

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO**  
**INSTITUTO DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA**  
**QUÍMICA**

**DISSERTAÇÃO**

**Avaliação de incertezas na modelagem de sedimentação de sólidos adensantes  
via técnicas de Monte Carlo e abordagem Bayesiana**

**GABRIEL MACHADO DE PAULA ANDRADE**

**2018**



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**Avaliação de incertezas na modelagem de sedimentação de sólidos adensantes  
via técnicas de Monte Carlo e abordagem Bayesiana**

**GABRIEL MACHADO DE PAULA ANDRADE**

*Sob a Orientação do Professor*  
**Luís Américo Calçada**

*e Co-orientação da Professora*  
**Josiane da Silva Cordeiro Coelho**

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Engenharia Química**, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Área de Concentração em Tecnologia Química.

Seropédica, RJ  
Dezembro de 2018

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro Biblioteca  
Central / Seção de Processamento Técnico

Ficha catalográfica elaborada  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

A553a Andrade, Gabriel Machado de Paula, 1992-  
Avaliação de incertezas na modelagem de sedimentação  
de sólidos adensantes via técnicas de Monte Carlo e  
abordagem Bayesiana / Gabriel Machado de Paula  
Andrade. - 2018.  
112 f.: il.

Orientador: Luís Américo Calçada.  
Coorientadora: Josiane da Silva Cordeiro Coelho.  
Dissertação (Mestrado). -- Universidade Federal  
Rural do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Química, 2018.

1. sedimentação. 2. modelagem. 3. análise de  
incerteza. 4. teoria Bayesiana. I. Calçada, Luís  
Américo, 1968-, orient. II. Coelho, Josiane da Silva  
Cordeiro, 1985-, coorient. III Universidade Federal  
Rural do Rio de Janeiro. Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Química. IV. Título.

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**GABRIEL MACHADO DE PAULA ANDRADE**

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Engenharia Química**, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, área de concentração em Tecnologia Química.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 12/12/2018.

---

Luís Américo Calçada, D. Sc., UFRRJ  
(Orientador)

---

João Jorge Ribeiro Damasceno, D. Sc., UFU

---

Felipe Leite Coelho da Silva, D. Sc., UFRRJ

*Aos meus pais, pois esse trabalho é fruto do apoio infundável e do amor incondicional que recebi durante toda minha vida. E também aos meus amigos que foram minha segunda família onde quer que eu fosse.*

## **Agradecimentos**

Agradeço aos deuses dos universitários perdidos que não desistiram de mim e me guiaram durante minha vida acadêmica, nos momentos em que não bastava apenas o apoio das pessoas presentes.

Agradeço aos meus pais, Angela e André, que me amam incondicionalmente e me aceitam do jeito que sou. Agradeço pelo apoio dado durante toda minha vida, pelo incentivo para continuar estudando e dando o melhor de mim, pelo dinheiro infinito gasto que eu pretendo retribuir eventualmente e pelos telefonemas atendidos de madrugada quando minha cabeça não aguentava mais e precisava extravasar a pressão.

Agradeço aos meus amigos, tanto da minha vida na Rural, quanto de Barbacena e do intercâmbio. Obrigado aos amigos de Barbacena por estarem comigo até hoje, mesmo que longe, sempre próximos. Obrigado aos amigos da Rural, alguns continuam comigo, outros já seguiram com a vida, mas todos foram essenciais no desenvolvimento do meu caminho aqui dentro, principalmente quando precisei extravasar o stress. Agradeço ao meu cachorro, Drake, por me receber todo dia cansativo da Rural como se eu fosse a melhor pessoa do mundo e por me fazer companhia nas noites infernais de Seropédica.

Agradeço aos meus orientadores, Josiane da Silva Cordeiro Coelho e Luis Américo Calçada, por me guiarem durante essa caminha doida que foi o mestrado e por me ajudarem a desenvolver um trabalho tão completo.

Agradeço aos professores Duilio, Felipe e Renan, pelas contribuições essenciais para a conclusão do trabalho e, em especial, ao Bruno, cuja ajuda foi crucial em diversos momentos do mestrado.

Agradeço ao Laboratório de Escoamento de Fluidos, à Petrobras e à secretaria de pós-graduação pelo apoio financeiro e estrutural.

Agradeço aos professores presentes nas bancas de seminário e na defesa pela disponibilidade e apreço em ler e avaliar o trabalho desenvolvido.

Finalmente, agradeço à todas as pessoas que, de alguma forma, contribuíram para a conclusão dessa dissertação, desde de contribuições intelectuais quanto ajudas pessoais.

## RESUMO

ANDRADE, Gabriel Machado de Paula. **Avaliação de incertezas na modelagem de sedimentação de sólidos adensantes via técnicas de Monte Carlo e abordagem Bayesiana**. 2018. 95p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Instituto de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ. 2018.

A perfuração de poços é uma das etapas da produção de óleo e gás. Durante o processo, fluido de perfuração é bombeado continuamente pela coluna de perfuração com diversas finalidades, dentre elas o arrefecimento, lubrificação e extração de sólidos gerados. Apesar de necessários, materiais presentes no fluido, como a barita, podem sedimentar durante o processo, causando um aumento na viscosidade do fluido, podendo danificar a estrutura do equipamento. Além disso, a barita tem a característica de formar um sedimento impermeável, o qual impede a mitigação do *annular pressure build-up* (APB). Dentro desse contexto, modelos matemáticos têm sido desenvolvidos para tentar prever o comportamento da sedimentação de material particulado. Dessa forma, o seguinte trabalho tem como foco a avaliação das incertezas acerca dos valores dos parâmetros na modelagem da sedimentação de sólidos adensantes em fluidos de perfuração, com ênfase na influência da distribuição de tamanho de partícula. O modelo fenomenológico utilizado é composto pelas equações da continuidade e do movimento para as fases sólida e líquida, e equações constitutivas para a descrição da pressão nos sólidos, permeabilidade e reologia do fluido. Os dados experimentais foram obtidos através da técnica de atenuação de raios-gama. A incerteza sobre os parâmetros foi naturalmente incorporada utilizando-se a inferência Bayesiana. Foram utilizados três métodos estatísticos computacionais: Monte Carlo, Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC) e *Randomized Maximum Likelihood* (RML). O método de Monte Carlo foi utilizado para analisar de forma direta a incerteza dos parâmetros na saída do modelo fenomenológico, gerando análises de sensibilidade dos parâmetros do modelo e cálculo de probabilidades de sedimentação. Observou-se que os parâmetros relacionados a equação de pressão nos sólidos não eram significativos para o modelo na região de sedimento. Além disso, o método foi utilizado na avaliação da escolha de diâmetros característicos na modelagem. Mostrou-se que diferentes diâmetros característicos retirados da distribuição granulométrica dos sólidos fornecem diferentes estimativas de parâmetros, e conseqüentemente, de propriedades do sistema como a permeabilidade. Os demais são métodos computacionais que permitem a implementação da inferência Bayesiana, cuja principal característica é a consideração que um parâmetro é aleatório, e não uma quantidade fixa desconhecida. O método MCMC foi utilizado para a avaliação apenas da incerteza proveniente do diâmetro da partícula, a partir de um meta-modelo, derivado para viabilizar a implementação com um menor custo computacional. Os resultados obtidos forneceram curvas de concentração volumétrica de sólidos com os respectivos intervalos de credibilidade, os quais descreviam bem os dados experimentais. O método RML forneceu uma avaliação das incertezas dos demais parâmetros em conjunto com o diâmetro da partícula, por ser um método aproximado de estimação, portanto, mais simples. Os resultados obtidos mostraram um intervalo de credibilidade menor que o método MCMC, ou seja, uma incerteza menor na saída do modelo. Os resultados mostram que a influência das incertezas não deve ser negligenciada, pois influenciam a estimação paramétrica do problema, podendo gerar previsões errôneas das características do fenômeno em questão.

**Palavras-chave:** sedimentação, análise de incerteza, modelagem.

## ABSTRACT

ANDRADE, Gabriel Machado de Paula. **Evaluation of uncertainty on the modelling of weighing material settling via Monte Carlo technique and Bayesian approach.** 2018. 95p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Instituto de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ. 2018.

Well drilling is one of the most important steps on the oil and gas production. During the process, drilling fluid is pumped continually through the drilling column in order to cool the structure, lube the equipment, extract the formed solids etc. However, some materials presented on the fluid, such as barite, can settle during the process, causing an increase on the fluid viscosity, which can damage the equipment structure. Moreover, barite forms an impermeable sediment, which prevents the mitigation of the annular pressure build-up (APB). In this context, mathematical models have been developed in order to predict the sedimentation behavior of particulate materials. Therefore, the following work focus on the evaluation of the uncertainty of the modelling parameters of sedimentation of weighing materials on drilling fluids, with emphasis on the influence of the particle size distribution. For that, a phenomenological model based on the continuity and momentum equations was used, alongside constitutive equations for solid pressure, media permeability and rheological features. The experimental data was obtained via gamma ray attenuation technique. There statistical methods were used: Monte Carlo, Monte Carlo via Markov Chains (MCMC) and Randomized Maximum Likelihood (RML). The Monte Carlo method was used to evaluate, in a straight-forward manner, the uncertainty of the parameters on the model output, generating sensitivity analysis and sedimentation probabilities. The parameters related to the solid pressure equation showed a low significance on the model for the sediment zone. Furthermore, the method was used to evaluate the effect of the choice of characteristic diameters on the modelling. Different characteristic diameters generated different set of estimated parameters, consequently, changing the estimated properties of the process. The other methods are parametric estimation methods based on the Bayesian theory, which main feature is to consider a previous uncertainty in the parameters, generating naturally an uncertainty on the model output. The MCMC method was used to evaluate only the uncertainty from the particle diameter. The method was performed using a simplification of the model, due to its complexity and high computational time demand. The results showed concentration profiles and credibility intervals agreeing with the experimental data. The RML method provides an uncertainty analysis for all the parameters, since it is simpler than the MCMC method and the whole model was used. The results showed a smaller credibility interval, therefore, a smaller uncertainty on the model output. In summary, the uncertainty must not be neglected, for the results showed that it affects the parametric estimation of the process, which can provide wrongful prediction of the model properties.

**Key-words:** settling, uncertainty analysis, modelling.



## LISTA DE ABREVIACOES E SMBOLOS

$a$	Parâmetro da distribuio <i>a priori</i> de $\sigma^2$
$b$	Parâmetro da distribuio <i>a priori</i> de $\sigma^2$
$c$	Fator geométrico
$c_1$	Fator geométrico
$c_2$	Fator geométrico
$\mathbf{C}_t$	Vetor de dados experimentais
$C_{ti}$	Componente do vetor de dados experimentais
$C_{ti}^*$	Ruído gerado para cada componente dos dados experimentais
$D$	Coefficiente de difuso
$D_M$	Matriz de covarincia dos dados
$D_{Mi}$	Componente da matriz de covarincia dos dados
$D_\theta$	Matriz de covarincia dos parâmetros
$D_{\theta i}$	Componente da matriz de covarincia dos parâmetros
$\overline{dp}$	Diâmetro característico das partículas [L]
$g$	Acelerao da gravidade [L.T <sup>-2</sup> ]
$\mathbf{I}$	Matriz identidade
$K$	Permeabilidade do meio [L <sup>2</sup> ]
$K_0$	Parâmetro da equao de permeabilidade [L <sup>2</sup> ]
$L$	Altura máxima da coluna de sedimentao [L]
$M$	Índice de consistência
$\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, t)$	Vetor de saídas do modelo
$m$	Força resistiva [M.L <sup>-2</sup> .T <sup>-2</sup> ]
$N$	Dimensionless number

$n$	Índice de comportamento
$NE$	Número de experimentos
$NY$	Número de saídas do modelo
$P_a$	Parâmetro da equação de Tiller e Leu (1980)
$P_0$	Pressão no topo da coluna de sedimentação [M.L <sup>-1</sup> .T <sup>-2</sup> ]
$p_0$	Pressão nos sólidos em $\varepsilon_{s0}$ [M.L <sup>-1</sup> .T <sup>-2</sup> ]
$p_s$	Pressão nos sólidos [M.L <sup>-1</sup> .T <sup>-2</sup> ]
$q_s$	Fluxo de sólidos [M.L <sup>2</sup> .T <sup>-1</sup> ]
$T(\lambda^*)$	Tensão cisalhante característica [M.L <sup>-1</sup> .T <sup>-2</sup> ]
$T_s$	Tensão nos sólidos [M.L <sup>-1</sup> .T <sup>-2</sup> ]
$\mathbf{T}'_s$	Tensor tensão extra
$\mathbf{T}_s$	Tensor tensão
$t$	Tempo [T]
$t_f$	Tempo final de sedimentação [T]
$\mathbf{U}$	Velocidade relativa [L.T <sup>-1</sup> ]
$U_z$	Velocidade relativa unidimensional [L.T <sup>-1</sup> ]
$u_s$	Velocidade dos sólidos adimensional
$v_f$	Velocidade do fluido [L.T <sup>-1</sup> ]
$v_s$	Velocidade dos sólidos [L.T <sup>-1</sup> ]
$v_{s0}$	Velocidade inicial de sedimentação [L.T <sup>-1</sup> ]
$y^e$	Dados experimentais
$y^m$	Saída do modelo
$\mathbf{z}^T$	vetor de variáveis dependentes e independentes
$z$	Altura da coluna de sedimentação [L]

## Greek Characters

$\alpha$	Parâmetro da distribuição <i>a priori</i> de $\overline{dp}$
$\beta$	Parâmetro da distribuição <i>a priori</i> de $\overline{dp}$
$\theta_s$	Concentração de sólidos adimensional
$\theta_i$	Componete i do vetor paramétrico
$\boldsymbol{\theta}$	Vetor paramétrico
$\mu$	Viscosidade
$\boldsymbol{\mu}$	Vetor de médias das distribuições <i>a priori</i> dos parâmetros
$\mu_i$	Componente do vetor de médias
$\mu_i^*$	Ruído gerado para cada componente das médias
$\sigma^2$	Variância dos dados experimentais de concentração
$\varepsilon$	Erro experimental
$\eta$	Altura adimensional
$\xi$	Tempo adimensional
$\varepsilon_{m\acute{a}x}$	Fração volumétrica de sólidos máxima
$\varepsilon_{s0}$	Fração volumétrica de sólidos inicial
$\varepsilon_f$	Fração volumétrica da fase fluida
$\varepsilon_s$	Fração volumétrica da fase sólida
$\varepsilon_{sc}$	Fração volumétrica de sólidos crítica
$\lambda^*$	Taxa de cisalhamento característica [T <sup>-1</sup> ]
$\rho_f$	Massa específica do fluido [M.L <sup>-3</sup> ]
$\rho_s$	Massa específica dos sólidos [M.L <sup>-3</sup> ]
$\rho_{s0}$	Massa específica inicial da suspensão [M.L <sup>-3</sup> ]

$\rho_{su}$	Massa específica do sedimento [M.L <sup>-3</sup> ]
$\Lambda$	Parâmetro da equação da permeabilidade
$\sigma_1$	Tensão normal
$\sigma_2$	Tensão normal
$\beta$	Parâmetro da equação de Tiller e Leu (1980)
$\theta(\phi)$	Função de esfericidade
$\phi$	Porosidade
$\Gamma$	Parâmetro do modelo de Arouca (2007)

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1.</b> Sedimentação em batelada (COE e CLEVINGER, 1916 apud CONCHA e BÜRGER, 2003).....	5
<b>Figura 2.2.</b> Variação da posição da superfície superior à suspensão contra o tempo (KYNCH, 1952).....	7
<b>Figura 2.3.</b> Efeito de <i>channeling</i> na sedimentação, formação de canais em uma suspensão de fosfato 2,6% com 0,5g de marcador de grafite. Adaptado de (HARRIS <i>et al.</i> , 1975). .....	8
<b>Figura 2.4.</b> Variação da posição da superfície superior à suspensão contra o tempo (KYNCH, 1952).....	15
<b>Figura 2.5.</b> Comparação entre testes de proveta para sólidos incompressíveis (A) e compressíveis (B) (AROUCA, 2007). .....	16
<b>Figura 2.6.</b> Exemplo de cálculo de intervalo de confiança de $(1 - \alpha)\%$ para distribuição normal. ....	24
<b>Figura 2.7.</b> Algoritmo de Metropolis-Hastings (MATHEW, 2013).....	30
<b>Figura 2.8.</b> Algoritmo do método RML. ....	35
<b>Figura 3.1.</b> Curva de viscosidade aparente do fluido. ....	40
<b>Figura 3.2.</b> Curva de tensão de cisalhamento em repouso do fluido de perfuração. ....	40
<b>Figura 3.3.</b> Curva de histerese do fluido de perfuração.....	41
<b>Figura 3.4.</b> Esquema do aparato utilizado na técnica de atenuação de raios gama. ....	42
<b>Figura 3.5.</b> Representação dos feixes de raios gama em meio físico (AROUCA, 2007).....	42
<b>Figura 3.6.</b> Perfil de concentração volumétrica de sólidos no fluido de perfuração. ....	43
<b>Figura 3.7.</b> Esquema de discretização do espaço pelo método de volumes finitos. ....	50
<b>Figura 3.8.</b> Comparação entre dados de saída do meta-modelo e do modelo completo variando o diâmetro da partícula. ....	53
<b>Figura 3.9.</b> Imagem do equipamento MALVERN - Mastersizer Hydro 2000UM. ....	54
<b>Figura 3.10.</b> Distribuição de tamanho de partículas de barita com distribuição ajustada Gama(1,53;0,069).....	55
<b>Figura 4.1.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $dp$ .63	
<b>Figura 4.2.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $K0$ . ....	63
<b>Figura 4.3.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $\Lambda$ . 64	

<b>Figura 4.4.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $Pa$ .	64
<b>Figura 4.5.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $\beta$ .	64
<b>Figura 4.6.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $\varepsilon_{máx}$ .	65
<b>Figura 4.7.</b> Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para $\varepsilon_{sc}$ .	65
<b>Figura 4.8.</b> Esquema de execução do método Monte Carlo para obtenção do diâmetro característico ótimo.	67
<b>Figura 4.9.</b> Comparação entre os dados experimentais e o modelo para os diferentes diâmetros característicos avaliados (a) 7,2 $\mu$ m, (b) 10 $\mu$ m, (c) 15 $\mu$ m, (d) 19 $\mu$ m e (e) 22 $\mu$ m.	68
<b>Figura 4.10.</b> Probabilidade de sorteio de partículas menores e maiores que (a) 15 $\mu$ m, (c) 19 $\mu$ m e (e) 22 $\mu$ m e comparação entre dados experimentais e a média das saídas do modelo para (b) 0,5cm, (d) 2cm e (f) 4cm.	71
<b>Figura 4.11.</b> Permeabilidade do meio estimada para cada diâmetro característico escolhido em (a) 0,5cm, (b) 2cm e (c) 4cm.	72
<b>Figura 4.12.</b> Cadeia completa formada na estimação do diâmetro (à esquerda) e cadeia obtida feita a filtragem e retirada do período de <i>aquecimento</i> (à direita).	74
<b>Figura 4.13.</b> Cadeia completa formada na estimação da variância (à esquerda) e cadeia obtida feita a filtragem e retirada do período de <i>burn-in</i> (à direita).	74
<b>Figura 4.14.</b> Distribuições <i>a priori</i> e <i>a posteriori</i> do diâmetro da partícula.	75
<b>Figura 4.15.</b> Distribuição preditiva da concentração de sólidos na cota 0,5cm.	76
<b>Figura 4.16.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $dp$ .	77
<b>Figura 4.17.</b> Distribuição preditiva de concentração de sólidos na cota 0,5cm para a estimação apenas do diâmetro.	78
<b>Figura 4.18.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $dp$ .	79
<b>Figura 4.19.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $k_0$ .	79
<b>Figura 4.20.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $\Lambda$ .	79
<b>Figura 4.21.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $Pa$ .	80
<b>Figura 4.22.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $\beta$ .	80
<b>Figura 4.23.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $\varepsilon_{sc}$ .	80

<b>Figura 4.24.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $\varepsilon_{\text{máx}}$ .....	81
<b>Figura 4.25.</b> Distribuição preditiva da concentração na cota 0,5cm para a estimação de todos os parâmetros. ....	81
<b>Figura 4.26.</b> Distribuição <i>a priori</i> (à esquerda) e <i>a posteriori</i> (à direita) do $dp$ para a valiação da pressão no fundo da coluna de sedimentação. ....	83
<b>Figura 4.27.</b> Distribuição preditiva da pressão para a estimação do diâmetro da partícula. ....	83

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 3.1.</b> Composição do fluido de perfuração.....	37
<b>Tabela 3.2.</b> Propriedades físicas do fluido de perfuração.....	38
<b>Tabela 3.3.</b> Parâmetros reológicos ajustados ao modelo Lei de Potência para o fluido de perfuração.....	39
<b>Tabela 3.4.</b> Parâmetros estimados para o meta-modelo.....	53
<b>Tabela 3.5.</b> Distribuições <i>a priori</i> para os demais parâmetros utilizados nos métodos Monte Carlo e MCMC.....	56
<b>Tabela 3.6.</b> Distribuições <i>a priori</i> utilizadas no método RML.....	56
<b>Tabela 4.1.</b> Valores estimados dos coeficientes da reta de regressão e teste de significância do coeficiente angular.....	62
<b>Tabela 4.2.</b> Probabilidades envolvendo a concentração de sólidos na cota de 0,5cm em diferentes tempos.....	66
<b>Tabela 4.3.</b> Diâmetros avaliados e seus significados.....	69
<b>Tabela 4.4.</b> Parâmetros ajustados para cada diâmetro característico escolhido.....	69
<b>Tabela 4.5.</b> Erro quadrático médio para cada cota e diâmetro avaliado, em negrito os menores erros para cada cota.....	70



# SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>4</b>
2.1. SEDIMENTAÇÃO.....	4
2.2. MODELOS DE SEDIMENTAÇÃO .....	14
2.2.1. <i>Modelo de Kynch (1952)</i> .....	14
2.2.2. <i>Modelo de D'Ávila (1978)</i> .....	16
2.2.2.1. Modelagem matemática .....	17
2.2.2.2. Tensor tensão e pressão nos sólidos.....	18
2.2.2.3. Força resistiva .....	19
2.2.2.4. Números adimensionais e equações adimensionalizadas .....	19
2.2.3. <i>Modelo de Arouca (2007)</i> .....	20
2.2.3.1. Modelagem matemática .....	21
2.3. INFERÊNCIA ESTATÍSTICA.....	22
2.3.1. <i>Estimação clássica x Estimação Bayesiana</i> .....	23
2.3.2. <i>Teorema de Bayes</i> .....	26
2.3.3. <i>Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC)</i> .....	27
2.3.3.1. Cadeias de Markov .....	28
2.3.3.2. Algoritmos do método MCMC .....	29
2.3.3.2.1. Algoritmo de Metropolis-Hastings (M-H).....	29
2.3.3.2.2. Amostrador de Gibbs.....	31
2.3.3.3. Implementação do MCMC.....	32
2.3.3.3.1. Sintonia da distribuição proposta.....	32
2.3.3.3.2. Escolha do valor inicial.....	32
2.3.3.3.3. Período de <i>burn-in</i> .....	33
2.3.3.3.4. Convergência.....	33
2.3.4. <i>“Randomized Maximum Likelihood” (RML)</i> .....	34
<b>3. MATERIAIS E MÉTODOS.....</b>	<b>36</b>
3.1. DADOS EXPERIMENTAIS.....	36
3.1.1. <i>Propriedade do fluido e dos sólidos</i> .....	37
3.1.2. <i>Reologia</i> .....	38
3.1.3. <i>Teste de sedimentação</i> .....	41
3.2. MODELO FENOMENOLÓGICO PROPOSTO .....	43
3.2.1. <i>Modelagem matemática</i> .....	44
3.2.2. <i>Força resistiva</i> .....	45
3.2.3. <i>Pressão nos sólidos</i> .....	46

3.2.4.	<i>Permeabilidade do meio</i> .....	47
3.2.5.	<i>Taxa de cisalhamento característica</i> .....	47
3.2.6.	<i>Tensão cisalhante</i> .....	48
3.2.7.	<i>Números adimensionais e equações adimensionalizadas</i> .....	48
3.2.8.	<i>Discretização do espaço por volumes finitos</i> .....	50
3.2.9.	<i>Cálculo de pressão na coluna</i> .....	51
3.3.	META-MODELO.....	52
3.4.	ESPECIFICAÇÕES DA DISTRIBUIÇÃO A <i>PRIORI</i> .....	53
3.4.1.	<i>Diâmetro da partícula</i> .....	54
3.4.2.	<i>Demais parâmetros</i> .....	55
3.5.	MODELO PROBABILÍSTICO.....	56
3.6.	DISTRIBUIÇÃO A <i>POSTERIORI</i> .....	57
3.7.	LINGUAGEM COMPUTACIONAL E PROCESSAMENTO.....	59
<b>4.</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	<b>61</b>
4.1.	MONTE CARLO.....	61
4.1.1.	<i>Análise de sensibilidade dos parâmetros</i> .....	61
4.1.2.	<i>Análise de probabilidades de saídas do modelo</i> .....	65
4.1.3.	<i>Diâmetro característico ótimo</i> .....	66
4.1.3.1.	<i>Influência do diâmetro característico na permeabilidade</i> .....	72
4.2.	MCMC.....	73
4.3.	RML.....	76
4.3.1.	<i>Estimação do diâmetro da partícula</i> .....	76
4.3.2.	<i>Estimação dos parâmetros</i> .....	78
4.3.3.	<i>Efeito da distribuição de tamanho de partícula na pressão na coluna de sedimentação</i> .....	82
<b>5.</b>	<b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES</b> .....	<b>84</b>
5.1.	CONCLUSÕES.....	84
5.2.	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	86
<b>6.</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>87</b>

## 1. Introdução

A produção de óleo e gás é desafiadora devido às suas muitas variáveis e problemas a serem resolvidos para um processo seguro e viável. Uma de suas principais etapas é a preparação do poço para a produção, a qual envolve operações de perfuração e selamento para garantir sua integridade em condições de alta temperatura e pressão. Durante o processo de perfuração, o fluido que é bombeado pela coluna de perfuração possui diversas finalidades, como manter a estabilidade da pressão dentro do poço, transportar sólidos eventualmente formados, lubrificar, resfriar, manter sólidos em suspensão etc. Geralmente, esse fluido tem base água ou óleo e é composto por materiais, como adensantes, estabilizantes e surfactantes, cujas propriedades garantem as características supracitadas. Se tal fluido não consegue alcançar essa demanda, pode causar problemas durante a perfuração. Por exemplo, se os sólidos gerados pelo processo de perfuração não forem devidamente removidos, podem sedimentar e aumentar a viscosidade aparente do fluido, dificultando o processo ou mesmo danificando a estrutura de perfuração (BLOYS, 1994).

Outro problema comum encontrado durante a produção de petróleo é o *annular pressure build-up* (APB), o qual é causado pela sedimentação de sólidos no fluido de perfuração. Quando a estrutura do poço é cimentada, o fluido de perfuração pode ficar confinado na região anular entre a estrutura de isolamento e a região cimentada. Durante a produção, a temperatura do óleo é superior à temperatura da formação rochosa, gerando um gradiente de temperatura e um aumento na pressão do fluido confinado. Esse aumento de pressão, caso não aliviado, pode causar danos à estrutura do poço, rompendo válvulas, conexões e tubos e é chamado de APB (CALÇADA et al., 2016). Um dos métodos para a mitigação envolve deixar uma via de comunicação entre a região anular e a formação rochosa, permitindo um alívio de pressão no anular devido à perda de fluido para a formação por meio de fraturas geradas na rocha (MOYER, 2012; VARGO JR., 2003). O poço pode ficar em repouso por meses ou até anos antes do início da produção, tempo em que pode haver a sedimentação dos sólidos adensantes presentes no fluido, mais especificamente a barita. Nesse caso, estudos comprovam que a barita pode gerar um sedimento impermeável que, caso ultrapasse a altura da rocha exposta, pode inviabilizar a de mitigação por alívio de pressão, causando o APB (VARGO JR., 2003; ADAMS E MACEACHRAN, 1994; LEACH E ADAMS, 1993).

Por meio de modelos fenomenológicos ou empíricos, a sedimentação tem sido investigada devido, não só aos seus problemas na indústria petrolífera, mas às suas aplicações em diferentes áreas da engenharia, como separação sólido-líquido, cálculo de velocidade terminal e tratamento de efluentes (AROUCA, 2007). A sedimentação é um assunto ainda em desenvolvimento, devido à sua complexidade e à dificuldade de se representar as forças sólido-sólido e sólido-líquido presentes no fenômeno (CONCHA E BÜRGER, 2002). Tais forças dependem das características do fluido e do sólido, como forma e tamanho das partículas. A literatura mostra que há negligência enquanto ao efeito da distribuição de tamanho das partículas no fenômeno da sedimentação. Na literatura, a maioria dos trabalhos que descrevem a sedimentação levam em conta apenas um diâmetro característico retirado da distribuição granulométrica das partículas, seja por meio de métodos estatísticos ou pela escolha da média ou mediana da distribuição. Portanto, há uma necessidade de explorar o conhecimento sobre a influência dessa escolha no fenômeno da sedimentação do ponto de vista da modelagem.

Dessa forma, esse trabalho tem em foco a avaliação, por diferentes métodos, da influência da distribuição granulométrica na modelagem da sedimentação de sólidos adensantes em fluidos de perfuração. Em geral, no desenvolvimento de modelos que levam em conta o tamanho da partícula, o diâmetro da partícula é tratado como um parâmetro fixo cujo valor é retirado da distribuição granulométrica dos sólidos por meio de métodos estatísticos ou escolha de valores característicos como moda, média e mediana. Neste trabalho, será utilizado o conhecimento de toda a distribuição de tamanho da partícula e também informações sobre as incertezas dos demais parâmetros do modelo, permitindo avaliar:

- A incerteza na simulação do modelo fenomenológico de sedimentação;
- A influência da escolha de um diâmetro característico na estimação paramétrica;
- Obtenção da estimação de uma distribuição da saída do modelo que combina tanto o conhecimento vindo da distribuição granulométrica e das incertezas dos demais parâmetros quanto os dados observados, viabilizando uma avaliação natural da incerteza gerada pelo conhecimento prévio dos parâmetros.

A fim de alcançar os dois primeiros objetivos acima descritos, foi utilizado o método de Monte Carlo. Para o terceiro objetivo, a incorporação da distribuição granulométrica do diâmetro da partícula e das incertezas dos demais parâmetros nas estimativas foi feita naturalmente por meio

da inferência Bayesiana, utilizando os métodos de Monte Carlo via Cadeias de Markov e *Randomized Maximum Likelihood*.

A estrutura do trabalho foi distribuída da seguinte forma:

- **Capítulo 2:** visa introduzir uma revisão bibliográfica dos principais estudos de sedimentação até os dias atuais, bem como exemplificar alguns modelos principais, como o modelo de D'Ávila (1978), para a inserção no contexto do trabalho. Além disso, traz uma revisão sobre teoria Bayesiana fazendo uma comparação com a teoria clássica de estimação de parâmetros e também sobre os métodos utilizados, trazendo informações sobre as teorias por trás de cada método e os meios de implementação;
- **Capítulo 3:** apresenta informações sobre os materiais e métodos utilizados para a obtenção tanto dos dados experimentais para realização da estimação Bayesiana, quanto dos parâmetros do modelo como concentração inicial de sólidos e parâmetros reológicos do fluido. Também mostra informações sobre o modelo utilizado, as distribuições *a priori* utilizadas nos métodos estatísticos, bem como a escolha do modelo probabilístico utilizado na estimação e informações sobre as unidades de processamento utilizadas ao longo do trabalho.
- **Capítulo 4:** mostra e discute os resultados obtidos na avaliação da incerteza dos parâmetros no modelo pelos diferentes métodos utilizados.
- **Capítulo 5:** apresenta conclusões sobre os resultados obtidos no trabalho e também sugestões para trabalhos futuros.

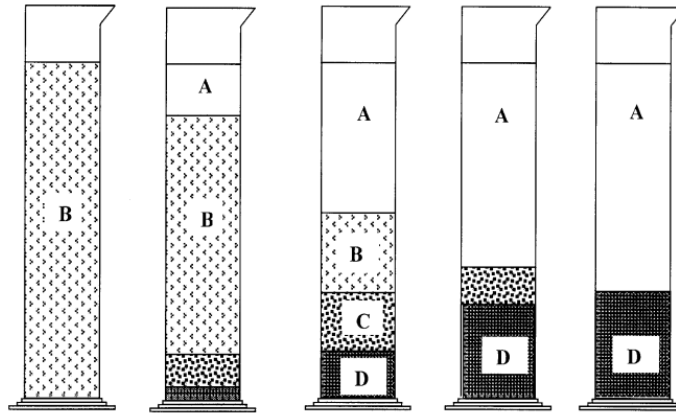
## **2. Revisão bibliográfica**

### **2.1. Sedimentação**

A sedimentação é a deposição de sólidos presentes em suspensões causada por algum campo de força, geralmente pela força da gravidade. Há mais de um século, teorias vem sendo desenvolvidas para descreve-la e, dentre elas, a de Hazen (1904) apud Concha e Bürguer (2002) foi pioneira. Hazen (1904) demonstrou que, para um sedimentador contínuo, a área de sedimentação e as características do particulado são mais importantes que o tempo de residência do material. Além disso, quanto maior a vazão de entrada no processo, menor a eficiência do sedimentador. Posteriormente, a influência das características físicas do fluido como temperatura e viscosidade também foram avaliadas (NICHOLS, 1908; ASHLEY, 1909).

