica varia de seu valor inicial para um valor máximo, isto é; $\varepsilon_{s0} < \varepsilon_s \leq \varepsilon_{sm}$, onde ε_{sm} é a concentração volumétrica máxima).

A Figura 1 ilustra cada uma destas regiões (domínios com fronteiras móveis), representadas pelas interfaces descendente e ascendente no eixo z , definidas pelos índices (1,2) e (3,4), respectivamente, com a origem das posições na sua base e a altura máxima da suspensão em $z = L$ (onde L é o comprimento da coluna de sedimentação).

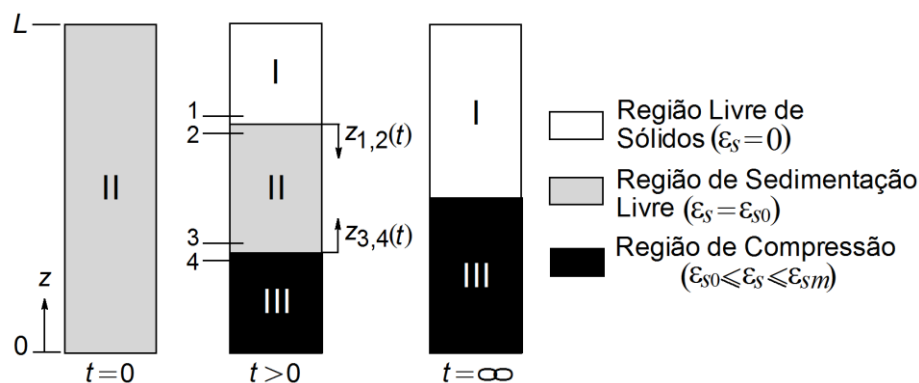


Figura 1. Regiões I, II e III da sedimentação batelada delimitadas por descontinuidades: interface descendente (1,2) e interface ascendente (3,4). Adaptado de Arouca (2007).

É importante destacar nesta figura que as descontinuidades previstas são superfícies singulares que se movem através do domínio espacial como funções do tempo, com $z_{1,2}(t)$ e $z_{3,4}(t)$ representando as posições das interfaces descendente e ascendente, respectivamente em um dado instante de tempo t . Como mencionado por D'Ávila (1978) e discutido por Arouca (2007), cada uma destas regiões pode ser modelada separadamente

usando as equações de continuidade e movimento derivadas da teoria das misturas, além da incorporação de equações constitutivas para cada região. Para esse propósito, Bürger e Wendland (1998) desenvolveram as condições de fronteira de entropia e salto para o problema de sedimentação considerando a compressão. Essas condições podem ser usadas para delimitar cada região durante a simulação do processo.

Matematicamente, o processo de sedimentação batelada pode ser modelado considerando as equações de continuidade e momento linear. Para uma aplicação unidimensional e transiente com densidade de sólidos constante, o conjunto de equações para a fase sólida em termos da concentração volumétrica (ε_s) é dado como segue (Bürger; Concha, 1998):

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial (V_s \varepsilon_s)}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\rho_s \varepsilon_s \left(\frac{\partial V_s}{\partial t} + V_s \frac{\partial V_s}{\partial z} \right) = \frac{\partial T_s}{\partial z} + m_z + \varepsilon_s (\rho_s - \rho_f) g_z \quad (2)$$

$$\varepsilon_s = \varepsilon_{s0}, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq L \quad (3)$$

$$V_s \varepsilon_s = 0, \quad t > 0 \text{ e } z = 0 \quad (4)$$

$$V_s \varepsilon_s = 0, \quad t > 0 \text{ e } z = L \quad (5)$$

onde V_s é a velocidade da fase sólida, ρ_s e ρ_f representam as densidades das fases sólida e líquida, respectivamente, T_s é o tensor que representa a tensão da fase sólida, m_z é a força resistiva e g_z é a aceleração gravitacional.

Para resolver esse modelo, é necessário definir as equações constitutivas usadas para caracterizar as propriedades materiais dos constituintes sólido e líquido da suspensão, assim como o tensor da fase sólida e a força resistiva. Os trabalhos de Bürger e Concha (1998); Bürger et al. (2000; 2004); Arouca (2007) e Diehl (2015) destacam uma simplificação importante nesse modelo, a saber, os termos inerciais (aceleração local e fluxo convectivo de momento linear) podem ser negligenciados na Eq. (2) quando comparados com outros que atuam no sistema físico. Com base nessa hipótese, a velocidade da fase sólida pode ser representada por uma equação algébrica em função da concentração volumétrica local da fase sólida e das equações constitutivas (que são dependentes da concentração volumétrica). Assim, de forma genérica, a Eq. (2) pode ser reescrita como:

$$V_s = g(\varepsilon_s) \quad (6)$$

onde $g(\varepsilon_s)$ é uma expressão que relaciona como a velocidade é uma função da concentração de sólidos.

Como consequência dessa hipótese, o modelo original pode ser representado pela seguinte equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial (g(\varepsilon_s)\varepsilon_s)}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

sujeita às condições iniciais e de contorno.

É importante mencionar que, embora o modelo tenha sido simplificado, as dificuldades relacionadas a descontinuidades e variações abruptas no perfil de concentração de sólidos e no fluxo de densidade dos sólidos ainda estão presentes (BÜRGER; CONCHA, 1998; BÜRGER et al., 2000, 2004, 2020; DIEHL, 2015). Nesse caso, para resolver um modelo com essas características, devem ser empregados métodos numéricos capazes de ultrapassar ou minimizar tais obstáculos.

