



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



**ESTUDO DA MISTURA E SEGREGAÇÃO DE MATERIAL
GRANULAR EM TAMBOR ROTATÓRIO COM SUSPENSORES
EMPREGANDO A ABORDAGEM NUMÉRICA LAGRANGEANA**

Rafael Ramos Heilbuth

Uberlândia – MG

2017



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



**ESTUDO DA MISTURA E SEGREGAÇÃO DE MATERIAL
GRANULAR EM TAMBOR ROTATÓRIO COM SUSPENSORES
EMPREGANDO A ABORDAGEM NUMÉRICA LAGRANGEANA**

Rafael Ramos Heilbuth

Orientadores:

Prof. Dr. Cláudio Roberto Duarte

Prof. Dr. Marcos A. de Souza Barrozo

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química

Uberlândia – MG

2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

H466e Heilbuth, Rafael Ramos, 1989-
2017 Estudo da mistura e segregação de material granular em tambor rotatório com suspensores empregando a abordagem numérica lagrangeana [recurso eletrônico] / Rafael Ramos Heilbuth. - 2017.

Orientador: Cláudio Roberto Duarte.

Coorientador: Marcos A. de Souza Barrozo.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2019.42>

Inclui bibliografia.

Inclui ilustrações.

1. Engenharia química. 2. Lagrange, Funções de. 3. Processos de fabricação. 4. Granulação. 5. Processos industriais. 6. Partículas - Separação e mistura. I. Duarte, Cláudio Roberto, 1975-, (Orient.). II. Barrozo, Marcos A. de Souza, 1961-, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDU: 66.0

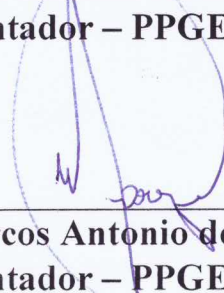
Rejâne Maria da Silva – CRB6/1925

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA COMO PARTE DOS REQUISITOS PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA, EM 27 DE NOVEMBRO DE 2017.

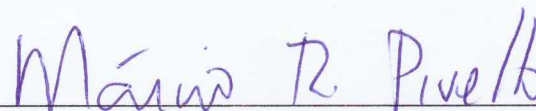
BANCA EXAMINADORA:



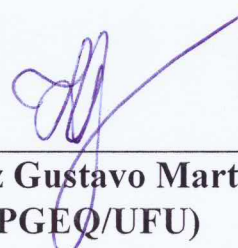
Prof. Dr. Claudio Roberto Duarte
(Orientador – PPGEQ/ UFU)



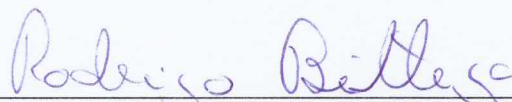
Prof. Dr. Marcos Antonio de Souza Barrozo
(Orientador – PPGEQ/ UFU)



Dr. Márcio Ricardo Pivello
(PPGEQ/UFU)



Prof^a. Dr. Luiz Gustavo Martins Vieira
(PPGEQ/UFU)



Prof. Dr. Rodrigo Béttega
(UFSCar)

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, Geraldo e Maria Aparecida, pelo amor, pela educação que me deram e por tudo que já fizeram por mim.

Aos meus irmãos, Livia e Thiago, pelo exemplo e apoio.

Agradeço aos meus familiares pelo companheirismo. Em especial à Mariana pelas sugestões e auxílio.

Aos colegas Rodolfo, Rondinelli e Suellen pela disponibilidade e por não medirem esforços em me ajudar, e também ao Márcio que gentilmente me esclareceu algumas dúvidas durante o trabalho.

Ao professor Luiz Gustavo, pelas sugestões e correções para o término deste trabalho.

Aos meus orientadores, Cláudio Roberto Duarte e Marcos Antonio de Souza Barrozo, por me possibilitarem o privilégio de trabalhar com eles, pela confiança e pelas enormes contribuições na minha formação.

À Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia pelos recursos oferecidos para a realização desse trabalho.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	i
LISTA DE SÍMBOLOS	iv
Capítulo 1 INTRODUÇÃO	10
1.1 OBJETIVOS	11
Capítulo 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
2.1 TAMBOR ROTATÓRIO	13
2.2 REGIMES DE ESCOAMENTO	14
2.2.1 REGIME DE DESLIZAMENTO	17
2.2.2 REGIME DE AVALANCHE OU CAIMENTO	18
2.2.3 REGIME DE ROLAMENTO	19
2.2.4 REGIME DE CASCADEAMENTO	20
2.2.5 REGIME DE CATARATEAMENTO	21
2.2.6 REGIME DE CENTRIFUGAÇÃO	21
2.3 FENOMENOLOGIA DE SEGREGAÇÃO E MISTURA	23
2.4 ABORDAGEM NUMÉRICA	28
2.4.1 ABORDAGEM EULERIANA	29
2.4.2 ABORDAGEM LAGRANGEANA	31
2.5 <i>SOFTWARES</i> DEM	44
Capítulo 3 MATERIAIS E MÉTODOS	47
3.1 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DEM.....	47
3.1.1 MEDIDA DO ÂNGULO DE REPOUSO DINÂMICO	50
3.1.2 MEDIDA DO ÍNDICE DE MISTURA	51
3.2 INVESTIGAÇÃO DA SEGREGAÇÃO DE PARTÍCULAS EM UM TAMBOR ROTATÓRIO COM SUSPENSORES	55
3.3 INVESTIGAÇÃO DA CINÉTICA DE MISTURA DE PARTÍCULAS EM UM TAMBOR ROTATÓRIO COM SUSPENSORES	57

3.4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL	59
3.4.1 CONFEÇÃO DAS GEOMETRIAS	59
3.4.2 INICIALIZAÇÃO E CONFIGURAÇÃO DO LIGGGHTS®-PUBLIC	60
3.4.3 SIMULAÇÃO	63
3.4.4 PÓS-PROCESSAMENTO	63
Capítulo 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	65
4.1 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DEM	65
4.2 SEGREGAÇÃO DE PARTÍCULAS EM TAMBORES ROTATÓRIOS COM SUSPENSORES	70
4.3 CINÉTICA DA MISTURA DE PARTÍCULAS EM TAMBORES ROTATÓRIOS COM SUSPENSORES	78
4.3.1 EFEITO DA QUANTIDADE DE SUSPENSORES	81
4.3.2 EFEITO DO TAMANHO DOS SUSPENSORES	83
4.3.3 EFEITO DO TAMANHO DAS PARTÍCULAS	86
Capítulo 5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES	88
Capítulo 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	92
APÊNDICES	100
APÊNDICE 1- PLANEJAMENTO DO COMPOSTO CENTRAL PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DEM	100
APÊNDICE 2- RESULTADOS DO ÍNDICE DE LACEY FINAL PARA AS SIMULAÇÕES DO PLANEJAMENTO 3 ³	101
APÊNDICE 3- RESULTADOS DA CONSTANTE CINÉTICA DE MISTURA PARA AS SIMULAÇÕES DO PLANEJAMENTO 3 ³	102

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Regimes de escoamento em um tambor rotatório em que $\omega_1 < \omega_2 < \omega_3 < \omega_4 < \omega_5 < \omega_6$ (adaptado de SANTOS, 2015)	15
Figura 2.2: Diagrama de Comportamento do Leito (MACHADO, 2016).	16
Figura 2.3: Regime de deslizamento no tambor rotatório.	17
Figura 2.4: Tambor rotatório em regime de avalanche.	18
Figura 2.5: Regiões ativa e passiva no regime de rolamento em um tambor rotatório (adaptado de HEYDENRYCH, 2001).	19
Figura 2.6: Regime de cascadeamento no tambor rotatório.	20
Figura 2.7: Tambor rotatório em regime de catarateamento.	21
Figura 2.8: Representação dos tipos de centrifugação em um tambor rotatório – a) somente a camada mais externa das partículas aderidas às paredes do tambor; b) todo o material sólido aderido às paredes do tambor (adaptado de NOROUZI et al., 2016).	22
Figura 2.9: Suspensores no eixo de rotação usados por Jiang et al. (2011) (a) um suspensor horizontal, (b) dois suspensores em cruz, (c) três suspensores em estrela.	27
Figura 2.10: Algoritmo empregado nas simulações DEM (adaptado de O’SULLIVAN, 2011).	34
Figura 2.11: Esquema do modelo de contato mola-amortecedor (BHATTACHARYA, 2011).	36
Figura 3.1: Disposição inicial do material granular no interior do tambor rotatório.	48
Figura 3.2: Determinação do ângulo de repouso dinâmico: a) recorte do leito de partículas; b) seleção do leito; c) extração dos pontos de fronteira do leito.	50
Figura 3.3: Etapas utilizadas no tratamento das imagens para obtenção do Índice de mistura experimental.	52
Figura 3.4: Seleção da seção do leito de partículas para determinação do índice de mistura.	54
Figura 3.5: Fluxograma da estrutura do código utilizado no cálculo do Índice de Lacey.	55
Figura 3.6: Tambores com o número de suspensores variando de 1 a 10.	58
Figura 3.7: Vista frontal (a) e lateral (b) da geometria de um tambor rotatório com 8 suspensores.	60
Figura 3.8: Dados gerais da simulação no arquivo de entrada	61

Figura 3.9: Modelo de contato e propriedades DEM no arquivo de entrada.....	61
Figura 3.10: Importação das geometrias e inserção das partículas no arquivo de entrada	62
Figura 3.11: Definição do tempo de simulação e informações de saída no arquivo de entrada.	62
Figura 4.1: Ângulo de repouso medido para as simulações do PCC em relação ao experimental	66
Figura 4.2: Comparação entre os Índices de Lacey medidos por diferentes métodos para uma mesma condição.....	67
Figura 4.3: Constante cinética de mistura para as simulações do PCC em relação ao valor experimental	67
Figura 4.4: Cinética de mistura para a condição experimental e a condição calibrada	69
Figura 4.5: Índice de Lacey pelo tempo em diferentes condições para (a) efeito da densidade (b) efeito do tamanho.....	71
Figura 4.6: Efeito da adição de 6 suspensores com $L/R = 0,75$ no Índice de Lacey final para grau de enchimento de 50%.....	73
Figura 4.7: Índice de Lacey final para as simulações do planejamento tipo 3^3	74
Figura 4.8: Seção transversal do tambor com 50% de grau de enchimento após 70 s de rotação para diferentes combinações de suspensores: (a) 2 suspensores com $L/R = 0,25$, (b) 6 suspensores com $L/R = 0,75$	77
Figura 4.9: Constante cinética de mistura para as simulações do planejamento do tipo 3^3	78
Figura 4.10: Constante cinética de mistura em um tambor com 4 suspensores.	80
Figura 4.11: Constante cinética de mistura para diferentes números de suspensores. .	81
Figura 4.12: Constante cinética de mistura para um número ímpar e par de suspensores.	82
Figura 4.13: Disposição entre lacunas e suspensores para: (a) tambores com número par de suspensores (lacuna oposta a lacuna) e (b) tambores com número ímpar de suspensores (lacuna oposta a suspensor).	83
Figura 4.14: Constante cinética de mistura para diferentes tamanhos do suspensor....	83
Figura 4.15: Lacunas entre suspensores para (a) $L/R = 0,8$ e (b) $L/R = 0,9$	84
Figura 4.16: Efeito do uso de suspensores na evolução de uma mistura binária em um tambor rotatório com grau de enchimento de 25%.	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Classificação dos regimes de escoamento em um tambor rotatório (adaptado de MELLMANN, 2001).	16
Tabela 2.2: Equações de velocidades críticas de centrifugação.	23
Tabela 3.1: Planejamento do composto central para determinação dos parâmetros DEM.	49
Tabela 3.2: Condições utilizadas para simulação da análise dos parâmetros numéricos no software LIGGGHTS®-PUBLIC.	49
Tabela 3.3: Configurações de partículas no estudo de segregação em tambor rotatório.	56
Tabela 3.4: Planejamento 3 ³ para avaliar o efeito dos suspensores.	56
Tabela 3.5: Matriz do Planejamento Composto Central para avaliação da cinética de mistura.	59
Tabela 4.1: Comparação entre os valores de parâmetros encontrados na simulação 14 com os medidos experimentalmente (LIMA, 2017).	68
Tabela 4.2: Variáveis significativas do PCC para determinação dos parâmetros DEM a partir do ângulo de repouso.	69
Tabela 4.3: Variáveis significativas do PCC para determinação dos parâmetros DEM a partir da constante cinética de mistura.	69
Tabela 4.4: Efeito da adição de 6 suspensores com $L/R = 0,75$ no Índice de Lacey final para grau de enchimento de 50%.	73
Tabela 4.5: Análise de regressão hierárquica do Índice de Lacey final usando o número de suspensores (NS), razão da altura do suspensor pelo raio do tambor (L/R) e grau de enchimento (GE) como preditores.	76
Tabela 4.6: Efeitos lineares normalizados dos fatores investigados	79
Tabela 4.7: Constante cinética de mistura para as simulações do PCC.	86
Tabela 4.8: Variáveis significativas do PCC.	87

LISTA DE SÍMBOLOS

a	aceleração	$M^0 L^1 T^{-2}$
a_i	proporção volumétrica do componente de referência na amostra i	$M^0 L^0 T^0$
\bar{a}	média da proporção volumétrica do componente de referência	$M^0 L^0 T^0$
c_i	proporção do componente de referência na amostra i	$M^0 L^0 T^0$
\bar{c}	Média da proporção do componente de referência	$M^0 L^0 T^0$
E^*	módulo de Young equivalente	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
E_i	módulo de Young da partícula i	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
e_p	coeficiente de restituição	$M^0 L^0 T^0$
e_{pp}	coeficiente de restituição partícula-partícula	$M^0 L^0 T^0$
e_{pw}	coeficiente de restituição partícula-parede	$M^0 L^0 T^0$
f	grau de enchimento	$M^0 L^0 T^0$
F	força	$M^1 L^1 T^{-2}$
$F_{t,max}^d$	força tangencial máxima de amortecimento	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_f	força de atrito	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_p	força peso	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_{ij}	força entre a partícula i e j	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_n	força normal	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_n^d	força normal de amortecimento	$M^1 L^1 T^{-2}$
Fr	número de froude	$M^0 L^0 T^0$
F_{ij}^N	força normal	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_{ij}^T	força tangencial	$M^1 L^1 T^{-2}$
g	gravidade	$M^0 L^1 T^{-2}$
G^*	módulo de cisalhamento equivalente	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
G_i	módulo de cisalhamento da partícula i	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
I_i	momento de inercia da partícula i	$M^1 L^2 T^0$
k_n	rigidez normal do modelo linear	$M^1 L^0 T^{-2}$
K_{sf}	troca de momento entre as fases sólida e fluida	$M^1 L^0 T^{-1}$
k_t	rigidez tangencial do modelo linear	$M^1 L^0 T^{-2}$

M_L	índice de Lacey	$M^0 L^0 T^0$
m	massa	$M^1 L^0 T^0$
m^*	massa equivalente	$M^1 L^0 T^0$
m_i	massa da partícula i	$M^1 L^0 T^0$
N	número de amostras	$M^0 L^0 T^0$
n	número de partículas por amostra	$M^0 L^0 T^0$
N_{eq}	número total de partículas equivalentes	$M^0 L^0 T^0$
p	pressão	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
p_s	pressão de sólidos	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
R	raio da partícula	$M^0 L^1 T^0$
R	raio do tambor	$M^0 L^1 T^0$
R^*	raio equivalente	$M^0 L^1 T^0$
r_i	raio da partícula i	$M^0 L^1 T^0$
r_{min}	raio da menor partícula do sistema	$M^0 L^1 T^0$
S_n	rigidez normal do modelo não linear	$M^1 L^0 T^{-2}$
S_t	rigidez tangencial do modelo não linear	$M^1 L^0 T^{-2}$
t	tempo	$M^0 L^0 T^1$
$\bar{\bar{T}}$	tensor tensão	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
$\bar{\bar{T}}_f$	tensor tensão da fase fluída	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
$\bar{\bar{T}}_s$	tensor tensão da fase sólida	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
T_R	tempo critico de integração	$M^0 L^0 T^1$
v	velocidade da partícula	$M^0 L^1 T^{-1}$
V	velocidade característica	$M^0 L^1 T^{-1}$
V_0	velocidade inicial	$M^0 L^1 T^{-1}$
V_1	velocidade final	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_i	velocidade da partícula i	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_{rel}^N	velocidade relativa normal	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_{rel}^T	velocidade relativa tangencial	$M^0 L^1 T^{-1}$
\vec{v}_s	vetor velocidade da fase sólida	$M^0 L^1 T^{-1}$
\vec{v}_f	vetor velocidade da fase fluida	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_i	velocidade linear da partícula i	$M^0 L^1 T^{-1}$
V_i	velocidade de impacto	$M^0 L^1 T^{-1}$

v_R	velocidade de onda de rayleigh	$M^0 L^1 T^{-1}$
x_j	posição da partícula j	$M^0 L^1 T^0$
símbolos gregos		
α	fração volumétrica	$M^0 L^0 T^0$
α_f	fração volumétrica da fase fluida	$M^0 L^0 T^0$
α_i	ângulo de impacto	$M^0 L^0 T^0$
α_r	ângulo de rechaço	$M^0 L^0 T^0$
α_s	fração volumétrica da fase sólida	$M^0 L^0 T^0$
β	coeficiente de amortecimento	$M^1 L^0 T^{-1}$
γ	razão entre diâmetro da partícula com espessura da chapa	$M^0 L^0 T^0$
γ_n	coeficiente normal de amortecimento	$M^0 L^0 T^0$
γ_t	coeficiente tangencial de amortecimento	$M^0 L^0 T^0$
δ_n	deformação viscoelástica normal	$M^0 L^1 T^0$
δ_t	deformação viscoelástica tangencial	$M^0 L^1 T^0$
$\dot{\delta}_n$	velocidade de deformação viscoelástica normal	$M^1 L^0 T^{-1}$
$\dot{\delta}_t$	velocidade de deformação viscoelástica tangencial	$M^1 L^0 T^{-1}$
θ	ângulo de atrito estático	$M^0 L^0 T^0$
θ_D	ângulo de repouso dinâmico	$M^0 L^0 T^0$
θ_i	posição angular de partícula i	$M^0 L^0 T^0$
θ_L	ângulo de repouso inferior	$M^0 L^0 T^0$
θ_U	ângulo de repouso superior	$M^0 L^0 T^0$
λ_n	coeficiente de amortecimento normal	$M^1 L^0 T^{-1}$
λ_t	coeficiente de amortecimento tangencial	$M^1 L^0 T^{-1}$
μ	coeficiente de atrito	$M^0 L^0 T^0$
μ_k	coeficiente de atrito cinético	$M^0 L^0 T^0$
μ_R	coeficiente de atrito de rolamento	$M^0 L^0 T^0$
μ_{Rpp}	coeficiente de atrito de rolamento partícula-partícula	$M^0 L^0 T^0$
μ_{Rpw}	coeficiente de atrito de rolamento partícula-parede	$M^0 L^0 T^0$
μ_s	coeficiente de atrito estático	$M^0 L^0 T^0$
μ_{spp}	coeficiente de atrito estático partícula-partícula	$M^0 L^0 T^0$
μ_{spw}	coeficiente de atrito estático partícula-parede	$M^0 L^0 T^0$
$\mu_{spw,c}$	coeficiente de atrito estático partícula-parede crítico	$M^0 L^0 T^0$
ρ_f	densidade da fase fluída	$M^1 L^{-3} T^0$

ρ_p	densidade da partícula	$M^1L^{-3}T^0$
ρ_s	densidade da fase sólida	$M^1L^{-3}T^0$
σ^2	variância da composição da mistura	$M^0L^0T^0$
σ_{seg}^2	variância da mistura totalmente segregada	$M^0L^0T^0$
σ_{mix}^2	variância da mistura aleatória	$M^0L^0T^0$
σ_p	razão de poisson	$M^0L^0T^0$
σ_r	desvio padrão final da composição da mistura	$M^0L^0T^0$
σ_r^2	variância final da composição da mistura	$M^0L^0T^0$
τ_{ij}	torque entre a partícula i e j	$M^1L^2T^{-2}$
ω	velocidade angular de rotação do tambor	$M^0L^0T^{-1}$
ω_c	velocidade angular crítica de rotação do tambor	$M^0L^0T^{-1}$
ω_i	velocidade angular da partícula i	$M^0L^1T^{-1}$

RESUMO

Tambores rotatórios são frequentemente usados no processamento de materiais granulares. O estudo do escoamento de partículas no interior de um tambor em rotação é fundamental para melhorar a eficácia desse equipamento. Por exemplo, existe uma tendência de partículas com propriedades distintas como formato, densidade ou tamanho, segregar quando colocadas em rotação no interior do tambor. Partículas menores e mais densas tendem a percolar pelas partículas maiores e menos densas na camada ativa e a se concentrar no centro do leito. Múltiplas variáveis afetam a eficiência da mistura como grau de enchimento, geometria do tambor, propriedades das partículas e a utilização de suspensores, que quando adicionados, perturbam a dinâmica das partículas. No presente trabalho, o Método dos Elementos Discretos (DEM) foi utilizado para investigar a influência da adição de suspensores à geometria do tambor na cinética de mistura e no grau de segregação para uma mistura binária. As simulações foram realizadas através do *software* de código aberto LIGGGHTS®-PUBLIC. Os coeficientes de atrito estático e atrito de rolamento, parâmetros para o modelo DEM, foram analisados através de uma série de simulações baseadas em um Planejamento Composto Central. Os resultados das simulações para o ângulo de repouso e constante cinética de mistura foram comparados com valores experimentais e uma boa concordância foi observada para seis condições. A condição, cujos parâmetros DEM foram os mais próximos aos reportados por Lima (2017), foi utilizada nas simulações subsequentes. Um planejamento do tipo 3^3 foi realizado para avaliar os efeitos do grau de enchimento, tamanho e quantidade dos suspensores na cinética de mistura e no grau de segregação (Índice de Lacey). A segregação foi analisada para os casos em que ela é promovida pela diferença de densidade e diferença de tamanho. Em relação ao controle da segregação, o uso de suspensores foi capaz de elevar o Índice de Lacey de 0,51 a 0,94 para um grau de enchimento de 50% usando 6 suspensores com razão entre o comprimento do suspensor e o raio do tambor (L/R) de 0,75. Os suspensores também melhoraram a velocidade de mistura, elevando a constante cinética de mistura em um grau de enchimento de 25% de $0,198 \text{ s}^{-1}$ sem suspensores para até $0,377 \text{ s}^{-1}$ usando 6 suspensores com L/R de 0,50. O tamanho das partículas também foi investigado, porém não apresentou efeito significativo na velocidade de mistura.

Palavras-chave: tambor rotatório, mistura de partículas, segregação, suspensores, método dos elementos discretos.

ABSTRACT

Rotary drums are frequently used when processing granular materials. The study of particle flow inside a rotating drum is imperative to improve the effectiveness of this equipment. One of the processes it is used is in the mixing of granular materials. However, particles with distinct properties such as shape, density and size, have a tendency to segregate when rotating inside a drum. Smaller and heavier particles percolate through larger and lighter particles in the active layer and concentrate at the center of the bed. Multiple variables affect the mixing efficiency such as filling degree, drum geometry, particle properties and the use of baffles, which disturb the particle flow. In the present study, the Discrete Element Method (DEM) was utilized to investigate the influence of adding baffles to the drum geometry on the mixing rate and the degree of segregation for a binary mixture. The simulations were performed with LIGGGHTS®-PUBLIC open source software. The static and rolling friction coefficients - DEM model parameters - were analyzed through a series of simulations based on a Central Composite Design. The simulation results for the repose angle and the mixing rate constant were compared to experimental findings and a high degree of agreement was observed for six conditions. The one with DEM parameters closest in value to those reported by Lima (2017) was used for subsequent simulations. A 3^3 experimental design was performed to evaluate the effects of filling degree, size and number of lifters on the mixing rate constant and degree of segregation (Lacey index). Segregation was analyzed for both size-driven segregation and density-driven segregation. Regarding segregation control, the use of baffles was responsible to increase Lacey index from 0,51 to 0,94 at 50% filling degree using 6 baffles and baffle length to drum radius ratio (L/R) of 0,75. Baffles also showed significant effect in improving the mixing velocity, raising the mixing rate constant at 25% filling degree from $0,194 \text{ s}^{-1}$ without baffles up to $0,377 \text{ s}^{-1}$ using 6 baffles and L/R of 0,50. The particle size was also investigated but had no effect on mixing velocity.

Key-words: rotary drum, particle mixing, segregation, baffles, discrete element method.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O tambor rotatório, por contar com vantagens como elevada capacidade de processamento, facilidade de limpeza e estrutura simples, é amplamente utilizado no processamento de materiais granulares. Este equipamento encontra aplicações nas indústrias de alimentos, fertilizantes, químicas, farmacêuticas e outras.

Para aperfeiçoar os processos realizados com tambores rotatórios, é necessário conhecer a dinâmica das partículas em seu interior. Henein *et al.* (1983) identificaram seis regimes de escoamento em tambores rotatórios, sendo eles: deslizamento, avalanche, rolamento, cascadeamento, catarateamento e centrifugação. As investigações numéricas do presente trabalho foram realizadas no regime de rolamento, sendo este o regime mais comum em aplicações industriais (HAJRA *et al.*, 2010).

Uma das principais áreas de aplicação do tambor rotatório é na mistura de materiais granulares. Em alguns processos industriais, é desejável misturar dois ou mais tipos de produtos granulares até atingir a homogeneidade. No entanto, tipos diferentes de materiais, quando colocados simultaneamente em tambores rotatórios, tendem a segregar devido a diferenças nas propriedades das partículas como forma, tamanho e densidade. A segregação impede a manutenção da uniformidade da mistura e leva, em alguns casos, à redução na qualidade do produto final. Dessa forma, a segregação é uma fonte contínua de problemas nas indústrias que processam materiais granulares e formas de evitá-la têm sido temas recorrentes de pesquisa (BHATTACHARYA, 2011; HAJRA *et al.*, 2010; JIANG *et al.*, 2011; LI; MCCARTHY, 2003).

A eficiência de mistura de um tambor rotatório depende de diversos parâmetros como o grau de enchimento, o tempo de mistura, a concentração dos componentes, a geometria do misturador, o padrão de carregamento inicial e a presença de suspensores. O uso de suspensores altera os campos de velocidade das partículas no tambor rotatório e interfere na convecção e na difusão na camada ativa (ZHOU *et al.*, 2016). Portanto, no projeto de um tambor rotatório, a inclusão de suspensores é um fator chave a ser considerado em relação à cinética de mistura.

Para estudar a dinâmica do material granular e o efeito das variáveis que influenciam o escoamento no tambor rotatório, modelos matemáticos podem ser

implementados para simular uma ampla gama de condições. A modelagem matemática pode ser classificada em duas abordagens: a Euleriana e a Lagrangeana. Na abordagem Euleriana, as partículas são modeladas como um meio contínuo. Todas as quantidades são dadas por funções contínuas da posição e do tempo (VALLE, 2012). Na abordagem Lagrangeana, as Leis do Movimento de Newton são aplicadas em cada partícula individualmente. O comportamento macroscópico do conjunto de partículas é determinado pelas interações microscópicas entre partículas e das partículas com as paredes. Na abordagem Lagrangeana, o Método dos Elementos Discretos (DEM) destaca-se como ferramenta usual na representação de escoamento de materiais granulares.

A implementação do Método dos Elementos Discretos já está disponível em uma variedade de *softwares*, tanto comerciais, quanto de código aberto. Os *softwares* de código aberto, além de não necessitar da aquisição de licenças, oferecem flexibilidade para acessar e modificar o código fonte de acordo com as necessidades do usuário e da modelagem utilizada. Dentre eles, o *software* LIGGGHTS®-PUBLIC oferece recursos como ferramentas para importar e mover geometrias e a possibilidade de executar processamento paralelo.

Neste trabalho, foram investigadas diversas condições para analisar o processo de segregação e melhorar a eficiência de mistura, através da adição de suspensores no tambor rotatório. Para isso, o *software* LIGGGHTS®-PUBLIC foi utilizado nas simulações, sendo estas comparadas com dados experimentais, oriundos de trabalhos já desenvolvidos no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia (PPGEQ-UFU).