Mais tarde, Forbes (1912) demonstrou que a velocidade de sedimentação é influenciada positivamente pela presença de substâncias eletrolíticas e negativamente pela altura do sedimentador. No mesmo ano, experimentos conduzidos por Mishler (1912) demonstraram que a taxa de sedimentação é diferente para suspensões diluídas e concentradas. A primeira, independente da altura de sedimentação e a última, com velocidade de sedimentação aumentando com o aumento da altura. Clark (1915), Free (1916) e Ralston (1916) avaliaram os efeitos da concentração de eletrólitos, do grau de floculação e da temperatura no processo.

Coe e Clevenger (1916) desenvolveram a primeira teoria de sedimentação, a qual se baseava na velocidade inicial de sedimentação em batelada, a concentração inicial da suspensão e concentração da lama formada. Foi determinado que, no processo de sedimentação de suspensões, há a formação de quatro áreas descritas na figura 2.1, onde A é a zona de clarificado, B é a zona de sedimentação livre, C a zona de concentração variável e D a zona de compactação.



**Figura 2.1.** Sedimentação em batelada (COE e CLEVINGER, 1916 apud CONCHA e BÜRGER, 2003).

Dessa forma, com a execução de vários testes de sedimentação em batelada, foi obtida uma expressão utilizada para o cálculo da capacidade de sedimentação de sedimentadores contínuos, dada por

$$q_s = \frac{v_{s0}}{\frac{1}{\rho_{s0}} - \frac{1}{\rho_{su}}}, \quad (2.1)$$

em que  $q_s$  é o fluxo de sólidos,  $v_{s0}$  a velocidade inicial de sedimentação,  $\rho_{s0}$  a concentração inicial de sólidos e  $\rho_{su}$  a concentração do sedimento.

A teoria de Coe e Clevenger (1916) foi contestada por Comings (1940), o qual por meio de um protótipo contínuo observou que a teoria só produzia bons resultados quando a lama formada era incompressível (COMINGS, 1940). Apesar disso, foi aceita até que Kynch (1952) desenvolveu sua hipótese inteiramente baseada na densidade local da suspensão.

Kynch (1952) observou que a equação obtida pela Lei de Stokes para solução da parte hidrodinâmica do problema só descrevia bem suspensões nas quais as partículas estariam espaçadas com distância bem maior que seus diâmetros, ou seja, com densidade muito baixa. E ainda que, quando consideradas suspensões com maiores densidades, a teoria não obtinha resultados satisfatórios. Dessa forma, Kynch (1952) propôs que o processo de sedimentação poderia ser descrito apenas pela equação da continuidade sem a necessidade da avaliação das forças presentes na partícula. E ainda que, com o conhecimento da variação da posição da interface superior à

suspensão e a distribuição inicial de partículas, seria possível descrever a relação entre a variação da velocidade da partícula com a densidade local.

A seguinte simplificação da equação da continuidade foi utilizada pelo autor para o processo de sedimentação de sólidos em batelada (KYNCH,1952), com  $z$  variando de 0 a  $L$ ,  $t > 0$ ,

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = -\frac{\partial q_s}{\partial z}, \quad (2.2)$$

em que  $q_s$  é o fluxo de sólidos,  $\varepsilon_s$  a concentração volumétrica de sólidos  $t$  o tempo e  $z$  a altura da coluna de sedimentação.

Para que a teoria de Kynch (1952) pudesse ser aplicada, algumas considerações foram feitas. As partículas na suspensão deviam ter mesma forma e tamanho, a velocidade de cada partícula seria apenas função da concentração local nas imediações, a concentração só variava com a altura da suspensão, efeitos de borda podiam ser desprezados e, finalmente, a velocidade da partícula tendia a zero quando a concentração tendesse ao seu valor máximo.

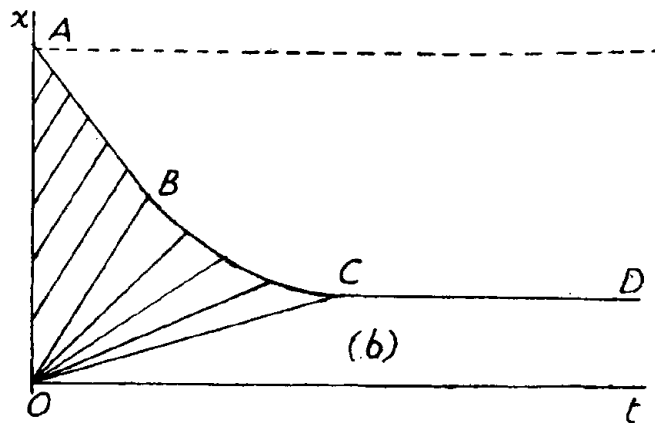
Rearranjando a equação (2.2), dado que  $\varepsilon_s = \varepsilon_s(z, t)$  e  $q_s = q_s(\varepsilon_s)$ ,

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + V(\varepsilon_s) \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} = 0. \quad (2.3)$$

Sabendo que a concentração em um ponto  $(z, t)$  qualquer é a mesma no ponto  $(z + dz, t + dt)$  e que  $V(\rho_s) = \partial q_s / \partial \varepsilon_s$ , onde  $V(\rho_s)$  é a velocidade de ascensão das ondas de concentração, pode-se construir um gráfico de altura *versus* tempo, tornando possível prever a concentração em diferentes alturas e tempos dependendo da posição da interface superior.

Na figura 2.2 é possível observar que há quatro regiões distintas. Primeiramente, tem-se a região AOB onde o coeficiente angular, e, portanto, a velocidade das partículas, é constante. Em segundo observa-se a região BOC cujo coeficiente angular varia. Em terceiro tem-se a região abaixo da curva OCD onde é encontrada a concentração máxima de material na suspensão. E, finalmente, a região acima da curva AD, a qual seria a região de clarificado. As quatro regiões podem ser atribuídas às zonas descritas por Coe e Clevenger (1916) (figura 2.1).





**Figura 2.2.** Variação da posição da superfície superior à suspensão contra o tempo (KYNCH, 1952).

Subsequente ao trabalho de Kynch (1952) houve vários outros autores que utilizaram sua teoria para descrever o processo de sedimentação. Richardson e Zaki (1954a, 1954b) descreveram o comportamento dinâmico de partículas esféricas em suspensão por meio da utilização de um fator de correção utilizado em conjunto com a Lei de Stokes. No mesmo ano, os autores avaliaram os efeitos da concentração na taxa de sedimentação e estabeleceram uma correlação para sistemas fluidizados em que as partículas eram mantidas em suspensão por meio de uma vazão de fluido ascendente. Da mesma forma, utilizando uma modificação na Lei de Stokes, Comings, Pruijs e Debord (1954) descreveram o processo de sedimentação em sedimentadores contínuos.

Utilizando a teoria de Coe e Clevenger (1916) e a simplificação que a teoria de Kynch (1952) trouxe para a avaliação de projetos de sedimentadores, Talmage e Fitch (1955) desenvolveram um método gráfico para calcular a área da seção transversal do sedimentador. Ainda compararam as duas teorias, chegando à conclusão que ambas só descreviam satisfatoriamente o processo de sedimentação de suspensões diluídas. Os autores ainda utilizaram da teoria de Kynch (1952) para projetar um tanque de sedimentação contínuo. Outro método gráfico desenvolvido foi o de Yoshioka *et al.* (1957), utilizado para determinar o perfil de concentração em relação à altura da coluna de sedimentação em batelada para suspensões flocculantes.

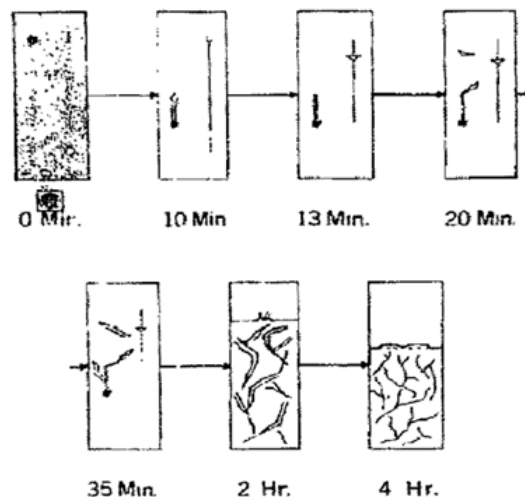
Apesar destes autores terem produzidos bons resultados na avaliação da sedimentação, grande parte dos resultados ainda não consideravam a complexidade do fenômeno, o qual não só depende das propriedades do fluido, como também das características das partículas em decaimento (MAUDE E WHITMORE, 1958). Maude e Whitmore (1958) desenvolveram uma teoria generalizada que incluía empiricamente o número de Reynolds, a esfericidade das partículas

e sua distribuição granulométrica na relação entre a concentração de sólidos com a velocidade de sedimentação.

Shannon *et al.* (1964) apresentaram um método de predição de sedimentação em batelada para suspensões ideais por meio de gráficos de fluxo de sólido contra concentração inicial de material particulado. Os experimentos foram realizados utilizando esferas de vidro em água, ou seja, fluido Newtoniano e particulado incompressível.

Dell e Sinha (1966) e Scott (1968a) mostraram que a taxa de sedimentação de suspensões de material floculado depende não só da concentração inicial, mas também de outros fatores, como altura da coluna de sedimentação, e que os valores experimentais extraídos estão intrinsecamente relacionados com o equipamento utilizado para a análise.

Posteriormente, Scott (1968b) descreveu um fenômeno chamado *channeling*, cuja característica é a formação de canais estreitos durante o processo de sedimentação que teriam a capacidade de aumentar a velocidade das partículas (figura 2.3). Os resultados foram obtidos por meio de inúmeros testes de sedimentação em batelada, em concentrações definidas, com ou sem o efeito da agitação. Conclui-se que os testes que melhor simularam a operação de sedimentadores foram os de suspensões de baixa concentração e com agitação. Scott (1968b) também percebeu que a altura da sedimentação influenciava somente materiais compressíveis, alterando a concentração do sedimento.



**Figura 2.3.** Efeito de *channeling* na sedimentação, formação de canais em uma suspensão de fosfato 2,6% com 0,5g de marcador de grafite. Adaptado de (HARRIS *et al.*, 1975).

Outros autores apresentaram teorias e cálculos complementando a teoria de Kynch, como Hasset (1958), Tory e Shannon (1965). Entretanto, todas elas descreviam bem o fenômeno da sedimentação para suspensões com pequenas esferas rígidas de mesmo tamanho. Foi então que Behn (1957) introduziu o processo de consolidação das partículas no cálculo da sedimentação, iniciando assim a próxima fase do estudo do fenômeno, posteriormente complementado por Shirato *et al.* (1970). Os autores desenvolveram matematicamente a solução da consolidação de partículas levando em conta o crescimento do sedimentado e a compressão devido à deposição de material, resultando em perfis de concentração de sedimento e pressão.

Adorján (1975, 1976) apud Damasceno (1992) apresentou sua teoria para a inclusão da compressão de sedimento a partir das equações de movimento e continuidade, desenvolvendo um método com resultados satisfatório para o projeto de sedimentadores. O autor observou que, para melhores resultados de simulação de sedimentação em batelada para suspensões compressíveis, era necessário realizar testes de adensamento em célula de compressão e permeabilidade. Dessa forma, era possível incluir na equação do movimento as forças relacionadas à tensão no sólido e à força resistiva realizada pelo fluido no sólido. O modelo conseguia avaliar a influência da altura do sedimento sobre o projeto do sedimentador, fornecendo um limite máximo de carga para o funcionamento do equipamento. Seu trabalho abriu caminho para que Smiles (1976) utilizasse da teoria do escoamento de água em solo expansível (SMILES E ROSENTHAL, 1968) para descrever o deslocamento de fluido pelas partículas sólidas, resultando na solução integral do problema.

No mesmo período, João D'Ávila (1976) desenvolveu um modelo matemático para a sedimentação em batelada a partir da Teoria das Misturas da Mecânica do Contínuo. D'Ávila (1976) propôs que o fenômeno da sedimentação em batelada poderia ser descrito apenas pelas equações da continuidade e do movimento relativas ao sólido, devido a velocidade nula encontrada tanto no sedimentado quanto no fluido ao fundo da coluna de sedimentação. Tal hipótese dependia das equações constitutivas relativas à tensão nos sólidos e à força resistiva serem adotadas para a discretização do problema. O modelo descreveu o fenômeno físico, apresentando característica hiperbólica. Ou seja, aparecimento de duas interfaces, uma ascendente e outra descendente, as quais seriam, respectivamente, a de sedimentado e a clarificado. Outrossim, o autor demonstrou que o modelo de Kynch (1952) possuía um perfil parabólico, descrevendo apenas a interface do inferior na sedimentação.

Posteriormente, D'Ávila e Sampaio (1977a, 1977b, 1977c) demonstraram que o tensor tensão está relacionado apenas com a compressão, caso esse seja função exclusivamente da porosidade da suspensão. Propuseram ainda algumas equações para descrever a tensão nos sólidos. Além disso, avaliaram o projeto de sedimentadores por meio do modelo de D'Ávila (1976), inserindo valores de velocidade de sedimentação e concentração volumétrica obtidos na equação da capacidade do sedimentador. Subsequentemente, avaliaram a influência de equações constitutivas na tensão nos sólidos, resolvendo inúmeras vezes o problema de valor inicial com diferentes equações. Para a solução dos problemas, foi considerado que as condições estabelecidas no encontro das duas interfaces na solução do primeiro problema de valor inicial seriam a condições iniciais utilizadas no próximo passo da resolução do problema para a sedimentação. Finalmente, concluindo que a equação quadrática com relação à porosidade é a que melhor se encaixa no problema.

No mesmo ano, Concha e Bascur (1977) simplificaram o cálculo da sedimentação para apenas uma equação diferencial parcial não-linear obtida por meio da equação da continuidade para sólidos. Para a sua solução, foi necessário inserir a velocidade relativa obtida pela equação pela equação do movimento, desconsiderando as forças inerciais. Também era necessário definir as equações constitutivas da pressão nos sólidos e permeabilidade do meio.

Por meio da técnica de atenuação de raios gama em testes de sedimentação em batelada, Hamacher (1978) desenvolveu equações empíricas para a solução da concentração em função do tempo e posição. Conclui que a velocidade de sedimentação e a pressão nos sólidos não dependiam apenas da concentração local e que as acelerações local e convectiva na equação do movimento podiam ser desprezadas quando comparadas com as outras grandezas.

Tiller e Leu (1980) avaliaram sólidos compressíveis em ensaios de adensamento em células de compressão e permeabilidade e desenvolveram um conjunto de equações empíricas para o cálculo de parâmetros ligados à permeabilidade e pressão nos sólidos. O método forneceu valores médios de porosidade e de pressão nos sólidos, os quais foram utilizados para a obtenção gráfica dos parâmetros.

Tiller (1981) também criou um modelo baseado na teoria de Kynch (1952), no entanto, considerou a existência de duas interfaces, uma entre a região de clarificado e a de concentração constante, e a outra entre o sedimentado e a região de concentração variável. O autor utilizou de gráficos para a interpretação dos parâmetros que seriam necessários como condição de contorno para a equação diferencial não-linear de segunda ordem obtida por ele. Apesar de fornecer

resultados satisfatórios para suspensões pouco compressíveis, o método de Tiller não era usual devido a necessidade da visualização das interfaces, a qual era dificultada pela turbidez de suspensões complexas.

Em seguida, Fitch (1983) descreveu que o método de Tiller (1981) era complicado e poderia ser simplificado considerando que as características partem tangencialmente da interface de compressão. O autor propôs a resolução gráfica do problema por meio de retas tangentes às curvas de sedimentação e de compressão. Adicionou ainda uma correção ao método de Talmage e Fitch (1955) e uma generalização do método de Kynch (1952) para o cálculo da área transversal de sedimentadores. Entretanto, como o método é derivado do método proposto por Tiller (1981), possui as mesmas restrições e dificuldades de visualização da ascensão da superfície inferior.

Wakeman e Holdich (1984) utilizaram resistências elétricas distribuídas ao longo da coluna de sedimentação e mediram a diferença de potencial elétrico atribuído a cada posição por meio de um voltímetro digital acoplado a um computador, proporcionando uma maneira de calcular a pressão nos sólidos em cada altura da sedimentação. Concluíram ainda que, assim como Hamacher (1978), as forças inerciais poderiam ser desprezadas se comparadas com os outros termos da equação do movimento e que seu procedimento só era válido na região de sedimentado.

A inserção das características compressíveis da sedimentação foi realizada com sucesso por Concha e Bustos (1987) por meio de uma mudança na condição de contorno do problema. Ao invés de considerar que a concentração dos sólidos no fundo da coluna é constante e igual a concentração dos sólidos no sedimentado, os autores solucionaram a equação do movimento para sólidos em  $z = 0$  e a utilizaram como a nova condição de contorno, a qual depende da densidade de sólidos, densidade do fluido, da aceleração da gravidade e da variação da pressão com a concentração de sólidos. Consequentemente, foi observado que a teoria conseguia descrever melhor o fenômeno da sedimentação em batelada se comparada com a de Kynch (1952).

Bustos e Concha (1988) posteriormente desenvolveram um modelo baseado na teoria de Kynch (1952), considerando que o resultado da sedimentação é o mesmo independentemente de como ocorre. Utilizaram algumas soluções globais para cinco fenômenos diferentes observados na sedimentação. Esses são:

- A variação rápida da concentração inicial para a concentração máxima;
- A mudança repentina de concentração no início e então o aumento contínuo até a concentração máxima;

- O aumento contínuo da concentração até a concentração máxima;
- A variação brusca da concentração inicial, seguida de um aumento contínuo e então a variação repentina até a concentração máxima;
- A variação contínua seguida de um aumento brusco até a concentração final.

Subsequentemente, Concha e Bustos (1991) propuseram uma solução unificada para a teoria de Kynch (1952) por meio de um método gráfico.

Damasceno e Massarani (1991,1992,1993), em conjunto com uma série de outros autores realizaram diversos experimentos e análises dos, até então, modelos apresentados. Damasceno *et al.* (1991) utilizaram raios gama para a determinação de parâmetros de equações constitutivas para tensão dos sólidos e permeabilidade do meio. Damasceno (1992) utilizou desses resultados para realizar um estudo teórico do espessamento contínuo, concluindo que a altura do sedimento é um parâmetro muito importante para o projeto de sedimentadores, em oposição ao que era proposto por outros autores. Mais tarde, Damasceno e Massarani (1993) compararam os métodos de Coe e Clevenger (1916), Kynch (1952) e Tiller e Chen (1988) e observaram que os dois primeiros descreviam bem o comportamento na região de sedimentação e o último apenas para a região de sedimentado.

Font e Ruiz (1993) utilizaram resultados de testes em batelada de sedimentação para a projeção de sedimentadores contínuos e constataram que, mesmo observando que a altura final de sedimento em testes de batelada é maior do que em testes contínuos, essa diferença não influenciava expressivamente os cálculos finais. Era só válida sua utilização quando a concentração da lama estivesse compreendida entre a concentração de suspensão na entrada e a concentração da lama no teste em batelada.

França *et al.* (1995) apud Arouca (2007) desenvolveram um método empírico para a obtenção dos parâmetros de diferentes equações constitutivas para a pressão nos sólidos por meio da realização de testes de proveta com diferentes concentrações iniciais na suspensão. Dessa forma, a partir de dados de altura final de sedimento em tubos de diferentes diâmetros, era possível obter os valores de concentração média da suspensão. Com o auxílio da equação do movimento para fase sólida, era possível a obtenção de um perfil de concentração do sólido. Posteriormente, esse perfil era integrado e comparado com os dados experimentais de forma iterativa até a conversão para os valores dos parâmetros.

Bürguer e Concha (1998) desenvolveram um modelo unidimensional que conseguia descrever o fenômeno da sedimentação tanto em batelada quanto contínuo para todo o espaço e tempo avaliado, não sendo necessária a partição do problema em subdomínios. O modelo era constituído por uma equação diferencial parcial hiperbólica de primeira ordem para a descrição da sedimentação e uma equação diferencial parcial parabólica de segunda ordem para concentrações locais superiores a concentração crítica. O modelo só foi validado para o caso de sedimentação em batelada, onde seus resultados foram satisfatórios se comparados com os dados experimentais.

França, Massarani e Biscaia Jr. (1999) avaliaram diferentes equações constitutivas para porosidade e pressão nos sólidos. Para isso, os autores utilizaram um modelo que é dividido em duas partes, uma que descreve a sessão de concentração constante e outro que descreve a sessão de sedimento na sedimentação em batelada. A primeira sendo composta pela solução analítica da equação do movimento considerando a não variabilidade da concentração no espaço e a última utilizando as equações do movimento e da continuidade para a fase sólida.

Bürguer e Tory (2000), por meio de funções de densidade de fluxo para a equação da continuidade, utilizaram métodos matemáticos para a solução das equações determinísticas da sedimentação em batelada e contínua. Um termo difusivo foi adicionado na equação hiperbólica mais tarde por Bürguer et al. (2000) na intenção de compensar o efeito da floculação na sedimentação de materiais compressíveis. O mesmo modelo foi modificado por Bürguer, Damasceno e Karlsen (2004) para a análise de suspensões floculantes em recipientes de seção transversal variável.

Arouca (2007) desenvolveu um modelo matemático para sedimentação em batelada baseado na junção dos conceitos fenomenológicos de D'Ávila (1978) e do desenvolvimento matemático explicitado por Burguer e Concha (1998), produzindo uma equação para a velocidade de sólidos que depende da permeabilidade do meio e da pressão nos sólidos, cujas correlações podem ser encontradas na literatura.

Nesse trabalho, foi utilizada a abordagem fenomenológica da modelagem, através da utilização de equações constitutivas para a pressão nos sólidos e permeabilidade do meio, produzindo uma abordagem híbrida da teoria desenvolvida por D'Ávila (1978), por meio da utilização da Teoria de Misturas da Mecânica do Contínuo com a utilização do sólido como partícula e não como fase.

## 2.2. Modelos de sedimentação

### 2.2.1. Modelo de Kynch (1952)

A teoria de Kynch (1952) foi utilizada por muitos outros autores como base para a avaliação das características da sedimentação em batelada (RICHARDSON E ZAKI, 1954, COMINGS *et al.*, 1954, TALMAGE E FITCH, 1955). Por conseguinte, essa será explicitada nesse trabalho com o intuito de exemplificar modelos de sedimentação para eventual comparação.

Seu estudo tem como principal hipótese a caracterização da sedimentação de sólidos como propagação de ondas, em que cada camada de sólido sentirá o efeito do fenômeno a partir da camada que a antecede. Além disso, a sedimentação foi considerada um fenômeno unidimensional, com a concentração aumentando com o tempo no fundo da coluna, a velocidade de sedimentação tendendo a zero quando a concentração de sólidos tendia à concentração máxima e dependente apenas da concentração local de sólidos, os efeitos de borda e de parede desprezados e finalmente, partículas com o mesmo tamanho e forma.

Kynch propôs uma simplificação da equação da continuidade para a fase sólida, com  $z$  variando de 0 a  $L$ ,  $t > 0$  e  $q_s = \rho_s v_s$  dada por

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = - \frac{\partial q_s}{\partial z}, \quad (2.4)$$

em que  $q_s$  é o fluxo de sólidos,  $\rho_s$  a massa específica dos sólidos,  $\varepsilon_s$  a concentração volumétrica de sólidos  $t$  o tempo e  $z$  a altura da coluna de sedimentação.

Sabendo que  $\varepsilon_s = \varepsilon_s(z, t)$  e  $v_s = v_s(\varepsilon_s)$ , pode-se afirmar que  $q_s = q_s(z, t)$ , assim tem-se

$$\frac{\partial q_s}{\partial z} = \frac{dq_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z}. \quad (2.5)$$

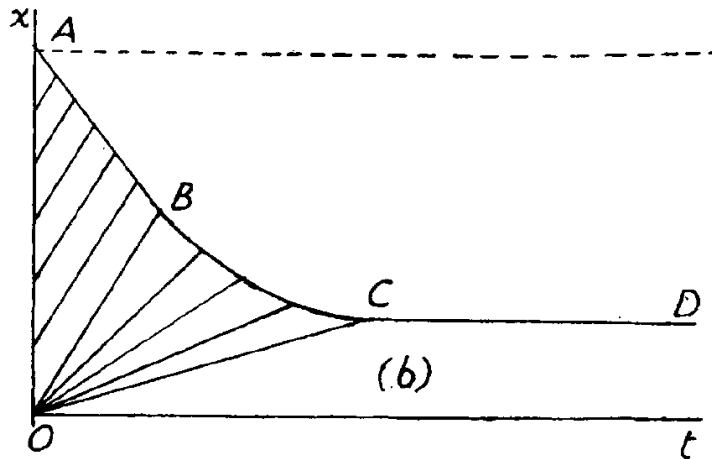


Substituindo a equação (2.5) na equação da continuidade para a fase sólida, obtem-se

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + V(\varepsilon_s) \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} = 0, \quad (2.6)$$

com  $V(\varepsilon_s) = dq_s/d\varepsilon_s$ , definido como velocidade de ascensão das ondas de concentração.

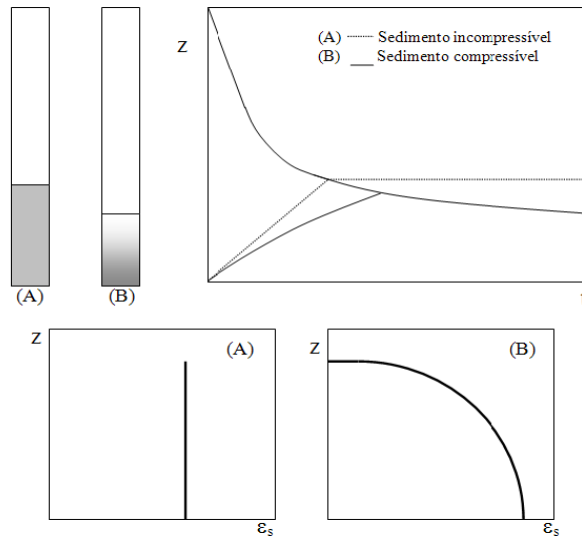
Com essas informações e com a construção de um gráfico de altura *versus* tempo, é possível prever a concentração em diferentes alturas e tempos dependendo da posição da interface superior.



**Figura 2.4.** Variação da posição da superfície superior à suspensão contra o tempo (KYNCH, 1952).

Na figura 2.4 é possível observar que há quatro regiões distintas, primeiramente tem-se a região AOB onde o coeficiente angular, e, portanto, a velocidade das partículas, é constante, em segundo observa-se a região BOC cujo coeficiente angular varia, em terceiro tem-se a região abaixo da curva OCD onde é encontrada a concentração máxima de material na suspensão e finalmente a região acima da curva AD, a qual seria a região de clarificado.

A não utilização da equação do movimento e, portanto, do balanço de forças do fenômeno confere uma restrição na teoria de Kynch, a qual só produz resultados satisfatórios para sólidos incompressíveis como esferas de vidro, visto que materiais compressíveis possuem forças de interação sólido-sólido e sólido-líquido (AROUCA, 2007). Sólidos compressíveis tendem a sofrer compactação na região de sedimento, cujo desvio é observado na curva de altura de sedimento por tempo (figura 2.5).



**Figura 2.5.** Comparação entre testes de proveta para sólidos incompressíveis (A) e compressíveis (B) (AROUCA, 2007).

### 2.2.2. Modelo de D'Ávila (1978)

O modelo de D'Ávila foi um dos primeiros estudos baseado na Teoria das Misturas da Mecânica do Contínuo (CREMASCO, 2014), nele foram utilizadas as equações da continuidade e do movimento tanto para a fase sólida quanto para a fase líquida na intenção de descrever a sedimentação de sólidos em batelada. O modelo consegue prever o comportamento do sólido na área de sedimentação, mas não pode ser utilizado para a área de compactação. Para a solução de todo o fenômeno da sedimentação, D'Ávila utilizou outras equações para descrever tanto a zona de compactação quanto a área de líquido clarificado. Nos próximos capítulos será discutida a base da modelagem para a região de sedimentação, outras informações sobre as outras regiões e como o problema foi resolvido não são o foco desse trabalho e, portanto, não serão discutidas, mas podem ser encontradas no trabalho original.

As hipóteses por trás da modelagem são:

- Fenômeno unidimensional;
- Fases incompressíveis;
- Tensores tensão são função apenas da porosidade do meio para as duas fases;
- Efeitos de borda e de parede desprezíveis.

### 2.2.2.1. Modelagem matemática

A partir dessas hipóteses, temos as equações do movimento e da continuidade para as fases sólida e fluida da seguinte forma

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon_s v_s)}{\partial z} = 0, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_f}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon_f v_f)}{\partial z} = 0, \quad (2.8)$$

$$\rho_s \varepsilon_s \left( \frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) = \frac{\partial T_s}{\partial z} + m + \varepsilon_s (\rho_s - \rho_f) g, \quad (2.9)$$

$$\rho_f \varepsilon_f \left( \frac{\partial v_f}{\partial t} + v_f \frac{\partial v_f}{\partial z} \right) = \frac{\partial T_s}{\partial z} - m + \rho_f g, \quad (2.10)$$

em que  $\varepsilon_f$  é a fração volumétrica da fase fluida,  $\varepsilon_s$  a fração volumétrica da fase sólida,  $v_s$  a velocidade dos sólidos,  $v_f$  a velocidade do fluido,  $\rho_s$  a massa específica dos sólidos,  $\rho_f$  a massa específica do fluido,  $T_s$  a tensão nos sólidos,  $m$  a força resistiva,  $g$  a aceleração da gravidade,  $t$  o tempo de sedimentação e  $z$  a altura da coluna de sedimentação.

Somando as equações (2.7) e (2.8), considerando que a velocidade superficial total é apenas função do tempo e que no fundo da coluna o fluxo de sólidos é nulo, obtém-se uma correlação da velocidade do sólido com a velocidade do fluido dada por

$$v_f = - \frac{\varepsilon_s}{(1 - \varepsilon_s)} v_s. \quad (2.11)$$

Essa correlação obtida pela soma das equações da continuidade possibilitou a simplificação do problema, visto que sua utilização permite que a solução seja obtida a partir apenas das equações da continuidade e do movimento para uma das fases.

Com essas equações em mãos, o próximo passo de D'Ávila foi definir as equações constitutivas da força resistiva e da tensão nos sólidos a serem utilizadas no modelo.

### 2.2.2.2. Tensor tensão e pressão nos sólidos

A consideração básica de que o sistema sólido-fluido é um meio isotrópico e estudos de restrições internas de natureza mecânica (homogeneidade das densidades das fases) conduziram D'Ávila e Sampaio (1977a) a representarem os tensores tensão da seguinte forma

$$\mathbf{T}_s = -p_s \mathbf{I} + \mathbf{T}'_s, \quad (2.12)$$

em que  $\mathbf{T}_s$  é o tensor tensão,  $\mathbf{T}'_s$  o tensor tensão extra,  $\mathbf{I}$  a matriz identidade e  $p_s$  a pressão nos sólidos.

Os autores enunciaram e demonstraram, ainda, três teoremas de representação das tensões dos componentes de uma suspensão. O teorema 1 constitui uma hipótese na formulação do modelo proposto para descrever os perfis de concentração do fluido Br-Mul. Eles afirmam que se a tensão extra no constituinte da mistura depende apenas da porosidade do meio, então o tensor tensão total possui apenas componentes normais à superfície de contato, que dependem apenas da porosidade, isto é,

$$\mathbf{T}_s(\varepsilon_s) = -p_s(\varepsilon_s) \mathbf{I}. \quad (2.13)$$

Essa consideração de que o tensor tensão depende apenas da pressão nos sólidos para fluidos não-Newtonianos é uma aproximação, visto que a velocidade da partícula influenciaria tanto a tensão cisalhante quanto a viscosidade aparente do fluido.

A partir do teorema enunciado nota-se que a pressão é função exclusiva da concentração volumétrica dos sólidos. Admitindo-se que  $\varepsilon_s = \varepsilon_s(t, z)$ , tem-se

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = -\frac{\partial p_s}{\partial z} = -\frac{dp_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} \quad (2.14)$$

### 2.2.2.3. Força resistiva

Utilizando o teorema 3 da teoria constitutiva de D'Ávila e Sampaio (1977a), definiu-se a força resistiva como função da porosidade local e da velocidade relativa dos constituintes, de forma que

$$m = -\frac{\mu\varepsilon_f}{k}(v_f - v_s), \quad (2.15)$$

em que  $v_f$  é a velocidade do fluido,  $v_s$  a velocidade dos sólidos,  $\varepsilon_f$  a fração volumétrica de fluido,  $\mu$  a viscosidade,  $k$  a permeabilidade do meio.

Substituindo a equação (2.11) na equação (2.15) e rearranjando, obtém-se

$$m = -\frac{\mu v_s}{k}. \quad (2.16)$$

### 2.2.2.4. Números adimensionais e equações adimensionalizadas

O processo de sedimentação em batelada pode ser resolvido pela solução das equações do movimento e da continuidade para a fase sólida, portanto se faz necessária suas adimensionalizações.