3. MÉTODO DA CAPTURA DE INTERFACE POR TANGENTE HIPERBÓLICA

Como discutido na seção anterior, o modelo matemático simplificado que representa o processo da sedimentação batelada pode ser descrito pela Eq. (7). Para apresentar o Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica, considera-se o seguinte problema de Cauchy para leis de conservação escalares:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (f(u))}{\partial z} = 0 \quad (8)$$

onde u é a variável dependente e $f(u)$ é uma expressão matemática definida em termos da variável dependente.

Esse tipo de problema hiperbólico comumente aparece em estudos de caso envolvendo dinâmica de fluidos, propagação de ondas e modelagem de fenômenos com descontinuidades (BÜRGER; CONCHA, 1998; BÜRGER et al., 2000).

3.1 Descrição Matemática

O Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica, proposto por Xiao et al. (2005), configura uma abordagem eficiente, precisa e que apresenta estabilidade numérica empregada para resolver equações diferenciais parciais com descontinuidades. A idéia principal é aproximar a solução $u(t, z)$ considerando um perfil hiperbólico suave para representar a transição entre diferentes regiões da solução (que apresentam descontinuidades). A solução no passo de tempo $(n + 1)$ é dada por:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta z} (f_{i+1/2} - f_{i-1/2}) \quad (9)$$

onde $f_{i+1/2}$ é o fluxo transportado através da fronteira $x_{i+1/2}$ durante o intervalo de tempo Δt , calculado como:

$$f_{i+1/2} = \begin{cases} - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \Theta_i(z_{i+1/2} - u_{i+1/2}(\tau - t^n)) u d\tau, & \text{se } u_{i+1/2} \geq 0 \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \Theta_{i+1}(z_{i+1/2} - u_{i+1/2}(\tau - t^n)) u d\tau, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (10)$$

onde Δz é o incremento na direção espacial, $\Theta_i(Z)$ é a função de interpolação de reconstrução.

O esquema THINC utiliza a função tangente hiperbólica por partes como função de interpolação:

$$\Theta_i(Z) = \frac{1}{2} \left(1 + \gamma \tanh\left(\beta \left(\frac{Z - z_{i+1/2}}{\Delta z} - \check{z}_i\right)\right) \right) \quad (11)$$

onde γ é um parâmetro que é igual a 1 para $u_{i-1} < u_{i+1}$, caso contrário γ é igual a -1. β (= 1,5) é um parâmetro definido para controlar a inclinação e a espessura do salto. O parâmetro \check{z}_i é calculado como:

$$\check{z}_i = \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{\exp\left(\frac{\beta}{\gamma}(1 + \gamma - 2u_i)\right) - 1}{1 - \exp\left(\frac{\beta}{\gamma}(1 + \gamma - 2u_i)\right)} \right) \quad (12)$$

É importante ressaltar que, para garantir a convergência do processo ao longo do tempo, a condição de Courant–Friedrichs–Lewy (COURANT et al., 1928) deve ser satisfeita. Esta relaciona as discretizações nas direções espacial e temporal, a magnitude do valor da variável dependente, bem como uma constante definida pelo usuário.

De acordo com Xiao et al. (2005), as principais vantagens da estratégia THINC são: (a) alta precisão na captura das interfaces (o uso da tangente hiperbólica fornece uma transição suave e precisa entre regiões com comportamentos distintos, o que é particularmente útil para capturar ondas de choque ou transições de fase com alta resolução); (b) estabilidade numérica (a abordagem preserva a estabilidade mesmo quando a solução envolve descontinuidades fortes); e (c) flexibilidade (essa estratégia numérica é aplicável a uma ampla gama de problemas em dinâmica de fluidos, fluxos compressíveis e simulações multi-físicas, tornando-a uma ferramenta robusta para lidar com problemas com interfaces complexas). Como principal desvantagem pode-se citar o tempo de processamento requerido para atender a condição de Courant–Friedrichs–Lewy (COURANT et al., 1928). Na literatura especializada, podem ser encontradas diferentes

aplicações envolvendo a estratégia THINC, como a solução de casos de teste multi-dimensionais (XIAO et al. 2011; LI et al., 2014); simulações de fluxos interfaciais multi-físicas na presença de configurações geométricas complexas (XIE et al., 2014); e dinâmica de gases compressíveis reativas (DENG et al., 2018).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção, a metodologia apresentada será empregada para resolver dois estudos de caso em sedimentação batelada. Para essa finalidade, alguns pontos devem ser destacados:

- A partir do conhecimento do domínio espacial de interesse (comprimento do sedimentador), do número de pontos de discretização na direção espacial (N) (como consequência tem-se o incremento da direção espacial - Δz), do parâmetro C e da magnitude da variável dependente, a condição de Courant–Friedrichs–Lewy (COURANT et al., 1928) é avaliada para a determinação do incremento no tempo (Δt) como:

$$\Delta t = \frac{C\Delta z}{|u|} \quad (13)$$

- Cabe destacar que a condição inicial do tipo Kynch é aquela em que a concentração inicial em todo o sedimentador é igual a ε_{s0} no tempo igual a zero. Por outro lado, na condição inicial do tipo Diehl tem-se duas regiões separadas por uma membrana impermeável no tempo igual a zero: (i) uma em que a concentração inicial é igual a zero ($0 \leq z \leq L_0$, onde L_0 é um comprimento característico definido no intervalo $0 < z < L$) e (ii) a outra em que a concentração inicial é igual a ε_{s0} ($L_0 < z \leq L$). Neste caso, no início do processo, a membrana é retirada e a sedimentação ocorre normalmente.
- Todas as rotinas numéricas foram implementadas utilizando o software Scilab® (versão 6.6.1).
- O tempo de processamento (TP) é calculado usando um computador de mesa com um processador Intel Core i7-4770 e 8GB de memória.

