



Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
de Recursos Naturais da Amazônia

## **SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE E FILTRO DE PARTÍCULAS**

**Clauderino da Silva Batista**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia, do Instituto Tecnológico, da Universidade Federal do Pará, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Recursos Naturais.

Orientadores: João Nazareno Nonato Quaresma  
Emanuel Negrão Macêdo

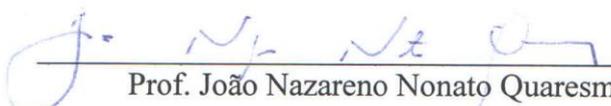
Belém  
Dezembro de 2011

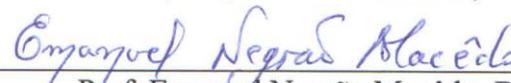
**SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A  
TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE E FILTRO DE PARTÍCULAS**

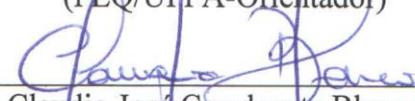
Clauderino da Silva Batista

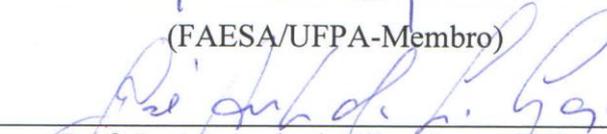
TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE RECURSOS NATURAIS DA AMAZÔNIA (PRODERNA/ITEC) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA DE RECURSOS NATURAIS.

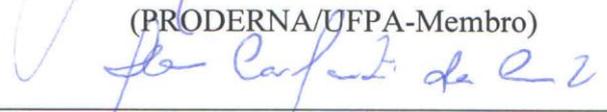
Aprovada por:

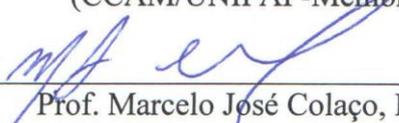
  
Prof. João Nazareno Nonato Quaresma, D.Sc.  
(FEQ/UFPA-Orientador)

  
Prof. Emanuel Negrão Macêdo, D.Sc.  
(FEQ/UFPA-Orientador)

  
Prof. Claudio José Cavalcante Blanco, Ph.D.  
(FAESA/UFPA-Membro)

  
Prof. José Antonio da Silva Souza, D.Eng.  
(PRODERNA/UFPA-Membro)

  
Prof. Alan Cavalcanti da Cunha, D.Eng.  
(CCAM/UNIFAP-Membro)

  
Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.  
(PEM/COPPE/UFRJ-Membro)

BELÉM, PA - BRASIL  
DEZEMBRO DE 2011

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**  
**Instituto de Tecnologia/Programa de Pós-graduação em**  
**Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia**

---

Batista, Clauderino da Silva

Solução de equações de balanço populacional usando a técnica da transformada de Laplace e filtro de partículas/Clauderino da Silva Batista; orientadores, João Nazareno Nonato Quaresma, Emanuel Negrão Macêdo. - Belém, 2011

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Pará. Instituto de Tecnologia. Programa de Pós-graduação em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia, 2011

1. Equações de Balanço Populacional 2. Transformada de Laplace 3. Sistemas Particulados 4. Aerossóis I. Título

CDD 22. ed. 660.28

---

*À minha esposa Dalvina e aos meus filhos  
Eduardo e Ana Claudia que me dão muita  
força e carinho, e colaboraram em todos os  
momentos para a realização deste trabalho.*

## **AGRADECIMENTOS**

A DEUS, pela força que me impulsionou a chegar ao final de mais uma etapa de minha vida.

À minha falecida mãe que sempre acreditou no meu potencial, e ao meu pai que sempre está ao meu lado quando preciso de apoio fraternal.

À minha esposa Dalvina e aos meus filhos Eduardo e Ana Claudia que me dão muita força e carinho, e colaboraram em todos os momentos para a realização deste trabalho.

Aos professores Emanuel Negrão Macêdo e João Nazareno Nonato Quaresma, pela orientação, incentivo, amizade e paciência dispensada durante a realização deste trabalho.

Aos meus amigos(as) Carlos Célio, Sil, Jean, Edilson, Cleber, Clever, Nelson e Michele pelo incentivo e amizade.

A todos os companheiros do laboratório que me ajudaram direta e indiretamente na realização deste trabalho.

Resumo da Tese apresentada ao PRODERNA/UFPA como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia de Recursos Naturais (D.Eng.)

## **SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE E FILTRO DE PARTÍCULAS**

**Clauderino da Silva Batista**

Dezembro/2011

Orientadores: João Nazareno Nonato Quaresma

Emanuel Negrão Macêdo

Área de Concentração: Transformação de Recursos Naturais

A evolução da distribuição do tamanho de partículas em muitos campos da ciência aplicada como cristalização, física de aerossol, química coloidal e processo de polimerização, pode ser obtida pela solução da equação de balanço populacional (PBE). A técnica da transformada de Laplace com inversão numérica foi usada para resolver uma equação integro-diferencial parcial que relaciona a modelagem matemática do problema físico para estudar processos convectivos com taxas de nascimento e morte de partículas e aerossóis. Tal modelo é governado PBE, na qual leva em consideração a nucleação, crescimento e processos de coagulação. Um método Bayesiano foi usado para resolver o problema inverso hiperbólico e não-linear, e estimar a função densidade de tamanho de partículas, e assim prever o comportamento dinâmico do sistema físico. Especificamente o filtro de partículas com amostragem e Reamostragem por Importância Sequencial (SIR) foi utilizado como metodologia de solução do problema. Através dessas soluções, resultados numéricos foram obtidos e comparados com os disponíveis na literatura para sistemas particulados, permitindo uma avaliação crítica da presente metodologia de solução.

Abstract of Thesis presented to PRODERNA/UFFPA as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Natural Resources Engineering (D.Eng.)

**SOLUTION OF A GENERAL POPULATION BALANCE EQUATION BY THE LAPLACE TRANSFORM AND PARTICLES FILTER TECHNIQUES.**

**Clauderino da Silva Batista**

December/2011

Advisor: João Nazareno Nonato Quaresma

Emanuel Negrão Macêdo

Research Area: Transformation of Natural Resources

The evolution of particle size distribution in many fields of applied science, such as crystallization, aerosols, colloids, and polymer processing, can be obtained by solving population balance equation (PBE). The Laplace transform technique with numerical inversion was used to solve an integro-partial-differential equation related to the mathematical modeling of the physical problem to study convective processes with birth and death rates of particles or aerosols. Such model is governed by the population balance equation (PBE), in which is taken into account the nucleation, growth and coagulation processes. A Bayesian method was employed to solve the hyperbolic and non-linear inverse problem and estimate the size distribution density function, thus predicting the dynamic behavior of the physical system. Specifically the particle filter with sampling Importance Resampling (SIR) has been applied as a method of solving the problem. From these solutions, numerical results were obtained and compared with those in the literature for particulate systems permitting a critical evaluation of the present solution methodology.

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 MOTIVAÇÃO.....	1
1.2 OBJETIVOS.....	2
1.3 CONTRIBUIÇÕES DA TESE.....	2
1.4 SINTESE DO TRABALHO.....	3
2. ESTADO DA ARTE E REVISÃO DA LITERATURA.....	4
2.1 EQUAÇÕES DO BALANÇO POPULACIONAL.....	4
2.2 APLICAÇÕES EM AEROSOIS.....	8
2.3 APLICAÇÕES EM SISTEMAS PARTICULADOS.....	12
2.4 METODOLOGIAS DE SOLUÇÕES PARA EQUAÇÃO DO BALANÇO POPULACIONAL (PBE).....	17
2.4.1 Método das características.....	17
2.4.2 Método da transformada de Laplace.....	18
2.4.3 Inversão numérica da transformada de Laplace.....	21
2.5 PROBLEMAS INVERSOS.....	23
2.6 FILTROS BAYESIANOS.....	25
2.6.1 Filtro de Kalman.....	28
3. MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO.....	31
3.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....	31
3.2 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO VIA TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE.....	32
3.2.1 Modelos propostos por RAMABHADHAN <i>et al.</i> (1976) para aerossóis....	32
3.2.2 Modelos propostos por GELBARD e SEINFELD (1978) para sistemas particulados.....	39
3.2.3 Modelos proposto por PETERSON <i>et al.</i> (1978) para condensação e coagulação de Aerossóis.....	52
3.3 RESUMO.....	56
3.3.1 Modelos propostos por RAMABHADHAN <i>et al.</i> (1976).....	56
3.3.2 Modelos propostos por GELBARD e SEINFELD (1978).....	57
3.3.3 Modelos proposto por PETERSON <i>et al.</i> (1978).....	58
4 ANÁLISE DOS RESULTADOS PARA O PROBLEMA DIRETO.....	60

4.1 ANÁLISE DOS MODELOS PROPOSTOS POR RAMABHADHAN <i>et al.</i> (1976) PARA AEROSSÓIS.....	60
4.2 ANÁLISE DOS MODELOS PROPOSTOS POR GELBAR E SEINFELD (1978) PARA SISTEMAS PARTICULADOS.....	66
4.3 ANÁLISE DOS MODELOS PROPOSTOS POR PETERSON <i>et al.</i> (1978) PARA COAGULAÇÃO E CONDENSAÇÃO DE AEROSSÓIS.....	73
5 FILTRO DE PARTÍCULAS.....	79
5.1 AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA.....	80
5.2 AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIS).....	81
5.3 AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIR).....	85
5.4 APLICAÇÃO PARA O PROBLEMA DE GELBARD E SEINFELD (1978).....	88
6 RESULTADOS E DISCUSSÕES DO FILTRO DE PARTÍCULAS.....	90
6.1 FILTRO COM AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTANCIA SEQUENCIAL (SIR).....	90
6.2 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 1.....	98
6.3 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 2.....	113
6.4 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 3.....	125
6.5 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 4.....	136
6.6 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 5.....	147
7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	170
REFERÊNCIAS.....	182
APENDICE A: SOLUÇÃO VIA TRANSFORMADA DE LAPLACE: DETALHES DE TERMOS.....	174
APENDICE B: CÁLCULO DOS MOMENTOS PARA OS CASOS-TESTES ANALISADOS.....	184

APENDICE C: ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES PARA OS CASOS-TESTES ANALISADOS.....	190
APENDICE D: SOLUÇÃO DE UMA EDO EM TERMOS DE UMA EQUAÇÃO DE BERNOULLI.....	192
APENDICE E: CONVERSÃO DA EDP EM FUNÇÃO DO VOLUME PARA DIÂMETRO (D) E COMPRIMENTO (L) DA PARTÍCULA.....	197
APENDICE F: SOLUÇÃO DE UMA EDO EM TERMOS DE UMA EQUAÇÃO DE RICCATI.....	198

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1</b>	Termos do balanço populacional. Fonte: IPT (2007).....	6
<b>Figura 2.2</b>	Termos no balanço populacional. Fonte: IPT (2007).....	6
<b>Figura 2.3</b>	Relação da função densidade de distribuição de tamanho com volume da partícula. Fonte: IPT (2007).....	8
<b>Figura 2.4</b>	Nucleação, condensação e coagulação de aerossol. Fonte: JONAS (2002).....	9
<b>Figura 2.5</b>	Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração. Fonte: ILIEVSKI (1991)	13
<b>Figura 2.6</b>	Filtro Bayesiano. Fonte: KAPIO e SOMERSALO (2004).....	28
<b>Figura 2.7</b>	Ilustração esquemática para o filtro de Kalman atualizado com preditor-corretor. Fonte: CHEN (2003).....	29
<b>Figura 4.1</b>	Comparação da densidade de população obtida no presente trabalho com os publicados por RAMABHADHAN <i>et. al</i> (1976) para $\Lambda = 0,1$ .....	62
<b>Figura 4.2</b>	Comparação da densidade de população obtida no presente trabalho com os publicados por RAMABHADHAN <i>et. al</i> (1976) para $\Lambda = 1,0$ .....	62
<b>Figura 4.3</b>	Comparação da densidade de população obtida no presente trabalho com os publicados por RAMABHADHAN <i>et. al</i> (1976) para $\Lambda = 10,0$ .....	63
<b>Figura 4.4</b>	Comparação da densidade de população obtida no presente trabalho com os publicados por RAMABHADHAN <i>et. al</i> (1976) para $\Lambda = 0,1$ .....	64
<b>Figura 4.5</b>	Comparação da densidade de população obtida no presente trabalho com os publicados por RAMABHADHAN <i>et. al</i> (1976) para $\Lambda = 1,0$ .....	65
<b>Figura 4.6</b>	Comparação da densidade de população obtida no presente trabalho com os publicados por RAMABHADHAN <i>et. al</i> (1976) para $\Lambda = 10,0$ .....	65
<b>Figura 4.7</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	67

<b>Figura 4.8</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	68
<b>Figura 4.9</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	68
<b>Figura 4.10</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	69
<b>Figura 4.11</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	70
<b>Figura 4.12</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	71
<b>Figura 4.13</b>	Comparação da distribuição de densidade de população gerada no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).....	72
<b>Figura 4.14</b>	Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON <i>et. al</i> (1978).....	74
<b>Figura 4.15</b>	Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON <i>et. al</i> (1978).....	75
<b>Figura 4.16</b>	Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON <i>et. al</i> (1978).....	75
<b>Figura 4.17</b>	Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON <i>et. al</i> (1978).....	76
<b>Figura 4.18</b>	Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON <i>et. al</i> (1978).....	77

<b>Figura 4.19</b>	Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON <i>et. al</i> (1978).....	77
<b>Figura 5.1</b>	Reamostragem. Fonte: CHEN (2002).....	86
<b>Figura 5.2</b>	Algoritmo do filtro de Partícula SIR. Fonte: SILVA (2010).....	88
<b>Figura 6.1</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,01 – 0,01) e $\tau = 0,25$ .....	92
<b>Figura 6.2</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	92
<b>Figura 6.3</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,01) e $\tau = 0,25$ .....	93
<b>Figura 6.4</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	93
<b>Figura 6.5</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,01 – 0,01) e $\tau = 1,0$ .....	94
<b>Figura 6.6</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	94
<b>Figura 6.7</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,05 – 0,01) e $\tau = 1,0$ .....	95
<b>Figura 6.8</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,05 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	95
<b>Figura 6.9</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,01 – 0,01) e $\tau = 2,0$ .....	96
<b>Figura 6.10</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	96
<b>Figura 6.11</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,01) e $\tau = 2,0$ .....	97
<b>Figura 6.12</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	97
<b>Figura 6.13</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso-teste 1 e $\tau = 0,25$ .....	99
<b>Figura 6.14</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso-teste 1 e $\tau = 0,25$ .....	99

<b>Figura 6.15</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ .....	100
<b>Figura 6.16</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ .....	100
<b>Figura 6.17</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ .....	101
<b>Figura 6.18</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ .....	102
<b>Figura 6.19</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ .....	102
<b>Figura 6.20</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ .....	103
<b>Figura 6.21</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 1 e $\tau = 2,0$ .....	104
<b>Figura 6.22</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 2,0$ .....	104
<b>Figura 6.23</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 1 e $\tau = 2,0$ .....	105
<b>Figura 6.24</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 2,0$ .....	105
<b>Figura 6.25</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 10,0$ .....	106
<b>Figura 6.26</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 20,0$ .....	107
<b>Figura 6.27</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	108
<b>Figura 6.28</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	108
<b>Figura 6.29</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	109
<b>Figura 6.30</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 10,0$ .....	109

<b>Figura 6.31</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma (0,01 - 0,05)$ e $\tau = 20,0$ .....	110
<b>Figura 6.32</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma (0,01 - 0,05)$ e $\tau = 0,25$ .....	111
<b>Figura 6.33</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma (0,01 - 0,05)$ e $\tau = 1,0$ .....	111
<b>Figura 6.34</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma (0,01 - 0,05)$ e $\tau = 2,0$ .....	112
<b>Figura 6.35</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma (0,01 - 0,05)$ e $\tau = 10,0$ .....	112
<b>Figura 6.36</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma (0,01 - 0,05)$ e $\tau = 20,0$ .....	113
<b>Figura 6.37</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,01 - 0,01)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 0,25$ .....	114
<b>Figura 6.38</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,01 - 0,05)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 0,25$ .....	115
<b>Figura 6.39</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,05 - 0,01)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 0,25$ .....	115
<b>Figura 6.40</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,05 - 0,05)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 0,25$ .....	116
<b>Figura 6.41</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,01 - 0,01)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 1,0$ .....	117
<b>Figura 6.42</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,01 - 0,05)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 1,0$ .....	117
<b>Figura 6.43</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,05 - 0,01)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 1,0$ .....	118
<b>Figura 6.44</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,05 - 0,05)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 1,0$ .....	118
<b>Figura 6.45</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,01 - 0,01)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ .....	119
<b>Figura 6.46</b>	Comparação das medidas com $\sigma (0,01 - 0,05)$ , para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ .....	120

<b>Figura 6.47</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 2 e $\tau = 2,0$ .....	120
<b>Figura 6.48</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 2,0$ .....	121
<b>Figura 6.49</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	122
<b>Figura 6.50</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	122
<b>Figura 6.51</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	123
<b>Figura 6.52</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	123
<b>Figura 6.53</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	124
<b>Figura 6.54</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	124
<b>Figura 6.55</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ .....	125
<b>Figura 6.56</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ .....	126
<b>Figura 6.57</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ .....	126
<b>Figura 6.58</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ .....	127
<b>Figura 6.59</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ .....	128
<b>Figura 6.60</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ .....	128
<b>Figura 6.61</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ .....	129
<b>Figura 6.62</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ .....	129

<b>Figura 6.63</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso-teste 3 e $\tau = 2,0$ .....	130
<b>Figura 6.64</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso-teste 3 e $\tau = 2,0$ .....	131
<b>Figura 6.65</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso-teste 3 e $\tau = 2,0$ .....	131
<b>Figura 6.66</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e $\tau = 2,0$ .....	132
<b>Figura 6.67</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	133
<b>Figura 6.68</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	133
<b>Figura 6.69</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	134
<b>Figura 6.70</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	134
<b>Figura 6.71</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	135
<b>Figura 6.72</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	135
<b>Figura 6.73</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso-teste 4 e $\tau = 0,25$ .....	136
<b>Figura 6.74</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso-teste 4 e $\tau = 0,25$ .....	137
<b>Figura 6.75</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso-teste 4 e $\tau = 0,25$ .....	137
<b>Figura 6.76</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso-teste 4 e $\tau = 0,25$ .....	138
<b>Figura 6.77</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso-teste 4 e $\tau = 1,0$ .....	139
<b>Figura 6.78</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso-teste 4 e $\tau = 1,0$ .....	139

<b>Figura 6.79</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ .....	140
<b>Figura 6.80</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ .....	140
<b>Figura 6.81</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ .....	141
<b>Figura 6.82</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ .....	142
<b>Figura 6.83</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ .....	142
<b>Figura 6.84</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ .....	143
<b>Figura 6.85</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	144
<b>Figura 6.86</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	144
<b>Figura 6.87</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	145
<b>Figura 6.88</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	145
<b>Figura 6.89</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	146
<b>Figura 6.90</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	146
<b>Figura 6.91</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 5 e $\tau = 0,25$ .....	147
<b>Figura 6.92</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso- teste 5 e $\tau = 0,25$ .....	148
<b>Figura 6.93</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso- teste 5 e $\tau = 0,25$ .....	148
<b>Figura 6.94</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso- teste 5 e $\tau = 0,25$ .....	149

<b>Figura 6.95</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso-teste 5 e $\tau = 1,0$ .....	150
<b>Figura 6.96</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso-teste 5 e $\tau = 1,0$ .....	150
<b>Figura 6.97</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso-teste 5 e $\tau = 1,0$ .....	151
<b>Figura 6.98</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso-teste 5 e $\tau = 1,0$ .....	151
<b>Figura 6.99</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,01), para o caso-teste 5 e $\tau = 2,0$ .....	152
<b>Figura 6.100</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,01 – 0,05), para o caso-teste 5 e $\tau = 2,0$ .....	152
<b>Figura 6.101</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,01), para o caso-teste 5 e $\tau = 2,0$ .....	153
<b>Figura 6.102</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso-teste 5 e $\tau = 2,0$ .....	153
<b>Figura 6.103</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	154
<b>Figura 6.104</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	155
<b>Figura 6.105</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	155
<b>Figura 6.106</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	156
<b>Figura 6.107</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	156
<b>Figura 6.108</b>	Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para $\sigma$ (0,01 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	157

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 4.1</b>	Coeficientes e taxas usados nos dois casos-testes.....	61
<b>Tabela 4.2</b>	Coeficientes e taxas usados nos cinco casos-testes.....	66
<b>Tabela 4.3</b>	Coeficientes e taxas usados nos dois casos-testes.....	73
<b>Tabela 6.1</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 0,25$ .....	91
<b>Tabela 6.2</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 1,0$ .....	91
<b>Tabela 6.3</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ .....	91

## NOMENCLATURA

$C_{exato,i,j}$	Valor medido,
$C_{estimado,i,j}$	Valor estimado,
$D$	Diâmetro da partícula, $\mu m$ ,
$k_0$	Número mínimo de monômeros em um núcleo estável,
$k-mer$	Número de monômeros,
$L_i(x_{i+1} x_i)$	Núcleo anterior
$M_0(t)$	Número total de partículas por unidade de volume do fluido, $cm^{-3}$
$M_1(t)$	Volume total de partículas por unidade de volume do fluido, $\mu m^3 / cm^3$
$N$	Número de partículas
$N_p$	Número de partículas
$N_s$	Número de células
$N_t$	Número de termos
$N_0$	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, $\mu m^{-3} cm^{-3}$
$P(x_0)$	Distribuição inicial da variável de estado
$P(x_t x_{t-1})$	Equação de transição da variável de estado
$P(y_t x_t)$	Distribuição marginal da variável de observação
$S_0$	Taxa de nucleação $cm^3 / s$
$v$	Volume da partícula $cm^3$
$v_0$	Volume da partícula no tempo zero $cm^3$
$\tilde{v}$	Volume da partícula $cm^3$
$v^*$	Volume da partícula sobre o qual a nucleação ocorre $cm^3$
$w(x_{0:t})$	Peso de importância
$w(x_t^{*(i)})$	Peso de importância nomalizados

## LETRAS GREGAS

$\alpha_0$	Taxa de variação de volume da partícula de tamanho $v$ , $\mu m^3 / s$
$\alpha_1$	Coefficiente de difusão para o espectro do aerossol, $\mu m^6 / s$
$\beta_0$	Coefficiente de coagulação constante, $cm^3 / s$

$\beta(v + \tilde{v})$	Coeficiente de coagulação variável, $cm^3 / s$
$\Delta$	Parâmetro adimensional de velocidade
$\delta(x_{0,k} - x'_{0,k})$	Delta de Dirac das medidas
$\theta$	Relação entre a taxa de remoção de partículas e a taxa de coagulação
$\Lambda$	Relação entre a taxa de condensação de partículas e a taxa de coagulação
$\pi(x_{0:t}   y_{1:t})$	Distribuição por importância
$\sigma$	Desvio Padrão
$\sigma_0$	Condensação constante para crescimento uniforme, $\mu m^3 / s$
$\sigma_1$	Condensação constante para crescimento linear, $s^{-1}$
$\sigma_{medidas}$	Desvio padrão do valor medido
$\sigma_{modelo}$	Desvio padrão do valor simulado
$\sigma_{med}$	Desvio padrão do valor medido
$\sigma_{mod}$	Desvio padrão do valor simulado
$\tau$	Tempo adimensional
$\Omega$	Relação entre a taxa de nucleação de partículas e a taxa de coagulação.

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

O presente capítulo estabelece as motivações e os principais objetivos ligados ao estudo de sistemas particulados, pela aplicação da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica e filtro Bayesiano (com amostragem por importância e reamostragem sequencial) na solução das equações de balanço populacional associadas ao problema físico de formação de aerossóis.

### 1.1 - MOTIVAÇÃO

O comportamento dinâmico de uma população de pequenas partículas é um assunto de interesse nos campos da física atmosférica, cristalização e da química coloidal. Em todos esses sistemas, as partículas crescem por colisões e coalescência com outras partículas (coagulação) e com crescimento de material no meio contendo partículas (RAMABHADRAN *et al.*, 1976). A descrição matemática do sistema onde a nucleação, crescimento e agregação ocorrem é referido como balanço populacional (BP). O BP muitas vezes toma a forma de uma equação íntegro-diferencial parcial hiperbólica não-linear e raramente tratável analiticamente (LITSTER *et al.*, 1995).

Precipitação e cristalização são problemas amplamente estudados na engenharia química moderna, onde vários fenômenos estão envolvidos, como a mistura em várias escalas, nucleação, crescimento de cristais, agregação e ruptura (MARCHISIO *et al.*, 2003). A influência da mistura sobre este tipo de processo tem sido estudada há mais de duas décadas, levando a resultados diferentes e por vezes contraditórios (BALDYGA *et al.*, 1995; BARRESI *et al.*, 1999).

Particularmente, para aerossóis atmosféricos, os fenômenos mais importantes são a coagulação e a condensação heterogênea. Por causa da forte dependência das propriedades de aerossóis como dispersão da luz sobre tamanho de partícula, é desejável entender com mais detalhes como a distribuição de tamanho evolui sob a influência desses dois processos. A distribuição de tamanho de um aerossol é descrito por sua função densidade de distribuição de tamanho, que é regida por uma equação geral de balanço populacional. Para simulações da dinâmica atmosférica de aerossóis, incluindo

o transporte turbulento e dispersão, a solução numérica da equação de PB pode ser necessária. No entanto, soluções analíticas para alguns casos-limites de aerossol espacialmente homogêneo podem ser valiosos para a compreensão da estrutura qualitativa em situações mais complexas (RAMABHADRAN *et al.*, 1976; PETERSON *et al.*, 1978; GELBARD e SEINFELD, 1978).

Como o processo é complicado pela interação dos mecanismos envolvidos, é difícil e, muitas vezes impossível, propor normas de *scale-up* e de projetos a partir de dados experimentais. Assim, uma abordagem de modelagem fornece uma ferramenta útil para a interpretação de dados experimentais. O modelo tem de ser tão preciso e completo quanto possível no que diz respeito aos dois fenômenos principais envolvidos: a mistura e evolução de sólidos (MARCHISIO *et al.*, 2003).

## 1.2 - OBJETIVOS

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é obter solução através da transformada de Laplace com inversão numérica e do filtro Bayesiano com amostragem e reamostragem por importância sequencial (SIR), para a equação geral que rege a função densidade de distribuição de tamanho de aerossóis e particulados. A solução deve ser útil para estimar o comportamento dinâmico de um sistema de partículas onde estará ocorrendo coagulação e condensação. Além disso, soluções analíticas para as situações anteriormente tratadas na literatura serão obtidas a fim de permitir uma comparação crítica da metodologia de solução atual.

## 1.3 - CONTRIBUIÇÕES DA TESE

Partículas precipitadas, normalmente são pequenos e discretos cristais, juntamente com aglomerados, cada um com diferentes tamanhos. A distribuição de tamanho de partícula (PSD, do inglês *Particle Size Distribution*) é frequentemente um importante indicador da qualidade para uma ampla faixa de produtos industriais, incluindo corantes, química fina e fármacos (FALOPE *et al.*, 2001).

A presente tese oferece uma alternativa para a solução de equação de balanço populacional (PBE) com taxa de crescimento, remoção e nucleação fazendo-se uso da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica e do filtro de partículas com amostragem e Reamostragem por Importância Sequencial (SIR). O filtro SIR é usado no

presente trabalho para estimar a função densidade de tamanho das partículas inerentes ao processo de sistema particulado.

#### **1.4 - SÍNTESE DO TRABALHO**

O capítulo introdutório procura situar motivações, objetivos e as contribuições do presente trabalho. É feito também um comentário sobre a importância do comportamento dinâmico de uma população de pequenas partículas, o qual é um assunto de interesse nos campos da física atmosférica, de cristalização e da química coloidal.

O Capítulo 2 é devotado a uma revisão das principais contribuições na literatura que abordaram o caso de sistemas particulados, coagulação e condensação de aerossol, envolvendo a taxa de crescimento, nascimento e morte, remoção e nucleação. É também dada atenção à técnica da transformada de Laplace, ao método das características, bem como à técnica da transformada de Laplace com inversão numérica na solução das equações de balanço populacional associadas ao problema físico abordado.

O Capítulo 3 apresenta a formulação matemática do problema para sistemas particulados e a dinâmica da coagulação e condensação de aerossol, com as respectivas soluções utilizando-se a metodologia da transformada de Laplace com inversão numérica, visando à obtenção computacional dos resultados dos problemas estudados.

A discussão dos resultados obtidos pela técnica da transformada de Laplace é mostrada no Capítulo 4, ilustrando-se os resultados numéricos e analíticos encontrados, e comparando-os aos resultados disponíveis na literatura.

O Capítulo 5 apresenta uma revisão de problemas inversos e filtros Bayesianos com ênfase nos filtros de partículas. Os filtros de partículas são técnicas estocásticas usadas para estimar o comportamento de um fenômeno ao longo de uma trajetória utilizando dados de medidas reais e pontuais.

A discussão dos resultados obtidos pela técnica de filtro SIR é mostrada no Capítulo 6, ilustrando-se os resultados encontrados, e comparando-os aos resultados disponíveis na literatura.

Finalmente, o Capítulo 7 apresenta as conclusões referentes à presente tese, bem como sugestões de sua continuação em etapas futuras.

## CAPÍTULO 2

### ESTADO DA ARTE E REVISÃO DA LITERATURA

#### 2.1 - EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL

Durante o último século, as equações de balanço populacional (PBEs, da sigla em inglês, *Population Balance Equations*) têm se estabelecido como uma forma rigorosa de descrever uma variedade de sistemas particulados, tais como populações de células, grande números de gotas ou bolhas, sólidos granulares, cristais, polímeros e coagulantes de aerossóis, e até mesmo sistemas astrofísicos. 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.

Segundo RIGOPOULUS e JONES (2003) a PBE teve origem no trabalho de SMOLUCHOWSKI (1917), cuja equação discreta para agregação pura desenvolveu-se por seu estudo para o movimento browniano. A equação foi mais tarde lançada de forma contínua e ampliada para incluir o processo de quebra de partículas.

Assim, na década de 1960, HULBURT e KATZ (1964) e RANDOLPH (1969) formularam a PBE para os fenômenos de nucleação e crescimento. As etapas seguintes, como o levantamento exaustivo de DRAKE (1972), a análise de RAMKRISHNA e BORWANKER (1973) e a revisão de RAMKRISHNA (1985) fizeram muito para a racionalização da PBE e estabeleceram-na como um método popular para a análise de sistemas particulados.

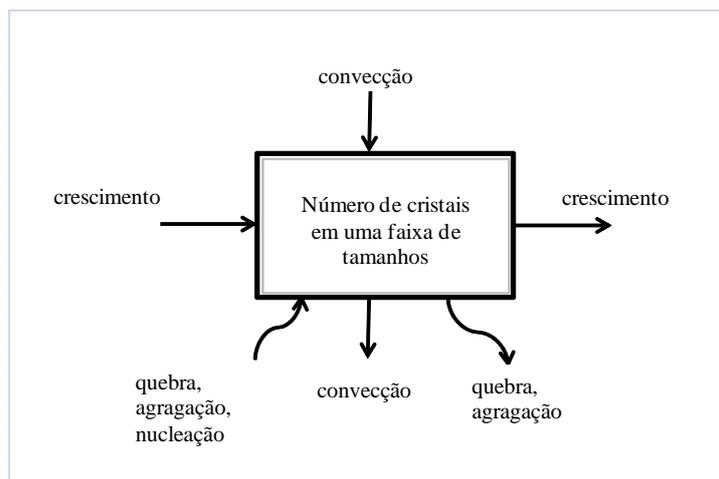
Na sua forma mais geral a PBE contínua, como mostra a Eq.(2.1) é uma equação de transporte dinâmico que descreve a evolução temporal da densidade populacional, como resultado de quatro mecanismos particulados: nucleação, crescimento, agregação e ruptura, bem como o transporte devido ao fluxo convectivo.

$$\frac{\partial n(x_i, t)}{\partial t} = -\frac{\partial [u_i n(x_i, t)]}{\partial x_i} + D \frac{\partial^2 n(x_i, t)}{\partial x_i^2} + B_{nuc} + B_{agg} - D_{agg} + B_{br} - D_{br} \quad (2.1)$$

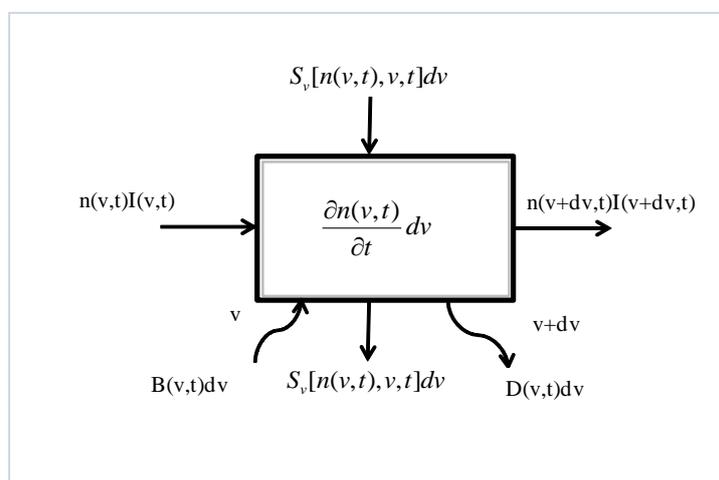
O primeiro termo do lado direito da Eq. (2.1) representa a taxa de crescimento, o segundo termo o transporte devido ao fluxo convectivo, o terceiro termo a taxa de nucleação, o quarto termo a taxa de agregação e o quinto termo a taxa de ruptura. Escrita assim, a PBE se refere a um espaço de estado composto de tempo, espaço físico, e um número adicional de dimensões que representam as propriedades características das partículas cuja distribuição se deseja calcular (muitas vezes referida como coordenadas internas). O termo gradiente (notação indicial usada, de forma que índices repetidos implicam em somatório) na Eq. (2.1), representa um crescimento (diferenciação no domínio do tamanho de partículas), ou qualquer outro mecanismo que opere sobre a densidade populacional de uma forma convectiva, bem como a entrada ou saída devido ao fluxo convectivo. Da mesma forma o termo da difusão pode representar tanto a difusão no espaço físico e difusão efetiva da densidade populacional, embora esta última normalmente não tenha nenhuma interpretação física (RIGOPOULOS *et al.*, 2003).

O número de partículas dentro das classes e tamanho é importante também para os processos industriais secundários, como separação sólido-líquido e secagem. A modelagem da geração de distribuições de tamanho de partículas para a operação da unidade de cristalização tem sido um desafio dentro desta área de tecnologia de partículas por algumas décadas (FALOPE *et al.*, 2001).

A maioria dos modelos foi desenvolvida utilizando-se um balanço de número de cristais, mais comumente conhecidos como balanço populacional, que considera a forma de uma equação íntegro-diferencial. Inicialmente, o desenvolvimento desses modelos levou somente em conta o nascimento de partículas, nucleação e crescimento de cristal. Posteriormente, os processos secundários como a agregação e quebra de cristais no sistema foram também incluídos (RANDOLPH, 1969; RANDOLPH e LARSON, 1988). Nas Figuras 2.1 e 2.2, é apresentado o modelo conceitual para a função densidade de distribuição de tamanho.



**Figura 2.1** – Termos do balanço populacional. Fonte: IPT (2007).



**Figura 2.2** – Termos no balanço populacional. Fonte: IPT (2007).

Em sistemas de fases dispersas o domínio material consiste de uma fase contínua e de uma fase dispersa. Esta última pode ser considerada como uma população de partículas, o que talvez se destaque pela propriedade de coordenadas. O conceito geral de equações de balanço populacional para modelos de sistemas de fases dispersas foi introduzido pela primeira vez na engenharia química por HULBURT e KATZ (1964) e uma revisão foi fornecida por RAMKRISHNA (1985).

A modelagem matemática de processos sólidos por meio de balanços populacionais é um campo de grande importância, mas as aplicações desse conceito também foram feitas na modelagem de processos de sistemas biológicos (FREDRICKSON *et al.*, 1967) e em outras áreas. Embora partículas individuais talvez se destaquem por mais de uma propriedade de coordenadas, em engenharia química

quase todas as publicações são limitadas a um problema unidimensional (WULKOW *et al.*, 2001).

Um sistema particulado quimicamente homogêneo e seu estado espacial é descrito pela sua função densidade de distribuição de tamanho  $n(v,t)$ , onde  $n(v,t)dv$  é o número de partículas por unidade de volume de fluido tendo volumes no intervalo entre  $v$  e  $v+dv$ . A dinâmica de tal sistema, no qual as partículas individuais podem crescer através de adesão de material da fase fluida (ou encolher pela perda de material) e no qual as partículas podem colidir e coagular é descrita pela equação do balanço geral de partículas (GELBARD e SEINFELD, 1978)

$$\frac{\partial n_v(v,t)}{\partial t} = \frac{\partial [I_v(v,t)n_v(v,t)]}{\partial v} + \int_0^{v/2} \beta_v(v-\tilde{v},\tilde{v})n_v(v-\tilde{v},t)n_v(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n_v(v,t) \int_0^\infty \beta_v(v,\tilde{v})n_v(\tilde{v},t)d\tilde{v} + S_v[n_v(v,t),v,t] \quad (2.2)$$

onde,  $I_v(v,t)=dv/dt$ , é a taxa de mudança de volume  $v$  pela transferência de material entre partículas e fase fluida,  $\beta_v(v,\tilde{v})$  é o coeficiente de coagulação da partícula para volumes  $v$  e  $\tilde{v}$ , e  $S_v$  é a taxa líquida de adição de partículas novas no sistema. As condições inicial e de contorno requeridas para a Eq. (2.2) são geralmente dadas como:

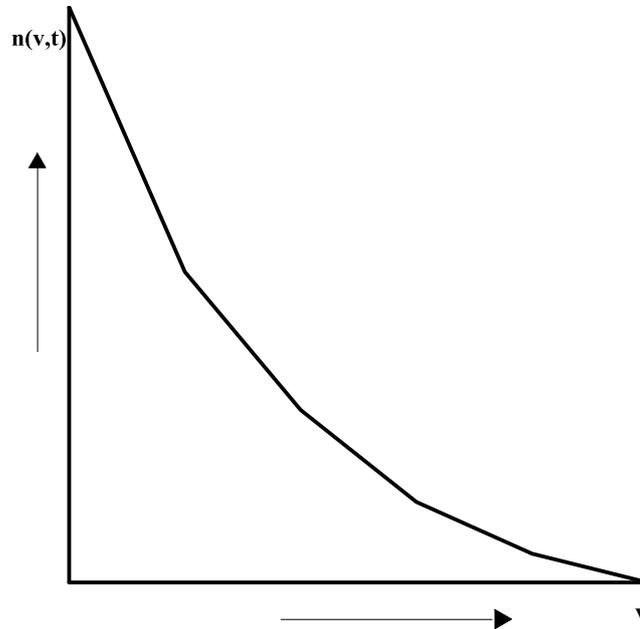
$$n_v(v,0) = n_{v_0}(v) \quad (2.3)$$

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

O primeiro termo do lado direito da Eq. (2.2) representa a taxa de crescimento da partícula pela transferência de material para a partícula individual. O segundo termo representa a taxa de acúmulo de partículas numa escala de tamanho  $(v,v+dv)$  pela colisão de duas partículas para volumes  $(v-\tilde{v})$  e  $(\tilde{v})$  para formar partículas de volume  $(v)$  (assumindo conservação de volume durante a coagulação). O terceiro termo representa a taxa de perda de partícula na escala de tamanho  $(v,v+dv)$  pela colisão com todas as outras partículas. O último termo representa todas as fontes e sumidouros de partículas. A Eq. (2.2) surge em uma grande variedade de contextos físicos, tais como química coloidal, dinâmica atmosférica de aerossóis, cinética de cristalização e dinâmica de populações biológicas (GELBARD e SEINFELD, 1978).

Na Figura 2.3, observa-se a relação entre a função densidade de distribuição de tamanho e o aumento do volume da partícula. Observa-se graficamente, onde o volume

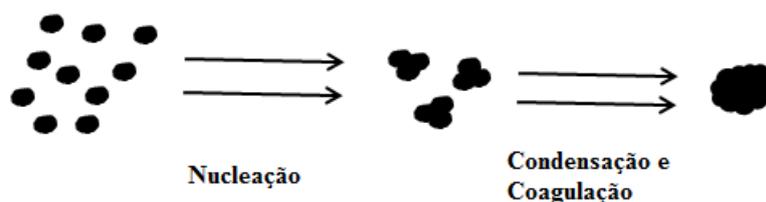
de partículas é menor a função densidade de partículas é maior e devido as colisões entre as partículas o volume cresce, logo a função densidade de distribuição de tamanho diminui devido a perda de partículas para o corpo que esta aumentando de volume.



**Figura 2.3** – Relação função densidade de distribuição de tamanho com volume da partícula. Fonte: IPT (2007).

## 2.2 - APLICAÇÕES EM AERROSSÓIS

O conceito de aerossóis é geralmente aplicado a uma suspensão de partículas finas em um ambiente fluido, que normalmente é produzido devido à dispersão de material contaminante. As partículas são transportadas pelo fluido, geralmente um gás, e ao mesmo tempo elas podem se mover em relação ao gás. O sistema de evolução de partículas é regido por diferentes processos físico-químicos tais como coagulação, sedimentação, difusão, convecção, crescimento, deposição entre outros (ELGARAYHI, 2003), como mostra a Figura 2.1.



**Figura 2.4** - Nucleação, condensação e coagulação de aerossol. Fonte: JONAS (2002).

Soluções analíticas são obtidas para a equação da dinâmica geral que rege a função densidade de distribuição de tamanho de um aerossol em crescimento simultâneo pela coagulação e condensação heterogênea. As soluções esclarecem as influências simultâneas de coagulação e condensação evoluindo com a distribuição do tamanho de um aerossol. Devido à complexidade da coagulação real e da cinética da condensação, é necessário considerar formas funcionais simples para esses processos e assim permitir a investigação analítica dessa dinâmica. Neste contexto, considera-se coagulação constante independente do volume de partículas e dependente da soma dos volumes das partículas, e as taxas de condensação independente do volume de partículas e linearmente dependente do volume de partículas. Um grupo adimensional  $\Lambda$  que representa uma taxa do tempo característico para a condensação e coagulação é introduzido. Quando  $\Lambda \ll 1$ , por exemplo, a coagulação ocorre muito mais rapidamente do que a condensação, e distribuições do tamanho tendem a apresentar a característica da ampliação da coagulação. A taxa de coagulação linear introduz uma acentuada ampliação na distribuição de tamanho em relação a uma taxa de coagulação constante para um mesmo valor de  $\Lambda$  (RAMABHADRAN *et al.*, 1976).

A evolução da distribuição de tamanho de um aerossol dependerá da importância relativa dos vários mecanismos de crescimento presentes.

A descrição da dinâmica da distribuição de tamanho de um aerossol resultante da coagulação e condensação envolve uma equação íntegro-diferencial parcial de equilíbrio de população, que geralmente é resolvida numericamente. Soluções analíticas da equação do balanço de aerossóis estão disponíveis para determinados casos especiais de coagulação (SCOTT, 1968) e condensação pura (BROCK, 1972). As soluções não foram obtidas para o caso em que a coagulação e condensação ocorrem simultaneamente, mas esta é geralmente uma situação importante (RAMABHADRAN *et al.*, 1976).

Um aerossol espacialmente homogêneo de composição química uniforme pode ser caracterizado pelo número de densidades de partículas de diversos tamanhos como uma função do tempo. Define-se  $n_k(t)$  como o número de densidade de partículas ( $cm^{-3}$ ) contendo  $k$  monômeros, onde um monômero (partícula < nm) pode ser considerado como uma única molécula da espécie que compreende a partícula. Os processos básicos que influenciam  $n_k(t)$  são a coagulação e a evaporação (o desaparecimento de uma molécula simples através do número de monômeros). Especificamente, se despreza os

processos em que  $k$ -mer dissocia espontaneamente em duas partículas de tamanhos  $\tilde{k}$  e  $k-\tilde{k}$ , se  $\tilde{k} > 1$  (nucleação homogênea, o processo pelo qual partículas estáveis são formadas está incluído na definição de coagulação).

A equação dinâmica que governa a função densidade do tamanho de partículas,  $k \geq 2$ , pode ser escrita como:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k-1} \beta_{j,k-j} n_j n_{k-j} - \sum_{j=1}^{k-1} \beta_{k,j} n_k n_j - q_k n_k + q_{k+1} n_{k+1} \quad (2.5)$$

Os dois primeiros termos do lado direito da Eq. (2.5) expressam a taxa de mudança para  $n_k$  como resultado do processo de colisão (coagulação), e os dois últimos termos descrevem a contribuição devido à evaporação de monômeros.

A Eq. (2.5) é uma rigorosa representação da cinética de um sistema de partículas submetidas à coalescência e à evaporação simultaneamente. É conveniente, no entanto, representar o processo de crescimento do monômero por outras partículas, de forma análoga à de evaporação. Assim, define-se  $p_k n_k$ , como a taxa de ganho de  $(k+1)$ -mers devida à colisão de um  $k$ -mer com um monômero, onde  $p_k$  ( $s^{-1}$ ) é a frequência com que um monômero colide com um  $k$ -mer. Este é o processo que geralmente se refere à condensação heterogênea. Com essa modificação, a Eq. (2.5) torna-se

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k-1} \beta_{j,k-j} n_j n_{k-j} - \sum_{j=1}^{k-1} \beta_{k,j} n_k n_j + p_{k-1} n_{k-1} - (p_k + q_k) n_k + q_{k+1} n_{k+1} \quad (2.6)$$

onde,  $p_k = \beta_{1,k} n_1$ .

Nesta formulação, assume-se que a menor partícula é de tamanho  $k=2$ . Nenhuma distinção foi feita ainda entre os processos de coagulação, nucleação homogênea e condensação heterogênea. Na realidade, existe um número mínimo de monômeros em um núcleo estável, chamado de  $k_0$ , e geralmente  $k_0=2$ . Na presença de vapor supersaturado, *clusters* estáveis, em tamanho  $k_0$ , irão formar-se continuamente a uma taxa explicada pela teoria clássica da nucleação homogênea. A taxa de formação de agregados estáveis contendo  $k_0$  monômeros na nucleação homogênea é  $r_0(t)$ . Logo, a coagulação e a condensação heterogênea de vapores sobre partículas de tamanho  $k \geq k_0$ ,

tornam-se processos distintos na Eq. (2.6). Alterando o menor tamanho de partícula estável de 2 para  $k_0$ , torna-se

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k-1} \beta_{j,k-j} n_j n_{k-j} - \sum_{j=1}^{k-1} \beta_{k,j} n_k n_j + p_{k-1} n_{k-1} - (p_k + q_k) n_k + q_{k+1} n_{k+1} + r_0(t) \delta_{k_0}, \quad (2.7)$$

$k = k_0, k_0 + 1, \dots$

A Eq. (2.7) é ainda uma representação rigorosa do sistema, e é impraticável se trabalhar com equações discretas por causa da enorme faixa de  $k$ . Assim, é habitual substituir o número densidade discreta  $n_k(t)$  ( $cm^{-3}$ ) pela função densidade de distribuição de tamanho contínuo  $n(v,t)$  ( $\mu m^{-3} cm^{-3}$ ), onde  $v = k\Delta v$ , sendo o volume associado a um monômero. Assim,  $n(v,t)dv$  é definido como o número de partículas por centímetro cúbico de volumes na faixa de  $v$  a  $v+dv$ . Fazendo-se,  $v_0 = k_0\Delta v$ , então a Eq. (2.7), no limite de uma distribuição de tamanhos contínuos, torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_{v_0}^{v-v_0} \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \int_{v_0}^{\infty} \beta(v, \tilde{v}) n(v, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \\ & - \frac{\partial}{\partial v} [\alpha_0(v) n(v, t)] - \frac{\partial^2}{\partial v^2} [\alpha_1(v) n(v, t)] + r_0(t) \delta(v-v_0) \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde,

$$\alpha_0(v) = \Delta v (p_k - q_k) \quad (2.9)$$

$$\alpha_1(v) = \frac{\Delta v^2}{2} (p_k + q_k) \quad (2.10)$$

Na Eq. (2.8) assume-se que uma partícula estável tem um limite inferior de volume  $v_0$ . Do ponto de vista da solução da Eq. (2.8), é vantajoso substituir o limite inferior,  $v_0$ , das integrais de coagulação, por zero. Normalmente isso não causa nenhuma dificuldade, pois a distribuição inicial  $n(v,0) = n_0(v)$  pode ser especificada como zero para  $v < v_0$ , e nenhuma partícula de volume  $v < v_0$  pode ser produzida para  $t > 0$ . A nucleação homogênea fornece uma fonte constante de partículas de tamanho  $v_0$ , de acordo com a taxa definida por  $r_0(t)$ . Posteriormente despreza-se a nucleação

homogênea uma vez que a inclusão não é o foco central do trabalho e admitindo a difusão muito pequena a Eq. (2.8) torna-se (RAMABHADRAN *et al.*, 1976):

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(v, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \frac{\partial}{\partial v} [\alpha_0(v) n(v, t)] \quad (2.11)$$

$$n(v, 0) = n_0(v) \quad (2.12)$$

$$n(0, t) = 0 \quad (2.13)$$

O comportamento dinâmico da distribuição do tamanho de aerossóis é de fundamental interesse na química de coloides (gel, espuma, detergentes e etc.) e de ciências atmosféricas (neblina, fumaça, poeira e etc.). Para um aerossol espacialmente homogêneo submetido a crescimento e coagulação com partículas fontes e sumidouros, a função densidade de distribuição de tamanho  $n(v, t)$  é regida pela seguinte equação íntegro-diferencial:

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial v} [I(v,t)n(v,t)] = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(v, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - R(v,t) + S(v,t) \quad (2.14)$$

onde,  $I(v,t)=dv/dt$ , é a taxa de crescimento da partícula de volume  $v$ ,  $\beta(v, \tilde{v})$  é o coeficiente de coagulação para partículas de volume  $v$  e  $\tilde{v}$ ,  $R(v,t)$  é a taxa de remoção de partículas do sistema e  $S(v,t)$  é a taxa de adição de novas partículas no sistema (PETERSON *et al.*, 1978).

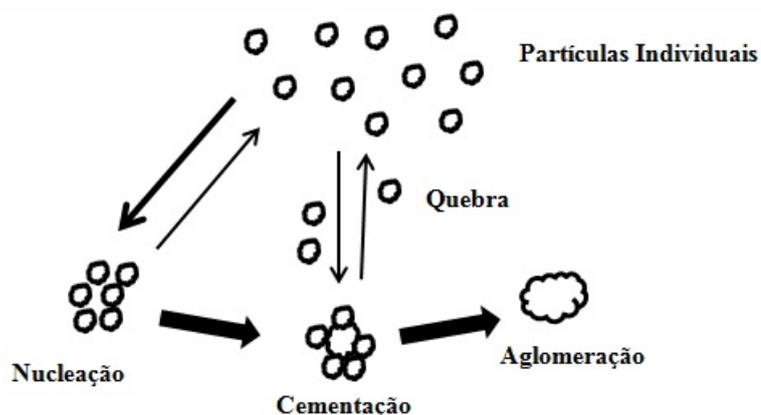
### 2.3 - APLICAÇÕES EM SISTEMAS PARTICULADOS

Uma propriedade importante de muitos processos particulados é a distribuição de tamanho de partículas (PSD) que controla os principais aspectos do processo e afeta as propriedades do produto final (ALEXOUPOULOS *et al.*, 2004). A distribuição do tamanho de cristal final (CSD), bem como a morfologia do cristal (PAGLIOLICO *et al.*, 1999; JUNG *et al.*, 2000) são fortemente influenciadas pelas concentrações locais e, em seguida, pela mistura se o processo é muito rápido. Além disso, a mistura também

desempenha um papel importante na determinação das interações das partículas (KRUTZER *et al.*, 1995; ZAUNER e JONES, 2000; SUNG *et al.*, 2000).

Muitos processos químicos, tais como catalisadores, pigmentos, preparação de produtos farmacêuticos, perfuração de poços de petróleo no mar, e tratamento de água, envolvem precipitação em uma ou mais etapas-chaves da operação global. A precipitação é um problema muito complexo, uma vez que é influenciada por vários fenômenos interagindo, e por isso tem atraído muita atenção de pesquisadores nessa linha de pesquisa.

A precipitação ocorre através de várias etapas, ou seja, nucleação, crescimento de cristais e, eventualmente agregação e quebra como mostra a Figura 2.2. Como o processo é rápido, com mistura em várias escalas, desempenha um importante papel na determinação da distribuição de tamanho do cristal final (CSD) e na morfologia dos cristais. Vários testes de reação de precipitação têm sido conduzidos para essa investigação, nos quais se utiliza o carbonato de cálcio, o sulfato de bário, o oxalato de cálcio e o oxalato de ítrio. Uma série de trabalhos foi publicada sobre este assunto tentando explicar os diferentes aspectos do processo (MARCHISIO *et al.*, 2002).



**Figura 2.5** - Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração. Fonte: ILIEVSKI (1991).

A precipitação com moderação de sais solúveis é um processo importante na produção de diversos materiais, tais como catalisadores, proteínas, produtos farmacêuticos, pigmentos e haleto de prata para a indústria fotográfica. A qualidade do produto final dos materiais obtidos por esta operação unitária é fortemente influenciada pela morfologia e pela distribuição do tamanho de cristais. O processo envolve três etapas distintas: a reação química, nucleação e crescimento. As duas primeiras etapas

são muito rápidas, o processo é definido "mistura sensível", no sentido de que a taxa não é controlada apenas pela cinética de precipitação, mas também pela mistura (MARCHISIO e BARRESI, 2001).

Agregação e quebra de partículas finas e ultrafinas em dispersões agitadas é um processo relevante em engenharia química. Tratamento de água, pós-processamento de polímeros, a dispersão dos minerais e a cristalização são algumas das inúmeras aplicações onde a agregação e a quebra de partículas desempenham um papel importante. Os produtos finais são na forma de uma população de agregados comumente descrita por uma distribuição de tamanho de partícula ou *cluster* (PSD) (MARCHISIO *et al.*, 2006a).

Populações de agregados podem ser caracterizadas por diversas técnicas experimentais, incluindo espalhamento de luz, espectroscopia de som, ou microscopia. Métodos de dispersão de luz são amplamente utilizados para caracterizar as dispersões diluídas e permitem obter propriedades médias da distribuição da massa de *cluster* (DMC), tais como o raio médio de rotação ou a massa ponderada à massa média, bem como informações sobre a estrutura dos agregados através do fator de estrutura (MARCHISIO *et al.*, 2006a).

Existem muitas aplicações de interesse industrial, tão diversas como a produção de nanopartículas de compostos orgânicos e produção de materiais cerâmicos nanoestruturados. Por exemplo, a produção de ativos de nanopartículas orgânicas com um revestimento de polímeros para aplicações farmacêuticas é cada vez mais importante. Estes processos são baseados na dissolução de uma substância orgânica e de um copolímero anfífilos do tipo dibloco (bloco hidrofílico e bloco hidrofóbico) em um solvente orgânico que, após a mistura rápida, com um anti-solvente miscível, por exemplo, água, precipita (JOHNSON e PRUD'HOMME, 2003; HORN, 2001).

Neste caso, a fase sólida é produzida por uma reação química e a mistura rápida é crucial para o controle do tamanho de grãos e das características de materiais sólidos (RIVALLIN *et al.*, 2005).

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 (DIRKSEN e RING, 1991). A nucleação é a formação da fase sólida e ocorre quando um número crítico de moléculas se juntam para formar um embrião. Embriões estáveis formam núcleos que crescem em partículas maiores através de um crescimento molecular. Os fenômenos de nucleação e

crescimento estão competindo, uma vez que ambos consomem as moléculas do soluto e, portanto, o tamanho das partículas é o resultado desta competição. Partículas muito pequenas são produzidas por taxas de nucleação alta, e partículas grandes são produzidas por baixas taxas de nucleação.

A agregação (ou aglomeração) e quebra são definidas como processos secundários, uma vez que são caracterizados por taxas mais lentas e, como consequência, ocorrem geralmente após a formação de partículas, além disso, eles não consomem as moléculas do soluto, deixando inalterada a massa de partículas totais. (MARCHISIO *et al.*, 2006b).

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 representado 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).

O modelo matemático de um sistema de partículas submetidas simultaneamente à nucleação, crescimento e aglomeração é uma equação íntegro-diferencial parcial não linear. Problemas são encontrados na solução dessa equação, resultante da forma hiperbólica combinada devido ao termo de crescimento e a não linearidade associada com a aglomeração. A busca de uma solução para essa equação consiste essencialmente em se procurar uma descrição de como as partículas são distribuídas por tamanho com o tempo. Na engenharia química, as populações de partículas formam uma categoria de sistemas que são referidos como processos em fase dispersa. Muitos processos de partículas, como cristalização da solução, polimerização em emulsão, o crescimento microbiano, os processos de aerossol e processos de granulação, são frequentemente descritos adequadamente por equações de equilíbrio da população (LIU e CAMERON, 2001).

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.

Modelos de balanço populacional são estruturas do sistema onde uma população discreta está distribuída sobre uma ou mais variáveis, incluindo as distribuições de tamanho de partícula em cristalização, precipitação, polimerização e estrutura interna de células biológicas. O resultado é geralmente 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).

O balanço populacional (PB), como descrito por RANDOLPH e LARSON (1988), é hoje amplamente utilizado como uma ferramenta matemática para modelar a distribuição de tamanho dos cristais (CSD) em sistemas de precipitação. As duas etapas na geração de um modelo de PB em um precipitador são a formulação da equação para o sistema a ser modelado, e a solução da equação resultante (LI *et al.*, 2000).

O estabelecimento de um modelo de PB em um sistema de precipitação é geralmente simples. Nas formulações matemáticas são estabelecidos os termos para descrever a aglomeração de cristais, o processo onde os cristais colidem e aderem para formar uma entidade maior, crescimento de cristais pela deposição de soluto da solução, e nucleação. No entanto, a resolução da equação de PB pode ser difícil, especialmente quando a aglomeração está presente. Soluções analíticas existem apenas para casos simples, por exemplo, onde qualquer aglomeração ou o crescimento é o único processo cinético envolvido no sistema. O desenvolvimento de métodos para resolver a equação de PB tem sido uma área de investigação ativa ao longo das últimas duas décadas. RAMKRISHNA (1985) reviu os métodos de solução de equações de PB atual, em meados da década de 1980. Desde então, uma série de técnicas numéricas tem sido relatada, tais como elementos finitos, colocação ortogonal, discretização e métodos de resíduos ponderados (LI, 2000).

A PBE dada pela Eq. (2.15) foi proposta por ILIEVSKI (2001) que representa a precipitação com supersaturação constante e núcleo de aglomeração da gibbsita (subproduto do processo Bayer em refinaria de alumina) independente do tamanho da partícula.

$$\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} + G \frac{\partial n(L,t)}{\partial L} = \frac{\beta L^2}{2} \int_0^L \frac{n[(L^3 - \lambda^3)^{1/3}, t] n(\lambda, t)}{(L^3 - \lambda^3)^{2/3}} d\lambda - \beta n(L,t) \int_0^\infty n(\lambda, t) d\lambda \quad (2.15)$$

onde,  $n$  é a função número de densidade cristalina,  $t$  é o tempo,  $G$  é a taxa de crescimento,  $\beta$  é o núcleo (coeficiente de aglomeração) independente do tamanho da aglomeração e  $L$  é o tamanho do cristal.

## 2.4 - METODOLOGIAS DE SOLUÇÕES PARA EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL

### 2.4.1 - Método das características

O método das características é um método que pode ser usado para resolver um problema de valor inicial (PVI) de uma equação diferencial parcial de primeira ordem. Considere a EDP de primeira ordem linear com duas variáveis independentes, juntamente com a condição inicial (SARRA, 2002):

$$a(x,t)u_x + b(x,t)u_t + c(x,t)u = 0 \quad (2.16.a)$$

$$u(x,0) = f(x) \quad (2.16.b)$$

O objetivo do método das características, quando aplicado a esta equação, é a mudança de coordenadas  $(x,t)$  para um novo sistema de coordenadas  $(x_0,s)$  em que a EDP se torna uma equação diferencial ordinária 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  $t=0$ ). Fazendo-se a seguinte consideração:

$$\frac{dx}{ds} = a(x,t) \quad (2.17)$$

$$\frac{dt}{ds} = b(x,t) \quad (2.18)$$

obtem-se,

$$\frac{du}{ds} = \frac{dx}{ds}u_x + \frac{dt}{ds}u_t = a(x,t)u_x + b(x,t)u_t \quad (2.19)$$

e, ao longo das curvas características, a EDP se torna uma EDO

$$\frac{du}{ds} + c(x,t)u = 0 \quad (2.20)$$

As Eqs. (2.17) e (2.18) são referenciadas como equações características (SARRA, 2002).

