

AGREGAÇÃO DE PARTÍCULAS EM UMA SUSPENSÃO DILUÍDA EM REGIMES DE RÁPIDA COAGULAÇÃO

Hugo Leonnardo Gomides do Couto

Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia. Departamento de Engenharia Mecânica.
Campus Universitário Darcy Ribeiro. 70910-900 - Brasília, DF, Brasil
hlcouto@unb.br

Resumo: Neste trabalho desenvolve-se uma investigação teórica acerca das interações binárias de partículas em uma suspensão diluída. A suspensão é composta de partículas esféricas magnéticas de diferentes raios e densidades imersas em um fluido Newtoniano. Esta polidispersidade promove o movimento relativo das partículas, por meio da ação da gravidade. Quando as partículas estão próximas, as partículas podem exercer umas sobre as outras uma força atrativa de van der Waals, uma força magnética, devido à prévia magnetização das partículas, e uma força repulsiva eletrostática, devido à formação de uma dupla camada elétrica sobre a superfície das partículas. No regime de rápida coagulação, a força atrativa de van der Waals e a força magnética dominam o efeito da força repulsiva. Por meio do cômputo das interações hidrodinâmicas entre esferas rígidas, no regime de baixos números de Reynolds, determina-se o movimento relativo das partículas. A relação entre a força interpartícula e a gravidade estabelece se as trajetórias resultantes serão fechadas, quando ocorre a agregação, ou abertas, podendo apresentar uma quebra da reversibilidade das trajetórias relativas no tempo. A eficiência do processo de agregação é calculada a fim de determinar o efeito das interações hidrodinâmicas sobre a estabilidade de suspensões não-Brownianas. Além disso, como a natureza da força magnética pode ser atrativa ou repulsiva, avalia-se a estabilidade da suspensão por meio da adequada orientação dos momentos de dipolo magnético das partículas.

Palavras-chave: sedimentação, interações hidrodinâmicas, eficiência de agregação, forças de van der Waals, partículas magnéticas.

1. INTRODUÇÃO

Em uma suspensão diluída, a probabilidade de uma terceira esfera influenciar o movimento de duas partículas interagentes é pequena. Dessa forma, as colisões de duas partículas são descorrelacionadas. Nos casos em que movimento Browniano, inércia e forças interpartícula podem ser desprezados, duas partículas esféricas sedimentando em uma suspensão diluída colidem de forma reversível, retornando às suas trajetórias iniciais. Entretanto, se um desses efeitos é considerado, as partículas são submetidas a uma migração lateral durante a colisão, que pode resultar em agregação ou, simplesmente, na quebra da reversibilidade das trajetórias relativas no tempo.

Para os casos em que a agregação ocorre, a quantidade de interesse é a taxa de formação de dímeros. As primeiras estimativas para a taxa de agregação em uma dispersão foram desenvolvidas por Smoluchowski (1917). Em seu modelo, as partículas são submetidas somente uma força de contato na colisão, ou seja, sem qualquer interação hidrodinâmica ou força interpartícula. Em seguida, Zeichner & Schowalter (1977) incluiu os efeitos da interação hidrodinâmica e forças interpartícula e calculou a taxa de agregação de uma dispersão de esferas idênticas sujeitas a um cisalhamento simples ou a um escoamento extensional. Além disso, Curtis & Hocking (1970) realizaram um cálculo semelhante para escoamentos cisalhantes e apresentaram resultados experimentais, evidenciando a importância das forças de van der Waals na agregação de partículas. Usando uma formulação do método integral de contorno, a colisão de duas partículas deformáveis foi determinada por Loewenberg & Hinch (1997). Para números de Peclet arbitrários, usando a solução da equação de Fokker-Planck para a distribuição de pares de partículas, Zinchenko & Davis (1992) determinaram a coalescência de gotas viscosas induzidas pela gravidade.

Neste trabalho, avalia-se a influência da força magnética, promovida pela prévia magnetização das partículas rígidas, sobre o fenômeno de agregação. Como a força magnética pode possuir natureza atrativa ou repulsiva, investiga-se como uma determinada orientação dos momentos de dipolo magnético da partícula pode reduzir a eficiência de agregação em uma suspensão diluída.

2. DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Considere duas partículas esféricas lisas, de raios a_1 e a_2 e de massas específicas ρ_1 e ρ_2 e magnetizações $\mathbf{M}_1 = M_1 \hat{\mathbf{d}}_1$ e $\mathbf{M}_2 = M_2 \hat{\mathbf{d}}_2$, imersas em fluido newtoniano de viscosidade μ e densidade ρ , sedimentando sob a ação de um campo gravitacional uniforme $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_3$. A Fig. (1) apresenta um esquema da configuração do par de partículas, ilustrando a nomenclatura utilizada.

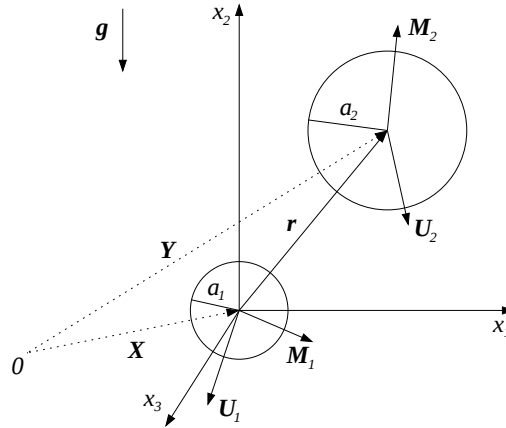


Figura 1. Esquema do sistema de coordenadas utilizado para descrição do movimento relativo de duas partículas esféricas movimentando-se em baixos números de Reynolds.