4.1 Estudo de Caso A

A primeira aplicação considera a conservação da massa em termos da concentração volumétrica de sólidos ao longo do eixo vertical z de um sedimentador batelada cujo modelo

matemático e as condições iniciais e de contorno são definidas como (BÜRGER et al., 2020):

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial (V_s \varepsilon_s)}{\partial z} = 0, \quad 0 < z \leq 1 \text{ m}, \quad 0 < t \leq t_f \text{ h} \quad (14)$$

$$V_s(\varepsilon_s) = \frac{18\varepsilon_s}{5 + 5\varepsilon_s^3/64} - \frac{\varepsilon_s}{35}, \quad [\text{m/h}] \quad (15)$$

$$\varepsilon_s(0, z) = \varepsilon_{s0}, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq 1 \quad (16)$$

$$\varepsilon_s(t, 0) = \begin{cases} \varepsilon_{s0}, & t \leq 0,01 \text{ h} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad t > 0 \text{ e } z = 0 \quad (17)$$

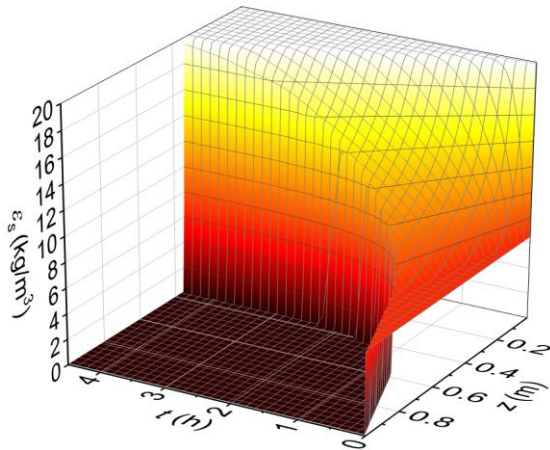
$$\varepsilon_s(t, 1) = \varepsilon_{sm}, \quad t > 0 \text{ e } z = 1 \quad (18)$$

onde t é o tempo (t_f é o tempo total de operação do processo), z é a variável espacial, ε_s é a concentração volumétrica de sólidos. ε_{s0} ($=6,5 \text{ kg/m}^3$) e ε_{sm} ($=20 \text{ kg/m}^3$) representam as concentrações inicial e máxima de sólidos no sedimentador.

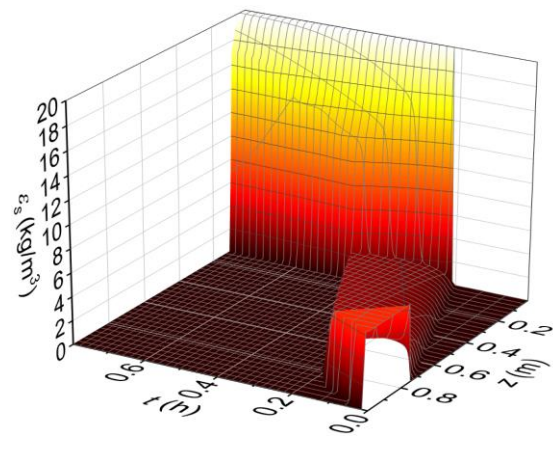
Para a condição inicial representada pela Eq. (16), tem-se o teste do tipo Kynch (onde ao longo de todo o sedimentador a concentração inicial é igual a ε_{s0} , sendo (t_f igual a 4,5 h). Para simular o modelo considerando o teste do tipo Diehl, o tempo de simulação será igual a 0,8 h. Além disso, a condição inicial dada pela Eq. (16) é substituída pela seguinte relação:

$$\varepsilon_s(0, z) = \begin{cases} \varepsilon_{s0}, & 0,75 \leq z \leq 1 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (19)$$

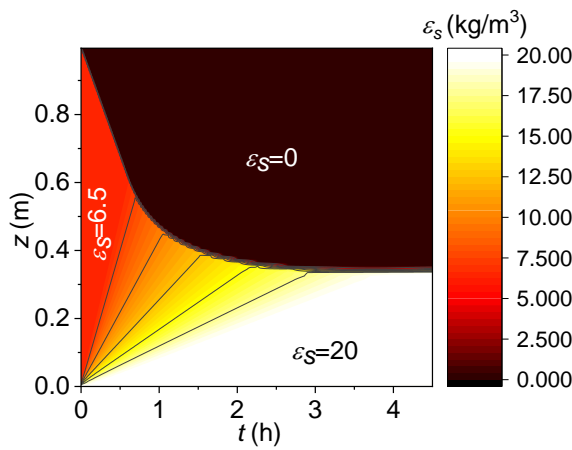
Na Figura 2 são apresentados os perfis de concentração volumétrica de sólidos em função do comprimento e do tempo, as suas projeções (gráficos de contorno) e os perfis de concentração volumétricas de sólidos ao longo do sedimentador para determinados instantes de tempo para os dois tipos de teste. No teste Kynch (Figura 2(a)) é possível observar a região onde ε_s é igual a zero; a região de sedimentação livre ($\varepsilon_s = 6,5 \text{ kg/m}^3$); e a região de compressão ($6,5 \text{ kg/m}^3 < \varepsilon_s \leq 20 \text{ kg/m}^3$). Já no teste Diehl (Figura 2(b)) também é possível observar a presença das mesmas três regiões. Todavia, devido ao tipo de condição inicial considerada (Eq. (19)), também podem ser observada uma outra região onde ε_s é igual a zero e uma região de transição ($0 < z \leq 0,75 \text{ m}$) onde as partículas percorrem a parte do sedimentador que, inicialmente, não contém material particulado.