Definindo os números adimensionais como

$$u_s = \frac{v_s}{v_{s0}}, \quad \xi = \frac{t}{t_f}, \quad \eta = \frac{z}{L}, \quad P = \frac{p_s}{p_0},$$

em que  $v_s$  é a velocidade dos sólidos,  $v_{s0}$  a velocidade inicial dos sólidos,  $t$  o tempo de sedimentação,  $t_f$  o tempo final de sedimentação,  $z$  a altura da coluna de sedimentação,  $L$  altura máxima da coluna de sedimentação,  $p_s$  a pressão nos sólidos e  $p_0$  a pressão nos sólidos em  $\varepsilon_{s0}$ .

Substituindo a equação (2.11) e os números adimensionais na equação (2.9), tem-se

$$-M \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \xi} + (1 - \varepsilon_s) \frac{\partial u_s}{\partial \eta} - u_s \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial \eta} = 0, \quad (2.17)$$

em que  $M = \frac{z_0}{v_{s0} t_0}$ .

Fazendo o mesmo para a equação (2.10) e também substituindo a tensão nos sólidos, obtém-se

$$(1 - \varepsilon_s) \left( M \frac{\partial u_s}{\partial \xi} + V \frac{\partial u_s}{\partial \eta} \right) + S \frac{dP}{d\varepsilon_f} \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial \eta} = -A u_s + B(1 - \varepsilon_s), \quad (2.18)$$

na qual  $M = \frac{z_0}{v_{s0} t_0}$ ,  $S = \frac{P_0}{v_{s0} \rho_s}$ ,  $A = \frac{\mu z_0}{\rho_s v_{s0} k}$ ,  $B = \frac{(\rho_s - \rho_f) g z_0}{\rho_s v_{s0}^2}$ .

### 2.2.3. Modelo de Arouca (2007)

Arouca (2007) utilizou uma combinação dos conceitos propostos por D'Ávila em sua abordagem para solução do problema da sedimentação em batelada com as propostas matemáticas utilizadas por Bürguer e Concha (1998), os quais inseriram o fator de compressão dos sólidos pelo peso das partículas. Dessa forma, foi proposto um modelo que consegue descrever totalmente o fenômeno da sedimentação sem a necessidade da separação do sistema em partes de sedimentação, líquido clarificado e zona de compressão.

As hipóteses por trás do modelo desenvolvido vieram da Teoria das Misturas da Mecânica do Contínuo e são:

- escoamento em meio poroso lento;
- compressão unidimensional dos sólidos;
- Não há transferência de massa entre as fases;
- Tensores tensão são função exclusiva da porosidade;
- Efeitos de parede desconsiderados;
- Gravidade como único campo de força agindo sobre o sistema.

### 2.2.3.1. Modelagem matemática

Aplicando as hipóteses nas equações de movimento e da continuidade das fases, são obtidas as seguintes equações:

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon_s v_s)}{\partial z} = 0, \quad (2.19)$$

$$\rho_s \varepsilon_s \left[ \frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial z} \right] = -\frac{\partial p_s}{\partial z} - \frac{\mu v_s}{k} - \Delta \rho_s \varepsilon_s g, \quad (2.20)$$

Os termos inerciais da equação do movimento (2.20) foram desconsiderados como mostrado por Damasceno (1992), levando a

$$\frac{\partial p_s}{\partial z} = -\frac{\mu v_s}{k} - \Delta \rho_s \varepsilon_s g. \quad (2.21)$$

Como a pressão nos sólidos é função exclusiva da concentração de sólidos, pela regra da cadeia, tem-se

$$v_s = \frac{k}{\mu} \left( -\frac{dp_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} - \Delta \rho_s \varepsilon_s g \right). \quad (2.22)$$

Substituindo a equação (2.22) na equação (2.19) e realizando a adimensionalização  $\eta = z/L$ , em que  $L$  é a altura da coluna de sedimentação, tem-se

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{k \varepsilon_s}{L^2 \mu} \frac{dp_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \eta} + \frac{k \Delta \rho_s \varepsilon_s g}{L \mu} \right] = 0. \quad (2.23)$$

Considerando  $\Gamma(\varepsilon_s) = \frac{k \Delta \rho_s \varepsilon_s g}{L \mu}$  e  $D(\varepsilon_s) = \frac{k \varepsilon_s}{L^2 \mu} \frac{dp_s}{d\varepsilon_s}$ , é obtida a equação (2.24), em que  $D(\varepsilon_s)$  é definido como coeficiente de difusão, tem-se

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ D(\varepsilon_s) \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial \eta} + \Gamma(\varepsilon_s) \right] = 0. \quad (2.24)$$

Dessa forma, ao solucionar essa equação se obtém o perfil de concentração de sólidos tanto no tempo quanto no espaço, bastando apenas definir equações constitutivas para a pressão nos sólidos e para a permeabilidade do meio.

O modelo proposto nesse trabalho será discutido mais a frente e segue a teoria desenvolvida por D'Ávila (1978), utilizando a restrição cinemática e a abordagem da Teoria de Mistura da Mecânica do Contínuo, com a equação de Tiller e Leu (1980) para a pressão nos sólidos e uma equação proposta para a permeabilidade do meio.

### **2.3. Inferência Estatística**

Apesar de existirem equações e modelos bem conhecidos que descrevem satisfatoriamente alguns fenômenos, a maioria possui constantes desconhecidas que devem ser estimadas a partir de dados experimentais observados, fazendo necessária a utilização da inferência estatística. A partir da utilização de funções probabilísticas, a inferência estatística tem o objetivo de estimar essas constantes, ou também chamadas de parâmetros, dos modelos a fim de ajustá-las aos dados previamente observados (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014).

Como forma de estimação, existem diversos métodos propostos, os principais pertencentes à duas vertentes da estatística, a inferência clássica ou frequentista e a inferência Bayesiana, sendo a primeira mais conhecida atualmente na estimação de parâmetros. De acordo com Roussas (2003), essas ainda podem ser divididas em dois tipos, a paramétrica e a não-paramétrica. A primeira, mais comum e amplamente utilizada, é aplicada a distribuições com número finito de parâmetros, e a última funciona para distribuições não definidas por um número exato de parâmetros. O foco desse trabalho será na inferência paramétrica, a qual possui ainda mais três subclasses: estimação pontual, estimação intervalar e teste de hipóteses.

Na inferência clássica, a estimação pontual gera apenas um valor para o parâmetro avaliado a partir dos dados observados. Diferente da inferência Bayesiana, na qual o parâmetro é tratado como uma variável aleatória e a estimação é realizada pela obtenção de sua distribuição de probabilidade, chamada de distribuição *a posteriori* (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014).

A estimação intervalar gera um intervalo no qual o valor do parâmetro tem dada probabilidade de pertencer. Na estimação clássica esse intervalo é obtido por meio de



aproximações, já na estimação Bayesiana, o intervalo é retirado diretamente da distribuição do parâmetro (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014).

E por último, o teste de hipóteses é útil quando se quer saber se o valor do parâmetro está localizado em um determinado evento do espaço amostral, como por exemplo, saber se duas médias ou distribuições diferentes são estatisticamente iguais (ROUSSAS, 2003).

Apesar de mais difundida, a teoria clássica leva em conta apenas a função de verossimilhança dos dados e não considera a história ou conhecimento prévio do parâmetro, definido também como distribuição *a priori* do parâmetro, fator que se faz presente na teoria Bayesiana (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014; GAMERMAN E LOPES, 2006). Além disso, a estimação clássica depende de funções objetivo, como máxima verossimilhança e mínimos quadrados, as quais precisam ser otimizadas para a obtenção do valor estimado do parâmetro. Contudo, essas funções podem ter caráter complexo e apresentar máximos e mínimos locais, dificultando sua otimização (MATHEW, 2013). Portanto, pela possibilidade da inserção de um conhecimento prévio do parâmetro, o qual, no caso deste trabalho, é a distribuição de tamanho de partícula, a inferência Bayesiana foi a escolhida para avaliar a influência da distribuição de tamanho de partículas na sedimentação de partículas adensantes em fluidos de perfuração.

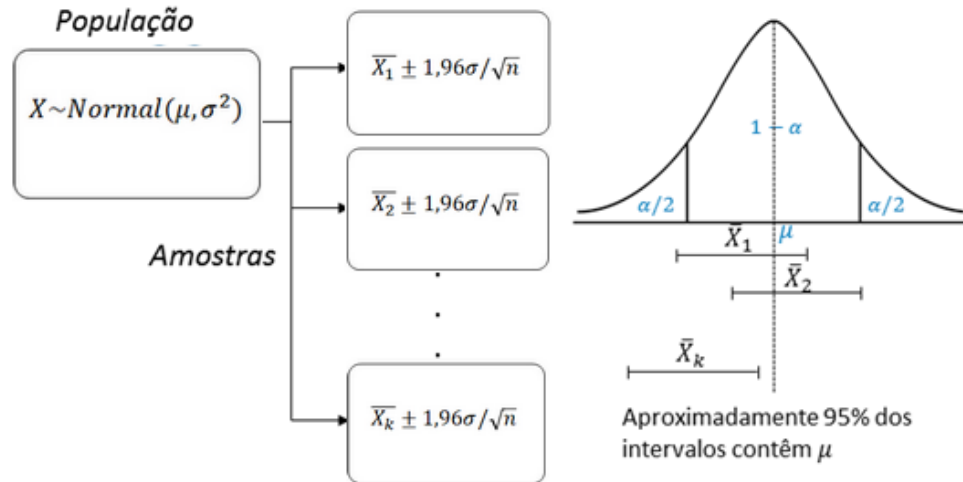
As próximas seções visam esclarecer as diferenças entre a inferência clássica e a Bayesiana, mostrando os pontos em comum e o que as diferem no quesito estimação de parâmetros.

### **2.3.1. Estimação clássica x Estimação Bayesiana**

No ambiente da engenharia, a estimação de parâmetros clássica é mais amplamente difundida e está presente em todos os campos de estudos.

A estimação clássica de parâmetros define que o valor a ser determinado é um valor fixo, ou seja, ao fim de uma estimação serão obtidos valores escalares para os parâmetros, com a possibilidade ainda do cálculo de intervalos de confiança por meio de aproximações das distribuições propostas. Por exemplo, seja  $X$  uma variável aleatória com distribuição  $Normal(\mu, \sigma^2)$ , com variância conhecida. O cálculo do intervalo é feito baseado no número de amostras ( $n$ ), no desvio padrão ( $\sigma$ ) e no coeficiente de confiança ( $1 - \alpha$ ), como exemplificado na figura 2.6. O intervalo de confiança tem sido considerado erroneamente como o intervalo em que o parâmetro tem  $(1 - \alpha)\%$  de chance de estar contido. Entretanto, a ideia do intervalo de confiança

é que, caso pudessem ser calculados infinitos intervalos,  $(1 - \alpha)\%$  deles conteriam o valor médio do parâmetro (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014).



**Figura 2.6.** Exemplo de cálculo de intervalo de confiança de  $(1 - \alpha)\%$  para distribuição normal.

Diferentemente, a estimação Bayesiana define os parâmetros como variáveis aleatórias com distribuições definidas, das quais pode-se retirar intervalos de credibilidade por meio dos quantis condizentes com a incerteza desejada. Por exemplo, um intervalo de credibilidade de 95% é construído a partir dos quantis de 0,025 e 0,975. O intervalo de credibilidade, diferentemente do intervalo de confiança, determina a probabilidade de o parâmetro estar contido dentro dele (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014).

Além disso, na inferência clássica, os erros de predição, ou seja, a incerteza atrelada aos dados experimentais e ao modelo, são calculados por meio de aproximações propostas a partir da definição do modelo de probabilidade designado ao erro experimental. Dessa forma, a partir da matriz de covariância dos dados e da matriz de sensibilidade, são calculados os intervalos de confiança da saída do modelo (PINTO E SCHWAAB, 2007). Já na estimação Bayesiana, o erro de predição é dado pela obtenção da distribuição preditiva do modelo, a qual considera não só a resposta do modelo aos parâmetros, mas também o conhecimento prévio sobre o comportamento do parâmetro (GAMERMAN E LOPES, 2006).

Uma hipótese em comum por trás tanto da estimação clássica quanto da estimação Bayesiana é chamada Hipótese do Modelo Perfeito, a qual define que, dado um modelo  $y^m = f(\theta)$ , com  $\theta$  como vetor paramétrico, os dados experimentais ( $y^e$ ) são dados por

$$y^e = y^m + \varepsilon. \quad (2.25)$$

Os desvios dos dados observados em relação ao modelo proposto são causados única e exclusivamente devido aos erros experimentais, ao contrário do que seria o ideal como o erro  $\varepsilon$  também ser dependente do erro de modelagem. Além disso, ambas estimações determinam distribuições características para o erro experimental, usualmente distribuições bem conhecidas como normal ou exponencial. São nessas distribuições que irão se basear os métodos de estimação, sendo que no âmbito clássico, os principais métodos são dados por meio de otimizações de funções objetivos, como o método de mínimos quadrados para modelos lineares e o método da máxima verossimilhança (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014; PINTO E SCHWAAB, 2007).

O método da máxima verossimilhança é o mais utilizado e consiste na maximização da função de verossimilhança do experimento dado o modelo, considerando que o formato da distribuição dos erros experimentais seja conhecido. Dessa forma é possível designar diferentes distribuições dependendo da forma com que o desvio experimental se apresenta (ROUSSAS, 2003; MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014; PINTO E SCHWAAB, 2007). Um exemplo de distribuição muito utilizada é a distribuição normal em que a probabilidade do dado observado dado o modelo provem da equação (2.26), cuja forma já está simplificada considerando a independência dos dados observados e que as variáveis independentes do modelo não possuem desvios. Tem-se

$$p(\mathbf{y}^e | \mathbf{y}^m, \mathbf{D}) = \prod_{i=1}^{NE} \prod_{j=1}^{NY} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{yij}^2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{(y_{ij}^e - y_{ij}^m(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}))^2}{\sigma_{yij}^2} \right] \right\}, \quad (2.26)$$

em que  $\mathbf{y}^e$  é o vetor de dados,  $\mathbf{y}^m$  o vetor de saídas do modelo,  $\mathbf{x}_i$  vetor de variáveis conhecidas do modelo,  $NE$  o número de experimentos,  $NY$  o número de saídas do modelo,  $\sigma_{yij}^2$  a variância de cada experimento,  $\mathbf{D}$  a matriz de covariância e  $\boldsymbol{\theta}$  o vetor paramétrico.

No exemplo da distribuição normal, a maximização da função de verossimilhança depende da aplicação do logaritmo em sua estrutura, fornecendo uma equação com um núcleo a ser minimizado, também chamado de função de mínimos quadrados ponderados, dada por

$$\ln[p(\mathbf{y}^e|\mathbf{y}^m, \mathbf{D})] = \sum_{i=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NY} \ln \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{y_{ij}}^2}} \right] - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NY} \frac{(y_{ij}^e - y_{ij}^m(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}))^2}{\sigma_{y_{ij}}^2}, \quad (2.27)$$

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NY} \frac{(y_{ij}^e - y_{ij}^m(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}))^2}{\sigma_{y_{ij}}^2}. \quad (2.28)$$

Existem outros métodos de estimação clássica, como o método dos momentos, que não tem valor acadêmico dentro da proposta desse trabalho. Nos métodos de estimação Bayesiana, geralmente, não é necessária a otimização de funções objetivos, as quais podem convergir para mínimos e máximos locais, ou ainda ter caráter muito complexo, o que dificulta a otimização (MATHEW, 2013). São utilizados métodos estatísticos de sorteio de distribuições, como por exemplo o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov e o *Randomized Maximum Likelihood*, ambos serão aplicados nesse trabalho.

A inferência Bayesiana tem como base o teorema de Bayes, o qual descreve uma atualização de probabilidades do parâmetro dado seu conhecimento prévio. O teorema de Bayes e também os métodos de estimação de parâmetros via teoria Bayesiana serão apresentados nas próximas seções.

### 2.3.2. Teorema de Bayes

Seja  $p(\mathbf{y}^e|\boldsymbol{\theta})$  o modelo probabilístico assumido para o vetor de dados observados e  $p(\boldsymbol{\theta})$  a distribuição *a priori* do vetor paramétrico  $\boldsymbol{\theta}$ . O teorema de Bayes define que existe uma distribuição *a posteriori* que é proporcional a função de verossimilhança multiplicada pela distribuição *a priori* dos parâmetros de acordo com a equação (2.30), a qual é uma simplificação da equação (2.29). Pode-se desconsiderar a distribuição marginal de  $\mathbf{y}^e$  ( $p(\mathbf{y}^e)$ ) pois ela não depende do parâmetro  $\boldsymbol{\theta}$  e, geralmente, é de difícil obtenção (GAMERMAN e LOPES, 2006).

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}^e) = \frac{p(\mathbf{y}^e, \boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{y}^e)} = \frac{p(\mathbf{y}^e|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{y}^e)} \quad (2.29)$$

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}^e) \propto l(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{y}^e)p(\boldsymbol{\theta}) \quad (2.30)$$

A distribuição *a posteriori* é uma atualização da distribuição de probabilidade do parâmetro que leva em conta tanto o conhecimento prévio de seu comportamento (distribuição *a priori*) quanto dados de saída do modelo do qual o parâmetro está sendo estimado (função de verossimilhança). Em geral, a forma da distribuição *a posteriori* é desconhecida. Para sua obtenção, é necessária a utilização de métodos estatísticos, sendo o mais utilizado o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (GAMERMAN e LOPES, 2006).

### 2.3.3. Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC)

Antes de descrever o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov é necessário esclarecer as características do método de Monte Carlos simples. O método de Monte Carlo é utilizado principalmente para cálculo aproximado de integrais complexas (MIGON, GAMERMAN E LOUZADA, 2014) em que, dada a função  $g(\theta)$ , a aproximação da integral

$$I = \int_a^b g(\theta) d\theta, \quad (2.31)$$

pode ser obtida pela aproximação dada por

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (b - a)g(\theta_i). \quad (2.32)$$

Também pode ser útil para propagar incertezas de parâmetros do modelo para sua saída por meio de sorteios aleatórios de valores das distribuições *a priori* dos parâmetros do simulador. Assim, calcula-se o resultado para cada um desses valores, gerando amostras aleatórias de saídas do modelo, as quais podem ser utilizadas para avaliar a sensibilidade dos parâmetros e para cálculo de probabilidades (ROBERT E CASELLA, 2013; SALTELLI *et al.*, 2008).

A utilização do método de Monte Carlo está condicionada ao conhecimento da distribuição dos parâmetros (ou seja, da forma da distribuição de probabilidade dos parâmetros). Na maioria dos casos, estas distribuições são complexas, fato que dificulta a obtenção de amostras aleatórias necessárias para a realização do método. Portanto, faz-se necessária a utilização de métodos alternativos que permitam o sorteio de valores de qualquer distribuição, sendo mais comumente aplicado o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MATHEW, 2013).

O método MCMC é baseado na utilização de cadeias de Markov, um tipo especial de processo estocástico cujas principais características são a probabilidade de transição fixa e a dependência do estado atual apenas com o anterior (GAMERMAN e LOPES, 2006; MIGON, GAMERMAN e LOUZADA, 2014). Maiores informações sobre o método e suas características serão apresentadas nas próximas seções.

### 2.3.3.1. Cadeias de Markov

Apresentada pelo russo Andrei Andreivich Markov no início do século 20, a cadeia de Markov é um processo estocástico, tipo de processo que descreve sequências de variáveis aleatórias, em que o estado atual da cadeia depende apenas do estado anterior para qualquer índice  $t$ , ou seja,  $P(Y_{t+1}|Y_1, Y_2, \dots, Y_t) = P(Y_{t+1}|Y_t)$ . Essa probabilidade é invariável com o tempo e é chamada de núcleo de transição da cadeia (GAMERMAN e LOPES, 2006; MATHEW, 2013).

Para que a distribuição estacionária ( $\pi(\cdot)$ ) da cadeia criada seja a desejada (distribuição *a posteriori*), o método MCMC deve seguir a equação que define a reversibilidade de uma cadeia (equação (2.33)). A validade do método pode ser comprovada pela simplificação da equação (2.33) para a equação da definição de cadeia estacionária (equação (2.34)) (BROOKS, 1998).

$$\pi(i)P(Y_{t+1} = j|Y_t = i) = \pi(j)P(Y_{t+1} = i|Y_t = j), \quad (2.33)$$

$$\sum_i \pi(i)P_{ij}(t) = \pi(j). \quad (2.34)$$

Além disso, a convergência desse tipo de processo estocástico depende da cadeia ser homogênea, irreduzível e aperiódica. Ou seja, as probabilidades de transição de um estado para

outro são invariantes, cada estado pode ser atingido a partir de qualquer outro em um número finito de iterações, não atinge o mesmo ponto com regularidade fixa e não há estados absorventes (GILKS *et al.*, 1995; GAMERMAN e LOPES, 2006).

Definidas essas três propriedades, é possível afirmar que se o tempo tender a infinito, a distribuição tenderá para a distribuição de interesse, no caso desse trabalho, a distribuição *a posteriori* do vetor paramétrico. Também é possível afirmar que a média amostral dessa distribuição irá convergir para a média populacional (GILKS *et al.*, 1996; GAMERMAN e LOPES, 2006).

### 2.3.3.2. Algoritmos do método MCMC

Existem várias formas de se construir uma cadeia com as características descritas na seção anterior. No presente trabalho, o algoritmo utilizado para a realização do MCMC foi o algoritmo de Metropolis-Hastings original, pois é mais indicado na estimação de parâmetros em que a distribuição *a posteriori* não tem um perfil conhecido, sendo necessária a utilização de uma distribuição proposta de sorteio. Dessa forma o foco das seções seguintes será exemplificar e descrever alguns algoritmos de MCMC, com ênfase no algoritmo de Metropolis-Hastings.

#### 2.3.3.2.1. Algoritmo de Metropolis-Hastings (M-H)

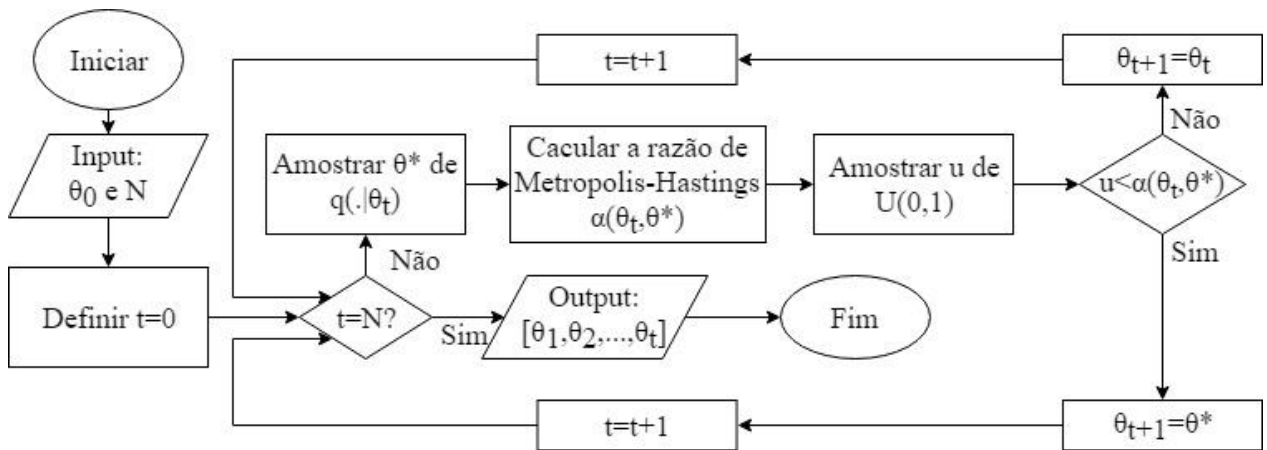
O algoritmo de Metropolis-Hastings foi inicialmente proposto por Metropolis *et al.* (1953) na intenção de calcular propriedades de substâncias por meio de simulações moleculares, e posteriormente adaptado para casos mais gerais por Hastings (1970).

Como mencionado previamente, um dos principais problemas encontrados nos métodos MCMC é o sorteio do vetor paramétrico ( $\theta$ ) diretamente de sua distribuição *a posteriori* ( $p(\theta|x)$ ), já que essa pode ter caráter complexo. Dessa forma o algoritmo de Metropolis-Hastings propõe que os parâmetros sejam sorteados de uma distribuição proposta conhecida ( $q(\theta_t|\theta^*)$ ) e de fácil sorteio, como por exemplo uma normal multivariada centrada no estado anterior ( $\theta_t$ ) da cadeia de Markov. É interessante citar que caso a distribuição escolhida seja simétrica, a distribuição  $q(\theta_t|\theta^*)$  é igual a  $q(\theta^*|\theta_t)$ , podendo ser feita uma simplificação posteriormente. Entretanto, como

esse sorteio não é realizado diretamente da distribuição dos parâmetros, é necessária a inclusão de uma razão de aceitação (METROPOLIS *et al.*, 1953; HASTINGS, 1970), dada por

$$\alpha(\boldsymbol{\theta}_t, \boldsymbol{\theta}^*) = \min\left(1, \frac{p(\boldsymbol{\theta}^*|y^e)q(\boldsymbol{\theta}_t|\boldsymbol{\theta}^*)}{p(\boldsymbol{\theta}_t|y^e)q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}_t)}\right). \quad (2.35)$$

Uma vez sorteados, os parâmetros propostos ( $\boldsymbol{\theta}^*$ ) são avaliados segundo a razão de aceitação  $\alpha(\boldsymbol{\theta}_t, \boldsymbol{\theta}^*)$  que é o mínimo valor entre um e a razão  $\frac{p(\boldsymbol{\theta}^*|y^e)q(\boldsymbol{\theta}_t|\boldsymbol{\theta}^*)}{p(\boldsymbol{\theta}_t|y^e)q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}_t)}$ . Em seguida, é feito um sorteio de um valor ( $u$ ) a partir de uma distribuição uniforme com intervalo de 0 a 1 ( $U(0,1)$ ) e caso a razão de aceitação seja maior que o valor sorteado, os parâmetros propostos são aceitos (METROPOLIS *et al.*, 1953; HASTINGS, 1970). O esquema do algoritmo pode ser visualizado na figura 2.7 em que  $\boldsymbol{\theta}_0$  é o vetor paramétrico inicial e  $N$  é o número de iterações (MATHEW, 2013).



**Figura 2.7.** Algoritmo de Metropolis-Hastings (MATHEW, 2013).

Existem algumas variações do método de Metropolis-Hastings, como por exemplo “*Single-Component Metropolis-Hastings*” (SCMH) que é ideal para casos em que hajam muitos parâmetros a serem sorteados, pois ao contrário do algoritmo original que utiliza de apenas uma razão de aceitação para todos os parâmetros, este separa os parâmetros em blocos, realizando análises de rejeição separadas para cada bloco e aumentando a eficiência da convergência do método para a distribuição *a posteriori* desejada. Uma desvantagem desse método é a alta demanda computacional caso seja necessária a resolução de equações diferenciais, pois para cada bloco de



parâmetro a ser avaliado, é necessária a avaliação do parâmetro proposto no modelo (GAMERMAN E LOPES 2006; MATHEW, 2013).

Outro exemplo de algoritmo é o “*Random-Walk Metropolis-Hastings*” (RWMH), o qual propõe que os novos valores da cadeia sejam sorteados a partir de uma distribuição proposta que considera um passo aleatório, ou seja,  $\theta_{t+1} = \theta_t + \mathbf{z}$ , onde  $\mathbf{z}$  é o passo. Essa distribuição pode ser qualquer uma, desde que o passo seja coerente com a taxa de aceitação do algoritmo, pois passos muito largos fazem com que a cadeia se mova para muito distante do centro da distribuição final e passos muito curtos podem fazer com que a cadeia estagne (GAMERMAN E LOPES 2006; MATHEW, 2013).

Os algoritmos mencionados anteriormente dependem intrinsecamente da sintonização de alguns parâmetros, como por exemplo o passo no RWMH ou as distribuições propostas no algoritmo original e no SCM. Dessa forma foi proposto por Haario *et al.* (1999) um método chamado “*Adaptive MCMC*” que faz o uso de distribuições propostas adaptáveis que se ajustam de acordo com o desenvolvimento da cadeia. Esse algoritmo é geralmente utilizado em conjunto com outros algoritmos já que é útil para minimizar o tamanho do período de *aquecimento* (período inicial da cadeia em que ainda não houve estabilização), mas não indicado para convergência da cadeia (GAMERMAN E LOPES 2006; MATHEW, 2013).

#### **2.3.3.2.2. Amostrador de Gibbs**

O amostrador de Gibbs é um caso especial do algoritmo de Metropolis-Hastings no qual os parâmetros sorteados da cadeia são sempre aceitos. A cadeia irá sempre se mover para um novo valor com transição definida pelas distribuições condicionais completas, a qual, dado um vetor paramétrico, é a distribuição da  $i$ -ésima componente condicionada em todas as outras componentes. Tal algoritmo pode ser utilizado apenas quando é possível realizar o sorteio direto das distribuições condicionais completas (GEMAN E GEMAN, 1984).

### **2.3.3.3. Implementação do MCMC**

Antes da implementação do método MCMC, são necessários alguns ajustes de parâmetros do método como a definição dos hiperparâmetros da distribuição proposta no algoritmo de Metropolis-Hastings, período de *aquecimento* e critérios de convergência.

#### **2.3.3.3.1. Sintonia da distribuição proposta**

Para o algoritmo de Metropolis-Hastings, é necessário fazer a escolha de uma distribuição proposta de sorteio. Essa escolha tem papel crucial na convergência do método, visto que distribuições que se assemelham à distribuição *a posteriori* tem maiores chances de convergir mais rapidamente (GELMAN, ROBERTS E GILKS, 1996; ROBERTS, GELMAN E GILKS, 1997; GILKS, RICHARDSON E SPIEGELHALTER, 1996). Entretanto, a distribuição desejada, na maioria das vezes, não tem forma definida, tornando a escolha da distribuição proposta subjetiva.

O algoritmo garante a convergência da distribuição final para a distribuição de interesse, portanto, para facilitar os cálculos, geralmente é escolhida como distribuição proposta uma distribuição normal, cujo comportamento é bem conhecido. A média da distribuição normal é, geralmente, considerada como o valor anterior da cadeia de Markov e a variância é definida por meio de sintonia do algoritmo. Segundo Roberts, Gelman e Gilks (1997), caso a distribuição proposta escolhida seja normal, a razão de aceitação ótima é de 23,4%, podendo variar desse valor a 50% para estimação de poucos parâmetros.

A sintonia é feita iterativamente, considerando que altas taxas de aceitação demonstram que a variância é muito baixa, gerando valores próximos à média, sendo necessário o aumento da variância. De forma análoga, variâncias altas produzem baixas taxas de aceitação devido ao aumento de probabilidade de valores distantes da média. Portanto, caso haja altas taxas de aceitação, a variância deve ser aumentada, caso o contrário, a variância deve ser diminuída.

#### **2.3.3.3.2. Escolha do valor inicial**

Métodos iterativos geralmente necessitam de valores iniciais para inicialização, dessa forma, é necessário definir valores iniciais dos parâmetros a serem ajustados por meio do algoritmo de M-

H. A escolha desses valores iniciais irá alterar a convergência da cadeia, visto que valores muito distantes de valores pertencentes à distribuição de interesse irão gerar períodos de *aquecimento* e tempo de convergência maiores. Portanto, um conhecimento prévio sobre o valor final dos parâmetros tem grande impacto na otimização de tempo para realização do método.

#### **2.3.3.3.3. Período de aquecimento**

O período de aquecimento é o período inicial de formação da cadeia de Markov em que os valores sorteados são descartados da distribuição final de interesse, pois ainda não estão na fase de equilíbrio da cadeia. Geyer (1992) mostrou que para cadeias suficientemente grandes, o período varia de 1 a 2%, entretanto, a determinação do período de aquecimento é geralmente subjetiva, devido ao comportamento aleatório da cadeia e também da escolha do valor inicial dos parâmetros, os quais podem aumentar consideravelmente o tamanho do período. Usualmente se utiliza gráficos da cadeia gerada para identificação do período.

#### **2.3.3.3.4. Convergência**

Existem diversos métodos para avaliar a convergência das cadeias geradas pelo método MCMC, dentre eles métodos teóricos que tentam calcular distâncias e estabelecer limites nas distribuições e métodos empíricos que avaliam as propriedades da distribuição gerada (GAMERMAN E LOPES, 2006).

A convergência ideal do método MCMC se dá quando são sorteados valores de todo o espaço amostral da distribuição de interesse, entretanto, como não se é conhecida a forma da distribuição final, esse critério de convergência se torna subjetivo (BROOKS, 1998). Uma forma de garantir que o método contemplou todo o espaço amostral é gerar diversas cadeias com valores iniciais diferentes para que a distribuição possa convergir para valores extremos da distribuição desejada. Existem também métodos para a avaliação de convergência, como por exemplo os métodos utilizados por Raftery e Lewis (1992) e Yu e Mykland (1998).

Mais informações sobre métodos de convergência podem ser encontradas nos trabalhos de Cowles e Carlin (1996) e Roberts (1998), nos quais são comparados diversos métodos estatísticos de avaliação de convergência.