#### **2.4.2 - Método da transformada de Laplace**

A teoria da transformada de Laplace, ou transformação de Laplace, também mencionada como cálculo operacional, tornou se, em anos recentes, parte essencial da bagagem matemática de engenheiros, físicos, matemáticos e outros cientistas. Isso porque, além de ser de grande interesse teórico, os métodos da transformada de Laplace proporcionam meios fáceis e efetivos para a solução de muitos problemas que surgem em vários campos da ciência e da engenharia. O assunto se originou em tentativas para justificar rigorosamente certas regras operacionais usadas por Heaviside no século XIX para resolver equações na teoria eletromagnética. Essas tentativas finalmente tiveram seu êxito no início do século XX através dos esforços de Bromwich, Carson, Van der Pol e outros matemáticos que empregaram a teoria das variáveis complexas (BALDINO, 1979).

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 representa algo importante neste contexto. As transformadas de Laplace são muito usadas em diversas situações (SODRÉ, 2003).

A transformada de Laplace é particularmente útil na análise de circuitos, onde os termos descontínuos ou impulsivos são comuns, mas também é importante em outras aplicações (BOYCE e DIPRIMA, 2001).

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

i) Definição da transformada de Laplace: Seja  $F(t)$  uma função de  $t$  definida para  $t > 0$ . Então, a transformada de Laplace de  $F(t)$  é representada por  $\mathcal{L}\{F(t)\}$  é definida por:

$$\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} F(t) dt \quad (2.21)$$

Diz-se que a transformada de Laplace de  $F(t)$  existe se a integral dada pela Eq. (2.21) converge para algum valor de  $s$ ; caso contrário ela não existe.

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

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

iv) Algumas propriedades importantes da transformação de Laplace: Na lista abaixo de teoremas, supõe-se que todas as funções satisfaçam as condições do teorema acima, de modo que suas transformadas de Laplace existam:

- Propriedade de linearidade;
- Primeira propriedade de translação ou de deslocamento;
- Segunda propriedade de translação ou de deslocamento;
- Propriedade de mudança de escala;
- Transformada de Laplace de derivadas;
- Transformada de Laplace de integrais;
- Multiplicação por  $t^n$ ;
- Divisão por  $t$ ;
- Funções periódicas
- Comportamento de  $f(s)$  quando  $s \rightarrow \infty$ ;
- Teorema do valor inicial;
- Teorema do valor final;
- Generalização do teorema do valor inicial;
- Generalização do teorema do valor final.

v) Métodos para encontrar transformadas de Laplace: Há vários métodos disponíveis para determinar transformadas de Laplace, como indicado na seguinte lista:

- Método direto;
- Método das séries;
- Método das equações diferenciais;
- Método em relação a um parâmetro;
- Diferenciação em relação a um parâmetro;
- Métodos diversos;
- Uso de tabelas.

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

vii) Algumas propriedades importantes das transformadas inversas de Laplace:

- Propriedade de linearidade;
- Primeira propriedade de translação ou deslocamento;
- Segunda propriedade de translação ou deslocamento;
- Propriedade de mudança de escala;
- Transformada inversa de Laplace de derivadas;
- Transformada inversa de Laplace de integrais;
- Multiplicação  $s^n$ ;
- Divisão por  $s$ ;
- Propriedade da convolução.

viii) Métodos para encontrar transformadas inversas de Laplace:

- Método das frações parciais;
- Método das séries;
- Método das equações diferenciais;
- Diferenciação em relação a um parâmetro;
- Métodos diversos usando os teoremas acima;

- Uso de tabelas;
- A fórmula complexa de inversão.

### 2.4.3 - Inversão numérica da transformada de Laplace

A transformada de Laplace de  $F(t)$  dada pela Eq. (2.21) 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) se 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 de acordo com a Eq. (2.21), supondo-se que para algum valor de  $s$  o integrando é absolutamente integrável.

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. O algoritmo inicial foi proposto por CRUMP (1976), mas foi significativamente melhorado por DE HOOG *et al.* (1982). Dada uma transformada de valor complexo  $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$ , a regra trapezoidal dá a seguinte aproximação para a transformada inversa:

$$G(t) = \left( \frac{e^{\alpha t}}{T} \right) \Re \left\{ \frac{1}{2} f(\alpha) + \sum_{k=1}^{\infty} f \left( \alpha + \frac{ik\pi}{T} \right) \exp \left( \frac{ik\pi t}{T} \right) \right\} \quad (2.22)$$

Esta é a parte real da soma de uma série de potências complexa em  $z = \exp(i\pi/T)$ , 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 algoritmo tenta escolher a ordem da aproximação de Pade para obter a precisão relativa especificada, não excedendo o número máximo permitido de avaliações da função. O parâmetro  $\alpha$  é uma estimativa do máximo das partes reais das singularidades de  $f$ , e uma escolha errada de  $\alpha$  pode dar uma falsa convergência. Mesmo nos casos em que o valor correto de  $\alpha$  é desconhecido, o algoritmo tentará estimar um valor aceitável. Assumindo uma convergência satisfatória, o erro de discretização  $E = G - F$  satisfaz a seguinte equação:

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2n\alpha T} F(2nT + t) \quad (2.23)$$

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

$$E \leq \frac{Me^{\alpha t}}{e^{2T(\alpha-\beta)} - 1} \quad (2.24)$$

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.

É preciso observar, antes de tudo, certos critérios para avaliação de diferentes técnicas numéricas de inversão, por exemplo: 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.

Na prática existem muitos problemas para os quais a inversão numérica da transformada de Laplace requer um tipo especial de método ou pode ser grandemente facilitado pelo uso de um determinado método.

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).

## **2.5 – PROBLEMAS INVERSOS**

No passado, problemas inversos foram considerados de não interesse físico por causa de sua característica mal posta, hoje desempenham um importante papel na solução de uma série de problemas práticos. O uso de métodos inversos representa uma linha de pesquisa, onde os resultados obtidos através de experimentos e soluções numéricas não são simplesmente comparados posteriormente, mas existe um sinergismo fechado entre pesquisadores teóricos e experimentais do estudo em curso, a fim de obter o máximo de informações do problema físico estudado (BECK, 1999).

Em um passado recente, problemas inversos tem-se desenvolvido, através de tópicos de pesquisa teóricos e específico, como uma importante ferramenta para análises em engenharia (OZISIK e ORLANDE, 2000).

O objetivo da coleta de dados é obter informações significativas sobre um sistema físico ou fenômeno de interesse. No entanto, em muitas situações as quantidades que deseja-se determinar são diferentes daqueles que são capazes de medir ou medidos. Se os dados medidos dependem, de algum modo das quantidades que queremos então os dados contém informações dessa quantidade. Começando com os dados que temos medidos, o problema de tentar reconstruir as quantidades que realmente queremos é chamado de problema inverso. Genericamente falando,

geralmente dizemos que um problema inverso é onde medimos um efeito e queremos saber a causa (TAN *et al.*, 2006).

A coleção de valores que queremos reconstruir é referido como imagem, mesmo que esses valores não representem uma imagem, mas são simples parâmetros que definem um modelo. O conjunto de todas as imagens é chamado de espaço imagem. Normalmente é definida a imagem por  $f$ .

O problema direto é o mapeamento da imagem para as quantidades que somos capazes de medir. Na maioria dos exemplos o problema direto é dado por alguma teoria física. Por exemplo, com a meia vida de uma substancia radioativa, os físicos nucleares podem calcular o decaimento radioativo ao menos no sentido estatístico. O mapeamento direto pode ser linear ou não linear e é definido por  $A(f)$ .

Na prática nunca é feito uma medida exata e os dados que medimos são versões corrompidas das quantidades medidas. Dados espaciais são o conjunto de todos os dados possíveis. A corrupção pode ser tão pequena quanto um erro de arredondamento produzido pela representação do cálculo das medições, pode ser intrínseco ao processo de medição como o brilho de uma estrela brilhante produzido por uma atmosfera turbulenta, ou geralmente inerente ao processo de medição. Então, a rigor o processo direto é um mapeamento a partir da imagem com os dados livres de erros  $\bar{d}$  e os dados atualmente medidos  $d$  é a forma corrompida. A diferença  $\bar{d} - d$  é chamada de ruído o qual é representado por  $n$ .

Assim o mapeamento da imagem para dados reais é dado pela relação

$$d = A(f) + n \tag{2.25}$$

O problema inverso é então o problema de encontrar a imagem original com base nos dados e conhecimento do problema direto (TAN *et al.*, 2006).

Engenheiros e cientistas precisam se preocupar com muito mais do que simplesmente encontrar respostas matematicamente aceitáveis para estimativa de parâmetros e problemas inversos. Uma razão é que pode haver muitos modelos que ajustam adequadamente os dados. É essencial para caracterizar que a solução obtida seja "boa", a aceitabilidade física e ajuste aos dados, talvez consistente com outras restrições. Questões essenciais que devem ser considerados incluem a existência de soluções, a unicidade da solução, e a instabilidade do processo de solução.

(i) Existência: Pode não haver nenhum modelo que se encaixe exatamente aos dados. Isso pode ocorrer na prática porque o modelo matemático do problema físico é aproximado ou porque os dados contêm ruído.

(ii) Unicidade: Se as soluções exatas existem, elas podem não ser única, mesmo para um número infinito dos pontos exatos de dados. Essa situação ocorre comumente em problemas de campo potencial. Um exemplo clássico é o campo gravitacional externo a partir de uma distribuição de massa esfericamente simétrica, que depende apenas da massa total e não sobre a distribuição da densidade radial.

(iii) Instabilidade: O processo de cálculo de uma solução inversa pode ser, e muitas vezes é, extremamente instável em que uma pequena mudança na medição pode levar a uma enorme mudança no modelo estimado. Problemas inversos, onde surge essa situação, são referidos como mal-postos no caso de sistemas contínuos, ou mal-condicionados no caso de sistemas discretos lineares. Um ponto importante é que comumente é possível estabilizar o processo de inversão através da imposição de restrições adicionais à solução inversa, um processo que é geralmente referido como a regularização. Regularização é frequentemente essencial para produzir uma solução utilizável para uma outra forma intratável do problema inverso mal-posto ou mal-condicionado (ASTER *et al.*, 2005).

## 2.6 – FILTROS BAYESIANOS

Segundo ORLANDE *et al.* (2008) os problemas de estimativa de estado são resolvidos com Filtros Bayesianos. Na abordagem estatística Bayesiana é feito uma tentativa de usar todas as informações disponíveis com a finalidade de reduzir as incertezas presentes em problema de tomada de decisão ou inferencial. Com novas informações obtidas, elas são combinadas com informações anteriores para formar a base para procedimentos estatísticos.

Para se definir o problema de estimativa de estado, deve-se considerar a um modelo para a evolução do vetor  $x$  na forma:

$$x_k = f_k(x_{k-1}, v_{k-1}) \quad (2.26)$$

onde  $k = 1, 2, \dots$ , indica um instante de tempo  $t_k$  em um problema dinâmico. O vetor  $x \in R^{n_x}$  é chamado de vetor de estado e contém as variáveis a serem dinamicamente

estimados. Este vetor avança de acordo com o modelo de evolução de estado dado pela Eq. (2.26), onde  $f$  é no caso geral, uma função não linear das variáveis de estado  $x$  e do vetor ruído de estado  $v \in R^{n_x}$ .

Considere também que as medidas  $z \in R^{n_z}$  são avaliadas para  $t_k, k = 1, 2, \dots$ . As medidas estão relacionadas com as variáveis de estado  $x$  através da possivelmente não linear função  $h$  na forma:

$$y_k = h_k(x_k, n_k) \quad (2.27)$$

onde  $n \in R^{n_n}$  são as medidas de ruídos. A Eq. (2.27) é referida como observação (medidas) do modelo.

O problema de estimativa de estado visa a obtenção de informações sobre  $x_k$  baseado no modelo de evolução do estado representado pela Eq. (2.26) e sobre as medidas  $y_{1:k} = \{y_i, i = 1, \dots, k\}$  disponíveis pela observação do modelo da Eq.(2.27) (ORLANDE *et al.*, 2008).

O modelo de evolução-observação dada pelas Eqs. (2.26 e 2.27) são baseados nas seguintes hipóteses (KAPIO e SOMERSALO, 2004; KAPIO, *et al.*, 2005):

- (i) A seqüência  $x_k$  para  $k = 1, 2, \dots$  é um processo Markoviano, o qual é

$$\pi(x_k | x_0, x_1, \dots, x_{k-1}) = \pi(x_k | x_{k-1}) \quad (2.28)$$

Esta propriedade equivale a afirmar que a probabilidade condicional de qualquer evento futuro, dado qualquer evento passado e o estado presente  $x_k$ , é independente do evento passado e dependente somente do estado presente do processo.

- (ii) A seqüência  $y_k$  para  $k = 1, 2, \dots$  é um processo Markoviano com respeito a história de  $x_k$ , o qual é

$$\pi(y_k | x_0, x_1, \dots, x_k) = \pi(y_k | x_k) \quad (2.29)$$

- (iii) A seqüência  $x_k$  depende somente das observações passadas através de sua própria história, isto é,

$$\pi(x_k | x_{k-1}, y_{1:k-1}) = \pi(x_k | x_{k-1}) \quad (2.30)$$

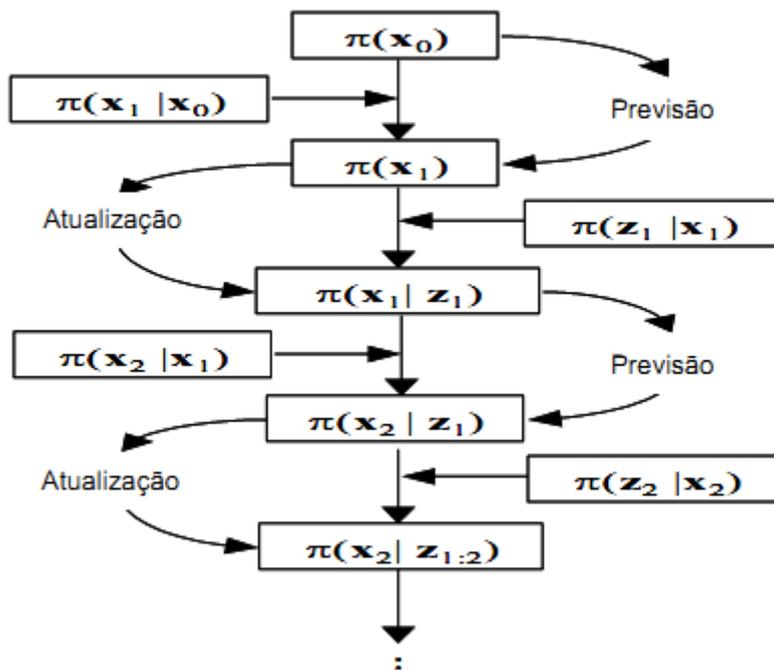
onde  $\pi(a|b)$  denota a probabilidade condicional de  $\mathbf{a}$  quando  $\mathbf{b}$  é dado.

Além disso, para o modelo de evolução-observação dado pelas Eqs. (2.26, 2.27) assume-se que, para  $i \neq j$  os vetores de ruído  $v_i$  e  $v_j$ , bem como  $n_i$  e  $n_j$ , são independentes entre si e também mutuamente independente do estado inicial  $x_0$ . Os vetores  $v_i$  e  $n_j$  também são independentes entre si, para todos  $i$  e  $j$  (KAIPIO and SOMERSALO, 2004).

Problemas diferentes podem ser considerados com o modelo de evolução observação acima, ou seja,

- (i) problema de previsão, com a determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k-1})$
- (ii) O problema de filtragem, com a determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k})$
- (iii) O problema fixo-retardo de suavização, diz respeito à determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k+P})$ , onde  $P \geq 1$  isto é retardo fixado
- (iv) O problema de suavização de todo o domínio, com a determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k})$ , onde  $y_{1:k} = \{y_i, i = 1, \dots, k\}$  é a seqüência completa de medições (ORLANDE *et al.*, 2008).

Assumindo-se que  $\pi(x_0 | z_0)$  é uma informação disponível (a priori), a densidade de probabilidade a posteriori  $\pi(x_k | z_{1:k})$  (objetivo do problema de filtro) pode ser obtida por filtros “Bayesianos” através de duas etapas: previsão e atualização. A Figura 2.6 ilustra o processo (PIRES, 2008).

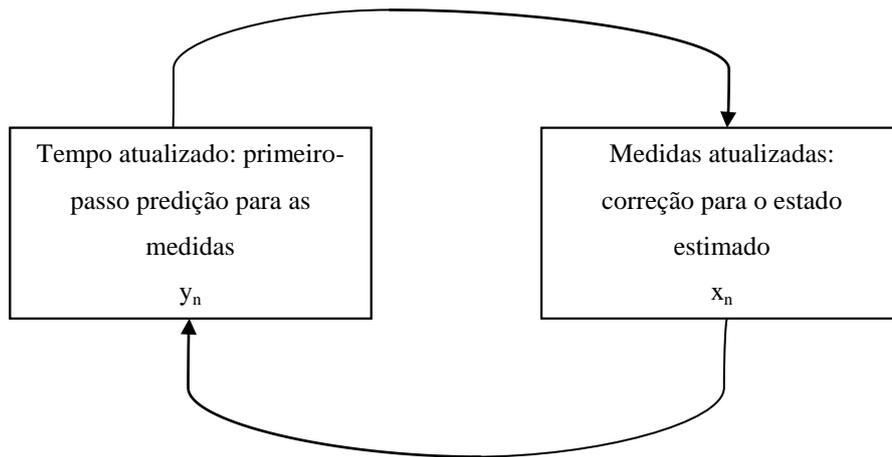


**Figura 2.6** – Filtro Bayesiano. Fonte: KAIPIO e SOMERSALO (2004).

### 2.6.1 - Filtro de Kalman

Quando o problema de estimação de estado envolve modelos de evolução e de observação lineares e quando os ruídos destes modelos são “Gaussianos” com médias e covariâncias conhecidas, o filtro de Kalman é aplicável (PIRES, 2008).

O filtro de Kalman é um algoritmo que calcula recursivamente as variáveis de estado de um sistema representado por equações de estado lineares (JAZWINSKI, 1970). O filtro de Kalman consiste em um processo iterativo previsão - correção (Figura 2.4). No passo previsão, o tempo atualizado é tomado, onde o passo-um previsão a frente da observação é calculado; na etapa correção, a medição atualizada é feita onde a correção para a estimativa do estado atual é calculado (CHEN, 2003).



**Figura 2.7** – Ilustração esquemática para o filtro de Kalman atualizado com preditor-corretor. Fonte : CHEN (2003)

Segundo ORLANDE *et al.* (2008), para a aplicação do filtro de Kalman assume-se que os modelos de evolução e observação dados pelas Eqs. (2.26) (2.27) são lineares. Assume-se que os ruídos em tais modelos são Gaussianos, com as médias e a covariâncias conhecidas e que são aditivos. Portanto, a densidade posterior  $\pi(x_k | y_{1:k})$  para  $t_k$ ,  $k = 1, 2, \dots$  é Gaussiano e o filtro de Kalman resulta em solução ótima para o problema de estimativa de estado, isto é, a densidade posterior é calculada exatamente. Com as hipóteses acima citadas, os modelos de evolução e observação podem ser escritos, com:

Modelo de Evolução de Estado:

$$x_k = F_k x_{k-1} + v_{k-1} \quad (2.31)$$

Modelo de Observação:

$$y_k = H_k x_k + n_k \quad (2.32)$$

Onde  $F_k$  e  $H_k$  são matrizes conhecidas para as evoluções linear do estado  $x$  e da observação  $y$ , respectivamente. Assumindo que os ruídos  $v$  e  $n$  têm zero média matriz de covariância  $Q$  e  $R$ , respectivamente a previsão e as etapas de atualização do filtro de Kalman são dadas por: (ORLANDE *et al.* 2008).

Previsão:

$$\bar{x}_k = F_k x_{k-1} \quad (2.33)$$

$$P_k^- = F_k P_{k-1} F_k^T + Q_k \quad (2.34)$$

Atualização:

$$K_k = P_k^- H_k^T (H_k P_k^- H_k^T + R_k)^{-1} \quad (2.35)$$

$$x_k = \bar{x}_k + K_k (y_k - H_k \bar{x}_k) \quad (2.36)$$

$$P_k = (I - K_k H_k) P_k^- \quad (2.37)$$

A matriz  $K$  é chamada de matriz ganho de Kalman. Observe acima que, depois de prever o estado da variável  $x$  e sua matriz de covariância  $P$  com as Eqs. (2.33 e 2.34), a estimativa posteriori para tais quantidades são obtidas na etapa de atualização com a utilização das medições  $y$ .

Para outros casos em que as hipóteses linear de Gauss de modelos evolução-observação não são válidos, o uso do filtro de Kalman não resulta em soluções ótimas porque a densidade posterior não é analítica (ORLANDE *et al.*, 2008).

## CAPÍTULO 3

### MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Neste capítulo é apresentado o modelo matemático para o balanço populacional (PB) de aerossol proposto por RAMABHADRAN *et al.* (1976) e PETERSON *et al.* (1978), e particulado proposto por GELBARD e SEINFELD (1978) como também a aplicação da metodologia de solução empregada para o problema em questão.

#### 3.1 - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

O comportamento dinâmico da distribuição de tamanho de aerossol é de fundamental interesse na química coloidal e na ciência atmosférica. Para entender o crescimento e a coagulação de um aerossol espacialmente homogêneo com fonte e sumidouro de partículas, a função distribuição de densidade  $n(v,t)$  é governada pela seguinte equação íntegro-diferencial parcial (PETERSON *et al.*, 1978):

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

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

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

Na Eq. (3.1.a) acima, o termo  $I(v,t)=dv/dt$ , é a taxa de crescimento de partículas de volume  $v$ ,  $\beta(v, \tilde{v})$  é o coeficiente de coagulação para partículas de volume  $v$  e  $\tilde{v}$ , o primeiro termo do lado direito está relacionado à taxa de crescimento de partículas por transferência de material para partículas individuais, o segundo representa o acúmulo de partículas na escala de tamanho  $(v, v+dv)$  pela colisão de duas partículas  $v-\tilde{v}$  e  $\tilde{v}$  para formar uma partícula de volume  $v$  (assumindo conservação de volume durante a coagulação), o terceiro representa a taxa de perda na escala de tamanho de partícula  $(v, v+dv)$  pela colisão com todas as outras partículas,  $R(v,t)$  é a taxa de remoção de partículas através do sistema e  $S(v,t)$  é taxa de adição de partículas novas no sistema.

## 3.2 - METODOLOGIA DE SOLUÇÃO UTILIZANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE

### 3.2.1 - Modelos propostos por RAMABHADRAN *et al.* (1976) para aerossóis

Para resolver o modelo matemático para aerossol dado pela equação íntegro-diferencial parcial (3.1) proposto por RAMABHADRAN *et al.* (1976), a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica foi empregada. Portanto, para este fim, dois casos-testes foram considerados:

- Caso-teste 1: taxa de coagulação constante ( $\beta=\beta_0$ ), taxa de condensação linear ( $I(v,t)=\sigma_1 v$ ) e  $R(v,t)=S(v,t)=0$ :

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \sigma_1 \frac{\partial [vn(v,t)]}{\partial v} = \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - \beta_0 n(v,t)M_0(t) \quad (3.2)$$

Aplicando a transformada de Laplace na Eq. (3.2), a fim de remover a variável independente  $v$  no caso-teste 1, obtém-se (ver detalhes no Apêndice A):

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} \right] = \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t}; \quad \mathcal{L} \left[ \sigma_1 \frac{\partial [vn(v,t)]}{\partial v} \right] = -\sigma_1 s \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} \quad (3.3.a,b)$$

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right] = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.3.c)$$

$$\mathcal{L} [\beta_0 n(v,t)M_0(t)] = \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.3.d)$$

onde,  $\bar{n}(s,t) = \mathcal{L} [n(v,t)]$ .

Portanto, a equação diferencial transformada para este caso, a partir dos resultados das Eqs. (3.3), juntamente com a condição inicial, dada pela Eq. (3.1.b), também transformada, são escritas como:

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - \sigma_1 s \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) - \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.4.a)$$

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s + (1/v_0)} \quad (3.4.b)$$

O momento de ordem zero  $M_0(t)$  que aparece na Eq. (3.2) é obtido a partir da sua definição usual e, para este caso-teste, é dado por (RAMABHADRAN *et al.*, 1976) (ver Apêndice B.4):

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(v,t) dv = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (3.5)$$

Definindo-se as seguintes variáveis:

$$\bar{p}(s,T) = \frac{2\bar{n}(s,t)}{(1-T)^2}; \quad T = 1 - \frac{M_0(t)}{N_0}; \quad \Lambda = \frac{\sigma_1}{\beta_0 N_0}; \quad \tau = \sigma_1 t \quad (3.6.a-d)$$

Aplicando as definições dadas pelas Eqs. (3.6) nas Eqs. (3.4) a equação resultante para  $\bar{p}(s,T)$  é da forma (ver Apêndice C):

$$\frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - 2\Lambda \frac{s}{(1-T)^2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\bar{p}^2}{2N_0} \quad (3.7.a)$$

$$\bar{p}(s,0) = \frac{2(N_0/v_0)}{s + (1/v_0)} \quad (3.7.b)$$

Usando o método das características:

$$\bar{p} = \bar{p}(s,T); \quad \bar{p} = \bar{p}[s(\xi), T(\xi)] \quad (3.8.a,b)$$

$$\frac{d\bar{p}}{d\xi} = \frac{ds}{d\xi} \frac{\partial \bar{p}}{\partial s} + \frac{dT}{d\xi} \frac{\partial \bar{p}}{\partial T} \quad (3.8.c)$$

Comparando-se a Eq. (3.8.c) com a Eq. (3.7.a), tem-se

$$\frac{dT}{d\xi} = 1; \quad T = \xi; \quad \frac{ds}{d\xi} = -2\Lambda \frac{s}{(1-T)^2} \quad (3.9.a-c)$$

ou,

$$\frac{ds}{dT} = -2\Lambda \frac{s}{(1-T)^2}; \quad \frac{d\bar{p}(s,T)}{d\xi} = \frac{\bar{p}^2(s,T)}{2N_0}; \quad \frac{d\bar{p}(s,T)}{dT} = \frac{\bar{p}^2(s,T)}{2N_0} \quad (3.9.d-f)$$

Integrando-se a Eq. (3.9.d), obtém-se

$$s = s_0 e^{\frac{-2\Lambda T}{1-T}} ; \quad s_0 = s e^{\frac{2\Lambda T}{1-T}} \quad (3.10.a,b)$$

Agora, integrando-se a Eq. (3.9.f), resulta

$$-\left[ \frac{1}{\bar{p}(s,T)} - \frac{1}{\bar{p}(s_0,0)} \right] = \frac{T}{2N_0} \quad (3.11.a)$$

Reescreve-se a Eq. (3.7.b) para  $s=s_0$ , obtendo-se

$$\frac{1}{\bar{p}(s_0,0)} = \frac{v_0 s_0 + 1}{2N_0} \quad (3.11.b)$$

Utilizando-se as Eqs. (3.11.b) e (3.10.b), a Eq. (3.11.a) é reescrita como

$$\bar{p}(s,T) = \frac{2(N_0/v_0) \exp[-2\Lambda T/(1-T)]}{s + \frac{1-T}{v_0} \exp[-2\Lambda T/(1-T)]} \quad (3.12)$$

Introduzindo-se a Eq. (3.6.a) na Eq. (3.12), resulta

$$\bar{n}(s,t) = \frac{(N_0/v_0)(1-T)^2 \exp[-2\Lambda T/(1-T)]}{s + \frac{1-T}{v_0} \exp[-2\Lambda T/(1-T)]} \quad (3.13)$$

Aplica-se a transformada de Laplace inversa na Eq. (3.13) e, para este propósito, faz-se uso da fórmula 33.29 do livro do SPIEGEL *et al.* (2009), para obter-se

$$\begin{aligned} n(v,t) &= \mathcal{L}^{-1}[\bar{n}(s,t)] = \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{(N_0/v_0)(1-T)^2 \exp[-2\Lambda T/(1-T)]}{s + \frac{1-T}{v_0} \exp[-2\Lambda T/(1-T)]} \right] = \\ &= \frac{N_0}{v_0} (1-T)^2 \exp\left(\frac{-2\Lambda T}{1-T}\right) \exp\left[-\frac{v}{v_0} (1-T) \exp\left(\frac{-2\Lambda T}{1-T}\right)\right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde a variável  $T=T(t)$  foi definida na Eq. (3.6.b).

- Caso-teste 2: taxa de coagulação linear [ $\beta = \beta_1(v + \tilde{v})$ ], taxa de condensação linear ( $I(v,t) = \sigma_1 v$ ) e  $R(v,t) = S(v,t) = 0$ :

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \sigma_1 \frac{\partial [vn(v,t)]}{\partial v} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \beta_1 n(v,t) [vM_0(t) + M_1(t)] \quad (3.15)$$

com condições inicial e de contorno dadas pelas Eqs. (3.4.b) e (3.4.c).

Neste caso-teste, a diferença em relação ao caso-teste 1 diz respeito às transformadas de Laplace dos termos do lado direito da Eq. (3.15), as quais são obtidas como:

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] = -\beta_1 \bar{n}(s,t) \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} \quad (3.16.a)$$

$$\mathcal{L} \left[ -\beta_1 n(v,t) (vM_0(t) + M_1(t)) \right] = \beta_1 M_0(t) \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} - \beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.16.b)$$

Portanto, a partir das Eqs. (3.3.a,b) e (3.16), a equação diferencial transformada para este caso é dada na seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - \left\{ \sigma_1 s + \beta_1 [-\bar{n}(s,t) + M_0(t)] \right\} \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = -\beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.17)$$

Onde os momentos de ordem zero  $M_0(t)$  e de primeira ordem  $M_1(t)$  que aparecem na Eq. (3.17) para este caso-teste são obtidos como (RAMABHADRAN *et al.*, 1976) (ver Apêndice B.5):

$$\frac{M_0(t)}{N_0} = \exp \left\{ \frac{\beta_1 N_0 v_0 [1 - \exp(\sigma_1 t)]}{\sigma_1} \right\} \quad (3.18.a)$$

$$\frac{M_1(t)}{N_0 v_0} = \exp(\sigma_1 t) \quad (3.18.b)$$

Define-se as seguintes variáveis:

$$\bar{p}(s,T) = \exp \left[ \frac{1}{\Lambda(1-T)} \right] \bar{n}(s,t); \quad T = 1 - \frac{N_0 v_0}{M_1(t)} = 1 - \exp(-\tau); \quad \Lambda = \frac{\sigma_1}{\beta_1 N_0 v_0}; \quad \tau = \sigma_1 t \quad (3.19.a-d)$$

Agora, substituindo-se as Eqs. (3.19) na Eq. (3.17), obtém-se a seguinte equação para  $\bar{p}(s, T)$  (ver Apêndice C):

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s, T)}{\partial T} - \left\{ s + \frac{1}{\Lambda v_0} e^{\frac{-1}{\Lambda(1-T)}} \left[ \frac{M_0(t)}{N_0} e^{\frac{1}{\Lambda(1-T)}} - \frac{\bar{p}(s, T)}{N_0} \right] \right\} \frac{\partial \bar{p}(s, T)}{\partial s} = 0 \quad (3.20)$$

Substituindo a Eq. (3.18.a) na Eq. (3.20), obtém-se:

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s, T)}{\partial T} - \left\{ s + \frac{1}{\Lambda v_0} e^{\frac{-1}{\Lambda(1-T)}} \left[ e^{\frac{1}{\Lambda}} - \frac{\bar{p}(s, T)}{N_0} \right] \right\} \frac{\partial \bar{p}(s, T)}{\partial s} = 0 \quad (3.21.a)$$

A partir da definição para  $\bar{p}(s, T)$  dada pela Eq. (3.19.a) e aplicando-se na condição inicial transformada, Eq. (3.4.b), tem-se:

$$\bar{p}(s, 0) = \frac{(N_0 / v_0)}{s + 1 / v_0} \exp\left(\frac{1}{\Lambda}\right) \quad (3.21.b)$$

Usando-se o método das características tal como descrito pelas Eqs. (3.8) e, após que, comparando-se com a Eq. (3.21.a), resulta:

$$\frac{dT}{d\xi} = 1 - T; \quad T = 1 - \exp(\xi) \quad (3.22.a,b)$$

$$\frac{ds}{d\xi} = - \left\{ s + \frac{1}{\Lambda v_0} \exp\left[\frac{-1}{\Lambda(1-T)}\right] \left[ \exp\left(\frac{1}{\Lambda}\right) - \frac{\bar{p}(s, T)}{N_0} \right] \right\} \quad (3.22.c)$$

$$\frac{d\bar{p}(s, T)}{d\xi} = 0; \quad \bar{p}(s, T) = \bar{p}(s, 0) \quad (3.22.d,e)$$

$$\frac{ds}{d\xi} = \frac{dT}{d\xi} \frac{ds}{dT} \quad (3.22.f)$$

$$(1-T) \frac{ds}{dT} = - \left\{ s + \frac{1}{\Lambda v_0} \exp\left[\frac{-1}{\Lambda(1-T)}\right] \left[ \exp\left(\frac{1}{\Lambda}\right) - \frac{\bar{p}(s, T)}{N_0} \right] \right\} \quad (3.22.g)$$

Resolvendo a Eq. (3.22.g) com a condição inicial, dada pela Eq. (3.21.b), obtém-se

$$s - (1-T)s_0 = -\frac{(1-T)}{v_0} \left[ 1 - e^{\frac{-T}{\Lambda(1-T)}} \right] + \frac{(1-T)}{v_0^2} \frac{1}{s_0 + 1/v_0} \left[ 1 - e^{\frac{-T}{\Lambda(1-T)}} \right] \quad (3.23.a)$$

Rearranjando-se a Eq. (3.23.a), resulta

$$\begin{aligned} s \left( s_0 + \frac{1}{v_0} \right) - (1-T) \left( s_0 + \frac{1}{v_0} \right)^2 = \\ -\frac{(1-T)}{v_0} \left( s_0 + \frac{1}{v_0} \right) - \frac{(1-T)}{v_0} \left[ 1 - e^{\frac{-T}{\Lambda(1-T)}} \right] \left( s_0 + \frac{1}{v_0} \right) + \frac{(1-T)}{v_0^2} \left[ 1 - e^{\frac{-T}{\Lambda(1-T)}} \right] \end{aligned} \quad (3.23.b)$$

Fazendo-se,

$$S_0 = s_0 + 1/v_0 \quad (3.23.c)$$

A Eq. (3.23.b), torna-se

$$(1-T)S_0^2 - \left\{ s + \frac{(1-T)}{v_0} \left[ 1 - e^{\frac{-T}{\Lambda(1-T)}} \right] + \frac{(1-T)}{v_0} \right\} S_0 + \frac{(1-T)}{v_0^2} \left[ 1 - e^{\frac{-T}{\Lambda(1-T)}} \right] = 0 \quad (3.23.d)$$

Reescrevendo-se a Eq. (3.23.d), obtém-se

$$(1-T)S_0^2 - \left[ s + \frac{(1-T)}{v_0} (2 - \omega) \right] S_0 + \frac{(1-T)}{v_0^2} (1 - \omega) = 0 \quad (3.23.e)$$

onde,

$$\omega = \exp \left[ \frac{-T}{\Lambda(1-T)} \right] \quad (3.23.f)$$

Resolvendo a Eq. (3.23.e) para  $S_0$ , resulta

$$S_0 = \frac{s + \frac{(1-T)(2-\omega)}{v_0} \pm \sqrt{\left[ s + \frac{(1-T)(2-\omega)}{v_0} \right]^2 - \left[ \frac{2(1-T)}{v_0} \sqrt{1-\omega} \right]^2}}{2(1-T)} \quad (3.24)$$

Substituindo a Eq. (3.24) na Eq. (3.21.b) para  $s=s_0$ ,  $\bar{p}(s,0)$  torna-se

$$\bar{p}(s,0) = \frac{2(1-T)(N_0/v_0)\exp(1/\Lambda)}{s + \frac{(1-T)(2-\omega)}{v_0} \pm \sqrt{\left[s + \frac{(1-T)(2-\omega)}{v_0}\right]^2 - \left[\frac{2(1-T)}{v_0}\sqrt{1-\omega}\right]^2}} \quad (3.25)$$

Fazendo-se,

$$S = s + b; \quad b = \frac{(1-T)(2-\omega)}{v_0} \quad (3.26.a,b)$$

A Eq. (3.25) torna-se

$$\bar{p}(s,0) = \frac{2(1-T)(N_0/v_0)\exp(1/\Lambda)}{S \pm \sqrt{S^2 - \left[\frac{2(1-T)}{v_0}\sqrt{1-\omega}\right]^2}} \quad (3.27.a)$$

A partir da introdução das Eqs. (3.19.a) e (3.22.e) na Eq. (3.27.a), considerando-se a raiz positiva, obtém-se

$$\bar{n}(s,t) = \frac{2(1-T)(N_0/v_0)\exp\left[\frac{-T}{\Lambda(1-T)}\right]}{S + \sqrt{S^2 - \left[\frac{2(1-T)}{v_0}\sqrt{1-\omega}\right]^2}} \quad (3.27.b)$$

Da definição da transformada de Laplace tem-se que

$$\mathcal{L}\left[e^{-bt}F(t)\right] = \int_0^\infty e^{-st}e^{-bt}F(t)dt = \int_0^\infty e^{-(s+b)t}F(t)dt = f(s+b) = f(S) \quad (3.28.a)$$

Portanto,

$$\mathcal{L}^{-1}\left[f(S)\right] = e^{-bt}F(t) \quad (3.28.b)$$

Logo, da Eq. (3.27.b) para  $\bar{n}(s,t)$ , tem-se

$$\bar{n}(s,t) = \frac{2(1-T)(N_0/v_0)\exp\left[\frac{-T}{\Lambda(1-T)}\right]}{S + \sqrt{S^2 - \left[\frac{2(1-T)}{v_0}\sqrt{1-\omega}\right]^2}} = \frac{A}{S + \sqrt{S^2 - B^2}} \quad (3.29.a)$$

$$A = 2(N_0 / v_0)(1-T) \exp \left[ \frac{-T}{\Lambda(1-T)} \right]; \quad B = \frac{2(1-T)}{v_0} \sqrt{1-\omega} \quad (3.29.b,c)$$

Rearranjando-se a Eq. (3.29.a), obtém-se

$$\bar{n}(s,t) = -\frac{A}{B^2} \left( \sqrt{S^2 - B^2} - S \right) \quad (3.30.b)$$

Fazendo-se uso da fórmula 29.3.58 do livro do ABRAMOWITZ e STEGUN (1965) juntamente com a Eq. (3.28.b), a transformada de Laplace inversa da Eq. (3.30.b) é obtida como:

$$n(v,t) = \frac{N_0 \omega}{v \sqrt{1-\omega}} \exp \left[ \frac{-(1-T)(2-\omega)v}{v_0} \right] I_1 \left[ 2(1-T) \sqrt{1-\omega} \frac{v}{v_0} \right] \quad (3.31)$$

onde  $T=T(t)$  foi definida na Eq. (3.19.b).

### 3.2.2 - Modelos propostos por GELBARD e SEINFELD (1978) para sistemas particulados

O estado espacial e químico para um sistema particulado homogêneo é descrito pela função densidade de partícula para a distribuição de tamanho  $n(v,t)$ , onde  $n(v,t)dv$  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.

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} = \frac{1}{2} \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(v,t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} + S[n(v,t), v, t] \quad (3.32)$$

A condição inicial e de contorno requeridas para a Eq. (3.32) são as Eqs.(3.1.b) e (3.1.c). A Eq. (3.32) pode, também, ser escrita em termos do diâmetro da partícula (assumindo partículas esféricas), (ver Apêndice E):

$$\frac{\partial n(D,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I(D,t)n(D,t)]}{\partial D} = \frac{1}{2} \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta[(D-\tilde{D})^{1/3}, \tilde{D}]n[(D-\tilde{D})^{1/3}, t]n(\tilde{D}, t)}{(D-\tilde{D})^2} d\tilde{D} + \int_0^\infty \beta(D, \tilde{D})n(D, t)n(\tilde{D}, t)d\tilde{D} + S[n(D, t), D, t] \quad (3.33)$$

onde

$$n(D, t) = (\pi D^2 / 2)n(v, t), \quad D_0 = (6v_0 / \pi)^{1/3}, \quad \tilde{v} = v / v_0, \quad \tilde{D} = D / D_0 \quad (3.34.a-d)$$

Para resolver o modelo matemático dado pela equação integro-diferencial parcial Eq. (3.32), a técnica de transformada de Laplace com inversão numérica foi empregada. Portanto, para este fim, cinco casos teste foram considerados

- Caso-teste 1:  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$  e  $I(v, t) = S[n(v, t), v, t] = 0$

Similarmente a transformada de Laplace aplicada na Eq. (3.2), é também feita na Eq. (3.32).

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} \right] = \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} \quad (3.35.a)$$

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v}, t)n(\tilde{v}, t)d\tilde{v} \right] = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s, t) \quad (3.35.b)$$

$$\mathcal{L} [\beta_0 n(v, t)M_0(t)] = \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s, t) \quad (3.35.c)$$

A equação diferencial transformada para este caso é dada pela Eq. (3.35), na forma

$$\frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} + \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s, t) = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s, t) \quad (3.36)$$

O momento de ordem zero  $M_0(t)$  que aparece na Eq. (3.36) é obtido a partir da sua definição usual e para este caso-teste é dado pela Eq. (3.5).

Aplicando a resolução para a equação de Bernoulli (ver Apêndice D) na Eq. (3.36) e usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.4.b), resulta

$$\bar{n}(s,t) = \frac{2N_0}{(2 + N_0\beta_0 t) \left[ 1 + \frac{v_0 s (2 + N_0\beta_0 t)}{2} \right]} \quad (3.37.a)$$

logo

$$\bar{n}(s,t) = \frac{4N_0}{(2 + N_0\beta_0 t)^2 \left[ s + \frac{2}{v_0 (2 + N_0\beta_0 t)} \right]} \quad (3.37.b)$$

aplicando a inversa da transformada de Laplace na Eq. (3.37.b)

$$n(s,t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{4N_0}{(2 + N_0\beta_0 t)^2 \left[ s + \frac{2}{v_0 (2 + N_0\beta_0 t)} \right]} \right\} \quad (3.38.a)$$

Utilizando a fórmula 32.29 disponível em SPIEGEL *et al.* (2009), obtém-se

$$n(v,t) = \frac{4(N_0/v_0)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \exp \left[ -\frac{2}{(2 + \beta_0 N_0 t)} \frac{v}{v_0} \right] \quad (3.38.b)$$

Aplicando-se as Eqs. (3.34.a), (3.34.b) e (3.34.d) na Eq. (3.38.b), resulta

$$n(D,t) = \frac{12(N_0/D_0)(D/D_0)^2}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \exp \left[ -\frac{2}{(2 + \beta_0 N_0 t)} \left( \frac{D}{D_0} \right)^3 \right] \quad (3.39)$$

- Caso-teste 2:  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1 (v + \tilde{v})$  e  $I(v,t) = S[n(v,t), v, t] = 0$

Neste caso-teste a diferença em relação ao caso-teste 1 é a transformada de Laplace do primeiro e segundo termo do lado direito da Eq. (3.32).

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\beta_1}{2} \int_0^v v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] = -\beta_1 \bar{n}(s,t) \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} \quad (3.40.a)$$

$$\mathcal{L} \left[ \beta_1 n(v,t) \int_0^\infty (v + \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] = \beta_1 M_0(t) \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} - \beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.40.b)$$

A equação diferencial transformada para este caso é dada pelas Eqs. (3.40), na forma

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} + \beta_1 [\bar{n}(s,t) - M_0(t)] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = -\beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.41)$$

Onde o momento de ordem zero  $M_0(t)$  e primeira ordem  $M_1(t)$  que aparecem na Eq. (3.41), são obtidos para este caso-teste como em RAMABHADRAN *et al.*, (1976), (ver Apêndice B.2).

$$M_0(t) = \int_0^{\infty} n(v,t) dv = N_0 \exp(-\beta_1 N_0 v_0 t) \quad (3.42)$$

$$M_1(t) = \int_0^{\infty} vn(v,t) dv = N_0 v_0 \quad (3.43)$$

Aplicando as Eqs. (3.42) e (3.43) na Eq. (3.41) e definindo  $\tau = \beta_1 N_0 v_0 t$ , obtém-se

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - \beta_1 [\bar{n}(s,t) - N_0 \exp(-\tau)] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = -\beta_1 N_0 v_0 \bar{n}(s,t) \quad (3.44)$$

A Eq. (3.44) é uma equação diferencial do tipo hiperbólica e é resolvida analiticamente através do método das características. Usando-se o método das características tal como descrito pelas Eqs. (3.8) e, após que, comparando-se com a Eq. (3.44), resulta:

$$\frac{dt}{d\xi} = 1 ; \quad t = \xi ; \quad \frac{ds}{d\xi} = \beta_1 [\bar{n}(s,t) - N_0 \exp(-\tau)] ; \quad \frac{d\bar{n}(s,t)}{d\xi} = -\beta_1 N_0 v_0 \bar{n}(s,t) \quad (3.45.a-d)$$

Resolvendo a Eq. (3.45.d), resulta

$$\bar{n}(s,t) = \bar{n}(s,0) \exp(-\tau) \quad (3.46)$$

Aplicando a Eq. (3.46) na Eq. (3.45.c), obtém-se

$$\frac{ds}{dt} = \beta_1 [\bar{n}(s,0) - N_0] \exp(-\tau) \quad (3.47)$$

resolvendo a Eq. (3.47), logo

$$s = s_0 + \frac{[\bar{n}(s,0) - N_0]}{v_0 N_0} [1 - \exp(-\tau)] \quad (3.48)$$

Da distribuição inicial dada pela Eq.(3.4.b), obtém-se

$$s_0 = \frac{1}{\bar{n}(s,0)} \frac{N_0}{v_0} - \frac{1}{v_0} \quad (3.49.a)$$

Substituindo a Eq. (3.49.a) na Eq. (3.48) temos

$$s = \frac{N_0}{\bar{n}(s,0)v_0} - \frac{1}{v_0} + \frac{[\bar{n}(s,0) - N_0]}{v_0 N_0} [1 - \exp(-\tau)] \quad (3.49.b)$$

logo

$$\bar{n}^2(s,0)(1 - \exp(-\tau)) - N_0 [sv_0 + 1 + (1 - \exp(-\tau))] \bar{n}(s,0) + N_0^2 = 0 \quad (3.49.c)$$

resolvendo a Eq. (3.49.c) resulta

$$\bar{n}(s,0) = -\frac{N_0[sv_0 + 2 - \exp(-\tau)]}{2[1 - \exp(-\tau)]} \pm \frac{\sqrt{N_0^2[sv_0 + 1 - \exp(-\tau)]^2 - 4[1 - \exp(-\tau)]N_0^2}}{2[1 - \exp(-\tau)]} \quad (3.50)$$

Aplicando a Eq. (3.50) na Eq. (3.46), obtém-se:

$$\bar{n}(s,t) = N_0 \exp(-\tau) \left\{ \frac{[sv_0 + 2 - \exp(-\tau)]}{2[1 - \exp(-\tau)]} \pm \frac{\sqrt{[sv_0 + 1 - \exp(-\tau)]^2 - 4[1 - \exp(-\tau)]}}{2[1 - \exp(-\tau)]} \right\} \quad (3.51)$$

onde

$$T = 1 - \exp(-\tau) \quad (3.52.a)$$

A equação resultante para  $\bar{n}(s,T)$  é

$$\bar{n}(s,T) = N_0 (1 - T) \left\{ \frac{[sv_0 + 1 + T] \pm \sqrt{[sv_0 + 1 + T]^2 - 4T}}{2T} \right\} \quad (3.52.b)$$

logo

$$\bar{n}(s, T) = \frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left\{ \left( s + \frac{1+T}{v_0} \right) \pm \sqrt{\left[ s + \frac{1+T}{v_0} \right]^2 - \left[ \frac{2\sqrt{T}}{v_0} \right]^2} \right\} \quad (3.52.c)$$

Fazendo  $S = s + \frac{1+T}{v_0} = s + b$ ,  $b = \frac{1+T}{v_0}$ , e  $A = \frac{2\sqrt{T}}{v_0}$ ; logo

$$\bar{n}(S, T) = \frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left[ S \pm \sqrt{S^2 - A^2} \right] \quad (3.52.d)$$

Lembrando da definição da transformada de Laplace nas Eqs. (3.27.a), (3.27.b) e (3.28), para a raiz negativa tem-se que

$$\bar{n}(S, T) = \frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left[ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right] \quad (3.52.e)$$

Aplicando a inversão de Laplace na Eq. (3.52.e) e da definição da Eq. (3.28), obtém-se

$$n(v, T) = -\frac{N_0v_0(1-T)}{2T} \exp\left[-\frac{(1+T)v}{v_0}\right] \mathcal{L}^{-1}\left[\sqrt{S^2 - A^2} - S\right] \quad (3.52.f)$$

Da fórmula 29.3.58, disponível em ABRAMIWITZ e STEGUN (1965), pagina 1025

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\sqrt{S^2 - A^2} - S\right] = \frac{iA}{v} J_1(iAv) = -\frac{A}{v} I_1(Av) \quad (3.53)$$

Usando a Eq. (3.53) na Eq. (3.52.f) resulta

$$n(v, T) = -\frac{N_0(1-T)}{v\sqrt{T}} \exp\left[-\frac{(1+T)v}{v_0}\right] I_1\left[2\sqrt{T} \frac{v}{v_0}\right] \quad (3.54)$$

Em termos do diâmetro

$$n(D, T) = -\frac{3(1-T)}{D\sqrt{T}} \exp\left[-(1+T)\tilde{D}^3\right] I_1\left[2\sqrt{T}\tilde{D}^3\right] \quad (3.55)$$

- Caso-teste 3:  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1(v + \tilde{v})$ ,  $I(v, t) = 0$  e  $S[n(v, t), v, t] = -R_0 n(v, t)$

Neste caso-teste, a diferença em relação ao caso-teste 2, é a transformada de Laplace do último termo do lado direito da Eq. (3.57) (ver Apêndice A).

$$\mathcal{L}[-R_0 n(v, t)] = -R_0 \bar{n}(s, t) \quad (3.56)$$

A equação diferencial transformada para este caso é dada pelas equações abaixo

$$\frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} - \beta_1 [M_0(t) - \bar{n}(s, t)] \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial s} = -[\beta_1 M_1(t) + R_0] \bar{n}(s, t) \quad (3.57)$$

O cálculo do momento de ordem zero  $M_0(t)$  e primeira ordem  $M_1(t)$ , que aparecem na Eq. (3.57) estão demonstrados abaixo (ver Apêndice B.3)

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(v, t) dv = N_0 \exp \left\{ \frac{\beta_1 v_0 N_0 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right\} \quad (3.58.a)$$

$$M_1(t) = \int_0^\infty vn(v, t) dv = v_0 N_0 \exp(-R_0 t) \quad (3.58.b)$$

Substituindo as Eqs. (3.58.a) e (3.58.b) na Eq. (3.57), resulta

$$\frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} - \beta_1 \left\{ N_0 \exp \left[ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right] - (\bar{n}(s, t)) \right\} \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial s} = - (N_0 v_0 \beta_1 \exp(-R_0 t) + R_0) \bar{n}(s, t) \quad (3.59)$$

Resolvendo a Eq. (3.59) pelo método das características

$$\frac{ds}{dt} = -\beta_1 \left\{ N_0 \exp \left[ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right] - \bar{n}(s, t) \right\} \quad (3.60.a)$$

$$\frac{d\bar{n}(s, t)}{dt} = -[N_0 v_0 \beta_1 \exp(-R_0 t) + R_0] \bar{n}(s, t) \quad (3.60.b)$$

$$\bar{n}(s, t) = \bar{n}(s, 0) \exp \left\{ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right\} \quad (3.60.c)$$

Substituindo a Eq. (3.60.c) na Eq. (3.60.a) obtendo-se

$$\frac{ds}{\partial t} = -\beta_1[N_0 - \bar{n}(s,0)] \exp\left\{\frac{N_0\nu_0\beta_1[\exp(-R_0t) - 1]}{R_0} - R_0t\right\} \quad (3.61.a)$$

logo

$$s = s_0 - \beta_1[N_0 - \bar{n}(s,0)] \left\{ \frac{1 - \exp\left\{-\frac{N_0\nu_0\beta_1[1 - \exp(-R_0t)]}{R_0}\right\}}{N_0\nu_0\beta_1} \right\} \quad (3.61.b)$$

Usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.4.b) e admitindo  $\theta = \frac{R_0}{N_0\nu_0\beta_1}$

obtem-se

$$sv_0 + 1 = \frac{N_0}{\bar{n}(s,0)} + \left(\frac{\bar{n}(s,0)}{N_0} - 1\right) \left(1 - \exp\left[\frac{\exp(-R_0t) - 1}{\theta}\right]\right) \quad (3.61.c)$$

$$(sv_0 + 1)\bar{n}(s,0) = N_0 + \left[\frac{\bar{n}^2(s,0)}{N_0}\right] \left[1 - \exp\left(\frac{e^{-R_0t} - 1}{\theta}\right)\right] - \left[1 - \exp\left(\frac{e^{-R_0t} - 1}{\theta}\right)\right] \bar{n}(s,0) \quad (3.61.d)$$

Reescrevendo a Eq. (3.61.d) resulta

$$\bar{n}^2(s,0) \left[1 - \exp\left(\frac{e^{-R_0t} - 1}{\theta}\right)\right] - N_0 \left\{(sv_0 + 1) + 1 - \exp\left[\frac{e^{-R_0t} - 1}{\theta}\right]\right\} \bar{n}(s,0) + N_0^2 = 0 \quad (3.61.e)$$

Admitindo  $\tau = N_0\beta_0\nu_0t$  e  $\tilde{T} = \exp(-\theta\tau)$ , tem-se

$$\bar{n}^2(s,0) \left[1 - \exp\left(\frac{\tilde{T} - 1}{\theta}\right)\right] - N_0 \left\{(sv_0 + 2) - \exp\left(\frac{\tilde{T} - 1}{\theta}\right)\right\} \bar{n}(s,0) + N_0^2 = 0 \quad (3.61.f)$$

onde

$$\tilde{g} = 1 - \exp\left(\frac{\tilde{T} - 1}{\theta}\right) \quad (3.61.g)$$

logo

$$\bar{n}(s,0) = \frac{N_0 \left[ (sv_0 + 2) - e^{\frac{\tilde{T}-1}{\theta}} \right] \pm \sqrt{N_0^2 \left[ (sv_0 + 2) - e^{\frac{\tilde{T}-1}{\theta}} \right]^2 - 4\tilde{g}N_0^2}}{2\tilde{g}} \quad (3.62.a)$$

Substituindo a Eq. (3.62.a) na Eq. (3.60.c) resulta

$$\bar{n}(s,\tilde{T}) = \frac{\tilde{T} \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}} \left\{ \frac{N_0}{v_0} \left[ (sv_0^2 + (1+\tilde{g})v_0) \pm \sqrt{[sv_0^2 + (1+\tilde{g})v_0]^2 - (2v_0\sqrt{\tilde{g}})^2} \right] \right\} \quad (3.62.b)$$

Fazendo  $S = sv_0^2 + (1+\tilde{g})v_0 = s+b$ ,  $b = (1+\tilde{g})v_0$  e  $A = 2v_0\sqrt{\tilde{g}}$  temos

$$\bar{n}(S,\tilde{T}) = \frac{\tilde{T}N_0 \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}v_0} \left\{ S \pm \sqrt{S^2 - A^2} \right\} \quad (3.62.c)$$

Para raiz negativa

$$\bar{n}(S,\tilde{T}) = -\frac{\tilde{T}N_0 \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}v_0} \left\{ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right\} \quad (3.62.d)$$

Lembrando da definição da transformada de Laplace das Eqs. (3.27.a), (3.27.b) e (3.28), e aplicando a inversão de Laplace na Eq. (3.62.d)

$$n(v,T) = -\frac{\tilde{T}N_0}{2\tilde{g}v_0} \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right) \exp[-(1+\tilde{g})v_0v] \mathcal{L}^{-1} \left[ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right] \quad (3.62.e)$$

Da fórmula 29.3.58, disponível em ABRAMOWITZ e STEGUN (1965), pagina 1025 e da Eq. (3.53), e substituindo na Eq. (3.62.e), obtém-se

$$n(v,T) = -\frac{\tilde{T}N_0}{v\sqrt{\tilde{g}}} \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right) \exp[-(1+\tilde{g})v_0v] I_1(2\sqrt{\tilde{g}}v) \quad (3.63)$$

- Caso-teste 4:  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$ ,  $I(v, t) = \sigma v$  e  $S[n(v, t), v, t] = 0$

Aplicando a transformada de Laplace na Eq. (3.32) para o caso-teste 4, as transformadas são iguais as Eqs. (3.3.a-d), portanto a equação diferencial para transformar este caso, a partir dos resultados das Eqs. (3.3), juntamente com a condição inicial transformada, são iguais a Eq. (3.4).

O momento de ordem zero  $M_0(t)$  que aparece na Eq. (3.4) é representado pela Eq. (3.5)

Resolvendo a Eq. (3.4) através do método das características

$$\frac{ds}{dt} = -\sigma s \quad (3.64.a)$$

$$s_0 = s \exp(\sigma t) \quad (3.64.b)$$

$$\frac{d\bar{n}(s, t)}{dt} + \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s, t) = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s, t) \quad (3.64.c)$$

Substituindo a Eq. (3.64.b) na Eq. (3.4.b), obtém-se a condição inicial

$$\bar{n}(s, 0) = \frac{(N_0/v_0)}{s \exp(\sigma t) + (1/v_0)} \quad (3.64.d)$$

Resolvendo a Eq. (3.64.c) pelo teorema de Bernoulli e usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.64.d), resulta

$$\bar{n}(s, t) = \frac{2N_0}{(2 + \beta_0 N_0 t)[1 + 2N_0 C(2 + \beta_0 N_0 t)]} \quad (3.64.e)$$

Então em  $t = 0$ , tem-se

$$\bar{n}(s, t) = \bar{n}(s, 0) = \frac{N_0}{v_0} \frac{1}{s \exp(\sigma t) + 1/v_0} \quad (3.64.f)$$

$$\frac{N_0}{v_0} \frac{1}{s \exp(\sigma t) + 1/v_0} = \frac{2N_0}{2(1 + 4N_0 C)} \quad (3.64.g)$$

$$2N_0 C = \frac{sv_0 \exp(\sigma t)}{2} \quad (3.64.h)$$

Substituindo a Eq. (3.64.h) na Eq. (3.64.e), obtém-se:

$$\bar{n}(s,t) = \frac{4(N_0/v_0)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2 \exp(\sigma t) \left[ s + \frac{2 \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0} \right]} \quad (3.65)$$

Usando a fórmula da inversão de Laplace na Eq. (3.65)

$$n(v,t) = \frac{4(N_0/v_0) \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s + \frac{2 \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0}} \right] \quad (3.66)$$

Utilizando a formula 32.29, disponível em SPIEGEL *et al.* (2009), resulta

$$n(v,t) = \frac{4(N_0/v_0) \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \exp \left[ -\frac{2 \exp(-\sigma t)v}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0} \right] \quad (3.67.a)$$

$$n(v,t) = \frac{4(N_0/v_0)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \exp \left[ -\frac{2 \exp(-\sigma t)v}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0} - \sigma t \right] \quad (3.67.b)$$

Assumindo  $\tau = \beta_0 N_0 t$ ,  $\Lambda = \sigma/N_0 \beta_0$  e aplicando na Eq. (3.93.b) obtendo-se

$$n(v,t) = \frac{4(N_0/v_0)}{(2 + \tau)^2} \exp \left[ -\frac{2v}{(2 + \tau)v_0} \exp(-\Lambda \tau) - \Lambda \tau \right] \quad (3.68)$$

- Caso-teste 5:  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$ ,  $I(v,t) = 0$  e  $S(n(v,t), v,t) = \frac{S_0 e^{\frac{-v}{v^*}}}{v^*} - R_0 n(v,t)$

Utilizando a técnica da transformada de Laplace neste caso-teste obtém-se a equação diferencial descrita abaixo.