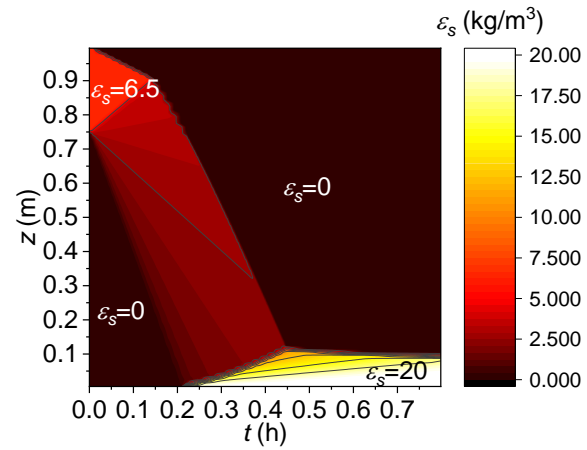
(a) ε_s (Teste Kynch).



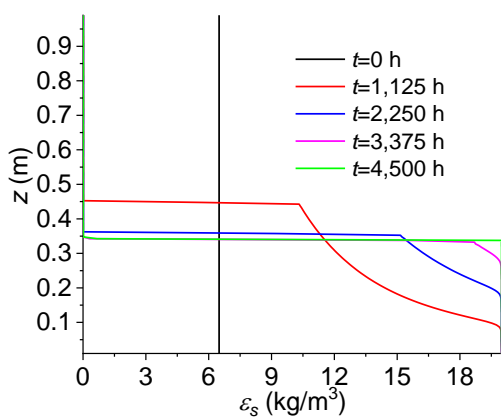
(b) ε_s (Teste Diehl).



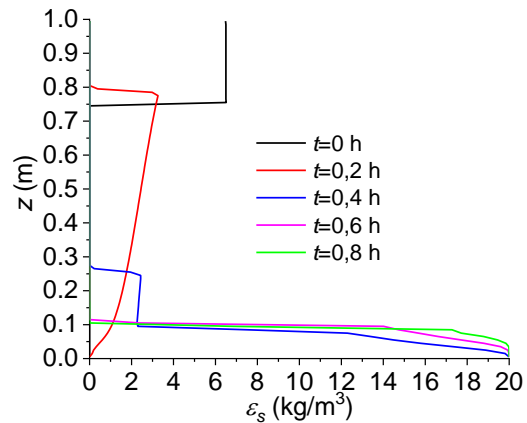
(c) Gráfico de contorno (Teste Kynch).



(d) Gráfico de contorno (Teste Diehl).



(e) $z \times \varepsilon_s$ (Teste Kynch).



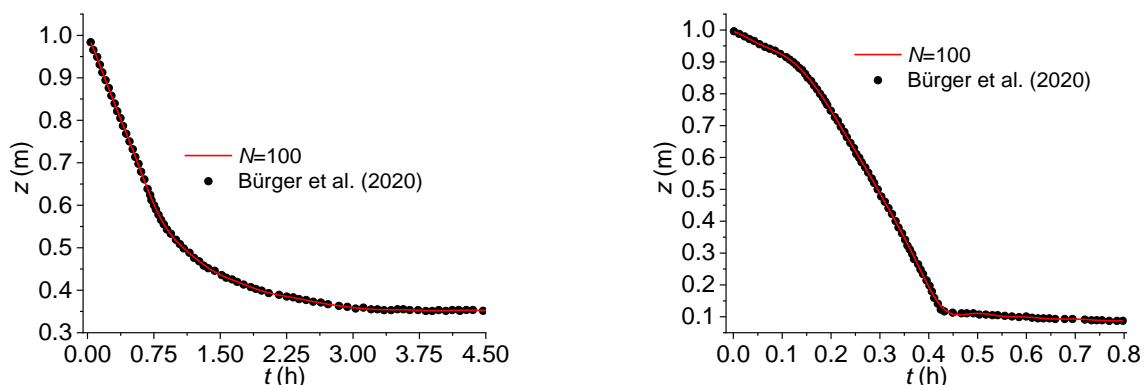
(f) $z \times \varepsilon_s$ (Teste Diehl).

Figura 2. Perfis de concentração volumétrica de sólidos para o estudo de caso A ($N=100$ e $C=0,5$).

Além disso, ressalta-se que, para t menor que aproximadamente $0,2$ h e $0 < z \leq 0,75$ m observa-se que na base do sedimentador ainda não existe a deposição das partículas. Isto já era esperado visto que para este tipo de teste não existem partículas no início do

processo para z menor ou igual a 0,75 m. Por fim, constata-se que os tempos de simulação requeridos por cada um dos testes para que o processo seja finalizado é bem diferente, sendo bem menor para o teste Diehl em relação ao Kynch. Isto se deve a quantidade de massa no teste Diehl ser menor do que a utilizada no teste Kynch (para manter a mesma concentração inicial para um volume menor no teste Diehl, é necessário reduzir a massa total). Assim, se a quantidade de massa do sistema é menor, implica que o tempo de sedimentação das partículas também é menor. Os gráficos de contorno apresentados nas Figuras 2(c) e 2(d) destacam as regiões do processo de sedimentação em cada um dos testes. Fica evidente nestas figuras a influência da condição inicial no perfil final obtido. Cabe enfatizar que, do ponto de vista matemático, o teste Diehl insere uma dificuldade adicional, isto é, tem-se logo em t igual a zero uma descontinuidade, o que aumenta a complexidade do problema a ser resolvido pela abordagem numérica considerada. Nas Figuras 2(e) e 2(f) é possível observar a evolução dos perfis de concentração volumétrica de sólidos ao longo do sedimentador para alguns instantes de tempo. De forma geral, quanto maior o tempo avaliado, maior é o valor de ε_s na base do sedimentador, como esperado. Todavia, a forma como a concentração evolui depende do tipo de teste (condição inicial adotada).