### 2.3.4. “Randomized Maximum Likelihood” (RML)

O método RML é um método aproximado de sorteio da distribuição *a posteriori*, geralmente utilizado quando o modelo a ser avaliado é muito complexo e demanda um tempo computacional muito grande. Diferente do método MCMC, o RML não depende de convergência. Dessa forma, o método aparece como uma alternativa para obtenção da distribuição *a posteriori*, pois, ao contrário do método MCMC que demanda centenas de milhares de iterações para garantir convergência, o método RML garante que cada sorteio realizado seja uma amostra da distribuição *a posteriori* aproximada. O método foi originalmente desenvolvido para avaliação de modelos lineares, mas também pode ser implementado para modelos não-lineares (OLIVER, REYNOLDS E LIU, 2008).

A aplicação do método está condicionada a definição de distribuições *a priori* dos parâmetros como distribuições normais, além disso, o modelo probabilístico designado ao erro também deve ser normal. Dessa forma, a distribuição *a posteriori* é dada por

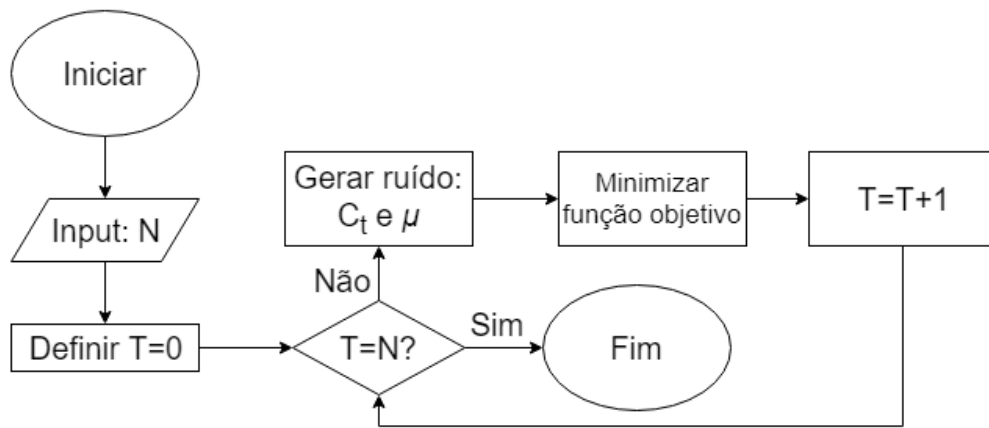
$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}^e) \propto \exp\left(-\left(\|\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{t}) - \mathbf{y}^e\|_{D_M^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu}\|_{D_\theta^{-1}}^2\right)\right), \quad (2.36)$$

em que  $\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{t})$  é o vetor de saídas do modelo,  $\mathbf{y}^e$  o vetor de dados experimentais,  $D_M$  a matriz de covariância dos dados,  $D_\theta$  a matriz de covariância dos parâmetros,  $\boldsymbol{\theta}$  o vetor paramétrico e  $\boldsymbol{\mu}$  o vetor de médias das distribuições *a priori* dos parâmetros.

O método consiste na geração de ruídos em cada componente dos dados experimentais ( $y_i^e$ ) e das médias das distribuições *a priori* ( $\mu_i$ ) por meio de sorteios aleatórios de distribuições normais  $y_i^{e*} \sim Normal(y_i^e, D_{Mi})$  e  $\mu_i^* \sim Normal(\mu_i, D_{\theta i})$ , gerando uma função objetivo dada por

$$\boldsymbol{\theta} = \operatorname{argmin}\left(-\left(\|\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{t}) - \mathbf{y}^{e*}\|_{D_M^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu}^*\|_{D_\theta^{-1}}^2\right)\right). \quad (2.37)$$

A otimização da estrutura dada pela equação (2.37) gera valores que são definidos como amostras aleatórias da distribuição *a posteriori* aproximada dos parâmetros. O diagrama do algoritmo do método pode ser observado na figura 2.8. Por ser um método aproximado, o método RML foi comparado com método exato como o MCMC, gerando distribuições com valores satisfatoriamente próximos das distribuições reais (OLIVER, REYNOLDS E LIU, 2008).



**Figura 2.8.** Algoritmo do método RML.

### **3. Materiais e métodos**

A proposta do trabalho foi avaliar o efeito da distribuição de tamanho de partícula na modelagem da sedimentação de sólidos adensantes em fluido de perfuração. Para isso, foram utilizados, como métodos estatísticos, os métodos de Monte Carlo, Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC) e *Randomized Maximum Likelihood* (RML).

O método de Monte Carlo utiliza as distribuições *a priori* dos parâmetros do modelo para avaliar a incerteza produzida nos resultados, gerando resultados de sensibilidade paramétrica. Além disso, o método possibilita a análise da influência da escolha de um diâmetro característico na estimação paramétrica e também um meio de escolher um diâmetro característico ótimo. Os métodos MCMC e RML são utilizados para realizar a estimação dos parâmetros do modelo por meio da teoria Bayesiana, na qual a incerteza dos parâmetros é naturalmente inserida na estimação por meio da distribuição *a priori*, ou seja, do conhecimento prévio que se tem sobre os parâmetros do modelo.

Para a realização dos métodos foi necessária a definição das distribuições *a priori* dos parâmetros através de investigação de valores possíveis e a descrição da distribuição *a posteriori*. Além disso, foram utilizados dados experimentais de concentração volumétrica de sólidos, dados sobre as características físicas do fluido e dos sólidos, bem como seu comportamento reológico. Dessa forma, as próximas seções visam apresentar com mais detalhes os materiais e métodos utilizados no trabalho.

#### **3.1. Dados experimentais**

No desenvolvimento e validação desse trabalho, foram utilizados experimentos conduzidos na Universidade Federal de Uberlândia, onde foi utilizada a técnica de atenuação de raios gama para calcular a concentração de sólidos em diferentes dias e diferentes alturas da coluna de sedimentação. Os procedimentos, materiais utilizados e suas características foram descritos sucintamente nas seções seguintes, mais informações sobre as técnicas utilizadas podem ser obtidas no trabalho de Fagundes (2015) e Arouca (2007).

### 3.1.1. Propriedade do fluido e dos sólidos

O fluido utilizado (Br-Mul) foi fornecido pela empresa Petrobras S.A. e é utilizado como fluido de perfuração, sendo composto por uma mistura de materiais mostrada na tabela 3.1. Tais materiais tem o papel de prover funções ao fluido, como estabilização da pressão do poço, transporte de material formado durante a perfuração, lubrificação e resfriamento do equipamento e manter sólidos em suspensão (BLOYS *et al.*, 1994).

**Tabela 3.1.** Composição do fluido de perfuração.

Composição dos Sólidos	Concentração
Olefina Interna	0,57 bbl/bbl
Cal	2,50 lb/bbl
Emulsificante Primário (Cyber Mul)	9,00 lb/bbl
Solução Saturada de CaCl <sub>2</sub>	0,39 bbl/bbl
Redutor de Filtrado (Ecotrol)	1,00 lb/bbl
Argila Organofílica (Cyber Vis HT)	2,00 lb/bbl
Modificador Reológico (Cyber Vis RM)	1,00 lb/bbl
Baritina	GSP 9 ppg

A massa específica dos sólidos presentes no fluido Br-Mul foi determinada pela técnica da picnometria a gás hélio, a qual determina o volume verdadeiro de um sólido por variação da pressão de gás numa câmara de volume conhecido. Foi utilizado o aparelho Gas Pycnometer da Micromeritics, modelo AccuPyc1330 do Laboratório de Processos de Separação da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia para a realização do experimento. O valor médio da massa específica dos sólidos presentes no fluido de perfuração Br-Mul foi de 2305,0kg/m<sup>3</sup>. A determinação de densidade foi obtida a partir de cinco medidas distintas de uma mesma amostra dos sólidos presentes no Br-Mul.

A massa específica da suspensão foi determinada pela técnica de picnometria simples na temperatura de 20°C. Nesta técnica foi utilizado um picnômetro de 50mL, água destilada ( $\rho_{\text{água}}(20^{\circ}\text{C}) = 0,99823\text{g/cm}^3$ ), fluido de perfuração Br-Mul e balança SHIMADZU, modelo

AY220. O valor médio calculado da massa específica da suspensão foi de 1097,0kg/m<sup>3</sup>. A obtenção da massa específica do fluido foi feita pela equação (3.26).

Para determinação do teor de sólidos não voláteis presentes no fluido de perfuração de poços foram realizadas análises de retorta utilizando o Kit da marca FANN modelo 210463 com 50mL de capacidade. Esses testes foram realizados em duplicata. O procedimento se iniciava pesando as câmaras vazias e depois preenchidas com a amostra de fluido. Os componentes voláteis foram evaporados por meio do aquecimento das câmaras nas temperaturas de 400°C, com a coleta dos vapores em uma proveta posicionada após um condensador. As pesagens das câmaras antes e depois do aquecimento foram feitas em uma balança semi-analítica da marca GEHAKA modelo BK 30000 e foi obtido um valor médio de 14,1% de sólidos no fluido. Os valores foram resumidos com seus respectivos desvios na tabela 3.2.

**Tabela 3.2.** Propriedades físicas do fluido de perfuração.

<b>Característica</b>	<b>Valor</b>	<b>Desvio padrão</b>
Massa Específica da Suspensão (kg/m <sup>3</sup> )	1097,0	1,0
Massa Específica dos Sólidos (kg/m <sup>3</sup> )	2305,0	3,0
Massa Específica do Fluido (kg/m <sup>3</sup> )	898,7	-
Teor de Sólidos (%)	14,1	0,6

### **3.1.2. Reologia**

Para a análise reológica do fluido foram realizados testes a taxas de cisalhamento constante para a obtenção da curva de viscosidade aparente do fluido, teste de histerese e tensão de cisalhamento em repouso. Os testes foram realizados no reômetro Brookfield R/S Plus, com banho termostaticado também da marca Brookfield, modelo programmable controller TC-6021.

Para o teste a taxa de cisalhamento constante para a obtenção da curva de viscosidade aparente, as amostras, na temperatura de 25°C, foram submetidas a uma taxa de cisalhamento de 1050s<sup>-1</sup> durante um minuto para que qualquer estrutura presente no fluido fosse desfeita. Em seguida, o fluido foi submetido a cinco taxas de deformação (10s<sup>-1</sup>, 20s<sup>-1</sup>, 30s<sup>-1</sup>, 40s<sup>-1</sup> e 50s<sup>-1</sup>) por aproximadamente três horas e meia, nas quais o equipamento



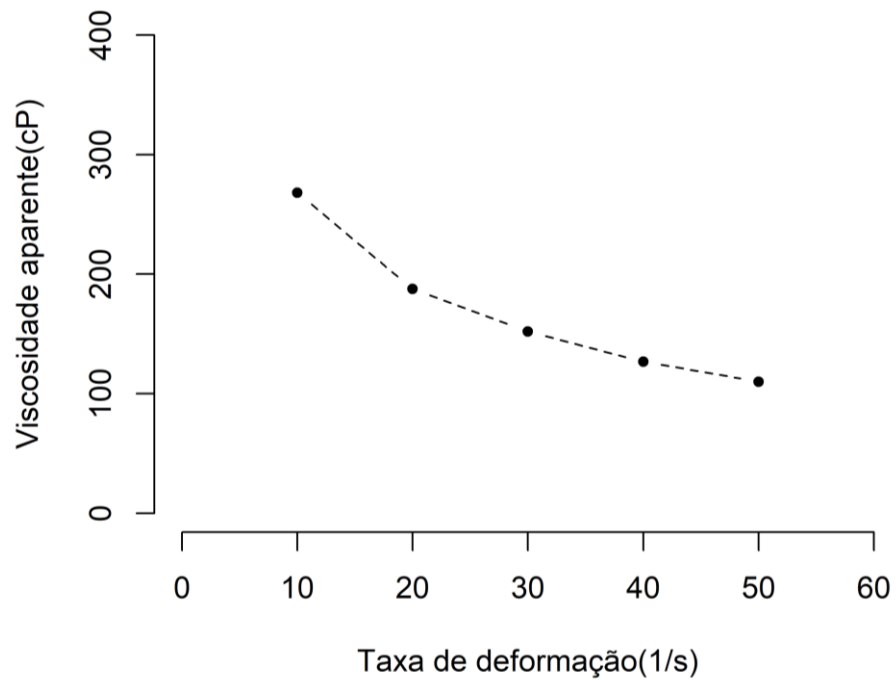
fornecia, a cada um minuto, os valores de tensão cisalhante e viscosidade. Os valores de viscosidade aparente, mostrados na figura 3.1, foram obtidos após o equipamento demonstrar uma tensão cisalhante constante por mais de 25 minutos. Os parâmetros reológicos foram obtidos ajustando o modelo da Lei de Potência aos dados de viscosidade aparente e taxa de deformação, sendo mostrados na tabela 3.3.

O teste de cisalhamento em repouso foi realizado a uma taxa de cisalhamento de  $5s^{-1}$  em três amostras em tempos de repouso diferentes, 10 segundos, 10 minutos e 30 minutos. Os resultados são mostrados na figura 3.2.

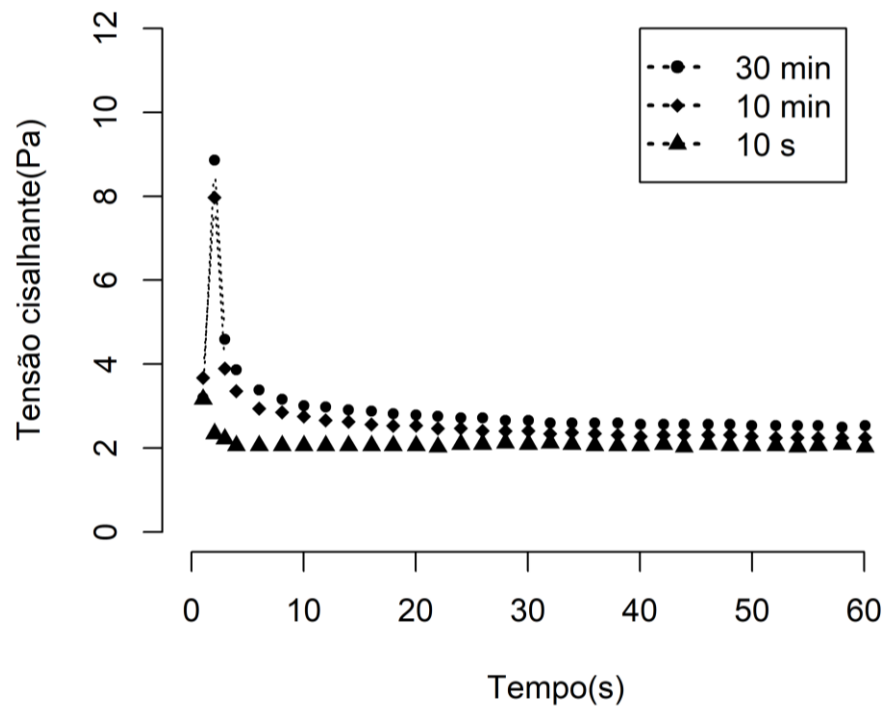
**Tabela 3.3.** Parâmetros reológicos ajustados ao modelo Lei de Potência para o fluido de perfuração.

<b>Modelo</b>	<b>M</b>	<b>n</b>	<b>Coefficiente de correlação</b>
$\tau(\lambda^*) = -M\lambda^{*n}$	1,006	0,437	$R^2=0,9947$

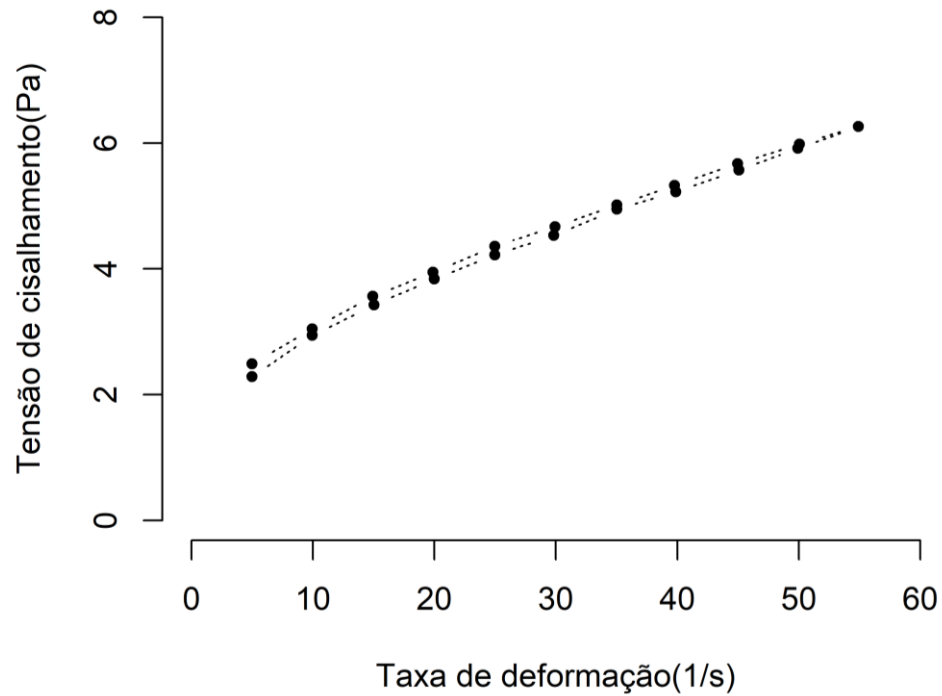
E, finalmente, o teste de histerese foi realizado aplicando-se uma taxa de cisalhamento de  $1050s^{-1}$  por um minuto em uma amostra em  $25^{\circ}C$ . A partir desse procedimento, a amostra foi cisalhada variando a taxa de cisalhamento de  $1s^{-1}$  a  $1050s^{-1}$  gradativamente e então reduzindo essa taxa a  $1s^{-1}$  novamente. A figura 3.3 mostra os resultados da análise da curva de histerese.



**Figura 3.1.** Curva de viscosidade aparente do fluido.



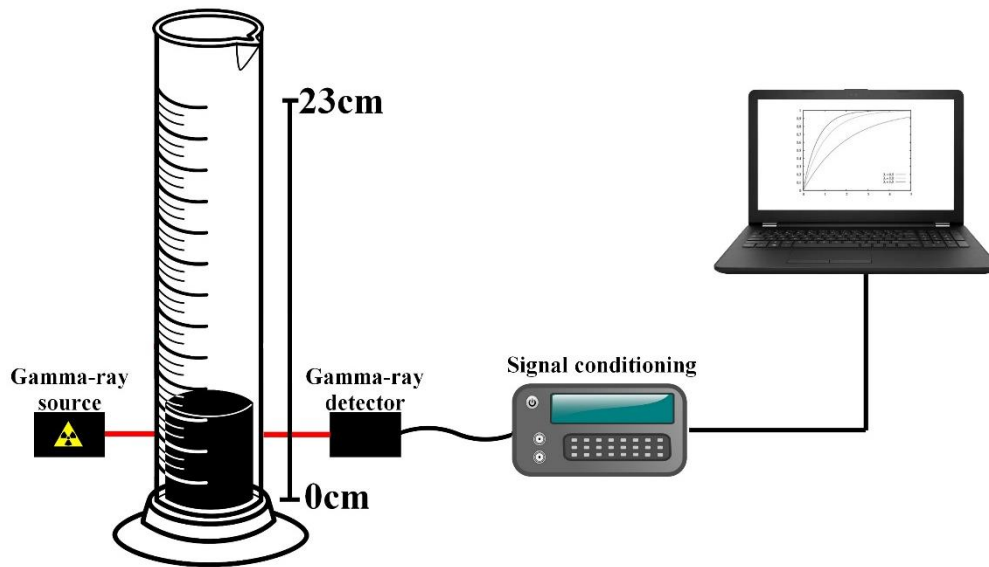
**Figura 3.2.** Curva de tensão de cisalhamento em repouso do fluido de perfuração.



**Figura 3.3.** Curva de histerese do fluido de perfuração.

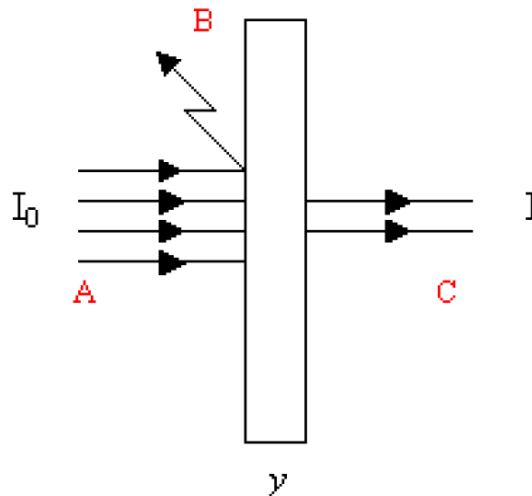
### 3.1.3. Teste de sedimentação

Foi realizado um teste de sedimentação em batelada para o fluido com as propriedades supracitadas. Foram coletadas amostras de concentração durante 90 dias em diversas cotas da coluna de sedimentação, a qual possui 23cm de altura. Os valores de concentração foram obtidos por meio da técnica de atenuação de raios gama e os testes foram realizados na unidade experimental de atenuação de radioisótopos no Laboratório de Separação Sólido-Líquido (LABSEP) da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia (figura 3.4).



**Figura 3.4.** Esquema do aparato utilizado na técnica de atenuação de raios gama.

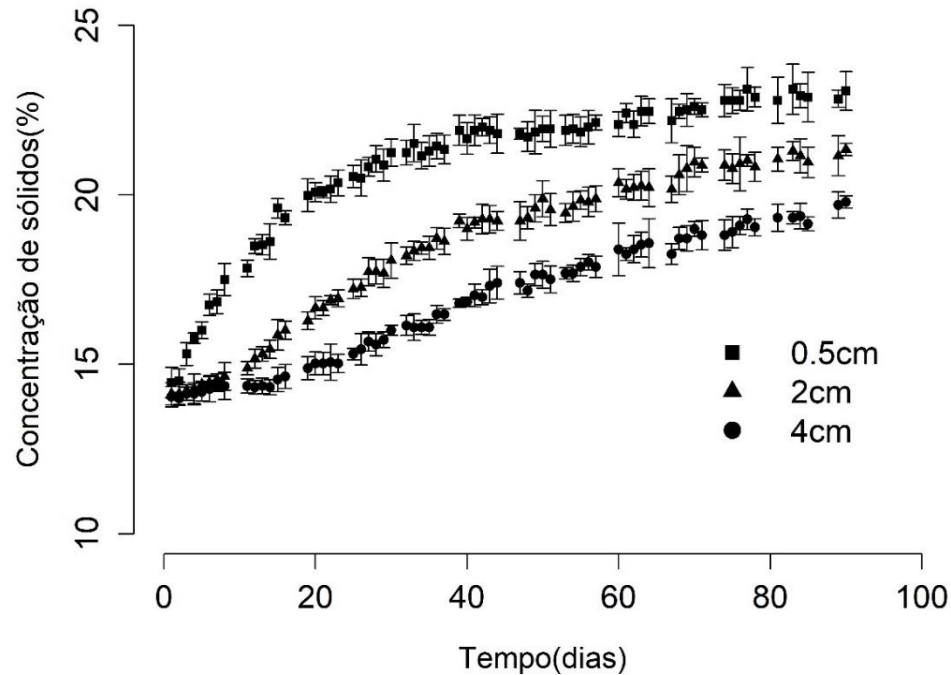
A utilização de medidas de atenuação de raios gama é uma técnica usada na obtenção indireta da concentração volumétrica de partículas no fluido para testes de sedimentação em batelada sem interferir na configuração e estabilidade do meio. Segundo Arouca (2007), observa-se que a radiação gama emitida pelo radioisótopo (A) ao atingir o meio físico com intensidade  $I_0$  pode se espalhar (B), ser atenuada pelo material ou atravessar o meio físico (C) (figura 3.5).



**Figura 3.5.** Representação dos feixes de raios gama em meio físico (AROUCA, 2007).

A partir de correlações, com os valores da intensidade  $I$ , foi possível obter os valores de concentração volumétrica de sólidos ao longo da coluna de sedimentação. A cota mais baixa da coluna de sedimentação foi utilizada para a avaliação do modelo devido ao maior interesse do

comportamento do sólido no fundo do poço de perfuração. Além disso, outras três cotas foram utilizadas para avaliação dos resultados do método de Monte Carlo. A figura 3.6 mostra as curvas de concentração durante os 90 dias nas cotas de 0,5cm, 2cm e 4cm.



**Figura 3.6.** Perfil de concentração volumétrica de sólidos no fluido de perfuração.

### 3.2. Modelo fenomenológico proposto

Para a avaliação da influência da distribuição de tamanho de partícula foi proposto um modelo baseado nas hipóteses de D'Ávila (1978) para a sedimentação em batelada, adicionando ainda a influência da reologia do fluido na modelagem matemática, para que fosse possível a avaliação de fluidos não-Newtonianos, como os fluidos utilizados na perfuração de poços. O modelo se baseia na teoria da Mecânica do Contínuo, entretanto, para a avaliação da incerteza proveniente do diâmetro da partícula, foi considerado que o sólido se comporta como material particulado e não como fase. Portanto, para esse trabalho, utilizou-se de uma abordagem híbrida entre considerações do discreto e do contínuo.

As seguintes hipóteses foram consideradas para a modelagem da sedimentação:

- Sedimentação unidimensional;

- Fase líquida incompressível;
- Efeitos de parede foram desconsiderados;
- O fluido é não-Newtoniano;
- Velocidade e taxas de cisalhamento baixas;
- Efeitos inerciais da equação do movimento foram desconsiderados;
- Velocidade das fases sólida e líquida são nulas no topo e na base da coluna;
- Sistema isotérmico.

### 3.2.1. Modelagem matemática

Com as hipóteses previamente descritas, temos as equações do movimento e da continuidade para a fase sólida da mesma forma do modelo de D'Ávila (1978),

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_s v_s}{\partial z} = 0, \quad (3.1)$$

$$\rho_s \varepsilon_s \left( \frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) = \frac{\partial T_s}{\partial z} + m + \varepsilon_s (\rho_s - \rho_f) g. \quad (3.2)$$

Utilizando a proposta de que a tensão nos sólidos depende apenas da pressão nos sólidos e que essa, por sua vez, é uma função apenas da concentração de sólidos e também desconsiderando as forças inercias da equação do movimento, tem-se

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = -\frac{\partial p_s}{\partial z} = -\frac{dp_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z}, \quad (3.3)$$

$$\rho_s \varepsilon_s \left( \frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) \cong 0, \quad (3.4)$$

$$-\frac{dP_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} + m + \varepsilon_s (\rho_s - \rho_f) g = 0. \quad (3.5)$$

### 3.2.2. Força resistiva

Diferente dos trabalhos de D'Ávila (1978) e Arouca (2007) e de outros autores como França *et al.* (1999), Damasceno (1992) e Burguer e Concha (1998), os quais levam em consideração a equação de Darcy para a força resistiva, o modelo aqui proposto tem como foco a avaliação de sistemas particulados compostos por fluidos não-Newtonianos. Dessa forma, a equação de Darcy se torna inviável visto que considera a viscosidade constante. Portanto, para representar a força resistiva para fluidos não-Newtonianos, foi utilizada a equação proposta por Telles e Massarani (1979), dada por

$$m = \frac{1}{k} \frac{T(\lambda^*)}{\lambda^*} \left[ 1 + c \frac{\rho_f \sqrt{k} \|q\|}{T(\lambda^*)/\lambda^*} + c_1 \frac{\sigma_1(\lambda^*)}{T(\lambda^*)} + c_2 \frac{\sigma_2(\lambda^*)}{T(\lambda^*)} \right] q, \quad (3.6)$$

em que  $k$  é a permeabilidade do meio,  $T(\lambda^*)$  tensão cisalhante característica,  $\lambda^*$  taxa de cisalhamento característica,  $\rho_f$  a massa específica do fluido,  $\sigma_1(\lambda^*)$  e  $\sigma_2(\lambda^*)$  as tensões normais,  $c, c_1$  e  $c_2$  fatores geométricos e  $q$  a velocidade superficial da mistura.

Pode-se observar na equação (3.6) a presença de efeitos inerciais, por meio do número de Reynolds e de efeitos de tensões normais, por meio dos números de Deborah

$$Re = c \frac{\rho \sqrt{K} \|q\|}{T(\lambda^*)/\lambda^*} \quad (3.7)$$

$$De_i = c_i \frac{\sigma_i(\lambda^*)}{T(\lambda^*)}, \quad i = 1, 2. \quad (3.8)$$

Para fins de simplificação do modelo, os números de Reynolds e Deborah foram omitidos da força de interação sólido-líquido proposta neste trabalho, devido as baixas velocidades e taxas de cisalhamento. Portanto, tem-se

$$m = \frac{1}{K} \frac{T(\lambda^*)}{\lambda^*} q. \quad (3.9)$$

Substituindo a equação (3.9) e equação (2.11) na equação (3.5), considerando que  $q = \varepsilon_f(v_s - v_f)$ , obtém-se

$$v_s = -\frac{K}{T(\lambda^*)/\lambda^*} \left[ \varepsilon_s(\rho_s - \rho_f)g - \frac{dP_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} \right]. \quad (3.10)$$

Dessa forma, para descrever completamente a velocidade dos sólidos no problema, é apenas necessária a escolha de equações constitutivas para a pressão nos sólidos, permeabilidade do meio, tensão cisalhante e taxa de cisalhamento característica.

### 3.2.3. Pressão nos sólidos

Foi utilizada como equação constitutiva para a pressão nos sólidos a equação descrita por Tiller e Leu (1980) em seu trabalho de filtração, a qual tem sido empregada no fenômeno da sedimentação por outros autores (FRANÇA, MASSARANI E BISCAIA Jr., 1999; AROUCA, 2007). Nela são considerados três parâmetros, incluindo uma concentração crítica na qual os efeitos de interação sólido-sólido começar a ser sentidos e tem a seguinte forma

$$P_s = P_a \left[ \left( \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{sc}} \right)^{\frac{1}{\beta}} - 1 \right], \quad (3.11)$$

em que  $\varepsilon_s$  é a concentração volumétrica dos sólidos,  $P_a$  e  $\beta$  parâmetros,  $\varepsilon_{sc}$  a concentração crítica.

Derivando a equação (3.11) tem-se

$$\frac{dP_s}{d\varepsilon_s} = \frac{P_a}{\beta(\varepsilon_{sc})^{\frac{1}{\beta}}} (\varepsilon_s)^{\frac{1-\beta}{\beta}}, \quad (3.12)$$

a qual será substituída na equação da velocidade dos sólidos.



### 3.2.4. Permeabilidade do meio

Para a equação constitutiva representante da permeabilidade do meio, foi proposta uma equação baseada nas equações já existentes de permeabilidade para filtração, nas quais se tem um comportamento exponencial com uma dependência quadrática do diâmetro da partícula (KOZENY, 1927; CARMAN, 1937; BRINKMAN, 1949).

Entretanto, quando se trata da sedimentação, temos que considerar que a medida que o tempo passa a permeabilidade do meio diminui chegando ao valor nulo quando a concentração de sólidos atinge uma concentração máxima. Dessa forma, foi inserida na equação proposta uma dependência não com uma concentração crítica da torta, mas com a concentração máxima da sedimentação, de forma que

$$K = K_0 \bar{d}_p^2 \left( 1 - \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{m\acute{a}x}} \right)^\Lambda, \quad (3.13)$$

em que  $K_0$  e  $\Lambda$  são parâmetros,  $\bar{d}_p$  diâmetro característico das partículas,  $\varepsilon_{m\acute{a}x}$  concentração volumétrica de sólidos máxima e  $\varepsilon_s$  concentração volumétrica de sólidos.

### 3.2.5. Taxa de cisalhamento característica

A taxa de cisalhamento característica é uma grandeza cinemática que considera a forma, tamanho e velocidade da partícula, dessa forma, Massarani e Silva Telles (1978), escreveram para o escoamento de fluidos não-newtonianos na vizinhança de partículas sólidas que

$$\lambda^* = \frac{\|\mathbf{U}\|}{d_p} \theta(\phi), \quad (3.14)$$

em que  $\mathbf{U}$  é a velocidade relativa da mistura,  $\theta(\phi)$  a função de esfericidade.