Admitindo  $\Delta = v^*/v_0$ ,  $sv_0 = \bar{S}$ ,  $\Omega = \frac{S_0}{\beta_0 N_0^2}$  e  $\theta = \frac{R_0}{\beta_0 N_0}$

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} = \frac{\beta_0 \bar{n}^2(s,t)}{2} - (\beta_0 M_0(t) + R_0) \bar{n}(s,t) + S_0 \left( \frac{1}{\Delta \bar{S} + 1} \right) \quad (3.69)$$

A equação do momento  $\bar{M}_0(t)$ , para este caso-teste está descrita abaixo:

$$\bar{M}_{ss}(0) = -\theta + \sqrt{\theta^2 + 2\Omega} ; \quad \bar{M}_0(\tau) = \frac{r_1 - r_2 F(\tau)}{1 - F(\tau)} ; \quad r_1 = -\theta + \sqrt{\theta^2 + 2\Omega} \quad (3.70.a-c)$$

$$r_2 = -\theta - \sqrt{\theta^2 + 2\Omega} ; \quad F(\tau) = \frac{1 - r_1}{1 - r_2} \exp\left[\frac{-\tau(r_1 - r_2)}{2}\right] \quad (3.70.d,e)$$

Admitindo  $\tau = N_0 \beta_0 t$  e adimensionalizando a Eq. (3.69), obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{n}(s, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\bar{n}^2(s, \tau)}{2N_0} - \left( \frac{M_0(\tau)}{N_0} + \theta \right) \bar{n}(s, \tau) + \frac{\Omega N_0}{\Delta \bar{S} + 1} \quad (3.71.a)$$

Dividindo a Eq. (3.71.a) por  $N_0$ , admitindo  $\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{n}(s, \tau)}{N_0}$  e

$$\bar{M}_0(\tau) = \frac{M_0(\tau)}{N_0} \text{ resulta}$$

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} + (\bar{M}_0(\tau) + \theta) \bar{p}(s, \tau) - \frac{\bar{p}^2(s, \tau)}{2} = \frac{\Omega}{\Delta \bar{S} + 1} \quad (3.71.b)$$

$$\bar{p}(s, 0) = \frac{1}{\bar{S} + 1} \quad (3.71.c)$$

Aplicando a solução de Riccati na Eq. (3.71.b), (ver Apêndice F)

Solução particular;

$$\bar{p}_p = \bar{M}_0(\tau) + \theta + \sqrt{(\bar{M}_{ss}(0) + \theta)^2 - \frac{2\Omega}{\Delta \bar{S} + 1}} \quad (3.72.a)$$

Solução geral

$$\bar{p}(s, \tau) = \bar{p}_p + \frac{1}{z} \quad (3.72.b)$$

Solução para z

$$\frac{dz}{d\tau} - (\bar{M}_0(\tau) + \theta - \bar{p}_p)z = -\frac{1}{2} \quad (3.72.c)$$

$$z = \frac{1}{2(\bar{M}_0(\tau) + \theta - \bar{p}_p)} + C_1 \text{Exp} \left( -\tau \sqrt{(\bar{M}_{ss}(0) + \theta)^2 - \frac{2\Omega}{\Delta S + 1}} \right) \quad (3.72.d)$$

Substituindo a Eq. (3.72.d) na Eq. (3.72.b) tem-se

$$\bar{p}(s, \tau) = \bar{p}_p + \frac{1}{\frac{1}{2(\bar{M}_0(\tau) + \theta - \bar{p}_p)} + C_1 \text{Exp} \left( -\tau \sqrt{(\bar{M}_{ss}(0) + \theta)^2 - \frac{2\Omega}{\Delta S + 1}} \right)} \quad (3.73.a)$$

Admitindo em  $\tau = 0 \rightarrow \bar{p}(s, 0) = \bar{p}_0 \rightarrow \bar{M}_0(0) = 1 \rightarrow \bar{p}_p = \bar{p}_{p0}$ , logo

$$C_1 = \frac{(\bar{p}_0 - \bar{p}_{p0}) + 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}}}{2\left(\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}}\right)(\bar{p}_0 - \bar{p}_{p0})} \quad (3.73.b)$$

Substituindo a Eq. (3.73.b) na Eq. (3.73.a) resulta

$$\bar{p}(s, \tau) = \bar{p}_p + \frac{2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \text{Dexp} \left( \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)}{\left(1 - \text{Dexp} \left( \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)\right)} \quad (3.74.a)$$

$$D = \frac{(\bar{p}_0 - \bar{p}_{p0})}{\bar{p}_0 - \bar{p}_{p0} + 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}}} \quad (3.74.b)$$

Logo

$$\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{p}_p + \left[ 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} - \bar{p}_p \right] \text{Dexp} \left( \tau \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)}{1 - \text{Dexp} \left( \tau \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)} \quad (3.75)$$

### 3.2.3 - Modelos propostos por PETERSON *et al.* (1978) para condensação e coagulação de Aerossóis

O comportamento dinâmico da distribuição de tamanho dos aerossóis é de fundamental interesse na química dos colóides e ciência atmosférica. Para um aerossol espacialmente homogêneo ser submetido a taxas de crescimento, coagulação, nucleação e remoção a função distribuição de densidade de tamanho é governada pela equação integro diferencial, Eq. (3.1.a). Portanto, para este fim, dois casos teste foram considerados.

- Caso-teste 1: coagulação constante e condensação linear

Para resolver o modelo matemático representado pela Eq. (3.1.a), a técnica de transformada de Laplace com inversão numérica foi empregada.

Admitindo  $R = \alpha n(v, t)$ ,  $s(v, t) = \frac{s_0}{v^*} \exp\left(-\frac{v}{v_0}\right)$ ,  $\Delta = \frac{v^*}{v_0}$ ,  $\beta(v - \tilde{v}, v) = \beta_0$  e  $\bar{v} = \frac{v}{v_0}$ ,

$\tau = N_0 \beta_0 t$  e  $\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{n}(s, \tau)}{N_0}$ , logo

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} - \Lambda S \frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial S} = \frac{\bar{p}^2(s, \tau)}{2} - (M_0(\tau) + \theta) \bar{p}(s, \tau) + \frac{\Omega}{\Delta S + 1} \quad (3.76)$$

Para  $\Omega = \theta = 0$

Utilizando a consideração acima e aplicando a transformada de Laplace, a equação resultante é a Eq.(3.4.a), cuja solução é semelhante a referida equação.

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} - \Lambda S \frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial S} = \frac{\bar{p}^2(s, \tau)}{2} - M_0(\tau) \bar{p}(s, \tau) \quad (3.77)$$

O momento de ordem zero  $M_0(t)$  que aparece na Eq. (3.76) é semelhante ao da Eq. (3.5). Resolvendo a Eq. (3.76), resulta

$$n(v, t) = \frac{4N_0}{v_0(2 + \tau)^2} \exp\left(-\frac{2\bar{v}}{2 + \tau} \exp(-\Lambda \tau) - \Lambda \tau\right) \quad (3.78)$$

Para  $\Omega = 0$  e  $\theta = 1$

Utilizando a consideração acima e aplicando a transformada de Laplace na Eq. (3.76) resulta

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} - \Lambda S \frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial S} = \frac{\bar{p}^2(s, \tau)}{2} - (M_0(\tau) + \theta) \bar{p}(s, \tau) \quad (3.79)$$

Onde o momento  $M_0(t)$ , é calculado como:

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(v, t) dv = \frac{2}{3 \exp(\tau) - 1} \quad (3.80)$$

Aplicando o método das características, para a solução da Eq. (3.79), obtêm-se

$$\bar{p}(S, \tau) = \frac{4 \exp(\tau)}{(3 \exp(\tau) - 1) [2 \exp(\tau) + (3 \exp(\tau) - 1) S \exp(\Lambda \tau)]} \quad (3.81)$$

logo

$$n(v, \tau) = \frac{4 \exp\left(\tau(1 - \Lambda) - \frac{2 \exp[\tau(1 - \Lambda)] \bar{v}}{3 \exp(\tau) - 1}\right)}{(3 \exp(\tau) - 1)} \quad (3.82)$$

Para  $\Omega = 1$  e  $\theta = 1$

Para essa hipótese, a Eq. (3.76) é a resultante. Utilizando as Eqs. (3.70.a-e) do momento, a Eq. (3.71.b) como condição inicial e aplicando o método das características, resulta

$$S_0 = S \exp(\Lambda \tau) \quad (3.83.a)$$

Aplicando a solução de Riccati na equação, ver Apêndice F, a solução particular é a Eq. (3.72.a) e a resolução é semelhante ao caso 3.2 (caso-teste 5) cujo resultado final é:

$$D = \frac{1 - \bar{p}_{p0} [S \exp(\Lambda \tau)]}{1 - \left( \bar{p}_{p0} + 2 \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right) (S \exp(\Lambda \tau))} \quad (3.83.b)$$

$$\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{p}_p + \left[ 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} - \bar{p}_p \right] D \exp\left(\tau\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}}\right)}{1 - D \exp\left(\tau\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}}\right)} \quad (3.84)$$

Para  $\Omega = 1$  e  $\theta = 0$

Para essa hipótese, a solução é seguir os mesmos passos do caso para  $\Omega = 1$  e  $\theta = 1$ , onde a solução é dada pelas equações a seguir:

$$D = \frac{1 - \bar{p}_{p0}[S \exp(\Lambda \tau)]}{1 - \left( \bar{p}_{p0} + 2\sqrt{\frac{(2\Omega)\Delta S}{\Delta S + 1}} \right) (S \exp(\Lambda \tau))} \quad (3.85.a)$$

$$\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{p}_p + \left[ 2\sqrt{\frac{2\Omega\Delta S}{\Delta S + 1}} - \bar{p}_p \right] D \exp\left(\tau\sqrt{\frac{2\Omega\Delta S}{\Delta S + 1}}\right)}{1 - D \exp\left(\tau\sqrt{\frac{2\Omega\Delta S}{\Delta S + 1}}\right)} \quad (3.85.b)$$

- Caso-teste 2: coagulação linear e condensação linear

Para resolver o modelo matemático representado pela Eq. (3.1.a), a técnica de transformada de Laplace com inversão numérica foi empregada.

Admitindo  $R = \alpha n(v, t)$ ,  $s(v, t) = \frac{s_0}{v^*} \exp\left(-\frac{v}{v_0}\right)$ ,  $\Delta = \frac{v^*}{v_0}$ ,  $\beta(v - \tilde{v}, v) = \beta(v + \tilde{v})$  e  $\bar{v} = \frac{v}{v_0}$ ,

$\tau = N_0 \beta_0 t$  e  $\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{n}(s, \tau)}{N_0}$ , logo

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} - [\Lambda s + M_0(\tau) - \bar{p}(s, \tau)] \frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial s} = -(M_0(\tau) + \theta) \bar{p}(s, \tau) + \frac{\Omega}{\Delta s + 1} \quad (3.86)$$

A equação do momento de ordem zero  $M_0(t)$  e de primeira ordem  $M_1(t)$  para essa solução foi proposta por PETERSON *et al.* (1978) as quais estão descritas abaixo.

$$\frac{d\tilde{M}_0(\tau)}{d\tau} = -\tilde{M}_0(\tau)(\tilde{M}_1(\tau) + \theta) + \Omega \quad (3.87)$$

$$\frac{d\tilde{M}_1(\tau)}{d\tau} = -(\Lambda - \theta)\tilde{M}_1(\tau) + \Omega \quad (3.88)$$

em  $\tau = 0$  o momento  $\tilde{M}_0 = \tilde{M}_1 = 1$ ;

Para  $\Omega = \theta = 0$

Utilizando a consideração acima e aplicando a transformada de Laplace a equação resultante, a solução é semelhante a Eq. (3.17).

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} - [\Lambda s + M_0(\tau) - \bar{p}(s, \tau)] \frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial s} = -M_1(\tau) \bar{p}(s, \tau) \quad (3.89)$$

$$\tilde{M}_1(\tau) = \exp(\Lambda \tau) \quad (3.90)$$

$$\tilde{M}_0(\tau) = \exp\left[\frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda}\right] \quad (3.91)$$

Utilizando a solução para o caso-teste 2 proposto por RAMABHADRAN *et al.* (1976), a equação resultante é

$$\bar{p}(s, \tau) = -\frac{\exp(\tau\Lambda) \exp\left[\frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda}\right]}{2 \left\{1 - \exp\left[\frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda}\right]\right\}} \left(\sqrt{S^2 + B^2} - S\right) \quad (3.92)$$

onde;

$$B = 2 \exp(-\tau\Lambda) \left\{1 - \exp\left[\frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda}\right]\right\} \quad (3.93)$$

$$b = \exp(-\tau\Lambda) \left\{2 - \exp\left[\frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda}\right]\right\} \quad (3.94)$$

Para  $\Omega = 0 \rightarrow \theta = 1$

A Eq. (85) torna-se

$$\frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial \tau} - [\Lambda s + M_0(\tau) - \bar{p}(s, \tau)] \frac{\partial \bar{p}(s, \tau)}{\partial s} = -[M_0(\tau) + \theta] \bar{p}(s, \tau) \quad (3.95)$$

$$\tilde{M}_1(\tau) = \exp[(\Lambda - \theta)\tau] \quad (3.96)$$

$$\tilde{M}_0(\tau) = \exp\left\{-\tau\theta + \frac{1 - \exp[\tau(\Lambda - \theta)]}{\Lambda - \theta}\right\} \quad (3.97)$$

Utilizando a solução para o caso-teste 2 proposto por RAMABHADRAN *et al.* (1976), a equação resultante é

$$\bar{p}(s, \tau) = - \frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] \exp\left(\frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{(\theta - \Lambda)}\right)}{2 \left\{1 - \exp\left(\frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{(\theta - \Lambda)}\right)\right\}} (\sqrt{S^2 + B^2} - S) \quad (3.98)$$

onde;

$$B = 2 \exp(-\tau\Lambda) \left\{1 - \exp\left(\frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{\theta - \Lambda}\right)\right\} \quad (3.99)$$

$$b = \exp(-\tau\Lambda) \left\{2 - \exp\left(\frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{\theta - \Lambda}\right)\right\} \quad (3.100)$$

### 3.3 – RESUMOS DAS SOLUÇÕES

#### 3.3.1 - Modelos propostos por RAMABHADRAN *et al.* (1976)

- Caso teste 1

$$\bar{n}(s, t) = \frac{(N_0 / v_0)(1-T)^2 \exp[-2\Lambda T / (1-T)]}{s + \frac{1-T}{v_0} \exp[-2\Lambda T / (1-T)]} \quad (3.13)$$

- Caso teste 2

$$\bar{n}(s,t) = \frac{2(1-T)(N_0/v_0) \exp\left[\frac{-T}{\Lambda(1-T)}\right]}{S + \sqrt{S^2 - \left[\frac{2(1-T)}{v_0} \sqrt{1-\omega}\right]^2}} \quad (3.27.b)$$

### 3.3.2 - Modelos propostos por GELBARD e SEINFELD (1978)

- Caso teste 1

$$\bar{n}(s,t) = \frac{4N_0}{(2 + N_0\beta_0 t)^2 \left[ s + \frac{2}{v_0(2 + N_0\beta_0 t)} \right]} \quad (3.37.b)$$

- Caso teste 2

$$\bar{n}(S,T) = \frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left[ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right] \quad (3.52.e)$$

- Caso teste 3

$$\bar{n}(S,\tilde{T}) = -\frac{\tilde{T}N_0 \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}v_0} \left\{ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right\} \quad (3.62.d)$$

- Caso teste 4

$$\bar{n}(s,t) = \frac{4(N_0/v_0)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2 \exp(\sigma t) \left[ s + \frac{2 \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0} \right]} \quad (3.65)$$

- Caso teste 5

$$D = \frac{(\bar{p}_0 - \bar{p}_{p0})}{\bar{p}_0 - \bar{p}_{p0} + 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}}} \quad (3.74.b)$$

$$\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{p}_p + \left[ 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} - \bar{p}_p \right] D \exp\left( \tau \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)}{1 - D \exp\left( \tau \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)} \quad (3.75)$$

### 3.3.3 - Modelos propostos por PETERSON *et al.* (1978)

- Caso-teste 1: coagulação constante e condensação linear

Para  $\Omega = \theta = 0$

$$\bar{n}(s, t) = \frac{(N_0 / v_0)(1-T)^2 \exp[-2\Lambda T / (1-T)]}{s + \frac{1-T}{v_0} \exp[-2\Lambda T / (1-T)]} \quad (3.13)$$

Para  $\Omega = 0$  e  $\theta = 1$

$$\bar{p}(S, \tau) = \frac{4\exp(\tau)}{(3\exp(\tau) - 1)[2\exp(\tau) + (3\exp(\tau) - 1)S \exp(\Lambda \tau)]} \quad (3.81)$$

Para  $\Omega = 1$  e  $\theta = 1$

$$D = \frac{1 - \bar{p}_{p0}[S \exp(\Lambda \tau)]}{1 - \left( \bar{p}_{p0} + 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right) (S \exp(\Lambda \tau))} \quad (3.83.b)$$

$$\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{p}_p + \left[ 2\sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} - \bar{p}_p \right] D \exp\left( \tau \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)}{1 - D \exp\left( \tau \sqrt{\frac{(\theta^2 + 2\Omega)\Delta S + \theta^2}{\Delta S + 1}} \right)} \quad (3.84)$$

Para  $\Omega = 1$  e  $\theta = 0$

$$D = \frac{1 - \bar{p}_{p0}[S \exp(\Lambda \tau)]}{1 - \left( \bar{p}_{p0} + 2\sqrt{\frac{(2\Omega)\Delta S}{\Delta S + 1}} \right) (S \exp(\Lambda \tau))} \quad (3.85.a)$$

$$\bar{p}(s, \tau) = \frac{\bar{p}_p + \left[ 2\sqrt{\frac{2\Omega\Delta S}{\Delta S + 1}} - \bar{p}_p \right] D \exp\left( \tau\sqrt{\frac{2\Omega\Delta S}{\Delta S + 1}} \right)}{1 - D \exp\left( \tau\sqrt{\frac{2\Omega\Delta S}{\Delta S + 1}} \right)} \quad (3.85.b)$$

- Caso-teste 2: coagulação linear e condensação linear

Para  $\Omega = \theta = 0$

$$\bar{p}(s, \tau) = - \frac{\exp(\tau\Lambda) \exp\left[ \frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda} \right]}{2 \left\{ 1 - \exp\left[ \frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda} \right] \right\}} \left( \sqrt{S^2 + B^2} - S \right) \quad (3.92)$$

$$B = 2 \exp(-\tau\Lambda) \left\{ 1 - \exp\left[ \frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda} \right] \right\} \quad (3.93)$$

$$b = \exp(-\tau\Lambda) \left\{ 2 - \exp\left[ \frac{1 - \exp(\tau\Lambda)}{\Lambda} \right] \right\} \quad (3.94)$$

Para  $\Omega = 0 \rightarrow \theta = 1$

$$\bar{p}(s, \tau) = - \frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] \exp\left( \frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{(\theta - \Lambda)} \right)}{2 \left\{ 1 - \exp\left( \frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{(\theta - \Lambda)} \right) \right\}} \left( \sqrt{S^2 + B^2} - S \right) \quad (3.98)$$

$$B = 2 \exp(-\tau\Lambda) \left\{ 1 - \exp\left( \frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{\theta - \Lambda} \right) \right\} \quad (3.99)$$

$$b = \exp(-\tau\Lambda) \left\{ 2 - \exp\left( \frac{\exp[\tau(\Lambda - \theta)] - 1}{\theta - \Lambda} \right) \right\} \quad (3.100)$$

## CAPÍTULO 4

### ANÁLISE DOS RESULTADOS PARA O PROBLEMA DIRETO

Para a solução dos modelos matemático, aplicou-se a técnica da transformada de Laplace nas equações diferenciais parciais em relação ao volume (com o coeficiente de coagulação constante  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$  e variável  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta(v + \tilde{v})$ ). Além do método das características, a solução de Riccati foi utilizada para a solução do modelo utilizando remoção e nucleação de partículas. Para este fim, foram desenvolvidos códigos computacionais em linguagem Fortran 90/95, os quais foram executados em um microcomputador com processador Intel (R) CORE i3 de 2.13 GHz do Laboratório de Simulação de Processos da FEQ/ITEC/UFPA.

Para a solução da inversão numérica da transformada de Laplace utilizou-se a subrotina DINLAP da biblioteca IMSL (1991), a qual usa o algoritmo proposto de K. S. CRUMP (1976), porém melhorado por HOOG *et al.* (1982), com tolerância igual ou maior que  $10^{-4}$ . Esta subrotina é apropriada para a solução de problemas de inversão da transformada de Laplace, como é o caso no presente estudo. Em alguns casos, utilizou-se a solução analítica para comparar com os resultados obtidos com a subrotina DINLAP.

Para a obtenção das curvas publicadas na literatura, utilizou-se o softwear GetData Graph Digitalizer versão 2.24 e os pontos obtidos foram reproduzidos utilizando o softwear Grapher 8.

#### 4.1 ANÁLISE DOS MODELOS PROPOSTOS POR RAMABHADRAN *et al.* (1976) PARA AEROSSÓIS

A fim de ilustrar o comportamento dos resultados para solução analítica e solução por inversão numérica via transformada de Laplace apresentam-se gráficos, e os resultados obtidos no presente trabalho foram comparados com de RAMABHADRAN *et al.*, 1976 que usou a solução analítica. Na solução do modelo, foram utilizadas duas hipóteses mostradas na Tabela 4.1, as quais são discutidas a seguir, e seus resultados mostrados nas Figuras 4.1 a 4.6. Em todos os casos a relação da taxa de condensação

pela taxa de coagulação ( $\Lambda$ ) considera as seguintes variações  $\Lambda = 0,1$ ,  $\Lambda = 1,0$ ,  $\Lambda = 10,0$  e admitindo  $N_0 = v_0 = 1$ .

**Tabela 4.1:** Coeficientes e taxas usados nos dois casos-testes

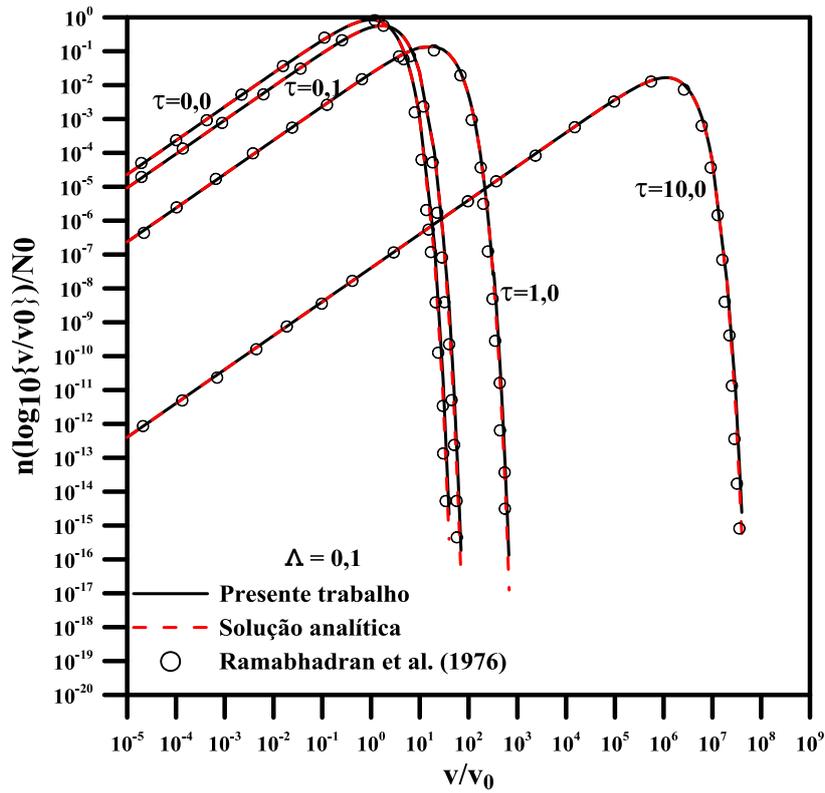
Caso teste	$\beta(v, \bar{v})$	$I_v$	$S_v(n_v, v, t)$
1	$\beta_0$	$\sigma_1 v$	0
2	$\beta_1(v + \bar{v})$	$\sigma_1 v$	0

Nas Figuras 4.1 a 4.3 são apresentados os resultados da transformada de Laplace com solução analítica e solução por inversão numérica (utilizando a subrotina DINLAP) obtidas no presente trabalho, com o tempo variando  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,1$ ,  $\tau = 1,0$ ,  $\tau = 10,0$  e número de termos igual a 81. O coeficiente de coagulação usado foi constante  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$  e comparados com os dados publicados por RAMABHADRAN *et. al* (1976) para o caso-teste 1.

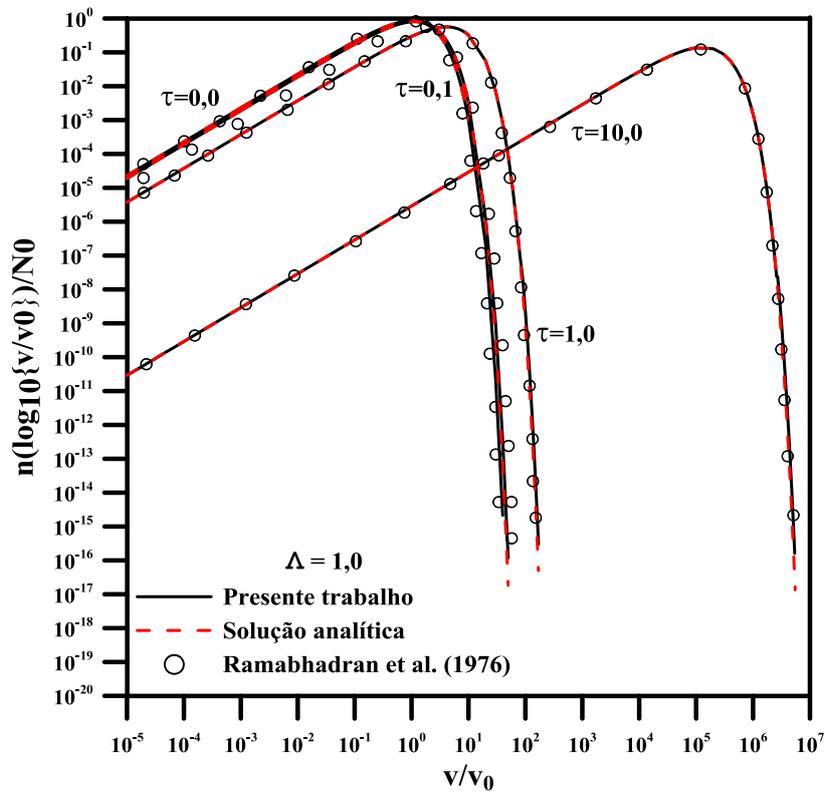
Na Figura 4.1 são apresentados os resultados para  $\Lambda = 0,1$  (taxa de condensação dez vezes menor que a taxa de coagulação). Nota-se graficamente que os resultados para a solução com inversão numérica da transformada de Laplace têm excelente concordância com a solução analítica e os dados publicados por RAMABHADRAN *et al.* (1976). Nota-se, também, que no início do processo a função densidade de tamanho da partícula aumenta em função do surgimento de nanopartículas, porém com os fenômenos da nucleação, colisão e conseqüente crescimento de partículas a função densidade de tamanho de partículas é bastante reduzida. Esse fenômeno é explicado pelo fato de partículas menores se chocarem para formar corpos maiores e dessa forma o corpo em questão cresce diminuindo assim a densidade de partículas inicial.

Os resultados para  $\Lambda = 1,0$  (taxa de condensação igual a taxa de coagulação) são apresentados na Figura 4.2. Observa-se uma excelente concordância entre os resultados publicados graficamente por RAMABHADRAN *et. al.* (1976).

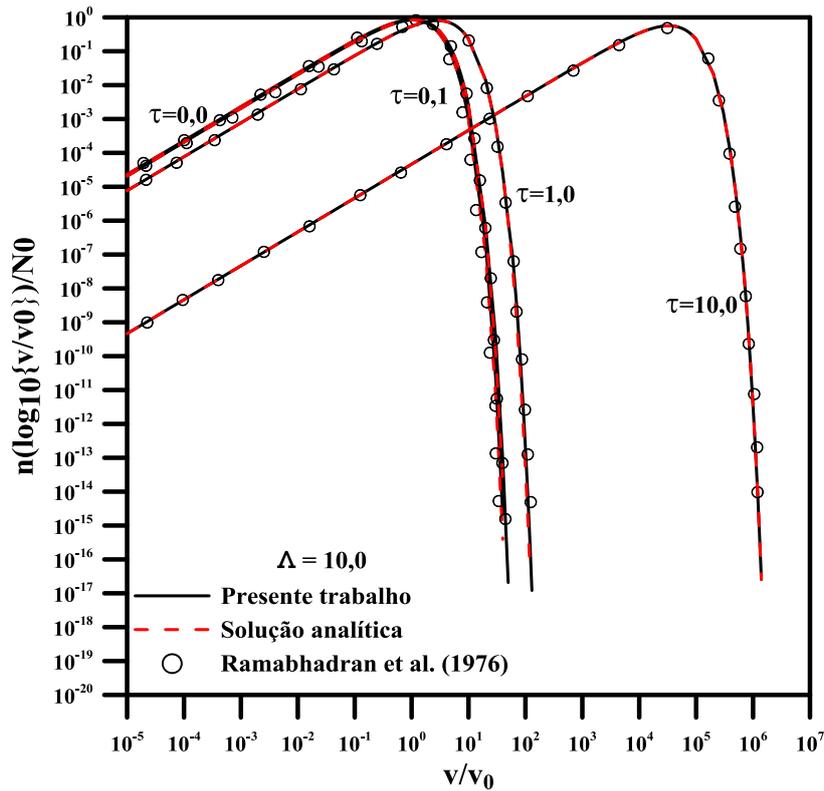
São apresentados na Figura 4.3 os resultados para  $\Lambda = 10,0$  (taxa de condensação dez vezes maior que a taxa de coagulação), a análise para essa figura é semelhante ao reportado para a Figura 4.2.



**Figura 4.1** - Comparação da densidade de população obtidos no presente trabalho com os publicados por RAMABHADRAN *et. al* (1976) para  $\Lambda = 0,1$ .



**Figura 4.2** - Comparação da densidade de população obtidos no presente trabalho com os publicados por RAMABHADRAN *et. al* (1976) para  $\Lambda = 1,0$ .



**Figura 4.3** - Comparação da densidade de população obtidos no presente trabalho com os publicados por RAMABHADRAN *et. al* (1976) para  $\Lambda = 10,0$ .

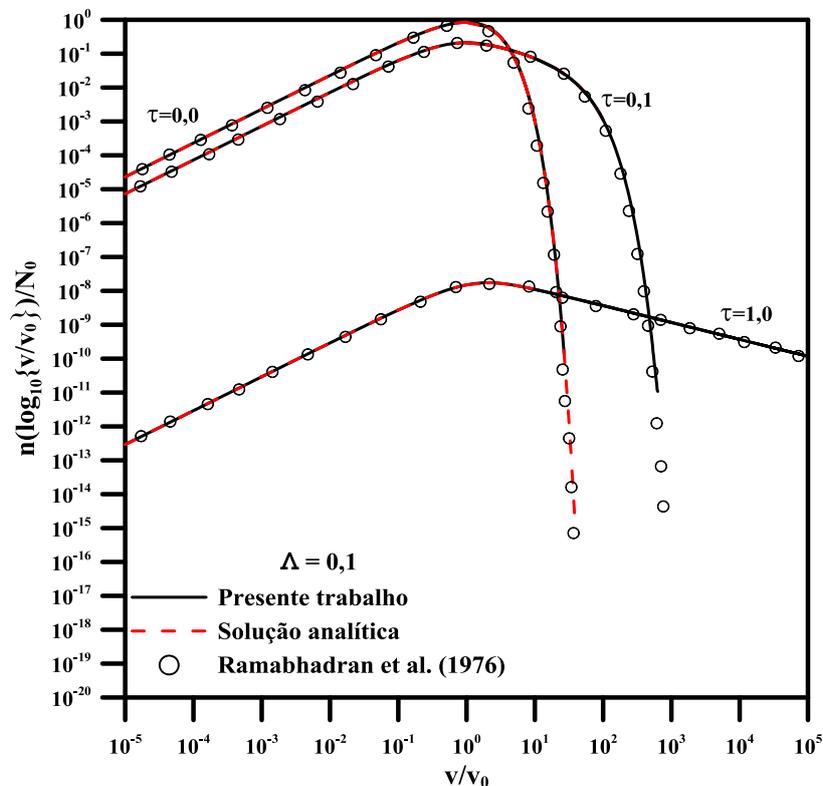
Nota-se nas Figuras 4.1 a 4.3 que aumentando a taxa de condensação em relação à taxa de coagulação ( $\Lambda$ ) o volume médio ( $V/V_0$ ) diminui, esse fato é observado com maior nitidez no tempo  $\tau = 10,0$ . Para  $\Lambda = 0,1$  a coagulação ocorre rapidamente, tendendo ao espalhamento da extremidade superior do espectro do tamanho de aerossol.

Nas figuras 4.4 a 4.6 são mostrados as comparações dos resultados da transformada de Laplace com solução analítica e por inversão numérica obtidos no presente trabalho utilizando a subrotina DINLAP com o tempo variando  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,1$ ,  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ . O coeficiente de coagulação usado foi variável  $[\beta(v, \tilde{v}) = \beta(v + \tilde{v})]$  e os resultados foram comparados com os dados publicados por RAMABHADRAN *et. al.* (1976) para o caso-teste 2. A função BSI1 (resolve a função de Bessel modificada de primeiro tipo e ordem um) da biblioteca do IMSL 91 e a expansão da função de Bessel modificada de primeiro tipo de ordem um, apresentam dificuldades na solução da função de Bessel para valores iguais ou superiores a  $10^3$ . A função BSI1 resolve para valores até 709, acima desse valor ela apresenta erro no valor absoluto enquanto os valores obtidos via expansão da função não conseguem representar os valores publicados por RAMABHADRAN *et. al.* (1976).

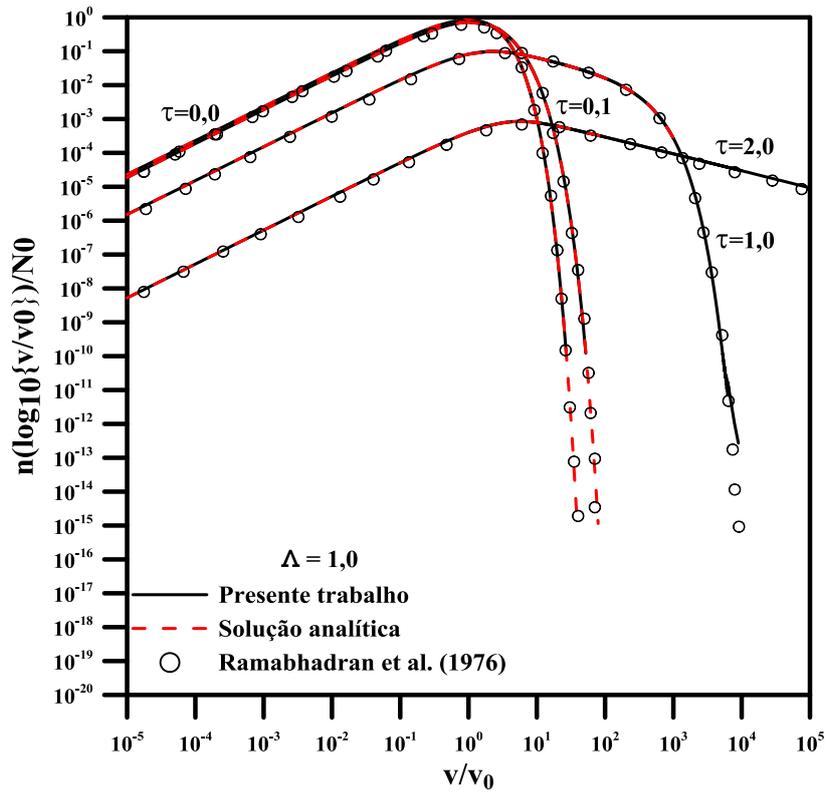
Na Figura 4.4 observa-se os resultados para  $\Lambda = 0,1$ ,  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,1$ , e  $\tau = 1,0$ . Nota-se que os resultados para a solução com inversão numérica da transformada de Laplace têm a mesma tendência que a solução analítica e os dados publicados por RAMABHADRAN *et. al.* (1976). Porém, os valores obtidos com a subrotina DINLAP e solução analítica do presente trabalho, não conseguiram acompanhar os valores publicados na literatura em sua totalidade e teve seu limite em  $10^{-11}$  em relação a densidade de partículas, em  $\tau = 0,1$  a solução analítica divergiu da solução por inversão numérica e RAMABHADRAN *et. al.* (1976), em  $\tau = 1,0$  a solução analítica não conseguiu acompanhar toda extensão da dimensão na relação  $v/v_0$ .

São apresentados na Figura 4.5 os resultados para  $\Lambda = 1,0$ ,  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,1$ ,  $\tau = 1,0$ , e  $\tau = 2,0$ . Em  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,1$  a solução por inversão numérica tem seu limite em  $10^{-10}$ , para  $\tau = 1,0$  a solução analítica e a solução por inversão numérica tiveram seus limites em  $10^{-5}$  e  $10^{-12}$  respectivamente em relação a densidade de partículas.

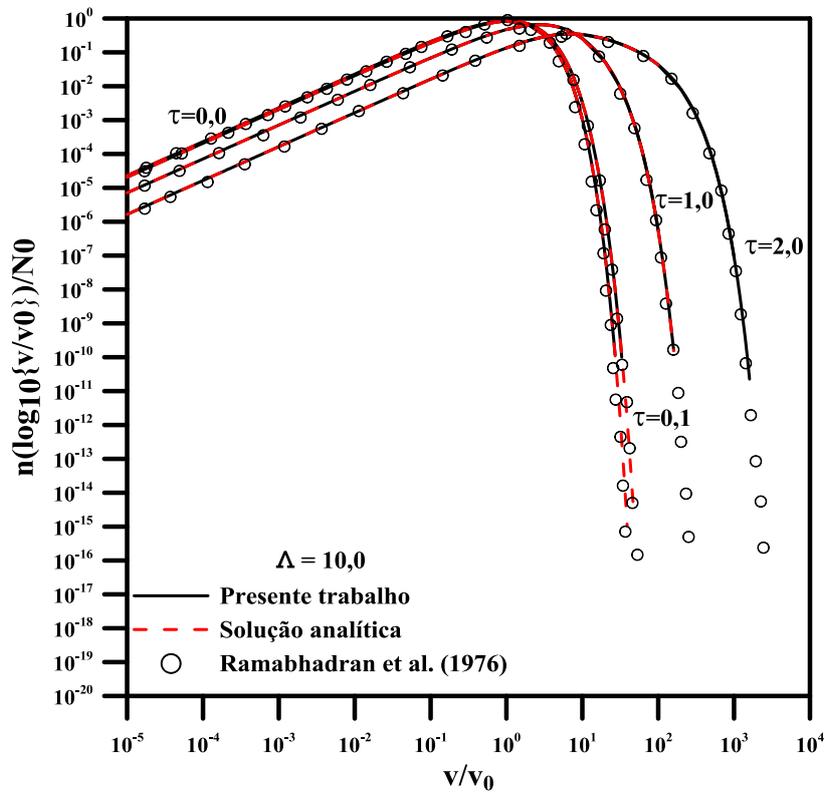
Na Figura 4.6 são comparados os resultados para  $\Lambda = 10,0$ ,  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,1$ ,  $\tau = 1,0$ , e  $\tau = 2,0$  a solução por inversão numérica tem seu limite em  $10^{-10}$  em relação a densidade de partículas, para todos os tempos estudados.



**Figura 4.4** - Comparação da densidade de população obtidos no presente trabalho com os publicados por RAMABHADRAN *et. al.* (1976) para  $\Lambda = 0,1$ .



**Figura 4.5** - Comparação da densidade de população obtidos no presente trabalho com os publicados por RAMABHADRAN *et al.* (1976) para  $\Lambda = 1,0$ .



**Figura 4.6** - Comparação da densidade de população obtidos no presente trabalho com os publicados por RAMABHADRAN *et al.* (1976) para  $\Lambda = 10,0$ .

Observa-se nas Figuras 4.4 a 4.6 que o volume é fortemente dependente da relação taxa de condensação pela à taxa de coagulação ( $\Lambda$ ) para a distribuição do tamanho de aerossol. Para a taxa de coagulação dependente do volume, as partículas tendem a coagular mais rapidamente a medida que crescem.

#### 4.2 - ANÁLISE DOS MODELOS PROPOSTOS POR GELBARD E SEINFELD (1978) PARA SISTEMAS PARTICULADOS

A fim de ilustrar os resultados da solução analítica e solução por inversão numérica via transformada de Laplace para distribuição de densidade foram analisados cinco casos-testes, nos quais utilizou-se o número de termos igua a 81 e mostrados na tabela 4.2.

**Tabela 4.2:** Coeficientes e taxas usados nos cinco casos-testes

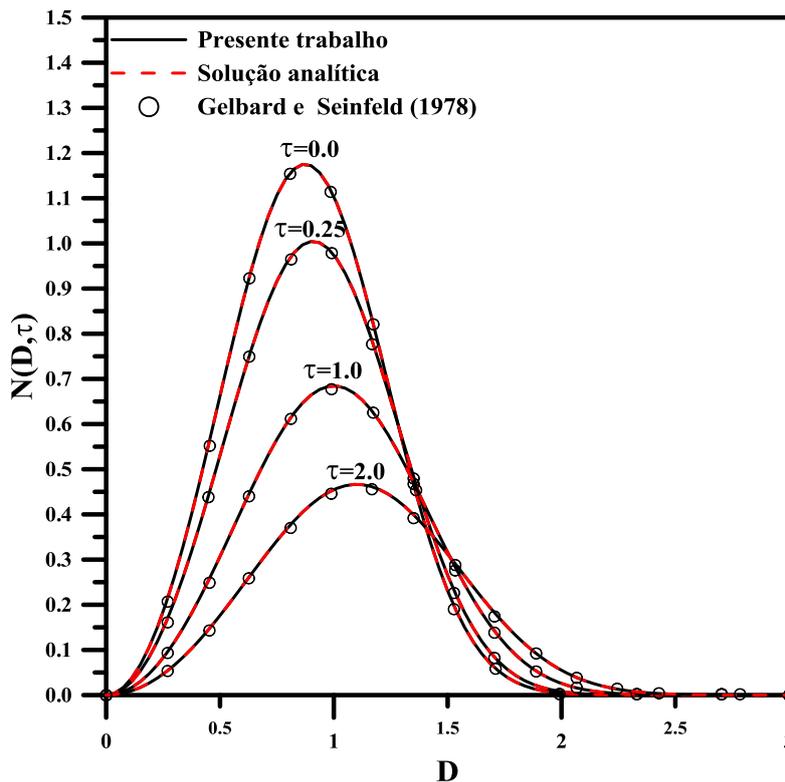
Caso teste	$\beta(v, \bar{v})$	$I_v$	$S_v(n_v, v, t)$
1	$\beta_0$	0	0
2	$\beta(v + \bar{v})$	0	0
3	$\beta(v + \bar{v})$	0	$-R_0 n_v$
4	$\beta_0$	$\sigma_1 v$	0
5	$\beta_0$	0	$-R_0 n_v + S_0 \exp(-V/V^*)/V^*$

Utilizou-se a transformada de Laplace com inversão numérica para os casos de coagulação pura com coeficiente de coagulação constante (caso-teste 1), coagulação pura com o coeficiente de coagulação variável (caso-teste 2), coagulação pura com coeficiente de coagulação variável e taxa remoção de partículas (caso-teste 3), condensação e coagulação com coeficiente de coagulação constante (caso-teste 4), e coagulação com coeficiente de coagulação constante e taxa de remoção e nucleação (caso-teste 5). Os resultados obtidos no presente trabalho foram comparados com os resultados da solução via elementos finitos publicados na literatura por GELBARD e SEINFELD (1978). Na solução do modelo, foram utilizados cinco casos-testes os quais serão discutidos a seguir e seus resultados são mostrados nas Figuras 4.7 a 4.13 com as variações de tempo  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$ ,  $\tau = 2,0$ ,  $\tau = 10,0$ , e  $\tau = 20,0$ .

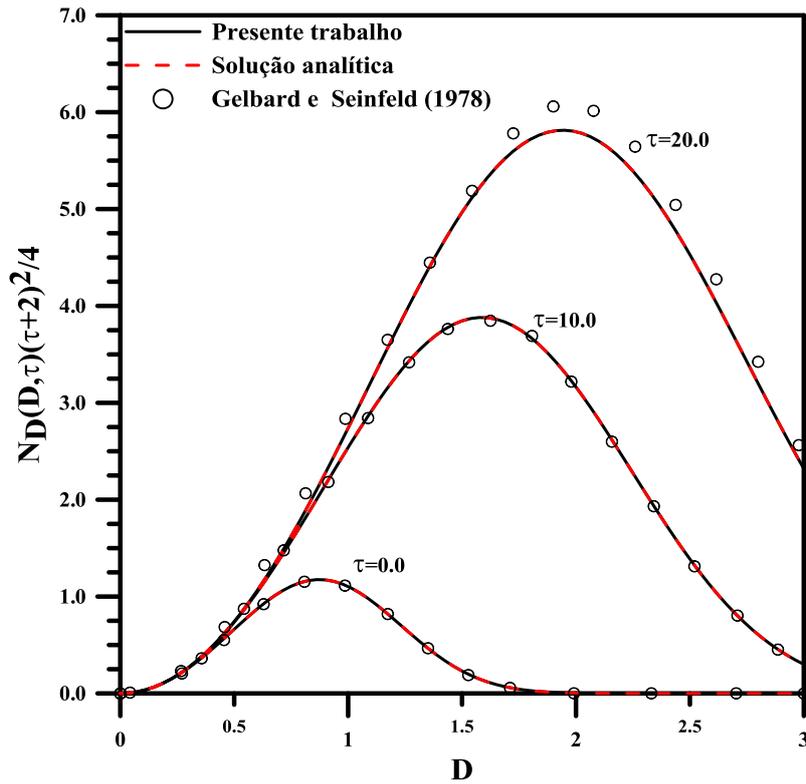
Para o caso-teste 1 que está representado pelas figuras 4.7 a 4.9 os tempos analisados foram os mencionados acima e admitindo  $N_0 = D_0 = 1$ . Na Figura 4.7

observa-se que os resultados para a solução com inversão numérica da transformada de Laplace têm excelente concordância quando comparados graficamente com os gerados pela solução analítica e os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978), para os tempos  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ . Nota-se também que a função densidade de distribuição de tamanho diminui quando o tempo aumenta e consequentemente o diâmetro também aumenta, isso ocorre devido a colisão entre partículas, para formar corpos maiores.

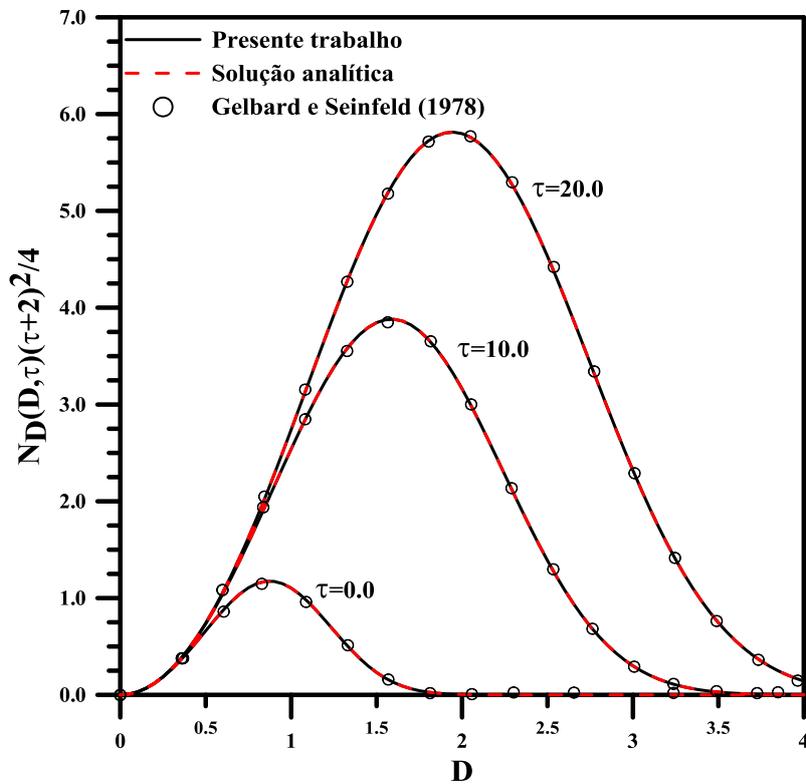
Nas Figuras 4.8 e 4.9, nota-se que para os tempos  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 10,0$  e  $\tau = 20,0$  os resultados obtidos no presente trabalho têm excelente concordância gráfica, quando comparados com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978). Para essa hipótese a função densidade de distribuição de tamanho foi multiplicada por  $(\tau + 2)^2 / 4$ . Observa-se também, que a função densidade de distribuição de tamanho aumenta quando o tempo aumenta e consequentemente o diâmetro também aumenta, isso ocorre devido a colisão entre partículas, para formar corpos maiores.



**Figura 4.7** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978)



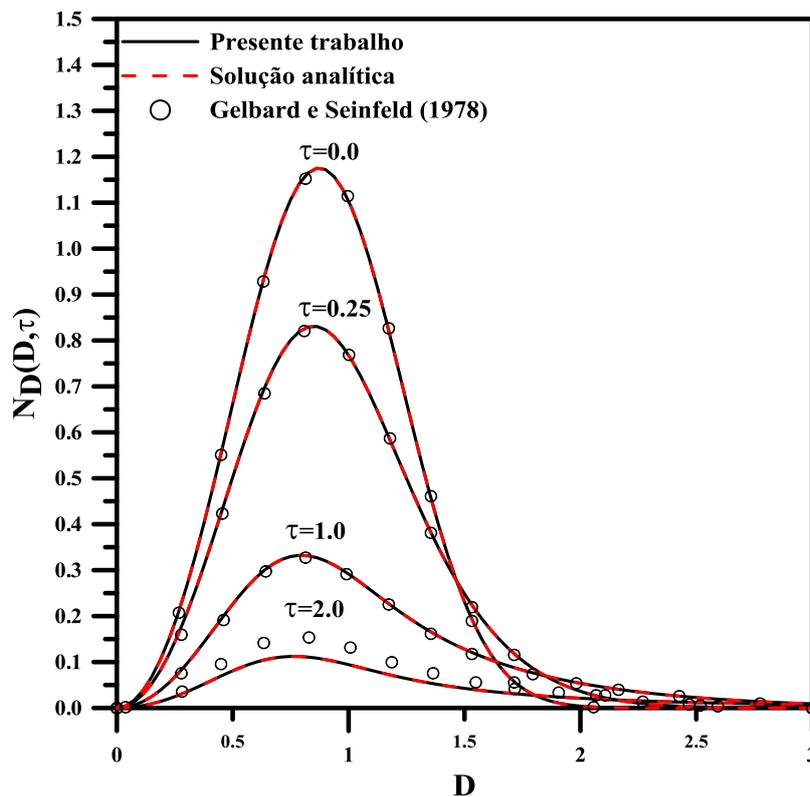
**Figura 4.8** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978)



**Figura 4.9** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).

Para o caso-teste 2 que está representado pela figura 4.10, também considerou-se  $N_0 = D_0 = 1$ , e os tempos analisados foram  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ . Na Figura 4.10 observa-se os resultados para a solução com inversão numérica e solução analítica da transformada de Laplace obtidos no presente trabalho têm excelente concordância gráfica para todos os tempos analisados, esses valores foram comparados com os obtidos via elementos finitos publicados por GELBARD e SEINFELD (1978). Porém, para o tempo  $\tau = 2,0$  houve divergência entre as curvas obtidas no presente trabalho com a da literatura e isso é devido a metodologia de solução proposta por GELBARD e SEINFELD (1978).

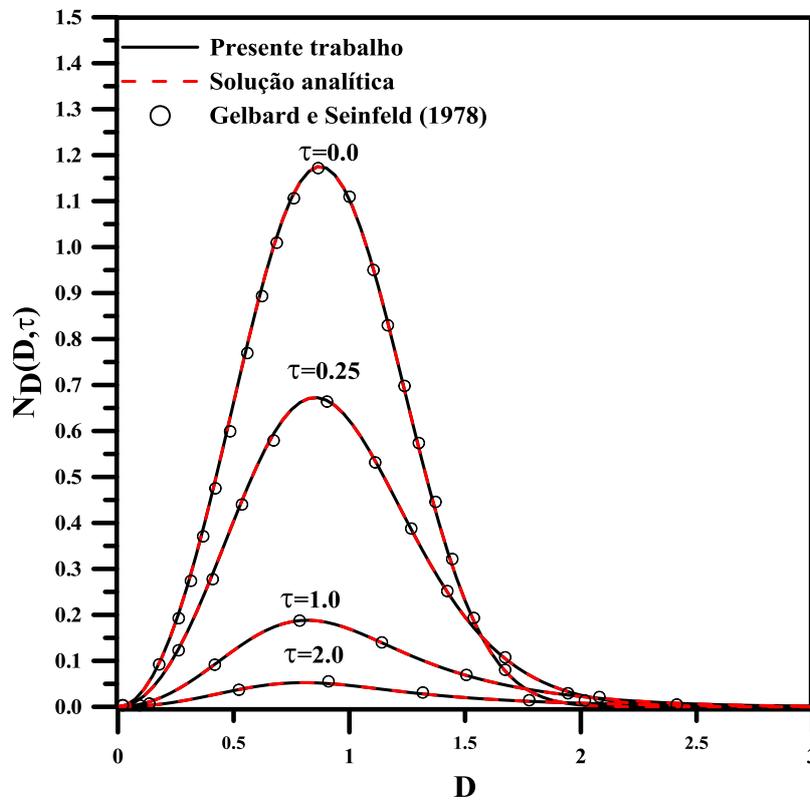
Para o caso teste 2 observa-se que a função densidade de partículas diminui quando o tempo aumenta devido a colisão entre partículas e aumento do diâmetro das mesmas.



**Figura 4.10** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).

Para o caso-teste 3 que está representado pela Figura 4.11 os tempos analisados foram  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$ ,  $\tau = 2,0$  e  $N_0 = v_0 = 1$ . Na Figura 4.11 observa se que os resultados no presente trabalho apresentam excelente concordância quando comparados

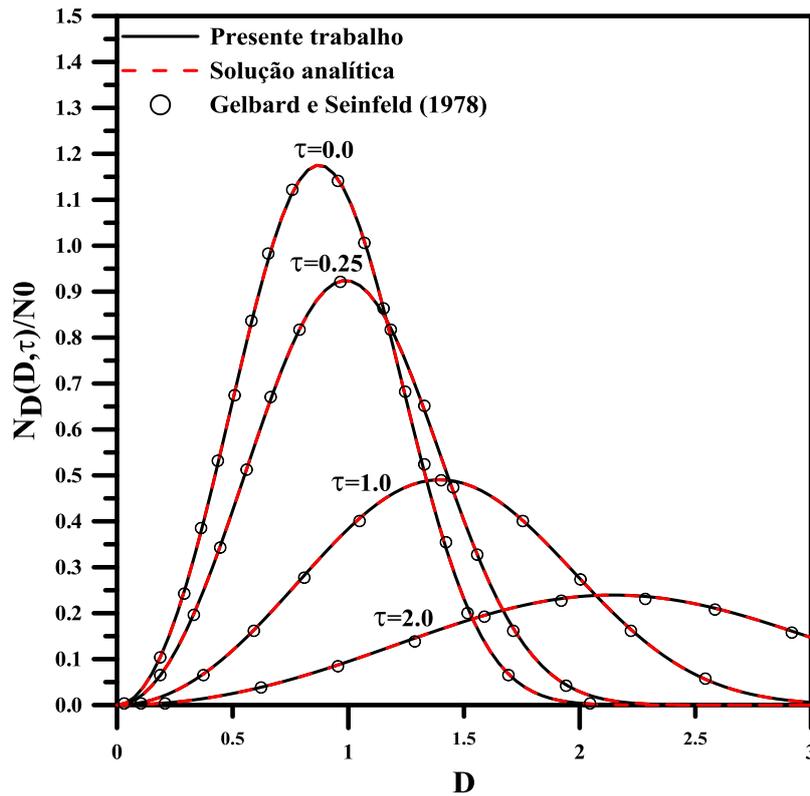
graficamente com os obtidos e publicados por GELBARD e SEINFELD (1978). A análise física para esse caso-teste é semelhante ao anterior.



**Figura 4.11** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).

Para o caso-teste 4 o qual é mostrado na Figura 4.12 considerou-se  $N_0 = v_0 = 1$  e os tempos analisados foram  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ . Na Figura 4.12 observa-se que os resultados para a solução com inversão numérica da transformada de Laplace e analítica, avaliados no presente trabalho têm excelente concordância quando comparados graficamente com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).

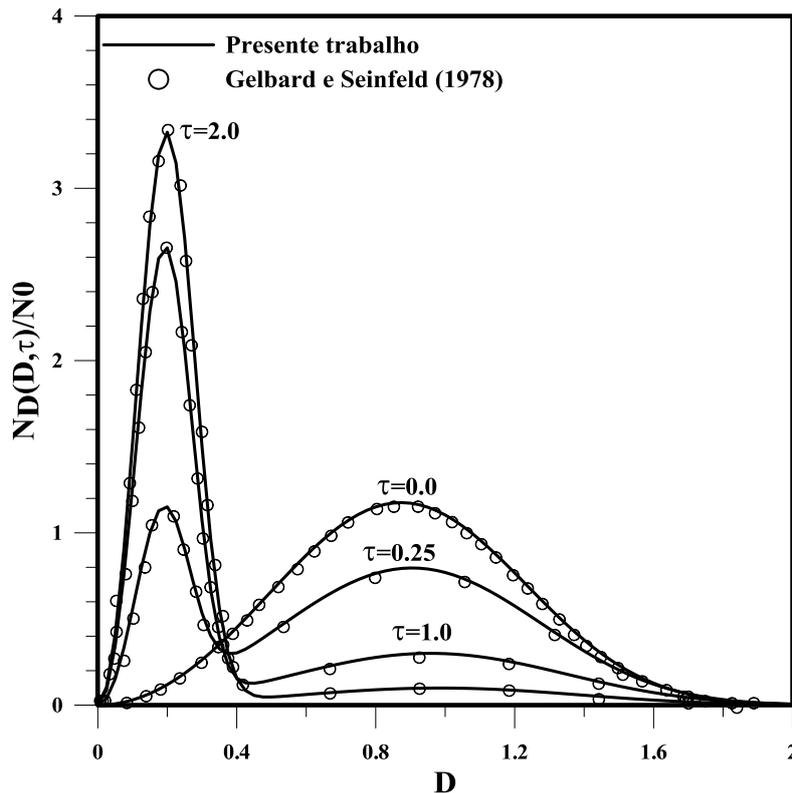
Para esse caso-teste observa-se que a função densidade de partículas diminui quando o tempo aumenta e conseqüentemente o diâmetro também aumenta, isso ocorre devido a colisão entre partículas, para formar corpos maiores. Nota-se também que para esse caso-teste o aumento do diâmetro foi maior, isso é devido o modelo levar em consideração a taxa de crescimento.



**Figura 4.12** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).

Para o caso-teste 5 que está representado pela Figura 4.13 os tempos analisados foram  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ . Na Figura 4.13 nota-se que os resultados para a solução com inversão numérica obtidos no presente trabalho quando comparados graficamente com os obtidos numericamente por elementos finitos por GELBARD e SEINFELD (1978), têm excelente concordância em todos os tempos analisados.

Observa-se na Figura 4.13 que a inclusão da taxa de nucleação provocou picos na função densidade de distribuição de tamanho, um na faixa reduzida na escala de tamanho o qual diminui rapidamente em função da taxa de coagulação e a segunda tem um espalhamento maior e diminui mais suavemente, nota-se também uma redução na distribuição de tamanho final das partículas.



**Figura 4.13** - Comparação da distribuição de densidade de população geradas no presente trabalho com os publicados por GELBARD e SEINFELD (1978).

Analisando graficamente os cinco casos-teste para sistemas particulados, observou-se que a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica apresenta excelente concordância gráfica com a solução analítica e os dados publicados por GELBARD e SEINFELD (1978), via elementos finitos.

Observa-se também que, para os caso-teste 1 e 2 onde não há taxa de nucleação e remoção, a densidade de população aumenta até um certo tamanho em relação ao diâmetro e em seguida diminui devido as colisões, isto é, em decorrência do crescimento a densidade das partículas diminui. No caso-teste 3, nota-se que com a inclusão da taxa de remoção a qual essencialmente afeta o pico da função densidade de partículas, reduzidas por coagulação. Para o caso-teste 4, observa-se que a inclusão da taxa de crescimento aumentou o tamanho da partícula para os tempos estudados. Para o caso-teste 5, observa-se que o aumento na função densidade de partículas ocorre em diâmetros menores e também diminui rapidamente em função da taxa de nucleação

### 4.3 - ANÁLISE DOS MODELOS PROPOSTOS POR PETERSON *et al.* (1978) PARA COAGULAÇÃO E CONDENSAÇÃO DE AEROSSÓIS

A fim de ilustrar o comportamento dos resultados para solução analítica e solução por inversão numérica via transformada de Laplace, para distribuição de densidade foram considerados dois casos-testes, mostrados na Figura 4.3.

**Tabela 4.3:** Coeficientes e taxas usados nos dois casos-testes

Caso teste	$\beta(v, \bar{v})$	$I_v$
1	$\beta_0$	$\sigma_1 v$
2	$\beta_1(v + \bar{v})$	$\sigma_1 v$

Os casos-testes considerados são coagulação constante com condensação linear e coagulação linear com condensação linear. Os resultados obtidos no presente trabalho foram comparados graficamente com os resultados publicados na literatura por PETERSON *et al.* (1978). Na solução do modelo foram utilizadas quatro hipóteses ( $\theta = \Omega = 0$ ), ( $\theta = 1, \Omega = 0$ ), ( $\theta = 0, \Omega = 1$ ) e ( $\theta = 1, \Omega = 1$ ), as quais serão discutidas a seguir e seus resultados são mostrados nas Figuras 4.14 a 4.19 com as variações de tempo  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ .

Nas Figuras 4.14 a 4.17 são mostrados os resultados para o caso-teste 1 com coagulação constante e condensação linear para a variação de tempo acima citados.