Já na Figura 3 é apresentado as interfaces descendentes obtidas pela metodologia proposta e as reportadas por Bürger et al. (2020) usando o esquema *Engquist-Osher* para cada um dos testes. Nestas figuras é possível observar uma boa concordância entre todos os perfis, evidenciando a eficácia do método THINC.



(a) Interface descendente (Teste Kynch).

(b) Interface descendente (Teste Diehl).

Figura 3. Interfaces descendentes para cada tipo de teste no estudo de caso A ($N=100$ e $C=0,5$).

Na Tabela 1 são apresentados os tempos de processamento requeridos no primeiro estudo de caso para valores de N . Nesta é possível constatar que, como esperado, o aumento no valor de N implica na redução do tamanho do passo espacial. Como consequência, tem-se a redução do incremento do tempo, conforme a condição de Courant–Friedrichs–Lewy (Eq. (13)). Como o teste de Diehl requer um tempo de simulação menor do que o de Kynch e o valor do parâmetro C foi o mesmo, o tempo de processamento do teste de Diehl é menor do que o requerido pelo teste de Kynch.

Tabela 1. Tempo de processamento (s) considerando os dois testes e diferentes números de pontos de discretização no espaço para o primeiro estudo de caso ($C=0,5$).

Teste	$N=50$	$N=100$	$N=200$
Kynch	2,35	18,29	130,03
Diehl	0,58	3,91	32,67

4.2 Estudo de Caso B

O segundo estudo de caso considera o sedimentador batelada estudado por Diehl (2007). Neste modelo a variável dependente é a fração volumétrica de sólidos (ϕ_s) e não da concentração, como no caso anterior. Matematicamente, este é descrito como:

$$\frac{\partial \phi_s}{\partial t} + \frac{\partial (V_s \phi_s)}{\partial z} = 0, \quad 0 < z \leq 1 \text{ m}, \quad 0 < t \leq t_f \text{ h} \quad (20)$$

$$V_s(\phi_s) = 12,1835 - 49,5619\phi_s + 58,4190\phi_s^2 + 4,0550\phi_s^3 - 32,4804\phi_s^4, \quad [\text{m/h}] \quad (21)$$

$$\phi_s(0, z) = \phi_{s0}, \quad t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq 1 \quad (22)$$

$$\phi_s(t, 0) = \begin{cases} \phi_{s0}, & t \leq 0,0001 \text{ h} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad t > 0 \text{ e } z = 0 \quad (23)$$

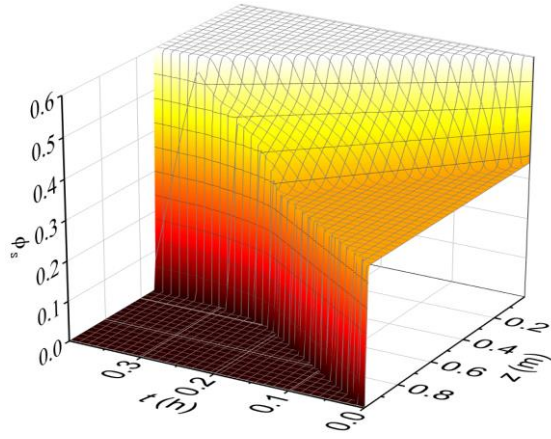
$$\phi_s(t, 1) = \phi_{sm}, \quad t > 0 \text{ e } z = 1 \quad (24)$$

onde t é o tempo, z é a variável espacial, ϕ_{s0} ($=0,34$) e ϕ_{sm} ($=0,6$) representam as frações inicial e máxima de sólidos no sedimentador.

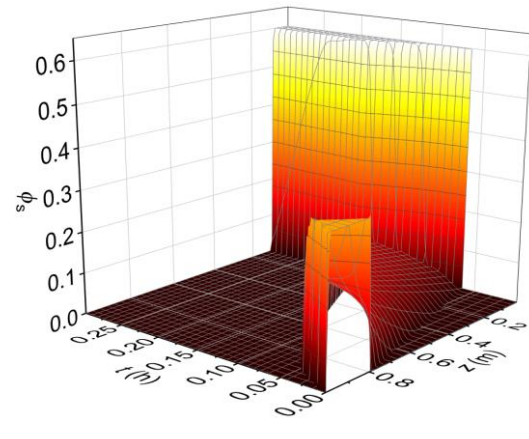
Como mencionado para a primeira aplicação, a Eq. (22) representa a condição inicial para o teste do tipo Kynch (em que t_f é igual a 0,4 h). Para simular o modelo considerando o teste do tipo Diehl o tempo de simulação é igual a 0,28 h e a condição inicial é dada como:

$$\phi_s(t, 0) = \begin{cases} \phi_{s0}, & 0,80 \leq z \leq 1 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (25)$$

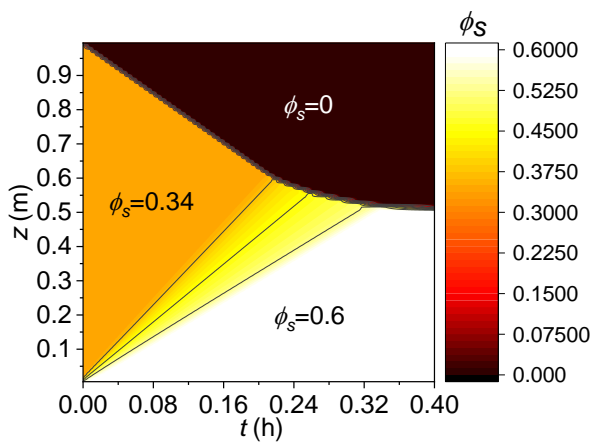
Na Figura 4 são apresentados os perfis de fração volumétrica, os gráficos de contorno e os perfis de fração volumétrica ao longo do sedimentador para determinados instantes de tempo para os dois tipos de teste.