1.1 OBJETIVOS

Este trabalho teve como objetivo geral estudar, por meio de técnicas numéricas, os fenômenos de mistura e segregação no interior de um tambor rotatório com suspensores. Por sua vez, os objetivos específicos foram:

- Determinar os coeficientes de atrito estático e atrito de rolamento entre partículas e entre partícula/parede que mais se aproximam de resultados experimentais da literatura;

- Avaliar o efeito da variação das condições operacionais, configurações do equipamento e das propriedades granulares sobre o fenômeno de segregação;
- Investigar a cinética de mistura em tambor rotatório, variando o número e tamanho de suspensores para diferentes graus de enchimento.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo é apresentada a revisão de literatura referente aos principais conteúdos explorados nesse trabalho. Os temas abordados referem-se ao tambor rotatório, regimes de escoamento, abordagem numérica e *softwares* DEM.

2.1 TAMBOR ROTATÓRIO

O tambor rotatório é um equipamento industrial para processamento de partículas. É constituído por um cilindro carregado com o material a ser processado, colocado em posição horizontal ou levemente inclinado, que gira com determinada velocidade de rotação. Uma de suas principais propriedades é promover o contato entre sólidos e gases. Existem inúmeras áreas em que ele é amplamente utilizado como na mineração, metalurgia, agricultura, indústria farmacêutica, indústria química e indústria de alimentos. Por ser fácil de operar, versátil, e permitir trabalhar com partículas de vários tipos e tamanhos, é frequentemente empregado na secagem ou resfriamento de partículas, como carvão, grãos e diversos minérios (SHERRITT *et al.*, 1994). Outros tipos de processamento possíveis incluem mistura, moagem, incineração, umidificação, reações químicas gás-sólido, revestimento e granulação (JAUHARI, 1997).

O tambor rotatório também encontra aplicação na investigação de propriedades das partículas. O teste em tambor rotatório permite medir o ângulo da superfície inclinada de um material no interior do tambor em determinada velocidade de rotação. Esse ângulo é conhecido como ângulo de repouso dinâmico e está relacionado com as interações partícula-partícula e partícula-parede. É possível também medir a coesão entre as partículas de um material a partir dos intervalos de tempo entre uma avalanche e outra (THAKUR, 2014).

As características geométricas dos tambores rotatórios são ajustadas de acordo com a aplicação. Na indústria, são usados diferentes diâmetros e comprimentos. A velocidade de rotação e o grau de enchimento de operação também são variados. Os tambores podem operar tanto em regime batelada, quanto em processos contínuos. Alguns tambores contam com o uso de suspensores que aumentam o contato gás-sólido. Esses suspensores são igualmente distribuídos ao longo da circunferência do tambor, se estendendo por todo o seu comprimento e podem ser usados em diferentes quantidades e formatos (JAUHARI, 1997).

Tanto as condições operacionais do tambor, como velocidade de rotação e o grau de enchimento, quanto as propriedades do material granular, influenciam na dinâmica do movimento das partículas durante seu processamento. Assim, para encontrar a configuração ideal para o processamento de um material em determinada aplicação, é necessário classificar os regimes de escoamento e avaliar a influência dessas variáveis no comportamento do escoamento.

2.2 REGIMES DE ESCOAMENTO

O escoamento de sólidos no interior de um tambor rotatório pode acontecer de diferentes formas. O tipo de escoamento é definido pelas dimensões do tambor, propriedades da partícula, a velocidade de rotação e o grau de enchimento (HEYDENRYCH, 2001). O comportamento do movimento de partículas carregadas em um tambor em rotação representa um fenômeno complexo. Muitos trabalhos dedicaram-se a observar e modelar o movimento do material granular. Destacam-se os trabalhos de Henein *et al.* (1983) e Mellmann (2001), que classificaram e estudaram a fundo os regimes de escoamento.

De acordo com Henein *et al.* (1983), existem seis regimes de escoamento: deslizamento, caimento ou “avalanche”, rolamento, cascadeamento, catarateamento e centrifugação. O padrão desses escoamentos é apresentado a seguir na Figura 2.1.

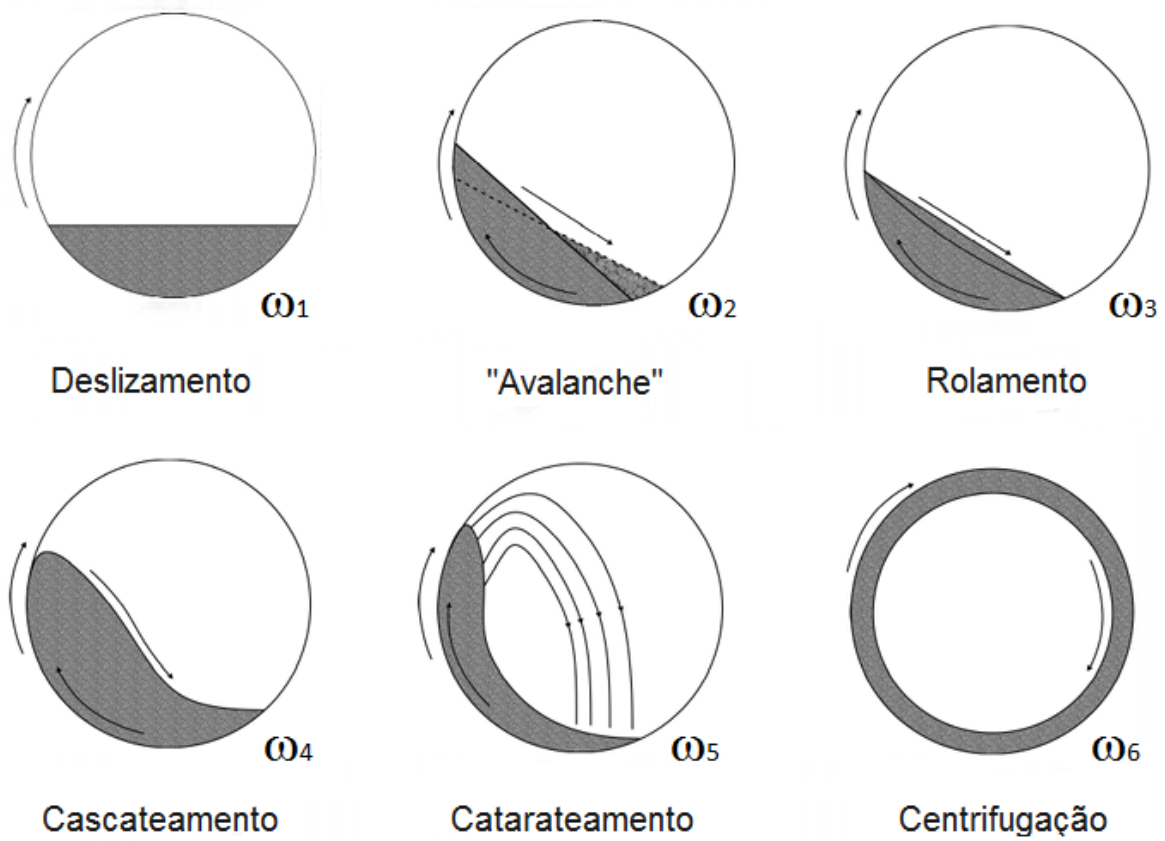


Figura 2.1: Regimes de escoamento em um tambor rotatório em que $\omega_1 < \omega_2 < \omega_3 < \omega_4 < \omega_5 < \omega_6$ (adaptado de SANTOS, 2015)

No estudo dos regimes de escoamento, a velocidade de rotação é geralmente avaliada em termos de um número adimensional denominado número de Froude, apresentado na Equação 2.1.

$$Fr = \frac{\omega^2 R}{g} \quad (2.1)$$

O tipo de regime depende principalmente do número de Froude (Fr), grau de enchimento (f) e o coeficiente de atrito estático das partículas com a parede (μ_{p-w}). A Tabela 2.1 apresenta as faixas de operação dessas variáveis que resultam nos diferentes regimes de escoamento. O parâmetro ($\mu_{p-w,c}$) representa o atrito estático crítico em que ocorre a transição do regime de deslizamento para “avalanche”.

Tabela 2.1: Classificação dos regimes de escoamento em um tambor rotatório (adaptado de MELLMANN, 2001).

Regimes	Deslizamento	Avalanche	Rolamento	Cascadeamento	Catarateamento	Centrifugação
Número de Froude	$0 < F_r < 10^{-4}$	$10^{-5} < F_r < 10^{-3}$	$10^{-4} < F_r < 10^{-2}$	$10^{-3} < F_r < 10^{-1}$	$0,1 < F_r < 1$	$F_r \geq 1$
Grau de preenchimento	$f < 0,1$	$f < 0,1$	$f > 0,1$		$f > 0,2$	
Coefficiente de atrito na parede	$\mu_{p-w} < \mu_{p-w,c}$	$\mu_{p-w} > \mu_{p-w,c}$				
Aplicação	-	Secadores rotatórios, reatores, resfriadores e misturadores			Moinhos de bola	-

É importante ressaltar que, segundo Mellmann (2001), as faixas dos valores do número de Froude e grau de enchimento delimitadas para cada regime representam apenas uma orientação, podendo variar a depender do material utilizado.

Estudos desenvolvidos por Henein *et al.* (1983) envolvendo tambores rotatórios resultaram no Diagrama de Comportamento do Leito, apresentado na Figura 2.2.

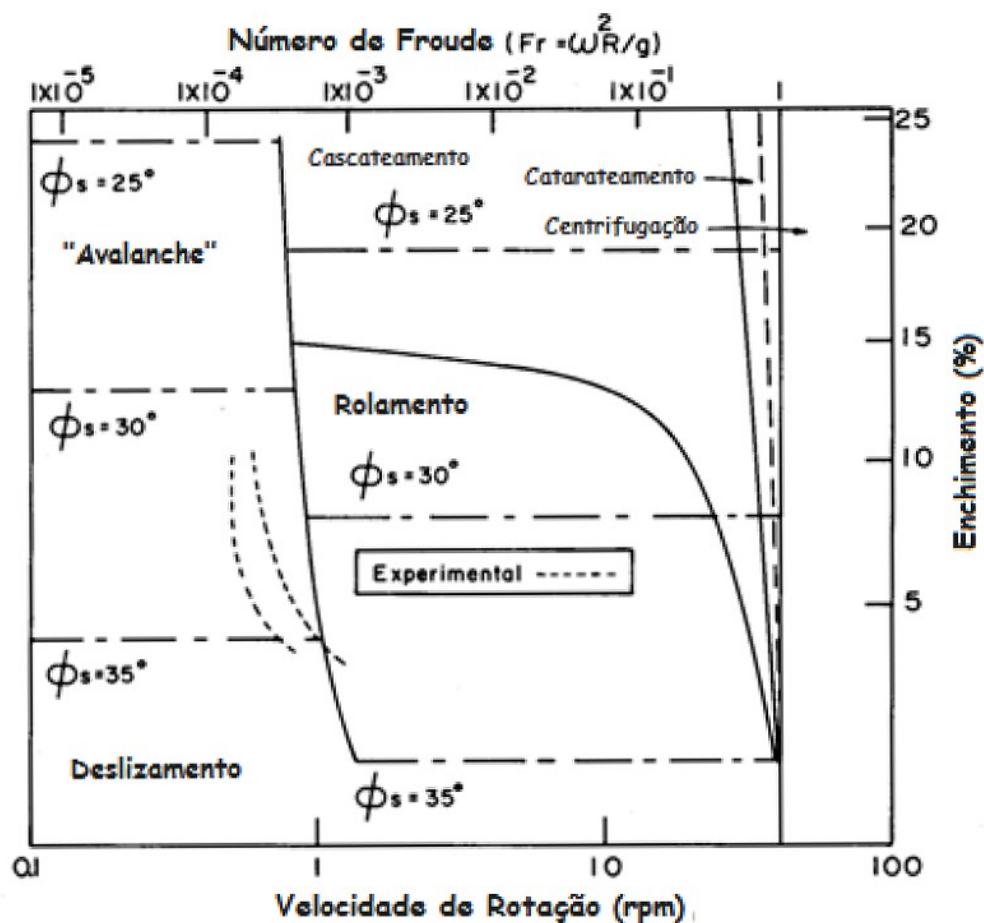


Figura 2.2: Diagrama de Comportamento do Leito (Adaptado de HENEIN *et al*, 1983b).

Nesse diagrama é possível prever o tipo de comportamento do leito baseado no número de Froude e no grau de enchimento do tambor. Os regimes individuais apresentados na Figura 2.1 serão descritos a seguir.

2.2.1 REGIME DE DESLIZAMENTO

O regime de deslizamento acontece quando as paredes internas do cilindro rotatório são muito lisas e a carga de material é baixa. De acordo com Mellmann (2001), esse regime caracteriza-se por um leito granular praticamente em repouso em que o material está em constante deslizamento com as paredes do tambor em rotação, geralmente apresentando um pequeno ângulo de deflexão, como mostrado na Figura 2.3.

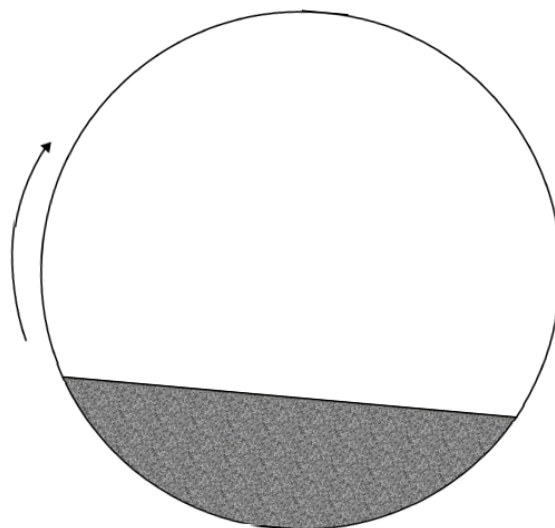


Figura 2.3: Regime de deslizamento no tambor rotatório.

A mistura entre partículas é quase inexistente, o que prejudica a transferência de calor e massa do material, resultando em um produto de qualidade inferior. Esse regime pode ser evitado usando tambores de paredes mais rugosas ou com a inclusão de suspensores de variados formatos ao longo das paredes internas do cilindro (AISSA *et al.*, 2012).

2.2.2 REGIME DE AVALANCHE OU CAIMENTO

No regime de avalanche, o leito granular no fundo do tambor é rotacionado como um corpo rígido junto com as paredes do tambor até atingir o ângulo superior, θ_U . Nesse momento, partículas na parte superior do leito começam a deslizar pela superfície, na forma de uma avalanche. Esse fluxo de partículas deslizando permanece até que o ângulo de repouso da superfície inclinada atinja o ângulo inferior, θ_L . Segundo Hema (2003), esse ângulo é menor do que o ângulo de repouso estático do material. O tambor em regime de avalanche é ilustrado na Figura 2.4.

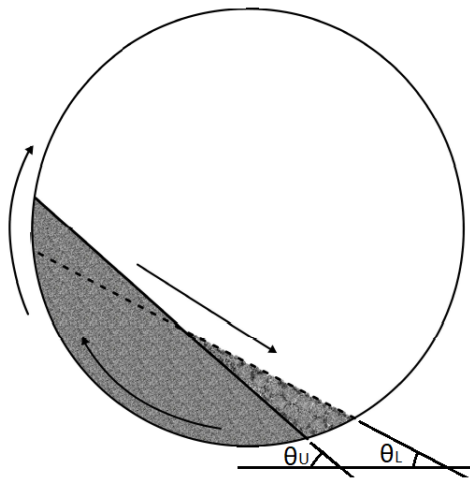


Figura 2.4: Tambor rotatório em regime de avalanche.

O movimento de avalanche ocorre periodicamente e o intervalo de tempo entre avalanches consecutivas decresce com o aumento da velocidade de rotação do tambor até deixar de existir, conforme se estabelece o regime de rolamento. Essa transição não é bem definida e o leito comporta-se de maneira imprevisível durante a transição (HEMA, 2003). Xiao *et al.* (2005) estudaram a influência da velocidade de rotação, grau de enchimento e dimensões do material nos ângulos inferiores e superiores do regime de avalanche. Eles concluíram que, ao contrário do que se encontrava na literatura, os ângulos inferior e superior não são independentes, existindo uma relação linear entre eles. Além disso, o aumento da razão entre o diâmetro da partícula e o do tambor também aumenta os valores desses ângulos. Não foram encontrados efeitos

significativos da velocidade de rotação e do grau de enchimento nestes estudos mencionados.

2.2.3 REGIME DE ROLAMENTO

A partir do regime de avalanche, ao se aumentar a velocidade de rotação, a diferença entre os ângulos superior e inferior do leito diminui até que o ângulo da superfície livre do leito já não oscila mais. Nesse momento, o regime de rolamento se estabelece. O ângulo da superfície no regime de rolamento é chamado de ângulo de repouso dinâmico e seu valor é aproximadamente a média entre os ângulos inferior e superior do regime de avalanche (MELLMANN, 2001). No regime de rolamento, o leito divide-se em duas regiões, a camada ativa e a camada passiva. A camada passiva consiste na maior parte do leito, como mostrado na Figura 2.5.

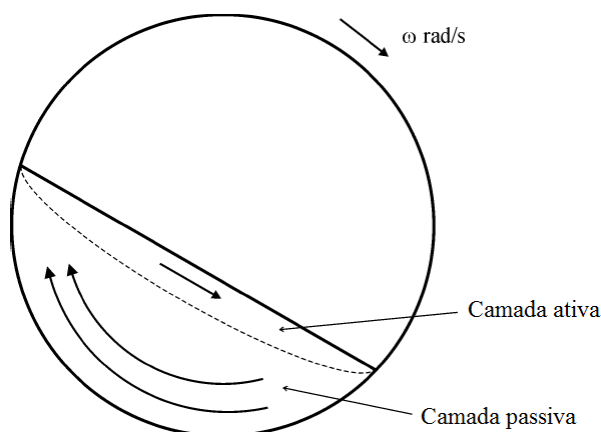


Figura 2.5: Regiões ativa e passiva no regime de rolamento em um tambor rotatório (adaptado de HEYDENRYCH, 2001).

Na camada passiva, o leito comporta-se como um corpo rígido que gira em torno do eixo do cilindro com a mesma velocidade de rotação do tambor. A mistura entre partículas é ínfima. Já a camada ativa é formada por uma camada mais fina de partículas que deslizam em alta velocidade pela superfície livre do leito. Essa camada é continuamente alimentada por partículas da camada passiva que atingem o topo do leito. Segundo Arntz (2010), na camada ativa ocorre um movimento difusional e aleatório entre partículas, resultante das colisões entre elas. Por isso, ela é a responsável pelos

processos de mistura e segregação de partículas. Quanto maior a espessura da camada ativa, maior é o tempo em que as partículas são expostas aos gases da região livre acima do leito e maiores são a mistura e as transferências de calor e massa entre as partículas e das partículas com o meio (JAUHARI, 1997).

Devido à eficiência de mistura e uniformidade do regime de escoamento, este é o regime de operação que apresenta mais aplicações, como já mostrado na Tabela 2.1 e é o mais utilizado na indústria (BHATTACHARYA, 2011).

2.2.4 REGIME DE CASCADEAMENTO

Se durante o regime de rolamento a velocidade de rotação é amplificada, as partículas da região superior do leito passam a se desprender da parede em uma altura maior. A superfície livre do leito, até então praticamente plana, começa a se arquear fazendo com que o leito tome a forma de um S (MCELROY *et al.*, 2009) como pode ser observado na Figura 2.6. Esse regime é denominado regime de cascadeamento.

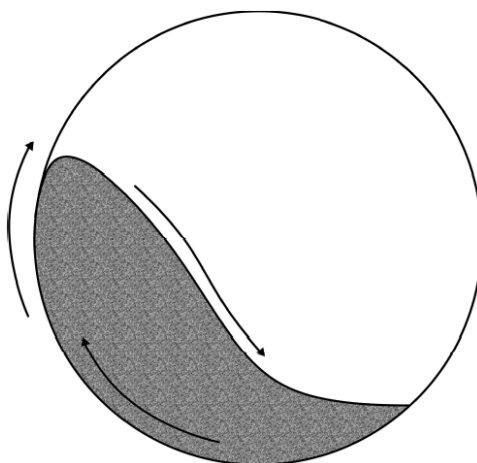


Figura 2.6: Regime de cascadeamento no tambor rotatório.

De acordo com Mellmann (2001), a altura do arco formado aumenta com o aumento da velocidade de rotação. Para partículas não-esféricas, a superfície em forma de S acontece em velocidades de rotação inferiores do que para partículas esféricas, sugerindo que existe influência do formato das partículas no ponto de transição entre rolamento e cascadeamento (NOROUZI *et al.*, 2016).

2.2.5 REGIME DE CATARATEAMENTO

Durante o regime de catarateamento, uma porção significativa de sólidos do leito é projetada no espaço livre do tambor, caindo posteriormente na parte mais rasa do leito, formando uma “catarata” de partículas, como ilustrado na Figura 2.7. À medida que a velocidade de rotação aumenta, o número de partículas sendo lançadas, bem como o tamanho de suas trajetórias, também aumentam.

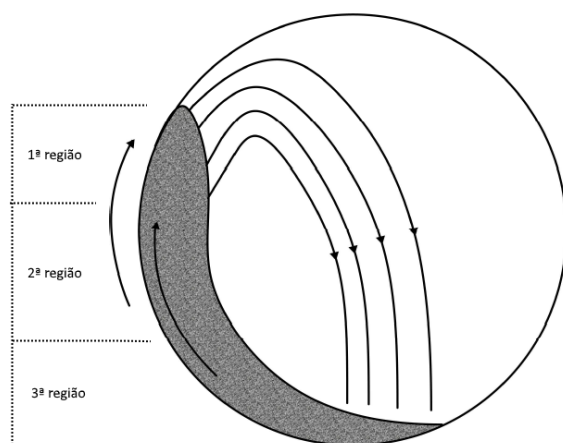


Figura 2.7: Tambor rotatório em regime de catarateamento.

De acordo com Arntz (2010), esse regime pode ser dividido em três regiões. Na primeira, partículas são lançadas com altas velocidades. Quanto mais próxima à parede, maior a velocidade e a altitude alcançada pela partícula. Na segunda região, a velocidade é insuficiente para lançar as partículas e elas apenas rolam pela camada externa. Na terceira região, na parte rasa do leito, as partículas que foram lançadas e as que rolaram encontram-se para entrar na parte densa do leito.

2.2.6 REGIME DE CENTRIFUGAÇÃO

A transição do regime de catarateamento para centrifugação acontece com aumentos ainda maiores na velocidade de rotação. Desse modo, as partículas que antes eram lançadas para o espaço livre do leito, passam a se aderir às paredes do cilindro.

O critério utilizado para verificar a transição do regime de catarateamento para centrifugação é a velocidade crítica de centrifugação (w_c). Segundo Watanabe (1999),

pode-se definir a velocidade crítica de duas maneiras: a primeira seria a velocidade alcançada quando todo o material sólido adere-se às paredes do cilindro, como na Figura 2.8(b), o que somente acontece em velocidades de rotação extremamente altas (MELLMANN, 2001). A segunda maneira seria quando apenas a camada mais externa de partículas se adere às paredes do cilindro, como na Figura 2.8(a).

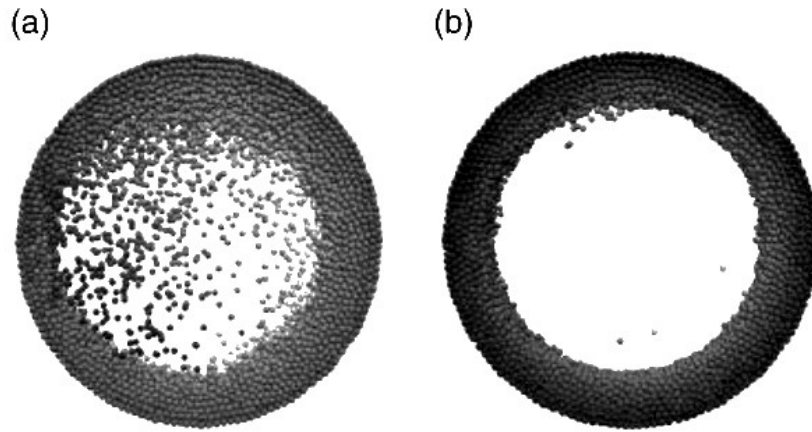


Figura 2.8: Representação dos tipos de centrifugação em um tambor rotatório – a) somente a camada mais externa das partículas aderidas às paredes do tambor; b) todo o material sólido aderido às paredes do tambor (adaptado de NOROUZI *et al.*, 2016).

De acordo com a mecânica clássica, durante a centrifugação, existe um equilíbrio das forças gravitacional e centrífuga atuando sobre as partículas. Nessa condição, o número de Froude é unitário e a velocidade crítica de centrifugação é definida pela Equação 2.2.

$$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R}} \quad (2.2)$$

No entanto, o que se observa na prática é a necessidade do número de Froude ser muito superior à unidade para que ocorra a adesão das partículas nas paredes do tambor (MELLMANN, 2001). A Equação 2.2 não leva em conta características do material carregado, aspectos da geometria do tambor e nem o grau de enchimento de operação. Vários autores sugeriram modificações na Equação 2.2 com o objetivo de incorporar a influência dessas variáveis na determinação da velocidade crítica de centrifugação. Algumas dessas modificações são mostradas na Tabela 2.2.

Tabela 2.2: Equações de velocidades críticas de centrifugação.

Rose e Sullivan, 1957	$\omega_c = \sqrt{\frac{2g}{D-d}}$	(2.3)
-----------------------	------------------------------------	-------

Walton e Braun, 1993	$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R \sin(\theta_D)}}$	(2.4)
----------------------	--	-------

Ristow, 1998	$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R\sqrt{1-f}}}$	(2.5)
--------------	---	-------

Watanabe, 1999	$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R \sin(\theta_D) \sqrt{1-f}}}$	(2.6)
----------------	---	-------

Juarez <i>et al.</i> , 2001	$\omega_c = \sqrt{\frac{g(1-\rho_f/\rho_s)}{R \sin(\theta_D) \sqrt{1-f}}}$	(2.7)
-----------------------------	--	-------

Santos, 2015	$\omega_c = \sqrt{\frac{g[1+\lambda \exp(-\tau f)]}{R}}$	(2.8)
--------------	--	-------

2.3 FENOMENOLOGIA DE SEGREGAÇÃO E MISTURA

O entendimento do fenômeno de mistura em sólidos granulares é mais desafiador do que em fluidos (KHAKHAR *et al.*, 1997). Isso se deve em parte à falta de um conjunto de equações constitutivas derivadas de princípios físicos fundamentais que descrevam os escoamentos granulares submetidos a determinado estado inicial e condições de contorno.

Os mecanismos de mistura em sólidos podem ser classificados em três tipos análogos aos mecanismos de mistura em fluidos. Esses tipos são definidos da seguinte forma (BRIDGWATER, 2012):

Convecção: aglomerados de partículas se deslocam de uma zona para outra por ação do equipamento de mistura. Assim, aumenta-se a homogeneidade e a área superficial entre diferentes partículas.

Difusão: acontece na escala do tamanho das partículas, ou seja, em menor escala do que a convecção. Ao contrário da difusão em fluidos, não é um processo físico que

obedece a uma equação constitutiva. A difusão ocorre quando o material permanece por certo período em um estado de alto empacotamento, e então, por ação de um misturador, se distribui por uma superfície e como resultado, um novo conjunto de contatos partícula-partícula é gerado.

Cisalhamento: o cisalhamento é responsável por quebrar aglomerados de partículas através de uma alta tensão de cisalhamento na área de contato entre dois grupos de partículas.

O tambor rotatório, por apresentar estrutura simples e alta capacidade de processamento, é frequentemente utilizado nas operações de mistura. Os trabalhos que abordam mistura em tambores rotatórios geralmente focam em três aspectos: a velocidade e evolução do estado da mistura, a segregação radial e a dispersão axial (OTTINO; LUEPTOW, 2008).