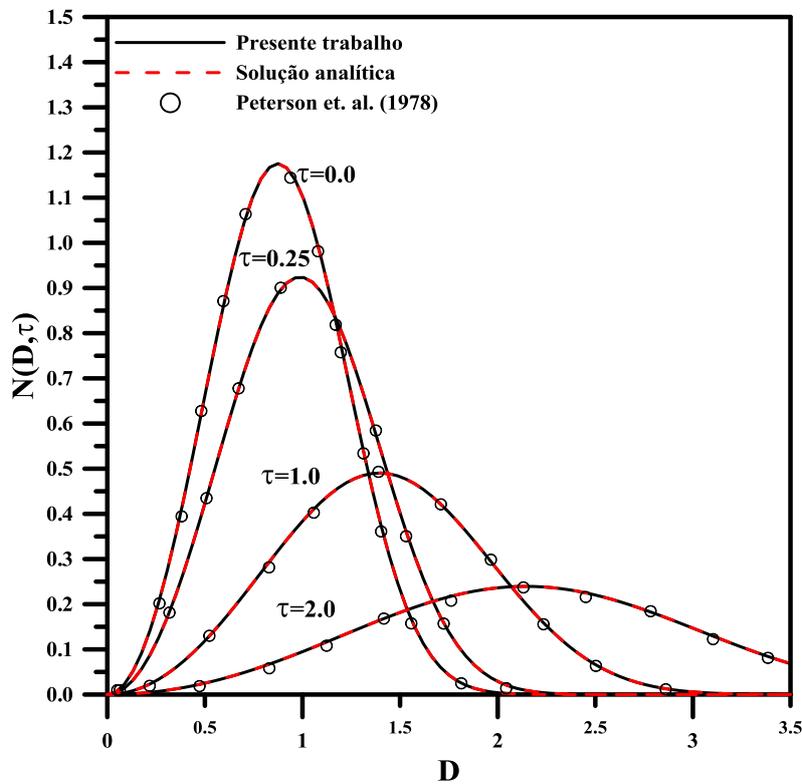
Na Figura 4.14 observa-se que os gráficos gerados no presente trabalho para todos os tempos em estudo e ( $\theta = \Omega = 0$ ), quando comparados com os publicados por PETERSON *et al.* (1978), apresentam excelente concordância. Isso demonstra que a solução por inversão numérica é uma boa ferramenta na solução deste problema. A análise para a Figura 4.14 é semelhante ao da Figura 4.12.

Verifica-se na Figura 4.15 que os resultados para a solução com inversão numérica e analítica obtidos no presente trabalho, quando comparados graficamente com os obtidos por PETERSON *et. al* (1978), apresentam excelente concordância para todos os tempos em estudo e ( $\theta = 1, \Omega = 0$ ). Isso demonstra que a solução por inversão numérica é uma boa ferramenta, também, na solução para este problema. A análise para a Figura 4.15 é semelhante ao da Figura 4.10.

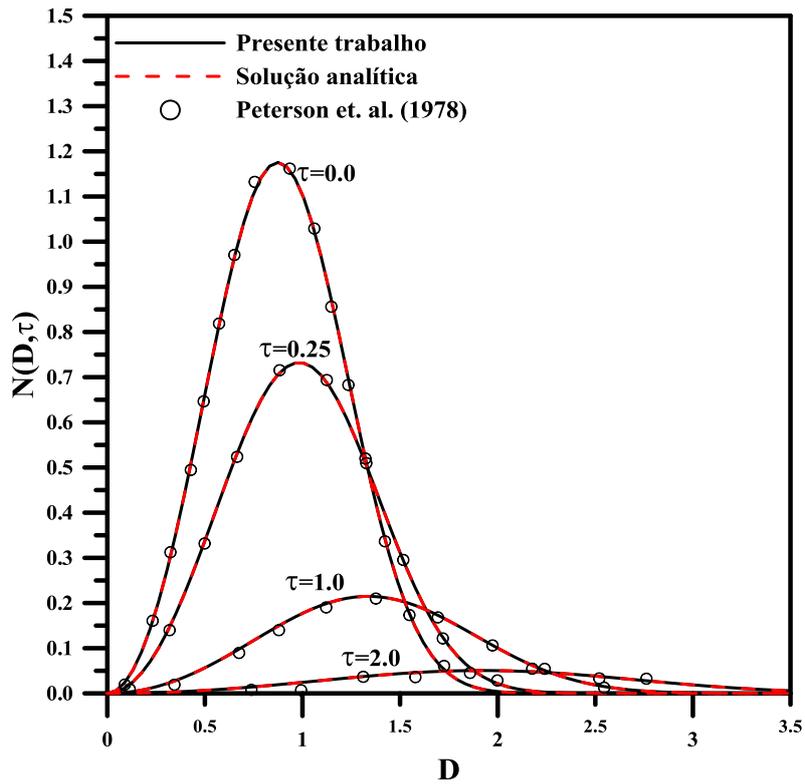
Nota-se na Figura 4.16 que os resultados para a solução com inversão numérica obtidos no presente trabalho, quando comparados graficamente com os obtidos por

PETERSON *et. al* (1978), apresentam a mesma tendência para todos os tempos em estudo e para  $\theta = 0$  e  $\Omega = 1$ . Porém divergem no pico das curvas para os tempos  $\tau = 1,0$  e  $\tau = 2,0$ . Analisando os resultados obtidos usando a subrotina DINLAP com os gerados analiticamente nos problemas anteriores, é possível afirmar que os valores gerados no presente trabalho são coerentes para a hipótese de  $\theta = 0$  e  $\Omega = 1$ , pois conseguem representar bem as soluções analíticas anteriormente obtidas. Enquanto, os resultados publicados na literatura têm solução assintótica quando  $\Omega = 1$ . A análise física é semelhante ao da Figura 4.13.

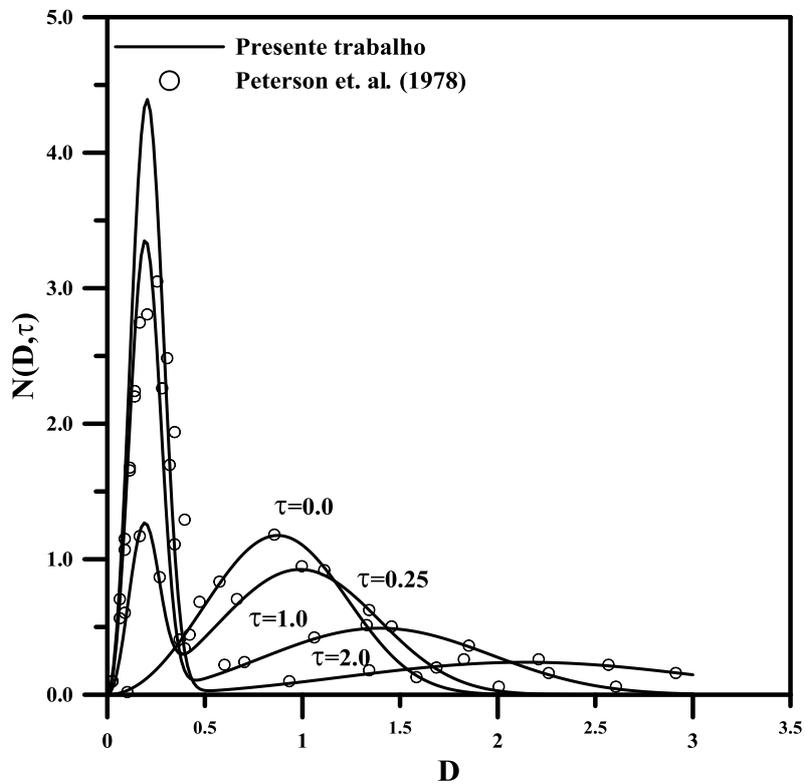
Observa-se na Figura 4.17 que os resultados para a solução com inversão numérica obtidos no presente trabalho, quando comparados com os obtidos via solução assintótica por PETERSON *et al.* (1978), apresentam a mesma tendência para todos os tempos em estudo e para  $\theta = 1$  e  $\Omega = 1$ . Porém também divergem no pico das curvas para os tempos  $\tau = 1.0$  e  $\tau = 2.0$ . Nota-se graficamente que os resultados têm a mesma tendência da Figura 4.16 e sua análise é semelhante, pois também para essa hipótese  $\Omega = 1$ , logo a solução é via equação de Riccati e não tem solução analítica, apenas assintótica. A análise física é semelhante ao da Figura 4.13.



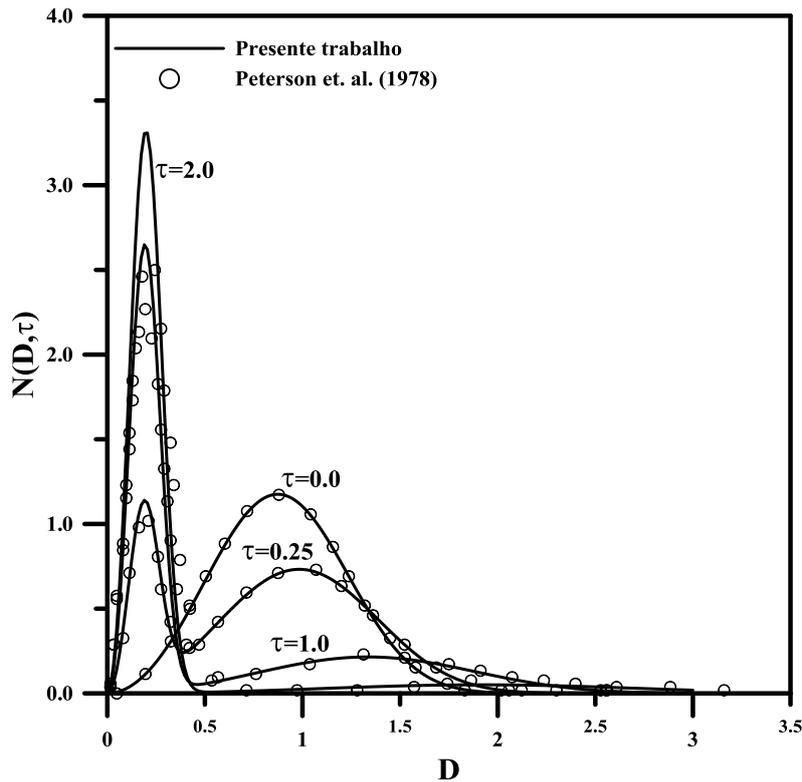
**Figura 4.14** - Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON *et. al* (1978).



**Figura 4.15** - Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON *et. al* (1978).



**Figura 4.16** - Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON *et. al* (1978).

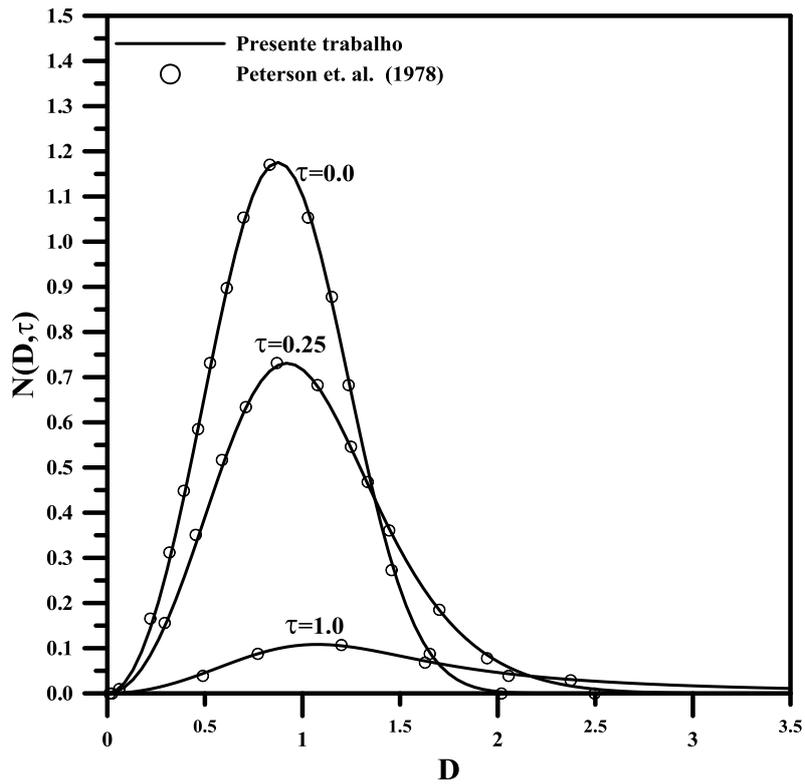


**Figura 4.17** - Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON *et. al* (1978).

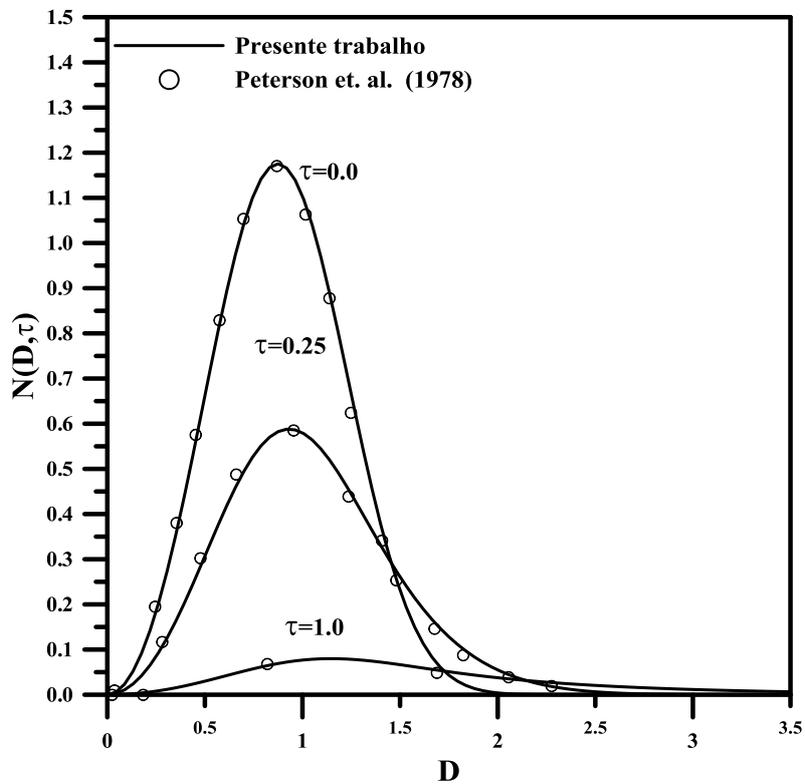
Nas Figuras 4.18 a 4.19 são mostrados os resultados para o caso-teste 2 com coagulação e condensação linear.

Na Figura 4.18 nota-se que os resultados da transformada de Laplace com inversão numérica obtidos no presente trabalho para os tempos  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$ ,  $\tau = 2,0$  e para  $\theta = e$  e  $\Omega = 0$ , quando comparados com publicados por PETERSON *et. al* (1978), os quais foram obtidos analiticamente, apresentam excelente convergência. Isso demonstra que a solução por inversão numérica é uma boa ferramenta na solução desse problema. A análise física da Figura 4.18 é semelhante o da Figura 4.10.

Na Figura 4.19 observa-se que os resultados para a solução com inversão numérica obtidos no presente trabalho para os tempos  $\tau = 0,0$ ,  $\tau = 0,25$ ,  $\tau = 1,0$ , ( $\theta = 1$ ,  $\Omega = 0$ ) e  $\Lambda = 1,1$ , quando comparados com os obtidos analiticamente por PETERSON *et. al.* (1978), apresentam excelente convergência. Isso demonstra que a solução por inversão numérica é uma boa ferramenta na solução deste problema. Utilizou-se o  $\Lambda = 1,1$  na solução deste caso-teste devido o denominador da equação (3.114) ser igual a zero quando  $\Lambda = 1,0$  e isso provoca uma indeterminação. A análise física é semelhante o da Figura 4.10.



**Figura 4.18** - Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON *et. al* (1978).



**Figura 4.19** - Comparação da distribuição de densidade de população do presente trabalho com os dados publicados por de PETERSON *et. al* (1978).

Nota-se graficamente que para sistemas particulados, a solução por inversão numérica da transformada de Laplace apresenta excelente concordância gráfica para os casos onde as taxa de remoção e nucleação são desprezíveis, pois nessas hipóteses existe solução analítica publicadas na literatura. Porém, com taxas de remoção e nucleação as soluções publicadas são aproximações assintóticas, para esses casos pode se afirmar que a solução com inversão numérica obteve bons resultados devido as comparações com outros casos que têm solução analítica.

## CAPÍTULO 5

### FILTRO DE PARTÍCULAS

O filtro de partículas é um método numérico de integração, ele é adequado para resolver problemas não lineares e não Gaussianos. Desde a década de sessenta, grande atenção tem sido devotada a estes problemas. Entretanto, somente com o aumento do poder computacional foi possível torna-lo mais usual.

Muitos problemas na ciência exigem estimativa do estado para um sistema em que mudanças ao longo do tempo usando uma sequência de medidas de ruídos são feitas sobre o sistema. Assim, equações diferenciais são usadas para modelar a evolução do sistema com o tempo, e medições são assumidos para avaliara os momentos discretos. Para a estimativa estado dinâmico, a abordagem de tempo discreto é generalizada e conveniente. (ARULAMPALAM *et al*, 2002)

O método Cadeia de Markov Monte Carlo é uma ferramenta comum para inferência Bayesiana. Infelizmente na dinâmica estabelecida quando uma sequência de distribuições posterior  $\pi_t$  é envolvida, a técnica Cadeia de Markov Monte Carlo pode ser ineficiente, pois terá de gerar uma corrida de diferentes cadeias para cada  $\pi_t$  posterior. Isto não leva em conta as gerações anteriores através de  $\pi_{t-1}$ . Alguns autores têm desenvolvido métodos mais eficientes com base em importância da amostragem e estratégia iterativa (CHOPIN, 2002).

Desde sua introdução em 1993, filtros de partículas tornaram-se uma classe muito popular de métodos numéricos para a solução de problemas de estimativa ótima em cenários não-linear e não-Gaussiano. Em comparação com os métodos de aproximação padrão, como o popular de Filtro Kalman Extendido, a principal vantagem dos métodos de partículas é que eles não dependem de qualquer técnica de linearização local ou qualquer aproximação grosseira funcional. O preço que deve ser pago por essa flexibilidade é computacional: estes métodos são computacionalmente caros. No entanto, graças à disponibilidade cada vez maior do poder computacional, estes métodos já são utilizados em aplicações em tempo real aparecendo em campos tão diversos como a engenharia química, visão computacional, econometria financeira, acompanhamento de alvo e robótica. Além disso, mesmo em situações em que não há restrições de tempo real, estes métodos podem ser uma alternativa poderosa para Cadeia de Markov Monte

Carlo (MCMC), alternativamente eles podem ser usados para projetar sistemas muito eficientes (DOUCET e JOHANSEN, 2008).

## 5.1 - AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA

O cálculo da integral na Eq. (2.35) é função da densidade posterior. Da mesma forma, toda a descrição da variável não observável  $\{\mathbf{x}_{0:t} \in \mathbf{N}\}$  é obtida da densidade posterior. Dentro do ambiente Bayesiano a distribuição posterior desempenha papel fundamental.

$$I = \int f(x_{0:t}) P(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t} \quad (5.1)$$

onde  $P(x_{0:t} | y_{1:t})$  é a distribuição posterior.

À exceção de casos lineares e Gaussianos, o cálculo da distribuição posterior e dos estimadores Bayesianos são proibitivamente complexos. Para transpor esta dificuldade o filtro de partículas adota uma abordagem baseada em simulação cuja técnica básica é denominada amostragem por importância. O objetivo é estimar a densidade de probabilidade posterior e a idéia central do filtro de partículas é representar tais densidades por conjunto de partículas.

Adota-se uma distribuição  $\pi(x_{0:t} | y_{1:t})$  denominada distribuição por importância. A amostragem será feita a partir desta distribuição e geradas amostras independentes e identicamente distribuída (i.i.d). Assim, seja a integral na Eq. (5.1), é válida a identidade:

$$I = \frac{\int f(x_{0:t}) P(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}}{\int P(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}} \quad (5.2)$$

multiplicando e dividindo a Eq. (5.2) por  $\pi(x_{0:t} | y_{1:t})$  numerador e denominador:

$$I = \frac{\int f(x_{0:t}) \frac{P(x_{0:t} | y_{1:t})}{\pi(x_{0:t} | y_{1:t})} \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}}{\int \frac{P(x_{0:t} | y_{1:t})}{\pi(x_{0:t} | y_{1:t})} \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}} \quad (5.3)$$

definindo  $w_{0:t} = \frac{P(x_{0:t} | y_{1:t})}{\pi(x_{0:t} | y_{1:t})}$  a equação resultante é:

$$I = \frac{\int f(x_{0:t}) w(x_{0:t}) \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}}{\int w(x_{0:t}) \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}} \quad (5.4)$$

onde  $w(x_{0:t})$  é denominado peso de importância. Um estimador da integral na Eq. (5.4) é dado por:

$$\hat{I}(f_t) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_{0:t}^{(i)}) w(x_{0:t}^{(i)})}{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w(x_{0:t}^{(j)})} = \sum_{i=1}^N f(x_{0:t}^{(i)}) w_t^{*(i)} \quad (5.5)$$

onde  $N$  representa o número de partículas e  $w_t^{*(i)} = \frac{w(x_{0:t}^{(i)})}{\sum_{j=1}^N w(x_{0:t}^{(j)})}$  são os pesos de

importância normalizados. O método, apesar de ser um método genérico de integração de Monte-Carlo (MC), não possui uma forma recursiva (AIUBE, 2005).

## 5.2 - AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIS)

Segundo ARULAMPALAM *et al.* (2002), o algoritmo de amostragem por importância sequencial (SIS) é um método de Monte Carlo (MC) que forma a base para a maioria dos filtros sequenciais MC desenvolvido ao longo das últimas décadas. Esta abordagem sequencial MC (SMC) é conhecida também como filtragem *bootstrap*, algoritmo de condensação, filtragem de partículas, aproximações de partículas interagindo e sobrevivência do mais apto. É uma técnica para implementação de um filtro Bayesiano recursivo por simulações MC. A idéia chave é representar a função de

densidade posterior necessária por um conjunto de amostras aleatórias com pesos associados e calcular as estimativas baseadas nessas amostras e pesos. Como o número de amostras torna-se muito grande, esta caracterização MC torna-se uma representação equivalente a descrição funcional habitual da função densidade de probabilidade (fdp) posterior, abordagens do filtro SIS é uma ótima estimativa Bayesiana.

A fim de desenvolver os detalhes do algoritmo, denotou-se uma medida aleatória  $\{x_{0:k}^i, w_k^i\}_{i=1}^{N_s}$  que caracteriza a fdp posterior  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$ , onde  $\{x_{0:k}^i, i = 0, \dots, N_s\}$  é um conjunto de pontos de apoio com pesos associados  $\{w_k^i, i = 1, \dots, N_s\}$ , e  $x_{0:k} = \{x_j, j = 0, \dots, k\}$  é o conjunto de todos os estados até o momento k. Os pesos são normalizados tal que  $\sum_i w_k^i = 1$ . Então, a densidade posterior pode ser aproximada como

$$P(x_{0:k} | z_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta(x_{0:k} - x_{0:k}^i) \quad (5.6)$$

Segundo ARULAMPALAM *et al.* (2002) tem-se, portanto, uma aproximação discreta ponderada para a verdade posterior  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$ . Os pesos são escolhidos com o princípio da importância por amostragem. Este princípio baseia-se sobre a seguinte premissa: Suponha que  $P(x) \propto \pi(x)$  é uma densidade de probabilidade a partir do qual é difícil tirar amostras, mas para o qual  $\pi(x)$  pode ser avaliado. Além disso,  $x^i \sim q(x), i = 1, \dots, N_s$ , são amostras que são gerados facilmente a partir de uma proposta chamada importância de densidade. Então, um aproximação ponderada para a densidade  $P(\bullet)$  é dada por

$$P(x) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta(x - x^i) \quad (5.7)$$

onde

$$w^i \propto \frac{\pi(x^i)}{q(x^i)} \quad (5.8)$$

é o peso normalizado da partícula.

Portanto, se as amostras  $x_{0:k}^i$  foram retiradas de uma importância de densidade  $q(x_{0:k} | z_{1:k})$  logo os pesos na Eq (5.6) são definidos pela Eq.(5.8), então

$$w_k^i \propto \frac{P(x_{0:k}^i | z_{1:k})}{q(x_{0:k}^i | z_{1:k})} \quad (5.9)$$

Voltando ao caso seqüencial, a cada iteração, um poderia ter amostras constituindo uma aproximação para  $P(x_{0:k-1} | z_{1:k-1})$  e quer aproximar  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$  com um novo conjunto de amostras. Se a importância de densidade é escolhido para fatorar tais que

$$q(x_{0:k} | z_{1:k}) = q(x_k | x_{0:k-1}, z_{1:k}) q(x_{0:k-1} | z_{1:k-1}) \quad (5.10)$$

então pode-se obter amostras  $x_{0:k}^i \sim q(x_{0:k} | z_{1:k})$  aumentando cada uma das amostras existentes  $x_{0:k-1}^i \sim q(x_{0:k-1} | z_{1:k-1})$  com o novo estado  $x_k^i \sim q(x_k | x_{0:k-1}, z_{1:k})$ . Para obter a equação do peso atualizado,  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$  é primeira expressa em termos de  $P(x_{0:k-1} | z_{1:k-1})$ ,  $P(z_k | x_k)$  e  $P(x_k | x_{k-1})$ , logo

$$P(x_{0:k} | z_{1:k}) = P(z_k | x_k) P(x_k | x_{k-1}) P(x_{0:k-1} | z_{1:k-1}) \quad (5.11)$$

Substituindo as Eqs.(5.10) e (5.11) na Eq. (5.9), a equação do peso atualizado será

$$w_k^i = w_{k-1}^i \frac{P(z_k | x_k^i) P(x_k^i | x_{k-1}^i)}{q(x_k^i | x_{0:k-1}^i, z_{1:k})} \quad (5.12)$$

Além disso, se  $q(x_k | x_{0:k-1}, z_{1:k}) = q(x_k | x_{k-1}, z_k)$ , logo a importância de densidade torna-se apenas dependente de  $x_{k-1}$  e  $z_k$ . Isso é particularmente útil no caso comum quando apenas uma estimativa filtrada de  $P(x_k | z_{1:k})$  é exigido em cada passo de tempo. Deste ponto em diante, assume-se tal caso, exceto quando explicitamente indicado o contrário. Em tais cenários, só  $x_k^i$  precisa ser armazenada; portanto, pode-se descartar o caminho  $x_{0:k-1}^i$  e história das observações  $z_{1:k-1}$ . O peso modificado é

$$w_k^i \propto w_{k-1}^i \frac{P(z_k | x_k^i) P(x_k^i | x_{k-1}^i)}{q(x_k^i | x_{k-1}^i, z_k)} \quad (5.13)$$

e a densidade posterior filtrada pode ser aproximada como:

$$P(x_k | z_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta(x_k - x_k^i) \quad (5.14)$$

onde os pesos são definidos na Eq. (5.13). Pode ser demonstrado que com  $N_s \rightarrow \infty$ , a aproximação dada pela Eq. (5.14) se aproxima da verdadeira densidade posterior. O algoritmo SIS, portanto, consiste da propagação recursiva de pesos e pontos de apoio de como cada medição é recebido sequencialmente (ARULAMPALAM *et al*, 2002).

Um problema comum com o filtro de partículas SIS é o fenômeno da degeneração, onde depois de algumas iterações todas as partículas terão um peso insignificante. A variância dos pesos por importância somente aumentam ao longo do tempo, e assim, é impossível evitar a fenômeno degeneração. Esta degeneração implica em grande esforço computacional onde é dedicado à atualização de partículas cuja contribuição para a aproximação  $P(x_k | z_{1:k})$  é quase zero. A medida adequada de degeneração do algoritmo é o tamanho efetivo da amostra  $N_{\text{eff}}$  o qual é definido como

$$N_{\text{eff}} = \frac{N_s}{1 + \text{Var}(w_k^{*i})} \quad (5.15)$$

onde  $w_k^{*i} = P(x_k^i | z_{1:k}) / q(x_k^i | x_{k-1}^i, z_k)$  é referido como o " peso verdadeiro". Isto não pode ser avaliado exatamente, mas uma estimativa  $\hat{N}_{eff}$  do  $N_{eff}$  pode ser obtida por

$$\hat{N}_{eff} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_s} (w_k^i)^2} \quad (5.16)$$

onde  $w_k^i$  é o peso normalizado obtido na Eq. (5.12). Note que  $N_{eff} \leq N_s$ , pequeno  $N_{eff}$  indica grave degeneração. Claramente, a degeneração do problema é um efeito indesejável de filtros de partículas. A abordagem de força bruta para reduzir o seu efeito é utilizado para  $N_s$  muito grande (ARULAMPALAM *et al.*, 2002).

### 5.3 - AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIR)

O algoritmo SIR pode ser facilmente derivado do algoritmo SIS por uma escolha adequada da densidade por importância onde  $q(x_k | x_{k-1}^i, z_{1:k})$  é escolhida para ser a densidade anterior  $P(x_k | x_{k-1}^i)$  e a etapa de reamostragem, que deve ser aplicada em cada índice de tempo.

A escolha da importância por densidade implica que precisamos de amostras a partir de  $P(x_k | x_{k-1}^i)$ . Uma amostra  $x_k^i \sim P(x_k | x_{k-1}^i)$  pode ser gerada pela primeira geração de uma amostra do processo de ruído  $v_{k-1}^i \sim P_v(v_{k-1})$  e configuração  $x_k^i = f_k(x_{k-1}^i, v_{k-1}^i)$ , onde  $P_v(\bullet)$  é o pdf do  $v_{k-1}$ . Para esta escolha particular de importância de densidade é evidente que os pesos são dados por

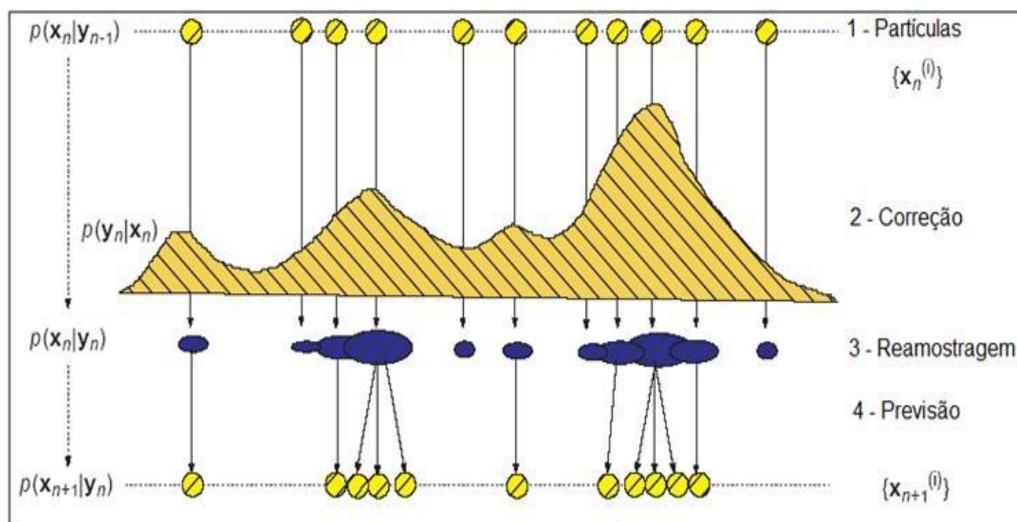
$$w_k^i \propto w_{k-1}^i P(z_k | x_k^i) \quad (5.17)$$

no entanto, observando que a reamostragem é aplicada a cada índice de tempo, tem-se  $w_{k-1}^i = 1/N \quad \forall i$ , portanto

$$w_k^i \propto P(z_k | x_k^i) \quad (5.18)$$

os pesos dados pela proporcionalidade da Eq. (5.18) são normalizados antes da fase de reamostragem.

A Figura 5.1 apresenta o processo de seleção das partículas através da reamostragem. Onde (1) são as Partículas com peso uniforme no momento  $t = t_u$ ; (2) são os pesos das partículas atualizados após as medições; (3) Reamostragem: Embora a quantidade total de partículas seja a mesma, aquelas com menor peso são descartadas e aquelas com maior peso dão origem a mais partículas próximas às regiões de maior probabilidade e (4) são as partículas com pesos uniformes no momento  $t_{u+1}$ .



**Figura 5.1** – Reamostragem. Fonte: CHEN (2002)

Como a densidade de amostragem por importância para o filtro SIR é independente de medição  $z_k$ , o espaço de estado é explorado sem nenhum conhecimento das observações. Portanto, esse filtro pode ser ineficiente e sensível a saídas. Além disso, a reamostragem é aplicada em cada iteração isso pode resultar em rápida perda de diversidade de partículas. No entanto, o método SIR tem a vantagem de que os pesos por importância são facilmente avaliadas e que a importância de densidade pode ser facilmente amostrados (ARULAMPALAM *et al.*, 2002), ver algoritmo a seguir.

Na Figura 5.2 é apresentado um resumo do algoritmo SIR, onde inicialmente  $N$  partículas são amostradas aleatoriamente da distribuição inicial  $P(x_0)$ . Denominam-se essas partículas de candidatas para representar a distribuição posterior no instante inicial

$t - 1$  denotando-as por  $x_{t-1}$ . A segunda etapa consiste em avaliar estas partículas, por isso essa etapa é conhecida como etapa de avaliação. Para tal, calcula-se o valor correspondente, denominado  $x_{t-1}^i$  de acordo com o modelo utilizado. Depois considera-se que no instante  $t - 1$  seja observado o valor  $y_{t-1}$ . Verifica-se a proximidade desses valores, isto é calcula-se a verossimilhança  $P(z_t | x_{t-1}^i)$ . Com isso tem-se o peso por importância das partículas. Em seguida, normaliza-se os pesos obtendo  $\hat{w}_t^{(i)}$ . As partículas de maior peso representam as regiões de maior importância da distribuição. Em seguida tem-se a etapa de seleção onde é feita a reamostragem da distribuição anterior  $P(x_t | x_{t-1}^i)$  das  $N$  partículas de acordo com os pesos  $\hat{w}_t^{(i)}$ . Obtêm-se as partículas em  $t - 1$  que representam a distribuição posterior denominadas por  $x_{t-1}^i$ , com pesos iguais a  $1/N$  e a etapa final é a evolução que a partir da equação de transição  $P(x_t | x_{t-1}^i)$ , gera as partículas candidatas a representar a distribuição posterior no instante  $t$ . Repete-se o procedimento e prossegue-se até o tempo final (SILVA, 2010).

### Algoritmo do filtro SIR

1. Inicialização
  - a. Tome um conjunto de partículas da distribuição inicial  $p(x_0)$  e obtenha  $\{(X_0^i, w_0^i); i = 1, \dots, N\}$ ;
  - b. Faça  $t = 1$ ;
2. Avaliação dos Pesos
  - a. Calcule os novos pesos:  $w_t^i = w_{t-1}^i p(z_t | x_{t-1}^i)$
  - b. Normalize os pesos:  $\hat{w}_t^i = \frac{w_t^i}{\sum_{i=1}^N w_t^i}$
3. Reamostragem ou Seleção

3.1 Reamostragem das partículas é dado abaixo:

  - 3.1.1 Construindo a soma dos pesos acumulativos (CSW), sendo computada por  $c_i = c_{i-1} + w_t^i$  para  $i = 2, \dots, N$ , com  $c_0 = 0$ .
  - 3.1.2 Tome  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ .
  - 3.1.3 Para  $j = 1, \dots, N$ , faça:
    - Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ .
    - Enquanto  $u_j > c_i$  faça  $i = i + 1$ .
    - Designe as partículas  $x_t^j = x_t^i$ .
    - Designe os pesos para  $w_k^j = N^{-1}$ .
4. Cálculo da Estimativa do Estado Atual
$$p(x_t | z_t) \approx \sum_{i=1}^N x_t(i) * \hat{w}_t^{(i)}$$
5. Evolução do Modelo
  - a. Avance os estados no tempo  $t-1$  para o tempo  $t$  usando a equação de estado:  $x_t = p(x_t | x_{t-1}^i)$  para  $i = 1, \dots, N$ .
  - b. Faça  $t = t + 1$ , se  $t = t_{final} + 1$ , então pare.

Com as novas partículas, retorne ao segundo passo.

**Figura. 5.2** – Algoritmo do filtro de Partícula SIR. Fonte: SILVA (2010)

## 5.4 – APLICAÇÃO PARA O PROBLEMA DE GELBARD E SEINFELD (1978)

No presente trabalho, para a solução do problema proposto por GELBARD e SEINFELD (1978) o filtro de partícula usado foi o filtro com Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR), o qual foi descrito na seção 5.3.

O filtro SIR proposto em GORDON *et al.* (1993) é um método de Monte Carlo que pode ser aplicado a problemas Bayesianos de filtragem recursiva. As hipóteses necessárias para usar o filtro SIR são muito fracas. O estado dinâmico e as funções de

medição  $f_k(\cdot, \cdot)$  e  $h_k(\cdot, \cdot)$  nas Eqs. (5.2 e 5.3) precisam ser conhecidas, é necessário para ser capaz de realizar amostra do processo de distribuição de ruído  $v_{k-1}$ , através da amostragem anterior. Finalmente a função de probabilidade  $P(y_k | x_k)$  precisa estar disponível para a uma avaliação pontual (ARALAMPALAM, *et al.*, 2002).

As partículas de maior peso (importância) são selecionadas. De acordo com o seu peso é realizada uma nova amostragem (da distribuição anterior). Assim, as partículas de maior peso dão origem a um maior número de partículas. As partículas de menor importância desaparecem e não originam “descendentes” (AIUBE, 2005).

## CAPÍTULO 6

### RESULTADOS E DISCUSSÕES DO FILTRO DE PARTÍCULAS

Neste capítulo serão apresentados os resultados do algoritmo do filtro de partícula com amostragem e Reamostragem por Importância Sequencial (SIR) descrito no capítulo 5.3, para o problema não-linear de balanço populacional transiente unidimensional, descrito na seção 3.2.2 para sistemas particulados, a fim de estimar a função densidade de tamanho das partículas ( $n(v, t)$ ). O algoritmo do filtro Bayesiano, a solução por inversão numérica da transformada de Laplace e solução analítica para o problema de sistema particulado foram implementados em Fortran 90 e o resultado foi gerado em um notebook com processador Intel(R) Core (TM) i3 com 2.13 GHz e utilizou-se uma malha com 81 números de termos.

#### 6.1 – FILTRO COM AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTANCIA SEQUÊNCIAL (SIR)

O filtro SIR foi usado para estimar ( $n(v, t)$ ), como mostram as tabelas 6.1 a 6.3. Com o número de partículas ( $N_p = 100, 500, 1000$  e  $2000$ ) para as variáveis de estado estimadas, o erro RMS (Raiz quadrada do erro quadrático médio) dado pela Eq. (6.1) é mostrado nas tabelas anteriormente mencionadas e variou de  $10^{-5}$  até  $10^{-6}$ . Foi analisado o desvio padrão do modelo e das medidas ( $\sigma$ ) de 1% e 5%, os quais foram testados em quatro combinações possíveis ( $\sigma_{\text{modelo}} = 0,01$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,01$ ,  $\sigma_{\text{modelo}} = 0,01$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,05$ ,  $\sigma_{\text{modelo}} = 0,05$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,01$ ,  $\sigma_{\text{modelo}} = 0,05$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,05$ ). As combinações são mostradas nas tabelas 6.1 a 6.3 e nas Figuras 6.1 a 6.12, para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0$  e  $2,0$ . O problema físico abordado foi para sistemas particulados e o caso-teste 1 foi escolhido para essa análise e seus resultados foram comparados com as medidas (resultado do problema direto mais um valor randômico multiplicado pelo desvio padrão das medidas) do filtro de partículas.

$$e_{\text{RMS}} = \sum_{i=1}^{N_t} \sum_{j=1}^{N_p} \frac{(C_{\text{exato},i,j} - C_{\text{estimado},i,j})^2}{N_t * N_p} \quad (6.1)$$

**Tabela 6.1:** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$ 

$\tau = 0,25$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS			
	$N_p = 100$	$N_p = 500$	$N_p = 1000$	$N_p = 2000$
0,01 – 0,01	2,087E-06	2,066E-06	2,503E-06	3,032E-06
0,01 – 0,05	2,093E-06	2,820E-06	2,312E-06	3,039E-06
0,05 – 0,01	6,446E-05	5,65E-05	8,225E-05	2,059E-06
0,05 – 0,05	4,664E-05	5,359E-05	4,793E-05	3,579E-05

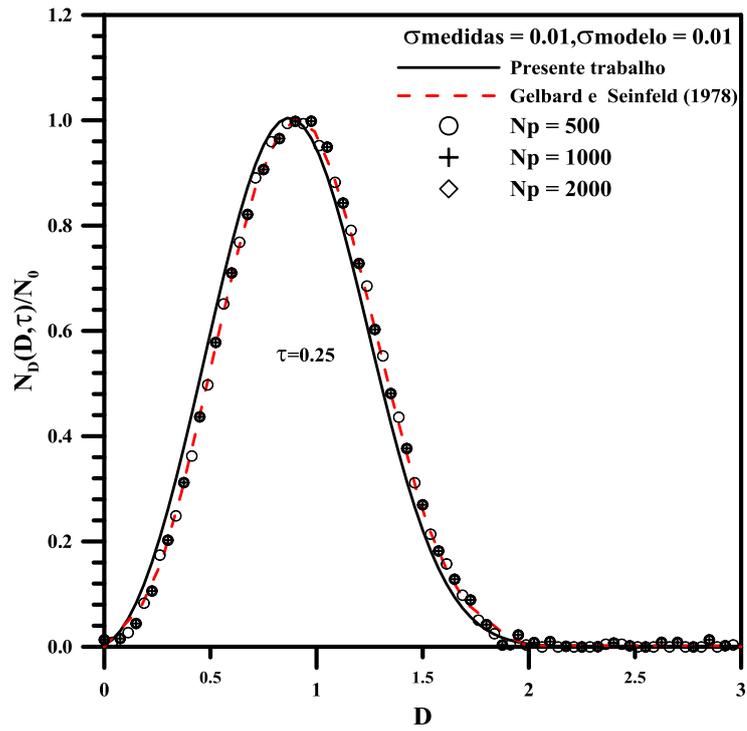
**Tabela 6.2.** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ 

$\tau = 1,0$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS			
	$N_p = 100$	$N_p = 500$	$N_p = 1000$	$N_p = 2000$
0,01 – 0,01	2,359E-06	4,194E-06	2,574E-06	1,951E-06
0,01 – 0,05	3,288E-06	2,140E-05	2,059E-06	2,644E-06
0,05 – 0,01	5,435E-05	5,934E-05	6,316E-05	2,035E-06
0,05 – 0,05	5,516E-05	4,745E-05	5,694E-05	4,534E-05

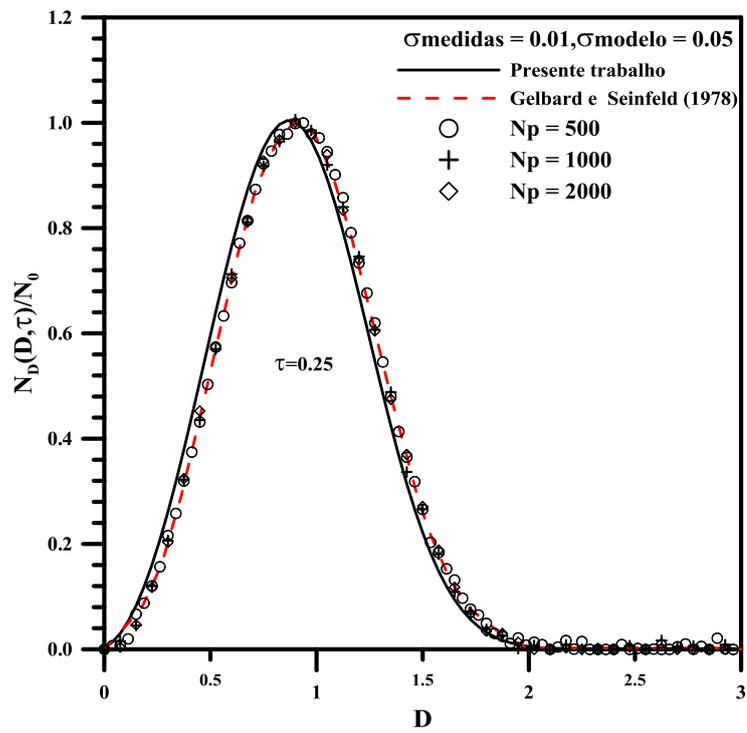
**Tabela 6.3.** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$ 

$\tau = 2,0$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS			
	$N_p = 100$	$N_p = 500$	$N_p = 1000$	$N_p = 2000$
0,01 – 0,01	2,099E-06	2,739E-06	3,101E-06	3,126E-06
0,01 – 0,05	2,608E-06	2,292E-06	3,601E-06	3,244E-06
0,05 – 0,01	5,590E-05	6,132E-05	8,919E-05	2,114E-06
0,05 – 0,05	5,31E-05	4,128E-05	5,699E-05	4,461E-05

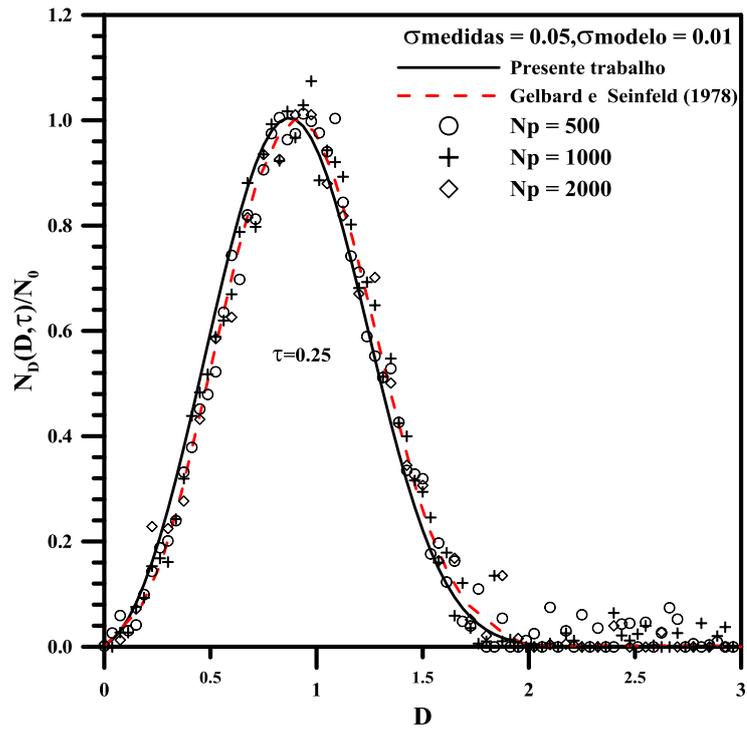
Nas Figuras 6.1 a 6.4 são mostrados o comportamento dos resultados do filtro SIR para  $N_p = 500, 1000$  e  $2000$  os quais foram comparados com a solução exata para o tempo  $\tau = 0.25$ . Observa-se nas Figuras 6.1 e 6.2 que aumentando o desvio padrão do modelo as medidas tendem aos valores medidos. Porém, verificam-se nas Figuras 6.3 e 6.4 que aumentando o  $\sigma$  dos valores medidos as medidas tendem aos valores estimados, nota-se também que aumentando o diâmetro da partícula ( $D$ ) a função densidade de distribuição de tamanho sofre forte influência em relação ao desvio padrão. Graficamente que os resultados têm boa concordância para as combinações testadas do desvio padrão.



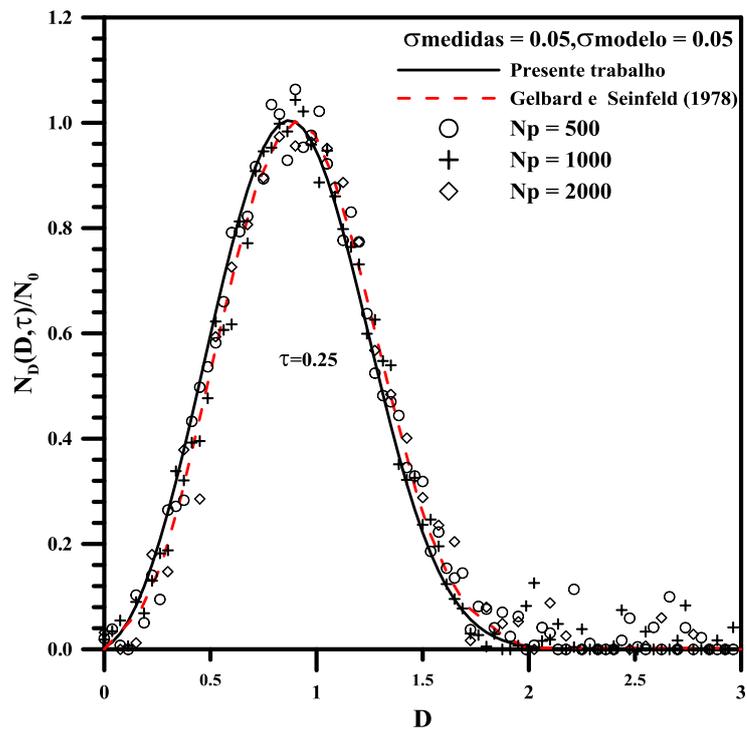
**FIGURA 6.1** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,01 – 0,01) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.2** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.3** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,01) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.4** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .

Nas Figuras 6.5 a 6.8, observa-se a mesma tendência das figuras anteriores para o tempo  $\tau = 1,0$ . Idem análise das Figuras 6.1 a 6.4.

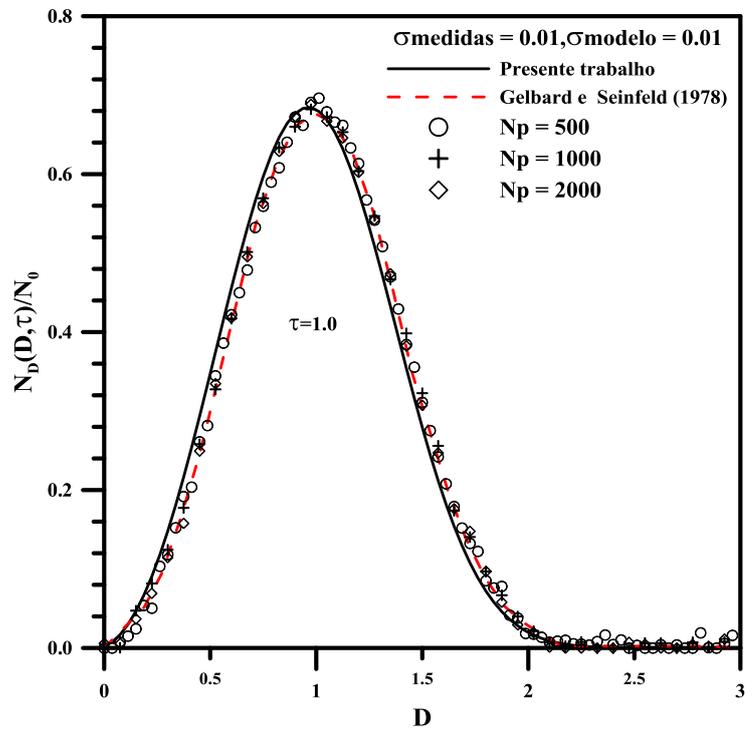


FIGURA 6.5 - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,01 – 0,01) e  $\tau = 1,0$ .

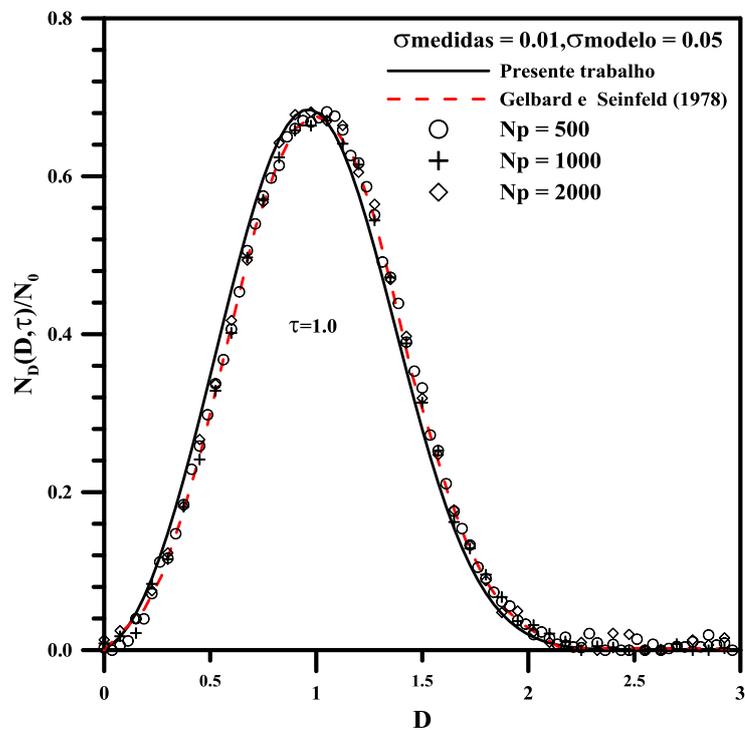
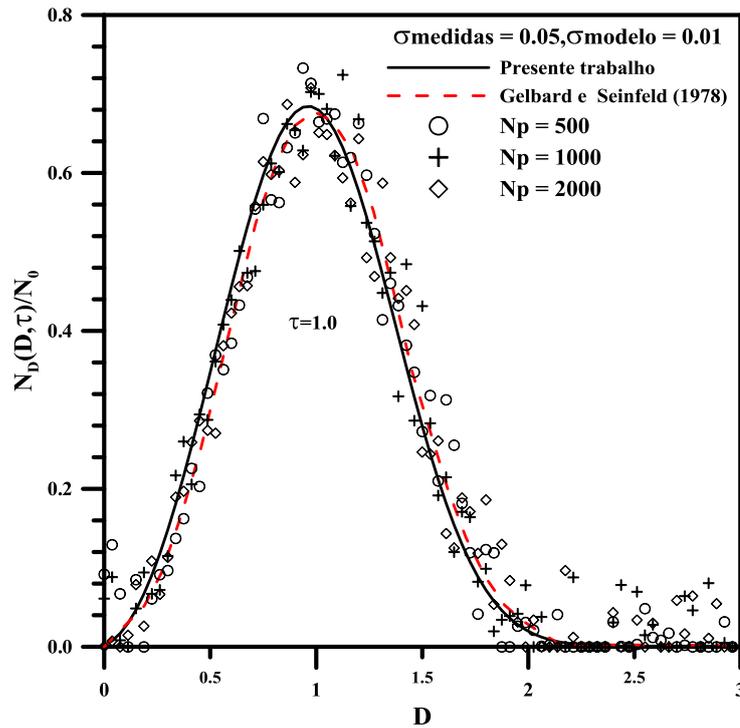
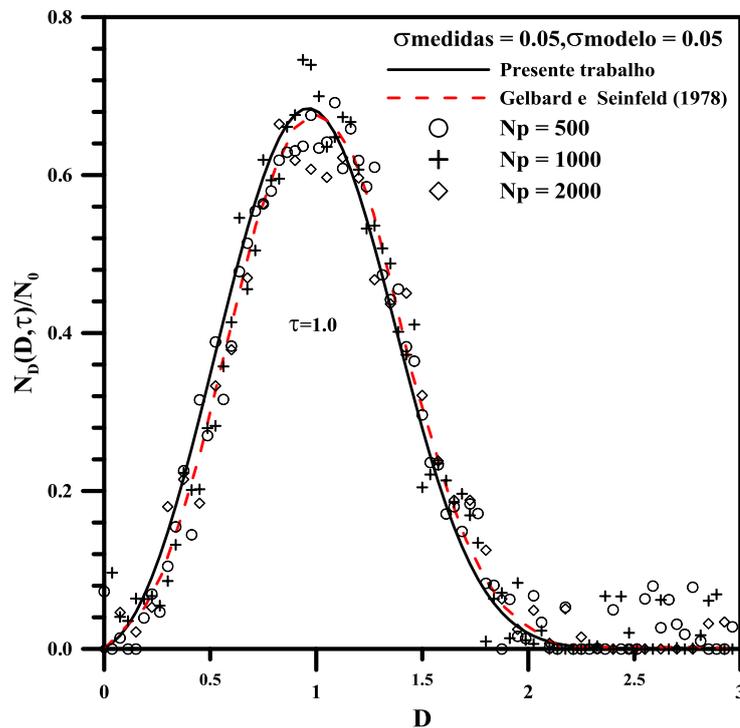


FIGURA 6.6 - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.7** - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,05 – 0,01) e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.8** - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,05 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

Nas Figuras 6.9 e 6.10, nota-se a mesma tendência das Figuras 6.5 a 6.8 para o tempo  $\tau = 2,0$  mesmo com a redução da função densidade de distribuição de tamanho.

Porém, nas Figuras 6.11 e 6.12 observa-se que aumentando o desvio padrão dos valores medidos, as medidas são fortemente influenciadas ao longo de todo o tamanho (D).

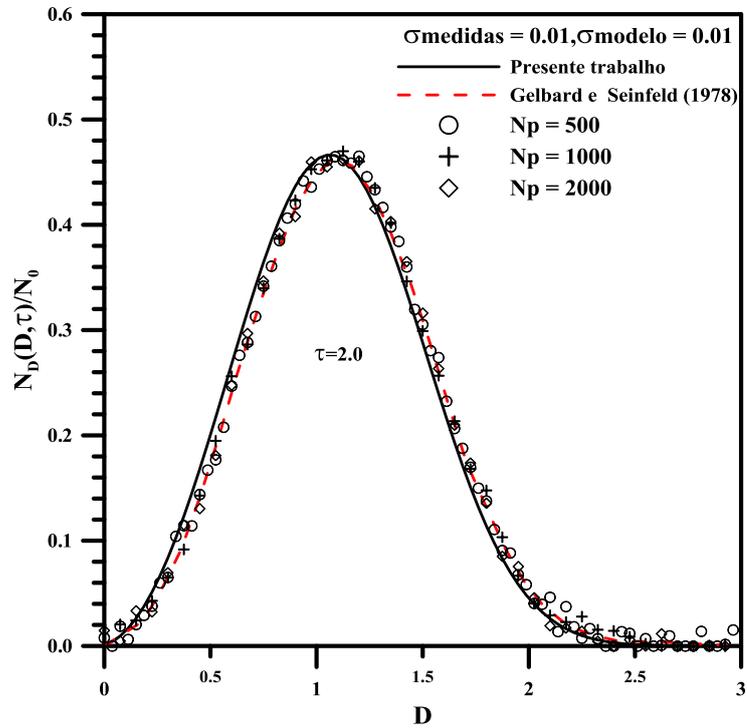


FIGURA 6.9 - Comparação da solução exata com o  $\sigma$  (0,01 – 0,01) e  $\tau = 2,0$ .

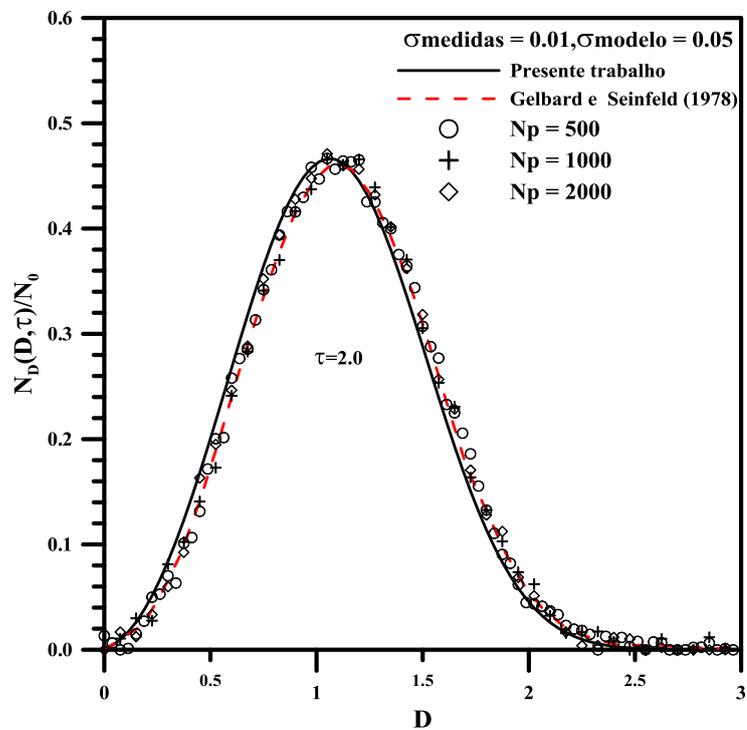


FIGURA 6.10 - Comparação da solução exata com o  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

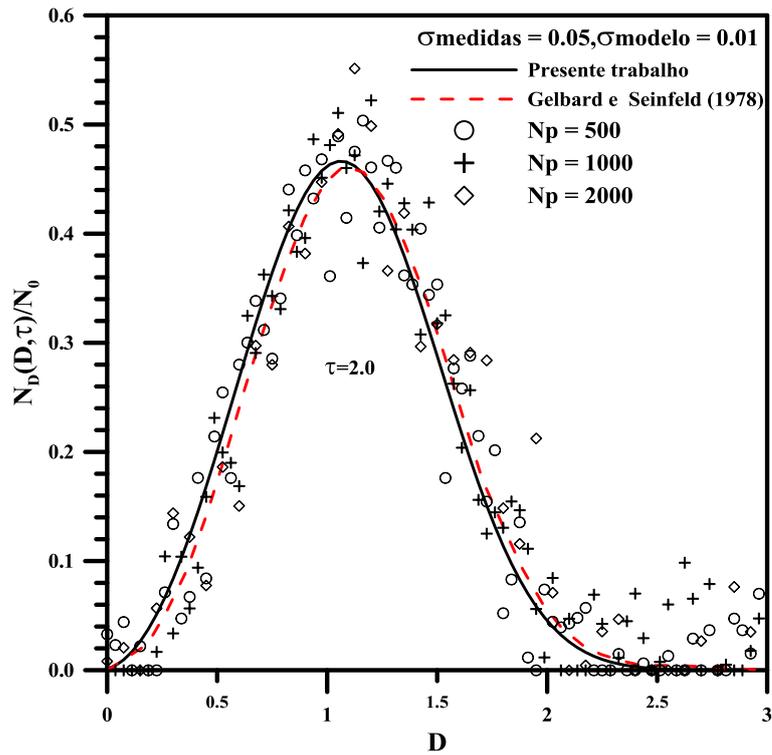


FIGURA 6.11 - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,01) e  $\tau = 2,0$ .