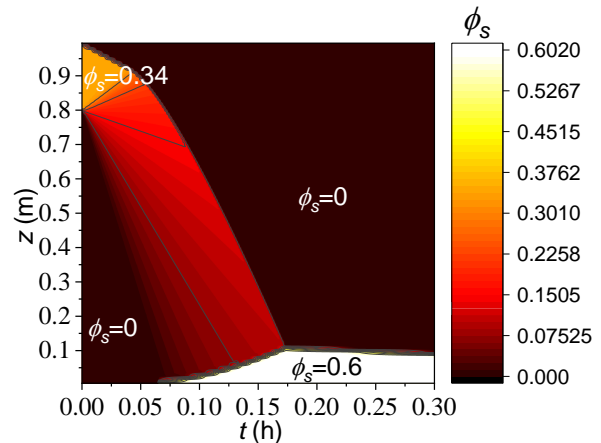
(a) ϕ_s (Teste Kynch).



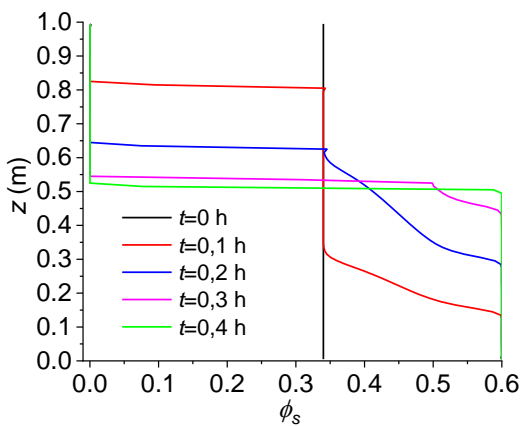
(b) ϕ_s (Teste Diehl).



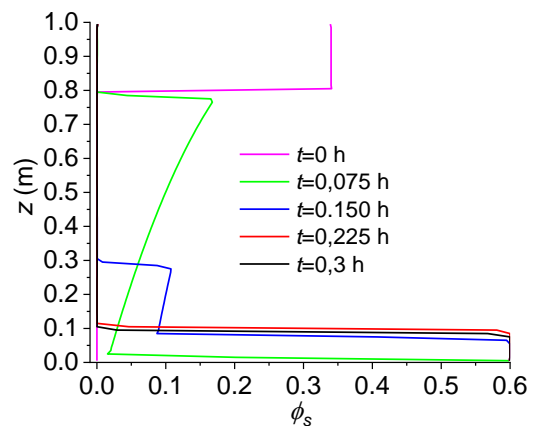
(c) Gráfico de contorno (Teste Kynch).



(d) Gráfico de contorno (Teste Diehl).



(e) $z \times \phi_s$ (Teste Kynch).

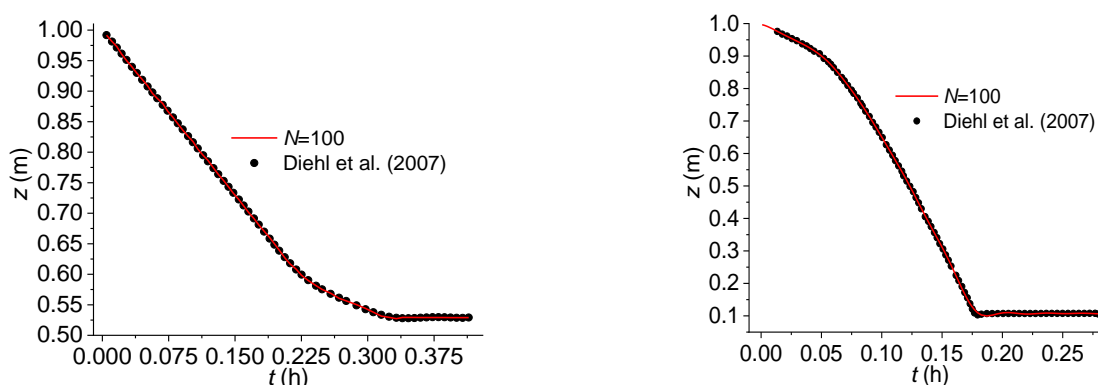


(f) $z \times \phi_s$ (Teste Diehl).

Figura 4. Perfis de fração volumétrica de sólidos para o estudo de caso B ($N=100$ e $C=0,01$).

Na Figura 4(a) (teste Kynch) observa-se as três regiões (ϕ_s igual a zero; ϕ_s igual a 0,34); e $0,34 < \phi_s \leq 0,6$). Já na Figura 4(b) (teste Diehl), além das já mencionadas, tem-se uma outra região onde ϕ_s é igual a zero e uma região de transição ($0 < z \leq 0,80$ m) onde as partículas percorrem a parte do sedimentador que, inicialmente, não contém material particulado. Assim como mencionado para a primeira aplicação, para t menor que aproximadamente 0,05 h e $0 < z \leq 0,8$ m, observa-se a ausência de partículas na base do sedimentador. Além disso, como a quantidade de partículas é menor no teste Diehl, o tempo de operação do processo para este teste é menor do que o requerido pelo teste Kynch. As regiões do processo de sedimentação em cada teste, bem como a influência da condição inicial podem ser visualizados nas Figuras 4(c) e 4(d). Por fim, nas Figuras 4(e) e 4(f) observa-se a evolução dos perfis de fração volumétrica de sólidos ao longo do sedimentador para determinados instantes de tempo. Como mencionado anteriormente, quanto maior o tempo avaliado, maior é o valor de ϕ_s na base do sedimentador, mas esta é função do tipo de condição inicial adotada.