Para caracterizar a mistura num tambor rotatório em operação, é necessário estabelecer um critério para quantificar a intensidade de mistura do sistema, ou seja, o quão distante ele está de um sistema bem misturado. Segundo Fan *et al.* (1970), uma mistura de partículas perfeita é aquela em que as partículas compõem um arranjo completamente ordenado. Ao se obter amostras de diferentes posições, todas teriam exatamente a mesma composição. No entanto, não é esse tipo de mistura que se obtém na prática. Na verdade, o que se busca são misturas que se aproximem de uma mistura estatisticamente aleatória. Na mistura aleatória, a probabilidade de se encontrar uma partícula de um componente em um ponto é a mesma em todos os outros pontos da mistura (FAN *et al.*, 1970). Para quantificar a intensidade de misturas, diferentes índices de mistura globais foram propostos na literatura. Um índice usual é o índice proposto por Lacey (1954) (Equação 2.9):

$$M_L = \frac{\sigma_{seg}^2 - \sigma^2}{\sigma_{seg}^2 - \sigma_{mix}^2} \quad (2.9)$$

em que σ^2 , σ_{seg}^2 e σ_{mix}^2 são, respectivamente, a variância da composição das amostras retiradas da mistura atual, a variância da mistura se estivesse totalmente segregada e a

variância da mistura aleatória. Em uma mistura binária, elas são dadas pelas Equações 2.10, 2.11 e 2.12:

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (c_i - \bar{c})^2}{N - 1} \quad (2.10)$$

$$\sigma_{seg}^2 = \bar{c}(1 - \bar{c}) \quad (2.11)$$

$$\sigma_{mix}^2 = \frac{\sigma_{seg}^2}{n} \quad (2.12)$$

em que c_i é a proporção do componente de referência na amostra i , \bar{c} é a média da proporção do componente de referência em todas as amostras, N é o número de amostras e n é o número de partículas por amostra. Valores baixos de M_L indicam que a mistura está muito segregada enquanto valores próximos de 1 indicam que a mistura está próxima de ser uma mistura aleatória. Mais de 30 índices de mistura foram propostos na literatura e podem ser encontrados em Fan *et al.* (1970).

A mistura de partículas em um tambor rotatório acontece tanto na direção radial quanto na axial, sendo dominante na direção radial. A mistura axial é determinada principalmente pela difusão de partículas e é tipicamente lenta (BHATTACHARYA, 2011). A difusão envolve o entrelaçamento de partículas na escala das partículas individuais, semelhante à difusão molecular em fluidos. Rao *et al.* (1991) mostraram que é possível aumentar a dispersão axial com o aumento da velocidade de rotação e do tamanho de partícula. A mistura radial acontece tanto por difusão, quanto por convecção. A convecção acontece a partir de movimento de conjunto de partículas em escala macro. A proporção da contribuição das misturas radiais e axiais depende do grau de enchimento, sendo que para graus de enchimento menores do que 50%, a convecção aumenta com o decréscimo do grau de enchimento (KHAKHAR *et al.*, 1997).

Hajra e Khakhar (2005) investigaram a mistura por difusão em um tambor quasi-bidimensional com 50% de grau de enchimento e partículas traçadoras dispostas pelas linhas de corrente para minimizar os efeitos convectivos e garantir que a mistura fosse dominada pela difusão. Foram obtidos perfis radiais por fotografias. Diferentes experimentos foram realizados pelos autores, variando-se a velocidade de rotação,

tamanho de partícula e tamanho do cilindro. Os resultados mostraram que a taxa de mistura por rotação, ou passe, diminui com o aumento da velocidade de rotação, aumenta com o aumento do tamanho das partículas e é pouco dependente do tamanho do cilindro. O fato da mistura por passe diminuir para maiores velocidades de rotação pode parecer, a princípio, contra intuitivo. Hajra e Khakhar (2005) explicam que apesar de ocorrer o aumento da difusividade em maiores velocidades, o tempo de residência das partículas na camada diminui; dessa forma, a mistura por passe é menor em velocidades maiores, mas a taxa de mistura por unidade de tempo aumenta, como esperado pelo autor.

Ao se tentar misturar partículas diferentes, como partículas mais densas com partículas menos densas ou partículas maiores com menores, pode-se chegar a resultados intrigantes, uma vez que ao se colocar mais energia em um processo de mistura, aumenta-se a segregação. Fan *et al.* (1970) agruparam as variáveis que influenciam a tendência de um sistema em misturar ou segregar. Essas variáveis podem ser classificadas como característica da partícula, característica do equipamento de mistura ou condição de operação:

Características dos sólidos:

- Distribuição de tamanho das partículas;
- Forma das partículas e características das superfícies;
- Densidade bulk e densidade das partículas;
- Conteúdo de umidade do material;
- Ângulo de repouso do material;
- Coeficiente de atrito das partículas;
- Friabilidade do material;
- Estado de aglomeração do material;
- Fluidez do material.

Características do equipamento misturador:

- Dimensões e geometria do misturador;
- Dimensões do agitador;
- Material de construção e acabamento das superfícies;
- Tipo, local e número de dispositivos de carga e descarga.

Condições operacionais:

- Peso de cada componente adicionado à mistura;
- Grau de enchimento do equipamento com o material (em termos volumétricos);
- Método, sequência e taxa da adição dos componentes;
- Velocidade do misturador ou de agitação;
- Tempo de mistura.

A segregação acontece pela percolação de partículas pequenas através dos interstícios entre as partículas grandes, no caso de partículas com diferentes tamanhos, ou devido à diferença de empuxo, no caso de partículas de diferentes densidades. Dessa forma, as partículas pequenas e pesadas vão se desviando para a parte inferior da camada ativa até saírem completamente dela antes das partículas grandes e pouco densas (OTTINO; LUEPTOW, 2008). As partículas menores acabam por formar um núcleo no centro do leito, envolto pelas partículas maiores.

Na indústria, a mistura de componentes é frequente em reações em fornos rotatórios, na composição de pigmentos e na produção de remédios, em que componentes ativos são misturados com enchimentos em uma proporção determinada (KHAKHAR *et al.*, 1997). A ocorrência de segregação em algumas aplicações pode resultar em grandes prejuízos (JIANG *et al.*, 2011). Muitas pesquisas têm sido feitas para determinar mecanismos de evitar a segregação, sendo muitas delas utilizando tambores rotatórios (BHATTACHARYA, 2011; JIANG *et al.*, 2011; ZHOU *et al.*, 2016). Jiang *et al.* (2011) investigaram o uso de suspensores colocados ao longo do eixo de rotação de um tambor rotatório. Os suspensores foram testados em três formatos, mostrados na Figura 2.9.

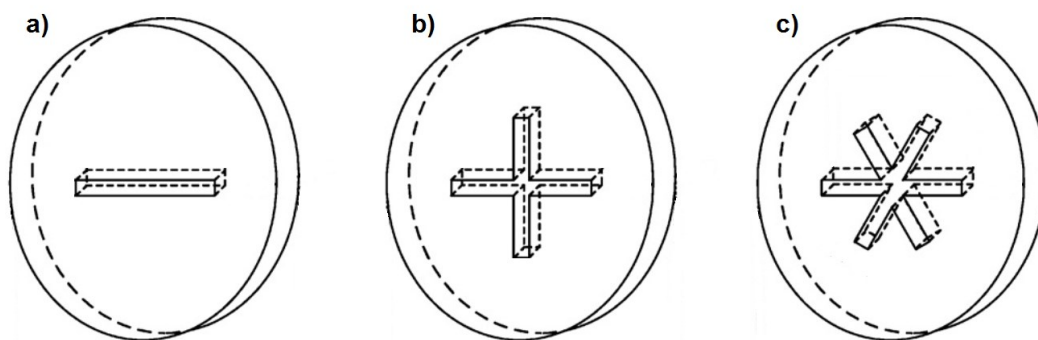


Figura 2.9: Suspensores no eixo de rotação usados por Jiang *et al.* (2011) (a) um suspensor horizontal, (b) dois suspensores em cruz, (c) três suspensores em estrela.

Foram simuladas partículas bi dispersas com diâmetros de 1,5 mm e 3 mm pelo método dos elementos discretos. Os resultados mostraram que para tambores sem suspensores, as partículas maiores tendem a se localizar na periferia e na superfície livre do leito, sendo praticamente ausentes do núcleo. Para os suspensores em cruz ou em estrela, a segregação é fortemente influenciada pelo tamanho dos suspensores (DELELE *et al.*, 2016; JIANG *et al.*, 2011). Jiang *et al.* (2011) observaram que o aumento no número de hastes promove a melhora da cinética de mistura, mas o ganho vai se reduzindo a partir de quatro hastes. Dos formatos utilizados, a configuração com suspensores em estrela apresentou a maior cinética de mistura para um tamanho de suspensor de 0,09m para um tambor com 0,15m de diâmetro.

Assim como no trabalho de Jiang *et al.* (2011), Bhattacharya (2011) também investigou o uso de suspensores dispostos pelo eixo axial de um tambor rotatório. Foram testados experimentalmente suspensores em diferentes formatos e colocados em diferentes posições radiais. Foi utilizada a razão ótima entre o tamanho do suspensor e o diâmetro $L/D = 0,5$ encontrada por Hajra e Khakhar (2005). O formato que resultou na melhor mistura foi do suspensor em "S". Tentou-se otimizar o formato em "S" variando sua amplitude, mas não houve efeito significativo. A localização ideal encontrada para a posição do suspensor foi sobre a superfície livre do leito, quando comparadas às posições no meio da camada ativa ou fora da camada ativa.

2.4 ABORDAGEM NUMÉRICA

A modelagem computacional do escoamento de material granular encontra inúmeras aplicações, tanto na academia quanto na indústria. É utilizada, por exemplo, nas áreas de geotecnia, ciência dos materiais, física e mecânica do solo, e outras. Na indústria, é utilizada nos processos de manufatura químicos, farmacêuticos, indústria de alimentos e mineração, dentre outras (MARIGO, 2012). O comportamento de materiais granulares compartilha propriedades semelhantes às dos líquidos e sólidos, assim como também diferem em outros aspectos (RAO *et al.* 2008). Dois tipos de abordagem são utilizados na modelagem do escoamento de material granular:

Abordagem Euleriana: as partículas são modeladas como um meio contínuo. Assim como na fase fluida, as equações de conservação são desenvolvidas baseadas em

volumes de controle. Todas as quantidades são dadas por funções contínuas da posição e do tempo (VALLE, 2012).

Abordagem Lagrangeana: o material é considerado como um conglomerado de partículas discretas. As Leis do Movimento de Newton são aplicadas em cada partícula individualmente. O comportamento macroscópico do conjunto de partículas é determinado pelas interações entre partículas e das partículas com as paredes.

Ambas abordagens possuem semelhanças e diferenças, bem como vantagens e desvantagens. A vantagem da abordagem Lagrangeana sobre a Euleriana é a capacidade de simular efeitos em nível de partículas, podendo incorporar de maneira direta características da partícula como formato, distribuição granulométrica e deformação (RAO *et al.*, 2008). O estudo das trajetórias das partículas resultantes de uma simulação Lagrangeana permite calcular a concentração e segregação de partículas, além de outros dados. A vantagem da abordagem Euleriana é a capacidade de lidar com um maior número de partículas devido ao menor custo computacional (VALLE, 2012). No entanto, é uma abordagem menos indicada em situações em que o comportamento das partículas individuais não pode ser ignorado. Nos tópicos a seguir, serão detalhadas as abordagens Euleriana e Lagrangeana.

2.4.1 ABORDAGEM EULERIANA

A abordagem Euleriana considera tanto a fase gasosa quanto a fase sólida como contínuas e completamente interpenetrantes. A suposição do conjunto de partículas se comportar como um contínuo é fundamentada na alta concentração de partículas no sistema de interesse (NIEUWLAND *et al.*, 1996).

Nesta abordagem, usualmente é utilizado o Método dos Volumes Finitos para modelar o escoamento. Este método fornece uma solução numérica usada para o estudo do escoamento. O volume do fluido, em todo o seu domínio, é dividido em pequenos volumes de controle. As equações de massa e momento, que governam o escoamento do fluido, são integradas nestes volumes para calcular as quantidades de interesse. A solução numérica das equações de conservação de massa e momento definem o escoamento do fluido pelo domínio no interior dos volumes (SMUTS, 2015).

A conservação de massa para as fases sólida e fluida são expressas pelas Equações 2.13 e 2.14.

Fase fluida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{v}_f) = 0 \quad (2.13)$$

Fase granular:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2.14)$$

A soma das frações de volume de cada fase é igual à unidade, conforme dado pela Equação 2.15.

$$\alpha_f + \alpha_s = 1 \quad (2.15)$$

os subscritos f e s denotam a fase fluida e sólida, respectivamente, enquanto α , \vec{v} e ρ , a fração volumétrica, o vetor velocidade e a densidade.

A conservação da quantidade de movimento para a fase sólida e para a fase fluida são representadas pelas Equações 2.16 e 2.17.

Fase fluida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \vec{v}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{v}_f \vec{v}_f) = -\alpha_f \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{\tau}_f) + \alpha_f \rho_f \vec{g} + K_{sf}(\vec{v}_s - \vec{v}_f) \quad (2.16)$$

Fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = -\alpha_s \nabla p_s + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{\tau}_s) + \alpha_s \rho_s \vec{g} + K_{sf}(\vec{v}_f - \vec{v}_s) \quad (2.17)$$

em que ρ_f , ρ_s , p , p_s , $\vec{\tau}_f$, $\vec{\tau}_s$ e K_{sf} são a densidade da fase fluida, a densidade da fase sólida, a pressão, a pressão de sólidos, o tensor tensão da fase fluida, o tensor tensão da fase sólida e o coeficiente de troca de momento entre as fases, respectivamente.

No estudo dos tambores rotatórios, a abordagem Euleriana foi empregada por diversos pesquisadores (DEMAGH *et al.*, 2012; HE *et al.*, 2007; SANTOS *et al.*, 2013; ZHENG; YU, 2015). He *et al.* (2007) estudaram por meio da abordagem euleriana a

segregação axial e radial. Os autores verificaram que partindo de uma mistura homogênea de partículas com diferentes tamanhos, o núcleo de partículas menores no leito se forma com cerca de 2,56 revoluções, consistente com as observações experimentais. Demagh *et al.* (2012) verificaram que as regiões da camada ativa, camada passiva e a interface da camada ativa e passiva foram devidamente previstas pelo modelo Euleriano. O modelo foi validado com dados experimentais e aplicado para uma situação real de escala industrial para o processamento de cimento. Santos *et al.* (2013) utilizaram a abordagem Euleriana para obter a distribuição de velocidade das partículas no leito de um tambor rotatório submetido a diferentes condições de operação. Os resultados numéricos mostraram boa concordância com os resultados experimentais. Zheng e Yu (2015) verificaram que os seis regimes de escoamento encontrados experimentalmente de deslizamento, avalanche, rolamento, cascadeamento, catarateamento e centrifugação, são bem reproduzidos por simulações pela abordagem Euleriana, desde que as condições e parâmetros apropriados sejam selecionados.

A abordagem Euleriana é apropriada para simulações em larga escala com grande quantidade de partículas, mas pode ser menos precisa em relação às características discretas do escoamento, como por exemplo, sobrestimar a curvatura em “S” em um leito de partículas preenchido com partículas grandes em um tambor rotatório (ZHENG; YU, 2015). Caso a natureza discreta do sistema granular seja relevante para o comportamento em estudo, o emprego da abordagem Lagrangeana, que será descrita no tópico seguinte, é preferível.

2.4.2 ABORDAGEM LAGRANGEANA

Os modelos contínuos encontram dificuldades em modelar alguns fenômenos granulares, como rachaduras no material granular, segregação e mistura de partículas (COETZEE; ELS, 2009). Essas limitações podem ser contornadas usando-se o Método dos Elementos Discretos (DEM). Na metodologia DEM, as características individuais das partículas são levadas em consideração. As trajetórias das partículas são rastreadas individualmente em determinado domínio de espaço e intervalo de tempo. A partir desses dados, é possível obter informações do comportamento "*bulk*" do material granular.

A metodologia DEM foi originalmente introduzida por Cundall e Strack em 1979 como uma ferramenta para a análise de problemas quasi-estáticos relacionados a materiais granulares de empacotamento denso (THAKUR, 2014). No método DEM, as partículas são consideradas como sistemas submetidos a forças de contato e de campo. Esses sistemas possuem movimentos de rotação e translação que são determinados pelas equações de movimento de Newton (ZHU *et al.*, 2008). As forças de contato são descritas pela relação constitutiva de contato para as interações partícula-partícula e partícula-parede (FINNIE *et al.*, 2005).

O DEM tem como vantagem a possibilidade de se obter informações como distribuição de tamanho e densidade do leito diretamente dos resultados da simulação. Além disso, os parâmetros que influenciam nas forças de contato entre partículas podem ser determinados através das propriedades do material, como o módulo de Young, a razão de Poisson e o coeficiente de restituição (SMUTS, 2015). Devido às suas características, o método DEM tem sido utilizado na simulação de diferentes tipos de misturadores (ALIAN *et al.*, 2015; ALIZADEH *et al.*, 2014; BASINSKAS; SAKAI, 2016), leitos de jorro (MARCHELLI *et al.*, 2017), peneiras vibratórias (YIN *et al.*, 2016), tambores rotatórios (ALCHIKH-SULAIMAN *et al.*, 2016; SANTOS *et al.*, 2016) dentre outras aplicações.

A Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia já desenvolveu alguns trabalhos usando o DEM como ferramenta para análise do comportamento granular. Dentre estes estudos, podem-se citar os trabalhos de Santos (2015) que usou o DEM em um caso de *scale-up* e determinou os parâmetros DEM para esferas de vidro e grãos de arroz, Resende (2017) estudou o comportamento de grãos de café em um tambor rotatório e determinou os parâmetros DEM para grãos de café através dos perfis de velocidade e ângulo de repouso, Brandão (2017) investigou a segregação radial e axial na mistura de partículas em um tambor rotatório e propôs um modelo oscilatório harmônico para predição do comportamento granular, e Lima (2017) investigou a influência da velocidade de rotação e grau de enchimento do tambor nos perfis de velocidade do leito.

Zhu *et al.* (2007) classificam os modelos DEM em duas categorias: os modelos de esfera rígida e os modelos de esfera macia. Nos modelos de esfera macia, as partículas podem sofrer deformações ou interpenetrações entre si durante as colisões. Essas interpenetrações são usadas para calcular as forças elásticas, plásticas e friccionais entre partículas. Essa abordagem é capaz de representar múltiplas colisões simultâneas entre partículas.

Na abordagem de esfera rígida a duração das colisões não é de interesse e considera-se que as colisões acontecem instantaneamente. A palavra rígida refere-se à ausência de deformação ou interpenetração durante o impacto de partículas (O’SULLIVAN, 2011). Nesses modelos, as colisões são processadas uma a uma, na ordem em que acontecem, não sendo permitido mais de um contato ao mesmo tempo. Essa abordagem possui maior eficiência computacional para sistemas diluídos (NOROUZI *et al.*, 2016). Nela, os mecanismos de restituição e fricção são tratados como desacoplados. Já na abordagem de esfera macia, esses mecanismos entram em ação apenas quando as esferas interpenetram-se, sendo a magnitude de sua interação função da profundidade de penetração (DURAN, 2000).

Tanto nos modelos de esfera rígida quanto nos de esfera macia, as simulações são transientes. Assim, o comportamento do sistema durante determinado período de tempo é avaliado em intervalos de tempo discretos, através de técnicas de discretização temporal, normalmente via diferenças finitas. De acordo com Duran (2000), a essência dos modelos de esfera macia está na deformação das esferas e por isso, ao contrário da abordagem de esfera rígida, o tempo de contato é de fundamental importância.

Os modelos de esfera rígida são adequados em representar escoamentos granulares rápidos e de baixa densidade, mas apesar de serem mais baratos computacionalmente que outros métodos, falham em capturar o comportamento de sistemas densos e quasi-estáticos, que envolvem múltiplos contatos simultâneos (O’SULLIVAN, 2011). O modelo de esfera macia é mais abrangente e segundo Norouzi *et al.* (2016) pode ser modificado e estendido para se adaptar ao modelo de esferas rígidas.

De acordo com Norouzi *et al.* (2016), para uma simulação DEM baseada na abordagem da esfera macia, que é a utilizada neste trabalho, as seguintes considerações devem ser feitas:

- 1) As partículas são deformáveis. As deformações são reversíveis e a partícula retoma à forma original após o contato. Ou seja, as deformações ocorrem no regime elástico.
- 2) As interações entre partículas em contato acontecem através da área de contato. A sobreposição entre os corpos é muito pequena se comparada com os seus tamanhos.
- 3) Essa sobreposição altera-se com o tempo durante o contato e o seu máximo é função das propriedades físicas e velocidades de impacto das partículas.

- 4) A intensidade da força de contato entre partículas que colidem é obtida das Leis de Força-Deslocamento, sendo função da sobreposição, velocidade relativa, histórico de contatos, formato e propriedades das partículas.

As etapas envolvidas numa simulação DEM são representadas na Figura 2.10. Inicialmente, o usuário entra com a geometria do sistema, condições de contorno e as propriedades do material. As características dinâmicas do sistema são estimadas numericamente através da integração iterativa das equações de movimento para cada partícula individual. Assume-se que as velocidades e acelerações lineares e angulares são constantes durante o passo de tempo. A intensidade das forças entre partículas em contato é função da distância entre elas. A cada iteração, as partículas em contato são identificadas e as forças partícula-partícula calculadas. Assim, a força e momento resultantes que agem em cada partícula podem ser determinados. Os movimentos translacional e rotacional são obtidos a partir da força e do momento resultantes, respectivamente. O deslocamento e rotação das partículas durante o passo de tempo são então obtidos através da integração pelo tempo das equações de movimento. As posições e orientações das partículas são atualizadas e utilizadas para o cálculo das forças de contato da iteração seguinte.

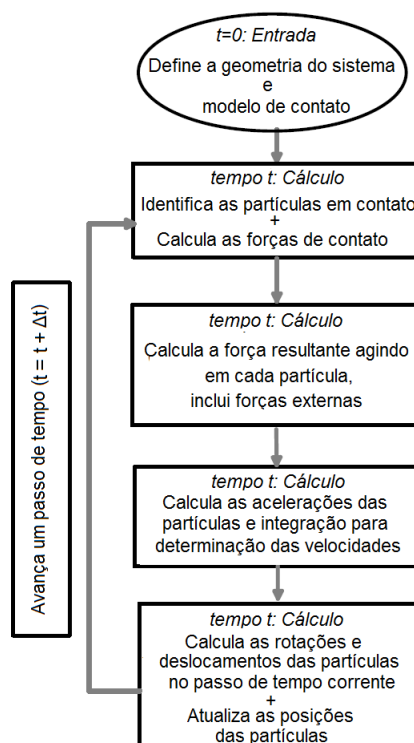


Figura 2.10: Algoritmo empregado nas simulações DEM (adaptado de O'SULLIVAN, 2011).

2.4.2.1 FORMULAÇÃO NUMÉRICA

Em um escoamento granular, cada partícula apresenta dois tipos de movimento: o translacional e o rotacional. As leis de movimento de Newton são usadas para calcular as acelerações translacionais e rotacionais. A Equação 2.18 descreve o movimento translacional.

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j F_{ij} + m_i g \quad (2.18)$$

Em que:

- m_i – massa da partícula i;
- v_i – velocidade linear da partícula i;
- F_{ij} – força entre as partículas i e j;
- g – aceleração da gravidade;
- t – tempo.

O movimento rotacional para uma partícula i é dado pela Equação 2.19:

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j M_{ij} \quad (2.19)$$

Em que:

- ω_i – velocidade angular da partícula i;
- I_i – momento de inércia da partícula i;
- M_{ij} – torque de contato na partícula i pela partícula j.

As Equações 2.18 e 2.19 formam um sistema de equações diferenciais não lineares e não podem ser resolvidas analiticamente. As soluções numéricas aproximadas, obtidas pela integração numérica das equações, resultam nas trajetórias de todas as partículas do sistema e é o objetivo último do DEM (BHATTACHARYA, 2011).

Para completar a modelagem DEM, é necessário especificar expressões para as forças de contato entre as partículas e entre elas com as paredes, tanto na direção normal quanto na direção tangencial. Segundo Zhu *et al.* (2007), seria difícil obter uma descrição completa e precisa dessas grandezas uma vez que a distribuição de trações na superfície de contato depende de muitos fatores físicos e geométricos como o formato, as propriedades do material e o movimento das partículas. Utilizam-se então modelos de contato simplificados e de maior eficiência computacional para calcular as forças e os torques resultantes dos contatos entre as partículas. Existem dois tipos principais de modelos elásticos para o cálculo das forças de contato: o modelo linear elástico e o modelo não-linear elástico. O modelo linear mais comum foi proposto por Cundall e Strack (1979) e é conhecido como o modelo linear mola-amortecedor (*linear spring-dashpot model*). O modelo não-linear de Hertz-Mindlin é um modelo mais complexo e robusto. Por este motivo, esse modelo demanda mais tempo para realizar as simulações DEM (ZHU *et al.*, 2007).

❖ Modelo linear mola-amortecedor

Esse é o modelo de contato mais simples e é provavelmente o mais utilizado no DEM (THAKUR, 2014). Nele, uma mola é usada para representar a deformação elástica, enquanto que o amortecedor contabiliza a dissipação viscosa. Como ilustrado na Figura 2.11, são usados dois conjuntos de mola-amortecedor em paralelo sendo que um representa as forças normais e o outro as forças tangenciais.

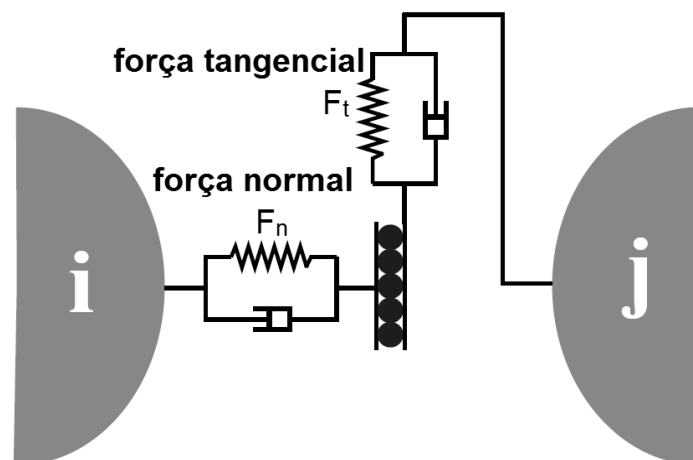


Figura 2.11: Esquema do modelo de contato mola-amortecedor (BHATTACHARYA, 2011).

A força normal no modelo mola-amortecedor é calculada através da adição do termo elástico, representado pela mola, com um segundo termo que modela a dissipação, representado pelo amortecedor (SUZZI *et al.* 2012), como mostra a Equação 2.20:

$$F_n = -k_n \delta_n + \lambda_n \overline{v_n'^{ei}} \quad (2.20)$$

em que k_n representa o coeficiente de rigidez normal, λ_n é o coeficiente de amortecimento normal e δ_n a sobreposição normal entre as partículas. O termo $\overline{v_n'^{ei}}$ é a velocidade relativa normal. O coeficiente de rigidez normal é determinado em função das propriedades físicas e geométricas das partículas e também da velocidade característica de colisão.

A força tangencial é dada pela Equação 2.21. De maneira similar, as forças tangenciais são representadas por uma mola e um amortecedor.

$$F_t = \begin{cases} -k_t \delta_t + \lambda_t \overline{v_t'^{ei}} & \text{se } |F_t| \leq \mu |F_n| \\ \mu F_n & \text{se } |F_t| > \mu |F_n| \end{cases} \quad (2.21)$$

O termo $k_t \delta_t$ representa a força da mola na direção tangencial e o termo $\lambda_t \overline{v_t'^{ei}}$ descreve a contribuição do elemento amortecedor. O coeficiente de atrito entre as partículas é representado por μ .

O coeficiente de rigidez normal pode ser calculado pela expressão da Equação 2.22 (MAW *et al.*, 1976):

$$k_n = \frac{16}{15} R^{*\frac{1}{2}} E^* \left(\frac{15 m^* V^2}{16 R^{*\frac{1}{2}} E^*} \right)^{\frac{1}{5}} \quad (2.22)$$

Os valores de E^* , R^* e m^* podem ser obtidos das Equações 2.23, 2.24 e 2.25 e representam respectivamente, o módulo de Young, o raio e a massa equivalente. V é a velocidade característica e ν a razão de Poisson.