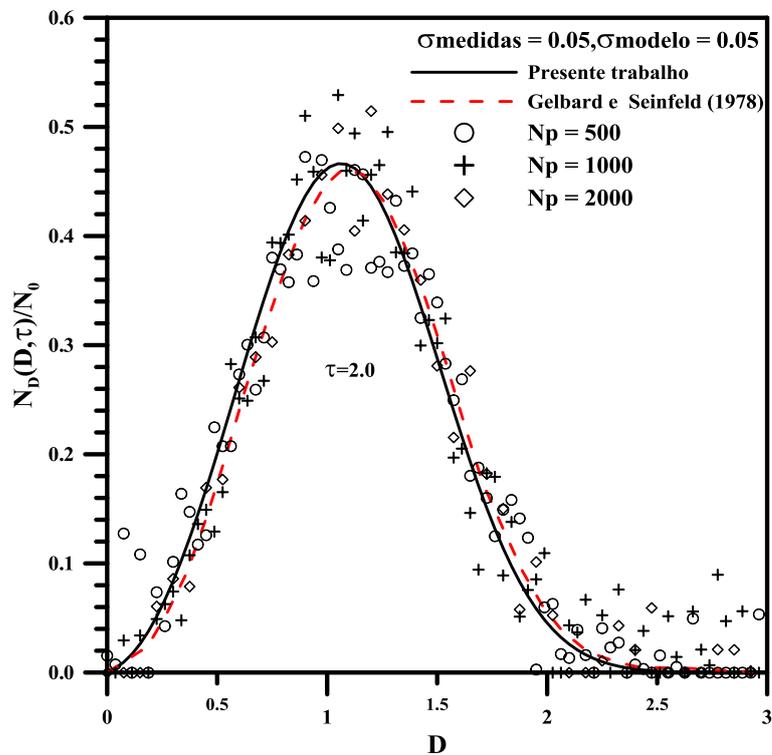


FIGURA 6.12 - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

Observando as Tabelas 6.1 a 6.3e as Figuras 6.1 a 6.12 optou-se usar  $N_p = 1000$  para estimar a função densidade do tamanho de partículas para os casos-testes estudados na seção 3.2.2. O motivo foi o erro ser pequeno em todas as variações do número de partículas para o filtro SIR, o tempo de CPU para  $N_p = 500$  foi 16,87,  $N_p = 1000$  foi 46,19 e  $N_p = 2000$  foi 363,57. Em todas as análises, o desvio padrão foi dividido pela concentração máxima da densidade do tamanho das partículas.

## **6.2 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 1**

Para o caso-teste 1, foram analisados os tempos adimensionais  $\tau = 0,25, 1,0, 2,0, 10,0$  e  $20,0$  admitindo o desvio padrão do modelo e dos valores medidos 1% e 5% com quatro combinações as quais foram utilizadas para melhor análise dos resultados. Nas Figuras 6.13 a 6.16 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro de partículas (SIR) para  $\tau = 0,25$ .

Na Fig. 6.13, nota-se que as medidas convergem para os valores medidos quando os desvios padrão do modelo e das medidas são pequenos. Observa-se graficamente que as medidas e os valores medidos tem a mesma tendência, mas não estão dentro do intervalo de 99% de confiança.

Observa-se na Fig. 6.14 que as medidas convergem para os valores medidos quando o desvio padrão do modelo é grande e o desvio padrão das medidas é pequeno. Nota-se, também, que as medidas e os valores estimados estão dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.

Analisando a Fig. 6.15, observa-se que as medidas se desviam dos valores do problema direto e tentam buscar os resultados estimados quando o desvio padrão das medidas é grande e o desvio padrão do modelo é pequeno. Nota-se também que as medidas e os valores estimados estão fora do intervalo de confiança de 99% do modelo.

As medidas na Fig. 6.16, tendem aos resultados estimados para grandes  $\sigma$  das medidas e do modelo. Observa-se que as medidas e os valores estimados estão dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.

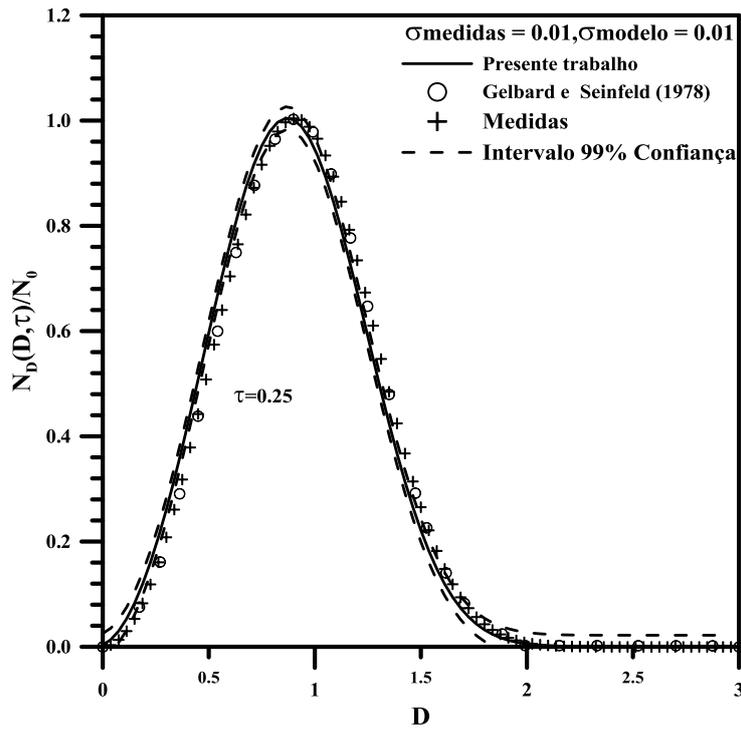


FIGURA 6.13 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$ .

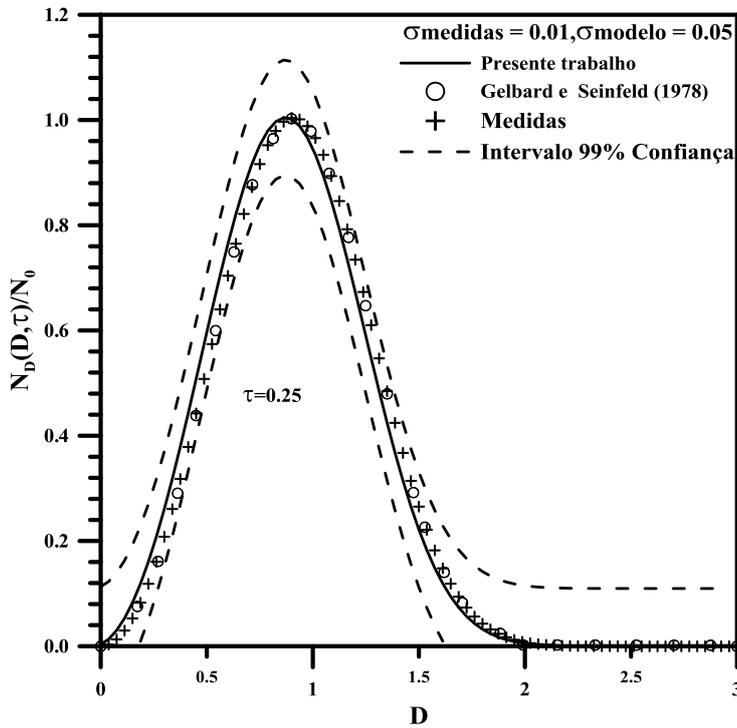
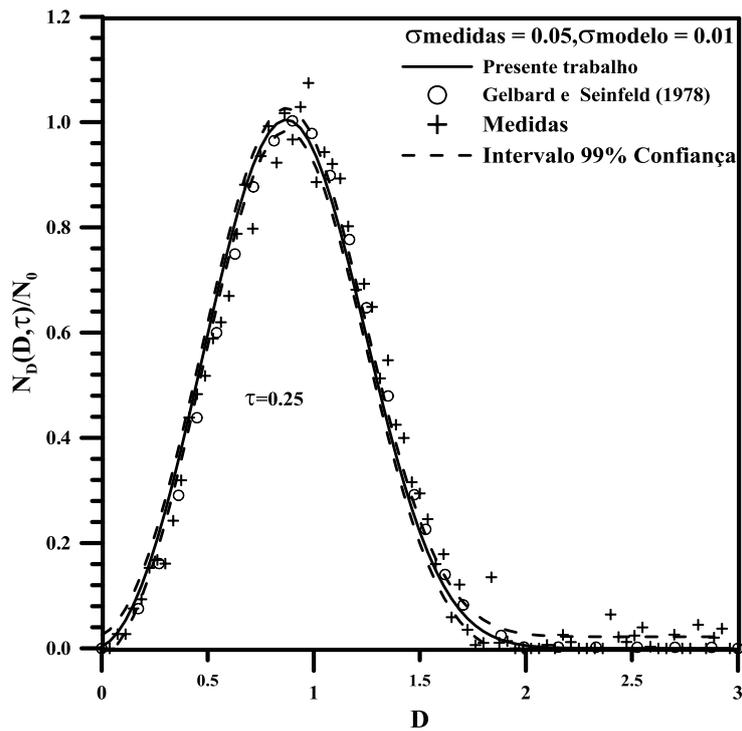
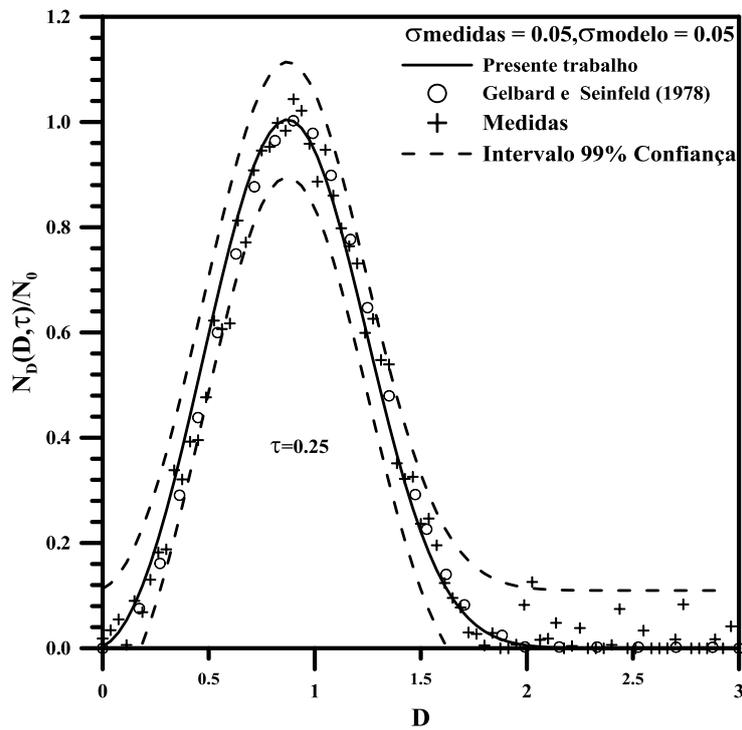


FIGURA 6.14 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.15** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$ .

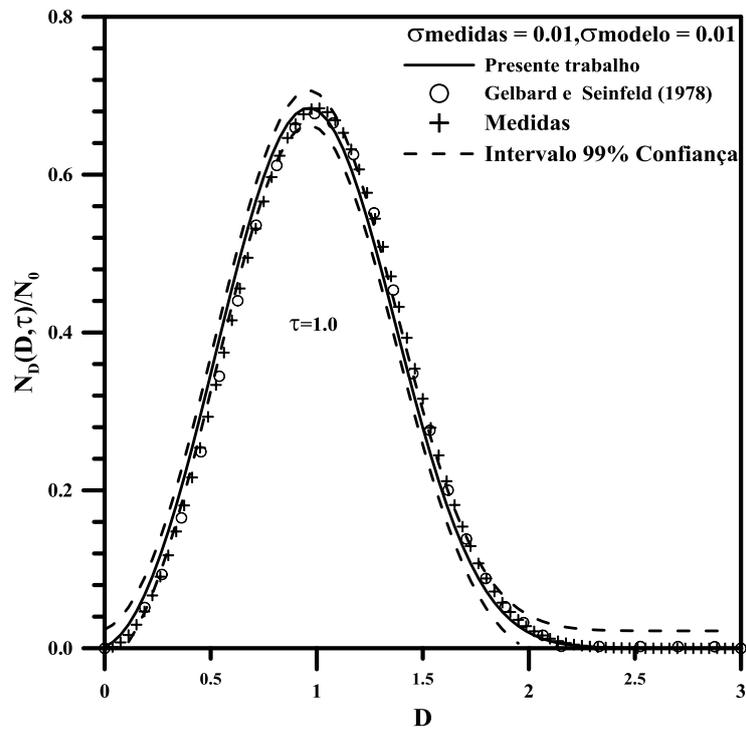


**FIGURA 6.16** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso teste 1 e  $\tau = 0,25$ .

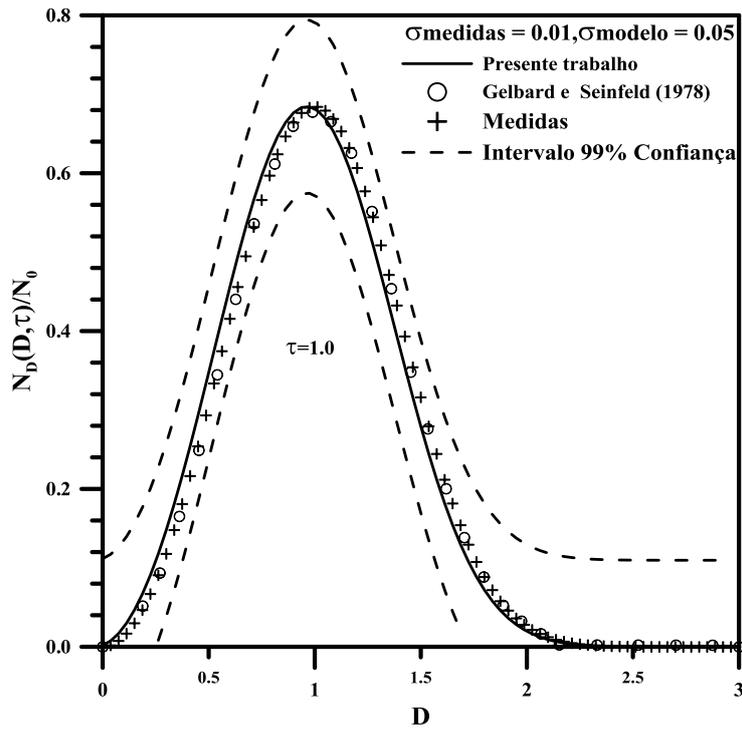
As Figuras 6.17 a 6.20 mostram as comparações gráficas para  $\tau = 1,0$ .

Nas Fig. 6.17 e 6.18 verifica se o mesmo comportamento das figuras 6.13 e 6.14. Porém, os resultados estão parcialmente dentro do intervalo de confiança.

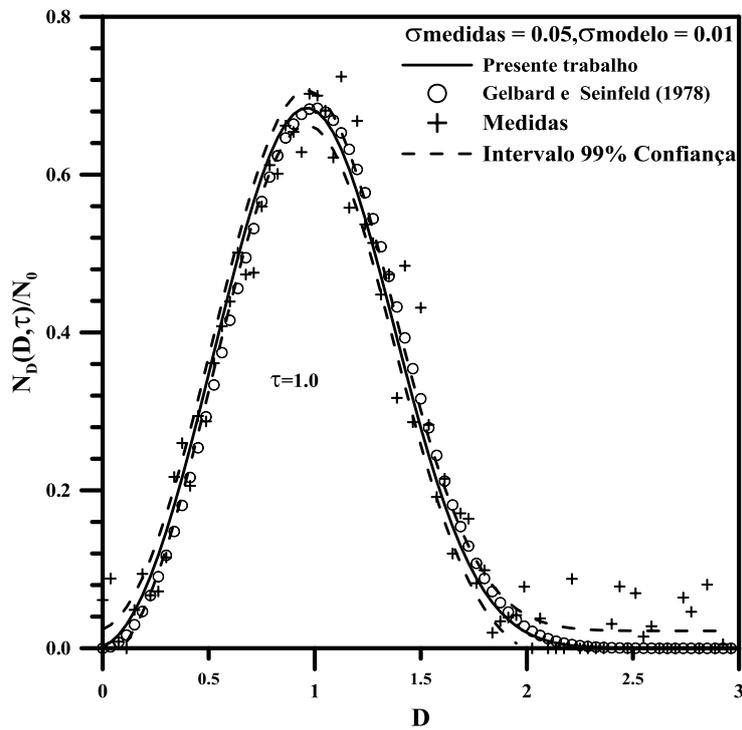
Observa-se que as Figuras 6.19 e 6.20 apresentam o mesmo comportamento da Figura 6.15.e 6.16 com suas respectivamente análises.



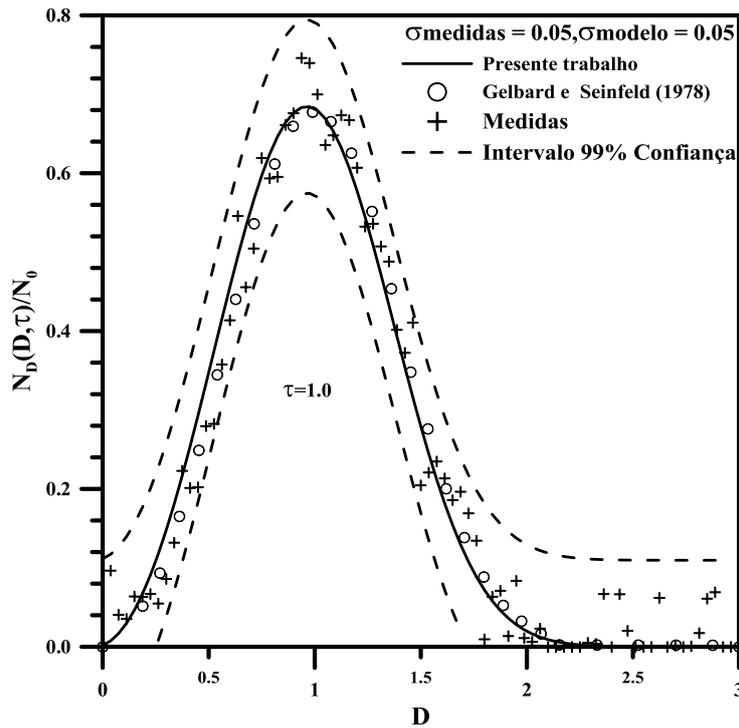
**FIGURA 6.17** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.18** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.19** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.20** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ .

As Figuras 6.21 a 6.24 mostram as comparações gráficas para  $\tau = 2,0$ .

Analisando a Figura 6.21, nota-se que as medidas têm excelente concordância com os valores medidos para pequenos desvios padrão os quais estão dentro do intervalo de 99% de confiança do modelo.

Nota-se que a Figura 6.22, tem o mesmo comportamento que a Figura 6.21 para pequeno desvio padrão dos valores medidos e grande desvio padrão do modelo, os quais estão dentro do intervalo de 99% de confiança do modelo.

Observa-se na Fig. 6.23, para grande desvio padrão dos valores medidos e pequeno desvio padrão do modelo, as medidas tendem ao resultado simulado.

Verifica-se na Figura 6.24, para grande desvio padrão dos valores medidos e do modelo, as medidas possuem boa concordância com aos valores simulados. Observa-se que os resultados estão dentro do intervalo de 99% de confiança.

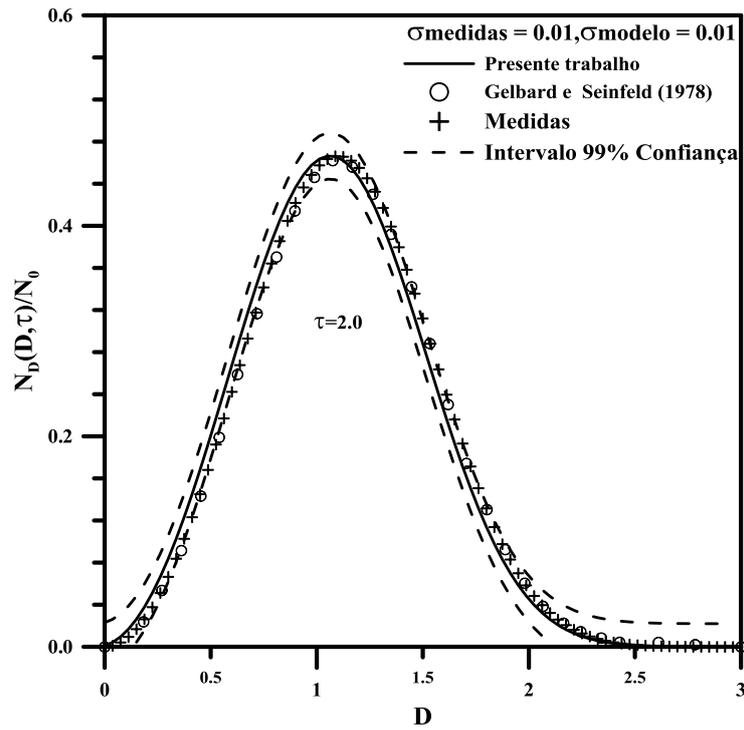


FIGURA 6.21 - Comparação das medidas para com variação de  $\sigma$  (0,01 – 0,01).

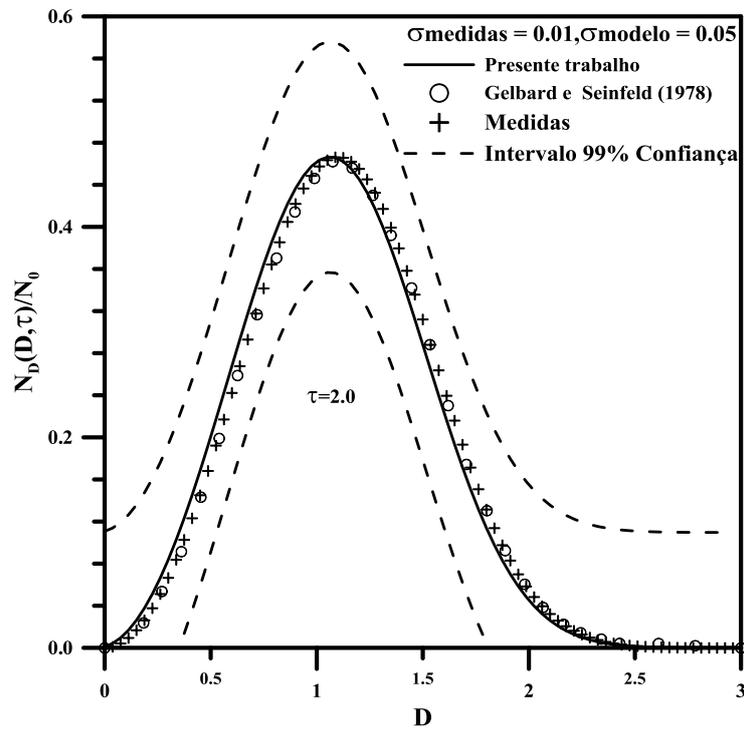
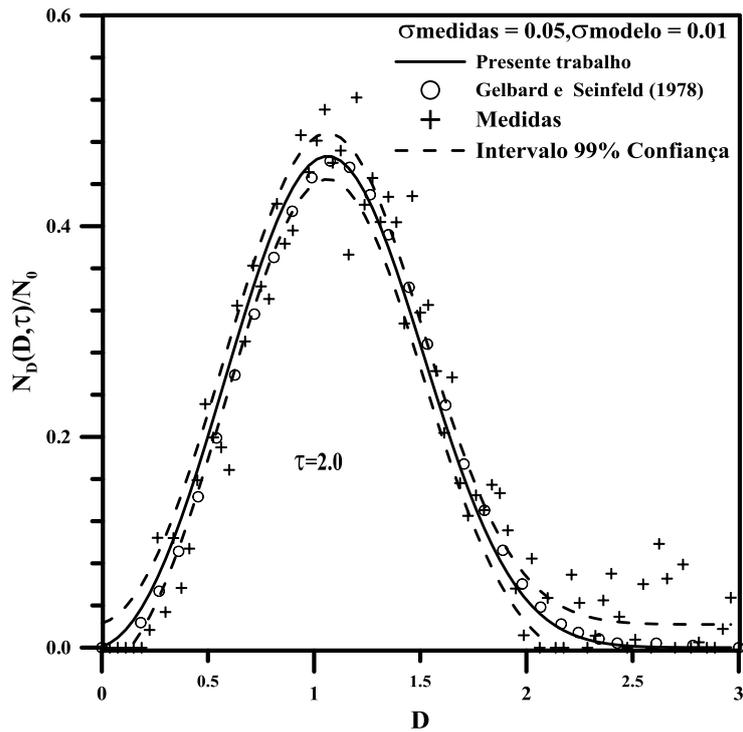
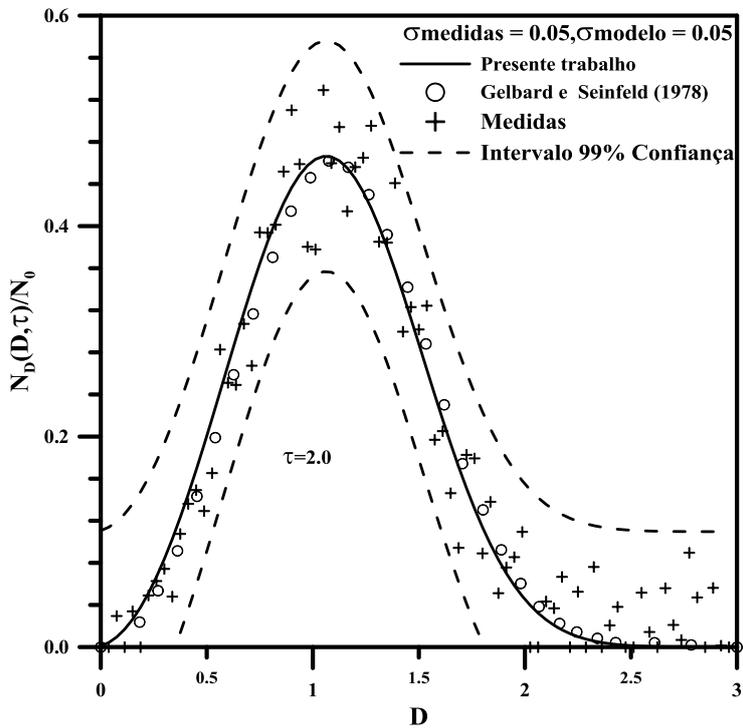


FIGURA 6.22 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$ .



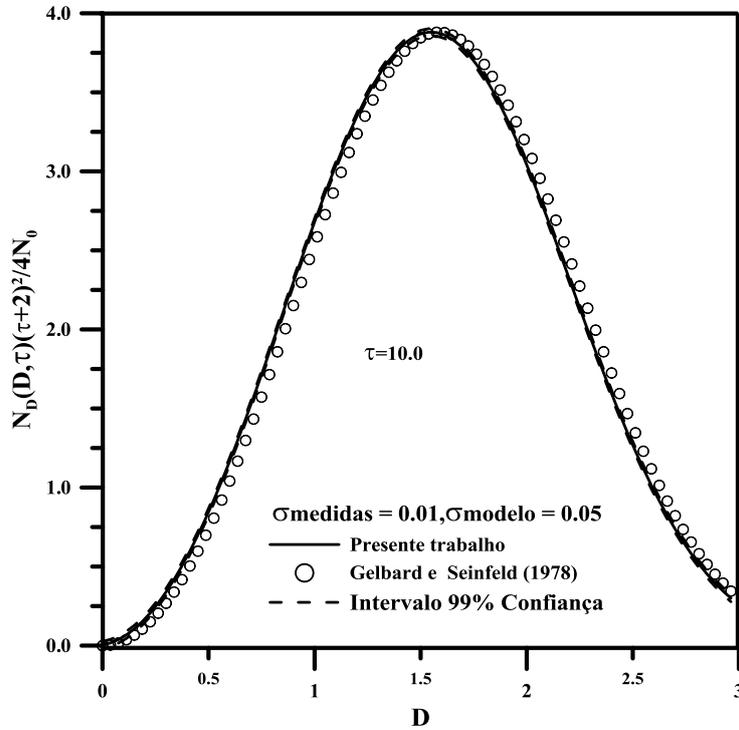
**FIGURA 6.23** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$ .



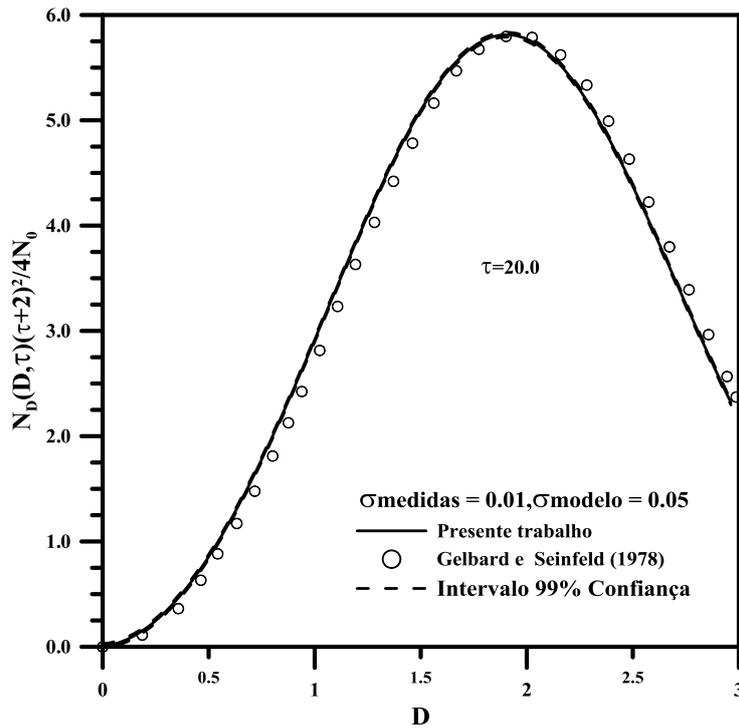
**FIGURA 6.24** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$ .

Avaliando as Figuras 6.25 e 6.26, nota-se que as medidas convergem para os valores medidos mesmo para grande desvio padrão do modelo. Isso é devido ao desvio

padrão analisado ser apenas 5%, o qual não provoca grande perturbação no processo de amostragem e reamostragem do filtro SIR. Observa-se que os resultados estão fora do intervalo de 99% de confiança para os tempos analisados  $\tau = 10,0$  e  $20,0$ .



**FIGURA 6.25** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 10,0$ .

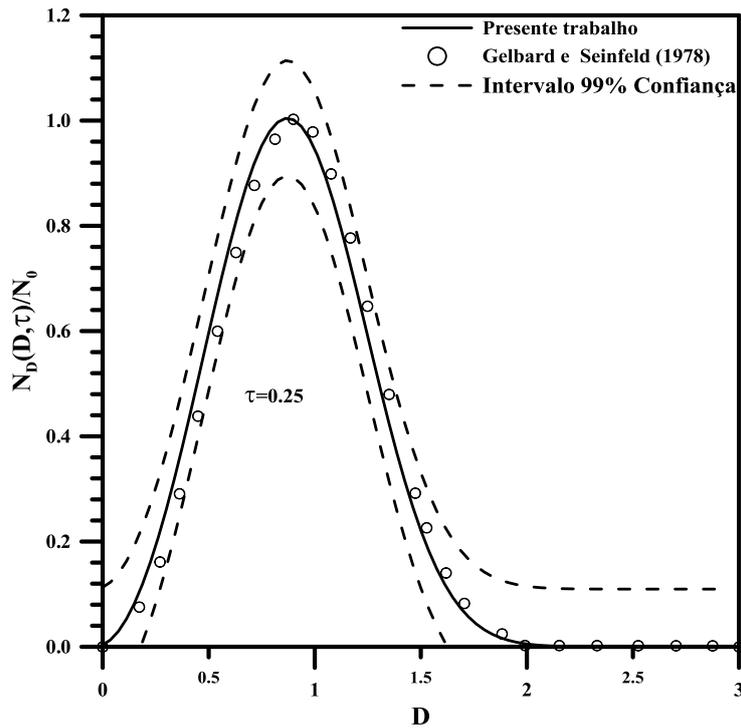


**FIGURA 6.26** - Comparação das medidas para variação de  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 20,0$ .

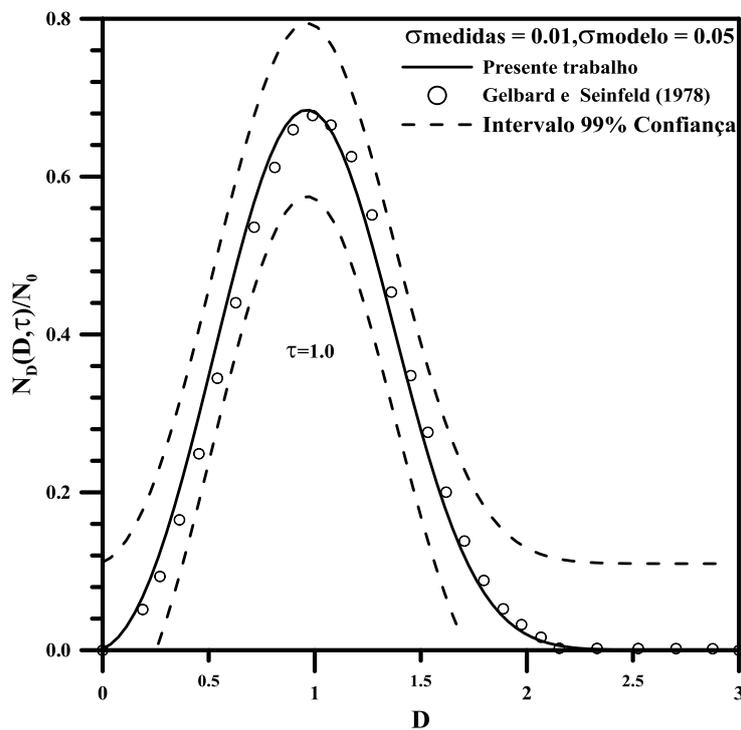
As análises anteriores foram feitas para a hipótese de medições (ponto de coleta de amostragem) ao longo de toda extensão onde está ocorrendo fenômeno. Sabe-se que é inviável fazer medidas em todos os pontos e é comum ter um ou três ponto de coleta de amostragem (ponto de medição), logo para essas duas hipóteses o filtro SIR foi aplicado.

Para a hipótese de um ponto de coleta de amostras, admitiu-se o maior valor amostrado e os resultados da simulação são demonstrados nas Figuras 6.27 a 6.31. Usou-se a combinação de desvio padrão (0,01 – 0,05) nos valores medidos e modelo, respectivamente.

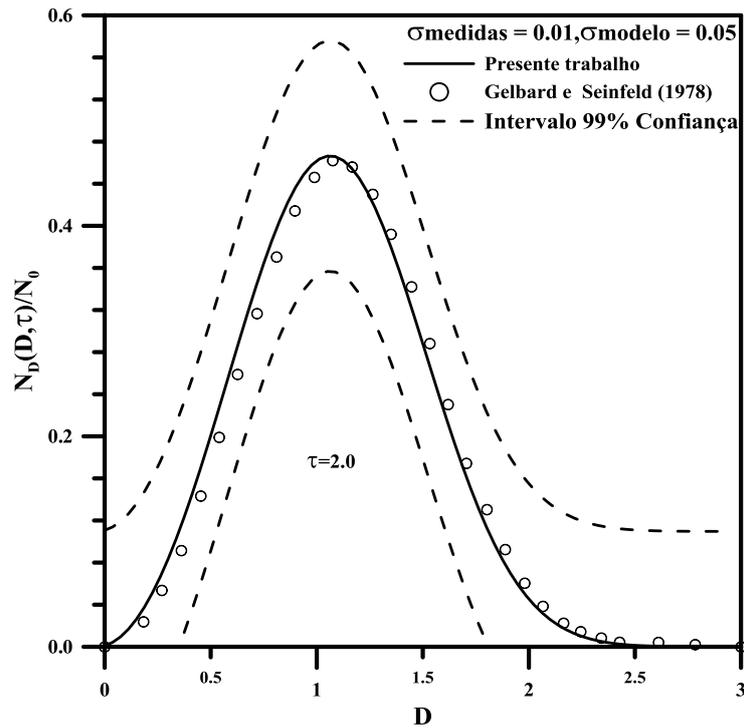
As Figuras 6.27 a 6.31 mostram graficamente resultados muito bons entre os valores medidos e os estimados para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0, 2,0, 10,0$  e  $20,0$ .



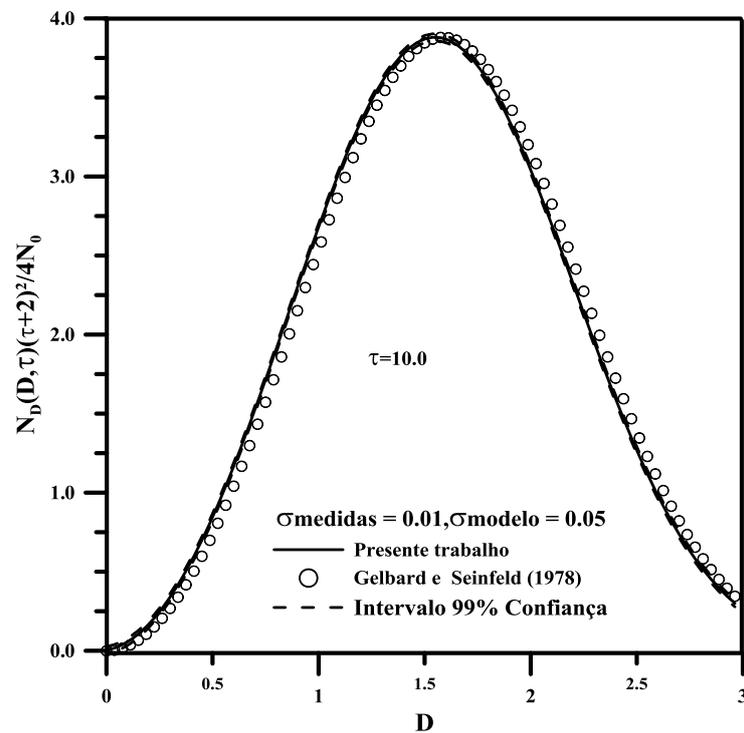
**FIGURA 6.27** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



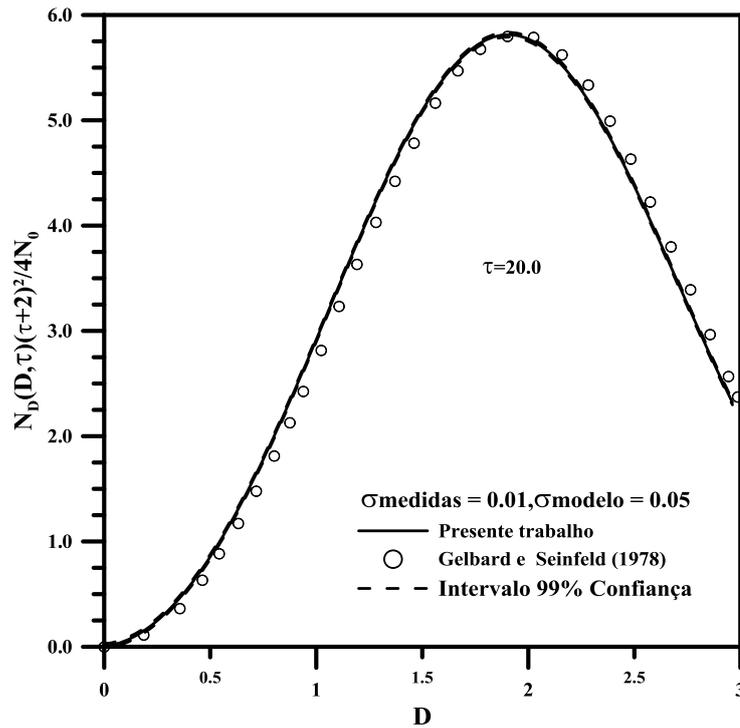
**FIGURA 6.28** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.29** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .



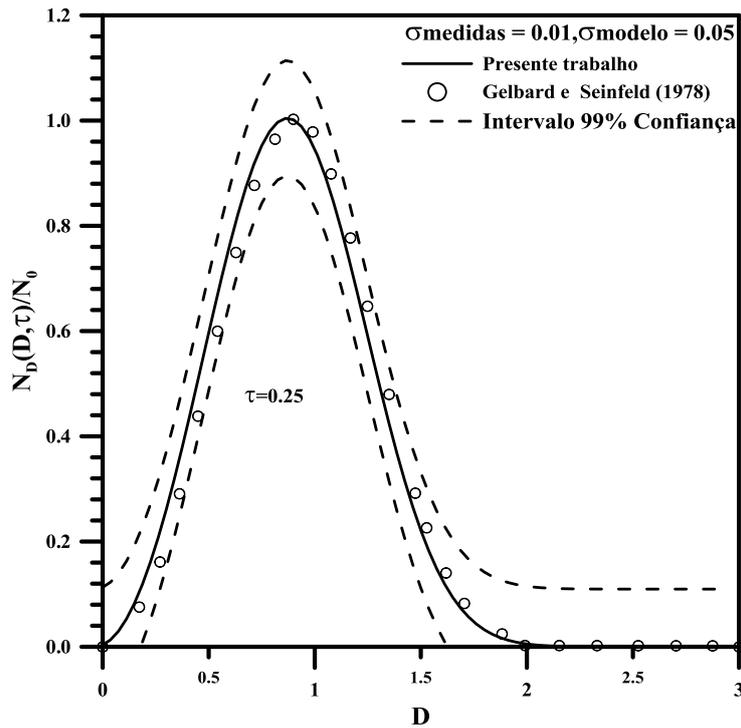
**FIGURA 6.30** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 10,0$ .



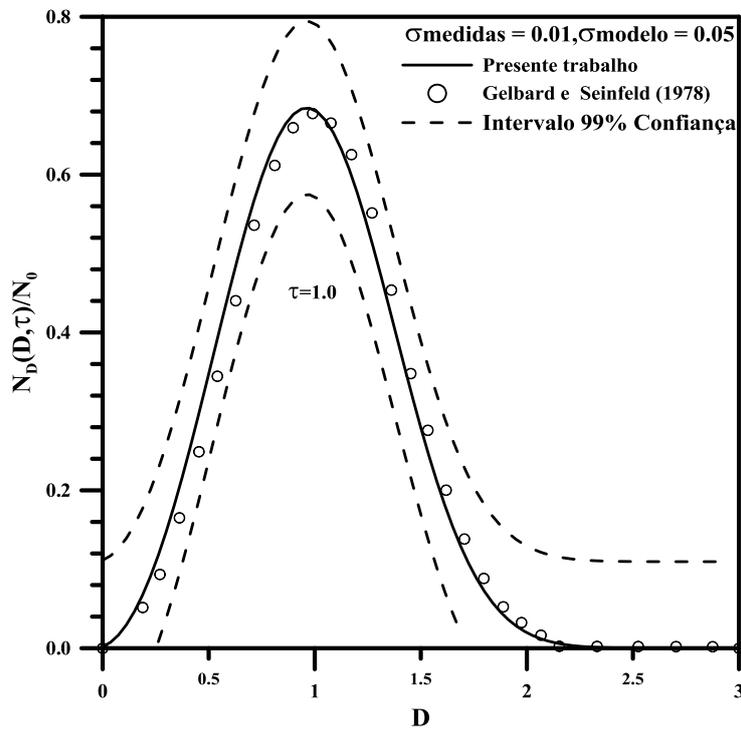
**FIGURA 6.31** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 20,0$ .

Para a hipótese de três pontos de coleta de amostras, admitiu-se também o maior valor amostrado e os resultados da simulação são apresentados nas figuras 6.32 a 6.36. Usou-se as mesmas hipóteses para um ponto de coleta de amostras.

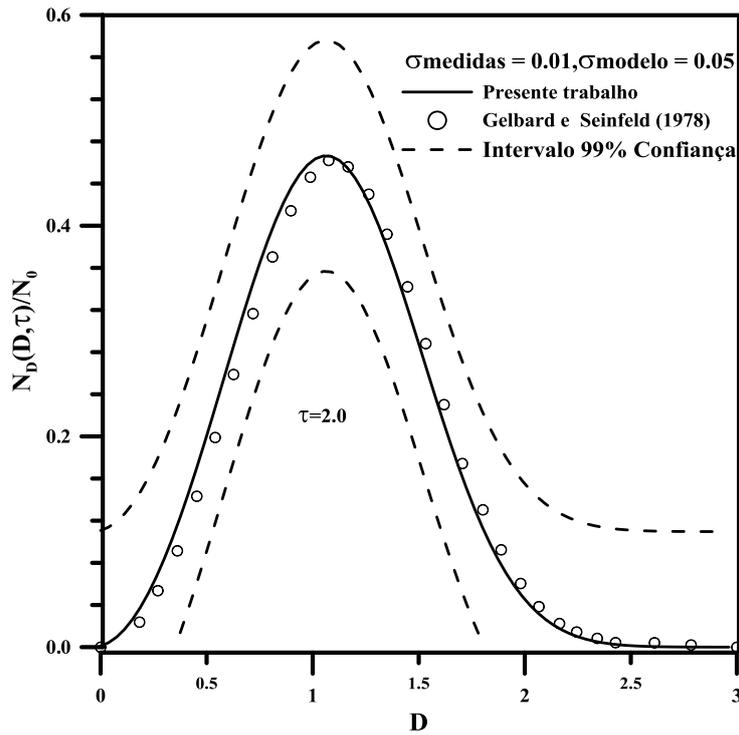
As figuras 6.32 a 6.36 mostram graficamente resultados semelhantes aos da hipótese anterior.



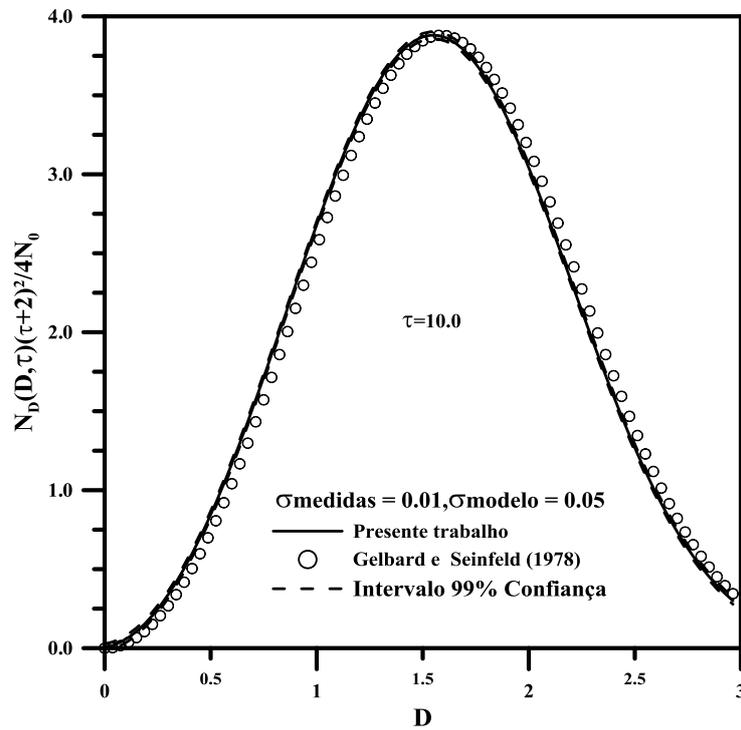
**FIGURA 6.32** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



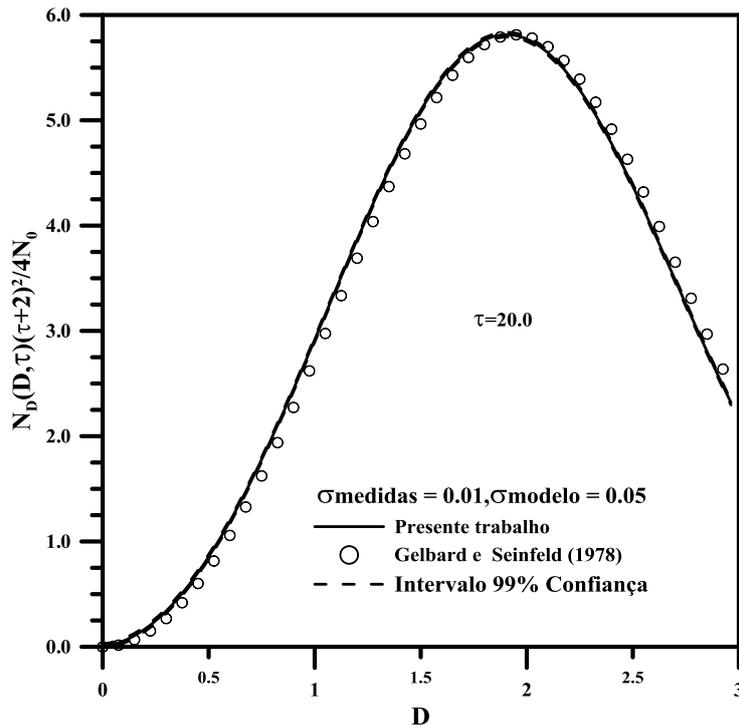
**FIGURA 6.33** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.34** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .



**FIGURA 6.35** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 10,0$ .



**FIGURA 6.36** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 20,0$ .

### 6.3 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 2

Para o caso-teste 2, foram analisados os tempos adimensionais  $\tau = 0,25, 1,0, e 2,0$  admitindo o  $\sigma$  (0,01 – 0,01; 0,01 – 0,05; 0,05 – 0,01; 0,05 – 0,05) os quais foram utilizados para melhor análise dos resultados. Nas Figuras 6.37 a 6.40 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro de partículas (SIR) para  $\tau = 0,25$ .

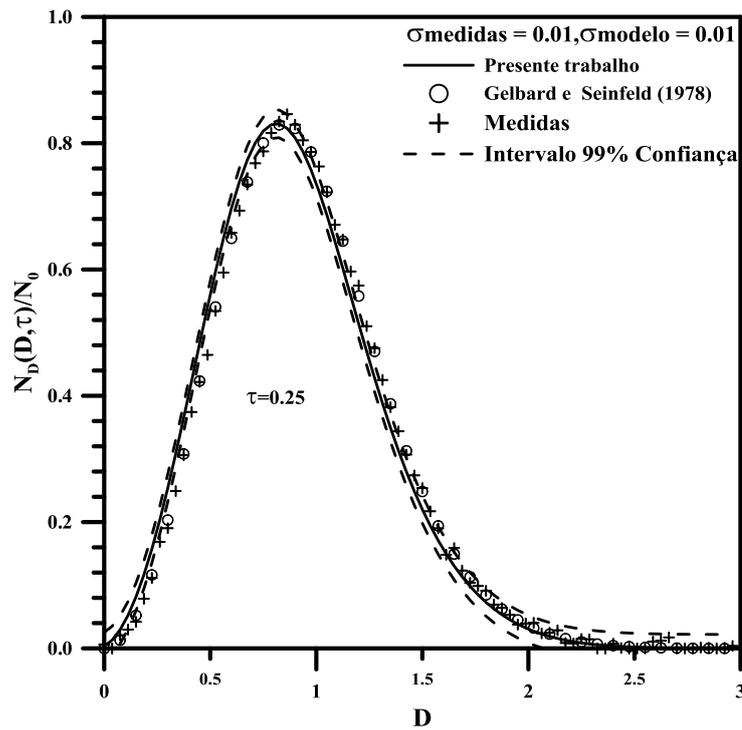
Na Fig. 6.37 nota-se que as medidas convergem para os valores medidos quando o desvio padrão do modelo e das medidas são pequenos. Observa-se graficamente que as medidas e os valores medidos têm a mesma tendência, porém não estão dentro do intervalo de 99% de confiança.

Observa-se na Figura 6.38 que as medidas convergem para os valores medidos quando  $\sigma$  (0,01 – 0,05). Nota-se, também, que as medidas e os valores estimados estão dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.

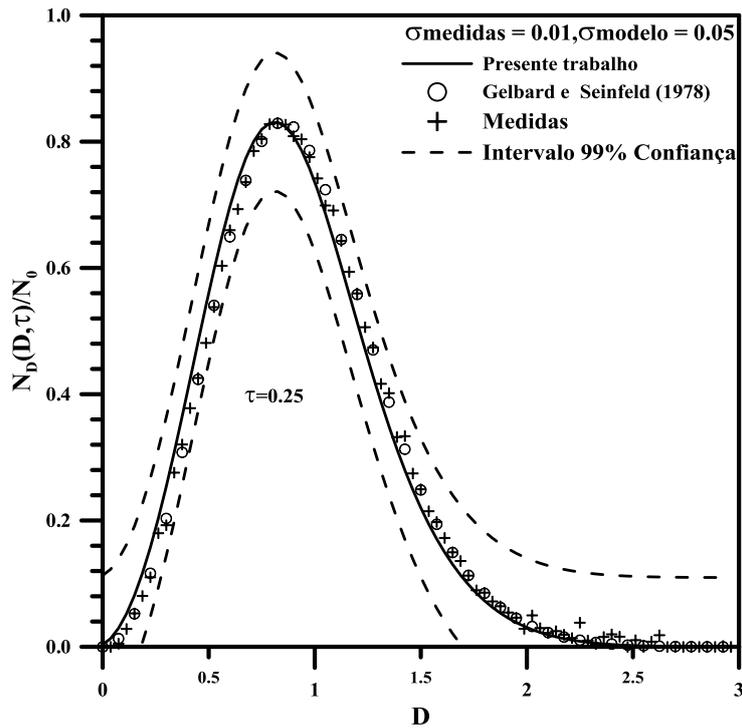
Analisando a Figura 6.39, observa-se que as medidas se afastam dos valores medidos e tendem aos resultados estimados quando o desvio padrão dos valores medidos é grande. Nota-se que as medidas e os valores estimados para a função

densidade de partículas estão parcialmente fora do intervalo de confiança de 99% do modelo. Observa-se também que as medidas da função densidade de tamanho de partículas sofrem forte influencia quando se aumenta o desvio padrão dos valores medidos para partículas de tamanho maior.

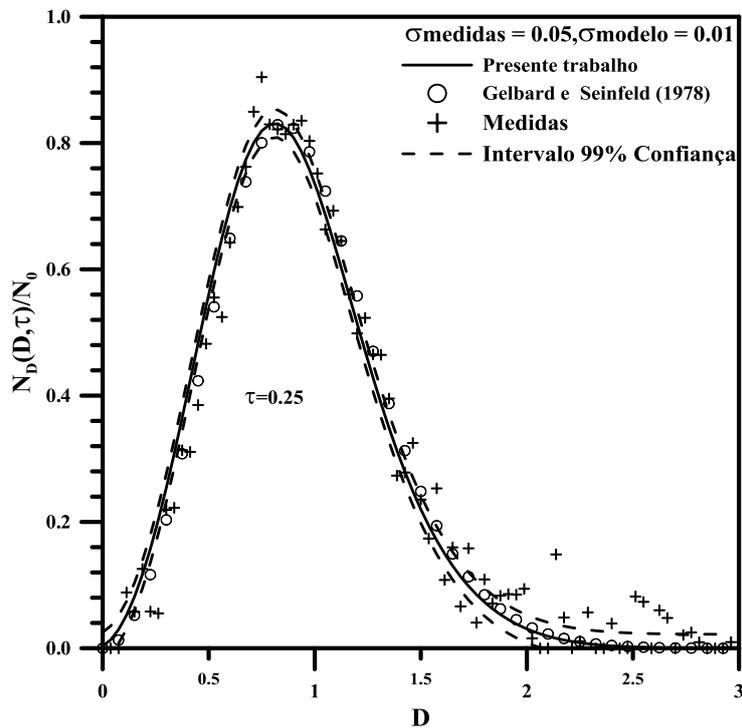
Na Figura 6.40, as medidas tendem aos resultados estimados para grandes  $\sigma$  das medidas e do modelo. Observa-se que as medidas e os valores estimados estão dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.



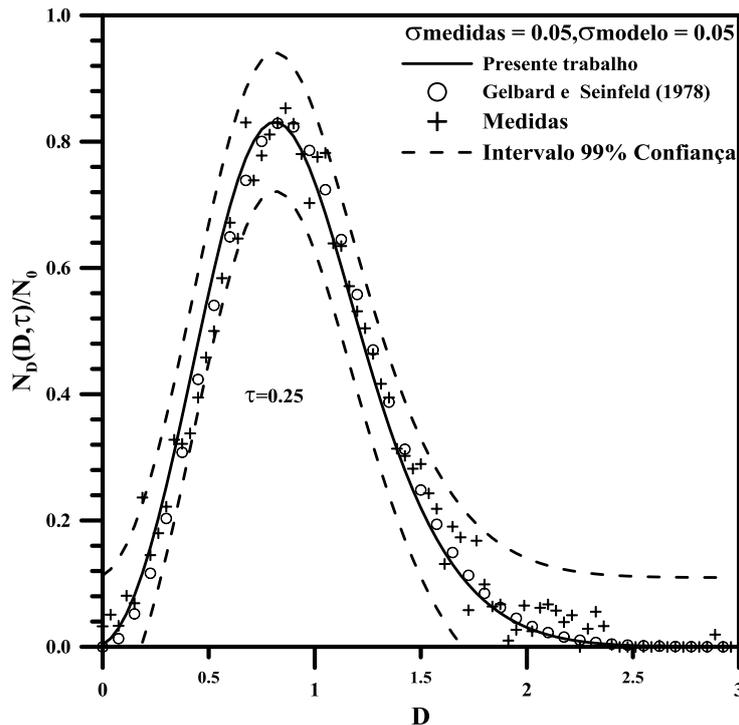
**FIGURA 6.37** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.38** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.39** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.40** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$ .

Nas Figuras 6.41 a 6.44 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro de partículas (SIR) para  $\tau = 1,0$ .

Observa-se na Figura 6.41 que as medidas tendem aos valores medidos para  $\sigma$  pequeno os quais estão dentro do intervalo de confiança de 99%.

Observa-se na Figura 6.42 que as medidas tendem aos valores medidos para  $\sigma$  do modelo grande os quais estão dentro do intervalo de confiança de 99%.

Nas Figuras 6.43 e 6.44, observa-se que as medidas abandonam os valores medidos e tentam buscar o modelo. Porém, para pequenos valores da função densidade do tamanho de partículas o aumento do desvio padrão provoca fortes oscilações nas medidas. Observa-se na Figura 6.43 que as medidas estão fora do intervalo de confiança de 99% devido o aumento do desvio padrão para 5% do valor medido da função densidade de tamanho de partículas as quais sofrem forte influencia para tamanho de partículas maiores. Na Figura 6.44 as medidas estão dentro do intervalo de confiança de 99%, porém devido o aumento do desvio padrão para 5% do valor medido da função densidade de tamanho de partículas elas sofrem forte influencia para tamanho de partículas maiores.

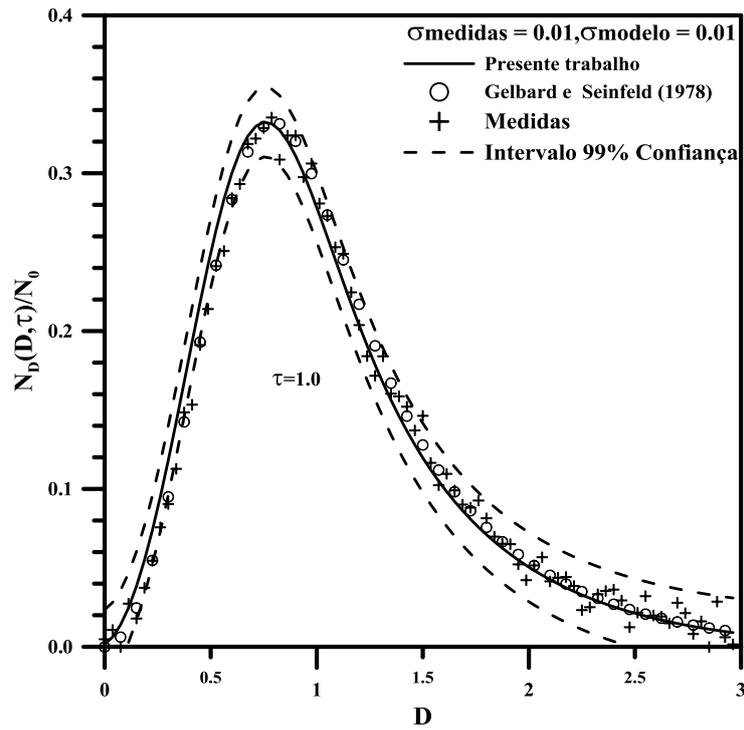


FIGURA 6.41 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$ .