A incidência de uma esfera sobre a outra é induzida pela diferença entre as respectivas velocidades de sedimentação em razão das diferenças de raio e/ou densidade. A polidispersidade do par de partículas é caracterizada pela razão de raios λ e pela razão de densidades reduzidas γ , definidas como segue

$$\lambda \equiv \frac{a_2}{a_1} \quad \text{e} \quad \gamma \equiv \frac{\rho_2 - \rho}{\rho_1 - \rho}. \quad (1)$$

As posições do centro das esferas 1 e 2 serão denotadas por $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}$, respectivamente, sendo $\mathbf{r} \equiv \mathbf{X} - \mathbf{Y}$ o vetor distância relativa. A distância entre centros é denotada por $r = |\mathbf{r}|$, sendo $s \equiv 2r/(a_1 + a_2)$ a distância adimensional. As velocidades de sedimentação das partículas 1 e 2, quando isoladas, são denotadas por $\mathbf{U}_1^{(0)}$ e $\mathbf{U}_2^{(0)}$, respectivamente, sendo que $\mathbf{U}_2^{(0)} = \gamma \lambda^2 \mathbf{U}_1^{(0)}$. Define-se por $\mathbf{U}_{12}^{(0)} \equiv \mathbf{U}_2^{(0)} - \mathbf{U}_1^{(0)}$ a velocidade terminal relativa, cujo módulo $U_{12}^{(0)}$ será empregado como escala de velocidade para as adimensionalizações.

Assume-se que as partículas são suficientemente pequenas de forma que o número de Reynolds de partícula $Re_\alpha \equiv \rho U_\alpha^{(0)} a_\alpha / \mu$ ($\alpha = 1, 2$) seja pequeno comparado com a unidade. Sob esta hipótese, é possível desprezar os termos de inércia do fluido ambiente na equação de movimento.

Uma vez especificadas as forças $\mathbf{F}_1$ e $\mathbf{F}_2$ atuando sobre as partículas e assumindo que estas estão livres de torque, as velocidades de translação $\mathbf{U}_1$ e $\mathbf{U}_2$ são determinadas pela relação de mobilidade (Kim & Karrila, 1991), apresentada a seguir

$$\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

em que a matriz quadrada é a *mobilidade global*, a qual contém os tensores de segunda ordem $b_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$), dados por

$$b_{\alpha\beta} = \frac{C_{\alpha\beta}}{3\pi\mu(a_\alpha + a_\beta)} \quad \text{e} \quad C_{\alpha\beta} = \left[A_{\alpha\beta} \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} + B_{\alpha\beta} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) \right], \quad (3)$$

com $\mathbf{I}$ denotando o tensor identidade. As funções mobilidade $A_{\alpha\beta}(s, \lambda)$ e $B_{\alpha\beta}(s, \lambda)$, as quais dependem apenas da distância adimensional s entre as partículas e da razão de aspecto λ , encontram-se tabeladas em Kim & Karrila (1991) e em Jeffrey & Onishi (1984), para interações de curto e longo alcance. Pode ser mostrado que, pelo Teorema da Reciprocidade de Lorentz (Happel & Brenner, 1967), $A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}$ e $B_{\alpha\beta} = B_{\beta\alpha}$.

A força $\mathbf{F}_\alpha$ atuando sobre as partículas incluem o peso líquido, que consiste do peso subtraído do empuxo de Arquimedes, a força atrativa de van der Waals e a força magnética. Desta forma, $\mathbf{F}_\alpha$ é expressa por

$$\mathbf{F}_i = \frac{4}{3}\pi a_i^3 (\rho_i - \rho) \mathbf{g} + (2i - 3)(\nabla \varphi_A + \nabla \varphi_M), \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

em que φ_A e φ_M são os potenciais interpartícula das forças de van der Waals e magnética, respectivamente.

2.1 Interação de van der Waals

A força de van der Waals entre duas partículas foi pela primeira vez estimada por (Hamaker, 1937). Entretanto, o cálculo de Hamaker ignora a retardação eletromagnética e, portanto, somente é válida para distâncias entre partículas menores que o comprimento de onda de London λ_L , que é tipicamente $0.1 \mu m$ para dispersões sólido-líquido. Este efeito

de retardação foi considerado por (Schenkel & Kitchener, 1960) que propôs as seguintes aproximações para sistemas polidispersos

$$\varphi_A = \begin{cases} -\frac{A}{12\xi(1+11.2h_L)} \frac{4\lambda}{(1+\lambda)^2}, & \text{when } h_L \leq \frac{1}{2\pi} \\ -\frac{A}{10^3\xi} \left\{ \frac{6.5}{h_L} - \frac{0.305}{h_L^2} + \frac{0.0057}{h_L^3} \right\} \frac{4\lambda}{(1+\lambda)^2}, & \text{when } h_L > \frac{1}{2\pi} \end{cases} \quad (5)$$

em que A é a constante de Hamaker, que considera propriedades do fluido base e das partículas, h é a distância entre as partículas e $h_L \equiv h/\lambda_L$. A distância entre partícula adimensional dada por ξ , tal que $\xi = s - 2$. Na Eq. (5) o termo h/λ_L pode ser expresso na seguinte forma apropriada

$$\frac{h}{\lambda_L} = \left(\frac{2h}{a_1 + a_2} \right) \left(\frac{a_1 + a_2}{2\lambda_L} \right) = \xi \left(\frac{a_1 + a_2}{2\lambda_L} \right). \quad (6)$$

De acordo com a Eq. (5) a influência da retardação eletromagnética no potencial de interação de curto alcance associated à força de van der Waals é considerado nas simulações das trajetórias relativas de duas partículas realizadas neste trabalho. Assim, define-se um coeficiente de retardação $\epsilon_R \equiv (a_1 + a_2)/2\lambda_L$ obtendo-se a seguinte expressão

$$\frac{h}{\lambda_L} = \xi \epsilon_R. \quad (7)$$

Para hidrossóis o raio de uma partícula é tipicamente $a_i \sim 1\mu m$ e, portanto, $\epsilon_R \equiv a_i/\lambda_L \sim 10$.

2.2 Interação Magnética

Para a interação magnética entre dois dipolos, a expressão de longo alcance dada em Rosensweig (1985) é usada

$$\varphi_M = \frac{\mu_0(M_1 V_1)(M_2 V_2)}{4\pi r^3} \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right]. \quad (8)$$

em que $\hat{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r}/r$ é o vetor unitário ao longo da linha de centro das partículas, V_1 e V_2 são os volumes das partículas e μ_0 é a permeabilidade magnética do espaço livre e é dada por $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} H \cdot m^{-1}$. Para a adimensionalização da Eqs. (5) e (8), escolhe-se como escalas típicas $\varphi_0^a = A$ e $\varphi_0^m = \mu_0 M_1^2 V_1$ sendo a medida da força dos potenciais de van der Waals e magnético, respectivamente. Então, a Eq. (8) pode ser reescrita em uma forma adimensional como sendo

$$\frac{\varphi_M}{\varphi_0^m} = \frac{M_{12}}{3s^3} \left(\frac{2\lambda}{1+\lambda} \right)^3 \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{s}}) \right], \quad (9)$$

em que $M_{12} = M_2/M_1$ é a razão das intensidades de magnetização das partículas.