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_i}{E_i} + \frac{1-\nu_j}{E_j} \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \quad (2.25)$$

Apesar de sua simplicidade, o modelo elástico linear mola-amortecedor possui alta eficiência e é amplamente utilizado em modelos de grande complexidade (PENG, 2014).

❖ Modelo não linear de Hertz Mindlin

O modelo contato de Hertz-Mindlin é uma extensão do modelo mola-amortecedor usado por Cundall e Strack (1979). As forças de contato na direção normal são modeladas usando-se a teoria de contato de Hertz (1881), que estabelece uma relação elástica não-linear entre a força de contato e o deslocamento normal. Na direção tangencial, é utilizado o modelo linear elástico de Mindlin (1949). Em ambas as direções, um termo para contabilizar a dissipação de energia durante as colisões é adicionado. A combinação desses modelos visa obter maior precisão e leva em consideração o formato esférico das partículas (PENG, 2014).

Como exposto por Peng (2014) e Bhattacharya (2011), no modelo de Hertz-Mindlin, a força normal (F_n) é dada pela Equação 2.26, sendo calculada em função do módulo de Young equivalente (E^*), da sobreposição normal (δ_n) e do raio de contato equivalente (R^*):

$$F_n = \frac{4}{3} E^* \delta_n^{3/2} \sqrt{R^*} \quad (2.26)$$

A força normal de amortecimento (F_n^d) é dada pela Equação 2.27:

$$F_n^d = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_n m^*} v_n^{\text{rel}} \quad (2.27)$$

em que S_n é a rigidez normal de contato e β é o coeficiente de amortecimento, que por sua vez é função do coeficiente de restituição e_p . Os valores de S_n e β são calculados pelas Equações 2.28 e 2.29 respectivamente:

$$S_n = 2E^* \sqrt{R^* \delta_n} \quad (2.28)$$

$$\beta = \frac{\ln e_p}{\sqrt{\ln^2 e_p + \pi^2}} \quad (2.29)$$

A força tangencial F_t é função do deslocamento tangencial δ_t e da rigidez de contato tangencial S_t como mostram as Equações 2.30 e 2.31:

$$F_t = -\delta_t S_t \quad (2.30)$$

$$S_t = 8G^* \sqrt{R^* \delta_n} \quad (2.31)$$

em que G^* é o módulo de cisalhamento equivalente. Para o caso de duas esferas i e j , pode ser obtido da Equação 2.32:

$$\frac{1}{G^*} = \frac{2-\nu_i}{G_i} + \frac{2-\nu_j}{G_j} \quad (2.32)$$

A força tangencial de amortecimento (F_t^d) é dada pela Equação 2.33:

$$F_t^d = -2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta\sqrt{S_t m^*} \overline{v_t^{cu}} \quad (2.33)$$

em que $\overline{v_t^{cu}}$ é a velocidade relativa tangencial.

A máxima força tangencial possível $F_{t,\max}^d$ é limitada pela lei de fricção de Coulomb (MARIGO, 2012). Essa força pode ser determinada em função do coeficiente de atrito estático μ_s e da força normal F_n (Equação 2.34):

$$F_{t,\max}^d = \mu_s F_n \quad (2.34)$$

O coeficiente de fricção de rolamento μ_R , em alguns casos, é usado para aproximar o comportamento de partículas ligeiramente não esféricas (MARIGO, 2012). Esse coeficiente pode ser contabilizado no torque τ como mostra a Equação 2.35:

$$\tau_{ij} = -\mu_R F_n r_i \omega_i \quad (2.35)$$

Para realizar uma simulação utilizando o modelo de Hertz-Mindlin, os seguintes parâmetros de entrada precisam ser definidos:

- O coeficiente de atrito estático μ_s tanto para o contato partícula-partícula μ_{s-pp} , quanto para o contato partícula-parede μ_{s-pw}
- O coeficiente de atrito de rolamento μ_R , tanto partícula-partícula μ_{R-pp} , quanto partícula-parede μ_{R-pw}
- O coeficiente de restituição e_p , tanto para partícula-partícula e_{p-pp} , quanto para partícula-parede e_{p-pw} .

2.4.2.2 ESQUEMA DE INTEGRAÇÃO E PASSO DE TEMPO

Na simulação DEM, as características dinâmicas do sistema são estimadas por uma integração iterativa das equações de movimento 2.18 e 2.19 para cada partícula individual. O incremento de tempo entre duas iterações consecutivas é chamado passo de tempo. Em cada passo de tempo, o estado do sistema é determinado pelo cálculo das velocidades lineares e rotacionais, bem como das posições das partículas.

As simulações, em geral, contam com uma quantidade elevada de partículas, podendo envolver milhares ou até milhões de partículas distintas. Cada partícula pode

ter múltiplos contatos e em cada contato existe uma componente de força normal e uma componente de força tangencial. Isso resulta em um grande número de cálculos que devem ser realizados para cada passo de tempo da simulação. Sendo assim, para uma melhor eficiência computacional, é desejável que o passo de tempo não seja muito pequeno. Por outro lado, ele deve ser pequeno o suficiente para capturar as não-linearidades do sistema (O’SULLIVAN, 2011).

Segundo Norouzi *et al.* (2016), deve-se escolher um passo de tempo pequeno o bastante para que as ondas de perturbação não se propaguem para além da distância entre os centros das partículas em contato em uma única iteração. Thakur (2014) sugere que o passo de tempo escolhido seja inferior ao tempo necessário para que uma onda de Rayleigh atravesse o menor tamanho de partícula do conjunto.

O passo de tempo crítico seguindo esse critério é dado pela Equação 2.36:

$$\Delta t_c = \frac{\pi r_{\min}}{0,163\nu + 0,8766} \sqrt{\frac{\rho_s}{G}} \quad (2.36)$$

em que r_{\min} é o raio da menor partícula no sistema, ρ_s é a densidade da partícula, G o módulo de cisalhamento e ν a razão de Poisson.

Na prática, para garantir um tempo de integração estável, o passo de tempo utilizado é uma fração do passo de tempo crítico calculado pela Equação 2.36. Essa fração depende do sistema a ser simulado. EDEM (2011) sugere um passo de tempo de 40% do passo de tempo crítico para sistemas com baixa densidade de partículas e de 20% para sistemas com alta densidade de partículas.

2.4.2.3 PARÂMETROS DEM

Ao se configurar uma simulação DEM, é necessário definir o conjunto dos valores de alguns parâmetros que caracterizam as propriedades físicas intrínsecas dos materiais a serem simulados. Alguns desses parâmetros são o tamanho, a densidade e a rigidez das partículas, bem como o coeficiente de atrito estático, coeficiente de atrito de

rolamento e coeficiente de restituição, cujos valores são definidos para partículas de mesmo material e para a interação entre materiais diferentes.

Para que se tenha confiança nos resultados obtidos, é preciso garantir a precisão dos parâmetros de entrada. Para isso, é importante realizar a calibração dos parâmetros para cada um dos materiais usados na simulação. Esse procedimento pode apresentar algumas dificuldades, já que em alguns casos as propriedades obtidas diretamente das partículas não representam com precisão o comportamento “*bulk*” do conjunto de partículas (COETZEE, 2017). A seguir, serão apresentados alguns parâmetros de entrada para o DEM.

Coeficiente de restituição

O coeficiente de restituição e representa a fração de energia cinética conservada após uma colisão. Ele é dado pela razão das velocidades depois e antes de uma colisão, como mostra a Equação 2.37:

$$e = \frac{V_r}{V_i} \quad (2.37)$$

em que V_r e V_i representam a velocidade de retorno e a velocidade de impacto respectivamente.

O valor do coeficiente de restituição varia entre 0 e 1, sendo 0 para uma colisão perfeitamente inelástica e 1 para colisão perfeitamente elástica, em que toda a energia cinética é conservada. Algumas possibilidades de dissipação de energia durante a colisão incluem: fricção interna, deformação permanente da partícula ou da superfície, armazenamento de energia na partícula como resultado da compressão, sendo dissipada posteriormente na forma de modos de oscilação ou recuperação do formato original (CROSS, 1999).

Diferentes métodos experimentais são utilizados para determinar o coeficiente de restituição como, por exemplo, o método da queda livre, utilizado por Uchiyama *et al.* (2012), adequado para partículas de alta esfericidade, ou o método proposto por Wang *et al.* (2015) para partículas irregulares, em que as partículas são lançadas numa superfície inclinada, sendo possível decompor as velocidades e coeficiente de

restituição nas direções normal e tangencial. Brandão (2017) investigou o coeficiente de restituição para esferas de aço e vidro pelo método da queda livre e observou que a espessura das chapas de teste influencia nos valores deste parâmetro.

Coeficiente de atrito estático

O atrito é a força de resistência ao movimento relativo de duas superfícies deslizando uma sobre a outra. As Leis clássicas de atrito foram propostas por Amontons em 1699, recebendo posteriormente contribuições de Coulomb em 1785 (IMOLE, 2014). As Leis de Atrito de Amontons afirmam que:

- A força de atrito é diretamente proporcional à carga. Sendo assim, essas forças possuem uma razão constante, denominada coeficiente de atrito.
- A força de atrito é independente da área de contato aparente.

A primeira Lei de atrito de Amontons pode ser expressa pela Equação 2.38:

$$F_c = \mu F_N \quad (2.38)$$

em que μ é o coeficiente de atrito estático, F_N é a força normal que pressiona as superfícies juntas uma à outra e F_c é a força tangencial de atrito.

As forças de atrito estático oriundas das irregularidades entre duas superfícies irão aumentar para prevenir o movimento relativo entre elas até um determinado limite, após o qual o movimento acontece. Uma vez que existe movimento relativo entre as superfícies, o atrito estático não é mais aplicável e o atrito passa a ser denominado atrito dinâmico.

Além da 1ª e 2ª Leis de Amontons, foi proposta uma 3ª Lei por Coulomb que afirma que o coeficiente de atrito dinâmico é independente da velocidade de deslizamento. Em geral, para um mesmo material, o coeficiente de atrito dinâmico é menor do que o coeficiente de atrito estático (IMOLE, 2014).

Lima (2017) realizou a calibração do coeficiente de atrito estático para diferentes materiais usando a metodologia do plano inclinado e concluiu que a metodologia é adequada desde que se utilize partículas agrupadas.

Coefficiente de atrito de rolamento

O atrito de rolamento é o torque que resiste ao rolamento de um objeto circular ao longo de uma superfície (IMOLE, 2014). Segundo Ai *et al.* (2011), a resistência ao rolamento pode ter várias causas originadas no contato entre duas partículas ou entre uma partícula e a superfície. Algumas dessas causas são microdeslizamentos e atrito na superfície de contato, deformação plástica ao redor do contato, histerese viscosa, adesão superficial e efeito do formato. De acordo com Wensrich e Katterfeld (2012), para materiais granulares, o efeito do formato é a principal causa de dissipação de energia.

No DEM, a simulação de partículas com formatos não esféricos mais complexos é de alto custo computacional (WENSRICH; KATTERFELD, 2012). Por esse motivo, o coeficiente de atrito de rolamento é frequentemente usado para adicionar resistência à rotação das partículas, como forma de representar o comportamento “*bulk*” de partículas de formato não-esférico. No entanto, essa abordagem é incapaz de contabilizar outros aspectos importantes da microestrutura granular como a densidade de empacotamento e o grau de dilatação do leito granular em regiões de alto cisalhamento (SINNOTT; CLEARY, 2016).

2.5 SOFTWARES DEM

Na literatura, os trabalhos que realizam simulações DEM utilizam códigos próprios desenvolvidos pelos próprios autores ou fazem uso dos *softwares* DEM já disponíveis. Dentre os *softwares* DEM, existem os *softwares* comerciais e os *softwares* de código aberto.

Alguns dos *softwares* comerciais são o PFC3D desenvolvido pela Itasca Consulting Group (<https://www.itascacg.com/software/pfc>), o ROCKY (<http://rocky-dem.com/>), distribuído no Brasil pela ESSS, e o EDEM (<https://www.edemsimulation.com/>), desenvolvido pela empresa DEM SOLUTIONS. As maiores vantagens dos *softwares* comerciais é que, em geral, contam com uma interface gráfica amigável e de fácil utilização, bem como acesso ao suporte técnico qualificado da empresa que fica disponível para a resolução de eventuais problemas na utilização do *software*. No entanto, não é permitido acesso ao código fonte do *software* e a sua utilização depende da aquisição de licenças que podem atingir valores elevados.

O *software* de código aberto é um programa de computador cujo código fonte é disponível para o público geral para uso e modificação de seu projeto inicial. É permitido ao usuário descarregar, copiar, modificar e redistribuir o código-fonte. Essas propriedades do *software* de código aberto estimulam um desenvolvimento e aperfeiçoamento contínuo do código por parte da comunidade de usuários, bem como oferecem flexibilidade para modificar e adaptar o código para demandas e situações específicas do usuário que muitas vezes não são atendidas pelo código-fonte original.

Existem diversos *softwares* de código aberto disponíveis como o Esys-particle (<http://www.esys-particle.org/>), o WooDEM (<https://woodem.org/>), o YADE (<https://yade-dem.org/>) desenvolvido originalmente por um grupo da Universidade de Grenoble, o MFiX-DEM (<https://mfix.netl.doe.gov/>) desenvolvido pelo Laboratório de Tecnologia de Energia dos Estados Unidos e o LIGGGHTS®-PUBLIC (KLOSS; GONIVA, 2010), concebido na Universidade Johannes Kepler na Áustria.

LIGGGHTS é a sigla para LAMMPS Improved General Granular and Granular-heat transfer simulations. O LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>) é um *software* de simulação de dinâmica molecular clássica e um acrônimo para Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. A partir dele, foi derivado o LIGGGHTS®-PUBLIC, cujas simulações se baseiam na modelagem DEM. No seu desenvolvimento, foram incorporadas algumas propriedades características às simulações do DEM, como a formulação das forças de contato Hertz-Mindlin/Hooke, forças coesivas, forças de atrito de rolamento e condução de calor entre partículas. Foram herdados do LAMMPS a estrutura do código, a escalabilidade de paralelização pela ferramenta MPI (*message passing interface*) e uma variedade de campos de força da dinâmica molecular que podem ser usados junto com os modelos granulares. O código do LIGGGHTS®-PUBLIC é escrito na linguagem C++ e pode ser executado em um único processador ou em paralelo. Ele pode ser descarregado diretamente de sua página eletrônica junto com o pacote do LIGGGHTS®-PUBLIC, que inclui as bibliotecas, exemplos, manuais e documentos relativos ao seu código. A possibilidade de paralelização usando um número ilimitado de processadores pela ferramenta MPI representa uma das principais vantagens desse *software* frente aos *softwares* comerciais como o EDEM, em que as licenças de uso limitam o número máximo de processadores que podem ser usados simultaneamente.

O LIGGGHTS®-PUBLIC foi desenvolvido com o objetivo de implementar a modelagem DEM de forma confiável e completa, assim como de ser usado em

aplicações industriais. Por esse motivo, é possível importar e processar geometrias complexa do tipo CAD, malhas móveis para representar geometrias moveis e várias opções de inserção de partículas (CARLES, 2014).

CAPÍTULO 3

MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo serão discutidas as metodologias utilizadas no estudo da cinética de mistura e segregação de partículas em um tambor rotatório com suspensores.

Na seção 3.1 será detalhada a calibração dos parâmetros de entrada do modelo numérico. As investigações numéricas dos fenômenos da cinética de mistura e de segregação serão feitas separadamente, sendo descritas nas seções 3.2 e 3.3 respectivamente. Os detalhes acerca da implementação computacional serão descritos na seção 3.4.

3.1 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DEM

Antes de iniciar o estudo da mistura e segregação de partículas no interior de um tambor com suspensores, foi preciso tomar como referência uma condição experimental já investigada para realizar a calibração dos parâmetros de entrada do modelo. A calibração visa garantir que os resultados obtidos nas simulações sejam capazes de reproduzir o comportamento experimental. Os parâmetros determinados foram: o coeficiente de atrito estático partícula-partícula (μ_{Spp}); o coeficiente de atrito estático partícula-parede (μ_{Spw}); o coeficiente de atrito de rolamento partícula-partícula (μ_{Rpp}); o coeficiente de atrito de rolamento partícula-parede (μ_{Rpw}). A comparação do comportamento das partículas entre a condição experimental e numérica foi feita através de duas respostas: o ângulo de repouso dinâmico e o índice de segregação. As metodologias para a obtenção dessas respostas são descritas nas seções 3.1.1 e 3.1.2 respectivamente.

No trabalho de Santos *et al.* (2016), os autores utilizaram um tambor rotatório de 22 cm de diâmetro e 50 cm de comprimento em que foram efetuados inúmeros ensaios

experimentais variando os tipos de partículas e condições de operação. Foi escolhido como referência um de seus ensaios experimentais em que o tambor rotatório foi carregado com partículas esféricas de vidro de 6,35 mm, igualmente divididas em dois grupos, dispostos lado a lado, sendo um pintado de branco e outro de preto, como ilustra a Figura 3.1. Nessa condição, o tambor foi alimentado com um grau de enchimento de 25% e colocado para girar a uma velocidade de rotação de 1,10 rad/s.

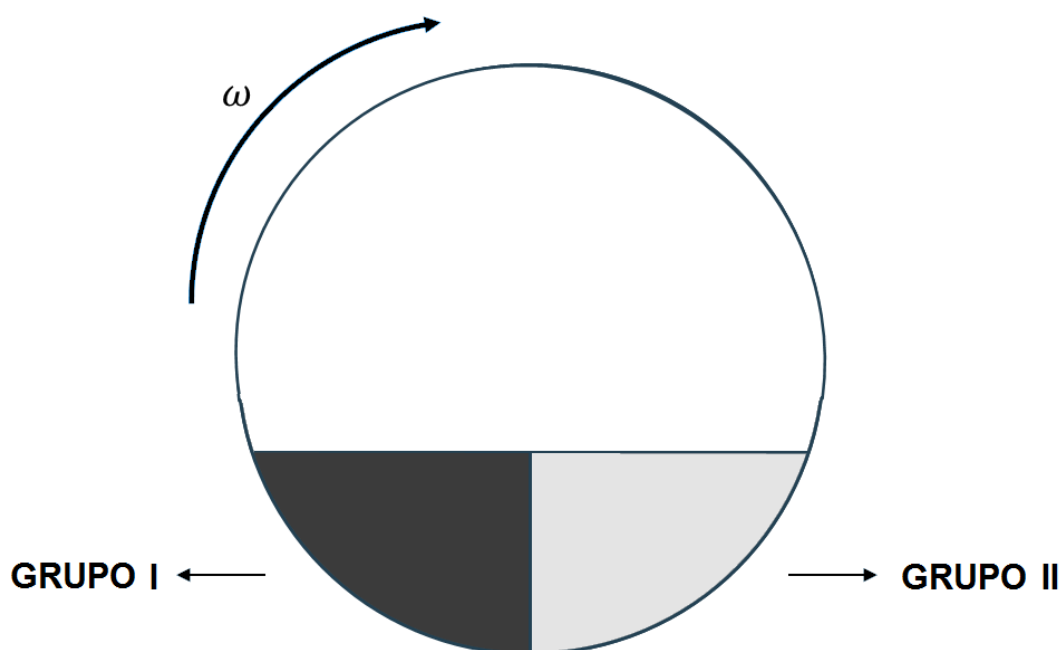


Figura 3.1: Disposição inicial do material granular no interior do tambor rotatório.

As condições desse ensaio foram simuladas para cada um dos casos do planejamento composto central (PCC) apresentado na Tabela 3.1. No entanto, o comprimento do tambor simulado foi reduzido de 50 cm para 10 cm, visando a diminuir o número total de partículas e obter um menor custo computacional. O comprimento de 10 cm é superior ao comprimento característico de $0,28R$ determinado por Dury *et al.* (1998) em que os efeitos das tampas influenciam nos resultados.

Nas simulações do PCC, assim como no ensaio experimental, as partículas foram classificadas como tipo I (partículas pretas) e tipo II (partículas brancas), ainda que fossem todas iguais. Tal distinção permite calcular o índice de mistura para cada condição (efeito do equipamento), como será explicado na seção 3.1.2.

As condições utilizadas nas simulações estão apresentadas na Tabela 3.2:

Tabela 3.1: Planejamento do composto central para determinação dos parâmetros DEM.

Simulação	Parâmetros							
	μ_{SPP}	X1	μ_{RPP}	X2	μ_{SPW}	X3	μ_{RPW}	X4
1	0,50	-1,00	0,03	-1,00	0,20	-1,00	0,02	-1,00
2	0,50	-1,00	0,03	-1,00	0,20	-1,00	0,06	1,00
3	0,50	-1,00	0,08	-1,00	0,20	1,00	0,02	-1,00
4	0,50	-1,00	0,08	-1,00	0,20	1,00	0,06	1,00
5	0,50	-1,00	0,03	1,00	0,50	-1,00	0,02	-1,00
6	0,50	-1,00	0,03	1,00	0,50	-1,00	0,06	1,00
7	0,50	-1,00	0,08	1,00	0,50	1,00	0,02	-1,00
8	0,50	-1,00	0,08	1,00	0,50	1,00	0,06	1,00
9	0,80	1,00	0,03	-1,00	0,20	-1,00	0,02	-1,00
10	0,80	1,00	0,03	-1,00	0,20	-1,00	0,06	1,00
11	0,80	1,00	0,08	-1,00	0,20	1,00	0,02	-1,00
12	0,80	1,00	0,08	-1,00	0,20	1,00	0,06	1,00
13	0,80	1,00	0,03	1,00	0,50	-1,00	0,02	-1,00
14	0,80	1,00	0,03	1,00	0,50	-1,00	0,06	1,00
15	0,80	1,00	0,08	1,00	0,50	1,00	0,02	-1,00
16	0,80	1,00	0,08	1,00	0,50	1,00	0,06	1,00
17	0,43	-1,48	0,06	0,00	0,35	0,00	0,04	0,00
18	0,87	1,48	0,06	0,00	0,35	0,00	0,04	0,00
19	0,65	0,00	0,06	-1,48	0,13	0,00	0,04	0,00
20	0,65	0,00	0,06	1,48	0,57	0,00	0,04	0,00
21	0,65	0,00	0,02	0,00	0,35	-1,48	0,04	0,00
22	0,65	0,00	0,09	0,00	0,35	1,48	0,04	0,00
23	0,65	0,00	0,06	0,00	0,35	0,00	0,01	-1,48
24	0,65	0,00	0,06	0,00	0,35	0,00	0,07	1,48
25	0,65	0,00	0,06	0,00	0,35	0,00	0,04	0,00
26	0,65	0,00	0,06	0,00	0,35	0,00	0,04	0,00

Tabela 3.2: Condições utilizadas para simulação da análise dos parâmetros numéricos no software LIGGGHTS®-PUBLIC.

Modelo	Hertz-Mindlin (<i>noslip</i>)
Passo no Tempo (s)	1×10^{-5}
Tempo de Simulação (s)	150
Grau de enchimento (%)	25
Diâmetro das partículas (mm)	6,35
Densidade (kg/m ³)	
Esfera de vidro	2460
Razão de Poisson [-]	
Esfera de vidro	0,20
Parede	0,30

3.1.1 MEDIDA DO ÂNGULO DE REPOUSO DINÂMICO

Para a determinação do ângulo de repouso dinâmico do ensaio experimental e das simulações, foram extraídas imagens nos instantes de tempo de 25, 50, 75, 100, 125 e 150 segundos após o início da rotação do tambor.

Inicialmente, a medida do ângulo de repouso foi efetuada diretamente com o *software* Measure, em que o operador posiciona os pontos de referência na imagem para obter o ângulo. No entanto, observou-se que as respostas obtidas por tal procedimento são sensíveis em relação à escolha da localização dos pontos de referência, podendo-se obter discrepâncias consideráveis para medidas do ângulo de repouso para uma mesma simulação. Para evitar esse problema, foi elaborado um novo método livre da influência do operador, descrito pelas seguintes etapas:

Etapa I: A imagem da seção transversal do tambor é recortada até que as extremidades do leito de partículas encontrem os limites da imagem, como mostra a Figura 3.2(a).

Etapa II: As regiões ocupadas por partículas do leito são selecionadas na imagem através de uma ferramenta de seleção do GIMP (*software* de edição de imagens de código aberto) que identifica os contornos baseado nas diferenças de cor e saturação dos pixels, obtendo-se uma imagem como a da Figura 3.2(b).

Etapa III: Os pontos que passam pelo contorno obtido da seleção do leito de partículas são extraídos do *software* de imagem na forma de uma tabela com suas coordenadas cartesianas. Os pontos que delimitam o leito na parte superior, ilustrados na Figura 3.2(c), são ajustados por uma reta, cujo módulo do coeficiente angular é a tangente do ângulo de repouso.

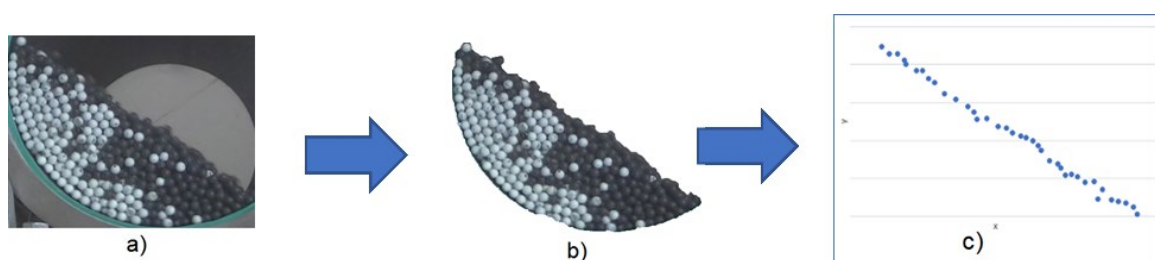


Figura 3.2: Determinação do ângulo de repouso dinâmico: a) recorte do leito de partículas; b) seleção do leito; c) extração dos pontos de fronteira do leito.

O ângulo de repouso considerado foi a média dos ângulos de repouso obtidos nos seis instantes de tempo. Este procedimento foi adotado tanto para as imagens obtidas dos vídeos dos experimentos, quanto para as imagens extraídas das simulações. Para avaliar a influência dos parâmetros DEM no ângulo de repouso dinâmico e determinar o conjunto que melhor representasse a situação experimental para esta resposta, o procedimento descrito foi realizado para cada condição do PCC mostrado na Tabela 3.1.

3.1.2 MEDIDA DO ÍNDICE DE MISTURA

Como citado anteriormente, existem diferentes índices de mistura para quantificar a intensidade da mistura em um leito de material granular. Neste trabalho, foi adotado o Índice proposto por Lacey (apresentado na Equação 2.9). O índice de Lacey foi determinado para a condição experimental e para todos os casos simulados em intervalos de 5 s, desde o instante em que o tambor entrava em rotação até 70 s após o início do movimento.

Para caracterizar a taxa de mistura em cada caso, o conjunto dos valores do Índice de Lacey ao longo do tempo pôde ser ajustado pela Equação 3.1, utilizada por Jiang *et al.* (2011):

$$M_L(t) = \frac{\sigma_{seg}^2 - \sigma^2}{\sigma_{seg}^2 - \sigma_{mix}^2} = 1 - \exp(-kt) \quad (3.1)$$

em que M_L é o Índice de Lacey e k é a constante cinética de mistura. Quanto maior o valor de k , mais rapidamente as partículas se misturam no interior do tambor. O objetivo dessa análise foi verificar quais os casos simulados do PCC da Tabela 3.1 que reproduzem melhor a dinâmica de mistura da condição experimental.

Para obter a disposição mostrada na Figura 3.1, foi colocado um plano separador durante a inserção de partículas para que as partículas pretas não se misturassem com as brancas. O separador foi então retirado após o término da inserção e antes do início da rotação.

Assim como o ângulo de repouso dinâmico, o índice de segregação também foi obtido tanto para a condição experimental, quanto para os casos simulados do PCC da Tabela 3.1. Contudo, os métodos de obtenção para cada um deles são diferentes e serão descritos nas Seções 3.2.2.1 para o resultado experimental e 3.2.2.2 para o resultado simulado.

3.1.2.1 ANÁLISE EXPERIMENTAL

Para a obtenção do índice de segregação experimental, foram executadas as seguintes etapas detalhadas a seguir e ilustradas na Figura 3.3. Tal metodologia é semelhante à utilizada por Brandão (2017).