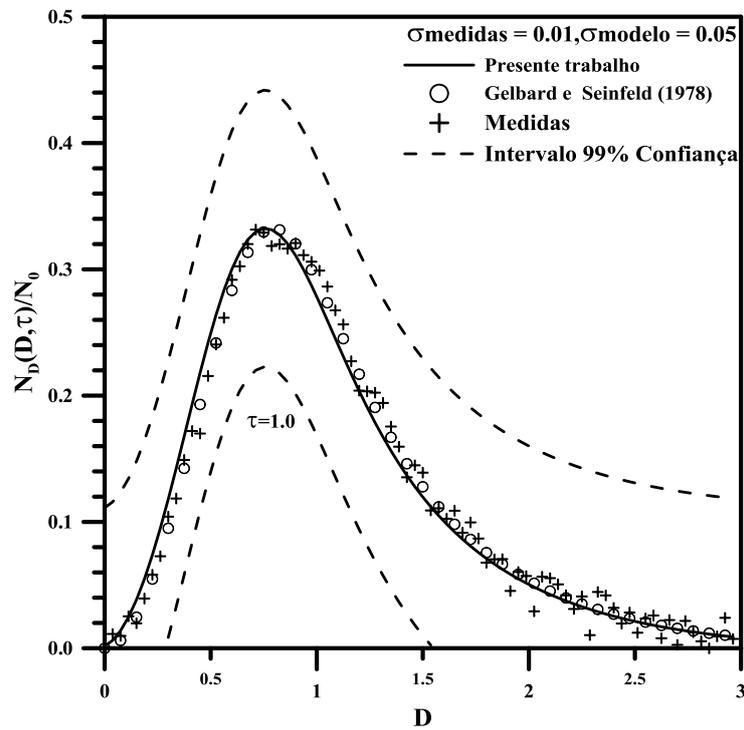
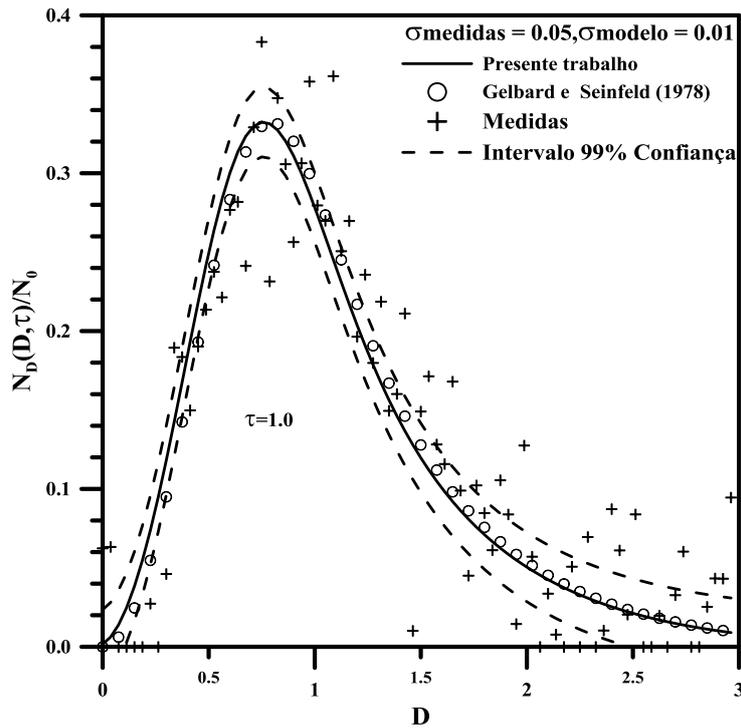
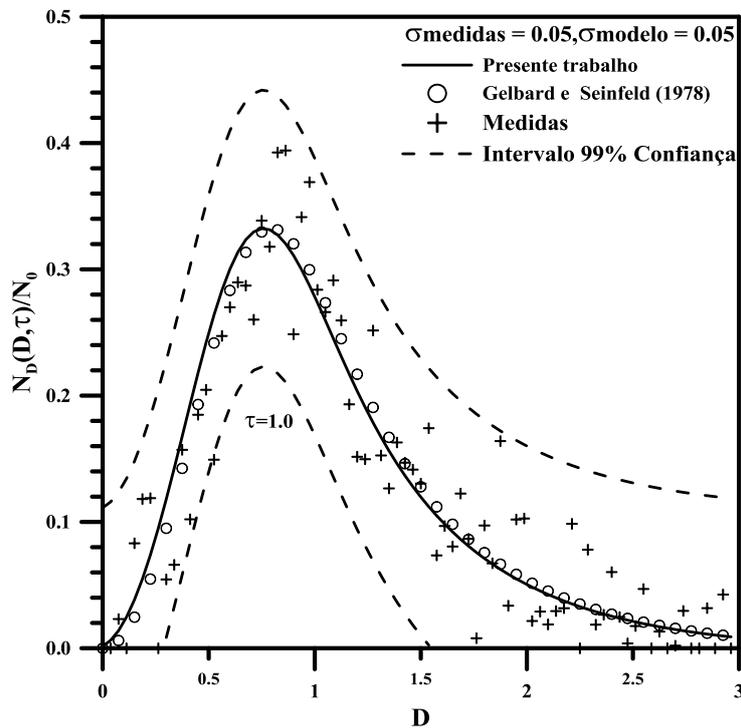


FIGURA 6.42 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.43** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$ .

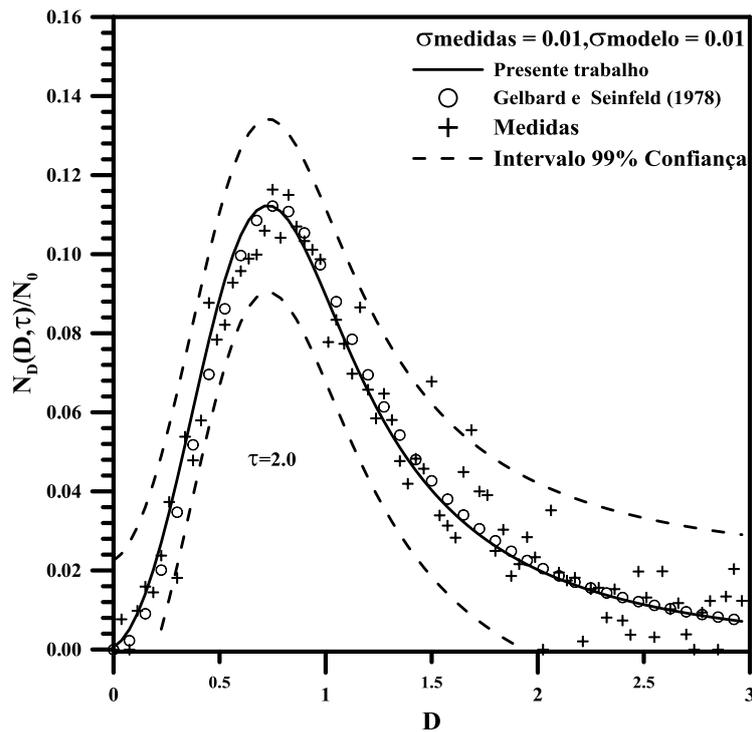


**FIGURA 6.44** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$ .

Nas Figuras 6.45 a 6.48 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro de partículas (SIR) para  $\tau = 2,0$ .

Observa-se nas Figuras 6.45 e 6.46 que as medidas tendem aos valores medidos para pequeno desvio padrão os quais estão dentro do intervalo de confiança de 99%. Idem análise para as Figuras 6.43 e 6.44.

Nota-se nas Figuras 6.47 e 6.48 que as medidas apresentam oscilações fortes e abandonam os valores medidos para grande desvio padrão das medidas e tentam convergir para o modelo. Observa-se na Figura 6.47 que as medidas estão fora do intervalo de confiança de 99%, pelo aumento do desvio padrão para 5% do valor medido da função densidade de tamanho de partículas as quais sofrem forte influencia para pequenos  $n(v,t)$  ao longo da distribuição de tamanho de partículas. Na Figura 6.48 as medidas estão dentro do intervalo de confiança de 99%, porém devido o aumento do desvio padrão para 5% do valor medido e pequena função densidade de tamanho de partículas as medidas sofrem forte influencia ao longo da distribuição de tamanho de partículas.



**FIGURA 6.45** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$ .

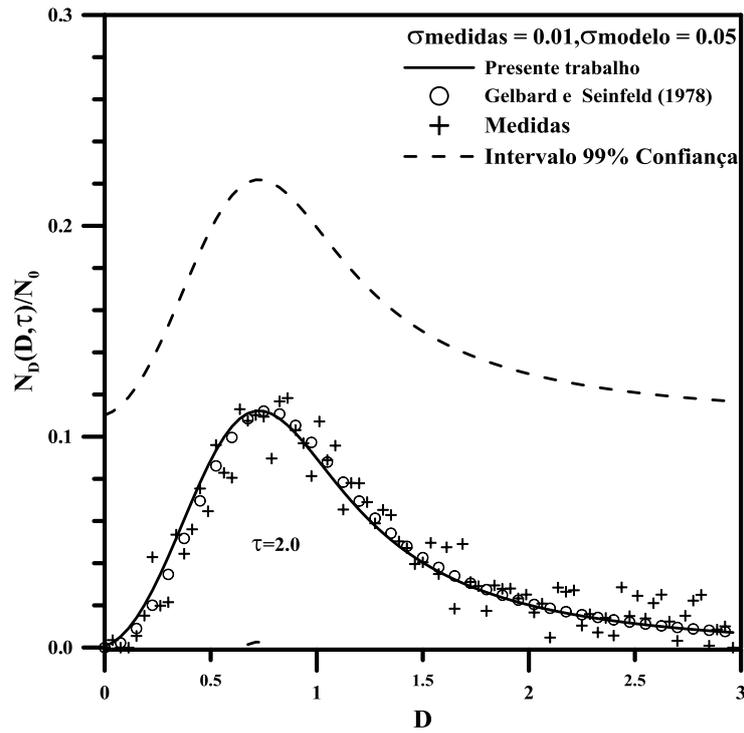


FIGURA 6.46 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$ .

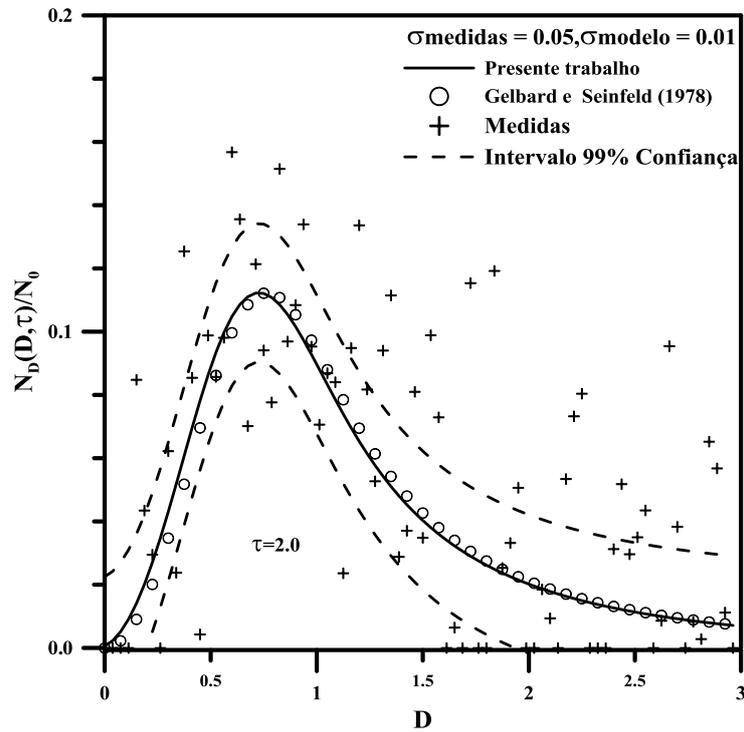
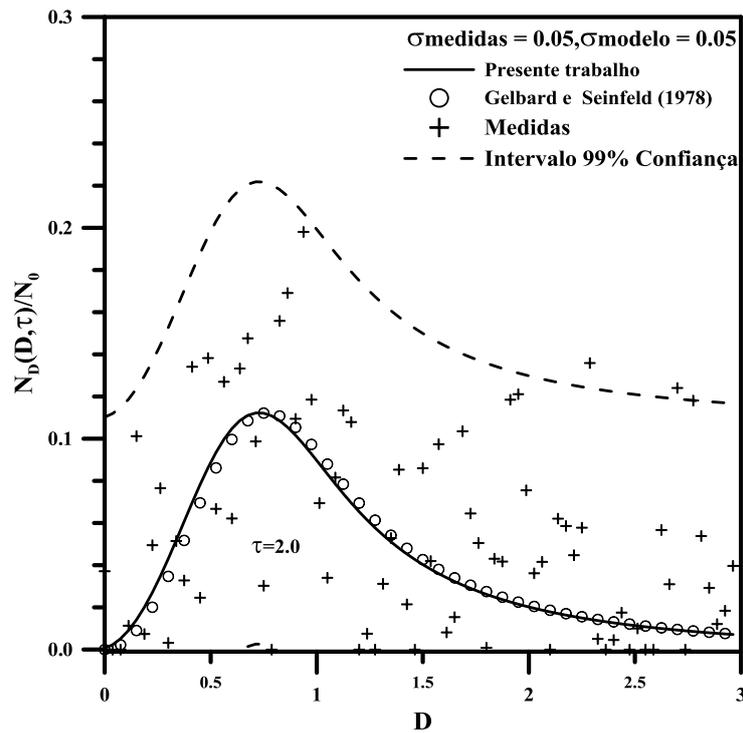


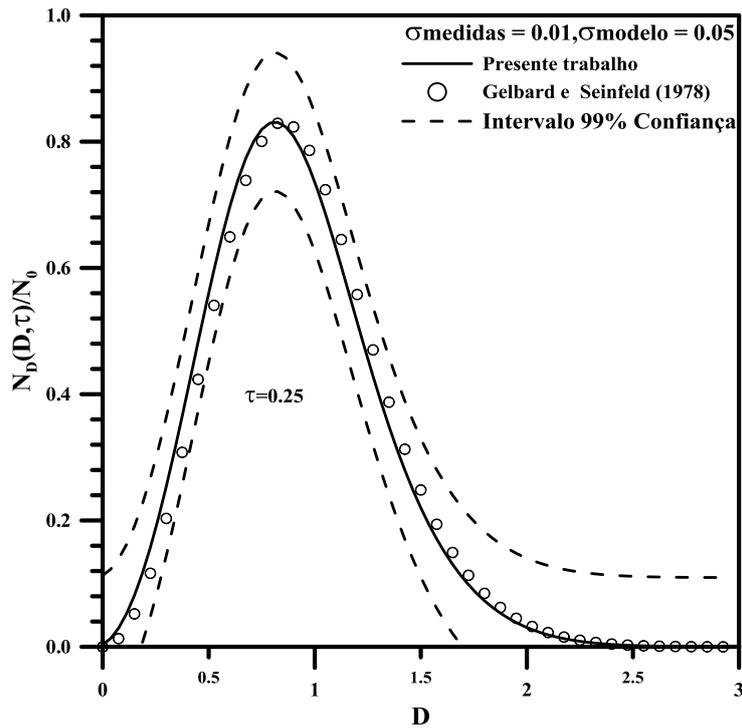
FIGURA 6.47 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$ .



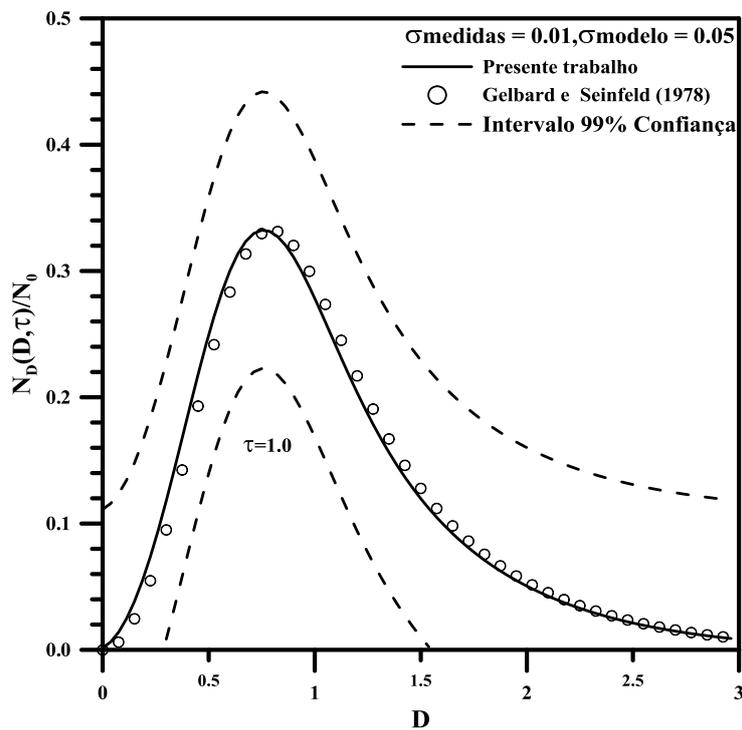
**FIGURA 6.48** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$ .

Nas Figuras 6.49 a 6.54 são apresentados os resultados da simulação usando a combinação de desvio padrão (0,01 – 0,05) nos valores medidos e modelo. Nota se graficamente que os resultados são muito bons entre os valores medidos e os estimados para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0, 2,0$  e avaliou se as hipóteses de um e três ponto de tomada de amostras.

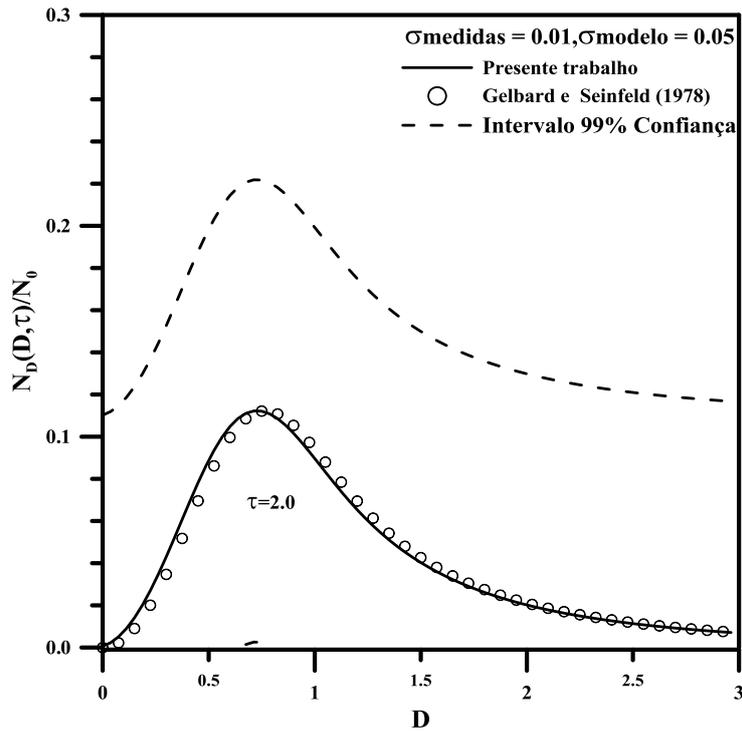
- Hipótese de uma tomada de amostras



**FIGURA 6.49** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .

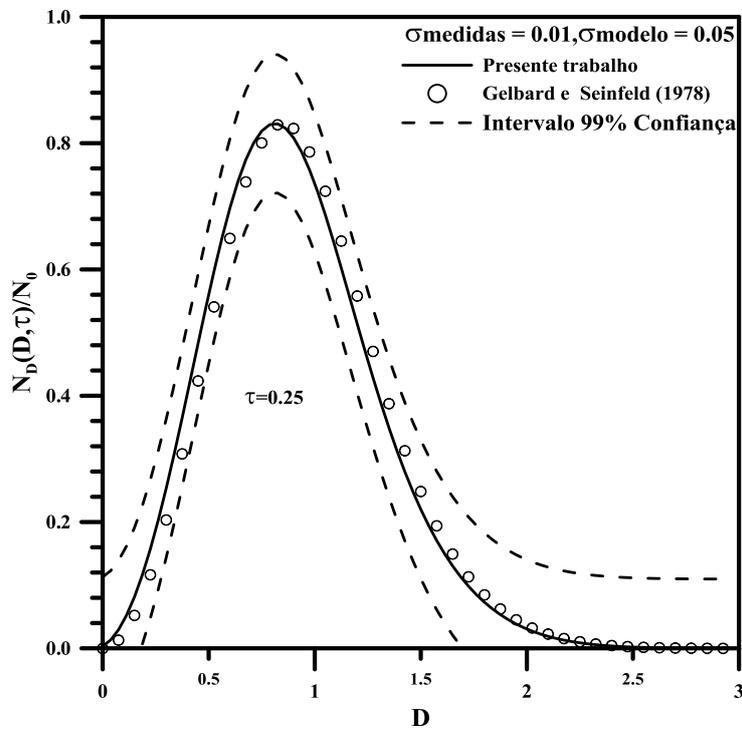


**FIGURA 6.50** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

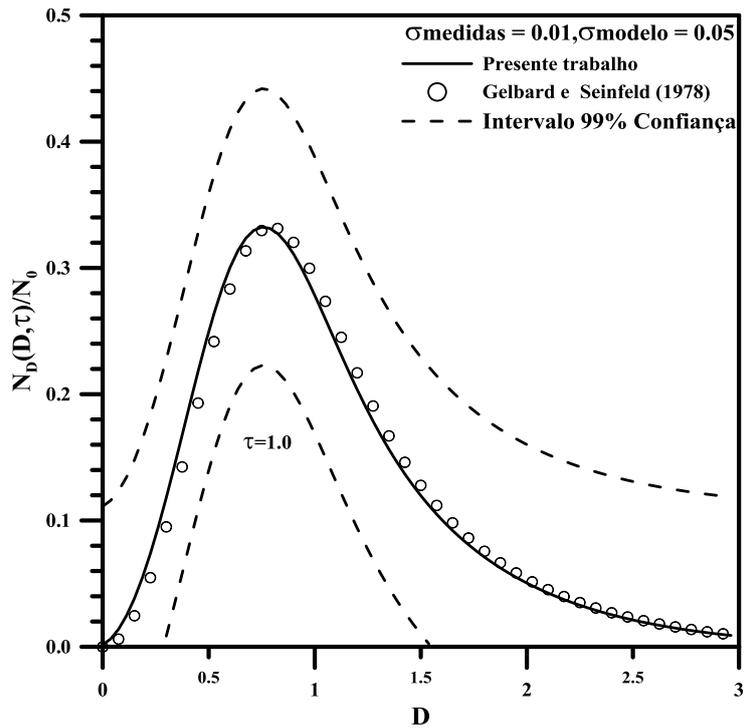


**FIGURA 6.51** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

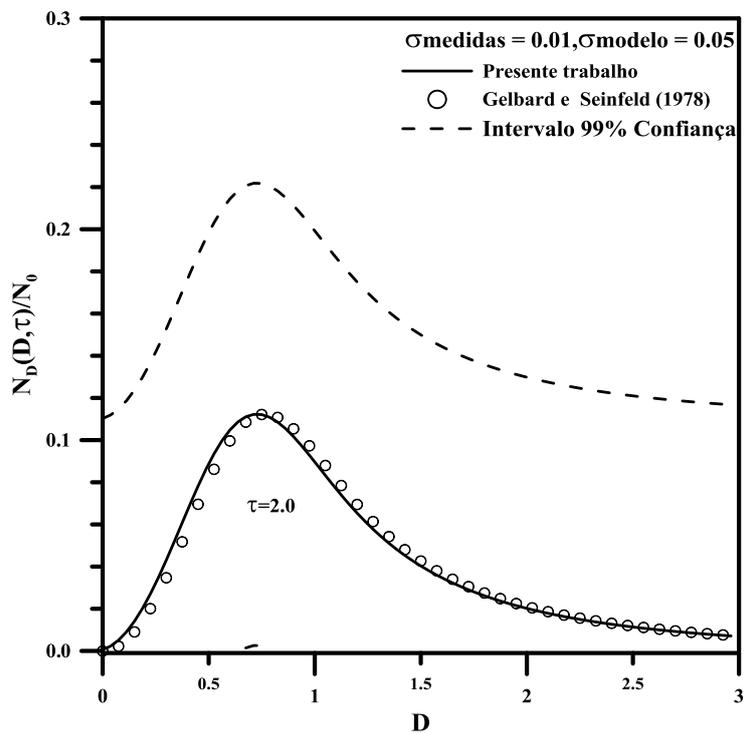
- Hipótese de três tomadas de amostragem



**FIGURA 6.52** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.53** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .



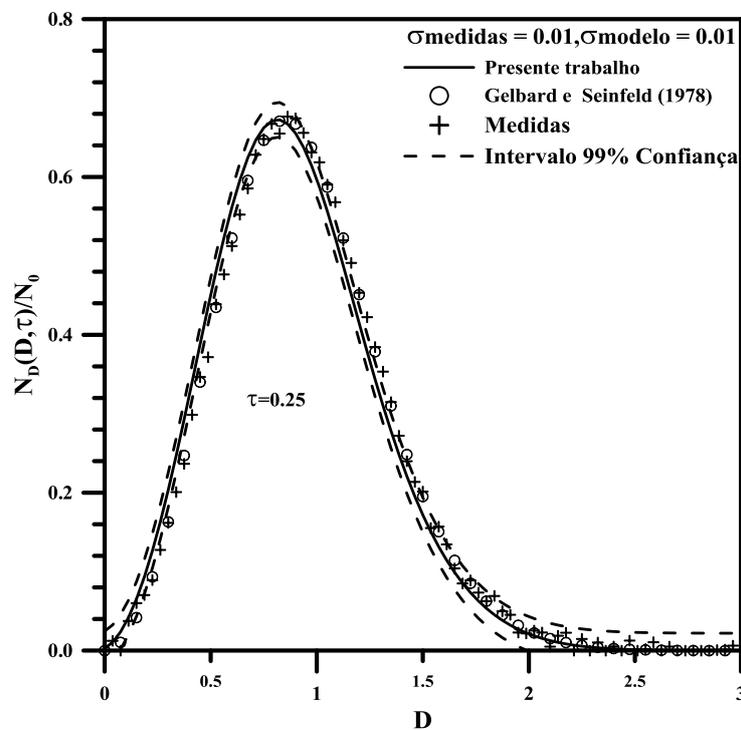
**FIGURA 6.54** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

## 6.4 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 3

Para o caso-teste 3, foram usados os mesmos parâmetros do caso-teste 2, para análise dos resultados. As Figuras 6.55 a 6.58 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro SIR para  $\tau = 0,25$ .

Nas Figuras 6.55 e 6.56, nota-se as mesmas tendências dos resultados apresentados pelas Figuras 6.37 e 6.38 com suas respectivas análises.

Nota-se nas Figuras. 6.57 e 6.58, as mesmas tendências dos resultados apresentados pelas Figuras 6.39 e 6.40 com suas respectivas análises.



**FIGURA 6.55** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$ .

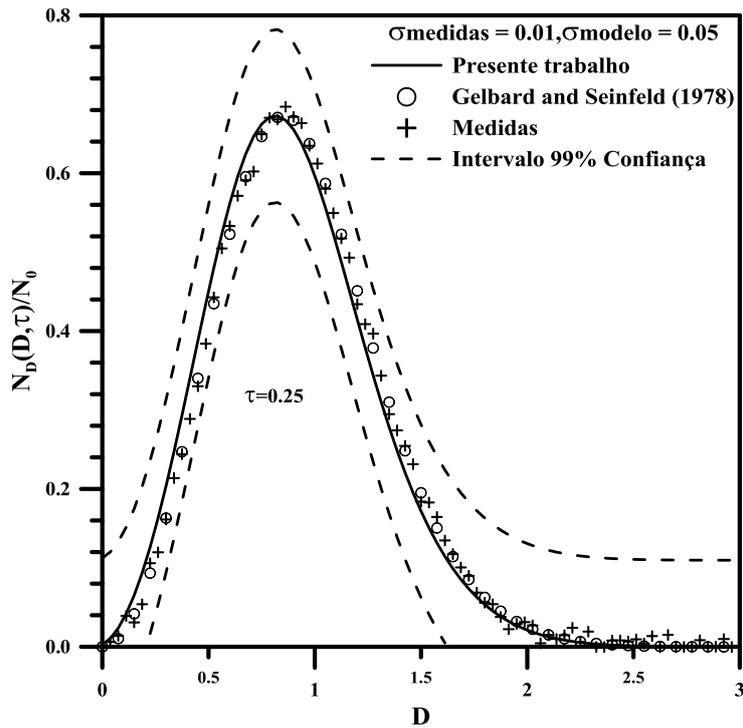


FIGURA 6.56 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$ .

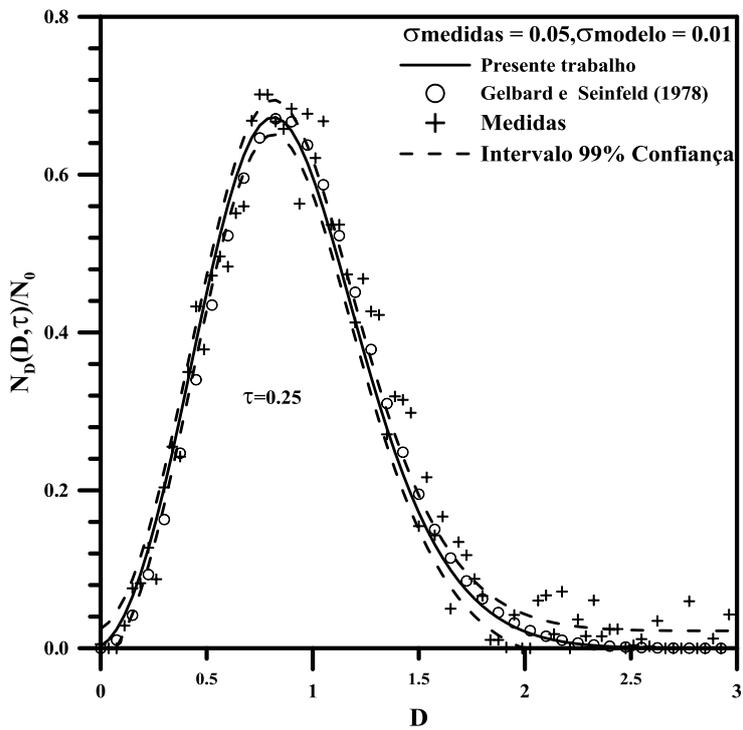
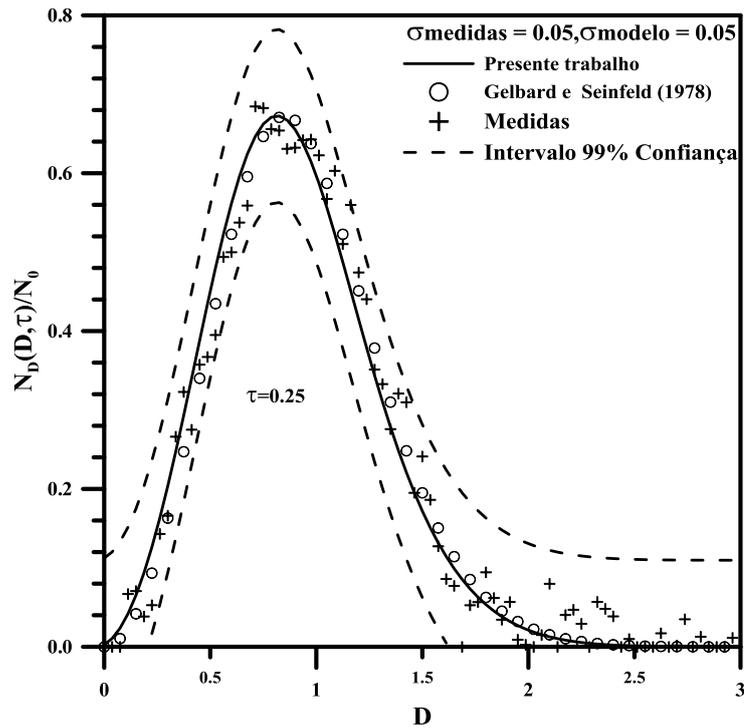


FIGURA 6.57 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.58** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$ .

Nas Figuras 6.59 a 6.62 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro de partículas (SIR) para  $\tau = 1,0$ . Observa-se que as figuras acima citadas apresentam a mesma concordância das Figuras 6.41 a 6.44 com suas respectivas análises.

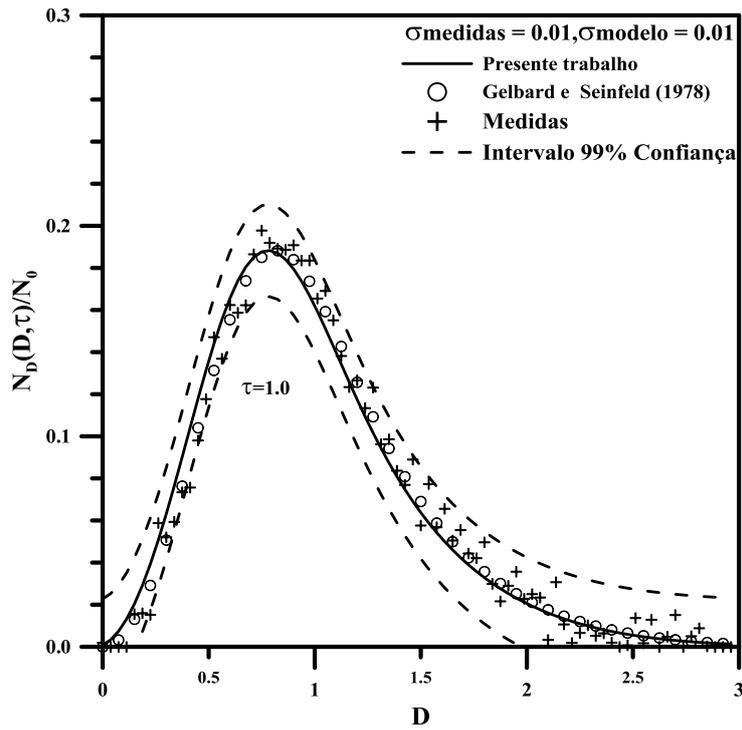


FIGURA 6.59 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$ .

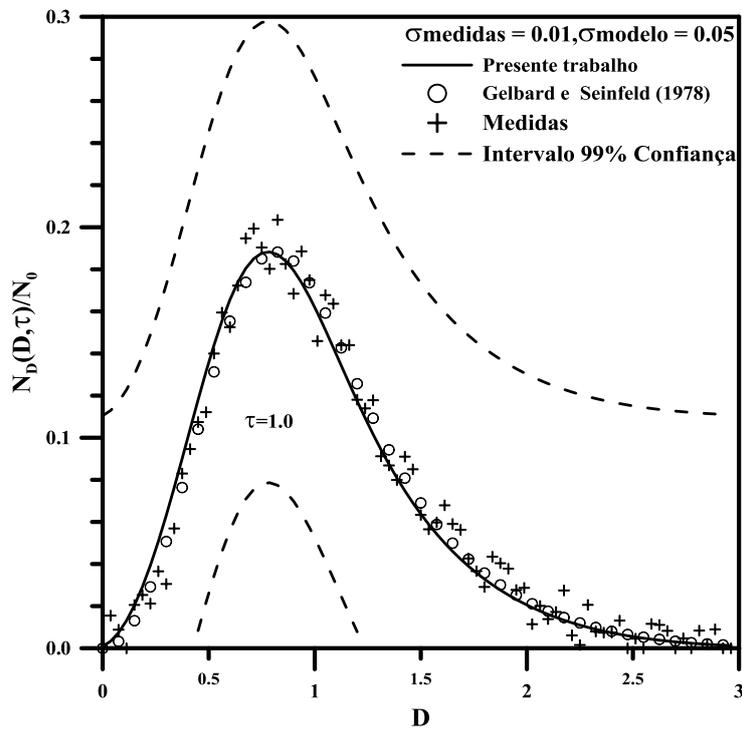
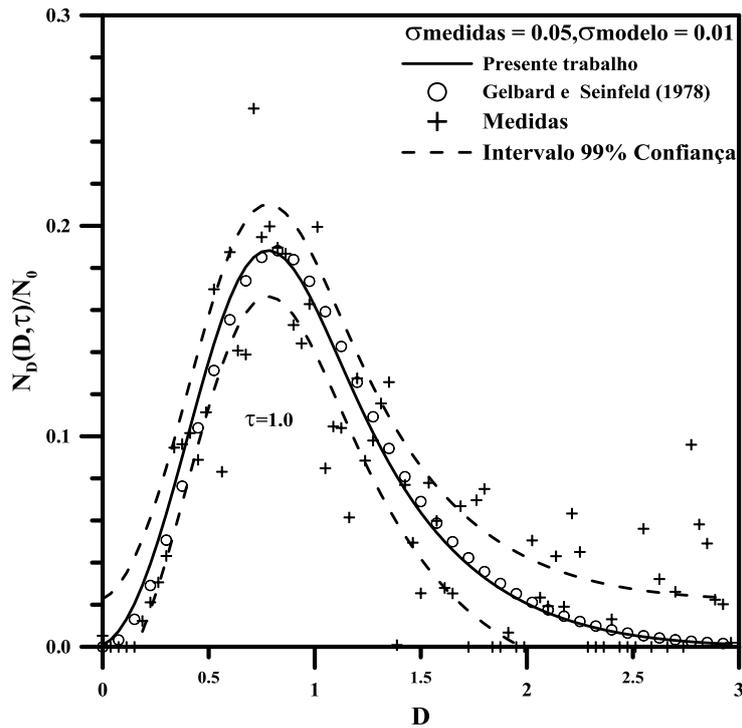
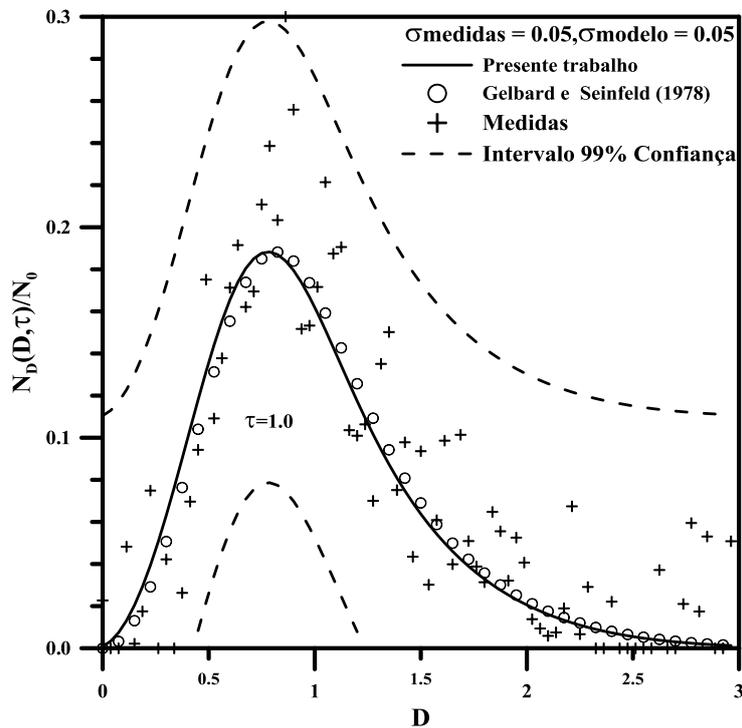


FIGURA 6.60 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$ .



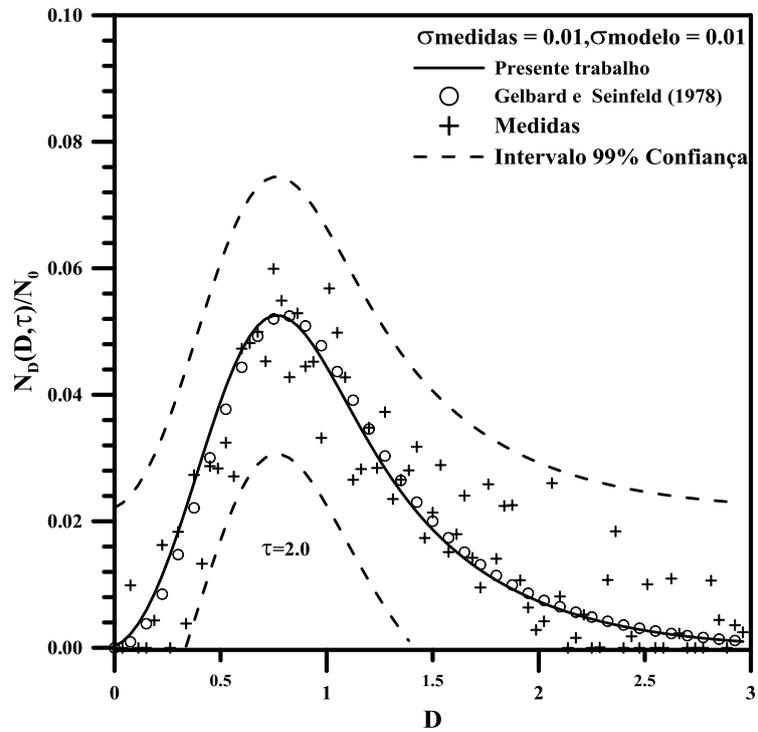
**FIGURA 6.61** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.62** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$ .

Nas Figuras 6.63 a 6.66 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro com amostragem e Reamostragem

por importância seqüencial para  $\tau = 2,0$ . Observa-se que as figuras acima citadas apresentam a mesma concordância gráfica das Figuras 6.45 a 6.48 com suas respectivas análises.



**FIGURA 6.63** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$ .

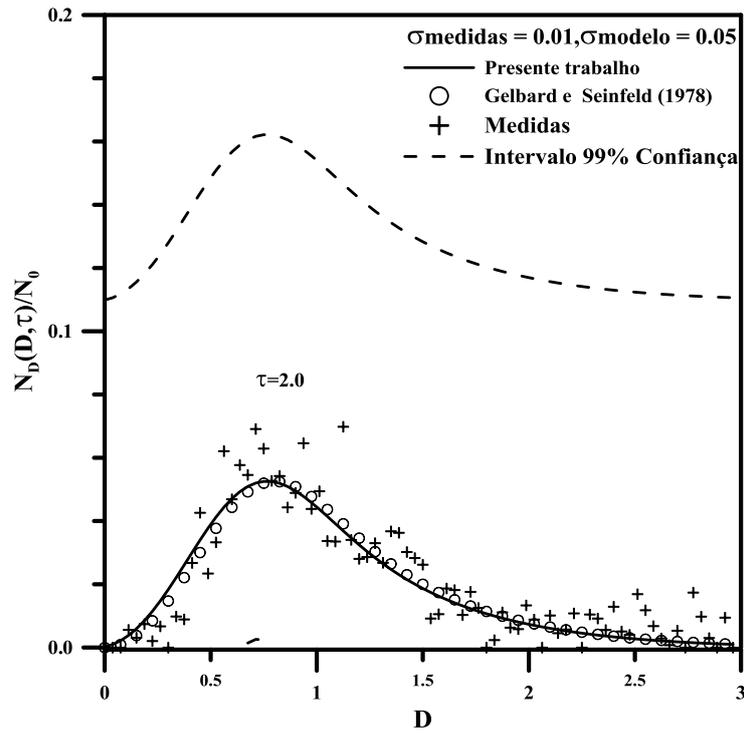


FIGURA 6.64 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$ .

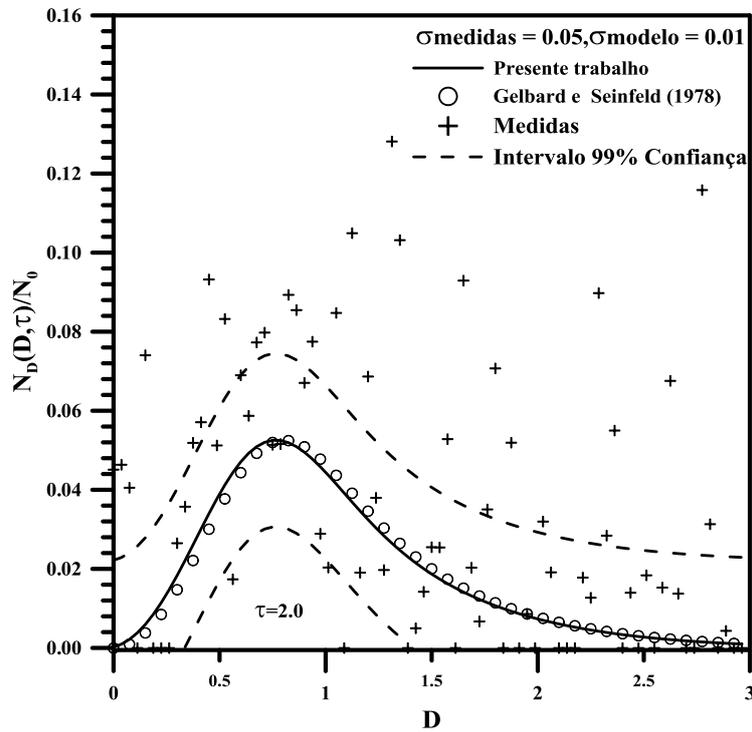
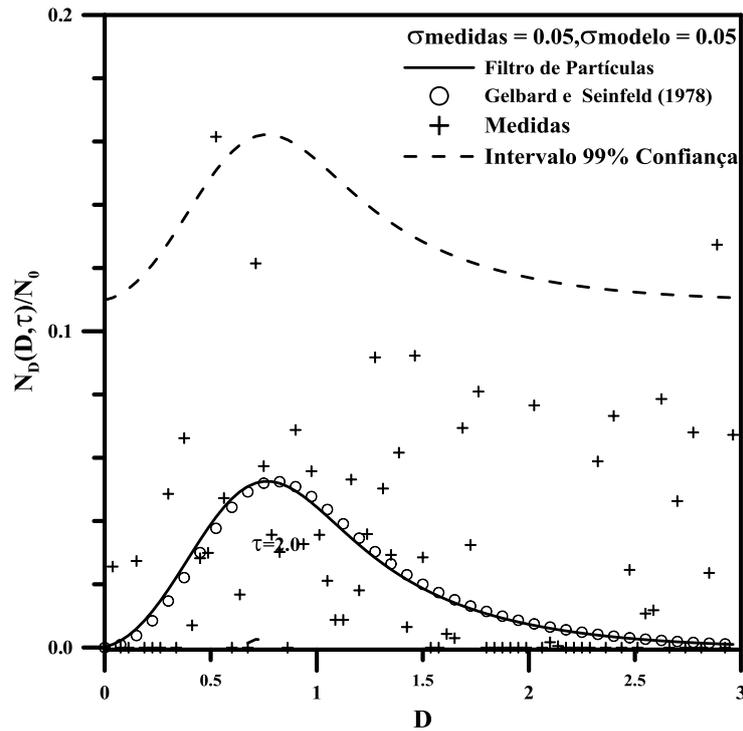


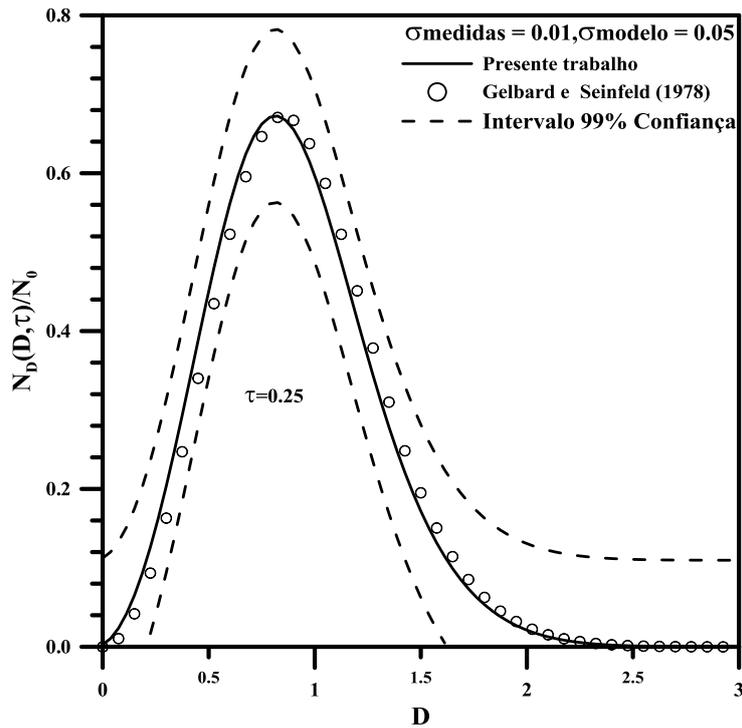
FIGURA 6.65 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$ .



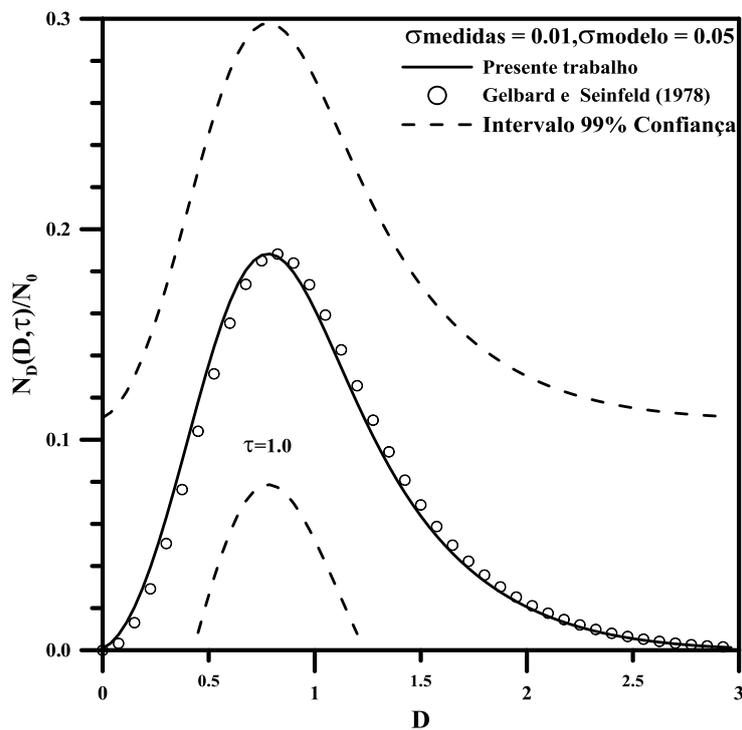
**FIGURA 6.66** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$ .

Nas Figuras 6.67 a 6.72 são apresentados os resultados da simulação usando a combinação de desvio padrão (0,01 – 0,05) nos valores medidos e modelados. Nota se graficamente que os resultados são muito bons entre os valores medidos do problema direto e os estimados para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0, 2,0$  e avaliam-se as hipóteses de um e três ponto de tomada de amostras.

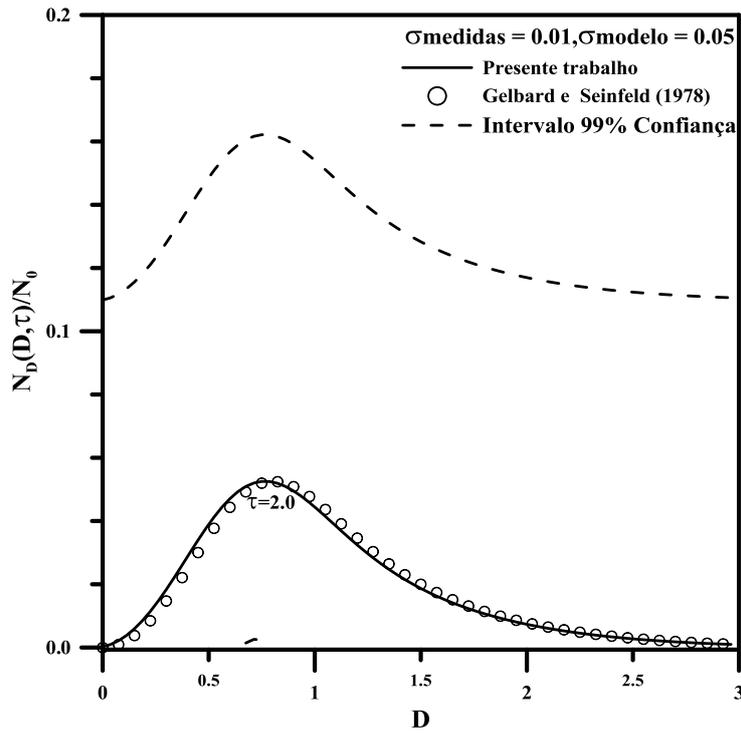
- Hipótese de uma tomada de amostras



**FIGURA 6.67** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .

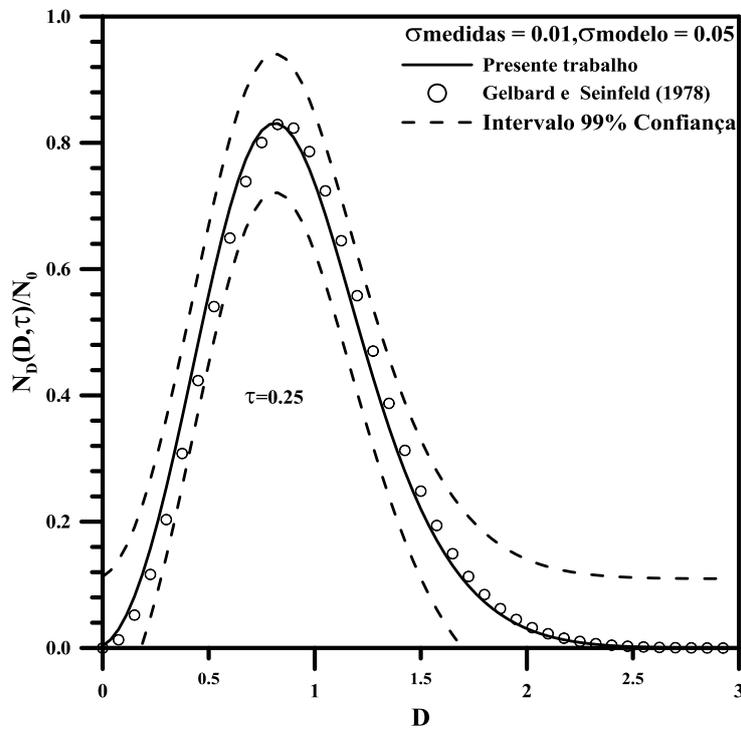


**FIGURA 6.68** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

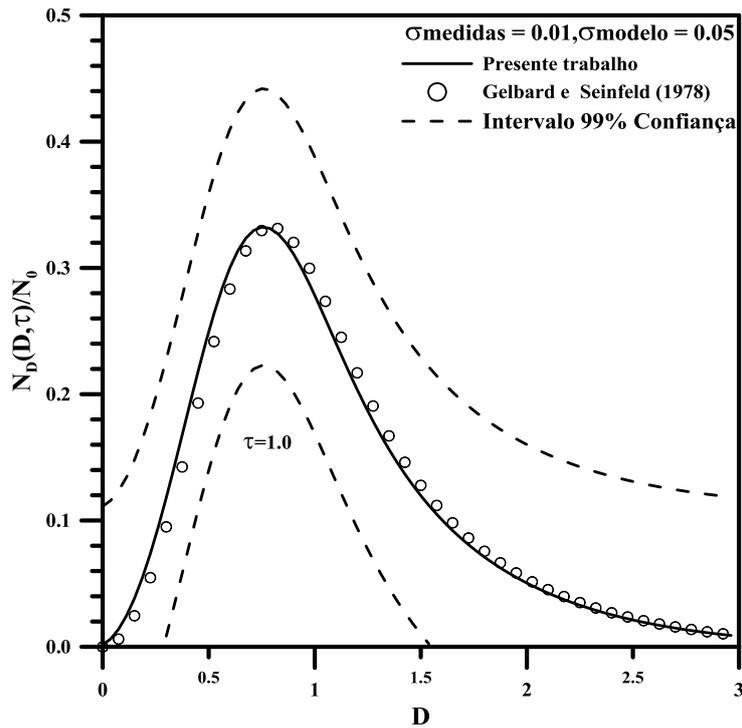


**FIGURA 6.69** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

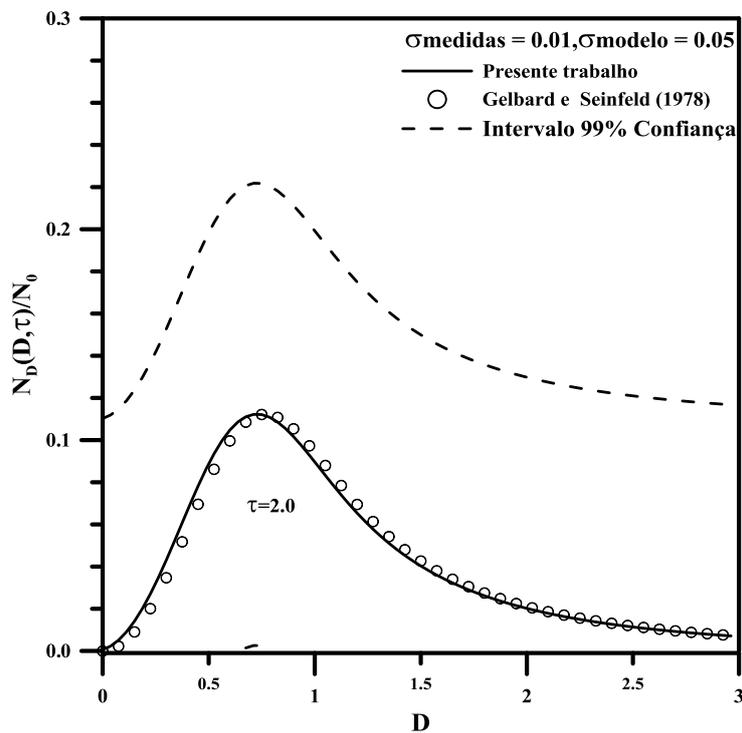
- Hipótese de três pontos de amostragens



**FIGURA 6.70** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.71** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

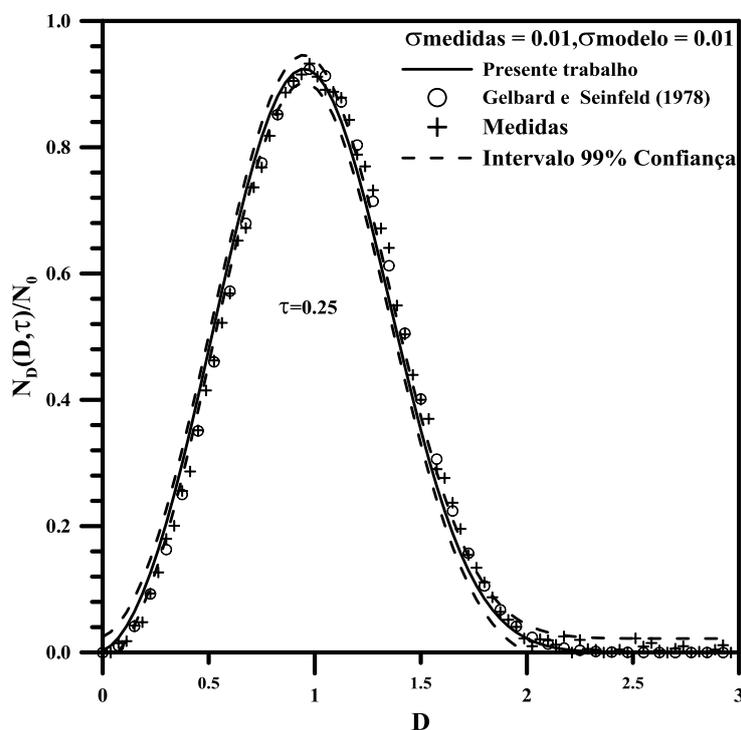


**FIGURA 6.72** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

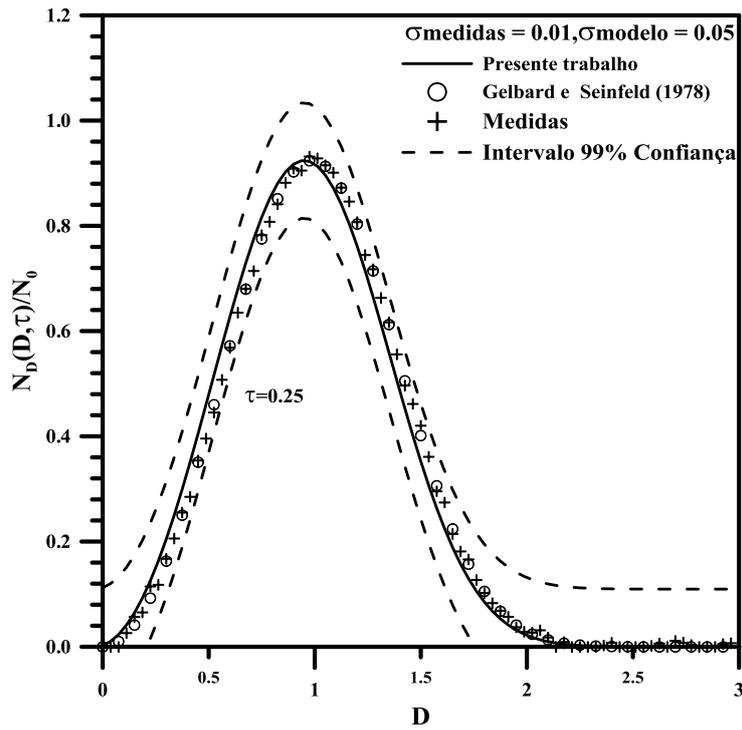
## 6.5 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 4

Para o caso-teste 4, foram usados os mesmos parâmetros do caso-teste 3, para análise dos resultados. Nas Figuras 6.73 a 6.76 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro SIR para  $\tau = 0,25$ .