2.3 Equação da Trajetória Relativa

Uma vez que as forças de inércia da fase fluida e da fase particulada não são relevantes nessa análise, a equação do movimento relativo de duas esferas rígidas em sedimentação consiste no balanço entre a força hidrodinâmica em cada partícula e a força aplicada $\mathbf{F}_i$. Assim, a evolução temporal do vetor $\mathbf{s}$, em uma forma adimensional, é governado pela seguinte equação diferencial

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \mathbf{U}_{12} \equiv \mathbf{U}_2 - \mathbf{U}_1. \quad (10)$$

E, substituindo a Eq. (4) em (2), obtém-se uma expressão para a velocidade relativa $\mathbf{U}_{12}$ que, em termos de quantidades adimensionais, é expressa por

$$\mathbf{U}_{12} = \mathbf{g} \cdot \left[\frac{\mathbf{s}\mathbf{s}}{s^2} \mathcal{L}(s) + \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}\mathbf{s}}{s^2} \right) \mathcal{M}(s) \right] - (\mathcal{Q}_A \nabla \varphi_A^d + \mathcal{Q}_M \nabla \varphi_M^d) \cdot \left[\frac{\mathbf{s}\mathbf{s}}{s^2} \mathcal{G}(s) + \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}\mathbf{s}}{s^2} \right) \mathcal{H}(s) \right], \quad (11)$$

em que $\varphi_A^d = \varphi_A/\varphi_0^a$ e $\varphi_M^d = \varphi_M/\varphi_0^m$ são os potenciais interpartícula na forma adimensional. Aqui, $\mathcal{L}(s)$, $\mathcal{M}(s)$, $\mathcal{G}(s)$ e $\mathcal{H}(s)$ são funções escalares de s dadas por

$$\mathcal{L}(s) = \frac{\gamma\lambda^2 A_{22} - A_{11}}{\gamma\lambda^2 - 1} + \frac{2(1 - \gamma\lambda^3)A_{12}}{(\gamma\lambda^2 - 1)(1 + \lambda)}, \quad (12)$$

$$\mathcal{M}(s) = \frac{\gamma\lambda^2 B_{22} - B_{11}}{\gamma\lambda^2 - 1} + \frac{2(1 - \gamma\lambda^3)B_{12}}{(\gamma\lambda^2 - 1)(1 + \lambda)}, \quad (13)$$

$$\mathcal{G}(s) = \frac{\lambda A_{11} + A_{22}}{(1 + \lambda)} - \frac{4\lambda A_{12}}{(1 + \lambda)^2}, \quad (14)$$

$$\mathcal{H}(s) = \frac{\lambda B_{11} + B_{22}}{(1 + \lambda)} - \frac{4\lambda B_{12}}{(1 + \lambda)^2}. \quad (15)$$

Similarmente, as funções $\mathcal{L}(s)$, $\mathcal{M}(s)$, $\mathcal{G}(s)$ e $\mathcal{H}(s)$ não variam quando λ e γ são substituídos por seus recíprocos λ^{-1} e γ^{-1} . Os dois termos do lado direito da Eq. (11) representam as contribuições da gravidade e da força interpartícula para o movimento relativo das partículas, respectivamente. Sua importância relativa pode ser medida pelo seguinte parâmetro físico $\mathcal{Q}_A$ e $\mathcal{Q}_M$

$$\mathcal{Q}_A \equiv \frac{2D_{12}^{(0)}}{(a_1 + a_2)U_{12}^{(0)}} \frac{A}{k_B T} \quad \text{and} \quad \mathcal{Q}_M \equiv \frac{2D_{12}^{(0)}}{(a_1 + a_2)U_{12}^{(0)}} \frac{\mu_0 M_1^2 V_1}{k_B T}. \quad (16)$$

Usando a Eq. (16) com a definição de $D_{12}^{(0)}$ pode-se obter que $\mathcal{Q}_A = A/(6\pi\mu a_1 a_2 U_{12}^{(0)})$. Este parâmetro pode ser interpretado como a relação entre duas escalas de energia; uma associada com a energia potencial da força atrativa de van der Waals representada pela constante de Hamaker A e outra com o trabalho realizado pelas forças viscosas. Similarmente, o parâmetro $\mathcal{Q}_M = \mu_0 M_1^2 V_1 / (6\pi\mu a_1 a_2 U_{12}^{(0)})$ pode ser visto como a medida da relativa importância entre o potencial magnético associado às interações dipolares e o trabalho feito pelas forças viscosas.

3. RESULTADOS

As equações governantes para as trajetórias relativas de duas partículas interagentes foram integradas por meio de uma implementação do método de Runge-Kutta de quarta ordem. As formas assintóticas para as funções mobilidade no regime de longo alcance são dadas por (Jeffrey & Onishi, 1984) e foram usadas para $s > 2.3$. De outra forma, as mobilidades de curto alcance são dadas pelos mesmos autores.

Neste problema muitas escalas de tempo estão envolvidas e, dessa forma, a interpenetração de partículas deve ser evitada. Assim, utiliza-se um passo de tempo adaptativo que considera a distância relativa entre as partículas. A fim de se determinar o passo de tempo adequado para estas simulações, considera-se o balanço entre as forças de lubrificação e a força interpartícula nas proximidades do contato. De acordo com (Kim & Karrila, 1991) e (Cunha, 2003), as escalas típicas para a lubrificação e a força de van der Waals são dadas por $6\pi\mu \bar{a}^2 U_\ell / h$ e $A \bar{a} / h^2$, respectivamente. Aqui, U_ℓ é a escala de velocidade associada com a lubrificação e $\bar{a} = (a_1 + a_2)/2$ uma escala de comprimento típica do movimento relativo. Similarmente, considera-se que $\mu_0 M^2 V \bar{a} / h^2$ é uma escala típica para a força de interação magnética. Portanto, obtém-se os seguintes balanços nas regiões próximas ao contato

$$\frac{6\pi\mu \bar{a}^2 U_\ell}{h} \sim \frac{A \bar{a}}{h^2} \quad \text{and} \quad \frac{6\pi\mu \bar{a}^2 U_\ell}{h} \sim \frac{\mu_0 M^2 V \bar{a}}{h^2}. \quad (17)$$

Considering $t_\ell \sim \bar{a}/U_\ell$ a time scale associated with the lubrication and non-dimensionalizing this time using the typical settling time scale $t_s \sim \bar{a}/U_{12}^{(0)}$ we obtain the typical time-step used in our simulations

$$\delta t = \frac{1}{10} \min \{10^{-2}, \xi^2 \mathcal{Q}_A^{-1}, \xi^2 \mathcal{Q}_M^{-1}\}. \quad (18)$$

Utilizando esse esquema, os erros de integração foram menores que $\zeta = 10^{-3}$, tal que ζ é uma fração do comprimento típico utilizado nesta formulação. Este resultado é obtido do argumento teórico de que, sem forças interpartícula, as partículas descrevem trajetórias abertas reversíveis.