Etapa I: A partir do ensaio experimental realizado por Santos *et al.* (2016) e registrado em vídeo, foram extraídas imagens dos perfis de mistura no tambor nos tempos pré-determinados ao longo do processo.

Etapa II: As imagens foram importadas no *software* de código aberto ImageJ, convertidas para 8 bits e nelas foi aplicado um filtro que transforma os pixels somente para as cores preta e branca.

Etapa III: Após serem tratadas como descrito na Etapa II, as imagens foram recortadas para deixar apenas a área do tambor preenchida por partículas. As áreas foram divididas em células através da ferramenta de gradeamento. A concentração de pixels pretos em cada célula, a concentração média de pixels pretos para a seção transversal e o total de células ocupadas foram calculados. A partir desses valores foi possível determinar os Índices de Lacey.

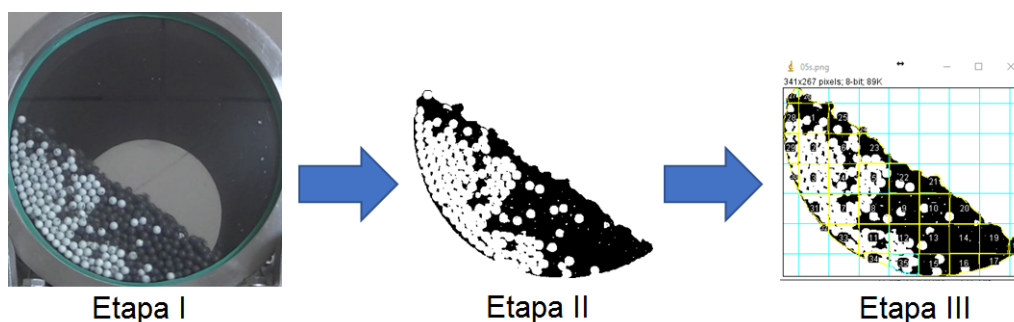


Figura 3.3: Etapas utilizadas no tratamento das imagens para obtenção do Índice de mistura experimental.

Para a determinação do índice de Lacey foi necessário calcular a variância da mistura, obtida pela Equação 2.10. Essa equação supõe que o tamanho das amostras é uniforme. No entanto, observou-se que o número de partículas por célula apresenta variação, não obedecendo à suposição de que as amostras possuem tamanhos iguais. Para contabilizar a variação do tamanho da amostra no cálculo da variância foi adicionado, à Equação 2.10, um fator de peso como proposto por Jiang *et al.* (2011). A variância foi, então, calculada através da Equação 3.2:

$$\sigma^2 = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^N w_i (c_i - \bar{c})^2 \quad (3.2)$$

em que w_i é o peso da célula i , ou seja, a razão entre o número de partículas na célula i (N_i) e o número total de partículas em todas as células (N_t) como mostra a Equação 3.3 e w é a soma de todos os w_i (Equação 3.4):

$$w_i = \frac{N_i}{N_t} \quad (3.3)$$

$$w = \sum_{i=1}^N w_i \quad (3.4)$$

3.1.2.2 ANÁLISE DO RESULTADO SIMULADO

Para a obtenção dos índices de segregação dos casos simulados, o procedimento descrito na seção anterior para o ensaio experimental poderia ser utilizado. Todavia, a quantidade de tratamentos que seriam realizados (25 casos do PCC da Tabela 3.1 avaliados em 15 instantes de tempo) tornaria esse procedimento impraticável. Como alternativa, foi proposto um algoritmo para o cálculo do índice de mistura. O algoritmo realiza o cálculo do Índice de Lacey a partir das informações de posição e tipo de cada uma das partículas do leito. Durante a simulação no LIGGGHTS®-PUBLIC, essas e

outras informações são armazenadas nos arquivos de saída para cada passo de tempo. Os dados referentes a todos os passos de tempo são unidos em uma única tabela e importados no RStudio, como será descrito na Seção 3.4.4.2.

O algoritmo foi programado na linguagem R e funciona da seguinte maneira:

- De acordo com a posição das partículas, são selecionadas apenas aquelas contidas em uma fatia de 1 cm de espessura da seção transversal do tambor rotatório, como mostra a Figura 3.4.

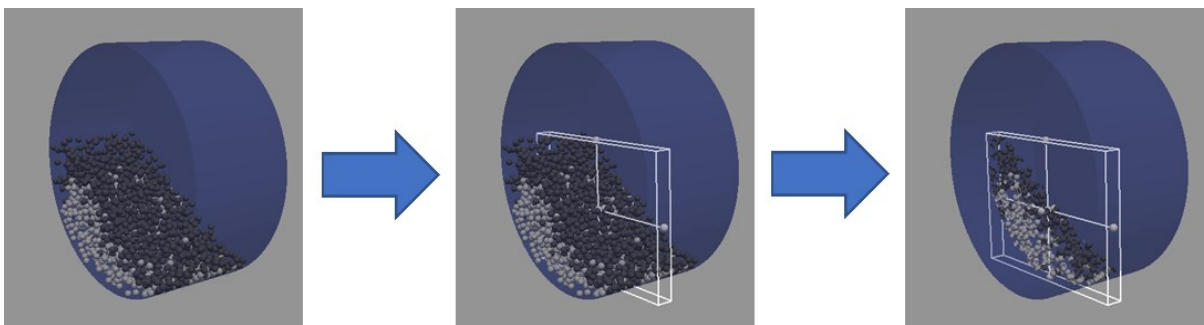


Figura 3.4: Seleção da seção do leito de partículas para determinação do índice de mistura.

- Essa seção é dividida em células e em cada uma é feita a contagem das partículas brancas e pretas. Utiliza-se uma expressão condicional para verificar se a célula está vazia e contar o número de células preenchidas.
- Enfim, calcula-se o fator de peso e a variância de cada célula não vazia através das Equações 3.2, 3.3 e 3.4; a variância de segregação pela Equação 2.11; a variância de mistura pela Equação 2.12; e finalmente o Índice de Lacey através da Equação 2.9.

Esse procedimento é então repetido para cada passo de tempo, através de um laço. O algoritmo possui três laços, sendo que o primeiro tem a função de percorrer todos os passos de tempo, desde o instante inicial até o fim da simulação, e os outros dois percorrem as células da seção transversal nas direções x e y do plano cartesiano. A estrutura do algoritmo é ilustrada pelo fluxograma da Figura 3.5.

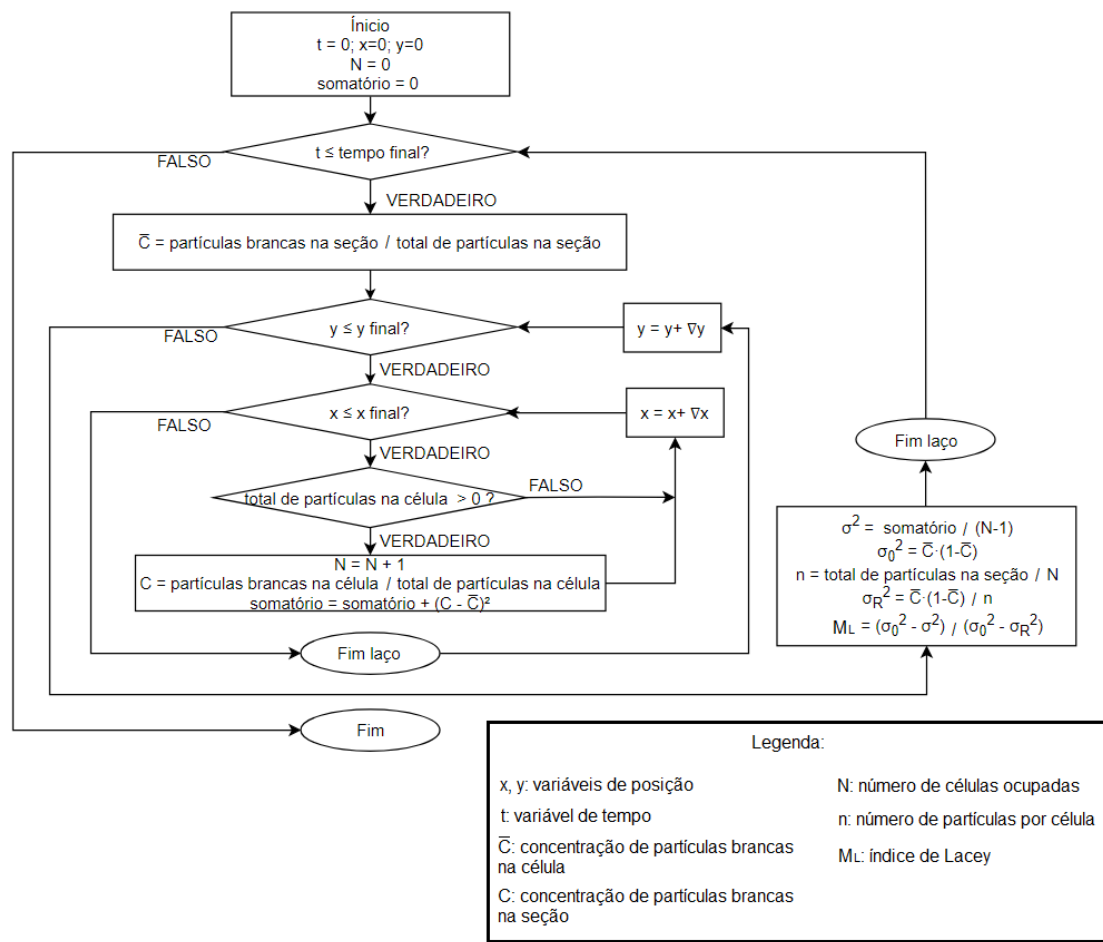


Figura 3.5: Fluxograma da estrutura do código utilizado no cálculo do Índice de Lacey.

3.2 INVESTIGAÇÃO DA SEGREGAÇÃO DE PARTÍCULAS EM UM TAMBOR ROTATÓRIO COM SUSPENSORES

Em algumas aplicações industriais é desejável a obtenção de um produto de material granular com uniformidade de mistura. No entanto, as partículas do leito podem apresentar diferentes níveis de distribuição das características que promovem a segregação, como as dimensões e densidades das partículas. Dessa forma, fica clara a importância de investigar quais são as condições de operação e propriedades geométricas do tambor rotatório que contribuem para minimizar a segregação. Brandão (2017) e Santos *et al.* (2016) investigaram numericamente e experimentalmente os efeitos do tamanho e densidade na segregação de partículas em um tambor rotatório sem suspensores, para diferentes condições de operação. No presente trabalho, investigou-se numericamente o efeito da adição de suspensores, em diferentes quantidades e

tamanhos, no fenômeno de segregação. Os efeitos da densidade e do tamanho das partículas foram considerados separadamente.

Para a investigação dos efeitos da densidade e tamanho de partículas, foram estabelecidos dois tipos de partícula, para duas configurações distintas, como mostra a Tabela 3.3, sendo a configuração C1 para avaliar o efeito da densidade das partículas e a configuração C2 para avaliar o diâmetro das partículas.

Tabela 3.3: Configurações de partículas no estudo de segregação em tambor rotatório.

Configuração	Material tipo I	Material tipo II	Efeito analisado
C1	d (mm) 6,350	d (mm) 6,350	Efeito da densidade das partículas
	ρ_s (kg/m ³) 2460	ρ_s (kg/m ³) 1230	
C2	d (mm) 6,350	d (mm) 3,175	Efeito do diâmetro das partículas
	ρ_s (kg/m ³) 2460	ρ_s (kg/m ³) 2460	

Em ambas as configurações C1 e C2, foram simuladas as condições estabelecidas em um planejamento do tipo 3³, sem repetições no ponto central, para avaliar a influência da quantidade e tamanho dos suspensores, bem como do grau de enchimento, na segregação do leito. Adicionais às 27 simulações do planejamento 3³, foram simulados ainda os casos para o tambor sem suspensores, para os três graus de enchimento investigados. A resposta analisada foi o Índice de Lacey final (M_L final), calculado através da metodologia detalhada na seção 3.1.2.2. Os valores usados no planejamento são mostrados na Tabela 3.4.

Tabela 3.4: Planejamento 3³ para avaliar o efeito dos suspensores.

Codificação	Número de suspensores	Razão altura do suspensor pelo raio do tambor (L/R)	Grau de enchimento (%)
-1	2	0,25	25,0%
0	4	0,50	37,5%
1	6	0,75	50,0%

Para o cálculo da variância na condição C2 em que as partículas possuem diâmetros diferentes, a proporção volumétrica foi usada no lugar da concentração de partículas e o número de partículas foi substituído pelo número de partículas equivalentes. Isto é, o diâmetro da menor partícula foi definido como o diâmetro básico e o número de partículas equivalentes das partículas maiores foi definido pela razão volumétrica com o volume da menor partícula. Dessa forma, a variância foi calculada pelas Equações 3.5 e 3.6:

$$\sigma^2 = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^N w_i (a_i - \bar{a})^2 \quad (3.5)$$

$$w_i = \frac{N_{eq_i}}{N_{eq_t}} \quad (3.6)$$

em que a_i é a proporção volumétrica do componente de referência na amostra i , \bar{a} é a média da proporção volumétrica do componente de referência em todas as amostras e N_{eq} é o número total de partículas equivalentes para a célula, denotada pelo subscrito “i”, ou para a seção inteira, denotada pelo subscrito “t”.

3.3 INVESTIGAÇÃO DA CINÉTICA DE MISTURA DE PARTÍCULAS EM UM TAMBOR ROTATÓRIO COM SUSPENSORES

A mistura de partículas em um tambor rotatório acontece em diferentes velocidades, a depender das características da partícula, da geometria do tambor e das condições de operação.

No presente estudo, o objetivo foi avaliar a influência do grau de enchimento, do tamanho e da quantidade de suspensores na velocidade de mistura. Para isso, foram simuladas as condições estabelecidas no planejamento do tipo 3^3 da Tabela 3.4 para avaliar os efeitos desses fatores na constante cinética de mistura (k), totalizando 27 casos simulados. Como referência, foram adicionados ainda os casos do tambor sem suspensores, nos três graus de enchimento investigados. As condições das simulações

são as mesmas apresentadas na Tabela 3.2. Assim como nas simulações de calibração, as partículas, ainda que idênticas, foram divididas entre dois tipos e dispostas como mostrado na Figura 3.1.

Em seguida, procurou-se avaliar o efeito da quantidade de suspensores isoladamente. Para isso, o grau de enchimento do tambor e a razão da altura dos suspensores pelo raio foram fixados em 25% e 0,5 respectivamente, por serem valores que resultaram nas maiores constantes cinéticas em simulações preliminares. O número de suspensores foi variado de 1 a 10, como ilustrado na Figura 3.6.

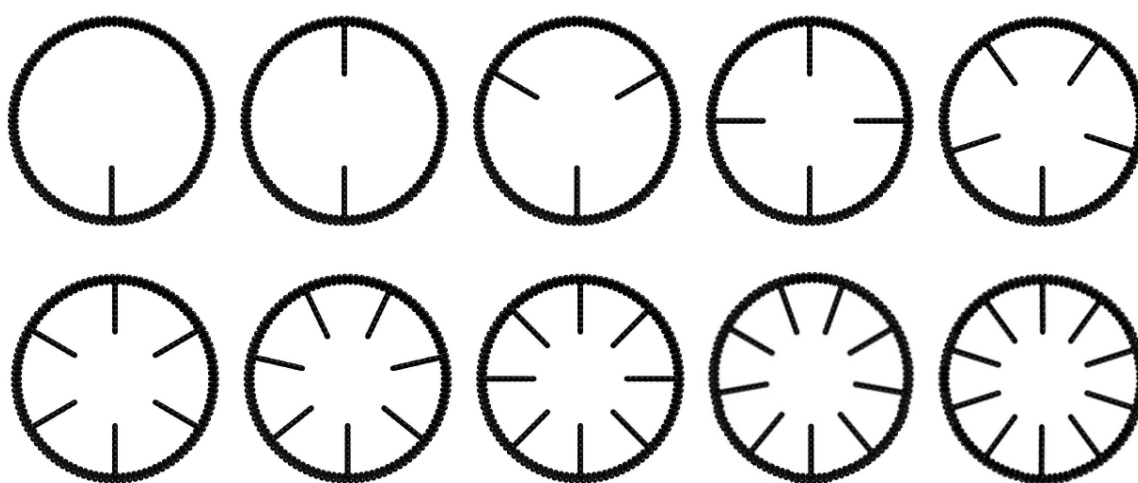


Figura 3.6: Tambores com o número de suspensores variando de 1 a 10.

O efeito isolado do tamanho dos suspensores foi investigado na sequência. O grau de enchimento foi novamente fixado em 25% e o número de suspensores foi fixado em 8, uma vez que essa quantidade de suspensores foi a que resultou na maior velocidade de mistura em simulações preliminares. A razão entre a altura dos suspensores e o raio do tambor (L/R) foi variada de 0,1 até 0,9, em incrementos de 0,1.

Após a realização de planejamentos para avaliar os efeitos do grau de enchimento e do tamanho e número de suspensores na cinética de mistura, foi planejado, através do PCC mostrado na Tabela 3.5, uma sequência de simulações para verificar o efeito do tamanho das partículas. Nesse planejamento, o número de suspensores foi fixado em 8 e foram investigados os efeitos do tamanho das partículas, do grau de enchimento do tambor e do tamanho dos suspensores.

Tabela 3.5: Matriz do Planejamento Composto Central para avaliação da cinética de mistura.

Simulação	Fatores					
	Diâmetro da partícula (mm)	X1	Razão altura do suspensor pelo raio do tambor	X2	Grau de enchimento (%)	X3
1	3,350	-1,00	0,25	-1,00	25,00	-1,00
2	3,350	-1,00	0,25	-1,00	50,00	1,00
3	3,350	-1,00	0,75	1,00	25,00	-1,00
4	3,350	-1,00	0,75	1,00	50,00	1,00
5	9,350	1,00	0,25	-1,00	25,00	-1,00
6	9,350	1,00	0,25	-1,00	50,00	1,00
7	9,350	1,00	0,75	1,00	25,00	-1,00
8	9,350	1,00	0,75	1,00	50,00	1,00
9	2,490	-1,29	0,50	0,00	37,50	0,00
10	10,210	1,29	0,50	0,00	37,50	0,00
11	6,350	0,00	0,18	-1,29	37,50	0,00
12	6,350	0,00	0,82	1,29	37,50	0,00
13	6,350	0,00	0,50	0,00	21,41	-1,29
14	6,350	0,00	0,50	0,00	53,59	1,29
15	6,350	0,00	0,50	0,00	37,50	0,00
16	6,350	0,00	0,50	0,00	37,50	0,00

3.4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

A implementação computacional foi realizada em quatro etapas: confecção das geometrias, inicialização e configuração do LIGGGHTS®-PUBLIC, simulação e pós-processamento.

Em todas as etapas de implementação, procurou-se utilizar, desde a confecção das geometrias até o pós-processamento, somente *softwares* de código aberto devido às vantagens já citadas anteriormente. A seguir serão detalhadas cada uma dessas etapas.

3.4.1 CONFECCÃO DAS GEOMETRIAS

As geometrias utilizadas nas simulações DEM foram confeccionadas no *software* Blender (desenvolvido pela Blender Foundation), que possui código aberto e é destinado à computação gráfica 3D. Uma vez criada, a geometria deve ser exportada em formato de extensão STL, que é o formato compatível com o *software* DEM

LIGGGHTS®-PUBLIC. Após ser importada no LIGGGHTS®-PUBLIC, a geometria pode ser configurada para apresentar padrões de movimento lineares, rotacionais, oscilatórios ou algum outro padrão de movimento definido pelo usuário (KLOSS; GONIVA, 2016).

As geometrias dos tambores rotatórios simulados neste trabalho foram construídas para o regime batelada, ou seja, o tambor não conta com regiões de entrada e saída de material. Os suspensores, quando adicionados, foram distribuídos igualmente pelo perímetro do tambor, por toda sua extensão. A geometria correspondente a um cilindro com 8 suspensores construída no Blender é ilustrada na Figura 3.7.

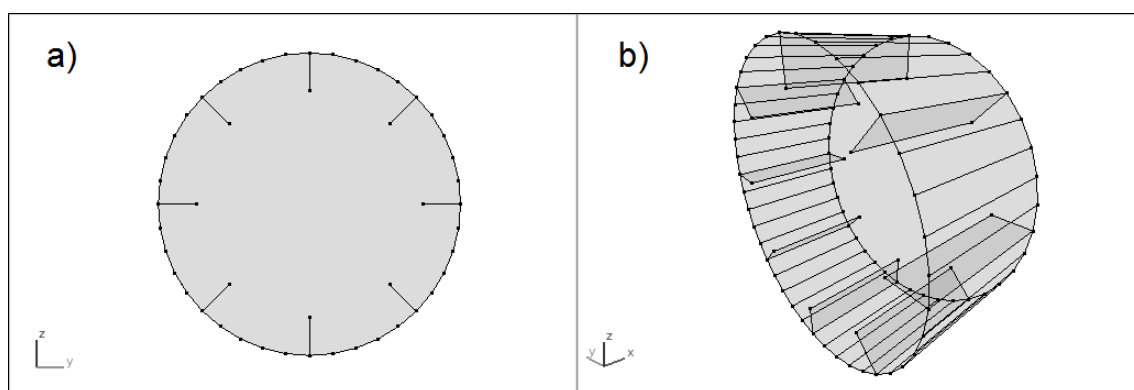


Figura 3.7: Vista frontal (a) e lateral (b) da geometria de um tambor rotatório com 8 suspensores.

3.4.2 INICIALIZAÇÃO E CONFIGURAÇÃO DO LIGGGHTS®-PUBLIC

Como citado anteriormente, o LIGGGHTS®-PUBLIC é um *software* de código aberto e está disponível gratuitamente para ser descarregado de seu *website*. É recomendável que ele seja instalado em um sistema operacional baseado em Unix já que o código do LIGGGHTS®-PUBLIC, assim como a maioria dos *softwares* de código aberto, foi criado e escrito em máquinas Unix. Além disso, outros aplicativos que também são importantes durante as simulações nem sempre são compatíveis com outros sistemas operacionais.

Além do LIGGGHTS®-PUBLIC, foi necessário instalar bibliotecas, ferramentas e atualizações fundamentais para a simulação. Uma dessas ferramentas é a *openMPI*. Através dela, é possível executar as simulações em paralelo em múltiplos núcleos com o uso do comando *mpirun*, reduzindo o tempo de simulação.

A configuração de uma simulação no LIGGGHTS®-PUBLIC é feita através de um arquivo de entrada.

Na primeira parte deste arquivo, são definidos dados gerais da simulação, como o tipo de partícula utilizado; se as fronteiras são do tipo fixo, móvel ou periódica; e o tamanho do domínio de simulação, como apresentado na Figura 3.8.

```
atom_style      granular
boundary        f f f
newton          off

processors 1 1 8

communicate      single vel yes
units           si

region          reg block -0.1101 0.1101 -0.1101 0.1101 -0.0501 0.0501 units box
create_box      3 reg

neighbor        0.001 bin
neigh_modify    delay 0
```

Figura 3.8: Dados gerais da simulação no arquivo de entrada

Na segunda parte, além do modelo de contato, são estabelecidas as propriedades para cada tipo de partícula e para interações entre partículas de diferentes tipos, como a razão de Poisson e os coeficientes de restituição e fricção. São determinados o passo no tempo e a aceleração da gravidade, como mostra a Figura 3.9.

```
#Material properties

fix          m1 all property/global youngsModulus peratomtype 5.0e6 5.0e6 5.0e6
fix          m2 all property/global poissonsRatio peratomtype 0.2 0.2 0.3
fix          m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair 3 0.90 0.90 0.80
0.90 0.90 0.80 0.80 0.80 0.10

fix          m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair 3 0.8 0.8 0.5
0.8 0.8 0.5 0.5 0.5 0

fix          m5 all property/global coefficientRollingFriction peratomtypepair 3 0.03 0.03
0.06 0.03 0.03 0.06 0.06 0.06 0

fix          m6 all property/global cohesionEnergyDensity peratomtypepair 3 0 0 0 0 0 0 0

#pair style
pair_style    gran model hertz tangential history cohesion sjkr rolling_friction cdt

pair_coeff     * *

timestep      0.00001

fix          1 all nve/sphere
fix          2 all gravity 9.81 vector 0.0 -1.0 0.0
```

Figura 3.9: Modelo de contato e propriedades DEM no arquivo de entrada.

Na terceira parte, são importadas as geometrias CAD e são definidas a região e a taxa de inserção das partículas. Nesta etapa, também são definidas as informações

termodinâmicas do sistema que serão exibidas no terminal durante a execução da simulação, como apresentado na Figura 3.10.

```
#import mesh from cad:
fix      cad1 all mesh/surface file meshes/tambor.stl type 3 move -0. -0. 0. &
scale 1 rotate axis 0. 1. 0. angle 0. rotate axis 0. 0. 1. angle 90.
#separador
fix      separador all wall/gran model hertz tangential history rolling_friction cdt primitive
type 2 xplane 0.0
#region of insertion
#region      bc cylinder z 0 0 0.11 -0.05 0.05 units box
region      bc1 block -0.098 -0.001 -0.049 0.049 -0.05 0.05 units box
region      bc2 block 0.001 0.098 -0.049 0.049 -0.05 0.05 units box
#particle distributions
fix      pts1 all particletemplate/sphere 1 atom_type 1 density constant 2460 radius
constant 0.003175
fix      pdd1 all particledistribution/discrete 1. 1 pts1 1.0
fix      pts2 all particletemplate/sphere 1 atom_type 2 density constant 1230 radius
constant 0.003175
fix      pdd2 all particledistribution/discrete 1. 1 pts2 1.0
#thermo settings
compute 1 all erotate/sphere
thermo_style custom step atoms ke c_1 vol
thermo 1000
thermo_modify lost ignore norm no
compute_modify thermo_temp dynamic yes
```

Figura 3.10: Importação das geometrias e inserção das partículas no arquivo de entrada

Por fim, são estipulados os resultados que devem ser gerados e armazenados nos arquivos de saída e os tempos de cada segmento da simulação (inserção de partículas, acomodação e rotação do tambor) e a velocidade de rotação, como mostra a Figura 3.11.

```
#make a dump of particles and the stl file
dump      dmp all custom 10000 post/dump*.movingMesh id type x y z ix iy iz vx vy vz radius
dump      dumpstl all mesh/stl 10000 post/dump*.stl
#use the imported mesh as granular wall
fix      bucket_wall all wall/gran model hertz tangential history rolling_friction cdt mesh n_mesher 1 meshes
cad1
run      1 upto
#run with particle insertion
fix      ins1 all insert/rate/region seed 123481 distributiontemplate pdd1 nparticles 2790 particlerate 12000
vel constant 0. -0.8 0. insert_every 500 overlapcheck yes region bc1
run      60000 upto
unfix    ins1
fix      ins2 all insert/rate/region seed 431524 distributiontemplate pdd2 nparticles 2790 particlerate 12000
vel constant 0. -0.8 0. insert_every 500 overlapcheck yes region bc2
run      120000 upto
unfix    ins2
#run to let particle settle
run      200000 upto
unfix    separador
#moving mesh
fix      movecad1 all move/mesh mesh cad1 rotate origin 0. 0. 0 axis 0. 0. 1. period 5.7
#period 5.7
#run
run      7000000
```

Figura 3.11: Definição do tempo de simulação e informações de saída no arquivo de entrada.

3.4.3 SIMULAÇÃO

Uma vez que o arquivo de entrada esteja completamente configurado, é possível executar o LIGGGHTS®-PUBLIC a partir da janela de comando no local em que estão localizados o arquivo de entrada, as malhas das geometrias e o diretório de saída. Nessa mesma janela, é mostrada a massa total do sistema, o passo de tempo atual e o número de partículas inseridas, sendo possível acompanhar a progressão da simulação.

Neste trabalho, as simulações foram executadas em uma máquina Linux com Ubuntu 16.04 LTS com 32 GB de memória RAM e dois processadores Intel Xeon *hexacore* de 2.40 GHz. A versão do LIGGGHTS®-PUBLIC utilizada é a LIGGGHTS-PUBLIC 3.4.1 lançada em 19 de maio de 2016.