Para o escoamento unidimensional,  $\|\mathbf{U}\| = U_z = v_s - v_f$ , substituindo na equação (3.14) junto com a equação (2.11), tem-se

$$\lambda^* = \frac{v_s}{(1 - \varepsilon_s)} \frac{\theta(\phi)}{dp}. \quad (3.15)$$

Como função de esfericidade escolhida tem-se a equação de Laruccia (1990), a qual é válida para uma faixa de  $0,5 < \phi < 1,0$  e foi obtida por meio de diversos experimentos de escoamento de partículas com formas e tamanhos diferentes em fluidos não-Newtonianos. A equação é dada por

$$\theta(\phi) = -3,45\phi^2 + 5,25\phi - 1,41. \quad (3.16)$$

### 3.2.6. Tensão cisalhante

Para a proposta desse trabalho, o modelo de comportamento reológico utilizado foi o modelo desenvolvido por Ostwald (1925) e De Waele (1923), chamado de modelo da potência, dado por

$$T(\lambda^*) = -M(\lambda^*)^n. \quad (3.17)$$

Rearranjando, obtém-se

$$\frac{T(\lambda^*)}{\lambda^*} = -M(\lambda^*)^{n-1}. \quad (3.18)$$

### 3.2.7. Números adimensionais e equações adimensionalizadas

Finalmente, com as equações constitutivas (3.12), (3.13), (3.15) e (3.18) em mãos, tem-se

$$v_s = \left\{ \frac{K}{M(1 - \varepsilon_s)^{1-n}} \left[ \frac{\overline{dp}}{\theta(\phi)} \right]^{n-1} \left[ \varepsilon_s(\rho_s - \rho_f)g - \frac{dP_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} \right] \right\}^{\frac{1}{n}}. \quad (3.19)$$

Com a equação da velocidade completamente descrita, é necessário ainda definir as condições inicial e de contorno do problema, que são

$$C.I.: \quad \varepsilon_s(z, t = 0) = \varepsilon_{s0},$$

$$C.C.1: \quad q_s = \varepsilon_s v_s (z = 0, t) = 0,$$

$$C.C.2: \quad q_s = \varepsilon_s v_s (z = L, t) = 0.$$

Como condição inicial tem-se a homogeneidade da concentração de sólidos ao longo da coluna de sedimentação. As condições de contorno mostram que não há fluxo de material nem no topo nem no fundo da coluna.

A fim de facilitar a solução da equação diferencial parcial gerada pela equação da continuidade, foram propostos números adimensionais, tais que

$$\xi = \frac{t}{t_f}; \quad \eta = \frac{z}{L}; \quad \theta_s = \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s0}}; \quad u_s = \frac{v_s}{v_{s0}}; \quad N = \frac{v_{s0} t_f}{L}.$$

Conseqüentemente, a equação da continuidade, da velocidade e as condições inicial e de contorno se tornam

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \xi} + N \frac{\partial (\theta_s u_s)}{\partial \eta} = 0, \quad (3.20)$$

$$u_s = \frac{1}{v_{s0}} \left\{ \frac{K}{M(1 - \theta_s \varepsilon_{s0})^{1-n}} \left[ \frac{\overline{dp}}{\theta(\phi)} \right]^{n-1} \left[ \theta_s \varepsilon_{s0} (\rho_s - \rho_f) g - \frac{\varepsilon_{s0}}{L} \frac{dP_s}{d\varepsilon_s} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta} \right] \right\}^{\frac{1}{n}}. \quad (3.21)$$

Com condições inicial e de contorno dadas por

$$C.I.: \quad \theta_s(\eta, \xi = 0) = 1,$$

$$C.C.1: \quad q_s = \theta_s \varepsilon_{s0} u_s v_{s0} (\eta = 0, \xi) = 0,$$

$$C.C.2: \quad q_s = \theta_s \varepsilon_{s0} u_s v_{s0} (\eta = 1, \xi) = 0.$$

sendo as equações válidas para  $0 < \xi < 1$  e  $0 < \eta < 1$ .

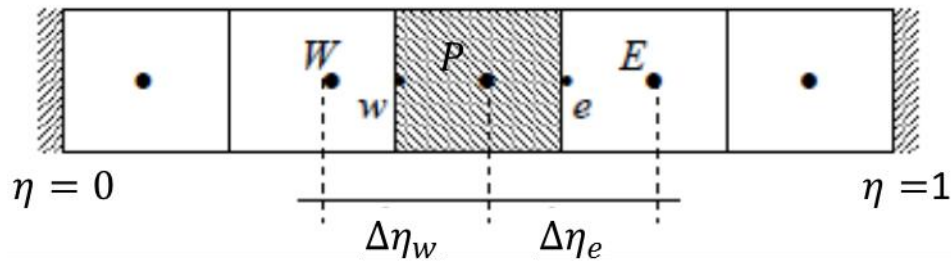
### 3.2.8. Discretização do espaço por volumes finitos

A discretização de variáveis pelo método de volumes finitos é geralmente utilizada para facilitar a resolução de equações diferenciais parciais (EDP), pois transformam EDP's em equações diferenciais ordinárias, facilitando a integração.

Portanto, para o modelo proposto, foi utilizado o método para discretizar o espaço ( $\eta$ ), gerando

$$\frac{d\theta_{s,p}}{d\xi} + N \left[ \frac{(\theta_s u_s)_e - (\theta_s u_s)_w}{\Delta\eta} \right] = 0, \quad (3.22)$$

com  $\theta_{s,p}$  sendo a concentração adimensional no centro do volume e  $(\theta_s u_s)_e$  e  $(\theta_s u_s)_w$  o fluxo de sólidos nas faces do volume, representado pela figura 3.7.



**Figura 3.7.** Esquema de discretização do espaço pelo método de volumes finitos.

Aplicando as condições de contorno na fronteira do sistema, são obtidas as equações

$$\frac{d\theta_{s,p}}{d\xi} + N \left[ \frac{(\theta_s u_s)_e}{\Delta\eta} \right] = 0; \text{ em } \eta = 0 \quad (3.23)$$

$$\frac{d\theta_{s,p}}{d\xi} - N \left[ \frac{(\theta_s u_s)_w}{\Delta\eta} \right] = 0; \text{ em } \eta = 1 \quad (3.24)$$

No volume genérico, o fluxo de sólidos nas faces  $e$  e  $w$  são obtidos pelo esquema de interpolação *up-wind*, em que a concentração de sólidos na face é aproximada pela concentração no centro do volume adjacente. Na simulação da coluna de sedimentação em batelada, a

concentração na interface do volume foi aproximada por interpolação linear, ou seja, a concentração na face a montante é a interpolação das concentrações no centro do volume central e no centro do volume a montante e a concentração na face a jusante é calculada de forma análoga.

Finalmente, definido o sistema de equações diferenciais ordinárias, o sistema foi integrado no domínio temporal usando a rotina computacional DASSL (PETZOLD, 1990), disponível para uso público.

### 3.2.9. Cálculo de pressão na coluna

Com o perfil de concentração disponível por meio da resolução do modelo fenomenológico, é possível calcular a pressão em um ponto da coluna de sedimentação num dado tempo. Para isso, foi considerado que

$$\nabla P = \rho g, \quad (3.25)$$

em que  $g$  é a aceleração da gravidade e  $\rho$  a massa específica da suspensão, dada por

$$\rho = \rho_s \varepsilon_s + \rho_f (1 - \varepsilon_s). \quad (3.26)$$

Assim, integrando, tem-se

$$P = P_0 + g \int_0^z [\rho_s \varepsilon_s + \rho_f (1 - \varepsilon_s)] dz \quad (3.27)$$

com  $0 < z < L$ .

### 3.3. Meta-modelo

Como mencionado anteriormente, na seção 2.3.3, o método MCMC demanda um grande número de execuções do modelo. Além de ser necessária a sintonia da variância da distribuição proposta quando utilizado o algoritmo de M-H, não há como calcular a quantidade mínima de iterações para garantir a convergência da cadeia.

O tempo de execução do modelo utilizado nesse trabalho é de, em média, 5 minutos, considerando execuções em que o integrador não consegue realizar o cálculo de forma rápida. Dessa forma, a necessidade de realizar milhares de execuções sem a garantia de convergência seria inviável.

Por isso, para a realização do método MCMC, foi desenvolvido um meta-modelo dependente do tempo e do diâmetro da partícula, baseado no comportamento exponencial apresentado pela cota de 0,5cm na saída do modelo completo. O meta-modelo possui semelhança também com a solução analítica da equação do movimento quando considerados dois volumes de controle na coluna de sedimentação. Dessa forma, obteve-se

$$M^*(\bar{d}p, t) = \varepsilon_0 + (\varepsilon_{m\acute{a}x} - \varepsilon_0)[1 - \exp(-t \cdot a \cdot \bar{d}p^b)] \quad (3.28)$$

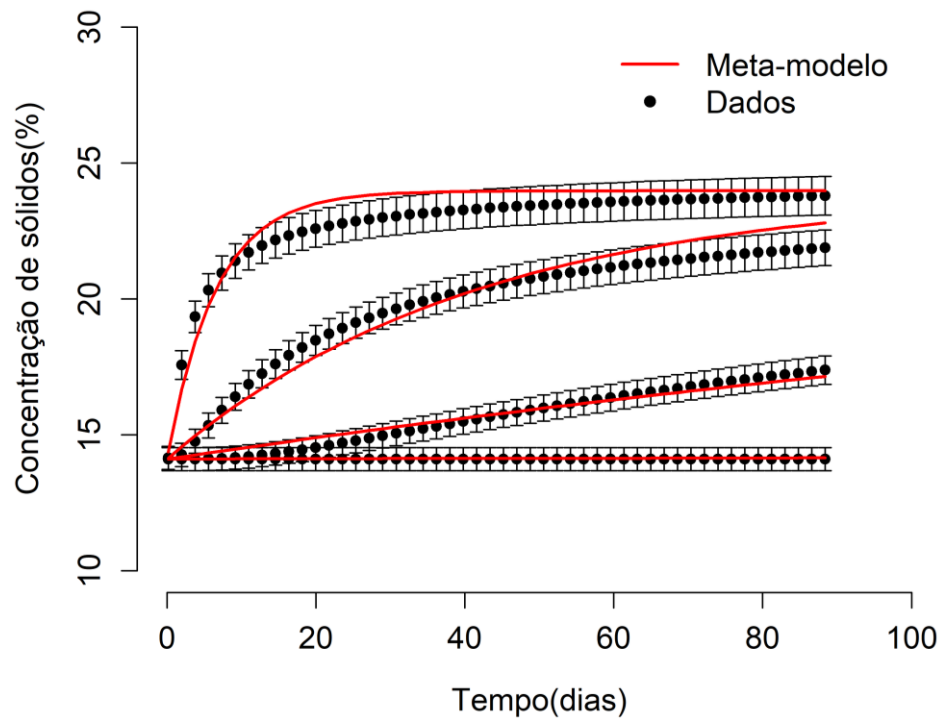
em que  $M^*(\bar{d}p, t)$  é a saída do meta-modelo,  $\varepsilon_{m\acute{a}x}$  a concentração máxima de sólidos,  $\varepsilon_0$  a concentração inicial de sólidos,  $t$  o tempo,  $\bar{d}p$  o diâmetro da partícula e  $a$  e  $b$  os parâmetros do meta-modelo.

Para seu desenvolvimento, foi feito um mapeamento dos valores de saída do modelo para vários diâmetros sorteados da distribuição granulométrica das partículas. Subsequentemente, os valores foram utilizados como dados pseudo-experimentais para a estimação dos parâmetros do meta-modelo considerando um desvio padrão de 3% do valor do dado. Para facilitar a estimação, foi considerado que  $a = 10^{\omega_1}$ ,  $b = 10^{\omega_2}$  e  $\varepsilon_{m\acute{a}x} = 10^{\omega_3}$ , os resultados foram resumidos na tabela 3.4.

**Tabela 3.4.** Parâmetros estimados para o meta-modelo.

Parâmetro	Valor estimado	Desvio Padrão
$\omega_1$	12,821	6,04E-02
$\omega_2$	0,487	1,82E-03
$\omega_3$	1,380	2,30E-04

Foram escolhidos 4 diâmetros diferentes para comparar a saída do meta-modelo com as saídas do modelo completo. As saídas foram plotadas na figura 3.8.



**Figura 3.8.** Comparação entre dados de saída do meta-modelo e do modelo completo variando o diâmetro da partícula.

### 3.4. Especificações da distribuição *a priori*

Na inferência Bayesiana é necessário especificar a distribuição *a priori* de todas as quantidades do modelo que serão consideradas parâmetros e estimadas, geralmente, assumindo a independência *a priori* entre cada parâmetro. Portanto, as próximas seções visam descrever a

obtenção da distribuição *a priori* do diâmetro da partícula por meio de sua distribuição granulométrica e também a designação de distribuições para os demais parâmetros do modelo.

### 3.4.1. Diâmetro da partícula

A distribuição de tamanho de partículas fornecida pela análise granulométrica da barita por meio do equipamento MALVERN – Mastersizer Hydro 2000UM (figura 3.9) foi utilizada na obtenção da distribuição *a priori* do diâmetro da partícula. O equipamento utiliza a técnica de difração a laser para determinar um ângulo de espalhamento em função do tamanho das partículas.

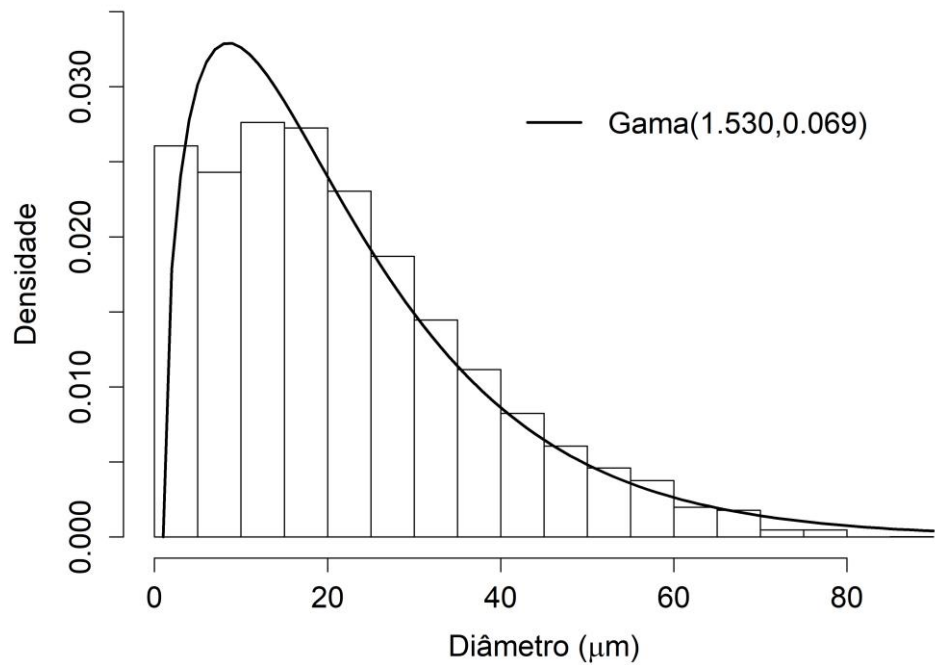


**Figura 3.9.** Imagem do equipamento MALVERN - Mastersizer Hydro 2000UM.

Como opções de distribuição *a priori* possíveis para esse tipo de distribuição, tem-se distribuições gama, log-normal, Weibull etc. Entretanto, foi escolhida a distribuição gama, com função densidade de probabilidade dada pela equação (3.29), por ter um ajuste mais adequado por meio do método da máxima verossimilhança e também por ser uma distribuição bem conhecida. A figura 3.10 representa o histograma da distribuição granulométrica de barita com sua devida distribuição *a priori* ajustada para o método MCMC.

$$p(x; \alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha x^{\alpha-1} \exp(-\beta x)}{\Gamma(\alpha)}. \quad (3.29)$$





**Figura 3.10.** Distribuição de tamanho de partículas de barita com distribuição ajustada Gama(1,53;0,069).

Para a realização do método RML, as distribuições *a priori* devem ser distribuições normais. Dessa forma, foi proposta uma distribuição log-normal para  $\overline{dp}$ , pois se  $X \sim \text{Lognormal}(\mu, \sigma^2)$ , então  $Y \sim \text{Normal}(\mu, \sigma^2)$  se  $Y = \ln(X)$ . Portanto, o método RML irá estimar  $\ln(\theta_i)$ , e não o valor de  $\theta_i$  em si. Assim, utilizando o método da máxima verossimilhança, foi ajustada para o diâmetro da partícula uma distribuição log-normal dada por  $\overline{dp} \sim \text{Lognormal}(-11,08; 1,10)$ .

### 3.4.2. Demais parâmetros

Para a simulação de Monte Carlo, foram designadas distribuições uniformes aos demais parâmetros do modelo devido ao não conhecimento de seus comportamentos. Os valores limiares das distribuições uniformes foram definidos por meio de investigação de valores possíveis dos parâmetros assumirem e estão resumidos na tabela 3.5.

**Tabela 3.5.** Distribuições *a priori* para os demais parâmetros utilizados nos métodos Monte Carlo e MCMC.

<b>Parâmetro</b>	<b>Distribuição</b>
$K_0$	Uniforme(0,5; 30)
$\Lambda$	Uniforme(1; 2)
$P_a$	Uniforme(5; 60)
$\beta$	Uniforme(0,1; 0,9)
$\varepsilon_{m\acute{a}x}$	Uniforme(0,20; 0,26)
$\varepsilon_{sc}$	Uniforme(0,15; 0,25)

Entretanto, todos os parâmetros do modelo assumem apenas valores positivos, impossibilitando a designação de distribuições normais, pois essas têm suporte variando de  $-\infty$  a  $+\infty$ . Portanto, os valores de média e variância das distribuições log-normal designadas para os demais parâmetros no método RML foram baseados nos valores limiares de suas respectivas distribuições uniformes anteriores, como descrito na tabela 3.6.

**Tabela 3.6.** Distribuições *a priori* utilizadas no método RML.

<b>Parâmetro</b>	<b>Distribuição</b>
$K_0$	Log-normal(2,4; 0,4)
$\Lambda$	Log-normal(0,45; 0,13)
$P_a$	Log-normal(3,3; 0,4)
$\beta$	Log-normal(-1; 0,3)
$\varepsilon_{m\acute{a}x}$	Log-normal(-1,4; 0,08)
$\varepsilon_{sc}$	Log-normal(-1,6; 0,15)

### 3.5. Modelo probabilístico

Seja  $C_t$  e  $M(\boldsymbol{\theta}, t)$  as componentes do vetor de dados e do vetor de saída do modelo de sedimentação no tempo  $t$  respectivamente. Assume-se que  $C_t$  tem distribuição normal com média na saída do modelo e variância  $\sigma^2$ , sendo definida como  $C_t \sim N(M(\boldsymbol{\theta}, t), \sigma^2)$  com  $\boldsymbol{\theta} = (\bar{d}p, K_0, \Lambda, P_a, \beta, \varepsilon_{sc}, \varepsilon_{m\acute{a}x})$ . A escolha da normal como representante parte do pressuposto de que

não há conhecimento específico da forma do erro experimental, assim, admite-se uma distribuição bem conhecida e simétrica. Além disso, o método RML demanda que os dados sejam representados pelo modelo normal.

Dessa forma, assumindo independência entre os erros experimentais, a função de verossimilhança do vetor de parâmetros do modelo é dada por

$$p(\mathbf{C}|\boldsymbol{\theta}, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{-T/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^T (C_t - M(\boldsymbol{\theta}, t))^2\right\}, \quad (3.30)$$

sendo  $T$  o número de dados no tempo e  $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_T)$ .

### 3.6. Distribuição *a posteriori*

A distribuição *a posteriori* é obtida combinando-se a função de verossimilhança com a distribuição *a priori* do vetor paramétrico. Para o método de MCMC utilizou-se o meta-modelo como modelo avaliado (termo que aparece na função de verossimilhança, equação (3.30)), que depende apenas do diâmetro da partícula. Portanto, nesse caso, o único parâmetro do modelo fenomenológico a ser estimado será o diâmetro da partícula.

Para completar a especificação da distribuição *a priori*, é necessário atribuir uma distribuição ao parâmetro variância ( $\sigma^2$ ). A variância do problema foi considerada desconhecida, permitindo que também sua estimação. Essa consideração foi feita devido a existência de um erro propagado ao se utilizar um meta-modelo como opção, o qual engloba o erro experimental, o erro de estimação de parâmetros do modelo determinístico e o erro de estimação dos parâmetros do meta-modelo. Dessa forma, atribui-se uma distribuição gama invertida ( $\sigma^2 \sim \text{InvGama}(a, b)$ ) para a facilitação dos cálculos e por ser uma distribuição amplamente utilizada na estimação da variância. Sua função de densidade de probabilidade é dada por

$$p(\sigma^2; a, b) = \frac{\beta^a (\sigma^2)^{-a-1} \exp(-b/\sigma^2)}{\Gamma(a)}. \quad (3.31)$$

Como definido na seção 3.4.1, temos que  $\bar{dp} \sim Gama(\alpha, \beta)$  cuja função de densidade de probabilidade é dada por

$$p(\bar{dp}; \alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha \bar{dp}^{\alpha-1} \exp(-\beta \bar{dp})}{\Gamma(\alpha)}, \quad (3.32)$$

Assim, pelo teorema de Bayes, podemos escrever a distribuição *a posteriori* como

$$p(\bar{dp}, \sigma^2 | \mathbf{C}) \propto (\sigma^2)^{-a^*-1} (\bar{dp})^{\alpha-1} \exp \left\{ -\frac{b^*}{\sigma^2} - \beta \bar{dp} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^T (C_t - M^*(\bar{dp}, t))^2 \right\}, \quad (3.33)$$

e as respectivas distribuições condicionais completas *a posteriori* (distribuições dos parâmetros condicionada aos dados) de  $\bar{dp}$  e  $\sigma^2$  como

$$p(\bar{dp} | \cdot) \propto (\bar{dp})^{\alpha-1} \exp \left\{ -\beta \bar{dp} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^T (C_t - M^*(\bar{dp}, t))^2 \right\}, \quad (3.34)$$

$$p(\sigma^2 | \cdot) \propto (\sigma^2)^{-a^*-1} \exp \left\{ -\frac{b^*}{\sigma^2} \right\}. \quad (3.35)$$

Finalmente, pode-se observar que a distribuição condicional completa *a posteriori* da variância é  $\sigma^2 \sim InvGamma(a^*, b^*)$ , com  $a^* = a + \frac{T}{2}$  e  $b^* = b + \frac{1}{2} \sum_{t=1}^T (C_t - M^*(\bar{dp}, t))^2$ , podendo ser amostrada diretamente pelo amostrador de Gibbs. Já a distribuição de  $\bar{dp}$  não tem padrão definido, ou seja, é necessária a inclusão de um passo de Metropolis-Hastings no amostrador de Gibbs.

A ideia inicial era estimar todos os parâmetros envolvidos no modelo fenomenológico. Devido a inviabilidade da implementação via o método MCMC, optou-se pelo uso do método RML. Nesse caso, atribui-se uma distribuição normal para cada componente  $\theta_i$  do vetor paramétrico  $\boldsymbol{\theta} = (\bar{dp}, K_0, \Lambda, P_a, \beta, \varepsilon_{sc}, \varepsilon_{m\acute{a}x})$ , com função densidade de probabilidade dada por

$$p(\theta_i) = \frac{1}{(2\pi D_{\theta_i})^{-\frac{1}{2}}} \exp\left\{-\frac{1}{2D_{\theta_i}}(\theta_i - \mu_i)^2\right\}, \quad (3.36)$$

em que  $\mu_i$  é a média e  $D_{\theta_i}$  é a variância de cada distribuição *a priori*.

Foi utilizada como variância a própria variância dos dados, visto que o método permite a utilização do modelo completo para avaliação. Dessa forma, a distribuição *a posteriori* é dada por

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{C}) \propto \exp\left\{-\left(\|\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{t}) - \mathbf{C}\|_{D_M^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu}\|_{D_\theta^{-1}}^2\right)\right\}. \quad (3.37)$$

Sabendo que  $NP$  é o número de parâmetros estimados e que as matrizes de covariância são  $D_M = \text{diag}\{D_{M_1}, \dots, D_{M_T}\} = \text{diag}\{\sigma^2, \dots, \sigma^2\}$  e  $D_\theta = \text{diag}\{D_{\theta_1}, \dots, D_{\theta_{NP}}\}$ , tem-se

$$\|\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{t}) - \mathbf{C}\|_{D_M^{-1}}^2 = \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^T (C_t - M(\boldsymbol{\theta}, t))^2, \quad (3.38)$$

$$\|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu}\|_{D_\theta^{-1}}^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{NP} \frac{(\theta_i - \mu_i)^2}{D_{\theta_i}}. \quad (3.39)$$

Entretanto, como mencionado anteriormente, todos os parâmetros do modelo assumem apenas valores positivos, impossibilitando a designação de distribuições normais. Portanto ao contrário de estimar o valor direto do parâmetro, irá se estimar o logaritmo natural do parâmetro, de forma que  $\boldsymbol{\delta} = \ln(\boldsymbol{\theta})$  e

$$p(\boldsymbol{\delta}|\mathbf{C}) \propto \exp\left\{-\left(\|\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{t}) - \mathbf{C}\|_{D_M^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\mu}\|_{D_\theta^{-1}}^2\right)\right\}. \quad (3.40)$$

### 3.7. Linguagem computacional e processamento

Todos os códigos utilizados nesse trabalho foram desenvolvidos em linguagem Fortran 90 e as saídas gráficas foram produzidas no R (THE COMPREHENSIVE R ARCHIVE NETWORK,

2018). A execução dos algoritmos foi realizada em dois computadores diferentes, um com processador de dois núcleos e memória RAM de 8Gb e outro com processador de 64 núcleos com memória RAM de 256Gb.

## 4. Resultados e discussões

Nas próximas seções foram apresentados os resultados e discussões obtidos na análise da influência da distribuição do diâmetro da partícula e dos demais parâmetros no modelo de sedimentação por meio dos métodos de Monte Carlo, MCMC e RML.

### 4.1. Monte Carlo

As análises pelo método de Monte Carlo foram feitas a partir de amostras aleatórias das distribuições *a priori* dos parâmetros e a execução do modelo para cada uma delas, possibilitando avaliar as saídas do modelo e realizar análises estatísticas para comparação dos resultados. Para isso, foram realizadas amostragens da distribuição *a priori* de cada parâmetro por meio do método de planejamento amostral hipercubo latino, o qual é amplamente utilizado para avaliações de incerteza de modelo (SANTNER *et al.*, 2003). Os hipercubos latinos foram gerados com o auxílio da sub-rotina *lhs* (LSH, 2018) disponível gratuitamente dentro do software R.

Um hipercubo latino é um planejamento de amostragem no qual o espaço amostral é subdividido em partes menores para que a amostragem seja mais uniforme, reduzindo o número de amostras necessárias para garantir que todo o espaço foi compreendido. Para esse trabalho, foi utilizada uma versão do planejamento na qual é realizada a maximização da distância mínima entre os pontos amostrados, chamada de planejamento *maximin* hipercubo latino. Essa maximização otimiza a amostragem e a cobertura do espaço amostral dos parâmetros.

Assim, foram feitas três diferentes análises dos resultados obtidos via método de Monte Carlo. Inicialmente, foi realizada uma análise de sensibilidade dos parâmetros do modelo. Em segundo, a avaliação de um diâmetro característico ótimo para se utilizar como parâmetro na modelagem. Finalmente, a análise de probabilidades de valores de saída do modelo. As próximas seções visam a descrição dos resultados obtidos e suas discussões.

#### 4.1.1. Análise de sensibilidade dos parâmetros

O método de Monte Carlo pode ser empregado na avaliação da sensibilidade dos parâmetros dado o modelo, ou seja, o quão significativos são e como influenciam a saída do modelo.

O modelo tem como saída o perfil de concentração de sólidos no tempo e no espaço. Entretanto, foi utilizada a cota mais baixa da coluna de sedimentação (0,5cm) e o tempo final de sedimentação (90 dias) para ilustrar a avaliação de sensibilidade dos parâmetros, pois esses são os dados mais relevantes para a avaliação do problema da sedimentação na indústria petrolífera. Um estudo de todas os pontos da coluna seria interessante, mas consumiria muito tempo. Dessa forma, foram realizadas 12000 execuções do modelo para avaliar os parâmetros  $\theta = (\overline{dp}, K_0, \Lambda, P_a, \beta, \varepsilon_{sc}, \varepsilon_{m\acute{a}x})$ . Os resultados foram analisados, sendo descartados os que apresentaram erro de execução, restando aproximadamente 9000 execuções.

Para a avaliação, foram plotados gráficos de dispersão para cada parâmetro, relacionando a saída do modelo e o valor do parâmetro sorteado. Subseqüentemente, realizou-se uma regressão linear para a geração de uma curva que indica a influência do parâmetro no modelo. Além disso, foi realizado o teste de significância do coeficiente angular. Esse tipo de avaliação visa avaliar se, na regressão linear, a hipótese de que o coeficiente angular é nulo é verdadeira. Dessa forma, valores altos de p-valor indicam hipótese verdadeira, ou seja, o coeficiente angular tem alta probabilidade de ser nulo, conseqüentemente, a variação do parâmetro não influencia de forma significativa o modelo. Os cálculos foram realizados no software R por meio das sub-rotinas referentes a regressão linear (*lm*) e análise de variância (*anova*). Os valores estimados dos coeficientes das retas obtidas pela regressão linear estão descritos na tabela 4.1 com seus desvios e o p-valor obtido na análise de variância.

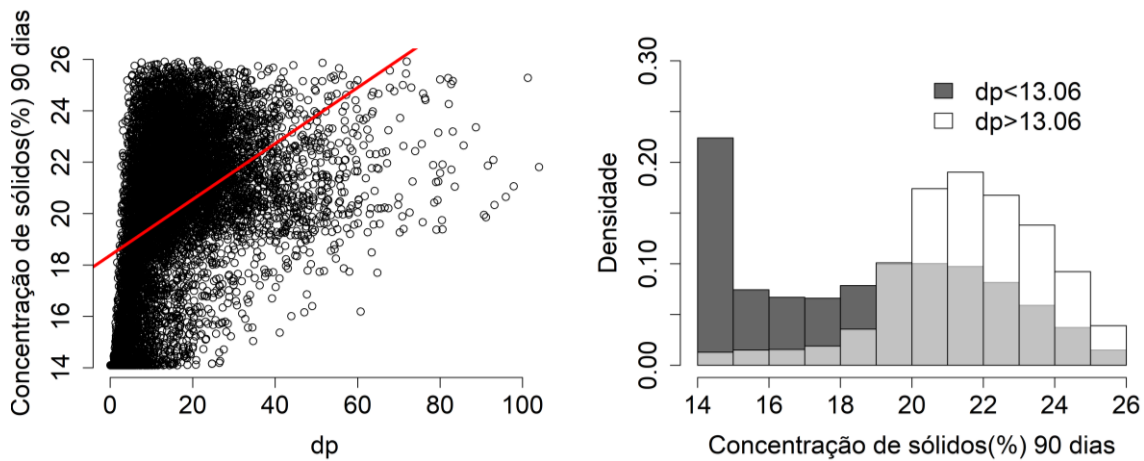
**Tabela 4.1.** Valores estimados dos coeficientes da reta de regressão e teste de significância do coeficiente angular.

Parâmetro	Coef. Angular	Desvio Padrão	Coef. Linear	Desvio Padrão	P-valor
$\overline{dp}$	0,109	0,002	18,377	0,049	~ 0
$K_0$	0,108	0,004	18,652	0,061	~ 0
$\Lambda$	-1,889	0,116	22,992	0,179	~ 0
$P_a$	5,956e-05	2,121e-03	20,110	0,076	0,978
$\beta$	-0,110	0,146	20,166	0,080	0,451
$\varepsilon_{sc}$	65,650	1,821	5,076	0,418	~ 0
$\varepsilon_{m\acute{a}x}$	16,229	1,164	16,831	0,238	~ 0

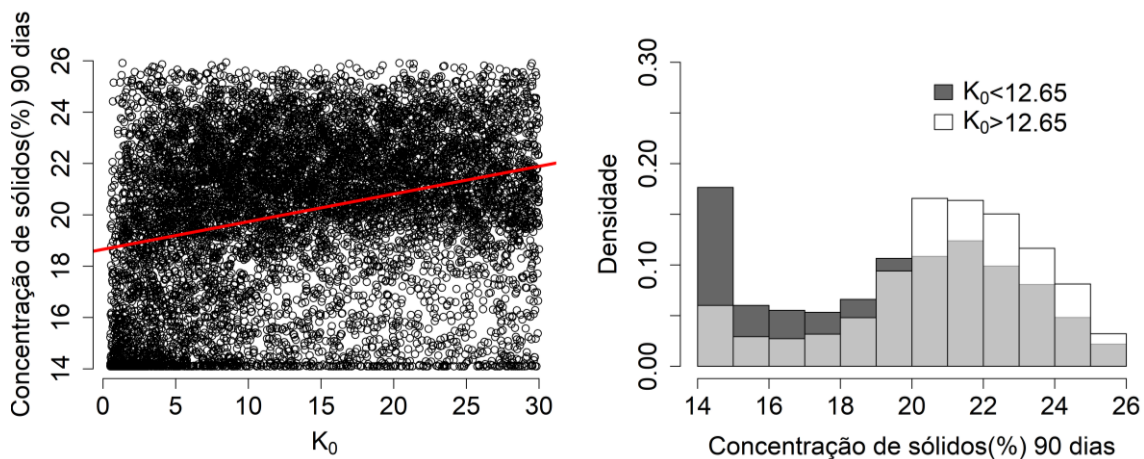


Ainda foram realizadas comparações entre as distribuições de concentração para valores menores e maiores que a mediana da distribuição dos valores sorteados dos parâmetros, mostrados nas figuras 4.1 a 4.7 (já excluindo os valores descartados por causa de erros de execução).