3.1 Trajetórias Relativas

O estudo de migração lateral de partículas é controlado por seis parâmetros físicos adimensionais. Dessa forma, torna-se relevante avaliar a influência de cada um desses parâmetros sobre a eficiência de coagulação. As Figs. (2) e (3) mostram as trajetórias relativas entre as partículas sob ação da sedimentação diferencial e das forças atrativas de van der Waals, de forma que $\mathcal{Q}_M \ll 1$.

A Fig. (2.a) apresenta a influência da condição inicial $y^{-\infty}$, situada na direção perpendicular à gravidade sobre a agregação das partículas. É possível observar que, à medida que a distância transversal entre as linhas de centro das partículas diminui, a colisão torna-se mais eficiente. Nota-se que existe um valor crítico para $y^{-\infty}$, tal que para valores menores que a distância crítica y_c^* sempre ocorrerá a colisão ou formação de dímeros. Para a situação descrita na Fig. (2.a), o valor crítico obtido é de aproximadamente $y_c^* \cong 1.37$.

Além disso, pode-se avaliar o efeito do número de van der Waals, $\mathcal{Q}_A$, sobre a agregação, através da Fig. (2.b). Nota-se que para $\mathcal{Q}_A = 10^2$ ou 10 ocorre a colisão entre as partículas, pois para estes valores de $\mathcal{Q}_A$ as forças coloidais são dominantes perante a ação da gravidade e as interações viscosas do tipo lubrificação. Para $\mathcal{Q}_A = 10^{-1}$ a partícula passa pela outra sem alterar sua trajetória, seguindo uma trajetória reversível, dado que neste caso a sedimentação é o fenômeno dominante.

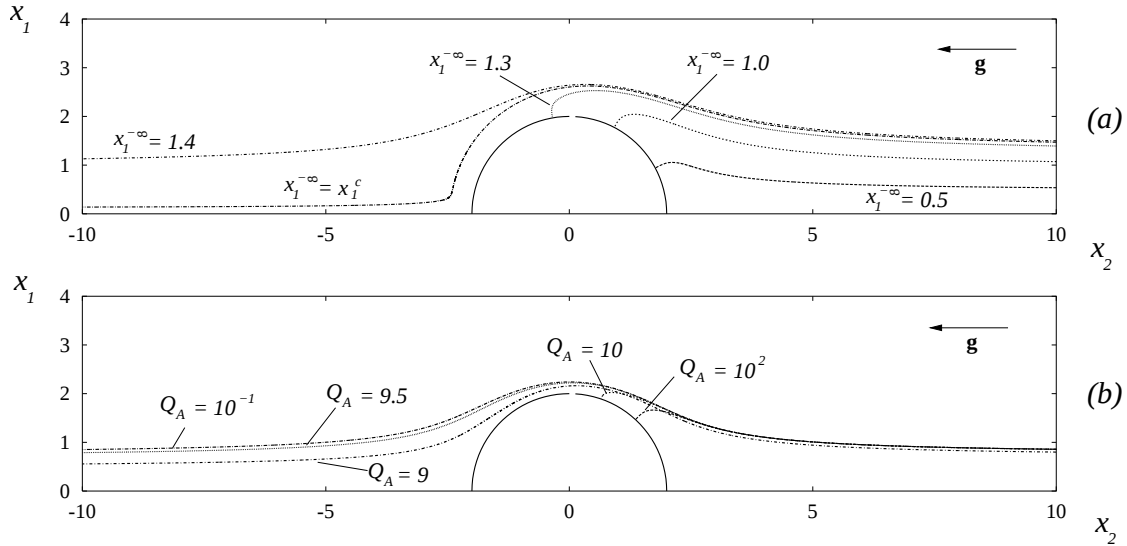


Figura 2. Trajetórias relativas típicas para duas partículas sujeitas à sedimentação, avaliando a influência dos parâmetros físicos no processo de agregação. (a) Influência da posição inicial $y_1^{-\infty}$ para $\lambda_r = 0.5$, $\gamma_r = 1.0$ e $Q_A = 10^2$; (b) Influência do número de van der Waals Q_A , para $y_1^{-\infty} = 0.8$, $\lambda_r = 0.5$ e $\gamma_r = 1.0$.

Os outros dois parâmetros avaliados dizem respeito à polidispersidade da suspensão, sendo estes a razão de densidade reduzida, γ_r e a razão de raios λ_r . É possível observar, na Fig. (3.b) que, à medida que γ_r cresce, diminui-se a possibilidade de colisão até o ponto em que as partículas não mais se agregam, $\gamma_r = 2.0$. Se γ_r for elevado, a velocidade relativa de sedimentação aumenta, dominando as forças atrativas de van der Waals. Por sua vez, da Fig. (3.a), nota-se que a redução da razão de raios λ_r , também eleva a velocidade relativa de sedimentação, logo o tempo para que a partícula se desloque de um raio na direção da outra é muito maior que o tempo de sedimentação, o que impede ou dificulta a colisão.