3.4.4 PÓS-PROCESSAMENTO

Durante a execução da simulação, para um número determinado de passos de tempo, são gerados dois tipos de arquivo de saída no diretório especificado no arquivo de entrada: os arquivos *dump*, que contém informações como posição, forças e velocidades e os arquivos de geometria STL para que elas possam ser visualizadas na ferramenta de pós-processamento, junto com as partículas. Em cada arquivo de saída são armazenadas informações de todas as partículas presentes naquele passo de tempo. O pós-processamento foi realizado através dos *softwares* Paraview e RStudio, como será detalhado nas seções 3.4.4.1 e 3.4.4.2.

3.4.4.1 PARAVIEW

O Paraview é uma aplicação de código aberto, multi-plataforma de análise de dados e visualização. Neste *software* é possível analisar e visualizar os dados das simulações produzidas no LIGGGHTS®-PUBLIC. Para carregar os dados no Paraview, é necessário converter os arquivos de saída para o formato *Visualization Toolkit* (VTK). Essa etapa foi realizada executando a ferramenta *LIGGGHTS post processing* (LPP) no diretório em que estão contidos os arquivos de saída da simulação.

Uma vez carregados os dados gerados pelo LIGGGHTS®-PUBLIC no Paraview, pode-se visualizar o movimento das superfícies, além das geometrias importadas e das partículas durante o progresso da simulação, sendo possível exportar os resultados como vídeo ou animação. Diferentes características das partículas podem ser visualizadas, tais como: velocidade e força nas três direções espaciais; raio; tipo de partícula e temperatura. O Paraview oferece uma variedade de filtros que possibilitam, por exemplo, fazer um corte no domínio de simulação e visualizar somente os resultados referentes a esse corte, traçar a trajetória de partículas especificadas ao longo do tempo, dentre outros. As imagens exportadas do Paraview foram usadas para a obtenção do ângulo de repouso dinâmico das simulações de calibração, de acordo com o método explicado na seção 3.1.1.

3.4.4.2 RSTUDIO

Na obtenção dos índices de Lacey, é preciso gerar planilhas a serem tratadas em um *software* estatístico. Para este fim, foi utilizado o RStudio, um *software* de código aberto que proporciona um ambiente de desenvolvimento integrado para a linguagem de programação R de computação estatística.

Os arquivos de saída do LIGGGHTS®-PUBLIC são gerados em determinados passos de tempo em uma frequência estabelecida no arquivo de entrada. Neste trabalho, os arquivos de saída foram gravados a cada 10000 passos de tempo, resultando em um número considerável de arquivos nas simulações realizadas.

Os arquivos referentes aos passos de tempo de determinada simulação foram unidos em um único arquivo através de uma ferramenta de código aberto denominada Pizza.py. Essa ferramenta, escrita na linguagem Python, conta com funções de pós-processamento dos arquivos de saída do LAMMPS, LIGGGHTS®-PUBLIC e outros simuladores. A função *dump* do Pizza.py analisa os arquivos de saída da simulação e permite filtrar somente o intervalo de tempo e as partículas de interesse, assim como exportar na forma de tabela as informações desejadas das partículas e intervalos de tempo selecionados. Nas simulações deste trabalho, os passos de tempo anteriores ao início da rotação do tambor foram descartados. O arquivo gerado pelo Pizza.py pode, então, ser importado pelo RStudio e processado como descrito na seção 3.1.2.2.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, serão apresentados os resultados da determinação dos parâmetros DEM (Seção 4.1), bem como das análises do efeito do uso de suspensores na segregação de partículas (Seção 4.2) e na cinética de mistura (4.3).

4.1 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DEM

Assim como relatado no item 3.3, foi definido um PCC (Tabela 3.2) para a determinação dos parâmetros DEM. Nesse planejamento, combinações dos valores das seguintes variáveis foram utilizadas: coeficiente de atrito estático partícula-partícula (μ_{Spp}); coeficiente de atrito estático partícula-parede (μ_{Spw}); coeficiente de atrito de rolamento partícula-partícula (μ_{Rpp}), e coeficiente de atrito de rolamento partícula-parede (μ_{Rpw}). As simulações de calibração foram comparadas com a condição experimental em duas respostas: o ângulo de repouso dinâmico e a constante cinética de mistura (k). Os resultados detalhados das simulações para ambas as respostas estão disponíveis no Apêndice 1. Os ângulos de repouso dinâmico foram determinados a partir da média das seis medidas realizadas para cada simulação em diferentes instantes de tempo e são apresentados na Figura 4.1.

Ainda que se tenha adotado uma metodologia desenvolvida para minimizar os erros de medição, as medidas do ângulo de repouso apresentaram variações médias em torno de 1,6%. O desvio-padrão dessas medidas variaram de 0,14° a 0,95°. Para eliminar as simulações que não reproduziram adequadamente o ângulo de repouso experimental, foram realizados testes t-Student para a comparação entre as médias das medidas de cada simulação com a média das medidas experimentais (33,02°; desvio-padrão: 0,80°). As condições que tiveram possibilidade estatística de apresentarem o

mesmo ângulo de repouso dinâmico da condição experimental foram destacadas em vermelho na Figura 4.1.

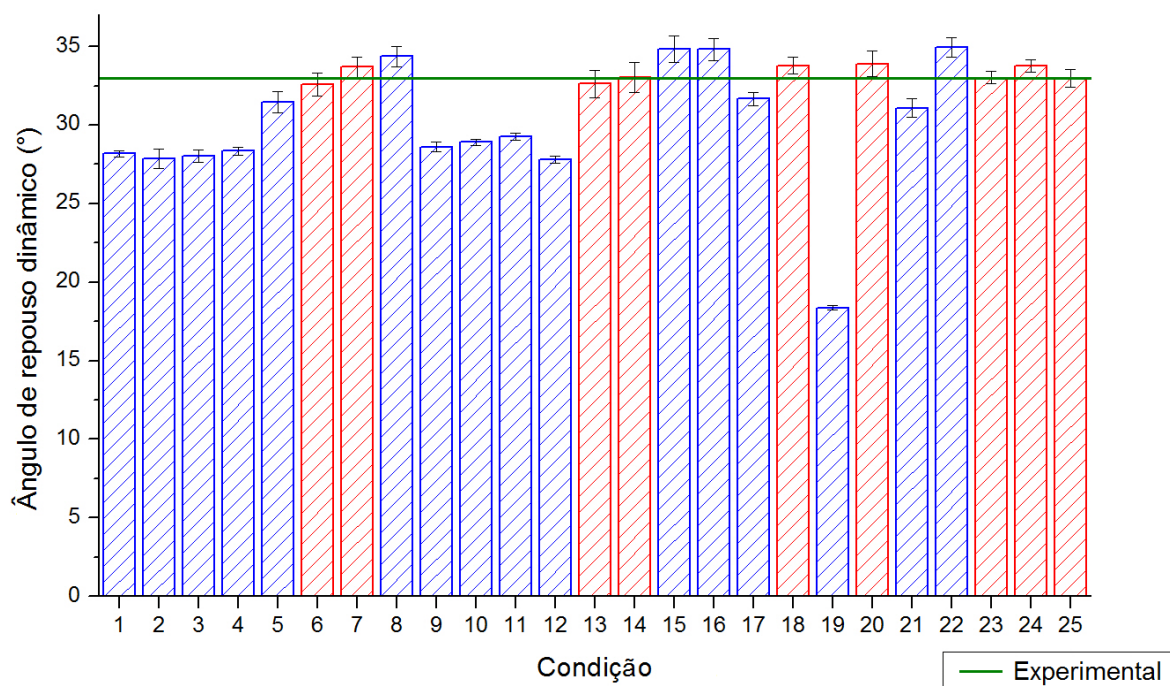


Figura 4.1: Ângulo de repouso medido para as simulações do PCC em relação ao experimental

A constante cinética de mistura foi calculada pelo ajuste da Equação 3.1 em 15 instantes de tempo, desde o início da rotação do tambor até 70 s após o início. As medidas para as condições experimentais e para a condição simulada foram realizadas de maneiras distintas. Para verificar se ambos os métodos obtêm resultados equivalentes, os Índices de Lacey e a constante cinética de mistura foram medidos para a simulação de uma condição arbitrária (condição 14) tanto pelo método simulado, descrito na Seção 3.1.2.2. quanto pelo método experimental, descrito na Seção 3.1.2.1. A comparação entre as respostas obtidas para ambos os métodos é apresentada na Figura 4.2. A constante cinética obtida pelo método usado nas condições simuladas foi de $0,194 \text{ s}^{-1}$ com um erro médio padrão de $0,016 \text{ s}^{-1}$, o valor obtido pelo método usado na condição simulada foi de $0,190 \text{ s}^{-1}$ e erro padrão de $0,015 \text{ s}^{-1}$. A diferença entre as medidas pelos dois métodos de $0,040 \text{ s}^{-1}$ foi muito inferior ao erro. Dessa forma, verificou-se que ambos os métodos de medida para o Índice de Lacey resultam em respostas equivalentes.

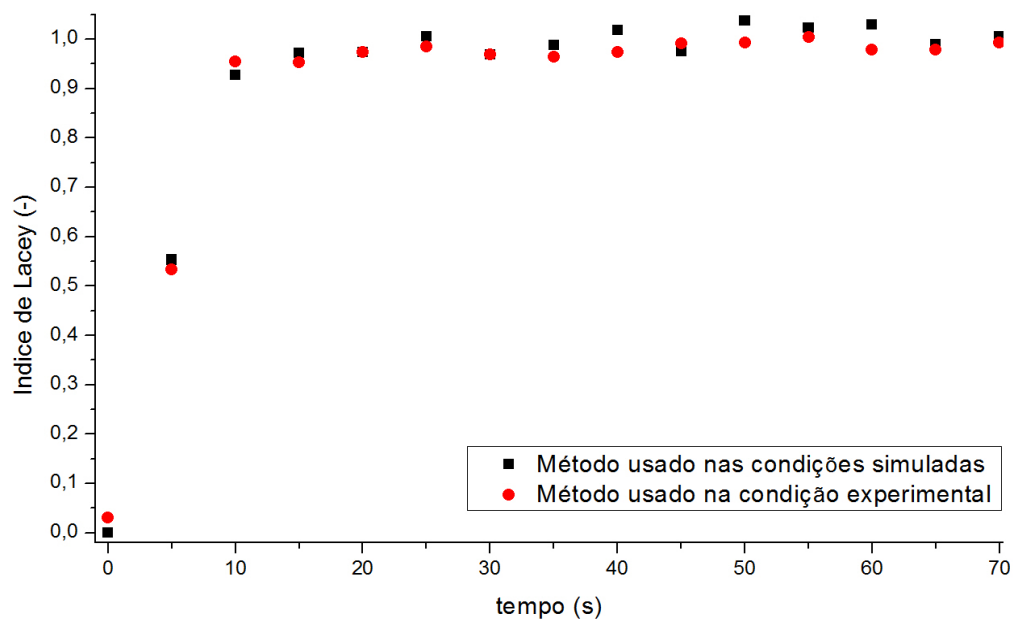


Figura 4.2: Comparação entre os Índices de Lacey medidos por diferentes métodos para a condição 14.

Os resultados das constantes cinéticas de mistura para as simulações do PCC são mostrados na Figura 4.3. De maneira similar ao ângulo de repouso, testes t-Student foram usados para verificar quais condições simuladas tiveram possibilidade estatística de apresentarem a mesma constante cinética de mistura da condição experimental ($k_{exp} = 0,198 \text{ s}^{-1}$, desvio-padrão = $0,034 \text{ s}^{-1}$). Essas condições foram destacadas em na Figura 4.3 vermelho.

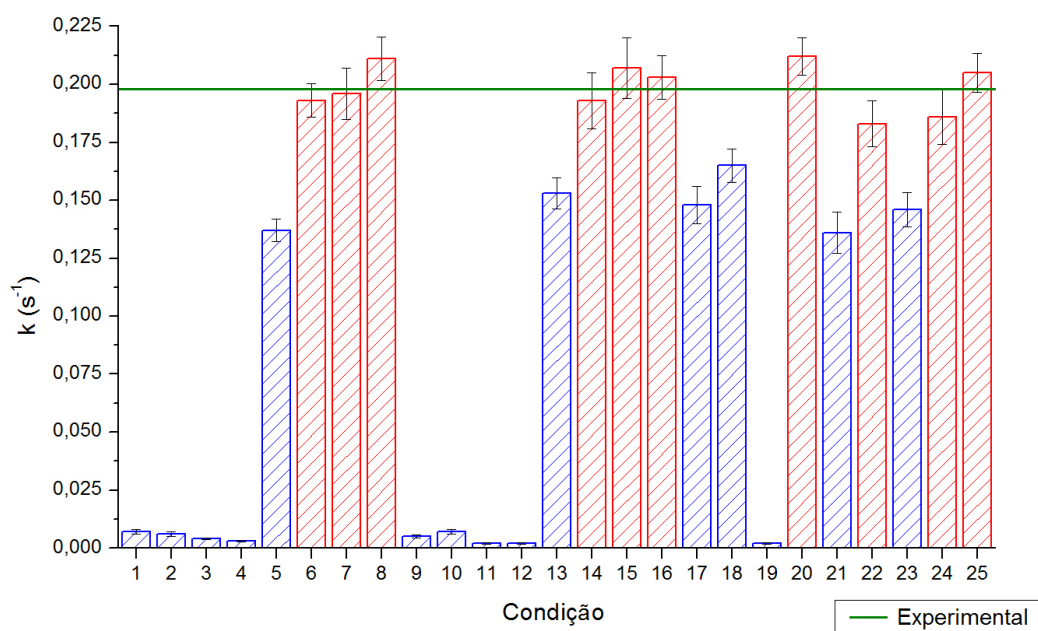


Figura 4.3: Constante cinética de mistura para as simulações do PCC em relação ao valor experimental

Para as duas respostas analisadas (ângulo de repouso e constante cinética de mistura) e para cada condição simulada, foi utilizado o seguinte teste de hipótese com nível de confiança de 95%:

H_0 : Resposta simulada = resposta experimental

H_1 : Resposta simulada \neq resposta experimental

As simulações em que pelo menos uma das respostas foi considerada significativamente diferente da resposta experimental foram rejeitadas. De acordo com o resultado dos testes, apenas seis simulações foram consideradas adequadas para representar a condição experimental. Foram elas: as simulações, 6, 7, 14, 20, 24 e 25. Dessa forma, os parâmetros das seis simulações foram capazes de representar satisfatoriamente a condição experimental em estudo. No entanto, a simulação 14 foi escolhida devido à proximidade entre os valores dos parâmetros DEM dessa condição com os valores encontrados experimentalmente por Lima (2017), exceto pelo parâmetro μ_{Rpp} . Apesar disso, a diferença neste parâmetro na simulação 14 e o valor experimental não seria suficiente para alterar as respostas de maneira significativa, conforme constatado no trabalho de Lima (2017). As superfícies calibradas nos experimentos de Lima (2017) (lixa P80 e vidro) são as mesmas usadas na condição experimental de Santos (2016) que foi escolhida como referência neste trabalho. A comparação entre os valores da simulação 14 e dos medidos experimentalmente por Lima (2017) são apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Comparação entre os valores de parâmetros encontrados na simulação 14 com os medidos experimentalmente (LIMA, 2017).

Coeficiente	Superfície	Parâmetros Medidos	Simulação 14
μ_{spp}	Esfera de Vidro	$0,80 \pm 0,07$	0,80
μ_{spw}	Lixa	$0,49 \pm 0,06$	0,50
μ_{Rpp}	Vidro	$0,011 \pm 0,001$	0,03
μ_{Rpw}	Lixa	$0,054 \pm 0,005$	0,06

Na Figura 4.4 a curva da cinética de mistura ajustada pelos resultados da simulação da condição 14 é comparada com os resultados obtidos da condição experimental.

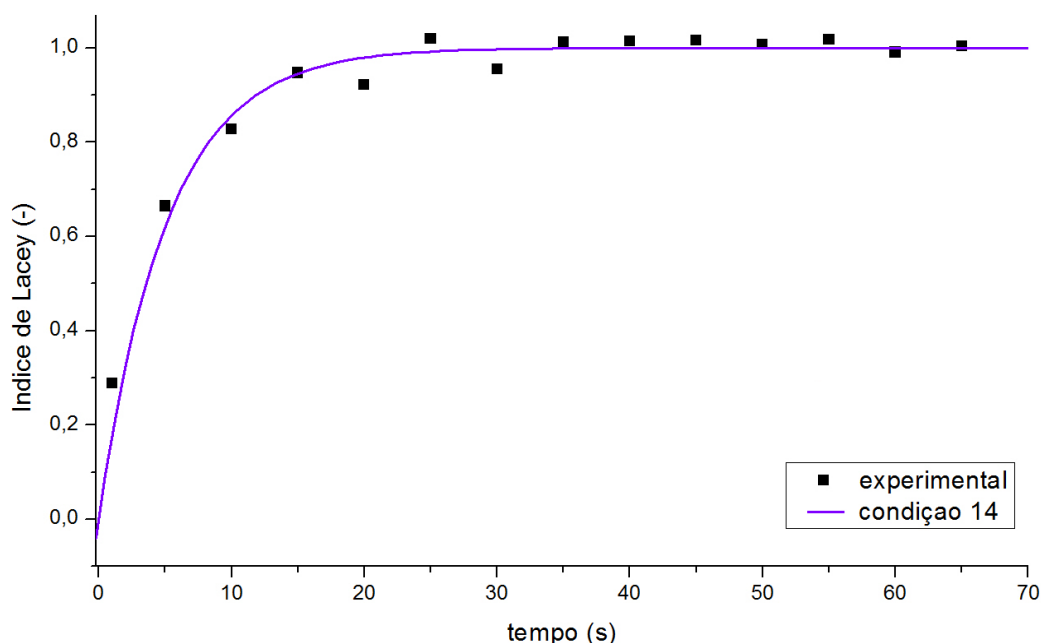


Figura 4.4: Cinética de mistura para a condição experimental e a condição calibrada

Além de permitir a calibração do conjunto de parâmetros DEM que representam a condição experimental, a análise do PCC revela a existência e intensidade dos efeitos dos parâmetros DEM nas duas respostas analisadas. As Tabela 4.2 e 4.3 mostram os valores calculados para os efeitos significativos e suas intensidades (valor p) na predição do ângulo de repouso dinâmico e da constante cinética de mistura, respectivamente.

Tabela 4.2: Variáveis significativas do PCC para determinação dos parâmetros DEM a partir do ângulo de repouso.

	μ_{Rpp}	μ_{Spw}	μ_{Spw}^2
Efeito	1,336	6,23	-5,63
Valor-p	0,0488	$<10^{-4}$	$<10^{-4}$
$R^2 = 86\%; \alpha = 5\%$			

Tabela 4.3: Variáveis significativas do PCC para determinação dos parâmetros DEM a partir da constante cinética de mistura.

	μ_{Spp}^2	μ_{Rpp}	μ_{Rpp}^2	μ_{Spw}	μ_{Spw}^2	μ_{Rpw}	μ_{Rpw}^2	μ_{Rpp} com μ_{Spw}
Efeito	-0,048	0,020	-0,046	0,173	-0,093	0,015	-0,040	0,021
Valor-p	0,0002	0,0070	0,0003	$<10^{-4}$	$<10^{-4}$	0,0334	0,0101	0,0123
$R^2 = 98\%; \alpha = 5\%$								

Para a predição da constante cinética de mistura, observa-se que um maior número de parâmetros e efeitos são significativos, comparados com a predição do ângulo de repouso dinâmico. Além disso, a equação de regressão resultante do PCC para a constante cinética de mistura conseguiu prevê-la de maneira mais precisa ($r^2 = 0,98$) do que o modelo do ângulo de repouso conseguiu prevê-lo ($r^2 = 0,86$), revelando que a constante cinética de mistura é mais sensível aos parâmetros DEM. A constante cinética de mistura foi obtida através do ajuste da Equação 3.1, desde o início da rotação até o final da simulação. Portanto, ela captura informações sobre a dinâmica do escoamento do leito em estado transiente. Já o ângulo de repouso é medido somente após o escoamento ter atingido o estado estacionário. Assim, em relação ao ângulo de repouso, a cinética de mistura é uma resposta que captura melhor as características das partículas e das paredes, que determinam os parâmetros DEM estudados, sugerindo que sua utilização seja mais adequada para a calibração desses parâmetros.

O atrito estático partícula-parede é o fator mais significativo em ambas as respostas. A análise do PCC foi repetida considerando apenas o efeito deste parâmetro e verificou-se que a equação expressa apenas em função do atrito estático partícula-parede consegue representar 84% da variabilidade do ângulo de repouso e 89% da variabilidade da constante cinética de mistura. Isso mostra que imprecisões na determinação deste parâmetro pode acarretar em grandes desvios na previsibilidade das respostas, demonstrando a importância de uma calibração rigorosa para este parâmetro a fim de se obter um modelo adequado.

De fato, o atrito estático partícula-parede é um parâmetro chave na caracterização do escoamento de um leito de partículas em um tambor rotatório, sendo usado por Mellmann (2001) como critério para a transição do regime de deslizamento e nos Diagramas de Comportamento do Leito de Henein *et al.* (1983) para a classificação dos escoamentos.

4.2 SEGREGAÇÃO DE PARTÍCULAS EM TAMBORES ROTATÓRIOS COM SUSPENSORES

Nesta seção foi estudada a influência dos suspensores em um tambor rotatório na segregação de partículas. Foram analisadas separadamente tanto a segregação promovida pela diferença do tamanho, quanto pela diferença de densidade das partículas. Nos dois casos, as simulações numéricas foram realizadas de acordo com as

condições do planejamento apresentado na Tabela 3.4, utilizando os parâmetros DEM correspondentes ao da condição 14 do planejamento de calibração.

No estudo da segregação por diferença de densidades, foram definidas partículas de mesmo diâmetro e densidade do material I o dobro da densidade do material II (configuração C1); e para o estudo do efeito do tamanho das partículas na segregação, foram utilizadas as mesmas densidades e diâmetro do material I sendo o dobro do diâmetro do material II (configuração C2), como foi apresentado na Tabela 3.3.

Na Figura 4.5 é apresentado o resultado das quatro condições extremas para o Índice de Lacey final das 27 simulações do planejamento 3^3 , para ambos os efeitos estudados.

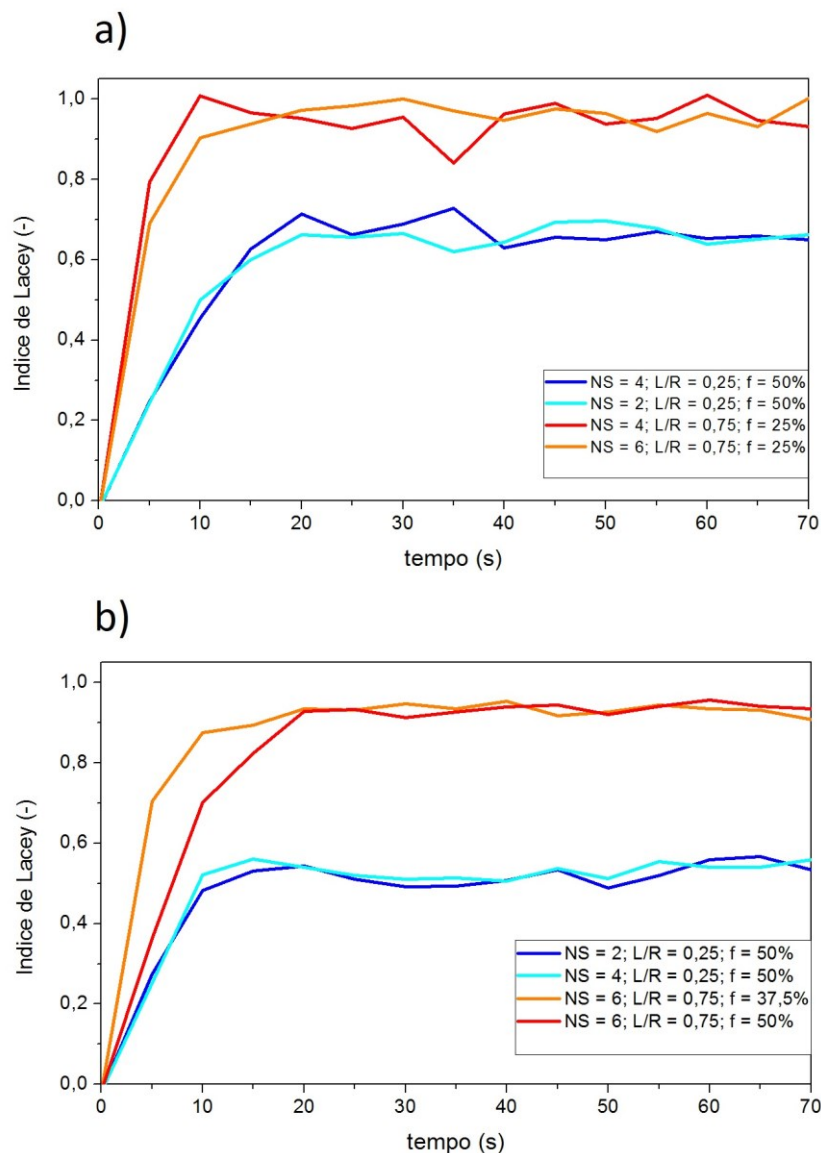


Figura 4.5: Índice de Lacey pelo tempo em diferentes condições para (a) efeito da densidade (b) efeito do tamanho.

É possível observar que para cada condição simulada, nas duas situações, o Índice de Lacey é crescente nos primeiros instantes após o início da rotação até atingir um patamar em que seu valor se mantém praticamente constante; esse valor é o Índice de Lacey final. Nota-se que passados cerca de 20 s após o início da rotação, esse patamar já é atingido para todas as condições. O mesmo foi observado para as condições não representadas na Figura 4.5. Para garantir um valor já estabelecido e característico de cada condição, o Índice de Lacey final utilizado foi a média dos valores do Índice de Lacey após 35 s até o final da simulação (70 s).

Nas simulações da determinação dos parâmetros DEM, discutido na Seção 4.1 em que foram usadas partículas idênticas como tipo I e tipo II, o patamar atingido nas condições em que houve mistura correspondia a um Índice de Lacey próximo a 1, indicando uma mistura completamente aleatória. Esse resultado já era esperado para partículas idênticas devido à ausência de fatores que causassem segregação e revela que o efeito do equipamento apenas não promove segregação. Entretanto, ao usar partículas com diferentes tamanhos ou densidades, para cada tipo a ser misturado, essas diferenças promovem segregação através da percolação de partículas pequenas ou densas, que tendem a formar um núcleo no centro do cilindro, como descrito por Ottino e Lueptow (2008).

Na Figura 4.5, observa-se que cada condição simulada corresponde a um patamar diferente, tanto na análise do efeito da densidade, quanto na do diâmetro de partículas. Esse resultado confirma que a quantidade e tamanho dos suspensores no tambor rotatório são capazes de influenciar a intensidade da segregação de uma mistura. Dessa forma, é possível minimizar a segregação de partículas ajustando-se o comprimento e o número de suspensores para valores que resultem no maior Índice de Lacey final.

A Figura 4.6, bem como a Tabela 4.4 apresentam o efeito da adição de suspensores em um tambor rotatório com 50% de grau de enchimento e com partículas de tamanhos distintos (configuração C2) sobre o Índice de Lacey. Observa-se que a simulação com suspensores possui Índice de Lacey final muito superior do que sem suspensores.