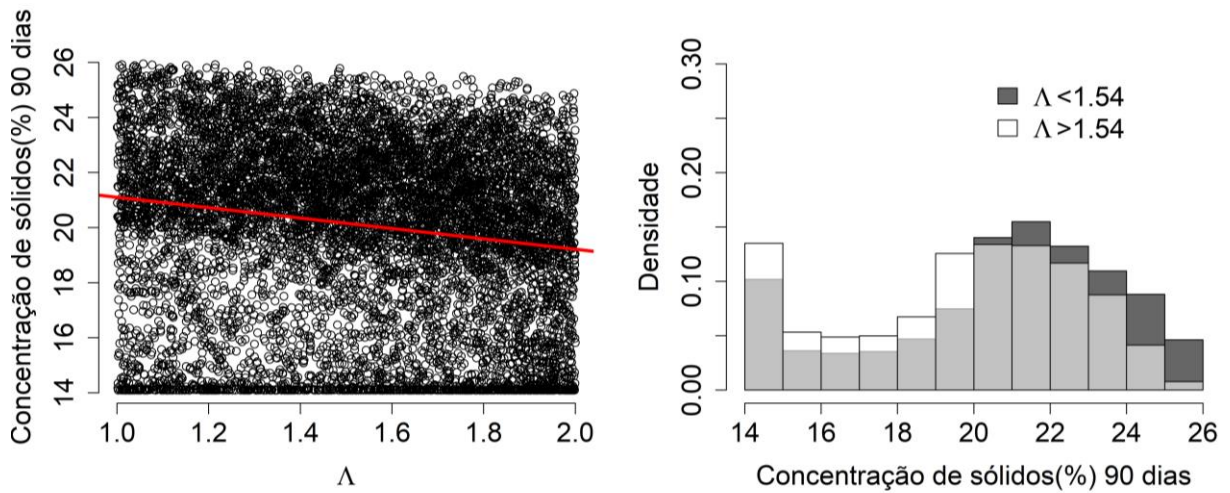
Dentre os parâmetros que demonstraram influência na cota 0,5cm e no tempo de 90 dias, tem-se os parâmetros da permeabilidade  $K_0$ ,  $\lambda$  e  $\varepsilon_{máx}$ , bem como o diâmetro da partícula ( $\overline{dp}$ ) e a concentração crítica ( $\varepsilon_{sc}$ ). Pode-se observar uma diferença entre as distribuições avaliadas (figuras 4.1-4.3, 4.6, 4.7) e também valores de p-valor próximos de zero (tabela 4.1), ou seja, probabilidade quase nula do coeficiente angular do modelo linear ser igual à zero. De forma contrária, os parâmetros  $P_a$  e  $\beta$  tiveram distribuições muito parecidas (figuras 4.4 e 4.5) e valores de p-valor altos, mostrando que ambos têm pouca influência na saída do modelo avaliada. No geral, os parâmetros que demonstraram influenciar a velocidade de sedimentação negativamente quando aumentados foram  $\lambda$  e  $\beta$ , fato característico das equações propostas.



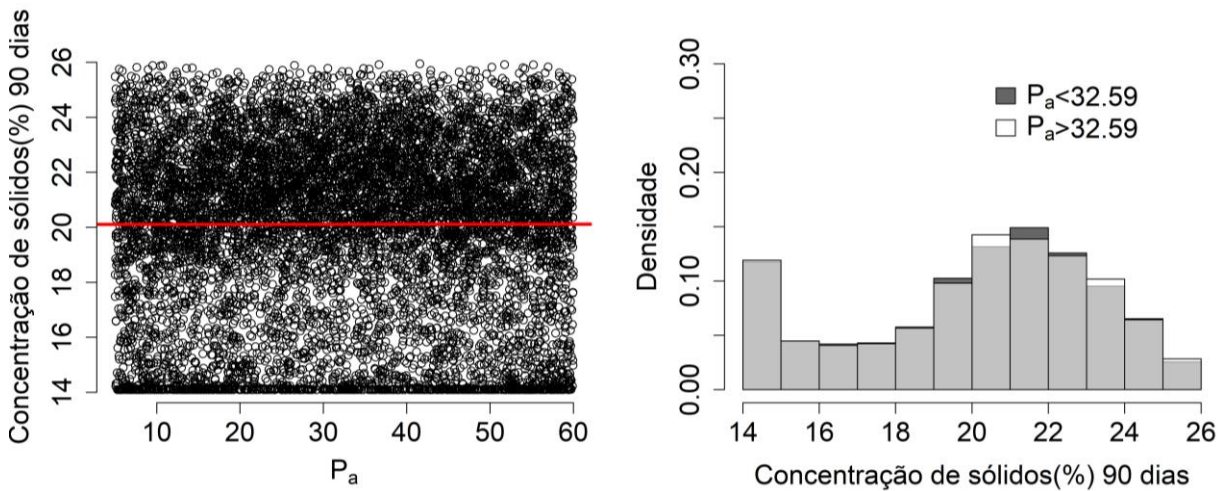
**Figura 4.1.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $\overline{dp}$ .



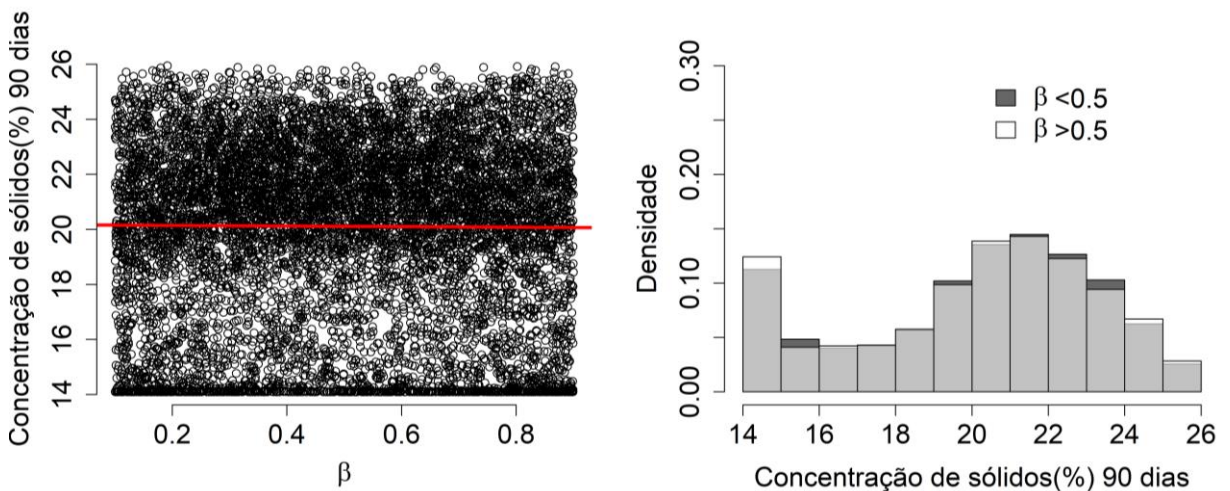
**Figura 4.2.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $K_0$ .



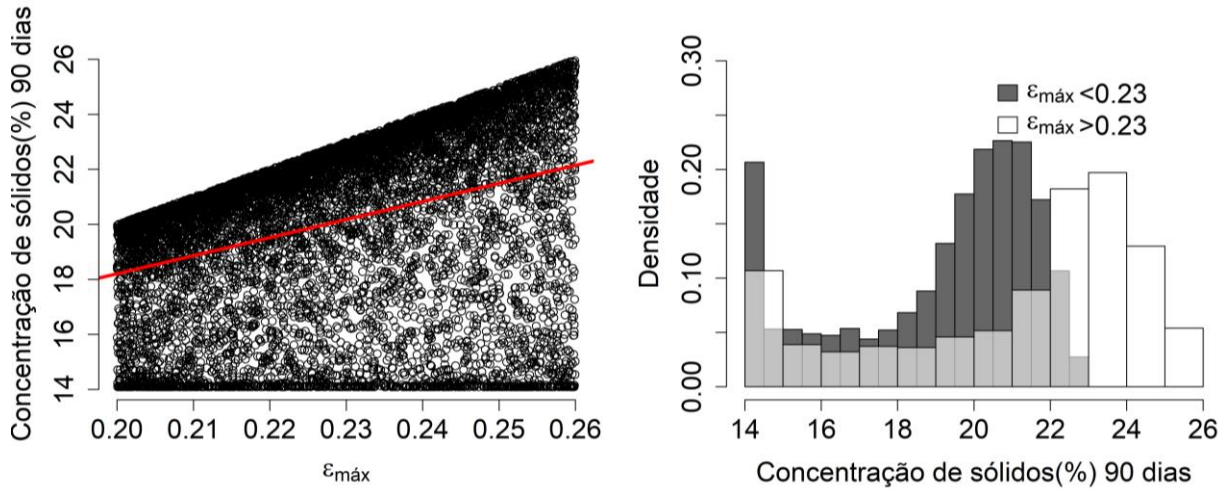
**Figura 4.3.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $\Lambda$ .



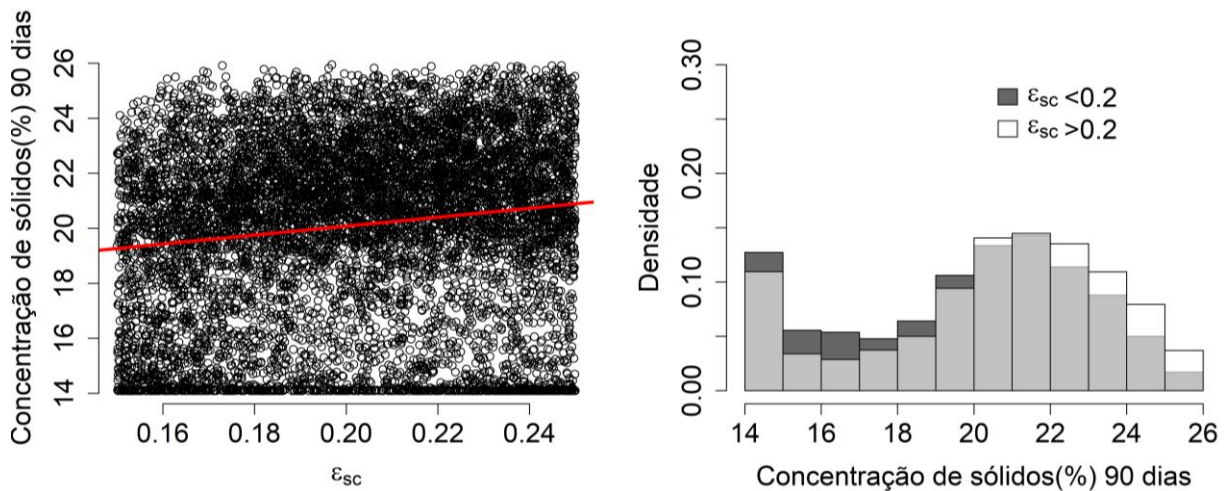
**Figura 4.4.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $P_a$ .



**Figura 4.5.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $\beta$ .



**Figura 4.6.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $\epsilon_{máx}$ .



**Figura 4.7.** Gráfico de dispersão (à esquerda) e histogramas de comparação (à direita) para  $\epsilon_{sc}$ .

#### 4.1.2. Análise de probabilidades de saídas do modelo

Outra função do método de Monte Carlo é a avaliação de probabilidades acerca das saídas do modelo. Por exemplo, pode-se calcular qual a probabilidade da concentração de sólidos ser maior ou menor do que um valor específico, como uma concentração crítica, ou de estar contida em um intervalo definido.

Para essa avaliação, foi utilizado o mesmo Monte Carlo simulado para a avaliação da sensibilidade dos parâmetros. Avaliou-se a cota mais baixa da coluna de sedimentação (0,5cm) em 6 tempos diferentes (9, 27, 36, 45, 63 e 90 dias). Para cada tempo, foi avaliada a probabilidade da

concentração de sólidos ser menor que 14,2% (não houve sedimentação) ou maior que 22% (concentração experimental). Os resultados estão resumidos na tabela 4.2, na qual pode-se observar um aumento de probabilidade de sedimentação durante o tempo, comportamento condizente com o comportamento físico do processo. Pode-se observar que a probabilidade de não ter sedimentado diminui com o tempo, o que consiste com o fenômeno. Por outro lado, a probabilidade da concentração ser maior do que uma concentração limitante aumenta com o tempo.

**Tabela 4.2.** Probabilidades envolvendo a concentração de sólidos na cota de 0,5cm em diferentes tempos.

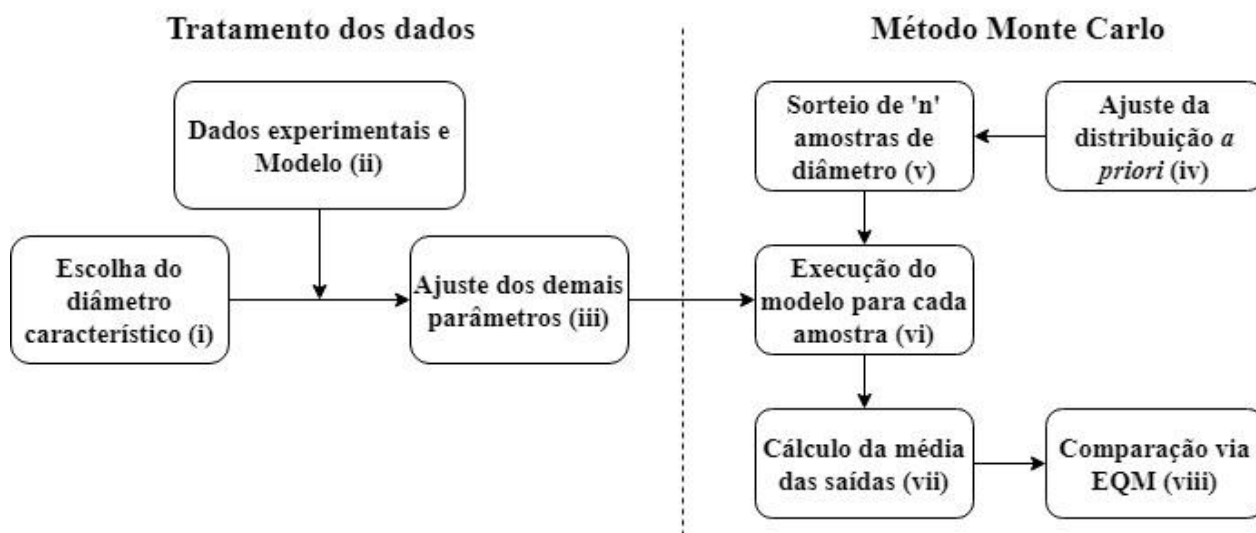
Tempo (dias)	Probabilidade	Probabilidade
	$C_t(0,5) < 14,2\%$	$C_t(0,5) > 22\%$
9	14,97%	13,01%
27	10,19%	22,04%
36	9,28%	24,19%
45	8,76%	25,95%
63	7,81%	28,59%
90	6,85%	31,48%

#### 4.1.3. Diâmetro característico ótimo

A abordagem em engenharia para problemas que levam em conta sistemas particulados com distribuições granulométricas como parâmetro para o diâmetro da partícula, geralmente, é a utilização de um diâmetro característico para a realização dos cálculos. Esse diâmetro característico pode ser obtido via métodos estatísticos como cálculo de momentos, moda, média de distribuições e cálculos ponderados que levam em conta número de partículas, área superficial, volume, etc (ALLEN, 2003; ALDERLIESTEN, 2008; KOWALCZUK E DRZYMALA, 2016). Entretanto, a escolha do diâmetro característico é subjetiva, geralmente é feita por convenções, como o diâmetro médio de Sauter para sistemas particulados, sem levar em conta sua validade.

Dessa forma, o método de Monte Carlo mostrou-se uma alternativa para a avaliação do diâmetro característico ideal dado o modelo e o dado experimental avaliado. Para isso foram realizadas avaliações de diferentes diâmetros característicos retirados da distribuição granulométrica das partículas. O esquema da metodologia pode ser observado na figura 4.8, o qual

foi dividido em duas partes. A parte 1 é a preparação dos dados experimentais juntamente com a escolha dos diâmetros característicos a serem avaliados, seguida da estimação dos demais parâmetros do modelo. Subsequentemente, a parte 2 trata do método de Monte Carlo em si, acoplado a avaliação de diâmetros característicos ótimos por meio de comparação via erro quadrático médio.

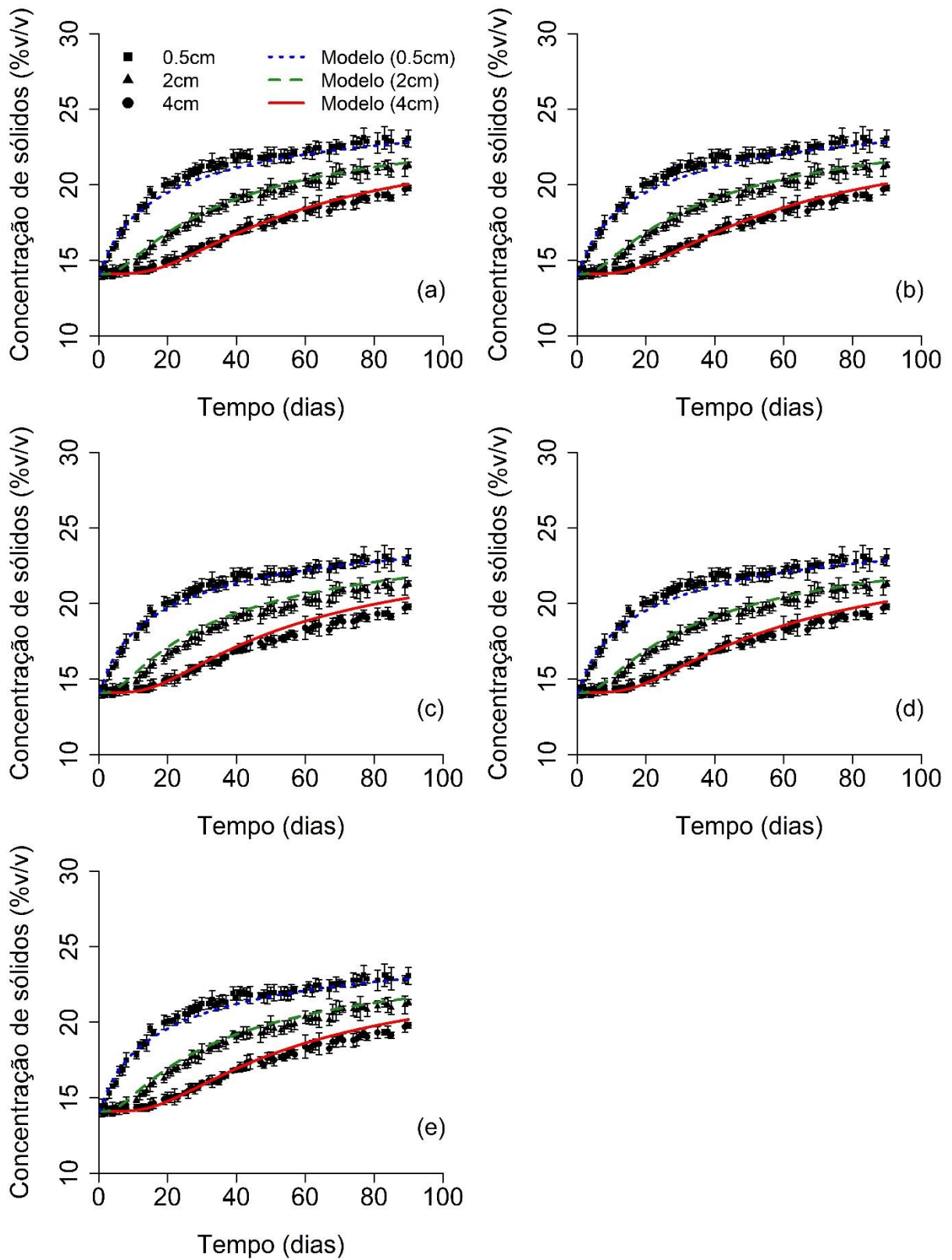


**Figura 4.8.** Esquema de execução do método Monte Carlo para obtenção do diâmetro característico ótimo.

### Parte 1: Tratamento dos dados

Cinco diferentes diâmetros característicos (tabela 4.3) foram escolhidos por meio da distribuição granulométrica da barita (i). Os dados experimentais e o modelo (ii) foram utilizados para estimar os demais parâmetros ( $K_0, \Lambda, P_a, \beta, \varepsilon_{m\acute{a}x}, \varepsilon_{sc}$ ) para cada um dos diâmetros escolhidos (iii) (tabela 4.4) por meio de estimação por investigação, visto que, devido à complexidade do modelo, a estimação por meio de estimadores robustos seria computacionalmente custosa. A fim de comprovar uma boa estimação, uma comparação entre os dados experimentais e o modelo para cada estimação foi fornecida na figura 4.9. Foi observado que o parâmetro que provia maior influência dada a variação do diâmetro característico era o da permeabilidade ( $K_0$ ) para a região de sedimento avaliada. Dessa forma, os demais parâmetros foram mantidos fixos.





**Figura 4.9.** Comparação entre os dados experimentais e o modelo para os diferentes diâmetros característicos avaliados (a) 7,2 $\mu$ m, (b) 10 $\mu$ m, (c) 15 $\mu$ m, (d) 19 $\mu$ m e (e) 22 $\mu$ m.

**Tabela 4.3.** Diâmetros avaliados e seus significados.

$\overline{dp}$ ( $\mu\text{m}$ )	Significado
7,2	Diâmetro médio de Sauter
10,0	-
15,0	-
19,0	Mediana
22,0	Média

**Tabela 4.4.** Parâmetros ajustados para cada diâmetro característico escolhido.

$\overline{dp}$	$K_0$	$\Lambda$	$Pa$	$\beta$	$\epsilon_{sc}$	$\epsilon_{m\acute{a}x}$
7,2	15,0	1,6	30,0	0,2	0,215	0,26
10,0	9,5	1,6	30,0	0,2	0,215	0,26
15,0	5,5	1,6	30,0	0,2	0,215	0,26
19,0	3,8	1,6	30,0	0,2	0,215	0,26
22,0	3,1	1,6	30,0	0,2	0,215	0,26

## Parte 2: Método de Monte Carlo

Os valores dos parâmetros estimados para cada diâmetro característico foram utilizados na avaliação da incerteza proveniente da distribuição granulométrica. Para isso, foram sorteados, pelo método de amostragem hipercubo latino *maximin*, 2000 diâmetros (v) da distribuição *a priori* previamente ajustada pela distribuição de tamanho de partículas (iv). O modelo foi executado com cada um dos cinco conjuntos paramétricos para cada uma das 2000 amostras de diâmetro (vi), gerando 2000 saídas para cada conjunto paramétrico. As saídas do modelo eram compostas por três perfis de concentração das cotas de 0,5cm, 2cm e 4cm. A partir desses perfis gerados, foram calculados perfis médios de concentração (vii). Finalmente, o erro quadrático médio (EQM), dado por

$$\text{EQM} = \frac{\sum_{i=1}^T (y_i^e - y_i^m)^2}{T}, \quad (4.1)$$

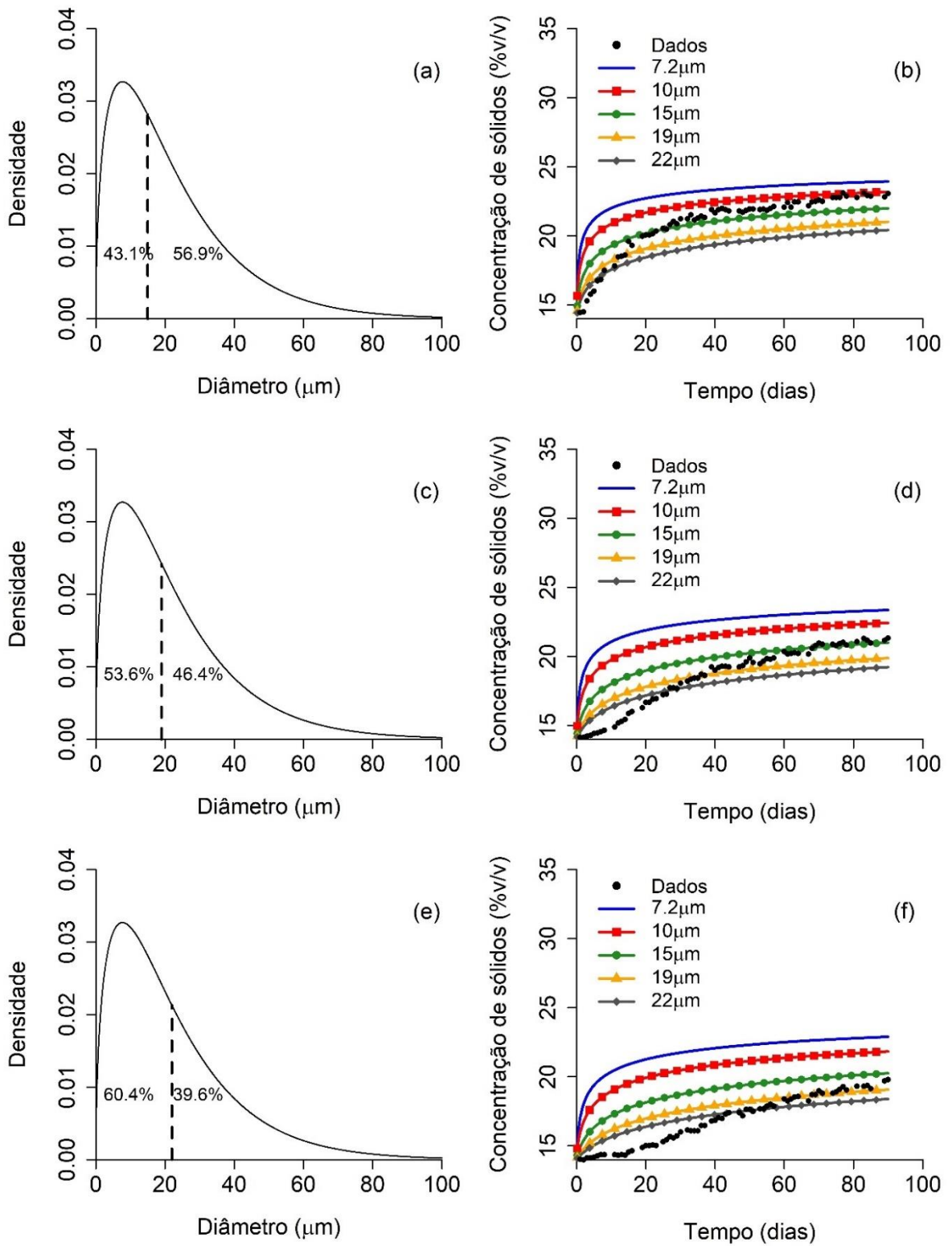
foi calculado entre as 68 amostras experimentais de concentração e os cinco perfis médios de concentração obtidos pelo método (tabela 4.5).

**Tabela 4.5.** Erro quadrático médio para cada cota e diâmetro avaliado, em negrito os menores erros para cada cota.

$\overline{dp}$	<b>0,5cm</b>	<b>2cm</b>	<b>4cm</b>
7,2 $\mu$ m	6,284	16,400	25,205
10 $\mu$ m	2,766	8,813	14,521
15 $\mu$ m	<b>1,026</b>	2,499	4,783
19 $\mu$ m	2,394	<b>1,221</b>	1,479
22 $\mu$ m	4,256	1,697	<b>0,857</b>

Pode-se observar na tabela 4.5 que, no geral, o diâmetro médio de Sauter apresentou um erro maior para todas as cotas, mostrando que pode não ser ideal utilizá-lo como diâmetro característico. Para a cota mais baixa (0,5cm), o diâmetro característico que apresentou o menor erro foi o de 15 $\mu$ m. Entretanto, na avaliação de cotas superiores, o diâmetro característico ótimo aumentou. Esse comportamento pode ser explicado pelo método em si. Para a avaliação do diâmetro característico foi designada uma distribuição *a priori* fixa, ou seja, a mesma incerteza foi disponibilizada para cada cota avaliada. Quando os parâmetros foram ajustados, o diâmetro característico escolhido foi fixado no valor que melhor representa os dados experimentais. Visto que, para esse modelo em particular, diâmetros sorteados com valores maiores do que o diâmetro característico escolhido aumentam a velocidade de sedimentação e vice-versa. Considerando que a escolha de maiores diâmetros característicos aumentam a probabilidade de amostrar diâmetros menores, cotas superiores vão possuir maiores diâmetros característicos ótimos, como mostrado na figura 4.10.

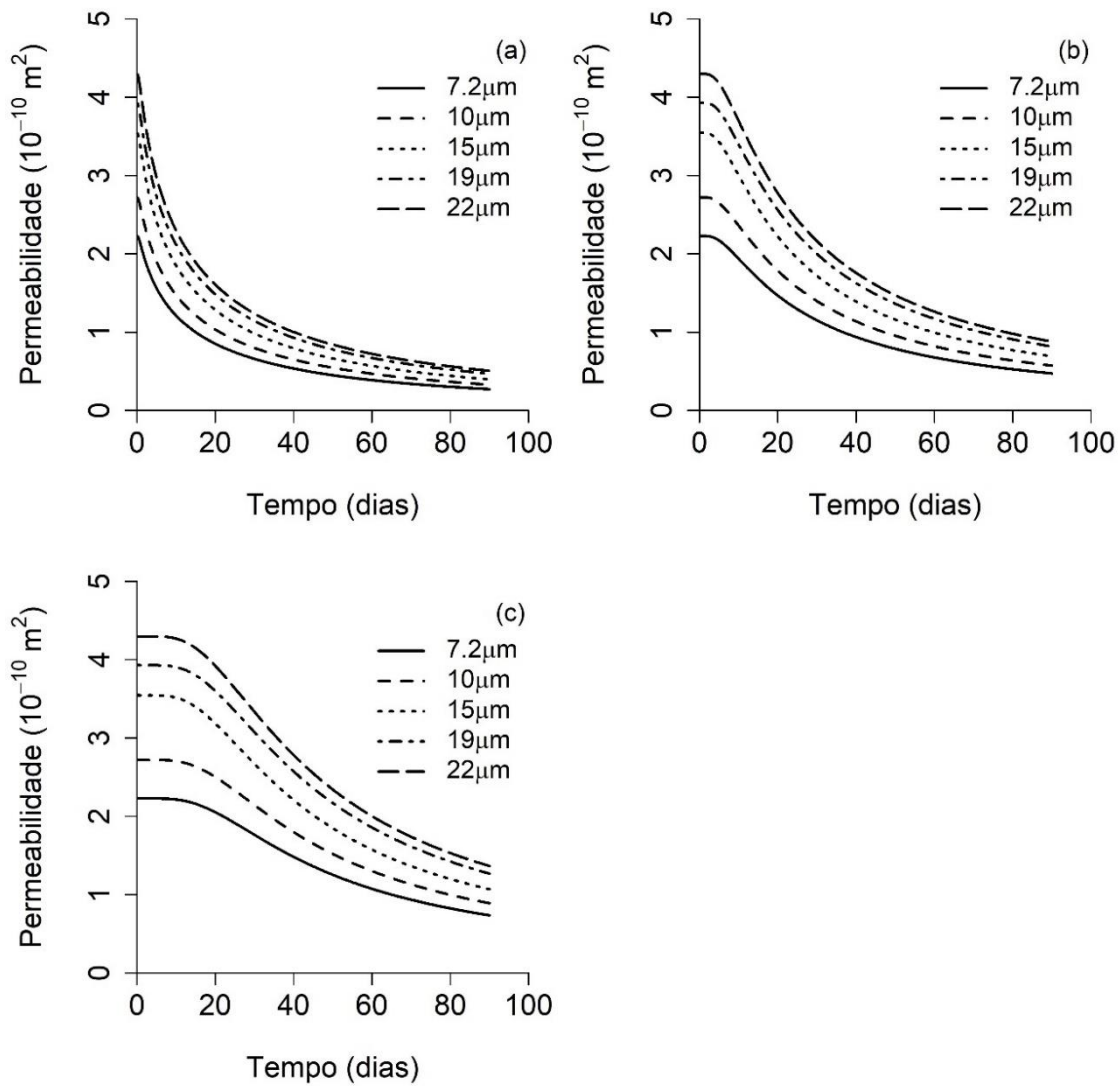




**Figura 4.10.** Probabilidade de sorteio de partículas menores e maiores que (a) 15 $\mu\text{m}$ , (c) 19 $\mu\text{m}$  e (e) 22 $\mu\text{m}$  e comparação entre dados experimentais e a média das saídas do modelo para (b) 0,5cm, (d) 2cm e (f) 4cm.

#### 4.1.3.1. Influência do diâmetro característico na permeabilidade

Pode-se perceber que a escolha do diâmetro característico influencia na estimação dos demais parâmetros do modelo, nesse caso, mais significativamente no parâmetro da permeabilidade do meio. Dessa forma, foi realizado uma análise da variação da permeabilidade estimada para cada diâmetro característico escolhido e em cada cota avaliada (figura 4.11). Para isso, utilizou-se dos valores de cada  $K_0$  em conjunto com seu respectivo diâmetro característico para estimar a permeabilidade nas cotas de 0,5cm, 2cm e 4cm.



**Figura 4.11.** Permeabilidade do meio estimada para cada diâmetro característico escolhido em (a) 0,5cm, (b) 2cm e (c) 4cm.