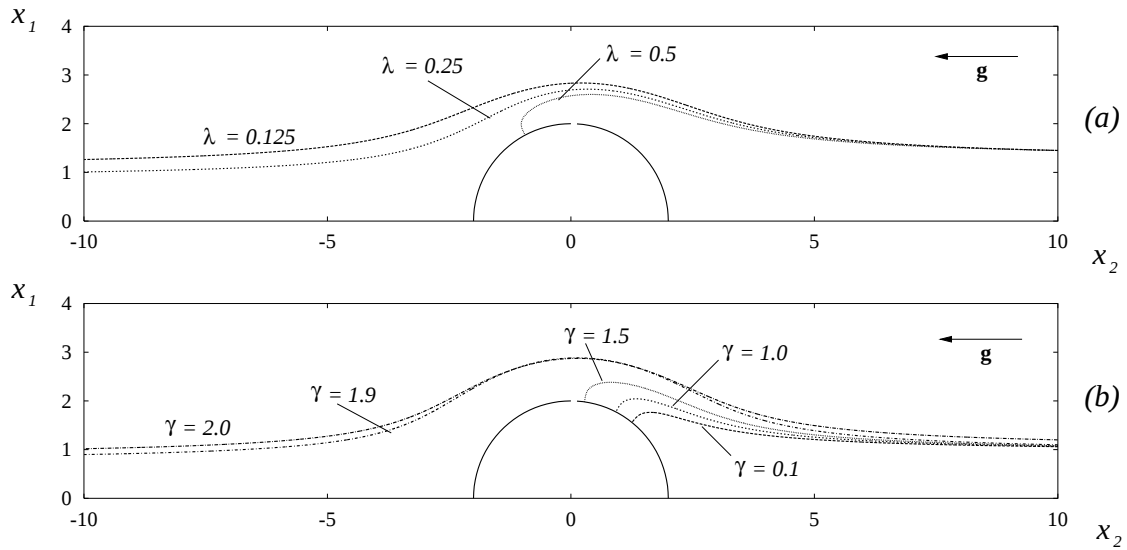


Figura 3. Trajetórias relativas típicas para duas partículas sujeitas à sedimentação, avaliando a influência dos parâmetros físicos no processo de agregação. (a) Influência da razão de raios λ_r para $y_1^{-\infty} = 1.5$, $\gamma_r = 1.0$ e $Q_A = 0.01$; (b) Influência da razão de densidade reduzida γ_r para $y_1^{-\infty} = 1.2$, $\lambda_r = 0.5$, $Q_A = 10^2$.

Nesta seção, investiga-se o fenômeno de agregação devido à interação magnética entre pares partículas em uma suspensão diluída. Dessa forma, as forças de van der Waals são consideradas desprezíveis ($Q_A \ll 1$).

A Fig. (4.a) avalia a influência da intensidade de magnetização relativa M_{12} . Nota-se que a elevação de M_{12} favorece a desestabilização da suspensão levando a uma rápida floculação. Convém observar que este é um parâmetro de grande importância no processo de agregação de partículas, tendo em vista que uma pequena variação do mesmo influencia de forma significativa o processo de agregação. A Fig. (4.b), por sua vez, apresenta a influência do potencial de interação magnética, Q_M sobre a agregação. Nota-se que ocorreu colisão apenas para $Q_M = 10^2$, enquanto que para os outros valores testados, ocorreu a quebra da reversibilidade do escoamento. Esse mecanismo caracteriza um fenômeno de auto-difusão na suspensão. Note que a difusão de trajetórias provocada pela interação magnética, Fig. (4.b) é maior que aquela apresentada para o potencial de van der Waals, o que é mostrado na Fig. (2.b).

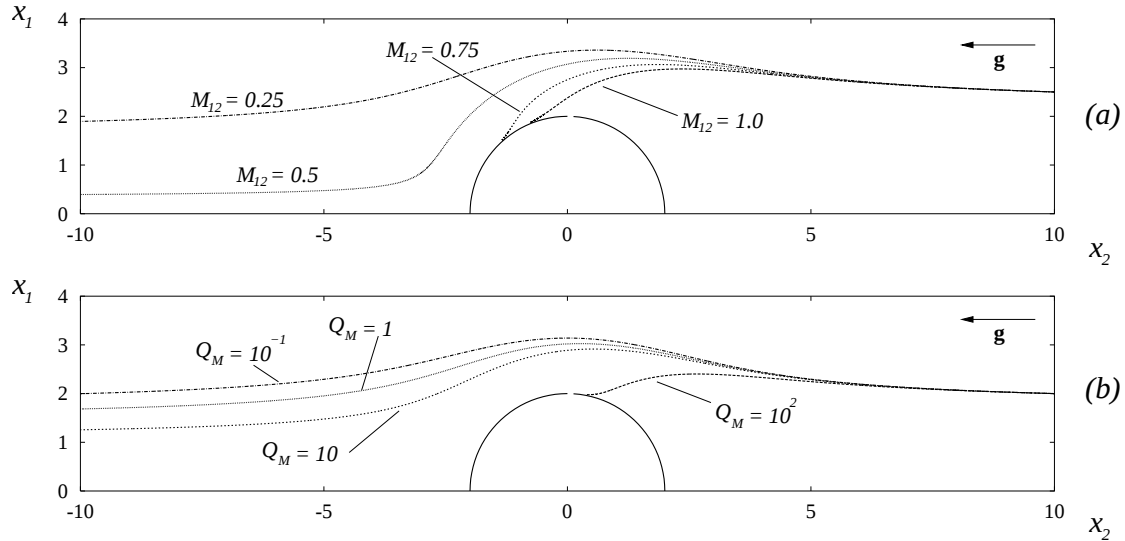


Figura 4. Trajetórias relativas típicas para duas partículas magnéticas sujeitas à sedimentação, avaliando a influência dos parâmetros físicos no processo de agregação. (a) Influência da intensidade de magnetização relativa M_{12} para $\lambda_r = 0.5$, $\gamma_r = 1.0$, $y^{-\infty} = 2.5$, $Q_M = 10^2$ e $\hat{d}_1 = \hat{d}_2 = (1, 0, 0)$; (b) Influência do parâmetro de agregação magnética Q_M para $\lambda_r = 0.5$, $\gamma_r = 1.0$, $y^{-\infty} = 2.0$, $M_{12} = 1.0$, $\hat{d}_1 = \hat{d}_2 = (1, 0, 0)$.

A força de interação magnética entre dois dipolos magnéticos pode ter tanto uma natureza atrativa quanto repulsiva. Para isso, basta controlar as direções das magnetizações $\hat{d}_1$ e $\hat{d}_2$. Nesse intuito a Fig. (5) avalia como a suspensão responde a configurações diferentes das direções das magnetizações das partículas.