Já na Figura 5 é apresentado as interfaces descendentes obtidas pela metodologia proposta e as reportadas por Diehl (2007) considerando o método de Godunov. Assim como na aplicação anterior, observa-se nesta figura uma boa concordância entre estes perfis, evidenciando a eficácia do método THINC para a resolução do problema de sedimentação batelada.



(a) Interface descendente (Teste Kynch). (b) Interface descendente (Teste Diehl).

Figura 5. Interfaces descendentes para cada tipo de teste para o estudo de caso B ($N=100$ e $C=0,01$).

Na Tabela 2 são apresentados os tempos de processamento requeridos para o segundo estudo de caso para diferentes números de pontos de discretização na direção

espacial. Como mencionado para a primeira aplicação, o aumento no valor de N implica na redução do tamanho do passo espacial e do incremento do tempo (Eq. (13)). Assim, como o teste de Diehl requer um tempo de simulação menor do que o de Kynch e o valor do parâmetro C não se altera, o tempo para a simulação considerando o teste de Diehl é menor que o requerido pelo teste de Kynch.

Tabela 2. Tempo de processamento (s) considerando os dois testes e diferentes números de pontos de discretização no espaço para o segundo estudo de caso ($C=0,01$).

Teste	$N=50$	$N=100$	$N=200$
Kynch	5,17	41,43	101,34
Diehl	3,72	30,74	77,14

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, o Método da Captura de Interface por Tangente Hiperbólica foi utilizado para simular o processo de sedimentação de partículas operando em regime batelada. Os resultados obtidos demonstraram que a estratégia numérica foi capaz de fornecer boas estimativas para os perfis de concentração (e de fração) volumétrica de sólidos quando comparado com outras abordagens numéricas. Neste contexto, o método numérico foi eficiente no tratamento das descontinuidades inerentes do problema em questão. É importante destacar que é necessário definir o parâmetro dado pela condição de Courant–Friedrichs–Lewy (COURANT et al., 1928). Todavia, o mesmo pode ser facilmente ajustado após simulações preliminares. Do ponto de vista físico, os resultados obtidos são consistentes com os reportados por experimentos descritos na literatura (AROUCA, 2007; DIEHL, 2015).

De forma geral, o teste Diehl representa uma dificuldade adicional em relação ao teste Kynch. Na prática, deve-se avaliar a aplicabilidade do teste Diehl, visto que o mesmo tem um tempo de operação inferior ao requerido pelo teste Kynch. Todavia, cabe ressaltar que a quantidade de massa depositada na base do sedimentador com o teste Diehl é inferior quando comparada com o teste Kynch. Além disso, a implementação experimental do teste Diehl não é trivial, conforme destacado por Bürger et al. (2020).

Como sugestões para trabalhos futuros pretende-se: (i) resolver o problema de sedimentação batelada considerando a equação de momento (e não uma equação empírica para a velocidade); (ii) propor e resolver um problema inverso para a determinação das densidades de fluxo de sólidos utilizando dados experimentais reais; (iii) investigar o fenômeno Boycott em sedimentadores inclinados; (iv) avaliar o efeito da temperatura na

sedimentação de partículas; e (v) avaliar o efeito da compactação dos sedimentos na base do sedimentador.

AGRADECIMENTOS

F.S. Lobato agradece à agência brasileira CNPq pelo apoio financeiro à sua pesquisa por meio da concessão de uma bolsa de pesquisa (número da bolsa 309178/2023-1).

REFERÊNCIAS

- AGARWAL, A.; LIU, Y. **Remediation Technologies for Oil-Contaminated Sediments**. *Marine Pollution Bulletin*, 101(2), 483-490. doi: 10.1016/j.marpolbul.2015.09.010, 2015.
- AROUCA, F.O. **Uma contribuição ao estudo da sedimentação gravitacional em batelada**. 2007. 162 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Federal de Uberlândia, Brasil, 2007.
- BÜRGER, R., CONCHA, F. **Mathematical Model and Numerical Simulation of the Settling of Flocculated Suspensions**. *International Journal of Multiphase Flow*, 24, 1005–1023. doi: 10.1016/S0301-9322(98)00026-3, 1998.
- BÜRGER, R.; WENDLAND, W.L. **Entropy Boundary and Jump Conditions in the Theory of Sedimentation with Compression**. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 21, 865—882. doi: 10.1002/(SICI)1099-1476(199806)21:9<865::AID-MMA983>3.0.CO;2-9, 1998.
- BÜRGER, R.; CONCHA, F.; TILLER, F.M. **Applications of the Phenomenological Theory to Several Published Experimental Cases of Sedimentation Processes**. *Chemical Engineering Journal*, 80, 105–117. doi: 10.1016/S1383-5866(00)00090-3, 2000.
- BÜRGER, R.; DAMASCENO, J.J.R.; KARLSEN, K.H. **A Mathematical Model for Batch and Continuous Thickening of Flocculated Suspensions in Vessels with Varying Crosssection**. *International Journal of Mineral Processing*, 73, 183–208. doi: 10.1016/S0301-7516 (03)000, 2004.
- BÜRGER, R.; GARCÍA, A.; KARLSEN, K.H. Towers JD. **A Family of Numerical Schemes for Kinematic Flows with Discontinuous Flux**. *Journal of Engineering Mathematics*, 60, 387–425. doi: 10.1007/s10665-007-9148-4, 2008.
- BÜRGER, R.; KARLSEN, K.H.; TOWERS, J.D. **An Engquist–Osher-Type Scheme for Conservation Laws with Discontinuous Flux Adapted to Flux Connections**. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 47(3), 1684-1712. doi: 10.1137/07069314X, 2009.
- BÜRGER, R.; DIEHL, S.; FARÁS, S.; NOPENS, I.; TORFS, E. **A Consistent Modelling Methodology for Secondary Settling Tanks: A Reliable Numerical Method**. *Water Science and Technology*, 68(1), 192-208. doi:10.2166/wst.2013.239, 2013.
- BÜRGER, R.; CAREAGA, J.; DIEHL, S. **A Review of Flux Identification Methods for Models of Sedimentation**. *Water Science Technology*, 81(8), 1715–1722. doi:

10.2166/wst.2020.113, 2020.

COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. **On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics**. AEC Research and Development Report. NYO-7689, New York: AEC Computing and Applied Mathematics Centre – Courant Institute of Mathematical Sciences, pp. V+76, 1928.

D'ÁVILA, J.S. **Um Modelo Matemático para a Sedimentação**. 1978. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil, 1978.

DENG, X.; XIE, B.; LOUBÈRE, R.; SHIMIZU, Y.; XIAO, F. **Limiters-Free Discontinuity-Capturing Scheme for Compressible Gas Dynamics with Reactive Fronts**. *Computers & Fluids*, 171, 1-14. doi: 10.1016/j.compfluid.2018.05.015, 2018.

DIEHL, S. **Estimation of the Batch-Settling Flux Function for an Ideal Suspension from Only Two Experiments**. *Chemical Engineering Science*, 17, 4589-4601. doi: 10.1016/j.ces.2007.05.025, 2007.

DIEHL, S. **Numerical Identification of Constitutive Functions in Scalar Nonlinear Convection–Diffusion Equations with Application to Batch Sedimentation**. *Applied Numerical Mathematics*, 95, 154-172. doi: 10.1016/j.apnum.2014.04.002, 2015.

FRIEDRICHS, K.O. **Symmetric Hyperbolic Linear Differential Equations**. *Communications on Pure Applied Mathematics*, 7, 345. doi: 10.1002/cpa.3160070206, 1954.

KURGANOV, A.; TADMOR, E. **New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Hamilton-Jacobi Equations**. *Journal of Computational Physics*, 160(2), 241-282. doi: 10.1006/jcph.2000.6481, 2000.

HILGERT, S.; SOTIRI, K.; FUCHS, S. **Review of Methods of Sediment Detection in Reservoirs**. *International Journal of Sediment Research*, 39(1), 28-43, doi: 10.1016/j.ijsrc.2023.12.004, 2024.

LI, S.; XIE, B.; XIAO, F. **An Interface Capturing Method with a Continuous Function: The THINC Method on Unstructured Triangular and Tetrahedral Meshes**. *Journal of Computational Physics*, 259, 260-269. doi: 10.1016/j.jcp.2013.11.034, 2014.

LIU, X.-D.; OSHER, S.; CHAN, T. **Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes**. *Journal of Computational Physics*, 115(1), 200-212. doi: 10.1006/jcph.1994.1187, 1994.

NESSYAHU, H.; TADMOR, E. **Non-Oscillatory Central Differencing for Hyperbolic Conservation Laws**. *Journal of Computational Physics*, 87, 408. doi: 10.1016/0021-9991(90)90260-8, 1990.

ROCHA, R.R.; OECHSLER, B.F.; MELEIRO, L.A.C.; FAGUNDES, F.M.; AROUCA, F.O.; DAMASCENO, J.J.R.; SCHEID, C.M.; CALÇADA, L.A. **Settling of Weighting Agents in Non-Newtonian Fluids to Off-Shore Drilling Wells: Modeling, Parameter Estimation and Analysis of Constitutive Equations**. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 184, 106535. doi: 10.1016/j.petrol.2019.106535, 2020.

SUN, L.; FANG, C.; LI, F.; ZHU, R.; ZHANG, Y.; YUAN, X.; JIA, A.; GAO, X.; SU, L. **Innovations and Challenges of Sedimentology in Oil and Gas Exploration and Development**. *Petroleum Exploration and Development*, 42(2), 143-151. doi:

10.1016/S1876-3804(15)30001-X, 2015.

TAO, W.; WU, J.; WANG, Q. **Mathematical Model of Sediment and Solute Transport Along Slope Land in Different Rainfall Pattern Conditions**. Scientific Reports, 7, 44082. doi: 10.1038/srep44082, 2017.

VAN LEER, B. **Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. A Second-Order Sequel to Godunov's Method**. Journal of Computational Physics, 32, 101-136. doi: 10.1016/0021-9991(79)90145-1, 1979.

WANG, S.; GUO, Y.; HU, Y. **Mathematics Model of Sedimentation and Application in Industrial Sedimentation**. International Conference on E-Product E-Service and E-Entertainment. doi: 10.1109/iceee.2010.5660549, 2010.

XIAO, F.; HONMA, Y.; KONO, Y. **A Simple Algebraic Interface Capturing Scheme using Hyperbolic Tangent Function**. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 48, 1023–1040. doi: 10.1002/flid.975, 2005.

XIAO, F.; LI, S.; CHEN, C. **Revisit to the THINC Scheme: A Simple Algebraic VOF Algorithm**. Journal of Computational Physics, 230(19), 7086-7092. doi: 10.1016/j.jcp.2011.06.012, 2011.

XIE, B.; LI, S.; XIAO, F. **An Efficient and Accurate Algebraic Interface Capturing Method for Unstructured Grids in 2 and 3 Dimensions: The THINC Method with Quadratic Surface Representation**. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 76(12), 1025-1042. doi: 10.1002/flid.3968, 2014.