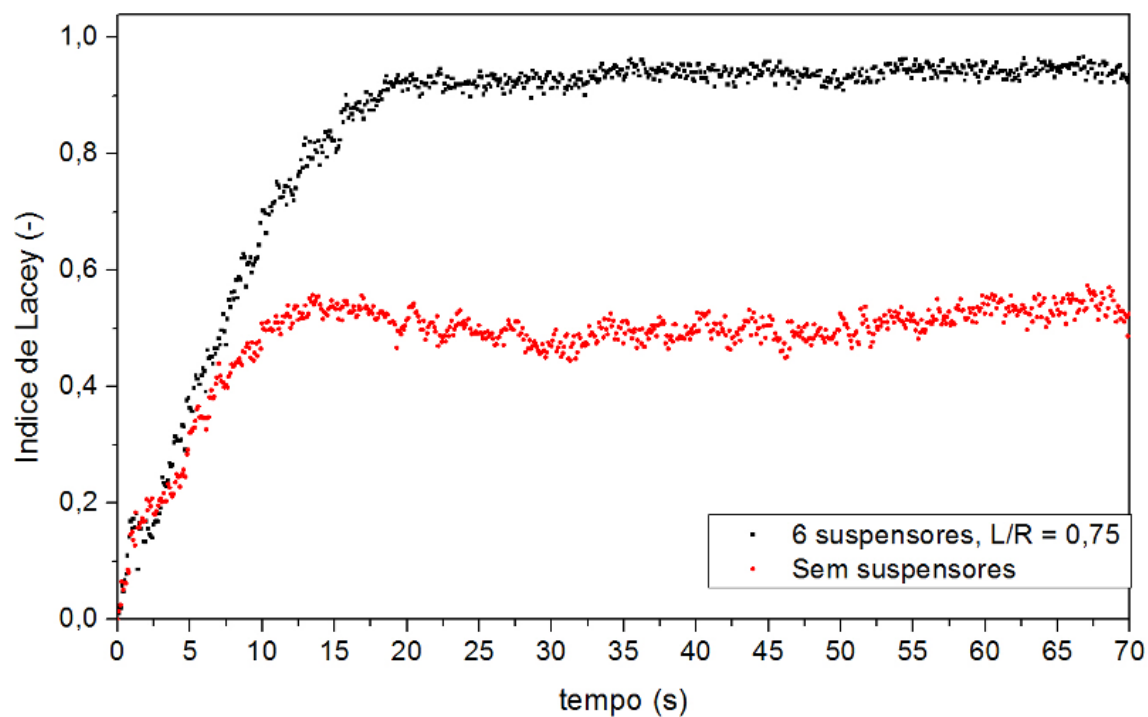


Figura 4.6: Efeito da adição de 6 suspensores com $L/R = 0,75$ no Índice de Lacey final para grau de enchimento de 50%.

Tabela 4.4: Efeito da adição de 6 suspensores com $L/R = 0,75$ no Índice de Lacey final para grau de enchimento de 50%.

	t = 0 s	t = 5 s	t = 10 s	t = 15 s	t = 20 s
Sem suspensores	 $M_L = 0$	 $M_L = 0,32$	 $M_L = 0,51$	 $M_L = 0,53$	 $M_L = 0,52$
6 suspensores $L/R = 0,75$	 $M_L = 0$	 $M_L = 0,36$	 $M_L = 0,70$	 $M_L = 0,82$	 $M_L = 0,92$

Na Figura 4.6 foram apresentados os valores quantitativos do Índice de Lacey enquanto que na Tabela 4.4, foi mostrado o reflexo qualitativo deste parâmetro em que a segregação das partículas é muito maior para a simulação sem suspensores.

Os resultados do Índice de Lacey final para as simulações das condições apresentadas na Tabela 3.4 para o efeito da densidade (configuração C1) e do tamanho de partícula (configuração C2) são mostrados na Figura 4.7. A tabela com os valores dos Índices de Lacey finais para o planejamento do tipo 3³ encontra-se no Apêndice 2.

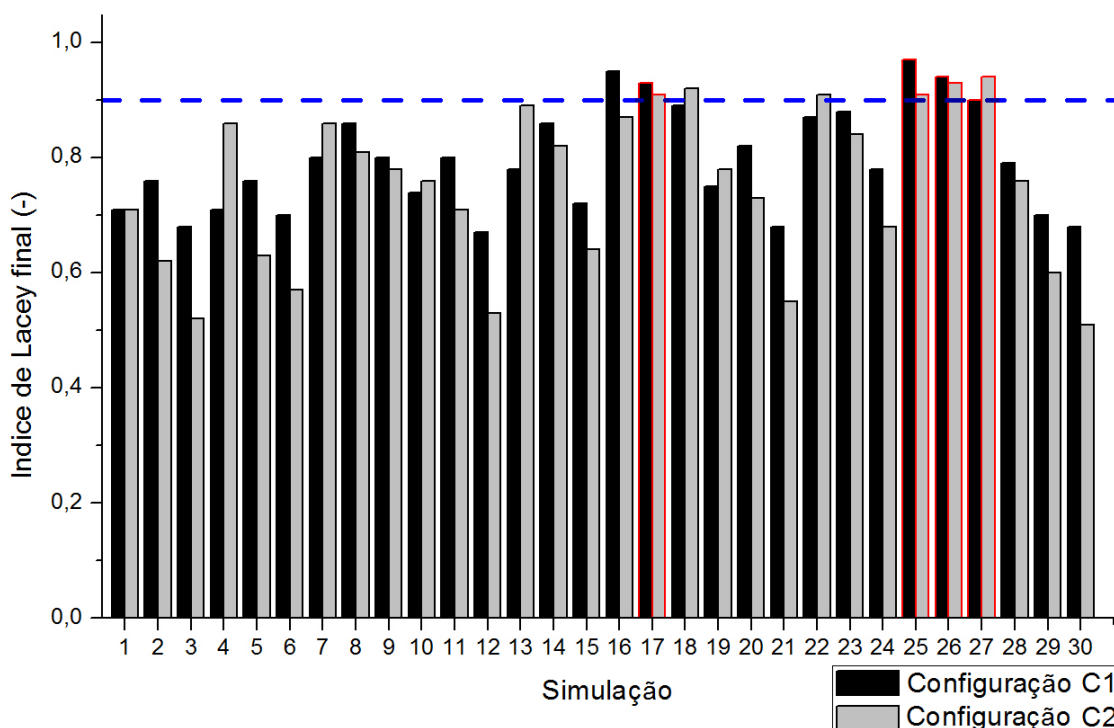


Figura 4.7: Índice de Lacey final para as simulações do planejamento tipo 3³

Pode-se observar que o Índice de Lacey final apresenta grandes diferenças dependendo da configuração dos suspensores, variando de 0,67 até 0,97, para a condição que analisa o efeito da densidade; e de 0,52 a 0,94, para a condição que analisa o efeito do tamanho de partículas. As quatro simulações que apresentam Índices de Lacey finais superiores a 0,9 para as configurações C1 e C2, simultaneamente, estão destacadas em vermelho na Figura 4.7, são elas as condições 17, 25, 26 e 27. Em todas elas a razão L/R é de 0,75 e em três delas, foram usados 6 suspensores. Ou seja, uma maior quantidade e tamanho de suspensores favorecem a mistura. A discussão sobre a influência dessas variáveis encontra-se a seguir.

Com a finalidade de verificar como o número de suspensores, razão da altura dos suspensores pelo raio do tambor e o grau de enchimento estão correlacionados com o Índice de Lacey final, foram realizadas análises de regressão hierárquica para dois casos. Para o caso em que são utilizadas partículas de igual tamanho e diferentes densidades (configuração C1) e para o caso de partículas de mesma densidade e tamanhos diferentes (configuração C2). Nas duas análises de regressão, primeiramente foi incluído apenas o número de suspensores (NS) (modelo 1), seguido pela adição da razão da altura dos suspensores pelo raio do tambor (L/R) (modelo 2) e então adicionado o grau de enchimento (GE) (modelo 3). Foi adicionado também o modelo 4, que considera os efeitos de interação lineares entre os fatores. Os resultados são apresentados na Tabela 4.5.

No modelo 1, o número de suspensores apresenta pouca influência na resposta e só é significativo para o caso com partículas de igual tamanho e densidades diferentes. Após a adição da altura do suspensor no modelo 2, a capacidade preditiva do modelo subiu drasticamente em ambas as condições, com o R^2 avançando de 0,18 para 0,71 na primeira configuração e de 0,10 para 0,59 na segunda. Ou seja, a altura dos suspensores explica sozinha 53% do Índice de Lacey final para a configuração C1 e 49% para a configuração C2. O efeito do grau de enchimento, adicionado no modelo 3, é um pouco mais expressivo para a configuração C2, explicando 24% da resposta, em relação a 17% para a condição 1.

Após a adição dos efeitos de interação, o modelo completo explica 94,7% do Índice de Lacey para a condição 1 e 91,1% para a condição 2. Observa-se no modelo completo, em ambas as configurações, que os efeitos lineares das três variáveis estudadas são significativas, sendo os efeitos do número e tamanho dos suspensores positivos e quantitativamente próximos para as duas configurações. O aumento do grau de enchimento atrapalha a mistura, sendo mais pronunciado para a configuração C2 que, por contar com um maior número de partículas para um mesmo grau de enchimento, acaba sendo mais influenciada por esta variável. Além disso, nenhum dos efeitos de interação significativos coincide entre as configurações C1 e C2, indicando que a depender do agente causador de segregação (diferenças na densidade ou tamanho das partículas), o ajuste das variáveis estudadas influencia de maneiras diferentes o nível de segregação da mistura.

Tabela 4.5: Análise de regressão hierárquica do Índice de Lacey final usando o número de suspensores (NS), razão da altura do suspensor pelo raio do tambor (L/R) e grau de enchimento (GE) como preditores.

Configuração C1						Configuração C2					
	Fatores	Efeito	Valor-p	R ²	ΔR ²		Fatores	Efeito	Valor-p	R ²	ΔR ²
Modelo 1	NS	0,089	0,0373	0,18	0,18	Modelo 1	NS	0,098	n.s.	0,10	0,10
	NS ²	0,020	n.s.				NS ²	0,026	n.s.		
Modelo 2	NS	0,089	0,0013	0,73	0,55	Modelo 2	NS	0,098	0,0362	0,59	0,49
	NS ²	0,020	n.s.				NS ²	0,026	n.s.		
	(L/R)	0,159	<10 ⁻⁴				(L/R)	0,223	<10 ⁻⁴		
	(L/R) ²	-0,030	0,0316				(L/R) ²	-0,010	n.s.		
Modelo 3	NS	0,089	<10 ⁻⁴	0,91	0,18	Modelo 3	NS	0,098	0,0034	0,83	0,24
	NS ²	0,020	n.s.				NS ²	0,026	n.s.		
	(L/R)	0,159	<10 ⁻⁴				(L/R)	0,223	<10 ⁻⁴		
	(L/R) ²	-0,030	0,0316				(L/R) ²	-0,010	n.s.		
	GE	-0,053	0,0021				GE	-0,157	<10 ⁻⁴		
	GE ²	0,064	<10 ⁻⁴				GE ²	0,019	n.s.		
Modelo 4	NS	0,089	<10 ⁻⁴	0,95	0,04	Modelo 4	NS	0,098	0,0006	0,91	0,08
	NS ²	0,020	n.s.				NS ²	0,026	n.s.		
	(L/R)	0,159	<10 ⁻⁴				(L/R)	0,223	<10 ⁻⁴		
	(L/R) ²	-0,030	0,0118				(L/R) ²	-0,010	<10 ⁻⁴		
	GE	-0,053	0,0005				GE	-0,157	<10 ⁻⁴		
	GE ²	0,064	<10 ⁻⁴				GE ²	0,019	n.s.		
	NS c/ L/R	0,043	0,0117				NS c/ L/R	0,020	n.s.		
	NS c/ GE	-0,032	0,0492				NS c/ GE	0,023	n.s.		
	L/R c/ GE	0,008	n.s.				L/R c/ GE	0,108	0,0014		

n.s.: não significativo

A contribuição significativa da altura dos suspensores no Índice de Lacey final está relacionada ao mecanismo de funcionamento da segregação. O fenômeno de segregação ocorre pela percolação das partículas menores ou mais densas através das maiores ou menos densas na camada ativa; assim, elas tendem a se ausentar dessa camada e se concentrar no centro do leito, formando um núcleo rodeado pelas partículas maiores e menos densas, como ilustrado na Tabela 4.4 ($t = 20$ s, imagem superior). Os suspensores, quando maiores, serviriam como barreiras que dividem o leito ou parte dele em seções, restringindo a propagação da percolação. No entanto, suspensores menores tem seu efeito limitado uma vez que uma parte maior do leito fica livre da sua contenção. De certa forma, é como se os suspensores menores não tivessem tamanho suficiente para perturbar o núcleo de partículas menores ou mais densas que se forma em um leito segregado. Por estes motivos, o tamanho do suspensor tem um efeito determinante na prevenção da segregação.

Na Figura 4.8 é ilustrada a seção transversal do tambor no instante final de simulação ($t = 70$ s) utilizando-se partículas de mesma densidade e diâmetros diferentes (configuração C2) nas condições que resultaram no maior e no menor nível de segregação respectivamente. Em ambas as condições, foi utilizado o tambor com 50% de grau de enchimento. Na primeira foram adicionados 2 suspensores com razão L/R de 0,25, resultando em um Índice de Lacey final de 0,52; na segunda foram adicionados 6 suspensores com razão L/R de 0,75, que resulta em um Índice de Lacey final de 0,94.

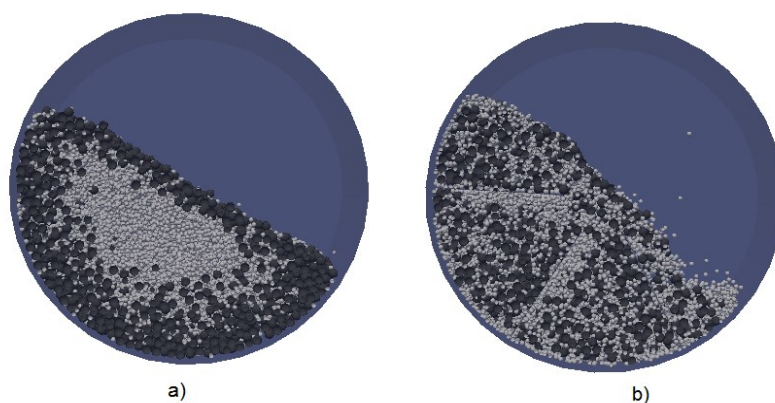


Figura 4.8: Seção transversal do tambor com 50% de grau de enchimento após 70 s de rotação para diferentes combinações de suspensores: (a) 2 suspensores com $L/R = 0,25$, (b) 6 suspensores com $L/R = 0,75$.

Na Figura 4.8 é apresentada a diferença que se pode obter para diferentes combinações entre o número e tamanho dos suspensores, evidenciando a importância da

seleção adequada desses valores. Constatase que para razões L/R menores, como a de 0,25 utilizada na simulação da Figura 4.8 (a), o tamanho dos suspensores é insuficiente para causar perturbações no leito e desfazer a formação do núcleo de partículas menores, como discutido anteriormente. Em contraste, na figura 4.8 (b) é mostrado um tambor que com a adição de 6 suspensores com razão L/R de 0,75, atingiu uma mistura praticamente aleatória, com índice de Lacey final de 0,94, apesar da forte tendência de segregação oriunda da grande diferença de tamanhos entre os dois tipos de partícula.

4.3 CINÉTICA DA MISTURA DE PARTÍCULAS EM TAMBORES ROTATÓRIOS COM SUSPENSORES

Para o estudo da cinética de mistura, em todas as análises realizadas, foram usadas para o tipo I e tipo II partículas idênticas. Essa medida visa destacar somente a cinética de mistura, sem interferência de efeitos de segregação.

Inicialmente foi realizado o planejamento do tipo 3^3 , descrito na Tabela 3.4, para avaliar os efeitos do número e altura dos suspensores e do grau de enchimento na cinética de mistura. Na Figura 4.9 são apresentadas as constantes cinéticas de mistura encontradas para cada uma das simulações deste planejamento, além das três condições sem suspensores.

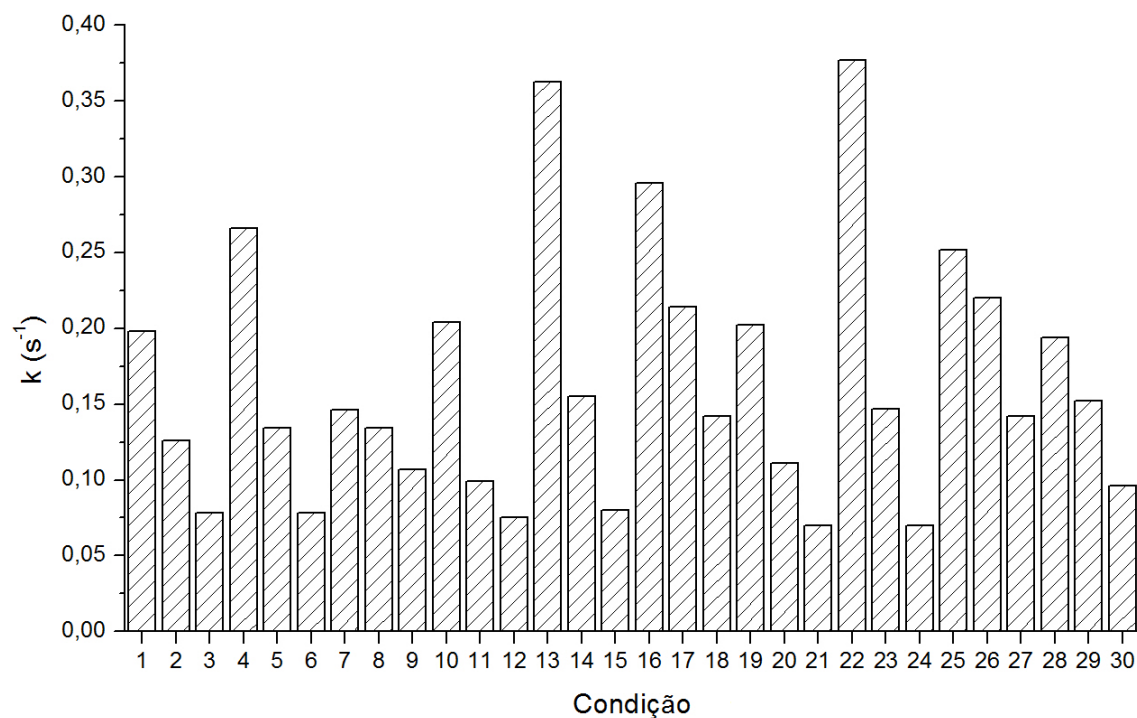


Figura 4.9: Constante cinética de mistura para as simulações do planejamento do tipo 3^3 .

Na análise estatística do planejamento 3^3 , o modelo de regressão é dado pela Equação 4.1:

$$k[s^{-1}] = 0,42 + 0,014 \cdot NS + 0,0041 \cdot (L/R) - 0,016 \cdot GE - 4,6 \times 10^{-5} \cdot (L/R)^2 + 1,6 \times 10^{-4} \cdot GE^2 + 4,1 \times 10^{-4} \cdot NS \cdot (L/R) - 6,8 \times 10^{-4} \cdot NS \cdot GE \quad (4.1)$$

em que NS é o número de suspensores, L/R é a razão entre o comprimento do suspensor e o raio do tambor e GE é o grau de enchimento. O modelo de regressão explica 81% da variabilidade dos resultados, com um nível de significância de 20%. Os efeitos lineares normalizados dos três fatores investigados são apresentados na Tabela 4.6.

Tabela 4.6: Efeitos lineares normalizados dos fatores investigados			
	NS (-)	L/R (-)	Grau de enchimento (%)
Efeito	0,036	0,113	-0,162
Valor-p	0,1058	0,0161	$<10^{-4}$

Os efeitos lineares normalizados para a razão L/R e o grau de enchimento foram expressivos, enquanto o número de suspensores pouco influenciou na cinética de mistura. Nas faixas consideradas para as três variáveis, o efeito em utilizar 2, 4 ou 6 suspensores pode ter sido encoberto pelos efeitos pronunciados do tamanho da partícula e do grau de enchimento, o que possivelmente não teria ocorrido caso se adotassem faixas mais estreitas para essas duas variáveis. Esse resultado é contrário ao encontrado na investigação da segregação, em que o número de suspensores foi um fator importante. Para o caso da segregação, o aumento do número de suspensores divide o leito em regiões menores, limitando a extensão da percolação somente àquela região e reduzindo a segregação de modo geral no tambor. Esse efeito divisório já não é desejado quando o objetivo é misturar partículas iguais mais rapidamente. Na seção 4.3.1, é discutida a investigação do efeito do número de suspensores isoladamente.

Na Figura 4.10 é mostrada a influência do tamanho dos suspensores na constante cinética de mistura para diferentes graus de enchimento. Para este gráfico, foi usada a

condição com 4 suspensores por este ser o valor intermediário, mas todos os comportamentos discutidos também foram observados para 2 e 6 suspensores.

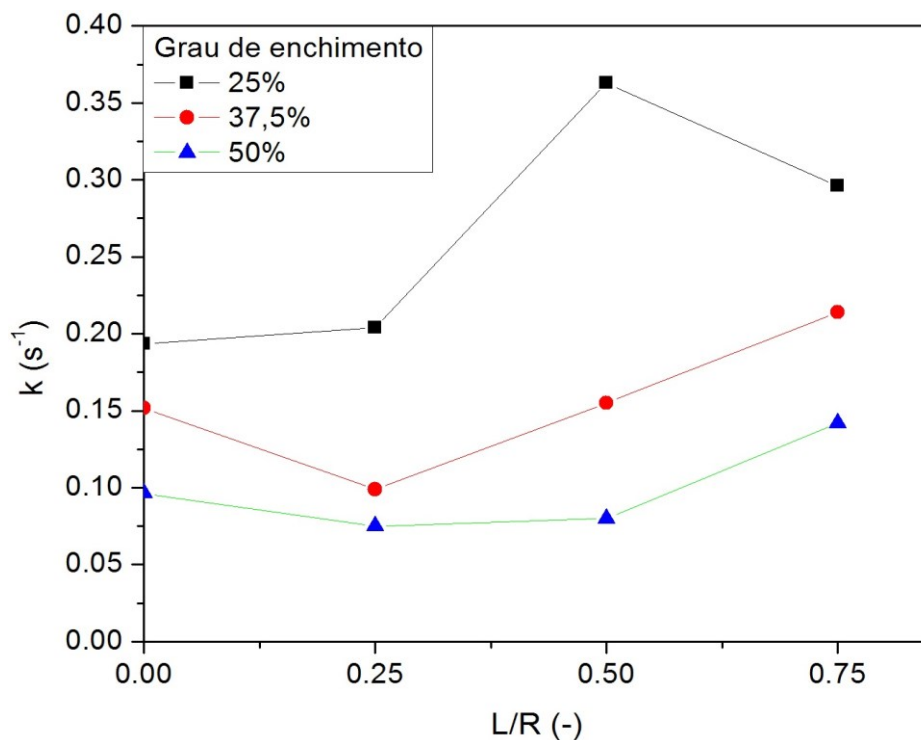


Figura 4.10: Constante cinética de mistura em um tambor com 4 suspensores.

Observa-se que suspensores com L/R abaixo de 0,25, para 25% de grau de enchimento, e abaixo de 0,50 para os graus de enchimento de 50% e 75%, não possuem efeito na velocidade de mistura das partículas. Esse resultado parece sugerir que existe uma razão entre o tamanho dos suspensores e a profundidade do leito, a qual somente acima dela, os suspensores passariam a aumentar a velocidade da mistura. De fato, suspensores menores podem não ter tamanho para penetrar o leito de partículas o suficiente para perturbá-lo, podendo até retardar ligeiramente a mistura, como se observa na Figura 4.10 entre uma razão L/R de 0 para 0,25 e 37,5% de grau de enchimento, por servir como uma barreira que restringe a livre movimentação de partículas. Além disso, seu comprimento reduzido limita sua capacidade em carregar uma quantidade significativa de partículas da camada passiva para então lançá-las sobre o leito.

Para o grau de enchimento de 25%, o aumento dos suspensores melhora a mistura até L/R de 0,5, do qual o acréscimo na altura acaba retardando a velocidade de mistura. Em um tambor com poucas partículas, suspensores maiores fazem com que as

partículas passem um maior tempo sendo carregadas por eles do que de fato se misturando no leito.

Observa-se que o aumento do grau de enchimento apresenta considerável efeito na diminuição da velocidade de mistura. Uma quantidade maior de partículas necessita de mais energia para atingir determinado nível de mistura, sendo preciso um maior tempo de rotação para atingir esse nível.

Os efeitos da quantidade e altura dos suspensores e do tamanho das partículas foram investigados separadamente e serão mostrados nas seções que seguem.

4.3.1 EFEITO DA QUANTIDADE DE SUSPENSORES

O primeiro parâmetro investigado foi a quantidade de suspensores colocados igualmente espaçados ao longo do perímetro do cilindro e estendidos por todo o seu comprimento. O grau de enchimento foi fixado em 25% e a razão da altura do suspensor pelo raio do tambor utilizada foi de 0,5, condição ótima encontrada no planejamento do tipo 3^3 para este enchimento.

O número de suspensores adicionados ao cilindro foi variado de 1 até 10, como mostra a Figura 3.6. Os resultados obtidos para a constante cinética de mistura são apresentados na Figura 4.11.

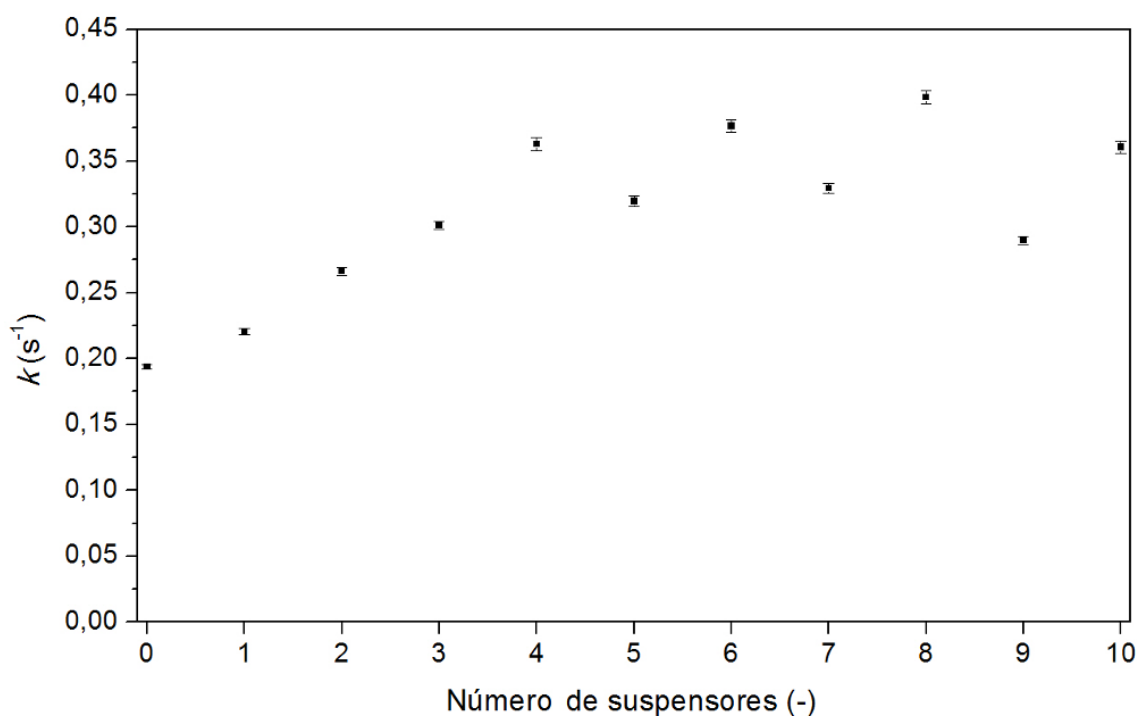


Figura 4.11: Constante cinética de mistura para diferentes números de suspensores.

De todas as possibilidades testadas, o tambor com 8 suspensores foi o que resultou na maior velocidade de mistura, com $k = 0,398 \text{ s}^{-1}$. O aumento do número de suspensores favorece a cinética de mistura gradualmente até 4 suspensores; a partir desse número, já não se observa mudanças significativas com o aumento dos suspensores.

Observou-se que a constante cinética de mistura apresenta tendências ligeiramente diferentes quando se utiliza um número ímpar ou par de suspensores. Com um número par, a constante cinética de mistura foi superior em relação a um número ímpar. A diferença fica evidente quando as curvas são traçadas separadamente, como apresenta a Figura 4.12.