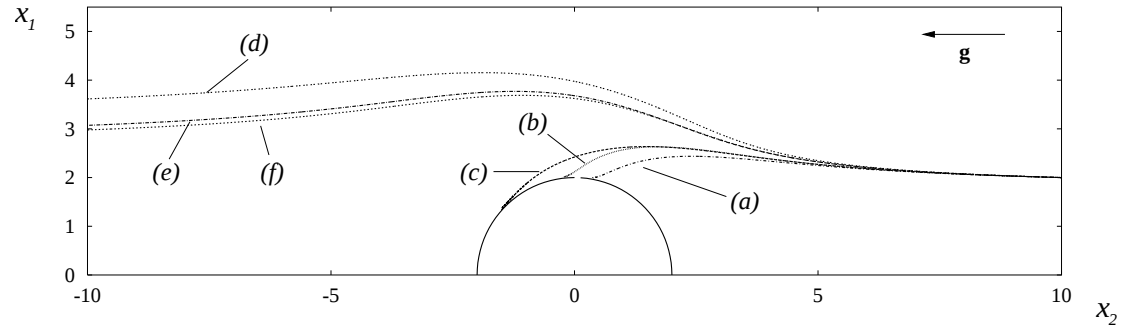


Figura 5. Trajetórias relativas para duas partículas magnéticas sujeitas à sedimentação, avaliando a influência da orientação das partículas na agregação, para $Q_M = 10^2$, $\lambda_r = 0.5$, $\gamma_r = 1.0$, $y^{-\infty} = 2.0$, $M_{12} = 0.5$. Resultados obtidos para: (a) $\hat{d}_1 = (1, 1, 0)$ e $\hat{d}_2 = (1, 1, 0)$; (b) $\hat{d}_1 = (0, 1, 0)$ e $\hat{d}_2 = (0, 1, 0)$; (c) $\hat{d}_1 = (1, 0, 0)$ e $\hat{d}_2 = (1, 0, 0)$; (d) $\hat{d}_1 = (1, 1, 0)$ e $\hat{d}_2 = (-1, -1, 0)$; (e) $\hat{d}_1 = (0, 1, 0)$ e $\hat{d}_2 = (0, -1, 0)$; e (f) $\hat{d}_1 = (1, 0, 0)$ e $\hat{d}_2 = (-1, 0, 0)$.

Avaliando-se as configurações apresentadas na Fig. (5) pode-se concluir que a configuração (a) $\hat{d}_1 = (1, 1, 0)$ e $\hat{d}_2 = (1, 1, 0)$ apresenta a maior eficiência de colisão, enquanto que a configuração (d) $\hat{d}_1 = (1, 1, 0)$ e $\hat{d}_2 = (-1, -1, 0)$ possui a menor eficiência de agregação. O resultado obtido na Fig. (5) mostra que as suspensões de partículas magnéticas apresentam uma excelente alternativa, quando se deseja ter um maior controle da agregação, pois no caso (d), nota-se que a suspensão tende a se estabilizar diminuindo a formação de dímeros, que são indesejados na maioria das aplicações industriais de suspensões.

3.2 Eficiência de Agregação

A taxa na qual os agregados se formam por unidade de volume é igual ao fluxo de pares através da superfície de colisão $r = a_1 + a_2$, dado por Zinchenko & Davis (1992) como sendo

$$J_{12} = -n_1 n_2 \int_{r=a_1+a_2} p(\mathbf{r}) \mathbf{U}_{12} \cdot \mathbf{n} dA \quad (19)$$

em que n_i é o número de partículas do tipo i por unidade de volume e a função distribuição de pares $p(\mathbf{r})$ satisfaz a equação de conservação

$$\frac{\partial p(\mathbf{r})}{\partial t} + \nabla \cdot (p(\mathbf{r}) \mathbf{U}_{12}) = 0 \quad (20)$$

Para suspensões diluídas, um estado quase permanente é estabelecido. O divergente em (20) é então igual a zero, e a integral em (19) pode ser tomada sobre qualquer superfície ao redor da esfera de raio $r = a_1 + a_2$. Quando as esferas entram em contato, admite-se que um agregado é formado (neste caso uma subsequente separação não ocorre), e a condição de contorno na superfície de colisão é portanto

$$p(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{para} \quad r = a_1 + a_2. \quad (21)$$

E, para grandes separações, obtém-se a outra condição de contorno

$$p(\mathbf{r}) \rightarrow 1 \quad \text{quando} \quad r \rightarrow \infty \quad (22)$$

A expressão para a taxa de colisão em termos de trajetórias relativas é obtido por meio dos argumentos de Zeichner & Schowalter (1977). A integral em (19) é tomada sobre a superfície que engloba o volume ocupado por todas as trajetórias que originam em $r = -\infty$ e terminam com as partículas entrando em contato. A seção transversal desse volume é um círculo de raio y_c^* . Uma vez que $p(\mathbf{r}) = 1$ e $\mathbf{U}_{12} = \mathbf{U}_{12}^o$ em $r = \infty$, a taxa de formação de agregados é então

$$J_{12} = n_1 n_2 U_{12}^o \pi (a_1 + a_2)^2 E_c, \quad (23)$$

em que $E_c = y_c^*/(a_1 + a_2)^2$ é a taxa de colisão adimensional. Se $E_c = 1.0$, ou seja, $r = a_1 + a_2$ e $J_{12} = J_{12}^o = n_1 n_2 U_{12}^o \pi (a_1 + a_2)^2$, depara-se com um modelo em que não são consideradas as interações hidrodinâmicas viscosas devido a forças de lubrificação, situação esta que corresponde ao modelo cinético de Smoluchowski (1917). Neste trabalho, espera-se $E_c < 1.0$ em consequência da grande resistência hidrodinâmica associada às forças de lubrificação.

A equação (23) representa o fluxo de pares de partículas por unidade de fluxo através da seção de colisão cuja área é dada por $\pi(a_i + a_j)^2$. Pode-se entender a equação (23) como a probabilidade por unidade de tempo e por unidade de volume de que a partícula do tipo i colida com a partícula tipo j . Isto é o produto da área de seção transversal de colisão $\pi(a_i + a_j)^2$ pela velocidade relativa de sedimentação das partículas U_{ij}^o .