É possível ver que a permeabilidade diminui com a diminuição do diâmetro característico escolhido. Esse fato se deve o que já foi mencionado na seção anterior, em que a probabilidade de sorteio de partículas menores aumenta para diâmetros característicos maiores. Dessa forma, com mais partículas finas, a velocidade de sedimentação tende a diminuir, gerando uma concentração menor de sólidos e uma maior permeabilidade. Ainda, pode ser observado que a permeabilidade aumenta também para cotas mais altas, o que condiz com o comportamento do fenômeno visto que em cotas mais baixas há uma concentração de sólidos maior, diminuindo a permeabilidade. Portanto, se faz visto que a escolha do diâmetro característico influencia não só o comportamento da saída do modelo, mas também a estimação de outros parâmetros do modelo, se tornando mais importante a avaliação dessa escolha na execução de modelos que dependam do diâmetro característico dos sólidos.

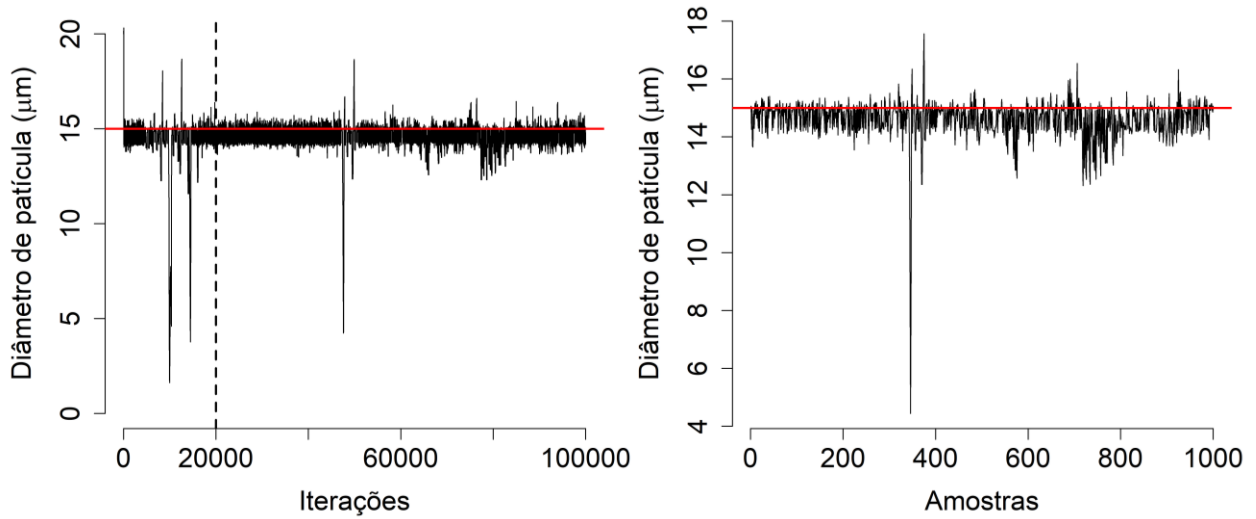
Finalmente, as próximas seções utilizarão do diâmetro característico ótimo como base para a execução dos métodos MCMC e RML quando utilizado para a avaliação apenas da incerteza do diâmetro da partícula no modelo fenomenológico.

## 4.2. MCMC

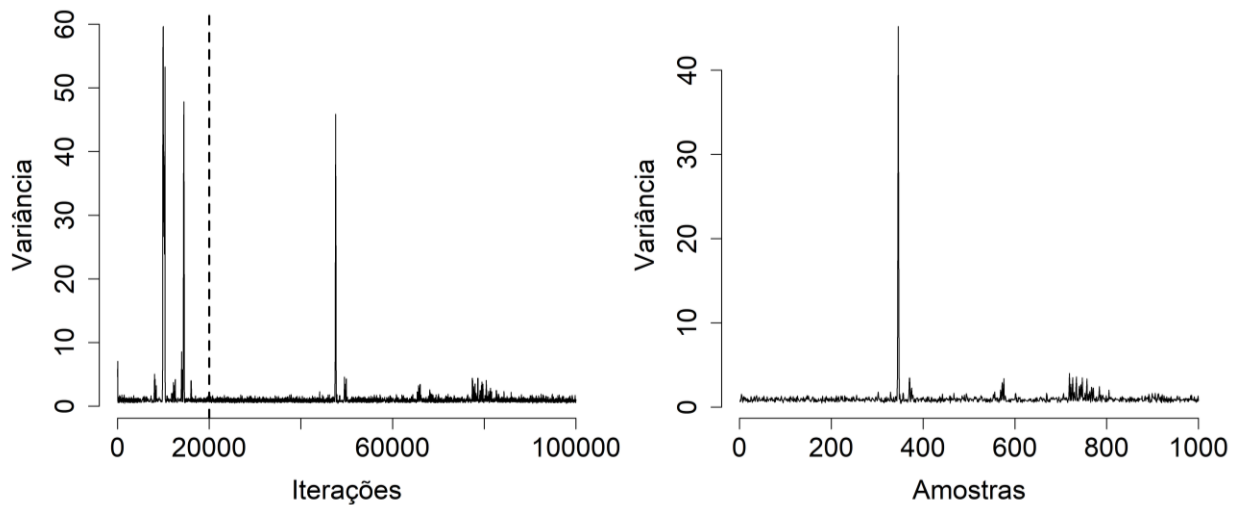
Para o método MCMC, foi utilizado como modelo o meta-modelo proposto, visto que o modelo completo tem um custo computacional alto. O dado experimental utilizado foi da cota de 0,5cm da coluna de sedimentação, devido ao meta-modelo ter sido ajustado para esse dado. Como observado na seção anterior, para a cota mais baixa (0,5cm), o diâmetro característico que demonstrou ter o menor erro quadrático médio se comparado com o dado experimental foi o de 15 $\mu$ m. Portanto, os demais parâmetros utilizados para a avaliação do método MCMC foram os ajustados para esse diâmetro característico ótimo obtido.

Foram realizadas 100000 iterações com taxa de aceitação de aproximadamente 40%, das quais 20000 iniciais foram descartadas como período de *aquecimento*. Nas amostras restantes, foi feita uma filtragem para remoção de correlações, retirando-se 1000 amostras para compor a distribuição *a posteriori*. Além do diâmetro, foi também estimada a variância dos dados, visto que há uma propagação de erros do dado experimental para o modelo e do modelo para o meta-modelo.

As cadeias completas formadas pela estimação do diâmetro e da variância, juntamente com as cadeias obtidas após retirado o período de *aquecimento* e feita a filtragem dos sorteios podem ser observadas nas figuras 4.12 e 4.13.



**Figura 4.12.** Cadeia completa formada na estimação do diâmetro (à esquerda) e cadeia obtida feita a filtragem e retirada do período de *aquecimento* (à direita).



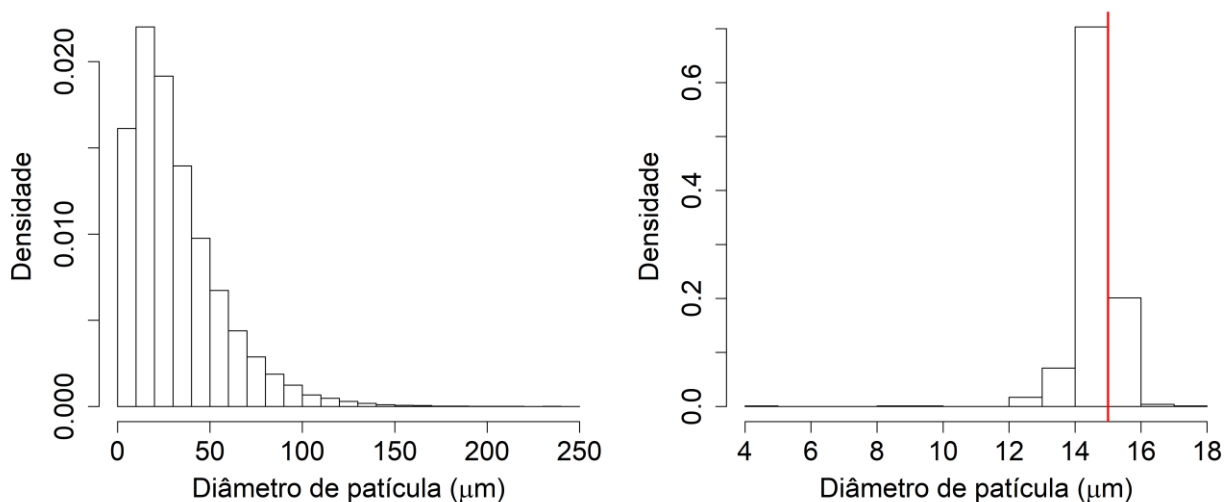
**Figura 4.13.** Cadeia completa formada na estimação da variância (à esquerda) e cadeia obtida feita a filtragem e retirada do período de *aquecimento* (à direita).

Quando se fez a avaliação do diâmetro característico ótimo, o restante dos parâmetros foi fixado em valores que, junto com o diâmetro escolhido, descreviam bem os dados experimentais. Portanto, já houve uma estimação do diâmetro prévia à utilização do método MCMC. Dessa forma,

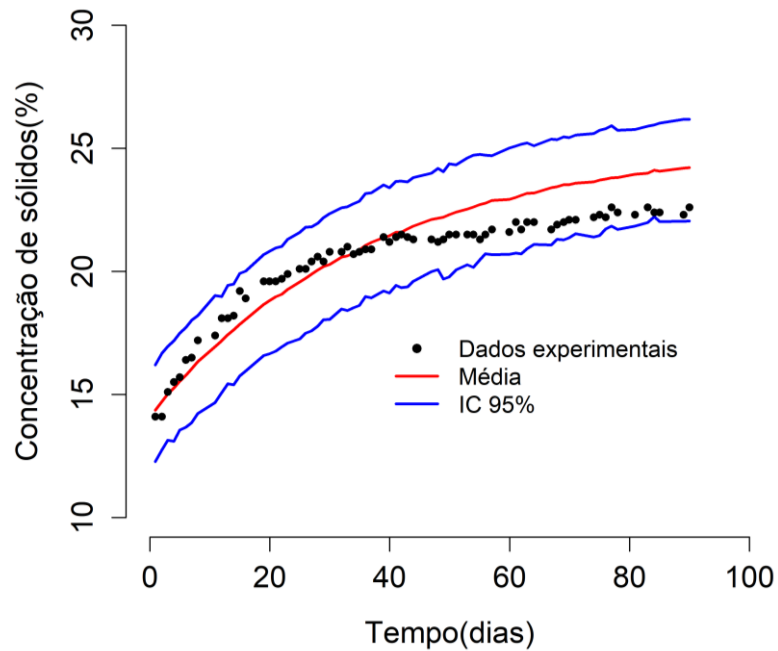
o interesse principal do método no escopo desse trabalho é fornecer a incerteza tanto do parâmetro quanto dos dados no modelo, de forma a se obter um intervalo de credibilidade para a saída do modelo.

A distribuição *a posteriori* obtida condiz com o diâmetro previamente ajustado, mostrando alta probabilidade de valores próximos de  $15\mu\text{m}$ , como pode ser observado na figura 4.14. Nela é comparada a distribuição *a priori* e a *a posteriori* do diâmetro, mostrando que a probabilidade do parâmetro dado o modelo é diferente da probabilidade previamente conhecida.

Finalmente realizou-se a avaliação da distribuição preditiva dos resultados por meio de sorteios de  $Normal\sim(M(\overline{dp}, t), \sigma^2)$  (distribuição normal com média na saída do modelo e variância ajustada). A figura 4.15 mostra que a distribuição preditiva com intervalo de credibilidade de 95% conseguiu englobar bem os dados experimentais. Entretanto, pode-se observar que a média da distribuição preditiva tem um desvio significativo do dado experimental, o qual foi avaliado calculando-se o erro quadrático médio (EQM) que foi de 1,0185. Esse valor será utilizado como meio de comparação para as estimações realizadas nas próximas seções.



**Figura 4.14.** Distribuições *a priori* e *a posteriori* do diâmetro da partícula.



**Figura 4.15.** Distribuição preditiva da concentração de sólidos na cota 0,5cm.

### 4.3. RML

Como o método RML, foi possível a realização da estimação da distribuição *a posteriori* de todos os parâmetros do modelo fenomenológico. Além disso, foi realizada a estimação apenas do diâmetro da partícula a fim de comparar com o método MCMC. Outra possibilidade aberta pelo método RML é a avaliação da distribuição do diâmetro na pressão no fundo da coluna de sedimentação. Foi utilizado como método de otimização da função objetivo gerada no método RML o método de Levenberg-Marquadt para funções não lineares. Mais informações sobre o método podem ser obtidas em Gavin (2017). Os resultados e discussões serão apresentados nas próximas seções.

#### 4.3.1. Estimação do diâmetro da partícula

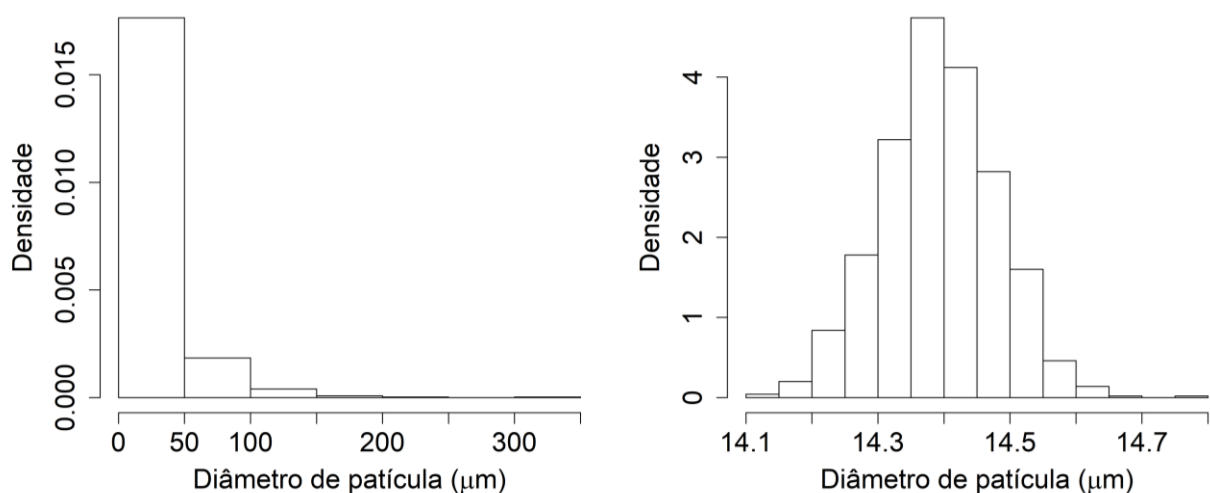
Para a avaliação apenas do diâmetro, foram utilizados os demais parâmetros fixados nos valores ajustados para o diâmetro ótimo previamente obtido, assim como no método MCMC. O dado experimental utilizado foi a cota de 0,5cm da coluna de sedimentação. O desvio padrão

utilizado nesse método foi de 0,4, pois foi considerado o maior desvio dos dados experimentais para garantir que o erro experimental fosse satisfatoriamente contemplado. Foram realizadas 1000 iterações do método, gerando assim 1000 amostras da distribuição *a posteriori* aproximada de  $\overline{dp}$ .

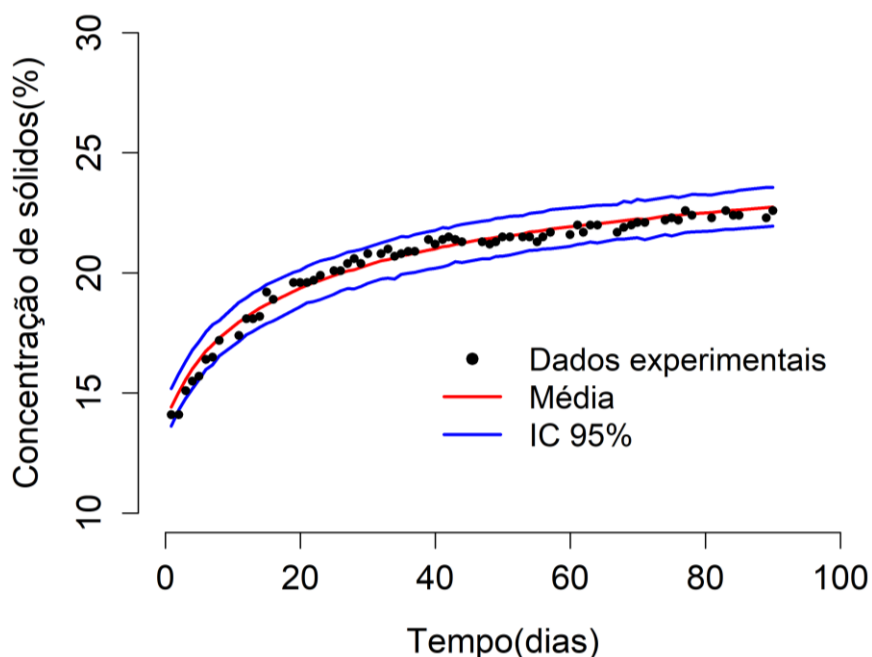
Pode-se observar na figura 4.16 que a distribuição *a posteriori* do diâmetro da partícula difere da distribuição *a priori*, mostrando que, assim como no método MCMC, a probabilidade desse parâmetro dado o modelo é diferente da probabilidade prévia conhecida.

Além disso, observa-se que a distribuição *a posteriori* para 1000 amostras não inclui o valor de diâmetro característico ótimo de 15 $\mu$ m. Pode-se designar o fato ao método RML ser um método aproximado de obtenção da distribuição *a posteriori* e também devido ao fato de os parâmetros terem sido ajustados por investigação de valores. Outro motivo plausível é o número de amostras, que pode ter sido baixo, consequentemente, não englobando todo o espaço amostral da distribuição *a posteriori*.

Assim como no método MCMC, realizou-se a avaliação da distribuição preditiva dos resultados por meio de sorteios de uma distribuição  $Normal \sim (M(\overline{dp}, t), \sigma^2)$  (distribuição normal com média na saída do modelo e variância dos experimentos). A figura 4.17 mostra que a distribuição preditiva com intervalo de credibilidade de 95% conseguiu englobar bem os dados experimentais. Comparou-se a média com os dados experimentais e obteve-se um valor de EQM de 0,0914, o qual é bem menor do que o calculado para o método MCMC com meta-modelo.



**Figura 4.16.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\overline{dp}$ .



**Figura 4.17.** Distribuição preditiva de concentração de sólidos na cota 0,5cm para a estimação apenas do diâmetro.

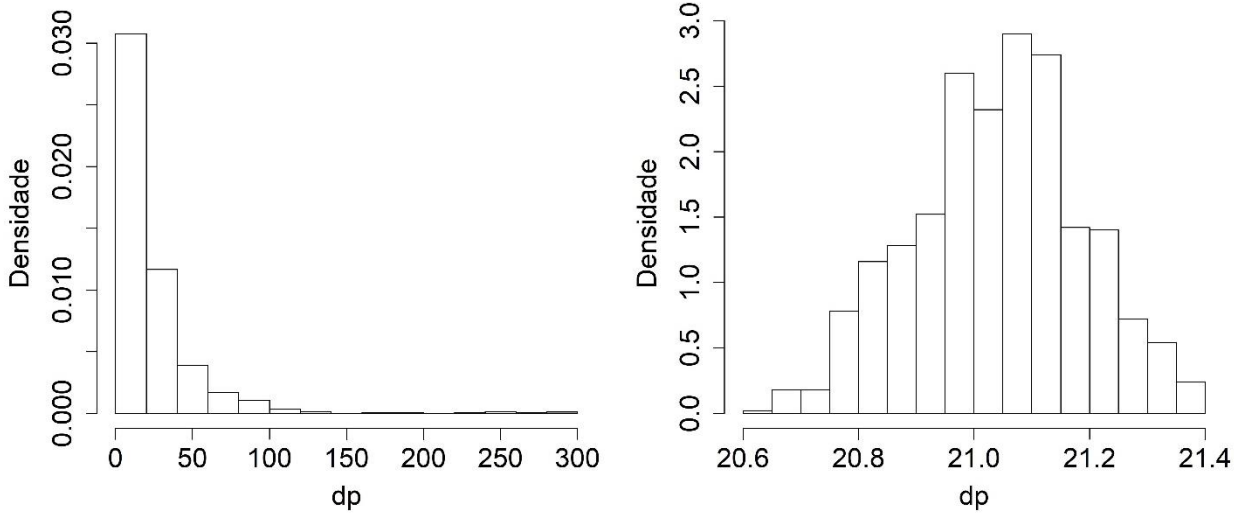
#### 4.3.2. Estimação dos parâmetros

O método RML também possibilitou a estimação dos demais parâmetros junto do diâmetro da partícula. Como nas seções anteriores, foi utilizado a cota de 0,5cm como dado experimental para a estimação. Utilizou-se como desvio padrão o valor de 0,4, assim como na estimação do diâmetro e foram amostrados 1000 valores da distribuição *a posteriori* aproximada dos parâmetros.

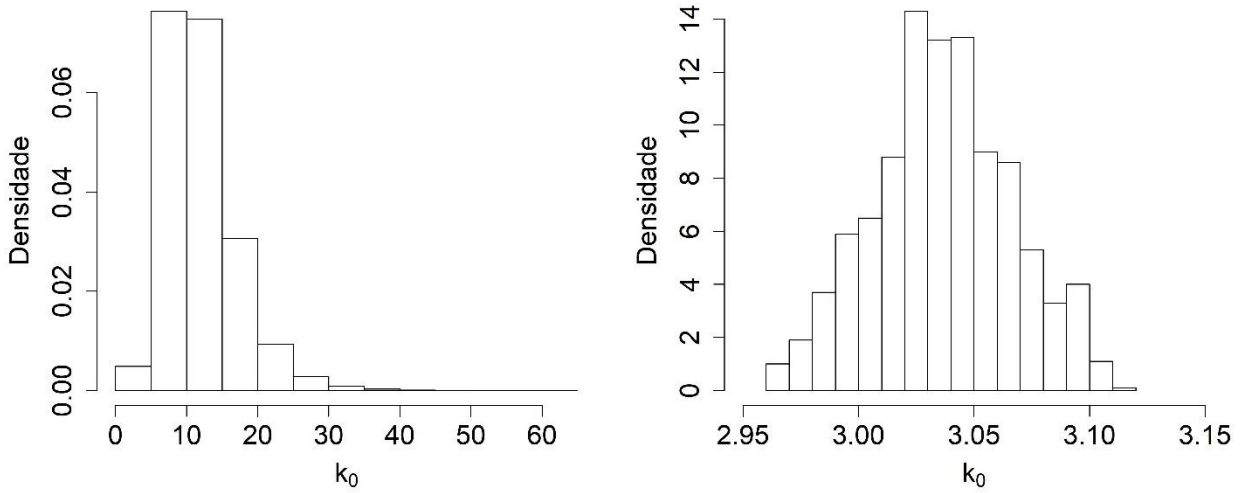
Para comparação, foi plotado o histograma dos sorteios individuais dos parâmetros contra o histograma das distribuições *a priori*. Pode-se observar nas figuras 4.18 a 4.24 que as distribuições de todos os parâmetros diferem da distribuição inicial, mostrando a mudança de probabilidade do parâmetro dado o modelo fenomenológico.

Para a obtenção da distribuição preditiva (figura 4.25) de concentração foi realizado o mesmo procedimento da seção anterior. Sorteou-se de uma distribuição normal com média na saída do modelo e variância 0,16. Foi calculado o EQM da média das distribuições preditivas, gerando valor de 0,062, menor valor encontrado se comparado com as estimações anteriores.

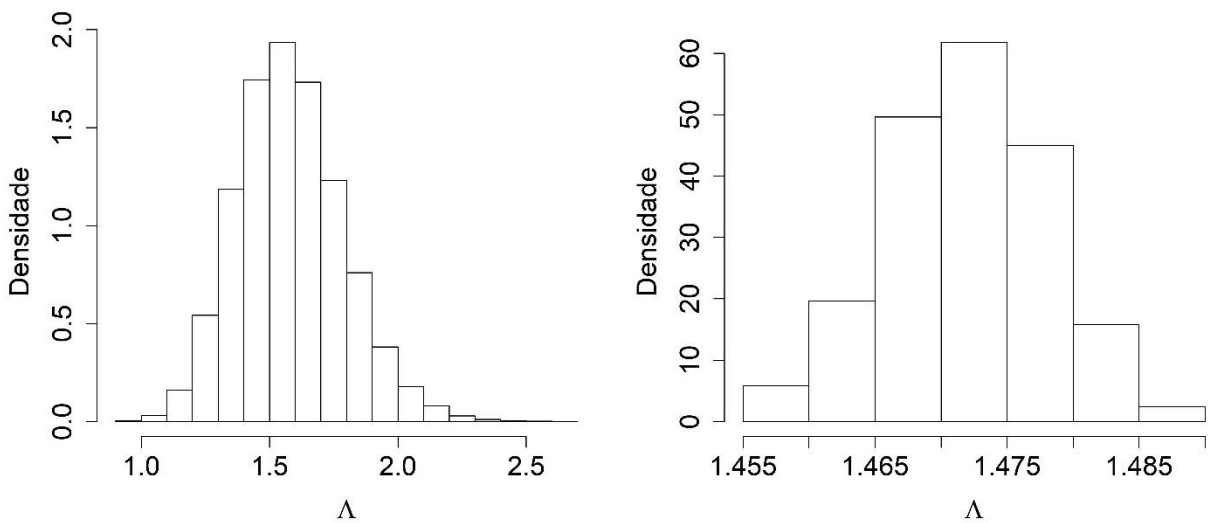




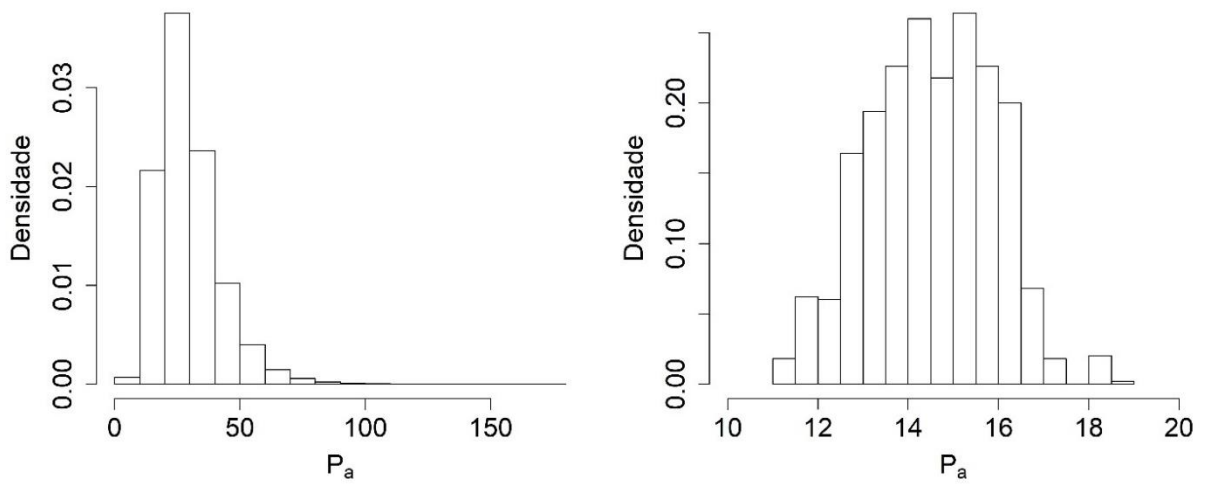
**Figura 4.18.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\overline{dp}$ .



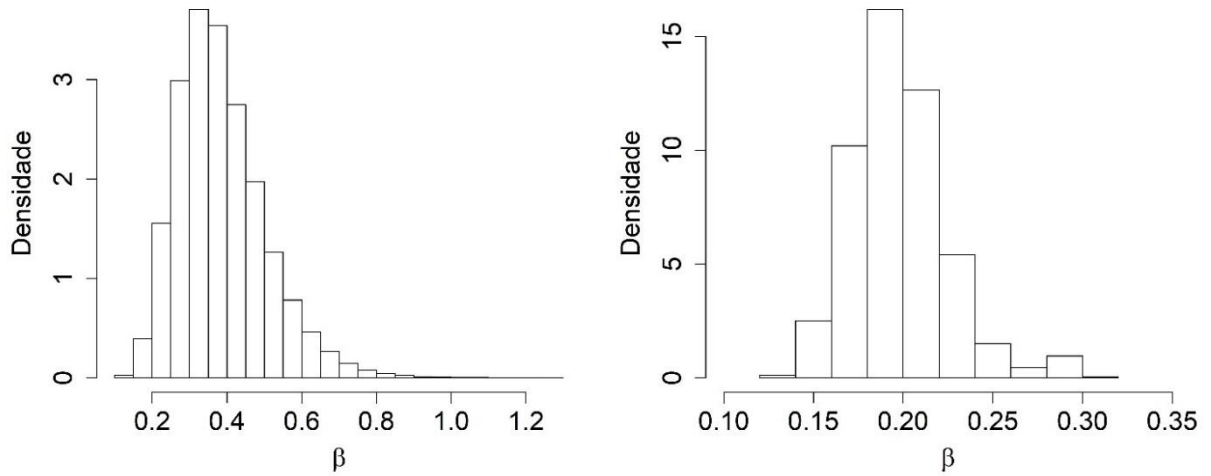
**Figura 4.19.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $k_0$ .



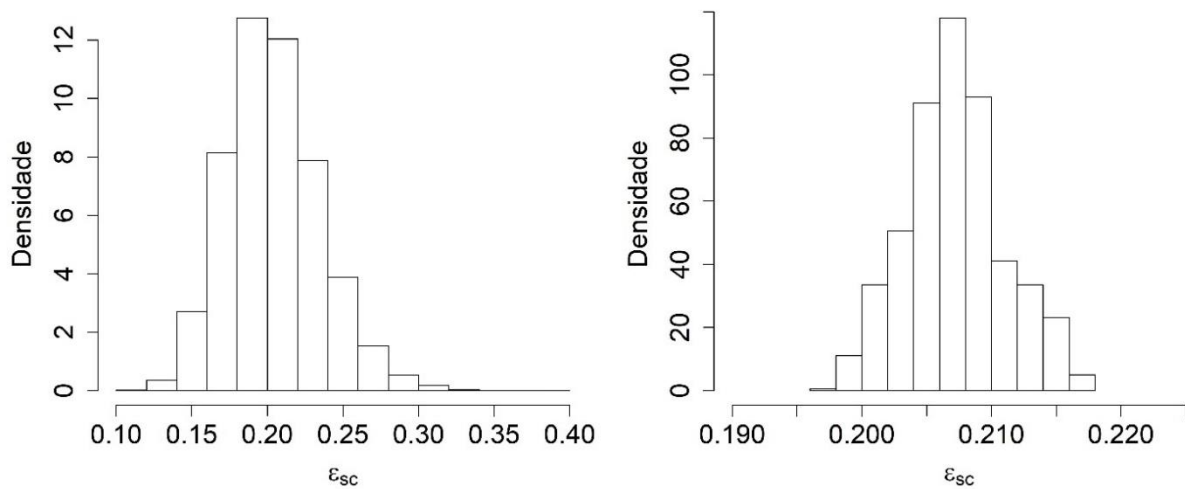
**Figura 4.20.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\Lambda$ .



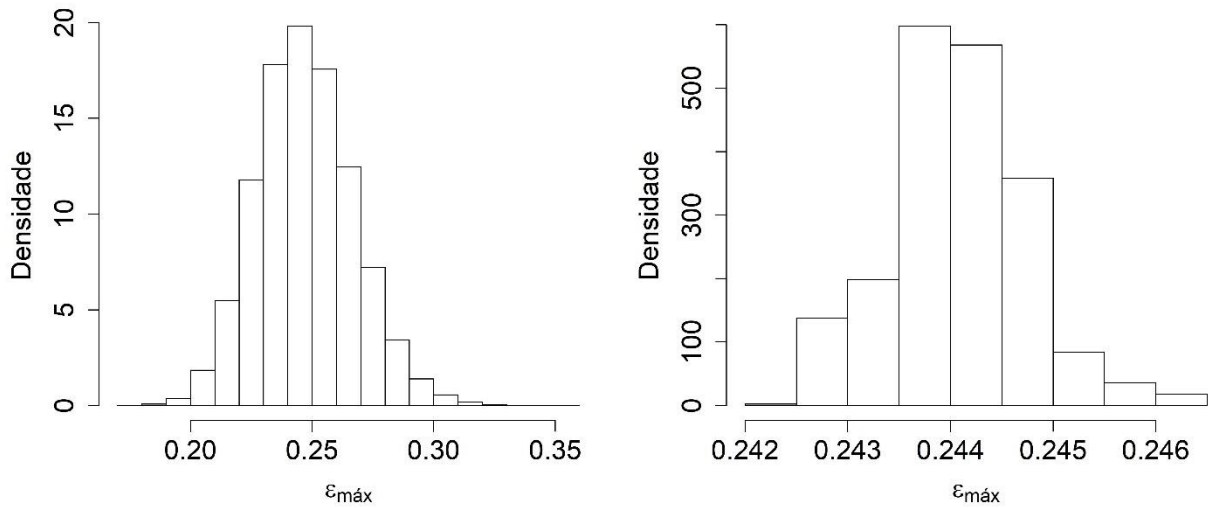
**Figura 4.21.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $P_a$ .