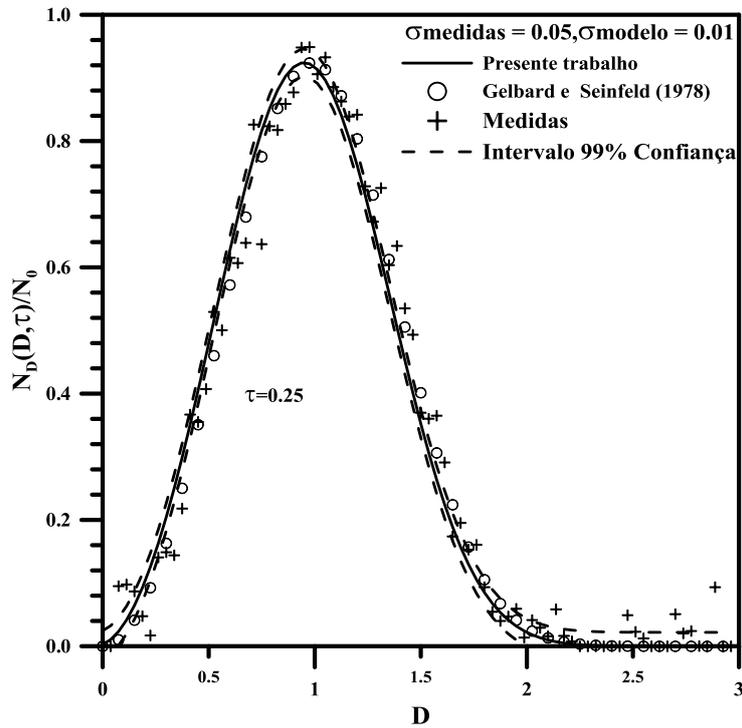
Nas Figuras 6.73 a 6.76, notam-se as mesmas tendências dos resultados apresentados pelas Figuras 6.55 e 6.56 com suas respectivas análises.



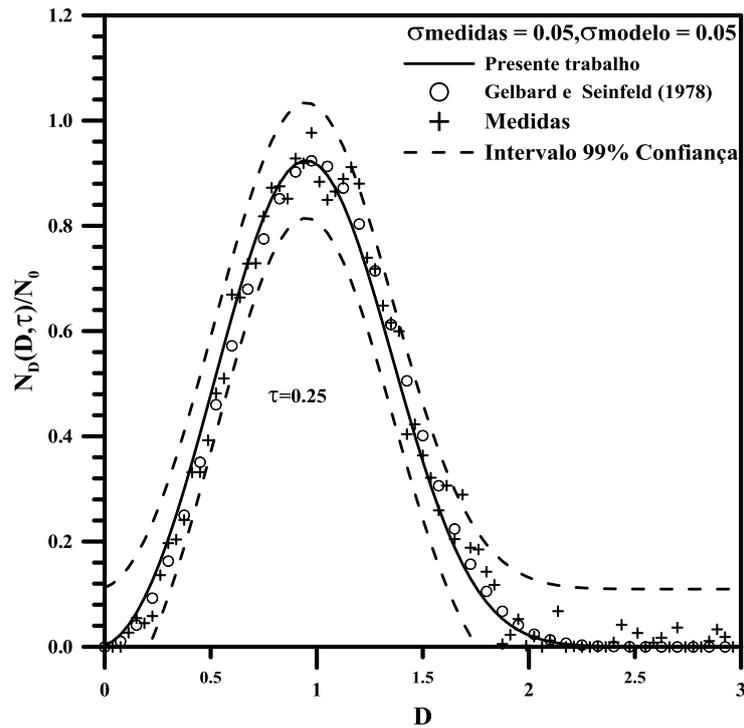
**FIGURA 6.73** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.74** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$ .

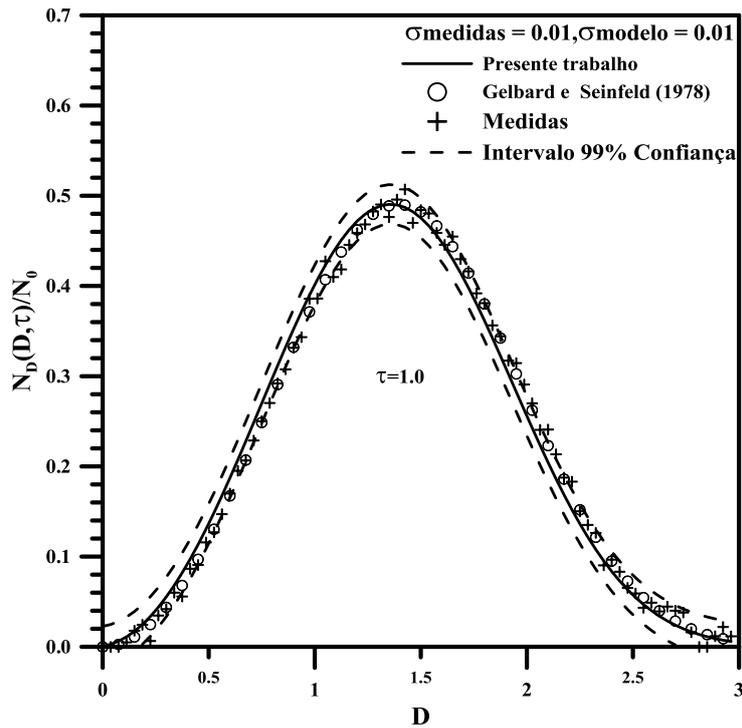


**FIGURA 6.75** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$ .

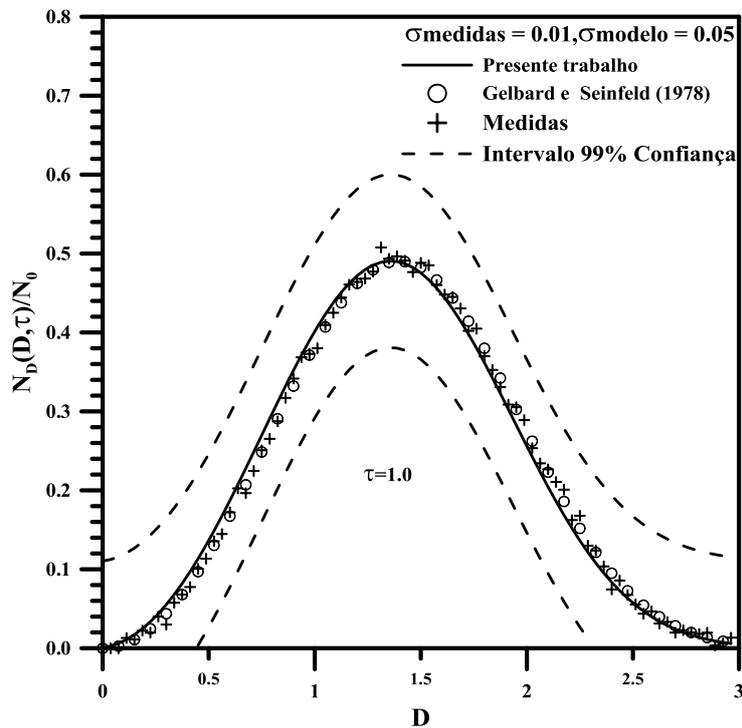


**FIGURA 6.76** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$ .

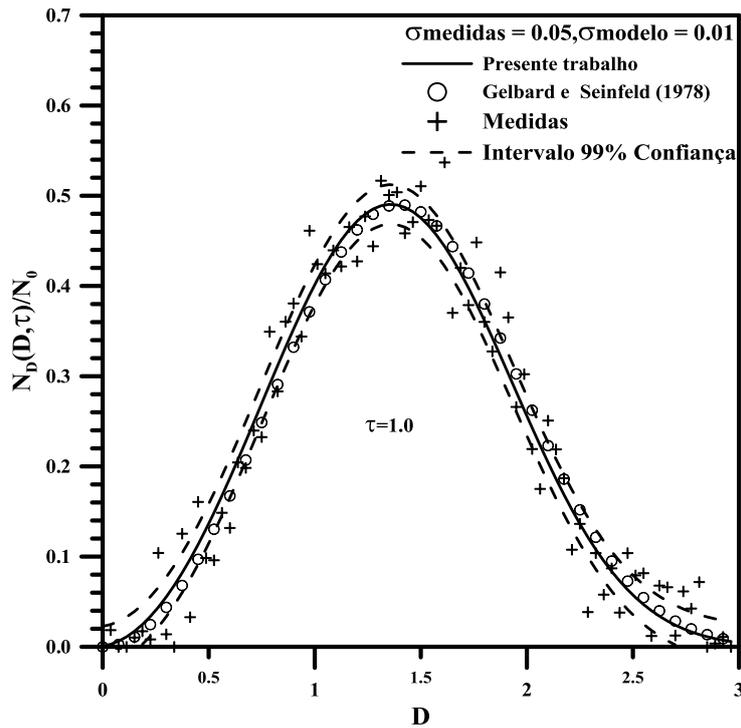
Nas Figuras 6.77 a 6.80 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro de partículas (SIR) para  $\tau = 1,0$ . Verifica-se nas figuras acima citadas, a mesma concordância das Figuras 6.41 a 6.44 com suas respectivas análises.



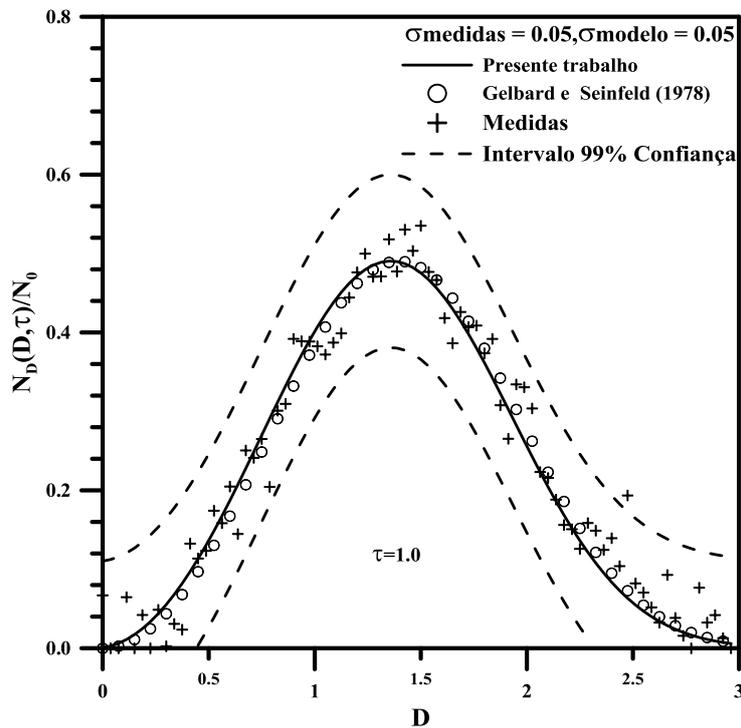
**FIGURA 6.77** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.78** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$ .



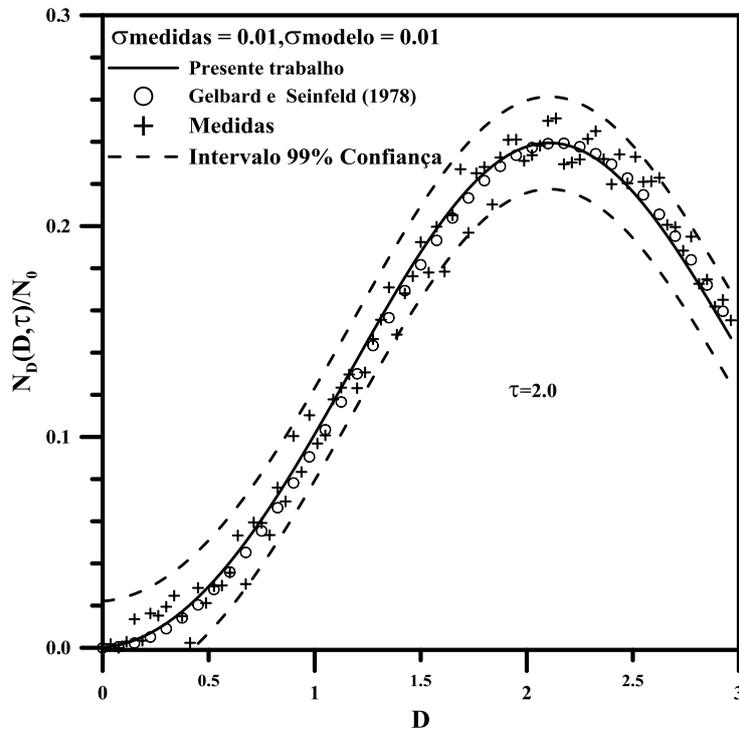
**FIGURA 6.79** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.80** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$ .

Nas Figuras 6.81 a 6.84 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução exata com os obtidos via filtro com amostragem e Reamostragem

por importância Sequencial de partículas para  $\tau = 2,0$ . Nota-se que as figuras acima citadas, apresentam a mesma concordância das Figuras 6.45 a 6.48 com suas respectivas análises.



**FIGURA 6.81** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$ .

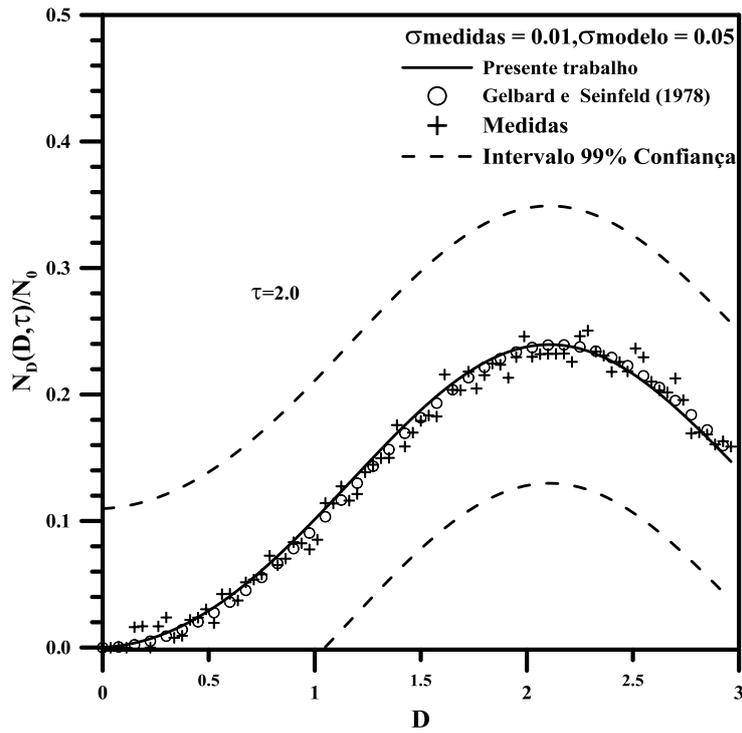


FIGURA 6.82 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$ .

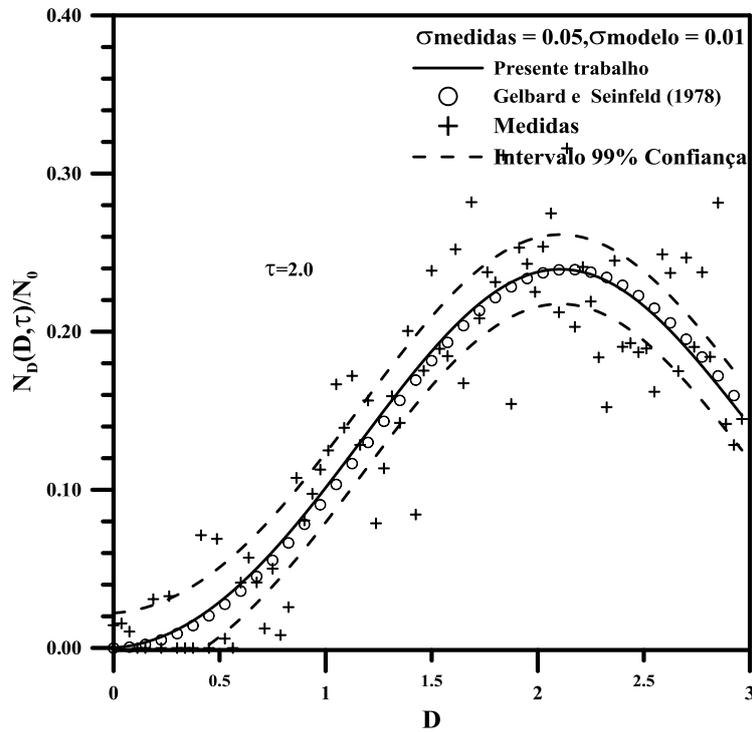
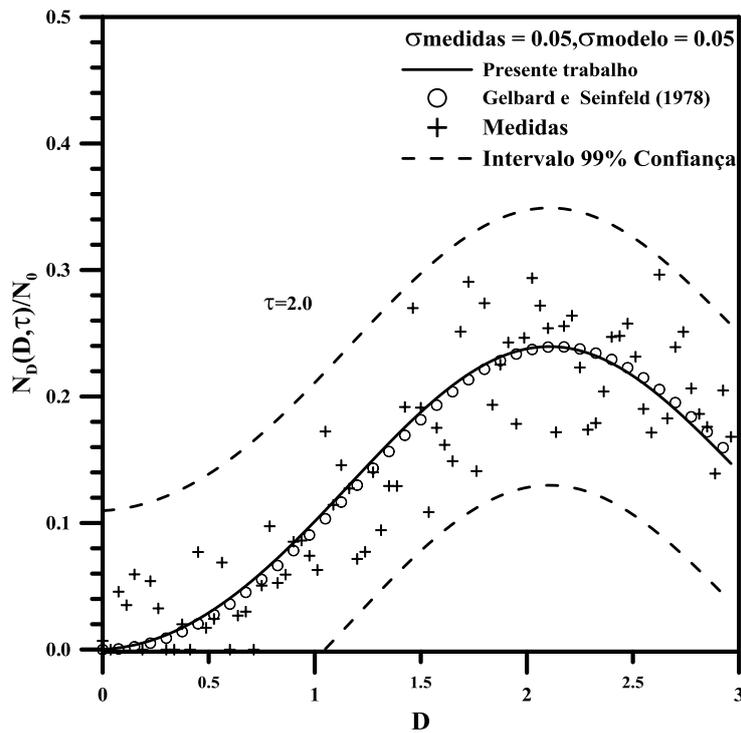


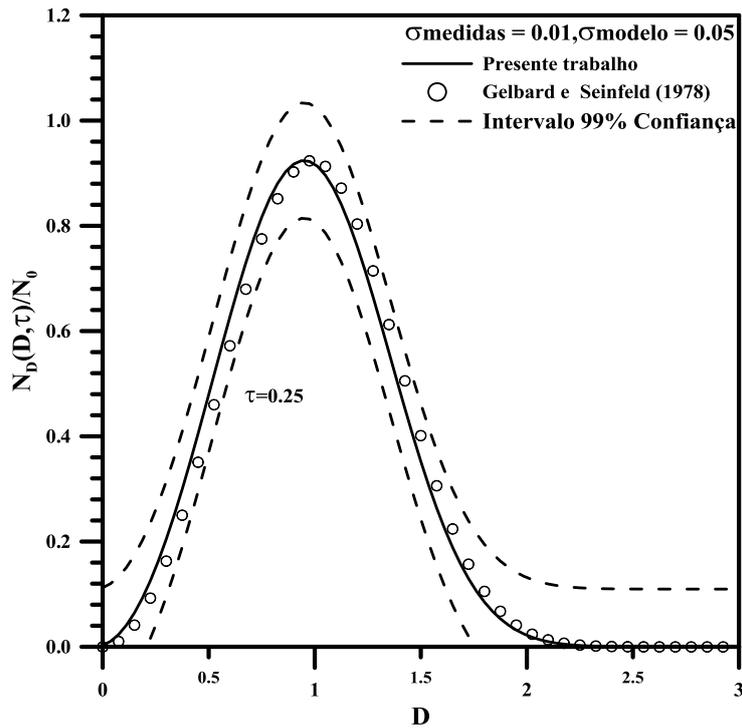
FIGURA 6.83 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$ .



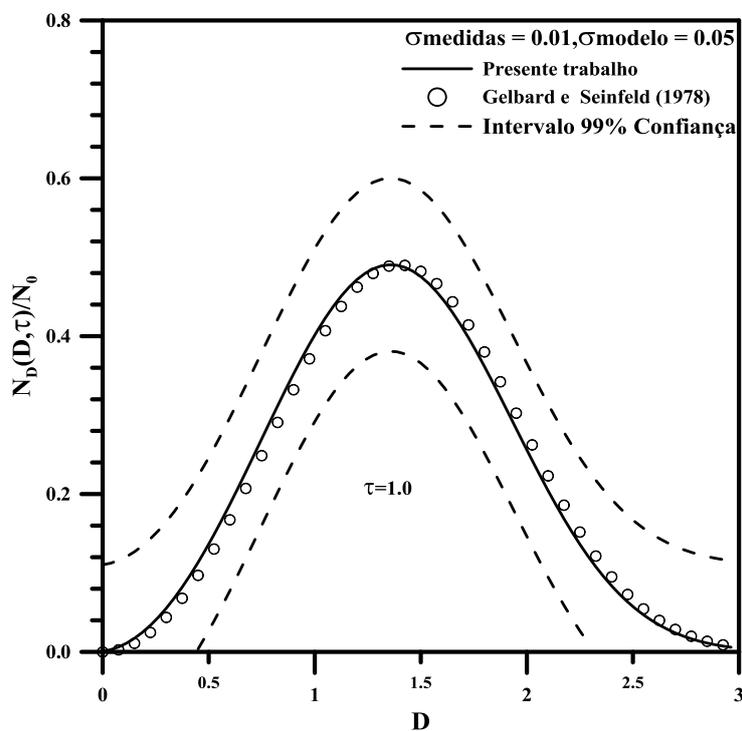
**FIGURA 6.84** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$ .

Nas Figuras 6.85 a 6.90 são apresentados os resultados da simulação usando a combinação de desvio padrão (0,01 – 0,05) nos valores obtidos pelo problema direto e os simulados. Observa-se graficamente que os resultados são bons entre os valores medidos e os estimados para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0, 2,0$  e avaliou-se as hipóteses de um e três ponto de tomada de amostras.

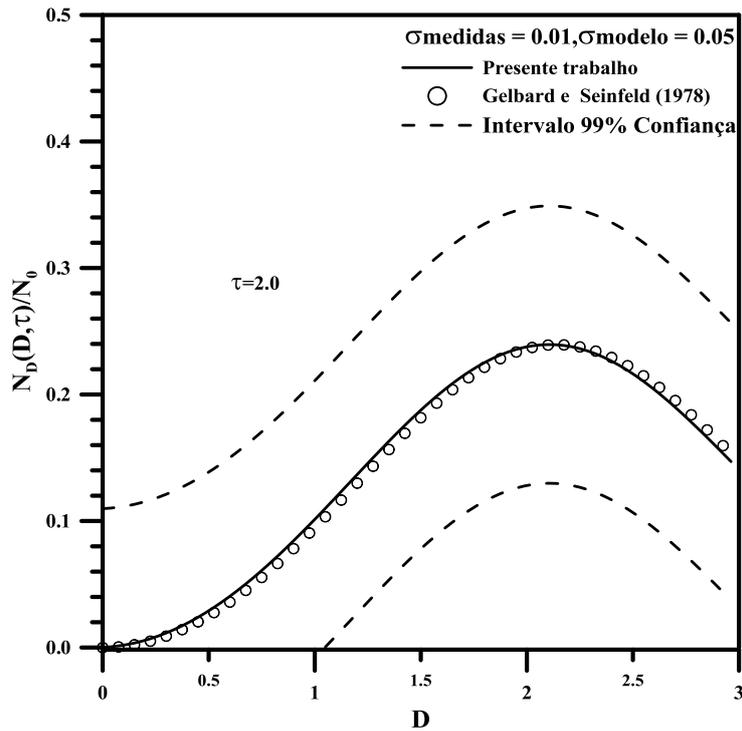
- Hipótese de uma tomada de amostras



**FIGURA 6.85** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .

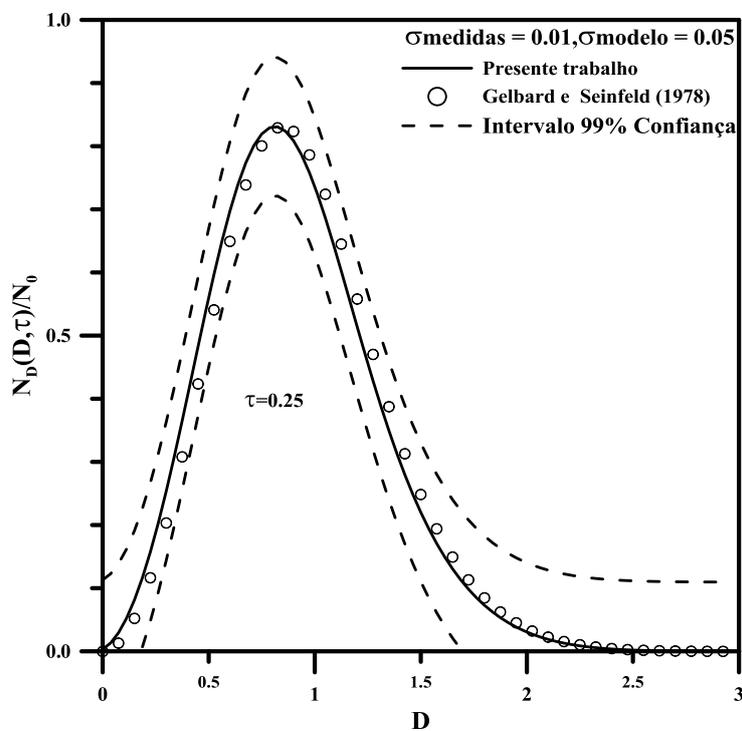


**FIGURA 6.86** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

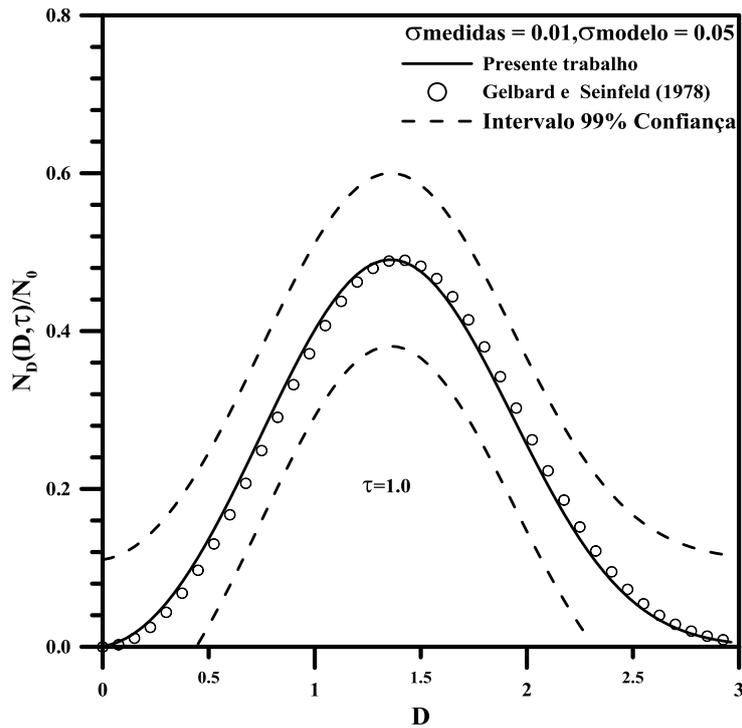


**FIGURA 6.87** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

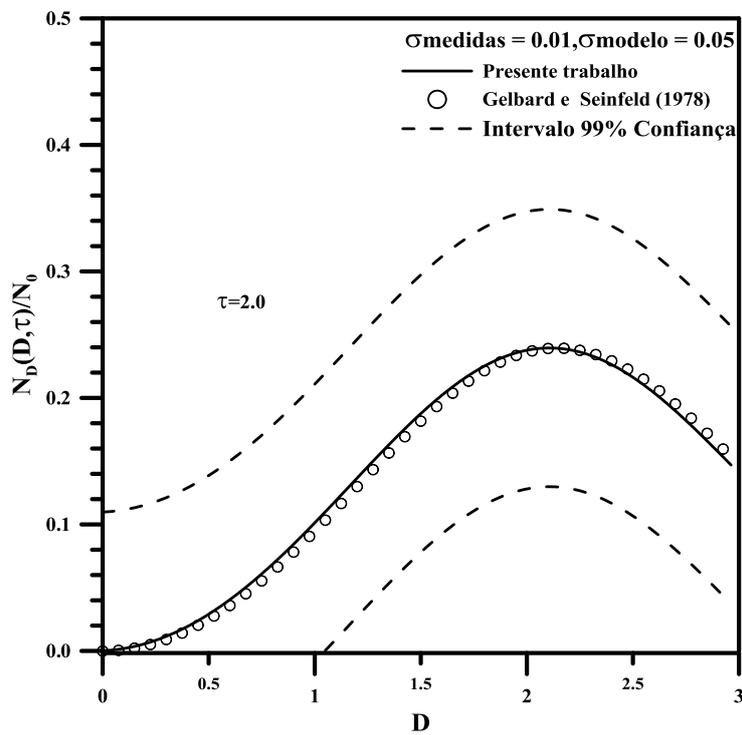
- Hipótese de três tomadas de amostragens



**FIGURA 6.88** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.89** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .



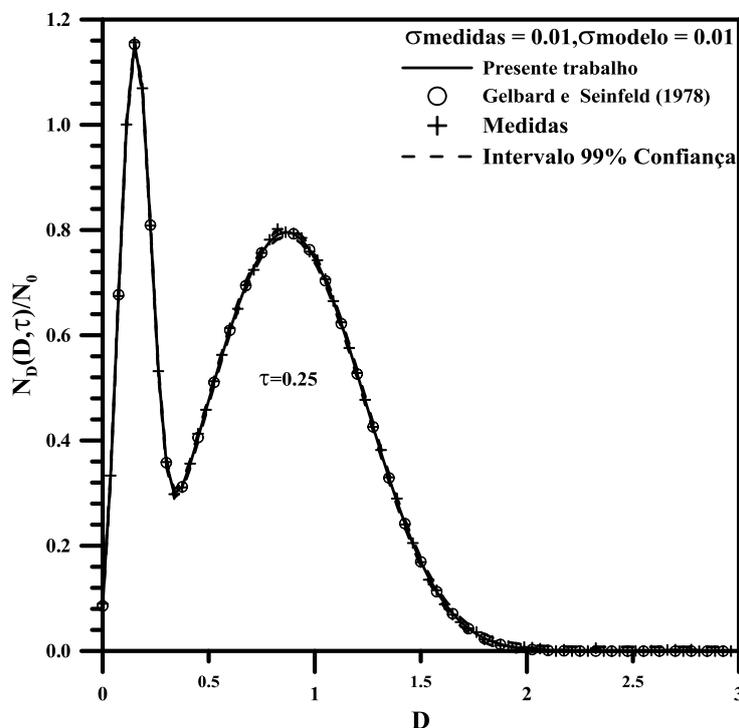
**FIGURA 6.90** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

## 6.6 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DO FILTRO SIR PARA O CASO-TESTE 5

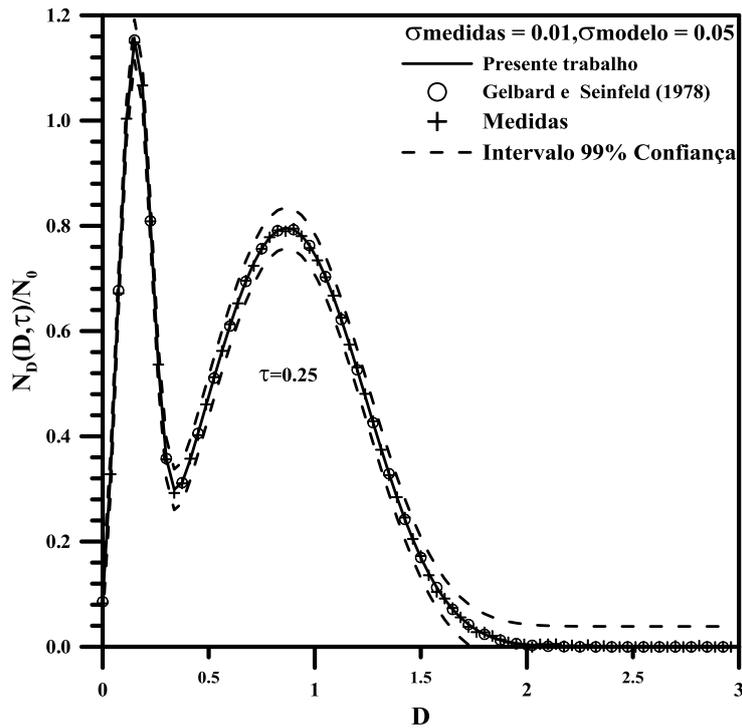
Para o caso-teste 5, também foram usados os mesmos parâmetros do caso-teste 4 para análise dos resultados. Porém, utilizou-se os resultados da solução por inversão numérica da transformada de Laplace porque a solução apresentada por SEINFELD *et al.* (1978) para esse caso-teste é assintótica.

Nas Figuras 6.91 a 6.94 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução por inversão numérica da transformada de Laplace com os obtidos via filtro SIR para  $\tau = 0,25$ . Nota-se excelente concordância entre resultados comparados e os mesmos estão dentro do intervalo de 99% de confiança.

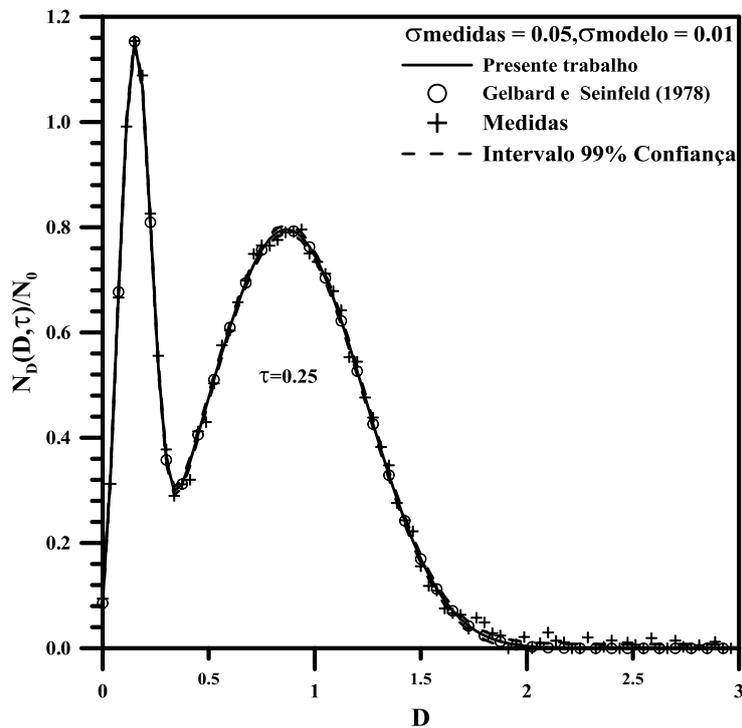
Observa-se nas Figuras 6.91 a 6.94 que a inclusão da taxa de nucleação provocou picos na função densidade de distribuição de tamanho, um na faixa reduzida na escala de tamanho o qual diminui rapidamente em função da taxa de coagulação e a segunda tem um espalhamento maior e diminui mais suavemente, nota-se também uma redução no tamanho final das partículas.



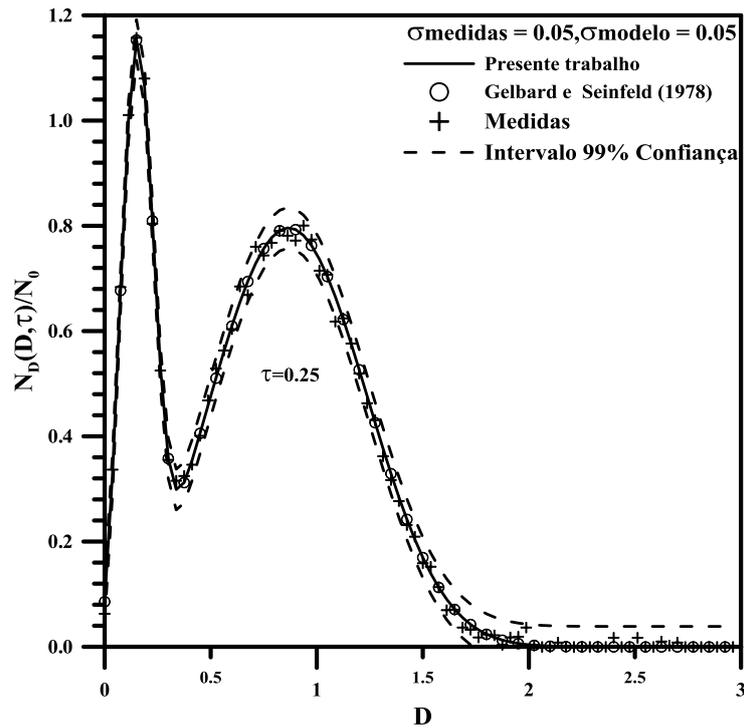
**FIGURA 6.91** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 5 e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.92** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 5 e  $\tau = 0,25$ .

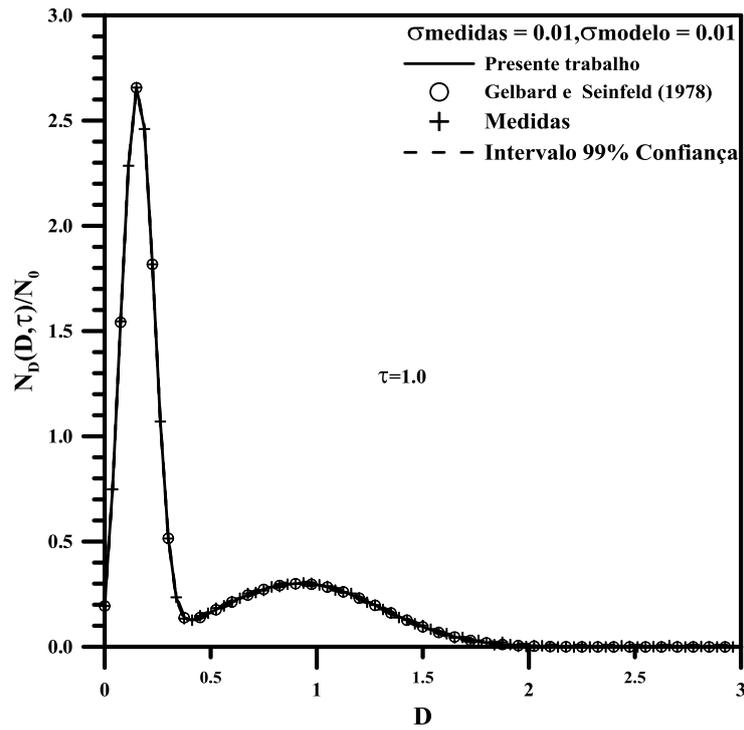


**FIGURA 6.93** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 5 e  $\tau = 0,25$ .

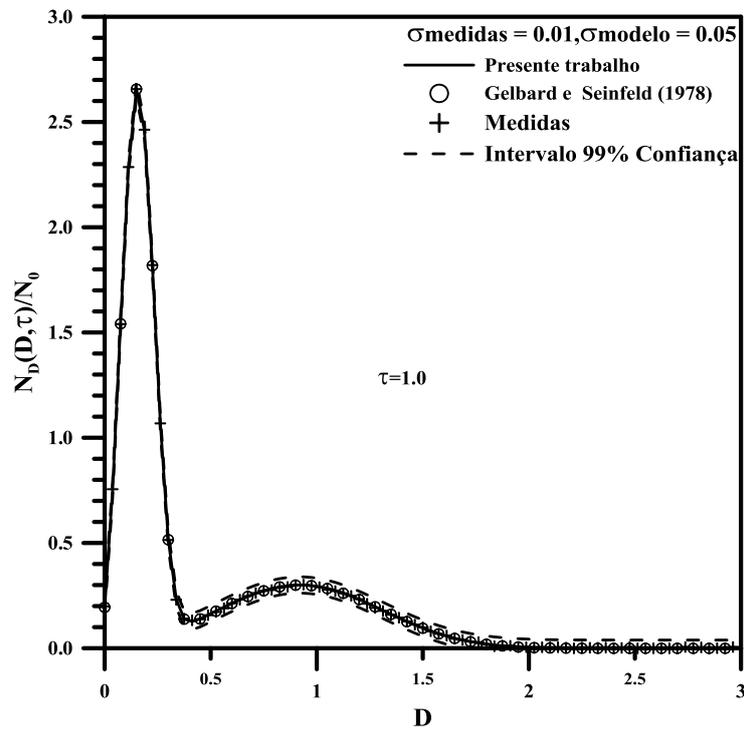


**FIGURA 6.94** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 5 e  $\tau = 0,25$ .

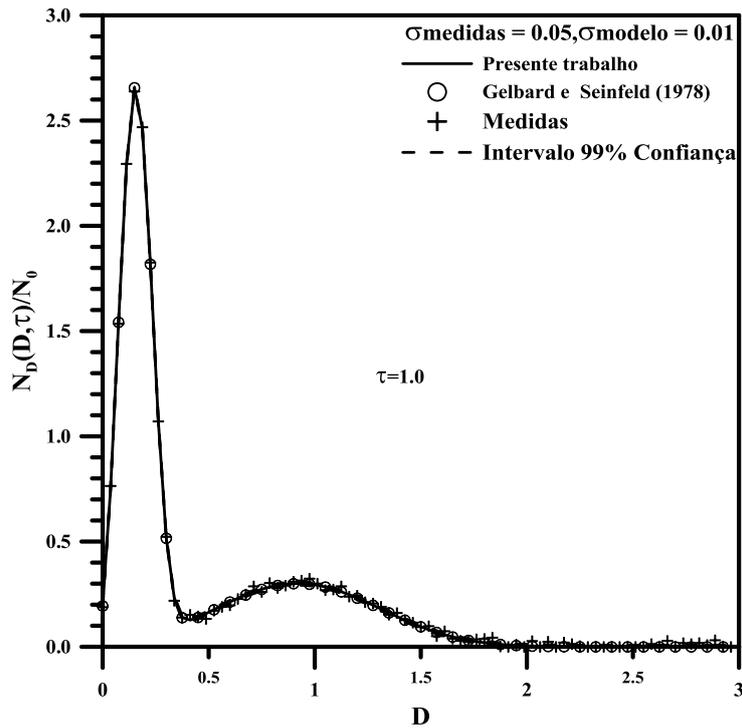
Observa se nas Figuras 6.95 a 6.98 as comparações gráficas entre os resultados da solução por inversão numérica da transformada de Laplace com os obtidos via filtro SIR para  $\tau = 1,0$ . A análise para o tempo em estudo é semelhante ao para  $\tau = 0,25$ .



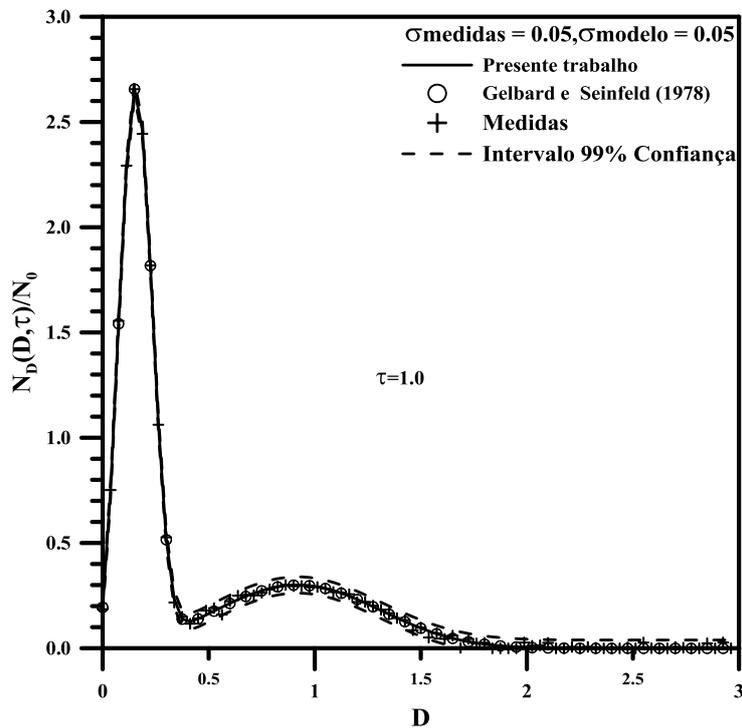
**FIGURA 6.95** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 5 e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.96** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 5 e  $\tau = 1,0$ .

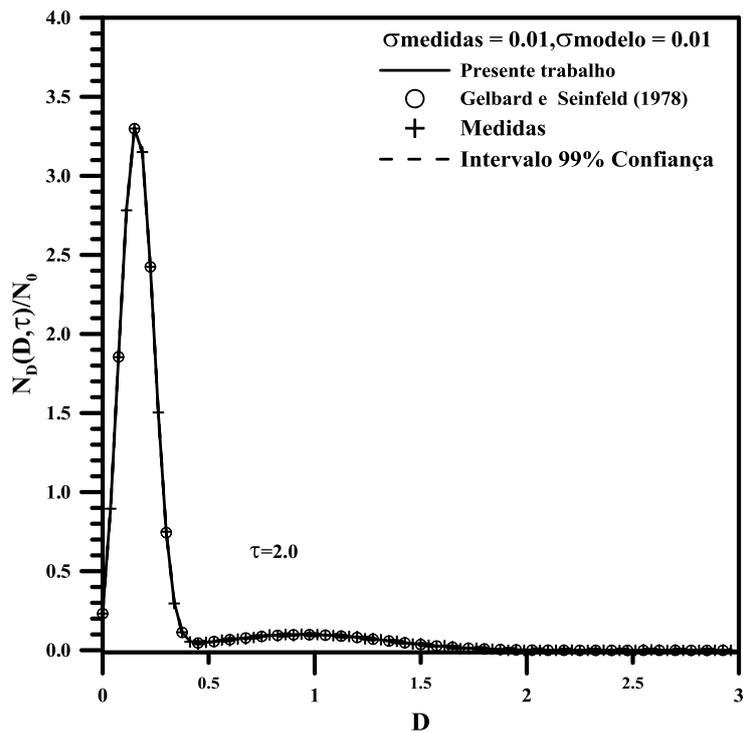


**FIGURA 6.97** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 5 e  $\tau = 1,0$ .

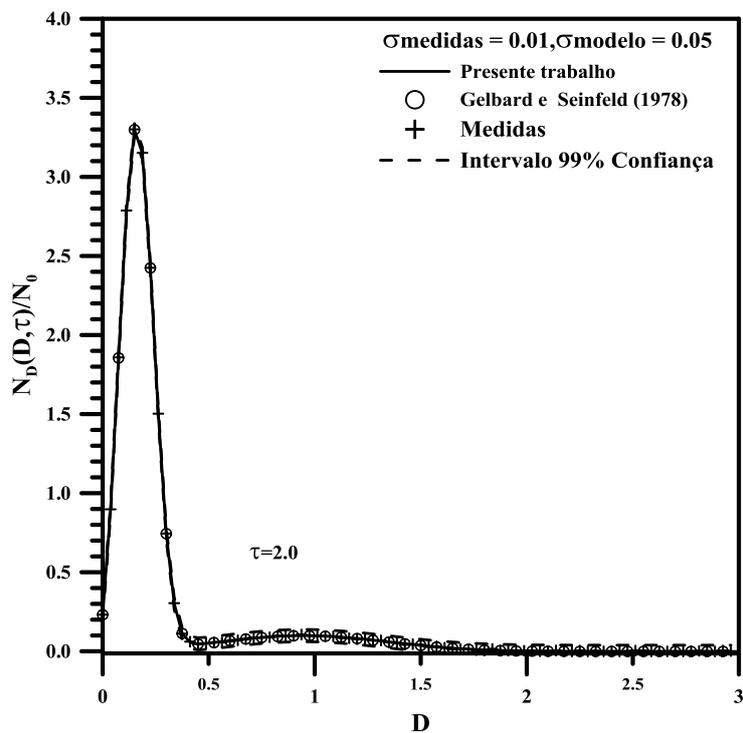


**FIGURA 6.98** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 5 e  $\tau = 1,0$ .

Observa-se nas Figuras 6.99 a 6.102 as comparações gráficas para  $\tau = 2,0$ . A análise para o tempo em estudo é semelhante aos de  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.99** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,01), para o caso-teste 5 e  $\tau = 2,0$ .



**FIGURA 6.100** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,01 – 0,05), para o caso-teste 5 e  $\tau = 2,0$ .

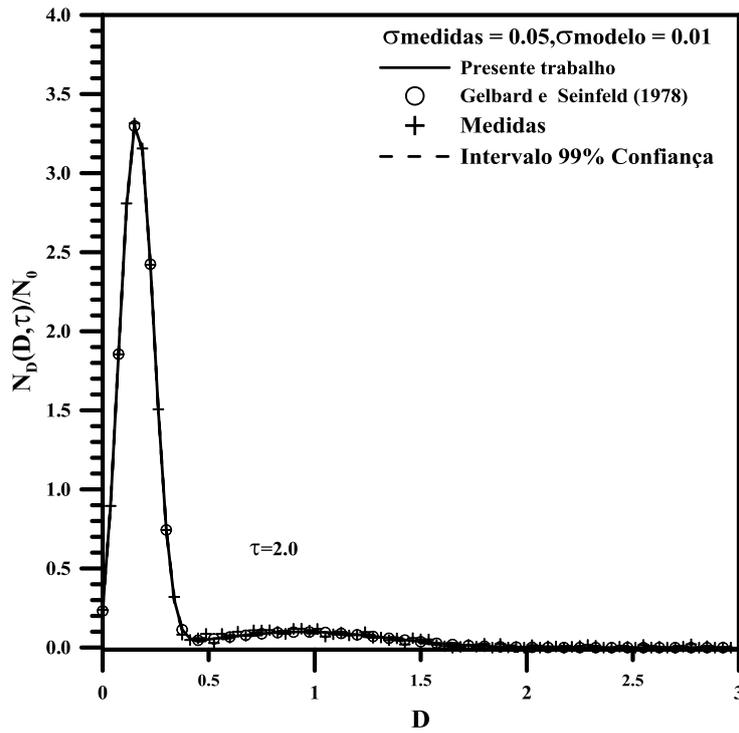


FIGURA 6.101 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,01), para o caso-teste 5 e  $\tau = 2,0$ .

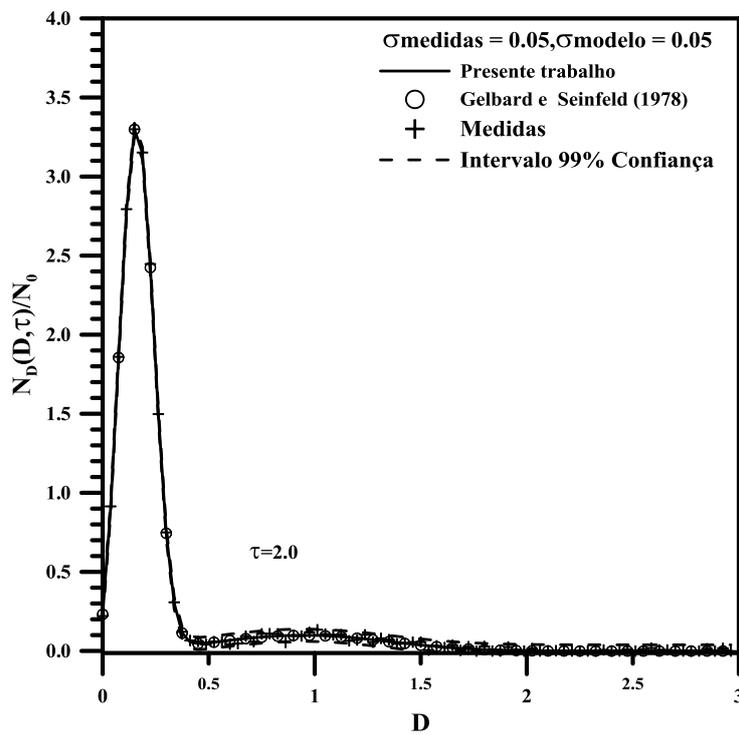
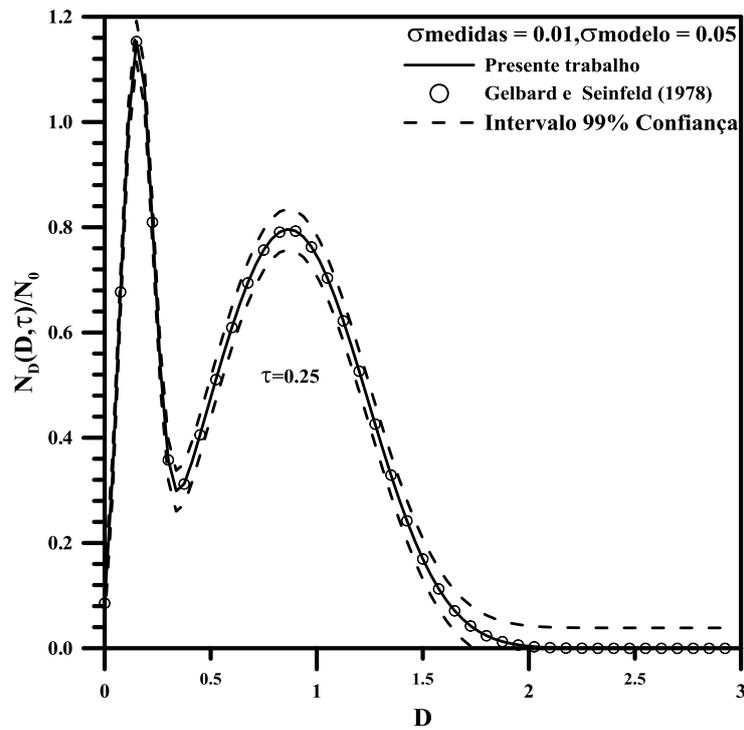


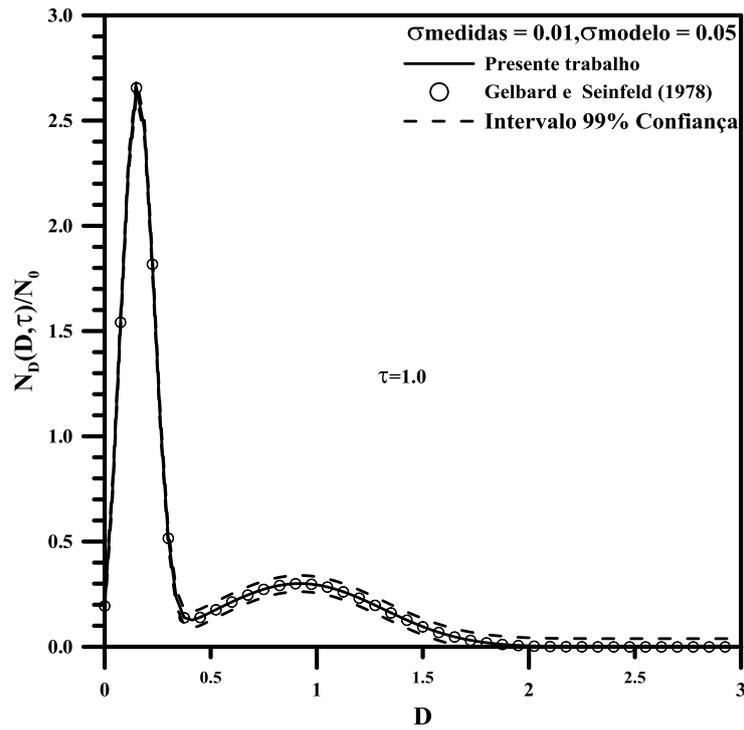
FIGURA 6.102 - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 5 e  $\tau = 2,0$ .

São apresentados nas Figuras 6.103 a 6.108 os resultados da simulação usando o desvio padrão (0,01 – 0,05) nos valores medidos e modelo. Observa se graficamente que os resultados são excelentes entre os valores medidos e os estimados para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0, 2,0$  e avaliam-se as hipóteses de um e três ponto de tomada de amostras.

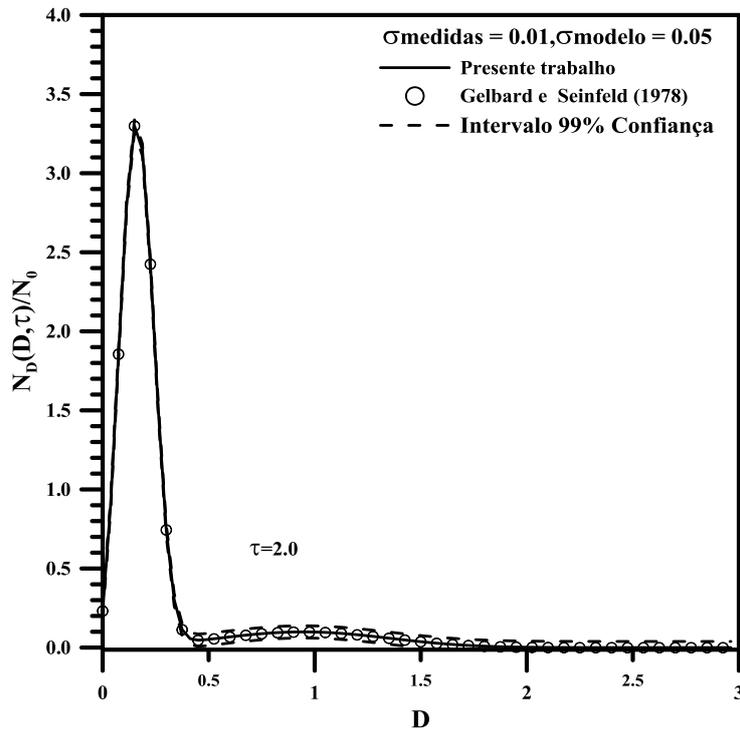
- Hipótese de uma tomada de amostras



**FIGURA 6.103** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .

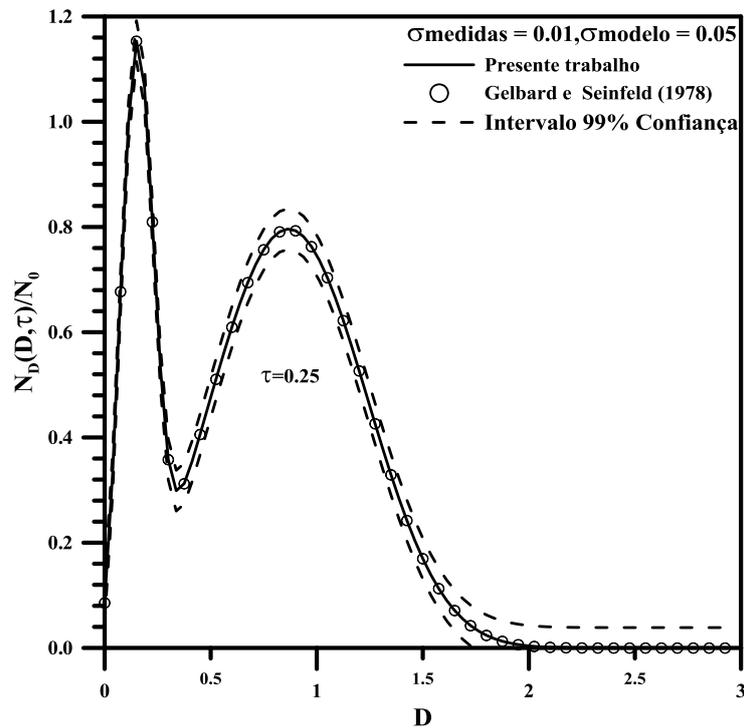


**FIGURA 6.104** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

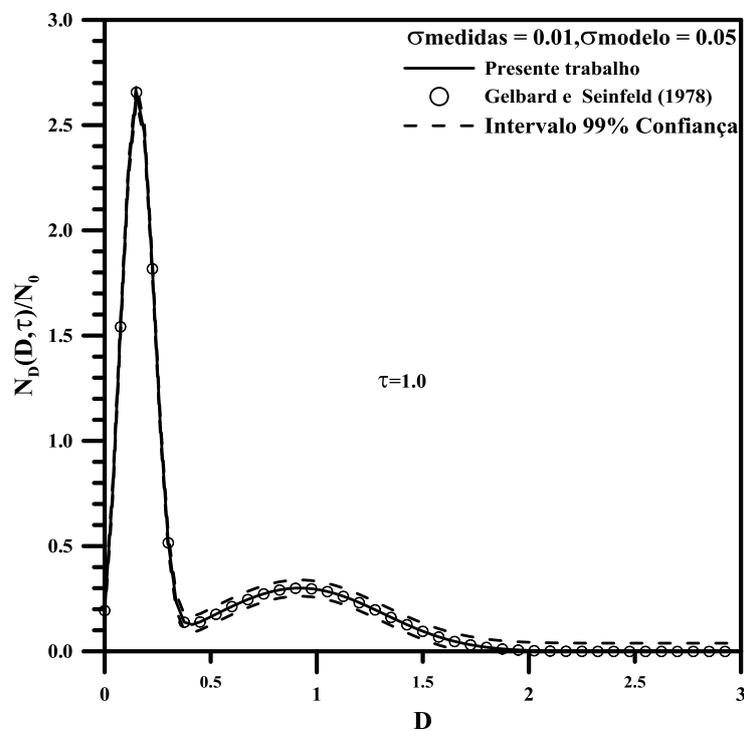


**FIGURA 6.105** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando um ponto de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

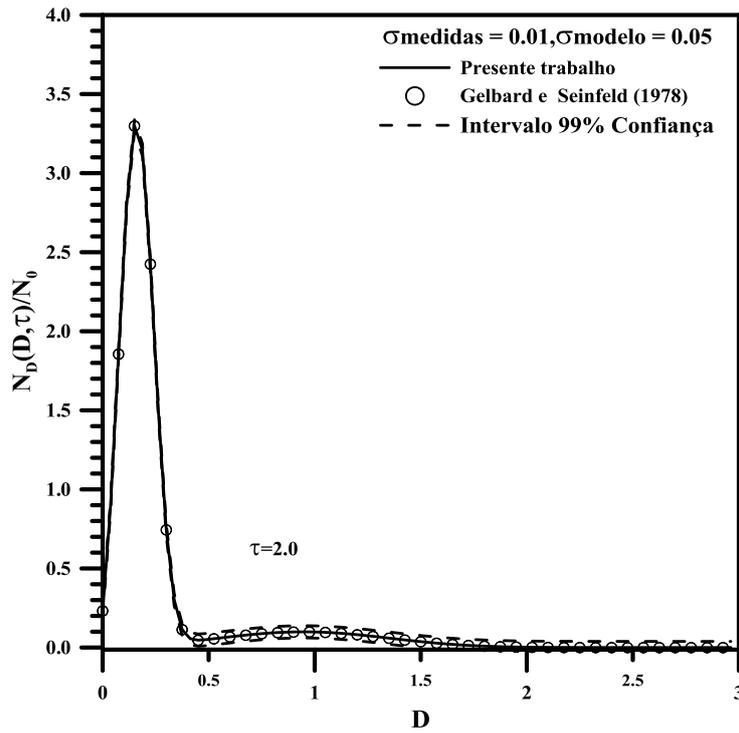
- Hipótese de três tomadas de amostras



**FIGURA 6.106** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 6.107** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 6.108** - Comparação entre valores medidos e estimados utilizando três pontos de amostragem para  $\sigma$  (0,01 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

Nota-se que nos cinco casos-testes estudados o filtro com amostragem e Reamostragem por Importância Sequencial (SIR) obteve excelentes resultados para estimar a função densidade de tamanho de partículas.