Nosso problema se reduz à determinação do parâmetro y_c^* que é o menor deslocamento em relação ao eixo vertical de simetria possível, tal que as partículas não coagulem. A trajetória relativa descrita pelas partículas nesse caso é chamada trajetória limite. Para isso, foi desenvolvido um código numérico capaz de capturar com uma precisão de 10^{-5} o valor de y_c^* .

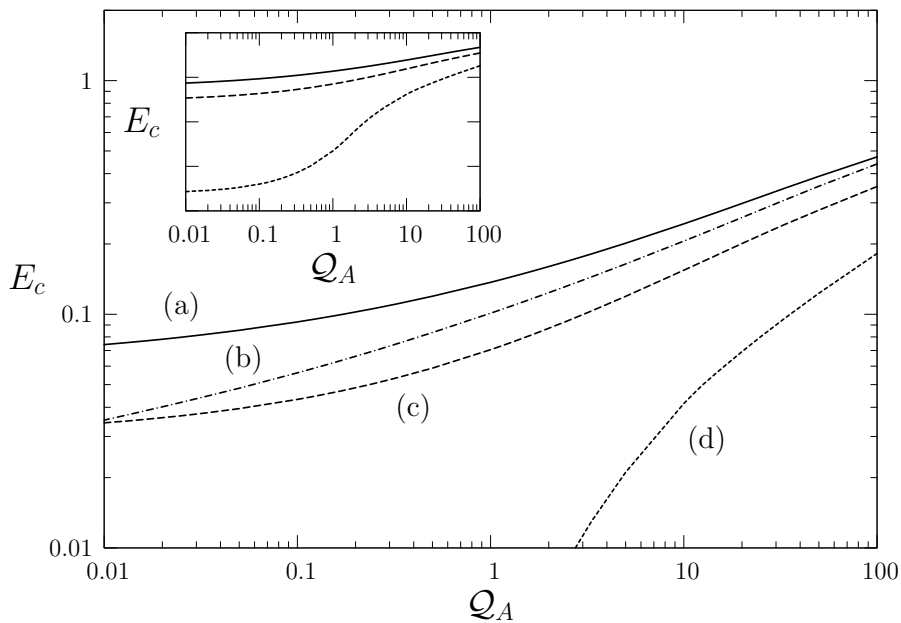


Figura 6. Taxa de colisão adimensional como função do parâmetro Q_A , avaliando a influência dos parâmetros de polidispersidade γ_r e λ_r . Resultados obtidos para (a) $\lambda_r = 0.5$ e $\gamma_r = 1.0$; (b) $\lambda_r = 0.5$ e $\gamma_r = 1.5$; (c) $\lambda_r = 0.5$ e $\gamma_r = 2.0$; e (d) $\lambda_r = 0.25$ e $\gamma_r = 1.0$. A inserção mostra o comportamento da curva (c), que não pode ser detalhado na figura principal.

Na Fig. (6) pode-se avaliar o efeito da polidispersidade sobre a taxa de colisão adimensional para partículas não-magnéticas ($Q_M \ll 1$). Nota-se que, à medida que γ_r se eleva, a taxa de colisão adimensional reduz drasticamente. Isso pode ser observado na curva (c), tendo em vista que para $Q_A = 10^{-2}$ a taxa de colisão adimensional atingiu o valor $E_c \cong 10^{-4}$.

Deve-se observar que, em geral, E_c é pequeno devido às interações hidrodinâmicas, o que previne a aproximação de duas esferas. Pode-se notar na Fig. (6) que, à medida que Q_A diminui, a distância entre as duas partículas para a qual a força de van der Waals é relevante diminui, e a taxa de colisão adimensional E_c diminui.

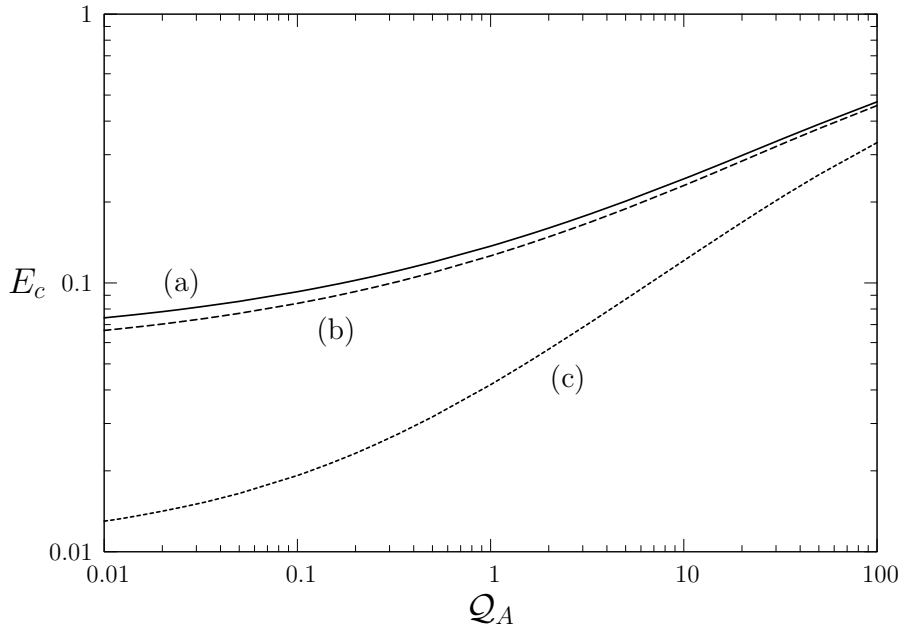


Figura 7. Taxa de colisão adimensional como função do parâmetro Q_A , avaliando o efeito da presença de partículas magnéticas. Resultados obtidos para $\lambda_r = 0.5$, $\gamma_r = 1.0$, $\hat{d}_1 = (1, 0, 0)$ e $\hat{d}_2 = (-1, 0, 0)$: (a) $Q_M \ll 1$ (partículas não-magnéticas) (b) $Q_M = 1.0$ e $M_{12} = 1.0$; e (c) $Q_M = 10$ e $M_{12} = 1.0$.

Além disso, as curvas (a) e (d) da Fig. (6) mostram a influência da razão de raios λ_r sobre a taxa de colisão adimensional. O decaimento de E_c para pequenos λ_r também foi mostrado por Adler (1981) para o caso de coagulação de esferas em cisalhamento simples e por Davis (1984) para o caso de coagulação de esferas em sedimentação, no limite assintótico válido para $Q_A < 10^3$.