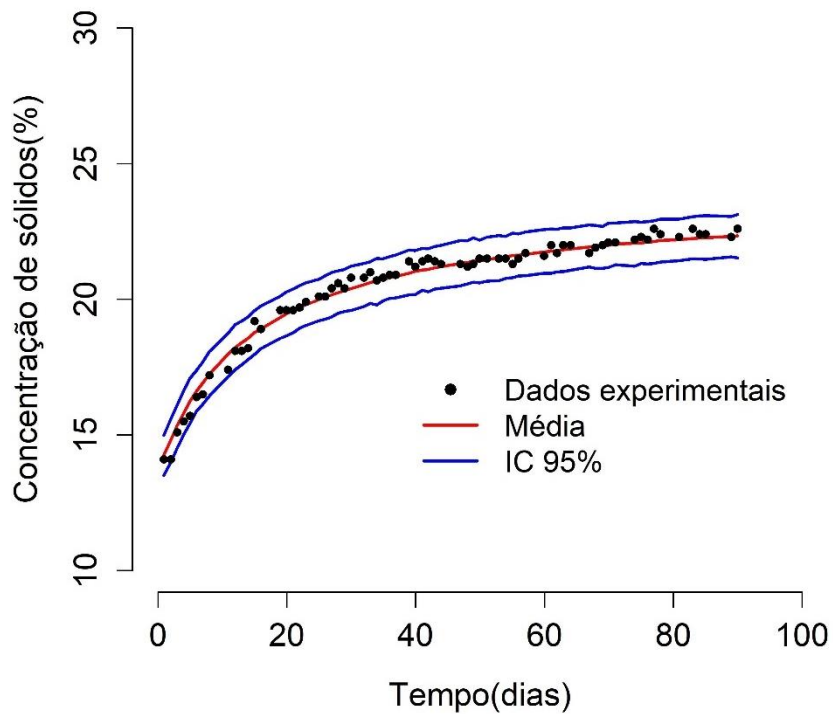
**Figura 4.22.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\beta$ .



**Figura 4.23.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\epsilon_{sc}$ .



**Figura 4.24.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\epsilon_{máx}$ .

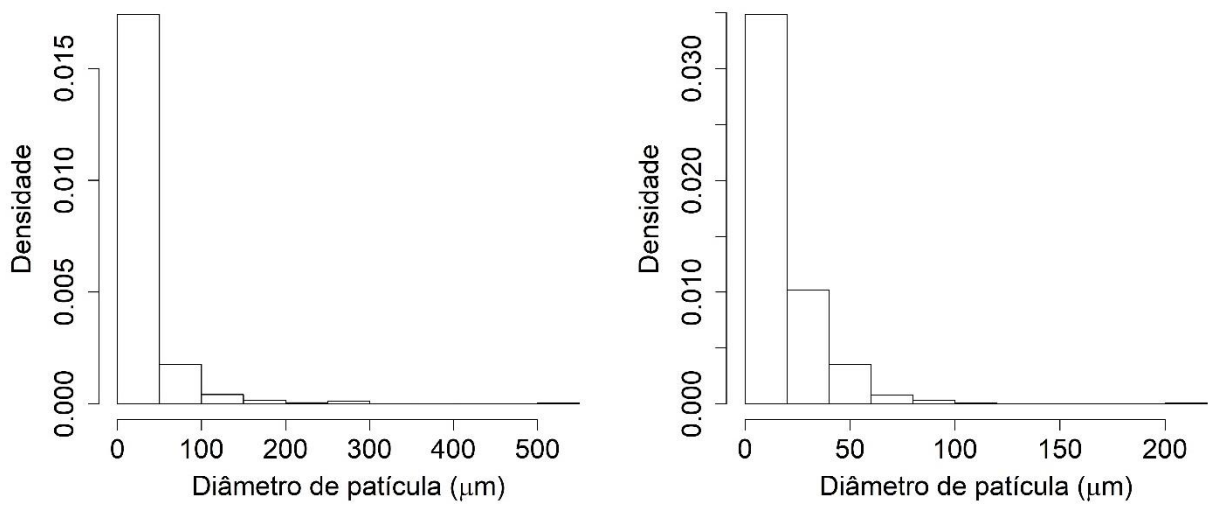


**Figura 4.25.** Distribuição preditiva da concentração na cota 0,5cm para a estimação de todos os parâmetros.

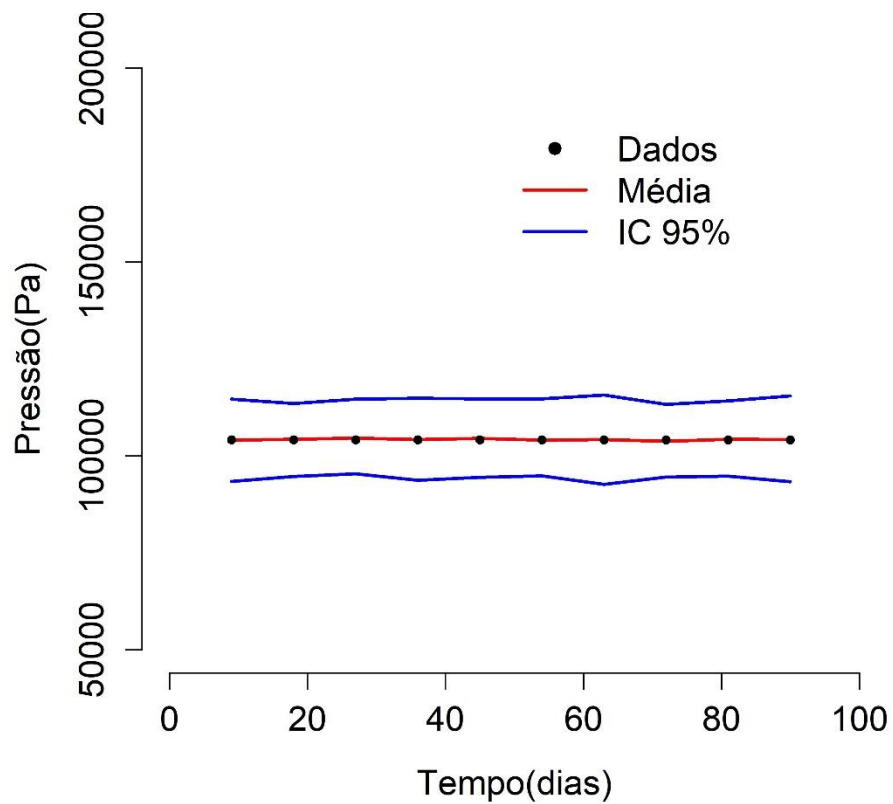
### 4.3.3. Efeito da distribuição de tamanho de partícula na pressão na coluna de sedimentação

Foi realizada uma avaliação da influência da distribuição de tamanho de partícula na pressão de fundo na coluna de sedimentação. Para isso, foram gerados dados pseudo-experimentais, por meio da execução do modelo com parâmetros pré-estabelecidos, da pressão no fundo da coluna de sedimentação (0,5cm) para a realização do método RML na estimação do diâmetro da partícula. Os dados foram gerados nos tempos de 9, 18, 27, 36, 45, 54, 63, 72, 81 e 90 dias. Considerou-se como pressão no topo da coluna ( $P_0$ ) a pressão atmosférica de 101325Pa, como diâmetro característico o valor de 15 $\mu$ m. Durante a estimação, foi utilizado como desvio padrão um valor de 5% do dado pseudo-experimental gerado para fins de análise. Foram geradas 1000 amostras para a avaliação da distribuição *a posteriori* do tamanho de partícula e da distribuição preditiva da pressão.

Pode-se observar pela figura 4.26 que a distribuição *a priori* é semelhante à distribuição *a posteriori*, esse fato é um indício de que o diâmetro da partícula não influencia a modelagem da pressão no fundo da coluna. Tal comportamento pode ser explicado pela consideração hidrostática utilizada, na qual a pressão depende apenas da massa de fluido e sólidos que está acima da altura desejada. Visto que o diâmetro da partícula não tem influência na massa total de sólidos presente na coluna como um todo, o parâmetro não influencia pressão no fundo da coluna de sedimentação. Pode-se observar na figura 4.27 que a pressão no fundo da coluna, prevista pelo modelo fenomenológico, se mantém constante em todo o tempo avaliado, assim como a média da distribuição preditiva e os intervalos de credibilidade de 95% gerados pelo método RML.



**Figura 4.26.** Distribuição *a priori* (à esquerda) e *a posteriori* (à direita) do  $\bar{d}_p$  para a valiação da pressão no fundo da coluna de sedimentação.



**Figura 4.27.** Distribuição preditiva da pressão para a estimação do diâmetro da partícula.

## 5. Conclusões e sugestões

### 5.1. Conclusões

Neste trabalho, foi avaliado o efeito das incertezas associada aos valores dos parâmetros  $\theta = (\overline{dp}, K_0, \Lambda, P_a, \beta, \varepsilon_{sc}, \varepsilon_{m\acute{a}x})$  envolvidos na modelagem da sedimentação de barita em fluido de perfuração. Neste contexto, foram utilizados métodos estatísticos computacionais robustos que permitiram diversas avaliações dessa incerteza, como o método de Monte Carlo, MCMC e RML.

O método de Monte Carlo foi utilizado para a análise direta de incerteza proveniente dos parâmetros. Assim, foi possível determinar a sensibilidade do modelo a cada um de seus parâmetros por meio de sorteios aleatórios de suas distribuições *a priori* e execução do modelo fenomenológico para cada conjunto de parâmetros. Observou-se que os parâmetros relacionados a pressão dos sólidos proveniente da equação de Tiller e Leu (1980) ( $P_a$  e  $\beta$ ) apresentam pouca influência na modelagem da zona de sedimento no fundo da coluna, levando a valores altos do p-valor (análise de variância). Os parâmetros exponenciais das equações constitutivas de permeabilidade e pressão nos sólidos influenciaram negativamente o modelo, ou seja, quanto maiores seus valores, menor a velocidade da sedimentação.

O método também foi utilizado para avaliar a escolha do valor do diâmetro característico na estimação paramétrica com base na distribuição granulométrica dos sólidos. Para isso, foram escolhidos 5 diâmetros característicos e, para cada um deles, foram estimados os demais parâmetros referentes ao modelo fenomenológico. A partir da estimação, foram sorteados valores de diâmetros de sua distribuição *a priori*, efetuadas avaliações do modelo e calculados os perfis de concentração médio para cada diâmetro característico escolhido em cada altura da coluna de sedimentação (0,5cm, 2cm e 4cm). Finalmente, foram obtidos os erros quadráticos médios comparando os perfis médios da simulação com os dados experimentais. O diâmetro de Sauter, amplamente utilizado na avaliação de sistemas particulados, apresentou o maior desvio dos dados experimentais para as três cotas avaliadas. Ainda, pôde-se perceber que, para a cota próxima ao fundo da coluna (0,5cm), o diâmetro característico ótimo foi o de 15 $\mu$ m, e que, quanto mais alta a cota, maior era o diâmetro característico ótimo, sendo 19 $\mu$ m para a cota de 2cm e 22 $\mu$ m para a de 4cm. Esse fato foi designado ao aumento da probabilidade de sorteio de partículas mais finas

quando se escolhe diâmetros característicos maiores. Além disso, a escolha do diâmetro característico influenciou a estimação dos demais parâmetros do modelo, mais especificamente o da permeabilidade, mostrando que diâmetros característicos maiores preveem permeabilidade maiores. Esse fato é devido ao aumento da probabilidade de sorteios de partículas menores, o qual faz com que a velocidade de sedimentação diminua, produzindo concentração de sólidos menores e, conseqüentemente, menores valores de permeabilidade.

O método ainda foi utilizado para calcular probabilidades de saídas do modelo. Pôde-se observar que a probabilidade do sólido não ter sedimentado, ou seja, ser menor que a concentração de sólidos inicial, diminuiu com o tempo, fato que condiz com o fenômeno da sedimentação. Por outro lado, a probabilidade da concentração ser maior do que uma concentração máxima aumenta com o tempo.

Neste trabalho, foi feita a estimação dos parâmetros do modelo por meio da inferência Bayesiana, na qual aborda-se o conhecimento prévio sobre os parâmetros na estimação de sua distribuição *a posteriori*. Para isso, foram utilizados dois métodos, o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov e o *Randomized Maximum Likelihood*. O primeiro método foi utilizado a partir da utilização de um meta-modelo desenvolvido para simplificar o modelo completo devido à grande demanda de tempo computacional requerida pelo método. Com isso, foi observada a incerteza proveniente da distribuição granulométrica de sólidos e gerada uma distribuição *a posteriori* do diâmetro da partícula, permitindo-se a obtenção da distribuição preditiva do modelo. O segundo método foi utilizado como método aproximado de sorteio da distribuição *a posteriori*, permitindo a estimação não só do diâmetro da partícula, mas também dos outros parâmetros do modelo. O método RML, apesar de ser um método aproximado, forneceu resultados satisfatórios de estimação. Como foi utilizado o modelo completo, a amplitude da incerteza do modelo, se comparada com a anterior produzida pelo método MCMC, foi menor. A estimação de todos os parâmetros por meio do método RML produziu resultados ainda melhores, com incertezas menores se comparada com a estimação apenas do diâmetro da partícula.

Finalmente, foi avaliada, pelo método RML, a influência do diâmetro da partícula na pressão no fundo da coluna de sedimentação. Para isso foram gerados dados pseudo-experimentais por meio do modelo, os quais foram utilizados para a estimação do diâmetro da partícula. A variação do diâmetro não apresentou influência na pressão no fundo devido a consideração hidrostática utilizada, a qual considera que a pressão no fundo da coluna de sedimentação só depende da pressão

no topo e da pressão exercida pela coluna de suspensão acima. Visto que a massa de sólidos é constante na suspensão durante todo o processo, a pressão também se mantém constante.

A influência das incertezas provenientes dos parâmetros do modelo não deve ser negligenciada. Os resultados mostram que essas produzem incertezas na saída do modelo e também influenciam a estimação paramétrica do problema, podendo gerar previsões errôneas das características do fenômeno em questão.

## **5.2. Sugestões para trabalhos futuros**

A análise da influência da escolha do diâmetro característico abre precedentes de estudos para sua avaliação. Esse trabalho propõe um método de avaliação dessa influência, portanto, uma investigação de outros possíveis métodos de avaliação deve ser considerada para esse tipo de análise.

Além disso, pode ser feita uma avaliação da variação da incerteza do diâmetro da partícula na saída do modelo, ou seja, dada uma distribuição granulométrica diferente, com partículas maiores ou menores, como ficaria a resposta do modelo proposto e a avaliação do diâmetro característico.

Ainda, se faz necessária a estimação do diâmetro da partícula por um método não aproximado, como o MCMC, por meio de meta-modelos que representem melhor o modelo completo, como por exemplo um emulador.



## 6. Referências bibliográficas

- ADAMS, A. J.; Maceachran, A. Impact on casing design of thermal expansion of fluids in confined annuli, SPE Drilling & Completion 9 n. 3, p. 210-216, 1994.
- ADORJÁN, L. A. A theory of sediment compression. In: XI International Mineral Processing Congress, Cagliari, Italy, p. 1-22, 1975.
- ADORJÁN, L. A. Determination of thickener dimensions from sediment compression and permeability test results. Trans. Inst. Min. Met, v. 85, p. 157-163, 1976.
- ALDERLIESTEN, M. Mean particle diameters. From statistical definition to physical understanding. Journal of biopharmaceutical statistics, v. 15, n. 2, p. 295-325, 2005.
- ALLEN, T. Powder sampling and particle size determination. Elsevier, 2003.
- AROUCA, F. O. Uma Contribuição ao Estudo da Sedimentação Gravitacional em Batelada. 2007. Doutorado – Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- ASHLEY, H. H. Theory of the settlement of slimes. Mining and Scientific Press, v. 98, p. 831-832, 1909.
- BEHN, V. C. Setting Behavior of Waste Suspensions. Journal of the Sanitary Engineering Division, v. 83, n. 5, p. 1-20, 1957.
- BLOYS, B.; DAVIS, N.; SMOLEN, B.; BAILEY, L.; FRASER, L.; HODDER, M. Designing and Managing Drilling Fluid. Oilfield Review, Texas, v.2, n.4, p. 33-43, abr. 1994.
- BOURBIE, T.; COUSSY, O.; ZINSZNER, B. Acoustics of porous media. Paris: Educ Technol; 1987.
- BRINKMAN, H. C. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. Flow, Turbulence and Combustion, v. 1, n. 1, p. 27, 1949.
- BROOKS, S. Markov chain Monte Carlo method and its application. Journal of the royal statistical society: series D (the Statistician), v. 47, n. 1, p. 69-100, 1998.
- BÜRGER, R.; CONCHA, F. Mathematical model and numerical simulation of settling of flocculated suspensions. International Journal of Multiphase Flow, v.24, p.1005-1023, 1998.

- BÜRGER, R.; CONCHA, F.; TILLER, F. M. Applications of the phenomenological theory to several published experimental cases of sedimentation processes. *Chemical Engineering Journal*, v. 80, n. 1-3, p. 105-117, 2000.
- BÜRGER, R.; DAMASCENO, J. J. R.; KARLSEN, K. H. A mathematical model for batch and continuous thickening of flocculated suspensions in vessels with varying cross-section. *International journal of mineral processing*, v. 73, n. 2-4, p. 183-208, 2004.
- BÜRGER, R.; TORY, E. M. On upper rarefaction waves in batch settling. *Powder technology*, v. 108, n. 1, p. 74-87, 2000.
- BUSTOS, M.; CONCHA, F. On the construction of global weak solutions in the Kynch theory of sedimentation. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, v. 10, n. 3, p. 245-264, 1988.
- BUSTOS, M.; CONCHA, F.; BÜRGER, R., TORY, E. M. *Sedimentation and thickening*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1999.
- CALÇADA, L. A.; SCHEID, C. M.; MELEIRO, L. A. C.; RIBEIRO, J. M.; SEUFITELLI, G. V. S.; PELIANO, S. V.; SANTOS, H.; SOUZA, E. A.; MONTEIRO, V.; MARTINS, A. L. Barite Sag and Its Impact On Annular Pressure Build Up Mitigation In Producing Offshore Wells, *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, 2016.
- CARMAN, P. C. Fluid flow through granular beds. *Trans Inst Chem Eng*, 15:150–67 1937.
- CLARK, A. A note on the settling of slimes. *Eng. Mining J.*, Vol. 99, No. 9, pp. 412, 1915.
- COMINGS, E. W.; PRUISS, C. E.; DEBORD, C. Continuous settling and thickening. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 46, n. 6, p. 1164-1172, 1954.
- COMINGS, E.W. Thickening calcium carbonate slurries. *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 32, No. 5, p. 663-668, 1940.
- CONCHA, F.; BASCUR, O. Phenomenological model of sedimentation. *XII International Mineral Processing Congress*, 1977.
- CONCHA, F.; BÜRGER, R. A Century of Research in Sedimentation and Thickening. *KONA Powder and Particle Journal*, v. 20, n. 0, p. 38-70, 2002.

- CONCHA, F.; BÜRGER, R. Thickening in the 20th century: A historical perspective. *Minerals and Metallurgical Processing*, v. 20, n. 2, p. 57-67, 2003.
- CONCHA, F.; BUSTOS, M. A modification of the Kynch theory of sedimentation. *AIChE Journal*, v. 33, n. 2, p. 312-315, 1987.
- CONCHA, F.; BUSTOS, M. Settling velocities of particulate systems, 6. Kynch sedimentation processes: batch settling. *International Journal of Mineral Processing*, v. 32, n. 3-4, p. 193-212, 1991.
- COWLES, M. K.; CARLIN, B. P. Markov chain Monte Carlo convergence diagnostics: a comparative review. *Journal of the American Statistical Association*, v. 91, n. 434, p. 883-904, 1996.
- CREMASCO, M. A. Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos. 2014.
- D'ÁVILA, J. S. Uma análise da teoria de Kynch para sedimentação. *Revista Brasileira de Tecnologia*, v. 7, p. 447-453, 1976.
- D'ÁVILA, J. S.; SAMPAIO, R. Equações de Estado para a Pressão no Sólido. In: II Congresso Brasileiro de Engenharia Química, São Paulo, Brasil. 1977a.
- D'ÁVILA, J. S.; SAMPAIO, R. Influência de Equações de Estado para a pressão no sólido no projeto de um sedimentador contínuo. *Anais do V Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos*, v. 3, p. 1-11, 1977c.
- D'ÁVILA, J. S.; SAMPAIO, R. Projeto de um Sedimentador Usando as Equações da Continuidade e do Movimento. III Simpósio Brasileiro de Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos, Rio de Janeiro, Brasil, 1977b.
- DAMASCENO, J. J. R. Uma Contribuição ao Estudo do Espessamento Contínuo. COPPE/UFRJ. [S.l.]. 1992.
- DAMASCENO, J. J. R.; HENRIQUE, H. M.; MASSARANI, G. Um modelo para a sedimentação não estacionária. XIX Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos, 1991.
- DAMASCENO, J. J. R.; MASSARANI, G. Cálculo da capacidade de sedimentadores por meio da determinação da permeabilidade do sedimento. *Anais do XXI Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos*, p. 233-242, 1993.

- DE WAELE, A. Oil Color Chem. Assoc. Journal, n. 6, p. 33-88, 1923.
- DELL, C. C.; SINHA, J. Experimental Study of the Behavior of Flocculated Clays in Thickening. Transactions (Sect. C) of the Inst. Mining and Metallurgy, v. 75, p. 139-146, 1966.
- ELER, F. Estudo da Sedimentação de Barita em Fluidos de Perfuração. 2012. Mestrado – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2012.
- FAGUNDES, F. M. Estudo da estabilidade da suspensão constituinte do fluido Br-Mul/Petrobras. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015.
- FITCH, B. Kynch theory and compression zones. AIChE Journal, v. 29, n. 6, p. 940-947, 1983.
- FONT, R.; RUIZ, F. Simulation of batch and continuous thickeners. Chemical Engineering Science, v. 48, n. 11, p. 2039-2047, 1993.
- FORBES, D. L. H. The settling of mill slimes. Engineering and Mining Journal, v. 93, p. 411-415, 1912.
- FRANÇA, S. C. A., BISCAIA JR., E. C.; MASSARANI, G. Estimação de parâmetros em equações constitutivas de sedimentos. XXVII Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados, 1995.
- FRANÇA, S. C. A., BISCAIA JR., E. C.; MASSARANI, G. Study on Batch Sedimentation Simulation. Powder Technology, 1999, 101, 157-164.
- FREE, E. E. Rate of slimes settling. Eng. Mining J., Vol. 101, pp. 681- 686, 1916.
- GAMERMAN, D.; LOPES, H. F., Markov Chains Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian Inference. 2ª edição. Florida: Chapman & Hall/CRC, 2006.
- GAVIN, H. The Levenberg-Marquardt method for nonlinear least squares curve-fitting problems. Department of Civil and Environmental Engineering, Duke University, p. 1-17, 2017.
- GELMAN, A.; ROBERTS, G. O.; GILKS, W. R. Efficient Metropolis jumping rules. Bayesian statistics, v. 5, n. 599-608, p. 42, 1996.
- GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, v. PAMI-6, n. 6, p. 721-741, 1984.
- GEYER, C. J. Practical markov chain monte carlo. Statistical science, p. 473-483, 1992.

- GILKS, W. R.; RICHARDSON, S.; SPIEGELHALTER, D. J. Introducing markov chain monte carlo. Markov chain Monte Carlo in practice, v. 1, p. 19, 1996.
- GILKS, W. R.; RICHARDSON, S.; SPIEGELHALTER, D. Markov chain Monte Carlo in practice. CRC press, 1995.
- HAARIO, H.; SAKSMAN, E.; TAMMINEN, J.. Adaptive proposal distribution for random walk Metropolis algorithm. Computational Statistics, v. 14, n. 3, p. 375-396, 1999.
- HAMACHER, M. E. Um estudo da sedimentação utilizando o método da atenuação de raios gama. Dissertação (Mestrado) – COPPE/UFRRJ, 1978.
- HARRIS, C.; SOMASUNDARAN, P.; JENSEN, R. Sedimentation of Compressible Materials: Analysis of Batch Sedimentation Curve. Powder Technology, v. 11, p. 75-84, 1975.
- HASSETT, N. J. Design and operation of continuous thickeners. Ind. Chem, v. 34, n. 11, 1958.
- HASTINGS, W. Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications. Biometrika, v. 57, n. 1, p. 97, 1970.
- HAZEN, A. On sedimentation, Trans. ASCE 53, p. 45-71, 1904.
- JÚNIOR, J. Modelagem e Simulação da Sedimentação de Sólidos Adensantes em Fluidos de Perfuração. 2016. Mestrado – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2016.
- KOWALCZUK, P. B.; DRZYMALA, J. Physical meaning of the Sauter mean diameter of spherical particulate matter. Particulate Science and Technology, v. 34, n. 6, p. 645-647, 2016.
- KOZENY J. Ueber kapillare Leitung des Wassers im Boden. Stizungsber Akad Wiss Wien, 136:271–306, 1927.
- KYNCH, G. A theory of sedimentation. Transactions of the Faraday Society, v. 48, p. 166, 1952.
- LARUCCIA, M. B. Velocidade de Sedimentação em Fluidos Não-Newtonianos: Efeito da Forma e da Concentração de Partículas. Dissertação de M.Sc., UNICAMP, Campinas, São Paulo, Brasil, 1990.
- LEACH, C. P.; ADAMS, A. J. A new method for the relief of annular heat-up pressures, SPE Production Operations Symposium, Soc. of Petroleum Eng., 1993.

- LHS. Disponível em: <<http://lhs.r-forge.r-project.org/>>. Acesso em: 17/ 11/ 2018.
- MASSARANI, G.; TELLES, A. S. Escoamento de Fluidos Não-Newtonianos na Vizinhança de Partículas Sólidas. *Revista Brasileira de Física*, v. 8, n. 3, p. 550-561, 1978.
- MATHEW, M. The Application of Markov Chain Monte Carlo Techniques in Non-Linear Parameter Estimation for Chemical Engineering Models. 2013. 146 p. Tese (Mestrado em Engenharia Química). Waterloo, Ontario, Canada, 2013.
- MAUDE, A.; WHITMORE, R. A generalized theory of sedimentation. *British journal of applied physics*, v. 9, n. 12, p. 477, 1958.
- MCGREGOR, R. The effect of rate of flow on rate of dyeing. Part II – The mechanism of fluid flow through textiles and its significance in dyeing. *J Soc Dyers Colourists*, 81:429–38, 1965.
- METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A.; ROSENBLUTH, M.; TELLER, A.; TELLER, E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *The Journal of Chemical Physics*, v. 21, n. 6, p. 1087-1092, 1953.
- MIGON, H. S., GAMERMAN, D., LOUZADA, F., *Statistical Inference: An Integrated Approach*. 2ª edição. Florida: CRC Press, 2014.
- MISHLER, R.T. Settling slimes at the Tigre Mill. *Eng. Mining J.*, Vol. 94, p. 643-646, 1912.
- MOREIRA, B. A.; AROUCA, F. O.; DAMASCENO, J. J. R. Analysis of suspension sedimentation in fluids with rheological shear-thinning properties and thixotropic effects. *Powder Technology*, v. 308, p. 290-297, 2017.
- MOYER, M. C. Challenges Associated With Drilling a Deepwater, Subsalt Exploration Well in the Gulf of Mexico: Hadrian Prospect, SPE Deepwater Drilling and Completions Conference, Society of Petroleum Engineers, 2012.
- NICHOLS, H. G. Theory of Settlement of Slimes, *Mining and Scientific Press*, July 11, p. 54-56, 1908.
- O'HAGAN, A. Bayesian analysis of computer code outputs: A tutorial. *Reliability Engineering & System Safety*, v. 91, n. 10-11, p. 1290-1300, 2006.

- OLIVER, D. S.; REYNOLDS, A. C.; LIU, N. Inverse theory for petroleum reservoir characterization and history matching. Cambridge University Press, 2008.
- OSTWALD, W. Kolloid-Z, n. 36, pp. 99-117, 1925.
- PETZOLD, L. R. DASSL code. Computing and Mathematics Research Division: Livermore, CA, 1990.
- PINTO, J. C.; SCHWAAB, M. Análise de Dados Experimentais: I. Fundamentos de Estatística e Estimção de Parâmetros. Editora E-papers, 2007.
- PORTALACTION.COM.BR. (2018). 4 - Intervalo de confiança - Inferência | Portal Action. Disponível em: <http://www.portalaction.com.br/inferencia/intervalo-de-confianca>. Acessado em 1 Aug. 2018.
- RAFTERY, A. E.; LEWIS, S. M. [Practical Markov Chain Monte Carlo]: comment: one long run with diagnostics: implementation strategies for Markov Chain Monte Carlo. Statistical science, v. 7, n. 4, p. 493-497, 1992.
- RALSTON, O.C. The control of ore slimes. Eng. Mining J., Vol. 101, p. 763-769, 1916.
- RICHARDSON, J.; ZAKI, W. Sedimentation and fluidisation: Part I. Chemical Engineering Research and Design, v. 32, p. S82-S100, 1954a.
- RICHARDSON, J.; ZAKI, W. The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow. Chemical Engineering Science, v. 3, n. 2, p. 65-73, 1954b.
- ROBERT, C.; CASELLA, G. Monte Carlo statistical methods. Springer Science & Business Media, 2013.
- ROBERTS, G. O.; GELMAN, A.; GILKS, W. R. Weak convergence and optimal scaling of random walk Metropolis algorithms. The annals of applied probability, v. 7, n. 1, p. 110-120, 1997.
- RODRIGUEZ E. F.; GIACOMELLI, V. A. Permeability–porosity relationship in RTM for different fiberglass and natural reinforcements. J Compos Mater, 38:259–68, 2004.
- ROUSSAS, G. G. An introduction to probability and statistical inference. Elsevier, 2003.
- SALTELLI, A.; Ratto, M.; Andres, T.; Campolongo, F.; Cariboni, J.; Gatelli, D.; Saisana, M.; Tarantola, S. Global sensitivity analysis: the primer. John Wiley & Sons, 2008.

- SANTNER, T. J.; WILLIAMS, B. J.; NOTZ, W. I. The Design and Analysis of Computer Experiments, New York: Springer-Verlag, 2003.
- SCOTT, K. Experimental Study of Continuous Thickening of a Flocculated Silica Slurry. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 7, n. 4, p. 582-595, 1968b.
- SCOTT, K. Theory of thickening: factors affecting settling rate of solids in flocculated pulps. *Trans. Inst. Min. Met.* 77, C85-C97, 1968a.
- SHANNON, P. T.; DEHAAS, R.; STROUPE, E. P.; TORY, E. M. Batch and continuous thickening. Prediction of batch settling behavior from initial rate data with results for rigid spheres. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 3, n. 3, p. 250-260, 1964.
- SHIH C. H.; LEE J. Effect of fiber architecture on permeability in liquid composite molding. *Polym Compos*, 19:629–39, 1998.
- SHIRATO, M.; KATO, H.; KOBAYASHI, K.; SAKAZAKI, H. Analysis of settling of thick slurries due to consolidation. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 3, n. 1, p. 98-104, 1970.
- SMILES, D. Sedimentation: integral behaviour. *Chemical Engineering Science*, v. 31, n. 4, p. 273-275, 1976.
- SMILES, D.; ROSENTHAL, M. The movement of water in swelling materials. *Australian Journal of Soil Research*, v. 6, n. 2, p. 237, 1968.
- TALMAGE, W.; FITCH, E. Determining Thickener Unit Areas. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 47, n. 1, p. 38-41, 1955.
- TELLES, A. S.; MASSARANI, G. Escoamento de Fluidos Não Newtonianos em Sistemas Particulados. *Revista Brasileira de Física*, v. 9, n. 2, p. 535-550, 1979.
- THE COMPREHENSIVE R ARCHIVE NETWORK. Disponível em: <<https://cran.r-project.org/>>. Acesso em: 12/ 11/ 2018.
- TILLER, F. M.; CHEN, W. Limiting operating condition for continuous thickeners. *Chem. Engng. Sci*, v.43(7), p.1695-1704, 1988.



- TILLER, F. M.; LEU, W. Basic data fitting in filtration. *Journal Chin. Inst. Chem. Engrs.*, p. 61-70, 1980.
- TILLER, F. Revision of kynch sedimentation theory. *AIChE Journal*, v. 27, n. 5, p. 823-829, 1981.
- TORY, E. M.; SHANNON, P. T. Reappraisal of Concept of Settling in Compression. *Settling Behavior and Concentration Profiles for Initially Concentrated Calcium Carbonate Slurries. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 4, n. 2, p. 194-204, 1965.
- VARGO JR., R.F. Practical and successful prevention of annular pressure buildup on the Marlin project, *SPE drilling & completion*, P. 228-234, 2003.
- WAKEMAN, R. J.; HOLDICH, R.G. Theoretical and experimental modeling of solids and liquid pressures in batch sedimentation. *Filtration & Separation*, p.420-422, 1984.
- YOSHIOKA, N.; HOTTA, Y.; TANAKA, S.; NAITO, S.; TSUGAMI, S. Continuous thickening of homogeneous flocculated slurries. *Chem. Eng. Japan*, Vol. 21, pp. 66-75, 1957.
- YU, B.; MYKLAND, P. Looking at Markov samplers through cusum path plots: a simple diagnostic idea. *Statistics and Computing*, v. 8, n. 3, p. 275-286, 1998.