## CAPÍTULO 7

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES

#### 7.1 – CONCLUSÕES

Neste trabalho os resultados mostram a aplicabilidade da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica na solução de equação do balanço populacional em sistemas particulados e aerossóis.

Utilizou-se a subrotina DINLAP da biblioteca IMSL (1989) a qual executa a transformada de Laplace com inversão numérica e os resultados gerados foram comparados com os dados produzidos pela solução analítica, os quais têm excelente concordância.

Validou-se, dessa forma a inversão numérica da transformada de Laplace para resolver problemas em sistemas particulados e aerossóis.

A técnica da transformada de Laplace com inversão numérica mostrou-se capaz de fornecer excelentes resultados para problemas sem taxa de remoção e nucleação e bons resultados para problemas com taxa de nucleação e remoção.

Analisando o comportamento dos gráficos gerados no presente trabalho, conclui-se que a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica é uma ferramenta alternativa na resolução dos problemas estudados.

A técnica da transformada de Laplace com inversão numérica pode ser usada como solução de equação do balanço populacional em processos de cristalização, pois esses processos utilizam o mesmo mecanismo para solucionar a física do problema.

O filtro Bayesiano usado neste trabalho foi o filtro com Amostragem por Importância e Reamostragem Seqüencial (SIR), o qual é aplicado em problema

hiperbólico e não linear (que é representado pela PBE) com o intuito de estimar a função densidade de tamanho da partícula.

O filtro com Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR) é de razoável implementação computacional.

O filtro SIR conseguiu estimar a função densidade de tamanho da partícula para sistemas particulados com: coagulação pura e coeficiente de coagulação constante, coagulação pura com o coeficiente de coagulação variável, coagulação pura com coeficiente de coagulação variável e taxa remoção de partículas, condensação e coagulação com coeficiente de coagulação constante e coagulação com coeficiente de coagulação constante e taxa de remoção e nucleação. Para todos os casos testados os resultados são bons.

O filtro Bayesiano com Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR) mostrou-se uma excelente ferramenta para estimar a função densidade de tamanho da partícula em sistemas particulados.

## **7.2 – SUGESTÕES**

- A sequência do presente trabalho é aplicar o filtro Auxiliar de Partícula (APF) para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- Utilizar o filtro de Monte Carlo com Amostragem Sequencial (SMC) para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- Utilizar o filtro para Estimativa Combinada de Parâmetros e Variáveis de Estado para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- Utilizar o filtro de Monte Carlo Sequencial sem o Cálculo da Função de Verossimilhança para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- A sequência natural do presente trabalho é aplicar filtros Bayesianos para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de cristalização os quais são de grande interesse industrial.

## REFERÊNCIAS

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

AIUBE, F. A. L., 2005, *Modelagem dos preços futuros de commodities: abordagem pelo filtro de partículas*, Tese de Doutorado da PUC-RIO, Departamento de Engenharia Industrial.

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.

ANDRADE, D., 2010, *Transformada de Laplace*, <<http://www.dma.uem.br/kit>> acesso em 20 jul.

ARULAMPALAM, M. S., MASKELL, S., GORDON, N., *et al.*, 2002, “A Tutorial on Particle Filters for Online Nonlinear/Non-Gaussian Bayesian Tracking”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol. 50, no. 2, pp. 174-188.

ASTER, R. C, BORCHERS, B., THURBER, C.H., 2005, *Parameter Estimation and Inverse Problems*, Elsevier Academic Press,.

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

BALDYGA, J., PODROSKA, W., POHORECKI, R., 1995, “Mixing-Precipitation Model with Application to Double Feed Semi-Batch Precipitation”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 50, pp. 1281.

BARRESI, A. A., MARCHISIO, D., G. Baldi, 1999, “On the Role of Micro and Meso-Mixing in a Continuous Couette-Type Precipitator”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, pp. 2339.

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

BECK, J. V., 1999, “Sequential Methods in Parameter Estimation”, *3rd International Conference on Inverse Problems in Engineering*, Tutorial Session, Port Ludlow, WA.

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

BOYCE, W. E., DIPRIMA, R., C., 2001, *Elementary Differential Equation and Boundary Value Problems*, Seventh Edition, John Wiley & Sons. Inc.

BROCK, J. R., 1972, “Condensational Growth of Atmospheric Aerosols,” 1. *Coil. Interfac. Sci.*, vol. 39, no. 1, 32.

CHEN, Z., 2003, “Bayesian Filtering: From Kalman Filters to Particle Filters, and Beyond”,

CHOPIN, N., 2002, “A Sequential Particle Filter Method for Static Models”, *Biometrika Trust*, Vol. 89, No. 3, pp. 539-551.

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.

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.

DEL MORAL, P., DOUCET, A., JASRA, A., 2006, “Sequential Monte Carlo Samplers”, *J. R. Statist. Soc. B* **68**, pp. 411 – 436.

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.

DOUCET, A., JOHANSEN, A. M., 2008, “A Tutorial on Particle Filtering and Smoothing: Fifteen years later”.

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.

FALOPE, G. O., JONES, A.G., ZAUNER, R., 2001, “On Modelling Continuous Agglomerative Crystal Precipitation via Monte Carlo Simulation”, *Chemical Engineering Science*, vol.56, pp. 2567-2574.

FREDRICKSON, A. G., RAMKRISHNA, D., TSUCHIVA, H. M. 1967, “Statistics and Dynamics of Prokaryotic Cell Populations”, *Mathematical Biosciences*, vol. 1, pp. 327-374.

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

GORDON, N., SALMOND, D. and SMITH, A. F. M., 1993, “Novel approach to nonlinear and non-Gaussian Bayesian state estimation,” *Proc. Inst. Elect. Eng., F*, vol. 140, pp. 107–113.

HARRISON, P. J., STEVENS, C. F., 1976, “Bayesian Forecasting (with discussion), *Journal of the Royal Statistical Society*, series B 38:205 – 247.

HORN D, RIEGER J., 2001, “Organic Nanoparticles in the Aqueous phase—theory Experiment, and Use”. *Angewandte Chemie - International*, Vol. 40, pp. 4330-4361.

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

ILIEVSKI, D., 1991, *Modelling Al(OH)<sub>3</sub> 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.

JAZWINSKI, A. H., 1970, "Stochastic Processes and Filtering Theory". New York: Academic.

JOHNSON B.K., PRUD'HOMME R.K., 2003, "Flash Nanoprecipitation of Organic Actives and Block Copolymers Using a Confined Impinging Jets Mixer", *Australian J Chem.*, vol.56, pp. 1021-1024.

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

JUNG, W. M., KANG, S. H., KING, W., et al., 2000, "Particle Morphology of Calcium Carbonate Precipitated by Gas-Liquid Reaction in a Couette-Taylor Reactor", *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 733.

KAIPIO, J., SOMERSALO, E., 2004, "Statistical and Computational Inverse Problems", *Applied Mathematical Sciences* 160, Springer-Verlag.

KAIPIO, J., DUCAN, S., SEPPANEN, A., et al., 2005, "State Estimation for Process Imaging", Chapter in *Handbook of Process Imaging for Automatic Control*, editors: David Scott and Hugh McCann, CRC Press.

KALOS, M.H., WHITLOCK, P.A., 1986, *Monte Carlo Methods*, John Wiley and Son.

KIM, W. S., J. M. TARBELL, 1996, "Micromixing Effects on Barium Sulfate Precipitation in an MSMR Reactor", *Chem. Eng. Commun.*, vol. 146, pag. 33.

KITAGAWA, G., 1996, "Monte Carlo Filter and Smoother for Non-Gaussian State Space Models", *Journal of Computational and Graphical Statistics*, vol. 5, pp 1-25.

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

KRUTZER, L. L. M., VAN DIEMEN A. J. G., STEIN H. N., 1995, "The Influence of the Type of Flow on the Orthokinetic Coagulation Rate", *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 171, pp. 429.

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.

LIU, J. S., CHEN, R., 1998, "Sequential Monte Carlo Methods for Dynamic Systems", *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 93, No. 443 pp. 1032- 1044.

LIU, J. S., WEST, M., 2001, “Combined Parameter and State Estimation in Simulation-based Filtering”, in *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*, A. Doucet, N. de Freitas, and N. Gordon, Eds. New York: Springer - Verlag, 197 – 217.

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., PIKTURNA, J. T., FOX, R. O., *et al.*, 2003, “Quadrature Method of Moments for Population-Balance Equations”, *AIChE Journal*, Vol. 49, No. 5, pp.1266 – 1276.

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., BARRESI, A. A., 2001, “Simulation of Turbulent Precipitation in a Semi-batch Taylor-Couette Reactor Using CFD”, *AIChE Journal*, Vol. 47, No. 3, pp. 664 – 676.

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.

MARCHISIO, D. L., SOOS, M., SEFCIK, J., *et al.*, 2006b, “Role of Turbulent Shear Rate Distribution in Aggregation and Breakage Processes”, *AIChE Journal*, Vol. 52, No. 1, pp. 158 – 173.

MARSHALL, A., 1956, “The use of Multi-Stage Sampling Schemes in Monte Carlo Computations”, in *Symposium on Monte Carlo Methods*, M. Meyer Ed. New York: Wiley, pp. 123 – 140.

ORLANDE, H. R. B., DULIKRAVICH, G. S., COLAÇO, M. J., 2008, “Application of Bayesian Filters to Heat Conduction Problems”, *International Conference on Engineering Optimization*, Rio de Janeiro, Brazil, 01 - 05 June.

OZISIC, M. N., ORLANDE, H.R.B., 2000, *Inverse Heat Transfer*, Taylor & Francis, New York.

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.

PAGLIOLICO, S., D. MARCHISIO, BARRESI A. A., 1999. “Influence of Operating Conditions on BaSO<sub>4</sub> Crystal Size Distribution and Morphology in a Continuous Couette Type Precipitator”, *J. Ther. Anal. Cal.*, vol. 56, pp. 1423.

PETERSON, T. W., GELBARD, F., SEINFELD, J. H., 1978, “Dynamics of Source-Reinforced Coagulation and Condensing Aerosols”, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 63, nº 3, March.

PIRES, T. S., 2008, “Estimativa de Função em Problema Inverso de Condução de Calor em uma Parede de Pequena Espessura (filtro de kalman)”, UFRJ – COPPE, Programa de Engenharia Mecânica, COM – 803:Topicos Especiais em Engenharia Mecânica.

PITT, M. e SHEPHARD, N., 1999, “Filtering via Simulation: Auxiliary Particle Filters”, *J. Amer. Statist. Assoc.*, vol. 94, nº 446, pp. 590 – 599.

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., 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.

RIVALLIN, M., BENMAMI, M., KANAIEV, A., *et al.*, 2005, “Sol-gel Reactor with Rapid Micromixing Modelling and Measurements of Titanium Oxide Nano-particle” Growth. *Chem Eng Research Design.*; 83–1A, pp.67 – 74.

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

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

SILVA, W. B., 2010, *Aplicação de Filtros de Partículas em Problemas de Transferência de Calor*, Qualificação de Doutorado da COPPE-UFRJ, Programa de Engenharia Mecânica.

SILVA, W. B., ORLAND, H. R. B., COLAÇO, M. J., 2010, “Evaluation of Bayesian Filters Applied to Heat Conduction Problems”, *2nd International Conference on Engineering Optimization*, September 6 – 9, Lisbon – Portugal.

SISSON, S. A., FAN, Y., TANAKA, M. M., 2009, “Sequential Monte Carlo without Likelihoods”, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 104, 1760 – 1765. Errata.

SMITH, A. F. M., WEST, M., 1983, “Monitoring Renal Transplant: In Application of the Multi-process Kalman Filter”, *Biometrics* 39:867 – 878.

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.

SUNG, M. H., *et al.*, 2000, “Agglomeration of Yttrium Oxalate Particles Produced by Reaction Precipitation in Semi-Batch Reactor”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 2173.

TAN, S., FOX, C. & NICHOLLS, G., 2006, “Inverse Problems”, Course Notes for Physics 707, University of Auckland, Auckland, NZ.

WEST, M., 1993a, “Approximation Posterior Distribution by Mixture”, *J. R. Statist. Soc. B*, vol.55, pp. 409 – 422.

WEST, M., 1993b, “Mixture Models, “Monte Carlo, Bayesian updating and Dynamics Models”, J. H. Newton (ed), Computing Science and Statistics: *Proceedings of the 24<sup>th</sup> Symposium on the Interface*, Interface Foundation of North America, Fairfax Station, Virginia, pp. 325 – 333.

WEST, M., HARRISON, P. J., 1997, *Bayesian Forecasting and Dynamics Models*, 2<sup>nd</sup> Edn. Springer – Verlag, New York.

WULKOW, M., GERSTLAUER, A., NIEKEN, U., 2001, “Modeling and simulation of crystallization processes using parsival”, *Chemical Engineering Science*, vol.56, pp. 2575-2588.

ZAUNER, R., JONES A. G., 2000, "Determination of Nucleation, Growth, Agglomeration and Disruption Kinetics from Experimental Precipitation Data: the Calcium Oxalated System", *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 4219.

ZHE CHEN, 2003, "Bayesian Filtering: From Kalman Filters to Particle Filters, and Beyond".

## APÊNDICE A

### SOLUÇÃO VIA TRANSFORMADA DE LAPLACE: DETALHES DE TERMOS

Termo 1

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial(vn(v,t))}{dv}\right] = \int_0^{\infty} e^{-sv} \frac{\partial(vn(v,t))}{dv} dv \quad (\text{A.1})$$

Aplicando a integração por partes

$$u = e^{-sv} \quad (\text{A.2a})$$

$$du = -se^{-sv} dv \quad (\text{A.2b})$$

$$dv = \frac{\partial(vn(v,t))}{\partial v} dv \quad (\text{A.2c})$$

$$v = vn(v,t) \quad (\text{A.2d})$$

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial(vn(v,t))}{dv}\right] = \left[ e^{-sv} n(v,t) v \right]_0^{\infty} + s \int_0^{\infty} e^{-sv} vn(v,t) dv \quad (\text{A.2e})$$

Quando  $v \rightarrow \infty$ ,  $n(v,t) \rightarrow 0$ , logo

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial(vn(v,t))}{dv}\right] = s \int_0^{\infty} e^{-sv} vn(v,t) dv \quad (\text{A.3a})$$

$$\bar{n}(s,t) = \int_0^{\infty} e^{-sv} n(v,t) dv \quad (\text{A.3b})$$

Derivando a Eq. (A.3b) em função de  $s$ , logo

$$\frac{d\bar{n}(s,t)}{ds} = - \int_0^{\infty} e^{-sv} vn(v,t) dv \quad (\text{A.3c})$$

Substituindo a Eq. (A.3c) na Eq. (A.3a), obtendo - se

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial(vn(v,t))}{dv}\right] = -s \frac{d\bar{n}(s,t)}{ds} \quad (\text{A.4})$$

Termo 2

$$\mathcal{L}\left[\int_0^{v/2} n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] = \int_0^\infty e^{-sv} \left[\int_0^{v/2} n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] dv \quad (\text{A.5a})$$

$$\mathcal{L}\left[\int_0^{v/2} n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-sv} \left[\int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] dv \quad (\text{A.5b})$$

Da fórmula 32.15 do livro Spiegel (página 162)

$$f(s)g(s) = \int_0^t F(u)G(t-u)du \quad (\text{A.5c})$$

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

$$\mathcal{L}\left[\int_0^{v/2} n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] = \frac{1}{2} \bar{n}(s,t)^2 \quad (\text{A.6})$$

Termo 3

$$\mathcal{L}\left[\int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] = \int_0^\infty e^{-sv} \left[\int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] dv \quad (\text{A.7})$$

Aplicando a integração por partes

$$u = ve^{-sv} \quad (\text{A.8a})$$

$$du = (1-sv)e^{-sv} dv \quad (\text{A.8b})$$

$$dv = \int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{A.8c})$$

$$v = \int_0^v \left( \int_0^{v'} n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv' \quad (\text{A.8d})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\left[\int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] &= \left\{ve^{-sv}\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}_0^\infty \\ &\quad - \int_0^\infty e^{-sv}\left\{\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}dv \\ &\quad + s\int_0^\infty ve^{-sv}\left\{\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}dv \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Da fórmula 32.14 do livro Spiegel (página 162)

$$\int_0^\infty e^{-sv}\left\{\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}dv = \frac{\bar{n}^2(s,t)}{s} \quad (\text{A.10a})$$

$$s\int_0^\infty e^{-sv}\left\{\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}dv = \bar{n}^2(s,t) \quad (\text{A.10b})$$

Diferenciando em função de  $s$ , obtém se

$$\begin{aligned} 2\bar{n}\frac{d\bar{n}(s,t)}{ds} &= \int_0^\infty e^{-sv}\left\{\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}dv \\ &\quad - s\int_0^\infty ve^{-sv}\left\{\int_0^v\left[\int_0^{v'}n(v'-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right]dv'\right\}dv \end{aligned} \quad (\text{A.10c})$$

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

## 1 PROVA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE DA CONVOLUÇÃO

$$f(s)g(s) = \left[\int_0^\infty e^{-s\eta}f(\eta)d\eta\right]\left[\int_0^\infty e^{-s\tau}g(\tau)d\tau\right] \quad (\text{A.1.1a})$$

$$f(s)g(s) = \int_0^\infty\int_0^\infty e^{-s(\eta+\tau)}f(\eta)g(\tau)d\eta d\tau \quad (\text{A.1.1b})$$

$$f(s)g(s) = \int_0^\infty g(\tau)\left[\int_0^\infty e^{-s(\eta+\tau)}f(\eta)d\eta\right]d\tau \quad (\text{A.1.1c})$$

fazendo

$$t = \eta + \tau \quad (\text{A.1.2a})$$

$$\tau = \xi \quad (\text{A.1.2b})$$

$$\eta = t - \tau = t - \xi \quad (\text{A.1.2c})$$

$$d\eta d\tau = |J| dt d\xi \quad (\text{A.1.2d})$$

$$|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial \eta}{\partial t} & \frac{\partial \eta}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \tau}{\partial t} & \frac{\partial \tau}{\partial \xi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \quad (\text{A.1.2e})$$

logo

$$f(s)g(s) = \int_0^\infty g(\xi) \left[ \int_0^\infty e^{-st} f(t-\xi) d\eta \right] d\xi \quad (\text{A.1.3})$$

Mudando os limites de integração

$$\bar{f}(s)\bar{g}(s) = \int_0^\infty e^{-st} \left[ \int_0^t f(t-\xi)g(\xi) d\eta \right] dt \quad (\text{A.1.4.a})$$

$$\bar{f}(s)\bar{g}(s) = \int_0^\infty e^{-st} [f * g] dt \quad (\text{A.1.4.b})$$

$$\bar{f}(s)\bar{g}(s) = \bar{f} * \bar{g} \equiv \mathcal{L}[f * g] \quad (\text{A.1.4.c})$$

## APÊNDICE B

### CÁLCULO DOS MOMENTOS PARA OS CASOS-TESTES ANALISADOS

B.1 - CÁLCULO DE MOMENTO  $M_0$  PARA  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$

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

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

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

Portanto

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

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

Resolvendo o primeiro termo do lado direito da Eq. (B.1.2d)

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

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.1.5.c) na Eq. (B.1.2d), logo

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

logo

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

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

$$M_0(t) = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (\text{B.1.7})$$

## B.2. CÁLCULO DE MOMENTO $M_0$ E $M_1$ PARA $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1(v + \tilde{v})$

### B.2.1 - Cálculo de momento $M_0$

$$M_1(t) = \int_0^\infty vn(v, t) dv \quad (\text{B.2.1})$$

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - \beta_1 n(v,t) \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{B.2.2a})$$

$$\int_0^\infty \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} dv = \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} dv - n(v,t) \beta_1 \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{B.2.2b})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_0(t)}{dt} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 \int_0^\infty vn(v,t)dv \left( \int_0^\infty n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \\ &\quad - \beta_1 \int_0^\infty n(v,t)dv \left( \int_0^\infty \tilde{v}n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.2.2c})$$

$$\frac{dM_0(t)}{dt} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - 2\beta_1 M_0(t)M_1(t) \quad (\text{B.2.2d})$$

Resolvendo o primeiro termo do lado direito da Eq. (B.2.2d)

$$II = \int_0^\infty \left[ \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right] dv \quad (\text{B.2.3a})$$

Mudando a ordem de integração da Eq. (B.2.3a)

$$II = \int_0^\infty n(\tilde{v},t) \left[ \int_{\tilde{v}}^\infty vn(v-\tilde{v},t)dv \right] d\tilde{v} \quad (\text{B.2.3b})$$

Utilizando a Eq. (B.1.4), a Eq. (B.2.3b) torna se

$$II = \int_0^\infty n(\tilde{u},t) \left[ \int_0^\infty (u+\tilde{u})n(u,t)du \right] d\tilde{u} \quad (\text{B.2.4a})$$

$$II = \int_0^\infty n(\tilde{u},t) \left[ \tilde{u} \int_0^\infty n(u,t)du + \int_0^\infty un(u,t)du \right] d\tilde{u} \quad (\text{B.2.4b})$$

$$II = \left( \int_0^\infty \tilde{u}n(\tilde{u},t)d\tilde{u} \right) \left( \int_0^\infty n(u,t)du \right) + \left( \int_0^\infty n(\tilde{u},t)d\tilde{u} \right) \left( \int_0^\infty un(u,t)du \right) \quad (\text{B.2.4c})$$

$$II = M_1(t)M_0(t) + M_0(t)M_1(t) \quad (\text{B.2.4d})$$

Substituindo a Eq. (B.2.4d) na Eq. (B.2.2d), logo

$$\frac{dM_0(t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} (2\beta_1 M_0(t) M_1(t)) - 2\beta_1 M_0(t) M_1(t) \quad (\text{B.2.5a})$$

$$\frac{dM_0(t)}{\partial t} = -\beta_1 M_0(t) M_1(t) \quad (\text{B.2.5b})$$

B.2.2 - Cálculo do momento  $M_1$  para  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1(v + \tilde{v})$

$$\int_0^\infty v \left\{ \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} - \frac{\beta_1}{2} \int_0^v v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v, t) \beta_1 \int_0^\infty (v + \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right\} dv \quad (\text{B.2.6a})$$

$$\frac{dM_1(t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 \int_0^\infty v n(v, t) \left( \int_0^\infty (v + \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) dv \quad (\text{B.2.6b})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_1(t)}{\partial t} = & \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 \left( \int_0^\infty v^2 n(v, t) dv \right) \left( \int_0^\infty n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) \\ & - \beta_1 \left( \int_0^\infty v n(v, t) dv \right) \left( \int_0^\infty \tilde{v} n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.2.6c})$$

$$\frac{dM_1(t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 M_2(t) M_0(t) - \beta_1 M_1(t) M_1(t) \quad (\text{B.2.6d})$$

Resolvendo o primeiro termo do lado direito da Eq. (B.2.6.d)

$$III = \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right) dv \quad (\text{B.2.6e})$$

ver os passos anteriores para o cálculo de  $II$

$$III = \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) \left[ \int_0^\infty (u + \tilde{u})^2 n(u, t) du \right] d\tilde{u} \quad (\text{B.2.7a})$$

$$III = \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) \left[ \int_0^\infty (u^2 + \tilde{u}^2 + 2u\tilde{u}) n(u, t) du \right] d\tilde{u} \quad (\text{B.2.7b})$$

$$\begin{aligned} III = & \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) \left[ \int_0^\infty u^2 n(u, t) du \right] d\tilde{u} + \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) \left[ \tilde{u}^2 \int_0^\infty n(u, t) du \right] d\tilde{u} \\ & + \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) \left[ \int_0^\infty 2u\tilde{u} n(u, t) du \right] d\tilde{u} \end{aligned} \quad (\text{B.2.7c})$$

$$III = \left( \int_0^\infty n(\tilde{u}, t) d\tilde{u} \right) \left( \int_0^\infty u^2 n(u, t) du \right) + \left( \int_0^\infty \tilde{u}^2 n(\tilde{u}, t) d\tilde{u} \right) \left( \int_0^\infty n(u, t) du \right) + 2 \left( \int_0^\infty \tilde{u} n(\tilde{u}, t) d\tilde{u} \right) \left( \int_0^\infty u n(u, t) du \right) \quad (B.2.7d)$$

$$III = M_0(t)M_2(t) + M_2(t)M_0(t) + 2M_1(t)M_1(t) \quad (B.2.7e)$$

Substituindo a Eq. (B.2.7e) na Eq. (B.2.6d), obtendo - se

$$\frac{dM_1(t)}{dt} = \frac{\beta_1}{2} (2M_2(t)M_0(t) + 2M_1^2(t)) - \beta_1 M_2(t)M_0(t) - \beta_1 M_1^2(t) \quad (B.2.8a)$$

$$\frac{dM_1(t)}{dt} = 0 \quad (B.2.8b)$$

Resolvendo a Eq. (B.2.8b) para  $t = 0$  e  $M_1(0) = N_0 v_0$ , logo

$$M_1(t) = N_0 v_0 \quad (B.2.9)$$

Substituindo a Eq. (B.2.9) na Eq. (B.2.5b), obtém se

$$\frac{dM_0(t)}{dt} = -\beta_1 M_0(t) N_0 v_0 \quad (B.2.10)$$

Resolvendo a Eq. (B.2.10) para  $t = 0$  e  $M_0(0) = N_0$ , tem-se

$$M_0(t) = N_0 \exp(-\beta_1 N_0 v_0 t) \quad (B.2.11)$$

### B.3 - CÁLCULO DO MOMENTO $M_0$ E $M_1$ COM TAXA DE REMOÇÃO PARA

$$\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1 (v + \tilde{v})$$

#### 3.1 - Cálculo do momento $M_0$ para $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1 (v + \tilde{v})$

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - \beta_1 n(v,t) \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - R_0 n(v,t) \quad (\text{B.3.1a})$$

$$\int_0^\infty \left\{ \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(v,t) \beta_1 \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - R_0 n(v,t) \right\} dv \quad (\text{B.3.1b})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_0(t)}{dt} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 \int_0^\infty vn(v,t)dv \left( \int_0^\infty n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \\ &\quad - \beta_1 \int_0^\infty n(v,t)dv \left( \int_0^\infty \tilde{v}n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) - R_0 \int_0^\infty n(v,t)dv \end{aligned} \quad (\text{B.3.1c})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_0(t)}{dt} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 M_1(t) M_0(t) \\ &\quad - \beta_1 M_0(t) M_1(t) - R_0 M_0(t) \end{aligned} \quad (\text{B.3.1d})$$

Usando o resultado da Eq. (B.2.4d) na Eq. (B.3.1d), obtendo - se

$$\frac{dM_0(t)}{dt} = \frac{\beta_1}{2} (2M_1(t)M_0(t)) - \beta_1 M_1(t)M_0(t) - \beta_1 M_0(t)M_1(t) - R_0 M_0(t) \quad (\text{B.3.1e})$$

$$\frac{dM_0(t)}{dt} = -(\beta_1 M_1(t) + R_0) M_0(t) \quad (\text{B.3.1f})$$

B.3.2 - Calculo do momento  $M_1$  para  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1(v + \tilde{v})$

$$\int_0^\infty v \left\{ \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(v,t) \beta_1 \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - R_0 n(v,t) \right\} dv \quad (\text{B.3.2a})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_1(t)}{dt} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv \\ &\quad - \beta_1 \int_0^\infty vn(v,t) \left( \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - R_0 \int_0^\infty vn(v,t) \end{aligned} \quad (\text{B.3.2b})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_1(t)}{dt} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 \left( \int_0^\infty v^2 n(v,t)dv \right) \left( \int_0^\infty n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \\ &\quad - \beta_1 \left( \int_0^\infty vn(v,t)dv \right) \left( \int_0^\infty \tilde{v}n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) - R_0 \int_0^\infty vn(v,t)dv \end{aligned} \quad (\text{B.3.2c})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_1(t)}{dt} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 M_2(t) M_0(t) \\ &\quad - \beta_1 M_1(t) M_1(t) - R_0 M_1(t) \end{aligned} \quad (\text{B.3.2d})$$

Usando o resultado da Eq. (B.2.7e) na Eq. (B.3.2d), logo

$$\frac{dM_1(t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} [2M_2(t)M_0(t) + 2M_1^2(t)] - \beta_1 M_2(t)M_0(t) - \beta_1 M_1^2(t) - R_0 M_1(t) \quad (\text{B.3.3a})$$

$$\frac{dM_1(t)}{\partial t} = -R_0 M_1(t) \quad (\text{B.3.3b})$$

Resolvendo a Eq. (B.3.3b) para  $t=0$  e  $M_1(0) = N_0 v_0$ , tem - se

$$M_1(t) = N_0 v_0 \exp(-R_0 t) \quad (\text{B.3.4})$$

Substituindo a Eq. (B.3.4) na Eq. (B.3.1f), obtendo - se

$$\frac{dM_0(t)}{\partial t} = -(\beta_1 N_0 v_0 \exp(-R_0 t) + R_0) M_0(t) \quad (\text{B.3.5})$$

Resolvendo a Eq. (B.3.5) para  $t=0$  e  $M_0(0) = N_0$ , obtém - se a solução para o momento  $M_0$

$$M_0(t) = N_0 \exp \left\{ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right\} \quad (\text{B.3.6})$$

#### B.4 - CALCULO DO MOMENTO $M_0$ COM TAXA DE CRESCIMENTO PARA

$$\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$$

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \sigma \frac{\partial (vn(v, t))}{\partial v} = \frac{1}{2} \int_0^v \beta_0 n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v, t) \int_0^\infty \beta_0 n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \quad (\text{B.4.1a})$$

$$\int_0^\infty \left\{ \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \sigma \frac{\partial [vn(v, t)]}{\partial v} = \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v, t) \beta_0 \int_0^\infty n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right\} dv \quad (\text{B.4.1b})$$

portanto

$$\frac{dM_0(t)}{dt} + \sigma \int_0^\infty \frac{\partial[vn(v,t)]}{\partial v} dv = \int_0^\infty \left[ \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right] dv - \beta_0 M_0(t) \int_0^\infty n(v,t)dv \quad (\text{B.4.1c})$$

$$\frac{dM_0(t)}{dt} + \sigma vn(v,t) \Big|_0^\infty = \frac{\beta_0}{2} M_0^2(t) - \beta_0 M_0^2(t) \quad (\text{B.4.1d})$$

quando  $v \rightarrow \infty$ ,  $n(v,t) \rightarrow 0$ , tem - se

$$\frac{dM_0(t)}{dt} = -\frac{\beta_0}{2} M_0^2(t) \quad (\text{B.4.1e})$$

Resolvendo a Eq. (B.4.1d) para  $t=0$  e  $M_0(0) = N_0$ , logo

$$M_0(t) = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (\text{B.4.2})$$

## B.5 - CÁLCULO DO MOMENTO $M_0$ E $M_1$ PARA $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1(v + \tilde{v})$

### B.5.1 - Cálculo de momento $M_1$

$$\int_0^\infty v \left\{ \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \sigma \frac{\partial[vn(v,t)]}{\partial v} - \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(v,t)\beta_1 \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right\} dv \quad (\text{B.5.1a})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_1(t)}{dt} - \sigma M_1(t) + v^2 \sigma n(v,t) \Big|_0^\infty &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v v^2 n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv \\ &\quad - \beta_1 \int_0^\infty vn(v,t) \left( \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv \end{aligned} \quad (\text{B.5.1b})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_1(t)}{dt} - \sigma M_1(t) &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left[ \int_0^v v^2 n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right] dv \\ &\quad - \beta_1 \left( \int_0^\infty v^2 n(v,t)dv \right) \left( \int_0^\infty n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) - \beta_1 \left[ \int_0^\infty vn(v,t)dv \right] \left( \int_0^\infty \tilde{v}n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.5.1c})$$

$$\frac{dM_1(t)}{dt} - \sigma M_1(t) = \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left[ \int_0^v v^2 n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right] dv - \beta_1 M_2(t) M_0(t) - \beta_1 M_1(t) M_1(t) \quad (\text{B.5.1d})$$

substituindo a Eq. (B.2.7e) na Eq. (B.5.1d), obtendo-se

$$\frac{dM_1(t)}{\partial t} - \sigma M_1(t) = \frac{\beta_1}{2} [2M_2(t)M_0(t) + 2M_1(t)M_1(t)] - \beta_1 M_2(t)M_0(t) - \beta_1 M_1(t)M_1(t) \quad (\text{B.5.1e})$$

logo

$$\frac{dM_1(t)}{\partial t} = \sigma M_1(t) \quad (\text{B.5.1f})$$

$$M_1(t) = N_0 v_0 \exp(\sigma t) = N_0 v_0 \exp(\tau) \quad (\text{B.5.1g})$$

B.5.2 - Cálculo de momento  $M_0$

$$\int_0^\infty \left\{ \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \sigma \frac{\partial [vn(v,t)]}{\partial v} - \frac{\beta_1}{2} \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(v,t)\beta_1 \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right\} dv \quad (\text{B.6.1a})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_0(t)}{\partial t} + v\sigma n(v,t) \Big|_0^\infty &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv \\ &\quad - \beta_1 \int_0^\infty n(v,t) \left( \int_0^\infty (v+\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv \end{aligned} \quad (\text{B.6.1b})$$

$$\begin{aligned} \frac{dM_0(t)}{\partial t} &= \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left( \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) dv - \beta_1 \left( \int_0^\infty vn(v,t)dv \right) \left( \int_0^\infty n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \\ &\quad - \beta_1 \left( \int_0^\infty n(v,t)dv \right) \left( \int_0^\infty \tilde{v}n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.6.1c})$$

$$\frac{dM_0(t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^\infty \left[ \int_0^v vn(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \right] dv - \beta_1 M_1(t)M_0(t) - \beta_1 M_1(t)M_0(t) \quad (\text{B.6.1d})$$

Usando a resolução da Eq. (B.2.4) e substituindo na Eq. (B.6.1d)

$$\frac{dM_0(t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} [-\beta_1 M_1(t)M_0(t) - \beta_1 M_1(t)M_0(t)] - \beta_1 M_1(t)M_0(t) - \beta_1 M_1(t)M_0(t) \quad (\text{B.6.1e})$$

logo

$$\frac{dM_0(t)}{\partial t} = -\beta_1 M_0(t)M_1(t) \quad (\text{B.6.1f})$$

utilizando a Eq. (B.5.1g) na Eq. (B.6.1f), obtém-se

$$M_0 = N_0 \exp\left\{\frac{\beta_1 N_0 v_0}{\sigma} [1 - \exp(\sigma t)]\right\} = N_0 \exp\left\{\frac{[1 - \exp(\tau)]}{\Lambda}\right\} \quad (\text{B.6.1g})$$

## APÊNDICE C

### ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES PARA OS CASOS-TESTES ANALISADOS

#### C.1 - EQUAÇÕES DO ARTIGO DE RAMABHADRAN ET.AL. (1976)

Caso-teste 1

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - \sigma_1 s \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) - \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (\text{C.1.1a})$$

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s_0 + (1/v_0)} \quad (\text{C.1.1b})$$

Definindo  $\bar{p}(s,T) = \frac{2\bar{n}(s,t)}{(1-T)^2}$ , onde  $T = 1 - \frac{M_0(t)}{N_0}$  e  $\Lambda = \frac{\sigma_1}{\beta_0 N_0}$ , aplicando essas

definições na equação (C.1.1a)

$$\bar{n}(s,T) = \frac{\bar{p}(s,T)(1-T)^2}{2} \quad (\text{C.1.2})$$

substituindo a Eq. (C.1.2) em (C.1.1a)

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \left[ (1-T)^2 \bar{p}(s,T) \right]}{\partial t} - \sigma_1 s \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \frac{(1-T)^4}{4} \bar{p}^2(s,T) - \beta_0 M_0(t) \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}(s,T) \quad (\text{C.1.3a})$$

$$-(1-T) \frac{dT}{dt} \bar{p}(s,T) + \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial t} - \sigma_1 s \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \frac{(1-T)^4}{4} \bar{p}^2(s,T) - \beta_0 M_0(t) \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}(s,T) \quad (\text{C.1.3b})$$

$$(1-T) \frac{dT}{dt} \bar{p}(s,T) + \frac{(1-T)^2}{2} \frac{dT}{dt} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \sigma_1 s \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0 (1-T)^4}{2} \bar{p}^2(s,T) - \beta_0 M_0(t) \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}(s,T) \quad (\text{C.1.3c})$$

Derivando  $T = 1 - \frac{M_0(t)}{N_0}$  em função de  $t$ , obtém se

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{N_0} \frac{dM_0(t)}{dt} \quad (\text{C.1.4a})$$

Substituindo a Eq. (B.4.1e) do momento na Eq. (C.1.4a)

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{\beta_0 M_0^2(t)}{2N_0} \quad (\text{C.1.4b})$$

substituindo a Eq. (C.1.4b) em (C.1.3c)

$$-(1-T) \frac{\beta_0 M_0^2(t)}{2N_0} \bar{p}(s,T) + \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\beta_0 M_0^2(t)}{2N_0} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \quad (\text{C.1.5a})$$

$$- \sigma_1 s \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0 (1-T)^4}{2} \bar{p}^2(s,T) - \beta_0 M_0(t) \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}(s,T)$$

$$\frac{(1-T)^2}{2} \frac{\beta_0 M_0^2(t)}{2N_0} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \sigma_1 s \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0 (1-T)^4}{2} \bar{p}^2(s,T) \quad (\text{C.1.5b})$$

$$(1-T) \frac{\beta_0 M_0(t)}{2} \frac{M_0(t)}{N_0} \bar{p}(s,T) - \beta_0 M_0(t) \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}(s,T)$$

$$\frac{(1-T)^2}{2} \frac{\beta_0 M_0^2(t)}{2N_0} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \sigma_1 s \frac{(1-T)^2}{2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0 (1-T)^4}{2} \bar{p}^2(s,T) \quad (\text{C.1.5c})$$

$$(1-T)^2 \frac{\beta_0 M_0(t)}{2} \bar{p}(s,T) - \beta_0 M_0(t) \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}(s,T)$$

$$\frac{\beta_0 M_0^2(t)}{2N_0} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \sigma_1 s \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0 (1-T)^2}{2} \bar{p}^2(s,T) \quad (\text{C.1.5d})$$

$$\frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \sigma_1 s \frac{2N_0}{\beta_0 M_0^2(t)} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \frac{2N_0}{\beta_0 M_0^2(t)} \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}^2(s,T) \quad (\text{C.1.5e})$$

$$\frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \sigma_1 s \frac{2N_0}{\beta_0 (1-T)^2 N_0^2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{N_0}{(1-T)^2 N_0^2} \frac{(1-T)^2}{2} \bar{p}^2(s,T) \quad (\text{C.1.5f})$$

$$\frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - 2 \frac{\sigma_1}{\beta_0 N_0} \frac{s}{(1-T)^2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\bar{p}^2(s,T)}{2N_0} \quad (\text{C.1.5g})$$

$$\frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - 2\Lambda \frac{s}{(1-T)^2} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial s} = \frac{\bar{p}^2(s,T)}{2N_0} \quad (\text{C.1.6})$$

## 1.2 Caso-teste 2

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - \left[ \sigma_1 s + \beta_1 (M_0(t) - \bar{n}(s,t)) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = -\beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (\text{C.2.1a})$$

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s_0 + (1/v_0)} \quad (\text{C.2.1b})$$

Definindo  $\bar{p}(s,T) = \exp\left(\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{n}(s,t)$ , onde  $T = 1 - \frac{N_0 v_0}{M_1(t)}$  e  $\Lambda = \frac{\sigma_1}{\beta_0 N_0 v_0}$ ,

e aplicando essas definições na Eq. (C.2.1a)

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} = \frac{\partial \left[ \bar{p}(s,T) \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \right]}{\partial t} \quad (\text{C.2.2a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial(1/\Lambda(1-T))}{\partial t} \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,T) + \\ & \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{C.2.2b})$$

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} = \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \left[ -\frac{dT}{dt} \frac{\partial(1/\Lambda(1-T))}{\partial t} \bar{p}(s,T) + \frac{dT}{dt} \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \right] \quad (\text{C.2.2c})$$

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} = \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{dT}{dt} \left[ -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)^2} + \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \right] \quad (\text{C.2.2d})$$

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\partial \bar{p}}{\partial s} \quad (\text{C.2.3})$$

Derivando  $T = 1 - \frac{N_0 v_0}{M_1(t)}$  em função de  $t$ , obtém-se

$$\frac{dT}{dt} = \frac{N_0 v_0}{M_1^2(t)} \frac{dM_1(t)}{dt} \quad (\text{C.2.4a})$$

Substituindo as Eqs. (B.5.1f) do momento na Eq. (C.2.4a), tem-se

$$\frac{dT}{dt} = \frac{N_0 v_0}{M_1^2(t)} \sigma M_1(t) \quad (\text{C.2.4b})$$

logo a Eq. (C.2.2d) torna-se

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} = \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{N_0 v_0}{M_1^2(t)} \sigma M_1(t) \left[ -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)^2} + \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \right] \quad (\text{C.2.5a})$$

Substituindo as Eqs. (C.2.5a) e (C.2.3) na Eq. (C.2.1a)

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\sigma N_0 v_0}{M_1(t)} \left[ -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)^2} + \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \right] \\ & - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \left[ \sigma_1 s + \beta_1 \left( M_0(t) - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,T) \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \quad (\text{C.2.5b}) \\ & - \beta_1 M_1(t) \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{N_0 v_0}{M_1(t)} \left[ -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)^2} + \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \right] \\
& - \left[ s + \frac{\beta_1}{\sigma} \left( M_0(t) - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,T) \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \\
& - \frac{\beta_1 M_1(t)}{\sigma} \bar{p}(s,t)
\end{aligned} \tag{C.2.5c}$$

Da definição de  $T$  e substituindo na Eq. (C.2.5c)

$$\begin{aligned}
& (1-T) \left[ -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)^2} + \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \right] \\
& - \left[ s + \frac{\beta_1}{\sigma} \left( M_0(t) - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,T) \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \\
& - \frac{\beta_1 M_1(t)}{\sigma} \bar{p}(s,t)
\end{aligned} \tag{C.2.5d}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)} + (1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \\
& - \left[ s + \frac{\beta_1 N_0 v_0}{\sigma N_0 v_0} \left( M_0(t) - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,T) \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \\
& - \frac{\beta_1 N_0 v_0 M_1(t)}{\sigma N_0 v_0} \bar{p}(s,t)
\end{aligned} \tag{C.2.5e}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\bar{p}(s,T)}{\Lambda(1-T)} + (1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} \\
& - \left[ s + \frac{1}{\Lambda N_0 v_0} \left( M_0(t) - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \bar{p}(s,T) \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \\
& - \frac{M_1(t)}{\Lambda N_0 v_0} \bar{p}(s,t)
\end{aligned} \tag{C.2.5f}$$

Aplicando a definição para  $T$  na Eq. (C.2.5f), logo

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \left[ s + \frac{1}{\Lambda N_0 v_0} \left( \frac{M_0(t)}{N_0} - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\bar{p}(s,T)}{N_0} \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = 0 \quad (\text{C.2.5g})$$

Substituindo a Eq. (B.6.1g) do momento na Eq. (C.2.5g) e admitindo  $\sigma t = \tau$ , tem - se

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \left[ s + \frac{1}{\Lambda N_0 v_0} \left( \exp\left(\frac{\beta N_0 v_0}{\sigma} (1 - \exp(\sigma t))\right) + \right. \right. \\ \left. \left. - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\bar{p}(s,T)}{N_0} \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = 0 \quad (\text{C.2.5h})$$

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \left[ s + \frac{1}{\Lambda N_0 v_0} \left( \exp\left(\frac{1}{\Lambda} (1 - \exp(\tau))\right) + \right. \right. \\ \left. \left. - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\bar{p}(s,T)}{N_0} \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = 0 \quad (\text{C.2.5i})$$

Aplicando a Eq. (B.5.1g) na definição para T e substituindo na Eq. (C.2.5i), obtém se

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \left[ s + \frac{1}{\Lambda N_0 v_0} \left( \exp\left(\frac{1}{\Lambda} \left(-\frac{T}{1-T}\right)\right) + \right. \right. \\ \left. \left. - \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \frac{\bar{p}(s,T)}{N_0} \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = 0 \quad (\text{C.2.5j})$$

$$(1-T) \frac{\partial \bar{p}(s,T)}{\partial T} - \left[ s + \frac{1}{\Lambda v_0} \exp\left(-\frac{1}{\Lambda(1-T)}\right) \left( \exp\left(\frac{1}{\Lambda}\right) - \frac{\bar{p}(s,T)}{N_0} \right) \right] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = 0 \quad (\text{C.2.5k})$$

## APÊNDICE D

### SOLUÇÃO DE UMA EDO EM TERMOS DE UMA EQUAÇÃO DE BERNOULLI

$$\frac{d\bar{n}}{dt} + \beta_0 M_0 \bar{n} = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2 \quad (\text{D.1})$$

Hipóteses para a solução de uma equação de Bernoulli:

$$n = 2 \quad (\text{D.2a})$$

$$p^*(t) = (1-n)p(t) = -\beta_0 M_0 \quad (\text{D.2b})$$

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

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

Cálculo do fator de integração:

$$\mu^* = e^{\int p^*(t) dt} = e^{-\beta_0 \int M_0(t) dt} \quad (\text{D.2d})$$

$$\mu^* = e^{-\beta_0 \int \frac{2N_0}{2+N_0\beta_0 t} dt} \quad (\text{D.2e})$$

$$\mu^* = e^{-2\ln(2+N_0\beta_0 t)} \quad (\text{D.2f})$$

$$\mu^* = \frac{1}{(2+N_0\beta_0 t)^2} \quad (\text{D.2g})$$

Solução geral:

$$z = \frac{C + \int q^*(t) \mu^* dt}{\mu^*} \quad (\text{D.3a})$$

Substituindo a Eq.(D.2c) e Eq.(D.2g) na Eq.(D.3a)

$$z = C(2 + \beta_0 N_0 t)^2 + (2 + \beta_0 N_0 t)^2 \int \left( -\frac{\beta_0}{2} \right) \frac{dt}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \quad (\text{D.3b})$$

Resolvendo a integral da Eq. (D.3b), fazendo  $u = 2 + \beta_0 N_0 t$

$$\int \frac{dt}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} = \frac{1}{\beta_0 N_0} \int \frac{du}{u^2} = -\frac{1}{\beta_0 N_0} \frac{1}{(2 + \beta_0 N_0 t)} \quad (\text{D.3c})$$

$$z = C(2 + \beta_0 N_0 t)^2 + (2 + \beta_0 N_0 t)^2 \left( -\frac{\beta_0}{2} \right) \left( -\frac{1}{\beta_0 N_0} \frac{1}{(2 + \beta_0 N_0 t)} \right) \quad (\text{D.3d})$$

$$z = C(2 + \beta_0 N_0 t)^2 + \frac{1}{2N_0} (2 + \beta_0 N_0 t) \quad (\text{D.3e})$$

$$z = \frac{(2 + \beta_0 N_0 t) [1 + 2CN_0 (2 + \beta_0 N_0 t)]}{2N_0} \quad (\text{D.3f})$$

$$\bar{n} = \frac{2N_0}{(2 + \beta_0 N_0 t) [1 + 2CN_0 (2 + \beta_0 N_0 t)]} \quad (\text{D.4})$$

## APÊNDICE E

### CONVERSÃO DA EDP EM FUNÇÃO DO VOLUME PARA DIÂMETRO (D) E COMPRIMENTO (L) DA PARTÍCULA

#### 1 DEDUÇÃO PARA DIÂMETRO (D) CONSIDERANDO PARTÍCULA ESFÉRICA

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} + \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(v,t)\int_0^\infty \beta(v,\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{E.1.1a})$$

$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0} \exp\left(-\frac{v}{v_0}\right) \quad (\text{E.1.1b})$$

$$n(0,t) = 0 \quad (\text{E.1.1c})$$

Multiplicando (E.1.1a) por  $\pi D^2/2$ , logo

$$\frac{\pi D^2}{2} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} + \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \\ -n(v,t)\int_0^\infty \beta(v,\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \end{array} \right\} \quad (\text{E.1.2a})$$

Admitindo  $\frac{\pi D^2}{2} n(v,t) = n(D,t)$ , obtém - se

$$\frac{\partial n(D,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I(v,t)n(D,t)]}{\partial v} + \frac{\pi D^2}{2} \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(D,t)\int_0^\infty \beta(v,\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{E.1.2b})$$

Resolvendo o segundo termo da Eq. (E.1.2b) e assumindo  $v = D^3$

$$II = \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{E.1.3a})$$

$$II = \int_0^{(D/2)^{1/3}} \beta \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, \tilde{D} \right] n(D^3 - \tilde{D}^3, t) n(\tilde{D}^3, t) 3\tilde{D}^2 d\tilde{D} \quad (\text{E.1.3b})$$

Assumindo  $3\tilde{D}^2 n(\tilde{D}^3, t) = n(\tilde{D}, t)$ , obtém-se

$$II = \int_0^{(D/2)^{1/3}} \beta \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, \tilde{D} \right] n(D^3 - \tilde{D}^3, t) n(\tilde{D}, t) d\tilde{D} \quad (\text{E.1.3c})$$

$$II = \int_0^{(D/2)^{1/3}} \beta \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, \tilde{D} \right] \frac{(\pi/2)(D^3 - \tilde{D}^3)^{2/3}}{(\pi/2)(D^3 - \tilde{D}^3)^{2/3}} n(D^3 - \tilde{D}^3, t) n(\tilde{D}, t) d\tilde{D} \quad (\text{E.1.3d})$$

Admitindo  $(\pi/2)(D^3 - \tilde{D}^3)^{2/3} n(D^3 - \tilde{D}^3, t) \cong n\left((D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, t\right)$ , obtém-se

$$II = \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, \tilde{D} \right] n \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, t \right] n(\tilde{D}, t)}{(\pi/2)(D^3 - \tilde{D}^3)^{2/3}} d\tilde{D} \quad (\text{E.1.3e})$$

logo

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(D, t)}{\partial t} = & -\frac{3D^2}{3D^2} \frac{\partial [I_D n(D, t)]}{\partial D} \\ & + \frac{\pi D^2}{2} \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, \tilde{D} \right] n \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, t \right] n(\tilde{D}, t)}{(\pi/2)(D^3 - \tilde{D}^3)^{2/3}} d\tilde{D} \end{aligned} \quad (\text{E.1.4a})$$

$$-n(D, t) \int_0^\infty \beta(D, \tilde{D}) n(\tilde{D}, t) d\tilde{D}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(D, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial [I_D n(D, t)]}{\partial D} \\ & + D^2 \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, \tilde{D} \right] n \left[ (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}, t \right] n(\tilde{D}, t)}{(D^3 - \tilde{D}^3)^{2/3}} d\tilde{D} \end{aligned} \quad (\text{E.1.4b})$$

$$-n(D, t) \int_0^\infty \beta(D^3, \tilde{D}^3) n(\tilde{D}, t) d\tilde{D}$$

Admitindo  $\psi^2 = (D^3 - \tilde{D}^3)^{1/3}$ , tem-se

$$\frac{\partial n(D,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I_D n(D,t)]}{\partial D} + D^2 \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta(\psi, \tilde{D}) n(\psi, t) n(\tilde{D}, t)}{\psi^2} d\tilde{D} - n(D,t) \int_0^\infty \beta(D^3, \tilde{D}^3) n(\tilde{D}, t) d\tilde{D} \quad (\text{E.1.5})$$

Admitindo  $\beta(D^3, \tilde{D}^3) = \beta(D, \tilde{D})$ , logo

$$\frac{\partial n(D,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I_D n(D,t)]}{\partial D} + D^2 \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta(\psi, \tilde{D}) n(\psi, t) n(\tilde{D}, t)}{\psi^2} d\tilde{D} - n(D,t) \int_0^\infty \beta(D, \tilde{D}) n(\tilde{D}, t) d\tilde{D} \quad (\text{E.1.6})$$

## 2 - DEDUÇÃO PARA O COMPRIMENTO (L)

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} + \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n(v,t) \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \quad (\text{E.2.1a})$$

$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0} \exp\left(-\frac{v}{v_0}\right) \quad (\text{E.2.1b})$$

$$n(0,t) = 0 \quad (\text{E.2.1c})$$

Multiplicando a Eq.(E.2.1a) por  $3L^2$ , logo

$$3L^2 \left\{ \begin{aligned} \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} + \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \\ &- n(v,t) \int_0^\infty \beta(v, \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \end{aligned} \right\} \quad (\text{E.2.2a})$$

Admitindo  $3L^2 n(v,t) = n(L,t)$ , obtém - se

$$\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} = -\frac{\partial [I(v,t)n(D,t)]}{\partial v} + \frac{3L^2}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n(L,t) \int_0^\infty \beta(v,\tilde{v})n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{E.2.2b})$$

Resolvendo o segundo termo da Eq. (E.2.2b) e admitindo  $v = L^3$

$$II = \frac{1}{2} \int_0^v \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} \quad (\text{E.2.3a})$$

$$II = \frac{1}{2} \int_0^{(L^3)^{1/3}} \beta\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},\tilde{L}\right]n(L^3-\tilde{L}^3,t)n(\tilde{L},t)3\tilde{L}^2d\tilde{L} \quad (\text{E.2.3b})$$

Assumindo  $3\tilde{L}n(\tilde{L}^3,t) = n(\tilde{L},t)$ , logo

$$II = \frac{1}{2} \int_0^L \beta\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},\tilde{L}\right]n(L^3-\tilde{L}^3,t)n(\tilde{L},t)d\tilde{L} \quad (\text{E.2.3c})$$

$$II = \frac{1}{2} \int_0^L \beta\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},\tilde{L}\right] \frac{3(L^3-\tilde{L}^3)^{2/3}}{3(L^3-\tilde{L}^3)^{2/3}} n(L^3-\tilde{L}^3,t)n(\tilde{L},t)d\tilde{L} \quad (\text{E.2.3d})$$

Admitindo  $3(L^3-\tilde{L}^3)^{2/3}n(L^3-\tilde{L}^3,t) \cong n\left((L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},t\right)$ , obtendo - se

$$II = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{\beta\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},\tilde{L}\right]n\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},t\right]n(\tilde{L},t)}{3(L^3-\tilde{L}^3)^{2/3}}d\tilde{L} \quad (\text{E.2.3e})$$

Logo

$$\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} = -\frac{3L^2}{3L^2} \frac{\partial [G_L n(L,t)]}{\partial L} + \frac{3L^2}{2} \int_0^L \frac{\beta\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},\tilde{L}\right]n\left[(L^3-\tilde{L}^3)^{1/3},t\right]n(\tilde{L},t)}{3(L^3-\tilde{L}^3)^{2/3}}d\tilde{L} - n(L,t) \int_0^\infty \beta(L,\tilde{L})n(\tilde{L},t)d\tilde{L} \quad (\text{E.2.4a})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial [G_L n(L,t)]}{\partial L} \\
& + \frac{L^2}{2} \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta \left[ (L^3 - \tilde{L}^3)^{1/3}, \tilde{L} \right] n \left[ (L^3 - \tilde{L}^3)^{1/3}, t \right] n(\tilde{L}, t)}{(L^3 - \tilde{L}^3)^{2/3}} d\tilde{L} \\
& - n(L,t) \int_0^\infty \beta(L^3, \tilde{L}^3) n(\tilde{L}, t) d\tilde{L}
\end{aligned} \tag{E.2.4b}$$

Admitindo  $\psi = (L^3 - \tilde{L}^3)^{1/3}$ , tem - se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial [G_L n(L,t)]}{\partial L} + \frac{L^2}{2} \int_0^L \frac{\beta(\psi, \tilde{L}) n(\psi, t) n(\tilde{L}, t)}{\psi^2} d\tilde{L} \\
& - n(L,t) \int_0^\infty \beta(L^3, \tilde{L}^3) n(\tilde{L}, t) d\tilde{L}
\end{aligned} \tag{E.2.5}$$

Admitindo  $\beta(L^3, \tilde{L}^3) = \beta(L, \tilde{L})$ , logo

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial [G_L n(L,t)]}{\partial L} + \frac{L^2}{2} \int_0^L \frac{\beta(\psi, \tilde{L}) n(\psi, t) n(\tilde{L}, t)}{\psi^2} d\tilde{L} \\
& - n(L,t) \int_0^\infty \beta(L, \tilde{L}) n(\tilde{L}, t) d\tilde{L}
\end{aligned} \tag{E.2.6}$$

Admitindo  $\tilde{L} \ll L$  logo  $\psi \cong L$ , obtém se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(L,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial [G_L n(L,t)]}{\partial L} + \frac{1}{2} \int_0^L \beta(L, \tilde{L}) n(L,t) n(\tilde{L}, t) d\tilde{L} \\
& - n(L,t) \int_0^\infty \beta(L, \tilde{L}) n(\tilde{L}, t) d\tilde{L}
\end{aligned} \tag{E.2.7}$$

## APÊNDICE F

### SOLUÇÃO DE UMA EDO EM TERMOS DE UMA EQUAÇÃO DE RICCATI

$$y' + P(x)y + Q(x)y^2 = R(x) \quad (\text{F.1})$$

Considere que equação de Riccati tenha uma solução particular  $u(x)$

$$y = u(x) + \frac{1}{z} \quad (\text{F.2})$$

Derivando a Eq. (2), obtém-se

$$y' = u'(x) - \frac{1}{z^2} z' \quad (\text{F.3})$$

Substituindo as equações (1) e (2) em (3), obtém-se

$$u'(x) - \frac{1}{z^2} z' + P(x) \left[ u(x) + \frac{1}{z} \right] + Q(x) \left[ u(x) + \frac{1}{z} \right]^2 = R(x) \quad (\text{F.4})$$

Simplificando a Eq. (4) obtém-se

$$u'(x) + P(x)u(x) + Q(x)u^2(x) - \frac{1}{z^2} z' + \frac{P(x)}{z} + \frac{2Q(x)u(x)}{z} + \frac{Q(x)}{z^2} = R(x) \quad (\text{F.5})$$

considerando que  $u(x)$  é a solução particular, logo

$$Q(x)u^2(x) + P(x)u(x) = R(x) \quad (\text{F.6})$$

$$z' - [P(x) + 2Q(x)u(x)]z = Q(x) \quad (\text{F.7})$$