Como já pode ser observado, a força de interação magnética pode ser usado a fim de desestabilizar a suspensão, promovendo a rápida coagulação, ou para estabilizar a suspensão, evitando a formação de dímeros. De acordo com a Fig. (7), isso pode ser constatado. Nota-se que a eficiência de colisão reduz-se sensivelmente ($\sim 32 - 83\%$), para o caso (c), em que $Q_M = 10$. Essa característica tem um grande apelo da indústria, em sistemas onde se deseja evitar a coagulação de partículas. Isso pode ser interessante em processos de separação magnética, quando partículas não-magnéticas são capturadas usando carreadores magnéticos Stratulat et al. (2000) ou em processos ambientais que usam partículas magnéticas na remediação de derramamentos de petróleo Sobral & Cunha (2005).

4. CONCLUSÕES

Por meio de uma análise da trajetória relativa, verificou-se que a força interpartícula promove o aparecimento de dois fenômenos distintos: a difusão de trajetórias, devido à migração lateral das partículas e a agregação das partículas.

Observa-se que a força de interação magnética promove uma quebra na reversibilidade do escoamento muito mais intensa que a força de van der Waals. Porém, isso se deve a intensidade da força de interação magnética, regulada pelos parâmetros M_{12} e Q_M , pois o potencial de interação magnética φ_M possui um maior decaimento, $\mathcal{O}(s^{-3})$ que o potencial de van der Waals, $\mathcal{O}(s^{-2})$. Por sua vez, o potencial de van der Waals é muito mais eficiente ao promover a floculação de partículas. Esse resultado é extremamente relevante, pois a análise realizada conseguiu precisar qual das duas forças agregativas atuantes é mais importante no fenômeno de agregação de partículas e na difusão de trajetórias relativas.

Além disso, nota-se que forças magnéticas induzidas por interações entre as partículas podem ser usadas de forma eficiente para estabilizar suspensões contra agregações irreversíveis, com reduções de até 83% na eficiência de agregação calculada. Em etapa posterior do trabalho, pretende-se inserir nestes cálculos a força repulsiva e avaliar quão importantes são as interações hidrodinâmicas no processo de agregação de partículas não-Brownianas.

5. DIREITOS AUTORAIS

O autor é o único responsável pela material impresso contido no artigo.

6. REFERÊNCIAS

- Adler P. M., 1981. "Interaction of unequal spheres. I. Hydrodynamic interaction: colloidal forces", *J. Colloid Interface Sci.*, **83**, 461.
- Cunha F. R., 2003. *Lecture notes on Mycrohydrodynamics*, Department of Mechanical Engineering, University of Brasilia, 2003.
- Curtis A. S. G. and Hocking L. M., 1970 "Collision efficiency of equal spherical particles in a shear flow", *Trans. Faraday Soc.*, **66**, 1381.
- Davis R. H., 1984. "The rate of coagulation of a dilute polydisperse system of sedimenting spheres", *J. Fluid Mech.*, **145**, 179.
- Hamaker H. C., 1937. "The London-van der Waals attraction between spherical particles", *Physica*, **4**, 1058.
- Happel J. and Brenner H., 1967. "Low Reynolds number hydrodynamics", (Prentice-Hall, 524 p).
- Jeffrey D. J. and Onishi Y., 1984. "Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal spheres in low-Reynolds-number flow", *J. Fluid Mech.*, **139**, 261.
- Kim S. and Karrila S. J., 1991. "Mycrohydrodynamics—Principles and Selected Applications" (Butterworth–Heinemann, 507 p).
- Loewenberg M. and Hinch E. J., 1997. "Collision of two deformable drops in shear flow", *J. Fluid Mech.*, **338**, 299.
- Rosensweig R. E., 1985. "Ferrohydrodynamics", (Dover Publications, 344 p).
- Schenkel J. H. and Kitchener J. A., 1960. "A test of the Derjaguin-Verwey-Overbeek theory with a colloidal suspension", *Trans. Faraday Soc.*, **56**, 161.
- Smoluchowski M. von, 1917 "Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen", *Z. Phys. Chem.*, **92**, 129.
- Sobral Y. D. and Cunha F. R., 2005. "Drift velocity and stretching of polarized drops in magnetic fields", *J. Magn. Magn. Mater.*, **289**, 318.
- Stratulat R., Călugăru G. and Bădescu V., 2000. "Magnetic carriers particles for selective separation in environmental and industrial processes", in: *Analele Stiintifice Ale Universitatii "AL.I.CUZA" IASI Tomul XLV-XLVJ*, s. Fizica Stării Condensate, 45.
- Zeichner G. R. and Schowalter W. R., 1977. Use of trajectory analysis to study stability of colloidal dispersions in flow fields, *AIChE J.*, **23**, 243.
- Zinchenko A. Z. and Davis R. H., 1992. Gravity-induced coalescence of drops at arbitrary Péclet numbers, *J. Fluid Mech.*, **280**, 119.

PARTICLE AGGREGATION IN A DILUTE SUSPENSION CONSIDERING RAPID COAGULATION REGIMES

Hugo Leonnardo Gomides do Couto

Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia. Departamento de Engenharia Mecânica.
Campus Universitário Darcy Ribeiro. 70910-900 - Brasília, DF, Brasil
hlcouto@unb.br

Abstract: This work concerns with a theoretical investigation of the pair-interacting of magnetic particles in a dilute sedimenting suspension. The suspension is composed of magnetic spherical particles of different radius and density immersed in a Newtonian fluid. The particles settle relative to one another under the action of gravity. When in close contact, the polarized particles may exert on each other an attractive van der Waals force and a magnetic force due to a permanent magnetization. If the attractive forces dominates the repulsive ones, we obtain a rapid coagulation regime. The calculation of the relative particle trajectories are based on direct computations of the hydrodynamic interactions among rigid spheres in the regime of low particle Reynolds number. Depending on the relative importance of the interparticle forces and gravity, the collisions may result in aggregation or simply in a break of particle relative trajectory time-reversibility. The aggregation efficiency is calculated in order to determine the influence of hydrodynamic interaction over the stability of non-Brownian suspensions. Furthermore, one may observe that the particle magnetization exhibits an interesting mechanism to control the stability of suspensions.

Keywords: sedimentação, interações hidrodinâmicas, eficiência de agregação, forças de van der Waals, partículas magnéticas.