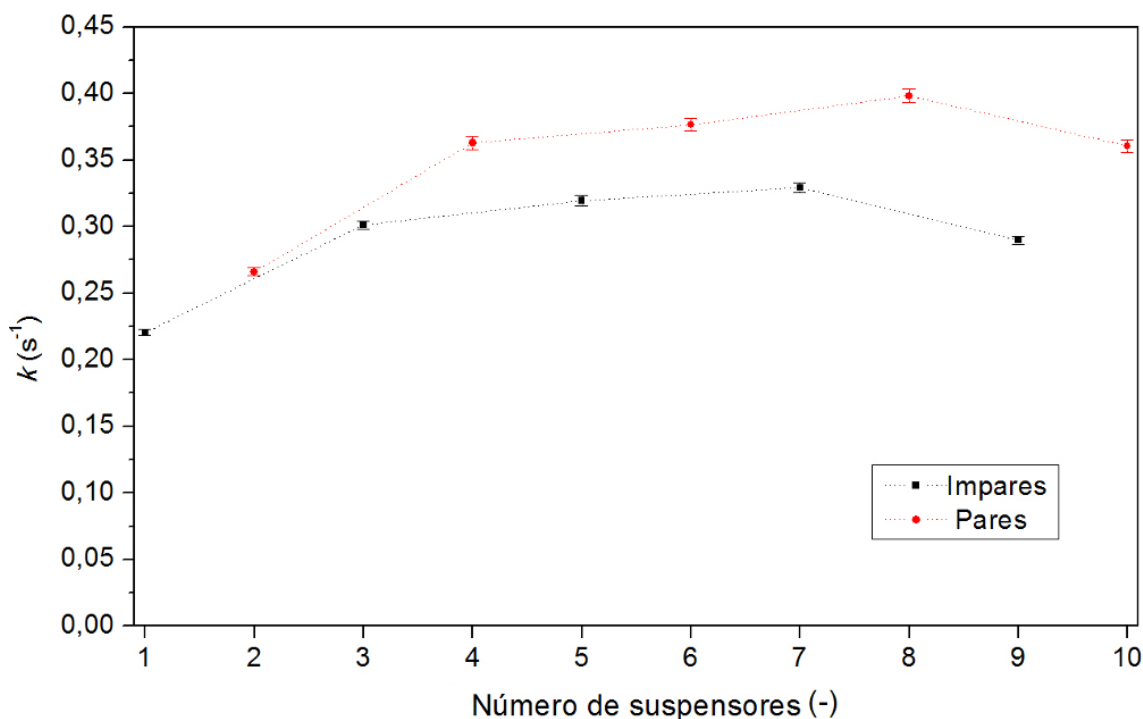


Figura 4.12: Constante cinética de mistura para um número ímpar e par de suspensores.

Essa diferença pode estar relacionada com o fato de que, na seção transversal, para cilindros com um número par de suspensores, as lacunas entre os suspensores ficam opostas a outras lacunas, como apresentado na Figura 4.13-a. Enquanto que com um número ímpar, as lacunas se opõem a um suspensor, e não a outra lacuna (Figura 4.13-b), o que sugere que os suspensores, quando opostos a lacunas, podem retardar a velocidade de mistura.

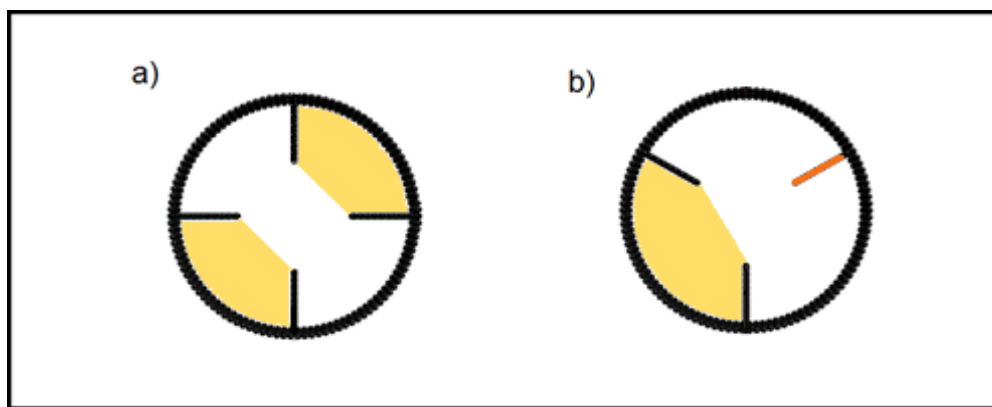


Figura 4.13: Disposição entre lacunas e suspensores para: (a) tambores com número par de suspensores (lacuna oposta a lacuna) e (b) tambores com número ímpar de suspensor (lacuna oposta a suspensor).

4.3.2 EFEITO DO TAMANHO DOS SUSPENSORES

A influência da altura dos suspensores foi investigada isoladamente, da mesma maneira que para o número de suspensores. A razão da altura do suspensor pelo raio do tambor foi variada de 0,1 até 0,9. O número de suspensores foi fixado em 8 por ter sido a condição ótima na análise do número de suspensores e foi usado um grau de enchimento de 25%. Os resultados encontrados são exibidos na Figura 4.14.

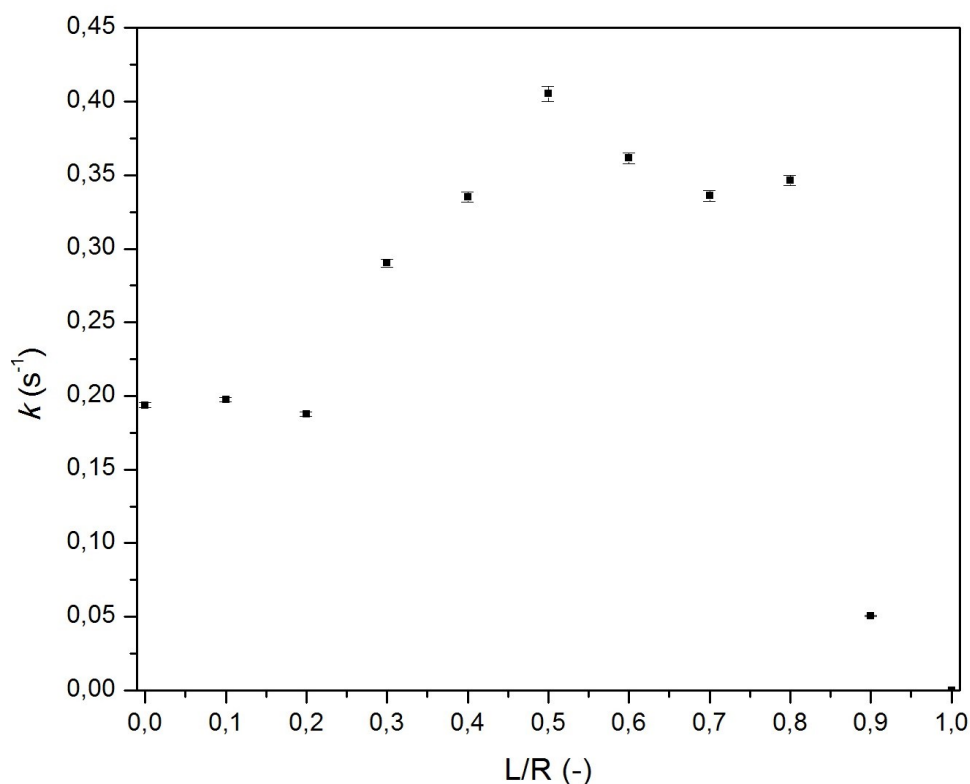


Figura 4.14: Constante cinética de mistura para diferentes tamanhos do suspensor.

O efeito de suspensores menores ($L/R \leq 0,2$) na mistura é equivalente ao das paredes do tambor sem suspensores, o que pode ser explicado pelo fato da altura do suspensor (2,20 cm) não ser consideravelmente maior do que o diâmetro das partículas (0,635 cm), limitando sua capacidade de carregar e projetar as partículas para regiões mais distantes do ponto em que são lançadas.

Como já observado no planejamento do tipo 3³, a razão L/R ideal novamente foi de 0,5, mesmo que mais valores tenham sido investigados. Para tamanhos menores do suspensor, a cinética de mistura se beneficia com o seu aumento, pois confere uma perturbação mais intensa no leito e uma capacidade de carregar um maior número de partículas. Para tamanhos dos suspensores superiores à metade do raio do tambor, para o grau de enchimento de 25%, o aumento dos suspensores retarda a velocidade de mistura, o que pode ser atribuído a dois efeitos:

- 1) suspensores mais longos fazem com que uma maior fração de partículas fiquem um maior tempo sendo carregadas ao invés de estarem se misturando no leito;
- 2) com suspensores maiores do que a profundidade do leito, o leito é dividido em seções que passam a se comunicar cada vez menos com o aumento da altura dos suspensores, como será discutido a seguir.

A constante cinética de mistura decresce consideravelmente ao aumentar a razão L/R de 0,8 para 0,9. Nesta condição, o espaço por onde as partículas fluem entre as seções delimitadas pelos suspensores acaba se tornando estreito, agindo como um “gargalo” que restringe a vazão de partículas. A Figura 4.15 exibe a diferença entre as lacunas entre os suspensores para $L/R = 0,8$ e $L/R = 0,9$.

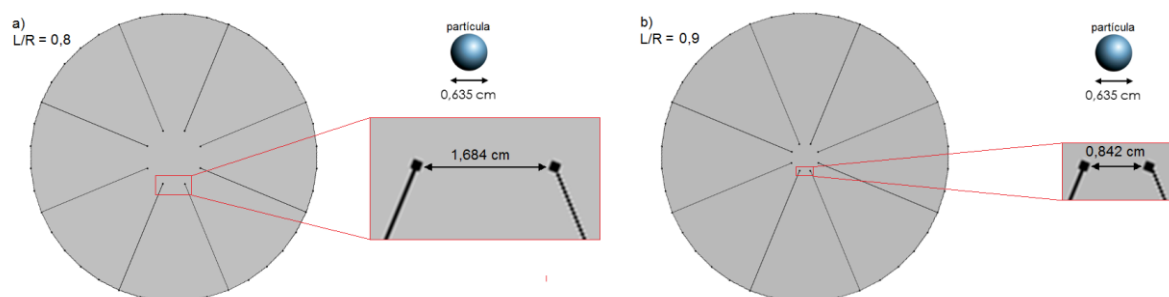


Figura 4.15: Lacunas entre suspensores para (a) $L/R = 0,8$ e (b) $L/R = 0,9$.

Assim, a troca de partículas entre essas seções é drasticamente reduzida, dificultando o progresso da mistura. Por esse motivo, a adição de suspensores com $L/R = 0,9$ é o único que apresenta uma cinética de mistura mais lenta do que para o tambor sem suspensores.

De todas as simulações realizadas, a que apresentou a maior constante cinética de mistura foi a condição com 8 suspensores, razão L/R de 0,50 e grau de enchimento de 25%. Na Figura 4.16 é mostrada a evolução do Índice de Lacey para o tambor nesta condição, comparado com um tambor com mesmo grau de enchimento, porém sem suspensores.

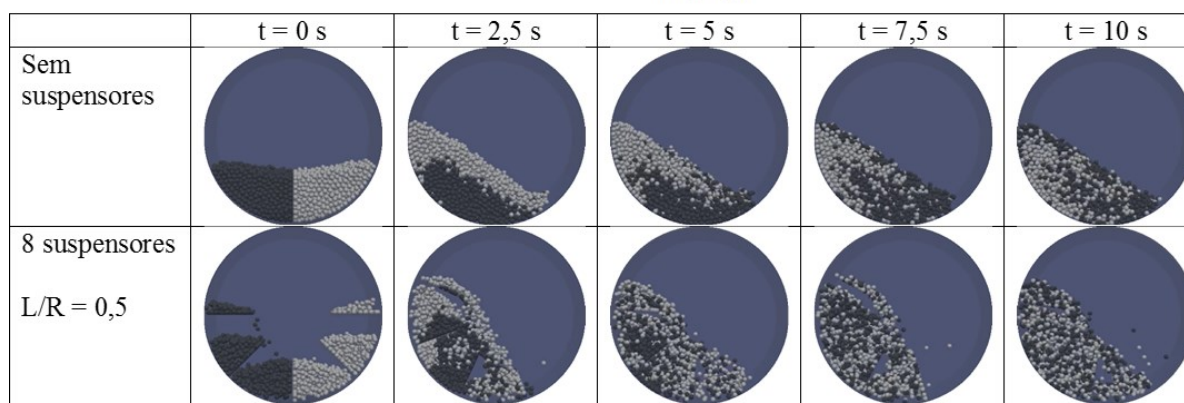
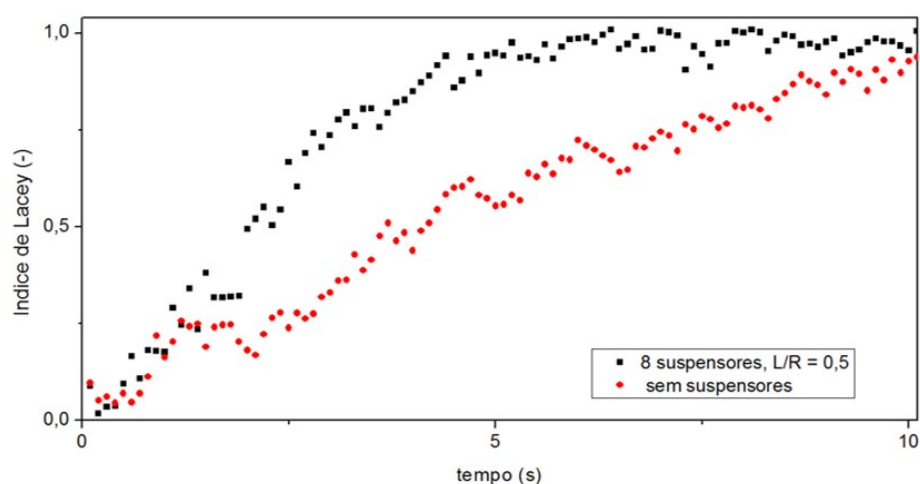


Figura 4.16: Efeito do uso de suspensores na evolução de uma mistura binária em um tambor rotatório com grau de enchimento de 25%.

A constante cinética de mistura para a condição sem suspensores foi igual a $0,194 \text{ s}^{-1}$. A adição dos 8 suspensores resultou numa constante cinética de $0,398 \text{ s}^{-1}$, representando uma melhoria de 105%.

4.3.3 EFEITO DO TAMANHO DAS PARTÍCULAS

A análise da influência do tamanho das partículas na cinética de mistura foi realizada através do PCC da Tabela 3.5. O objetivo desta análise era obter um modelo que descrevesse a relação entre três variáveis: o grau de enchimento e as razões do tamanho das partículas pelo raio do tambor e da altura dos suspensores pelo raio do tambor. Esse modelo poderia ser usado para prever a cinética de mistura a partir dessas três variáveis adimensionais, podendo ser aplicado em uma ampla faixa de condições de tambores, suspensores e partículas de dimensões diferentes das usadas nessas simulações. Os resultados do planejamento encontram-se na Tabela 4.7.

Tabela 4.7: Constante cinética de mistura para as simulações do PCC.

Simulação	Fatores			Constante cinética de mistura k (s ⁻¹)
	Diâmetro das partículas (mm)	Tamanho do suspensor (L/R) (-)	Grau de enchimento (%)	
1	3,35	0,25	25,00	0,232
2	3,35	0,25	50,00	0,076
3	3,35	0,75	25,00	0,331
4	3,35	0,75	50,00	0,156
5	9,35	0,25	25,00	0,249
6	9,35	0,25	50,00	0,071
7	9,35	0,75	25,00	0,393
8	9,35	0,75	50,00	0,174
9	2,49	0,50	37,50	0,200
10	10,21	0,50	37,50	0,131
11	6,35	0,18	37,50	0,126
12	6,35	0,82	37,50	0,291
13	6,35	0,50	21,41	0,424
14	6,35	0,50	53,59	0,056
15	6,35	0,50	37,50	0,178
16	6,35	0,50	37,50	0,232

Contudo, na análise estatística dos resultados mostrada na Tabela 4.8, o efeito do número de suspensores não foi significativo na predição da constante cinética de mistura.

Tabela 4.8: Variáveis significativas do PCC.

	L/R (-)	Grau de enchimento (%)
Efeito	0,113	-0,213
Valor-p	0,0004	$<10^{-4}$
$R^2 = 90\%; \alpha = 5\%$		

Assim como no planejamento 3³ discutido no início da seção 4.3, apenas os efeitos da altura dos suspensores e do grau de enchimento foram significativos. Esse resultado indica que a variação do diâmetro de partículas na faixa utilizada no PCC possui influencia negligenciável na velocidade de mistura. Isso se deve a uma de duas possibilidades: ou a faixa escolhida para o diâmetro das partículas foi pouco abrangente comparadas às faixas utilizadas para a altura dos suspensores e grau de enchimento; ou de fato o tamanho das partículas pouco interfere na cinética de mistura. Considerando que a faixa de diâmetros para as partículas usada foi de 2,49 mm até 10,21 mm, sendo o volume da partícula maior aproximadamente setenta vezes o da partícula menor, a primeira possibilidade é improvável.

Considerando duas condições, ambas com mesmo grau de enchimento, tamanho e número de suspensores sendo na primeira as partículas maiores do que na segunda, poder-se-ia esperar que a primeira condição, por ter uma quantidade menor de partículas, iria se misturar mais rapidamente. No entanto, ao se aumentar o tamanho das partículas, o número de interstícios entre elas e a quantidade de partículas que o suspensor consegue carregar diminuem e a massa por partícula aumenta, o que neutraliza o benefício do menor número de partículas em relação à cinética de mistura. Dessa forma, a não ser que os suspensores sejam longos ou as partículas grandes o suficiente para causarem o efeito de “gargalo” descrito na Figura 4.15, o tamanho das partículas não interfere na velocidade de mistura.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Durante toda a pesquisa, procurou-se estabelecer uma linha de investigações numéricas direcionadas ao cumprimento dos objetivos propostos em relação ao estudo da influência de suspensores nos fenômenos de segregação e mistura em tambores rotatórios. Com base nos resultados obtidos, seguem as principais conclusões.

Determinação dos parâmetros DEM:

- ✓ Constatou-se que das 25 simulações realizadas no planejamento do composto central, seis delas foram adequadas para representar a condição experimental;
- ✓ Das seis simulações adequadas, uma apresentou o conjunto de parâmetros DEM com valores próximos aos determinados experimentalmente por Lima (2017). Esse conjunto foi utilizado nas simulações deste trabalho. Os valores dos parâmetros DEM desta condição são $\mu_{Spp} = 0,80$; $\mu_{Spw} = 0,50$; $\mu_{Rpp} = 0,03$; $\mu_{Rpw} = 0,06$;
- ✓ Modelos foram ajustados para as respostas: ângulo de repouso e constante cinética de mistura. Ambos os modelos apresentaram boa capacidade preditiva com R^2 de 86% e 98% respectivamente;
- ✓ A capacidade preditiva da resposta ângulo de repouso foi menor do que da constante cinética de mistura. Esse resultado pode ser atribuído ao fato de que, enquanto a primeira é obtida somente depois que o escoamento do leito atinge o regime permanente, a segunda extrai informações da dinâmica transiente do leito de partículas. Além disso, o modelo para a predição da constante cinética de mistura envolve um maior número de efeitos do que para o ângulo de repouso,

sugerindo que esta resposta seja mais adequada para a calibração dos parâmetros DEM;

- ✓ Dos quatro parâmetros DEM investigados - coeficiente de atrito estático partícula-partícula (μ_{Spp}); coeficiente de atrito estático partícula-parede (μ_{Spw}); coeficiente de atrito de rolamento partícula-partícula (μ_{Rpp}); coeficiente de atrito de rolamento partícula-parede (μ_{Rpw}) - o coeficiente de atrito estático-partícula parede se destacou na previsão das respostas, prevendo 81% da variabilidade para ângulo de repouso e 89% para a constante cinética de mistura. Isso mostra que uma determinação acurada deste parâmetro é fundamental para a obtenção de um modelo bem calibrado e representativo da condição experimental.

Segregação de partículas em tambores rotatórios com suspensores:

- ✓ Constatou-se que o uso de suspensores em um tambor rotatório tem influência significativa no estado de segregação final de uma mistura com partículas de diferentes densidades ou tamanhos;
- ✓ Diferentes combinações de grau de enchimento, tamanho e quantidade de suspensores foram determinantes no Índice de Lacey final resultante, sendo possível ajustar essas variáveis para obter uma condição que minimiza a segregação de partículas;
- ✓ Dentre os fatores estudados, o tamanho do suspensor foi o mais significativo na predição do Índice de Lacey final. Observou-se que, com o aumento da altura do suspensor, o Índice de Lacey, que até então apresentou pequenas variações, aumentou de forma significativa. Tal fato sugere que a altura do suspensor pode perturbar o núcleo de partículas menores ou mais densas que se forma no centro do leito. Além disso, suspensores longos dividem o leito em seções distintas, limitando o mecanismo de segregação pela percolação das partículas menores e menos densas somente àquela seção. Consequentemente, as partículas do leito apresentam uma mistura mais homogênea.

Cinética da mistura de partículas em tambores rotatórios com suspensores:

- ✓ O tamanho das partículas não apresentou influência significativa na velocidade de mistura;
- ✓ O efeito de aumentar o número de suspensores na cinética de mistura só foi efetivo até quatro suspensores;
- ✓ O tamanho ótimo dos suspensores variou de acordo com o grau de enchimento, sendo que enchimentos maiores apresentam melhores misturas com suspensores maiores. Para o grau de enchimento de 25%, a razão L/R ótima foi de 0,5;
- ✓ A velocidade de mistura foi fortemente influenciada pelo grau de enchimento: quanto menor o grau de enchimento, maior a velocidade. Nas simulações realizadas, o grau de enchimento de 25% foi a que apresentou as maiores constantes cinéticas de mistura;
- ✓ Dentre os três fatores investigados, concluiu-se que o grau de enchimento foi o que apresentou maior efeito na constante cinética de mistura;
- ✓ Contudo, apesar do número de suspensores não ter tido influência na cinética de mistura, ele demonstrou efeito significativo na segregação;
- ✓ Das simulações realizadas, a que apresentou a maior velocidade de mistura foi a condição com 8 suspensores, L/R de 0,5 e grau de enchimento de 25%. A constante cinética de mistura para o tambor sem suspensores foi de $0,194 \text{ s}^{-1}$ e com suspensores de $0,398 \text{ s}^{-1}$, representando uma melhora de 105%.
- ✓ A utilização do *software* livre LIGGGHTS®-PUBLIC mostrou-se adequada na predição do comportamento granular bem como na representação dos fenômenos de mistura e segregação no interior de tambores rotatórios. Por não possuir limitações no número de processos simultâneos, como acontece nos *softwares* comerciais, o tempo das simulações no LIGGGHTS®-PUBLIC não

restringiu de forma considerável o andamento do trabalho e foi possível realizar todas as simulações propostas.

Como sugestões para trabalhos futuros:

- ❖ Verificar o efeito de suspensores com alturas e espaçamentos angulares não uniformes na cinética de mistura e no controle de segregação;
- ❖ Investigar suspensores colocados no centro do cilindro, ao longo do eixo de rotação;
- ❖ Verificar o efeito da velocidade de rotação na cinética de mistura;
- ❖ Estudar misturas heterogêneas em relação ao tamanho das partículas, objetivando estudar materiais de distribuição granulométrica conhecida;
- ❖ Analisar o efeito do *scale-up*;
- ❖ Avaliar o efeito dos suspensores em misturas coesivas;
- ❖ Avaliar o efeito dos suspensores na segregação axial.

CAPÍTULO 6

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AI, J.; CHEN, J. F.; ROTTER, J. M.; OOI, J. Y. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. **Powder Technology**, v. 206, n. 3, p. 269–282, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.09.030>.
- AISSA, A. A.; DUCHESNE, C.; RODRIGUE, D. Transverse mixing of polymer powders in a rotary cylinder part I: Active layer characterization. **Powder Technology**, v. 219, p. 193–201, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2011.12.040>.
- ALCHIKH-SULAIMAN, B.; ALIAN, M.; EIN-MOZAFFARI, F.; LOHI, A.; UPRETI, S. R. Using the discrete element method to assess the mixing of polydisperse solid particles in a rotary drum. **Particuology**, v. 25, p. 133–142, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2015.05.006>.
- ALIAN, M.; EIN-MOZAFFARI, F.; UPRETI, S. R. Analysis of the mixing of solid particles in a plowshare mixer via discrete element method (DEM). **Powder Technology**, v. 274, p. 77–87, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.01.012>.
- ALIZADEH, E.; BERTRAND, F.; CHAOUKI, J. Discrete element simulation of particle mixing and segregation in a tetrapodal blender. **Computers and Chemical Engineering**, v. 64, p. 1–12, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.12.009>.
- ARNTZ, M. M. H. D. **Modeling of particle segregation in a rotating drum**. Tese de Doutorado – Wageningen University, 2010.
- BASINSKAS, G.; SAKAI, M. Numerical study of the mixing efficiency of a ribbon mixer using the discrete element method. **Powder Technology**, v. 287, p. 380–394, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.10.017>.
- BHATTACHARYA, T. **Controlling mixing and segregation in time periodic granular flows**. Tese de Doutorado – Swanson School of Engineering, 2011.

- BRANDÃO, R. J. **Estudo da segregação de material granular em tambor rotatório empregando a abordagem numérica lagrangeana**. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2017.
- BRIDGWATER, J. Mixing of powders and granular materials by mechanical means – a perspective. **Particuology**, v. 10, n. 4, p. 397–427, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2012.06.002>.
- CARLES, B. P. Discrete element simulations with LIGGGHTS. **Dissertação de Mestrado** - Swansea University, 2014.
- COETZEE, C. J. Review: Calibration of the discrete element method. **Powder Technology**, v. 310, p. 104–142, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.01.015>.
- COETZEE, C. J.; ELS, D. N. J. Calibration of granular material parameters for DEM modelling and numerical verification by blade-granular material interaction. **Journal of Terramechanics**, v. 46, n. 1, p. 15–26, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.jterra.2008.12.004>.
- CROSS, R. The bounce of a ball. **American Journal of Physics**, v. 67, n. 3, p. 222, 1999. <https://doi.org/10.1119/1.19229>.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979. <https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>.
- DELELE, M. A.; WEIGLER, F.; FRANKE, G.; MELLMANN, J. Studying the solids and fluid flow behavior in rotary drums based on a multiphase CFD model. **Powder Technology**, v. 292, p. 260–271, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.01.026>.
- DEMAGH, Y.; MOUSSA, H. BEN; LACHI, M.; NOUI, S.; BORDJA, L. Surface particle motions in rotating cylinders: Validation and similarity for an industrial scale kiln. **Powder Technology**, v. 224, p. 260–272, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.03.002>.
- DURAN, J. **Sands, powders and grains: an introduction to the physics of granular**

materials. 1. ed. Nova York: Springer, 2000. <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0499-2>.

DURY, C. M.; RISTOW, G. H.; MOSS, J. L.; NAKAGAWA, M. Boundary Effects on the Angle of Repose in Rotating Cylinders. **Physical Review E**, v. 57, n. 4, p. 4491–4497, 1998. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.4491>.

EDEM. EDEM 2.4 User Guide. 2011.

FAN, L. T.; CHEN, S. J.; WATSON, C. A. Solids Mixing. **Ind. Eng. Chem.**, v. 62, n. 7, p. 53–69, 1970. <https://doi.org/10.1021/ie50727a009>.

FINNIE, G. J.; KRUYT, N. P.; YE, M.; ZEILSTRA, C.; KUIPERS, J. A. M. Longitudinal and transverse mixing in rotary kilns: A discrete element method approach. **Chemical Engineering Science**, v. 60, n. 15, p. 4083–4091, 2005. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.12.048>.

HAJRA, S. K.; BHATTACHARYA, T.; MCCARTHY, J. J. Improvement of granular mixing of dissimilar materials in rotating cylinders. **Powder Technology**, v. 198, n. 2, p. 175–182, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2009.10.020>.

HAJRA, S. K.; KHAKHAR, D. V. Radial mixing of granular materials in a rotating cylinder: Experimental determination of particle self-diffusivity. **Physics of Fluids**, v. 17, n. 1, p. 1–12, 2005. <https://doi.org/10.1063/1.1825331>.

HE, Y. R.; CHEN, H. S.; DING, Y. L.; LICKISS, B. Solids Motion and Segregation of Binary Mixtures in a Rotating Drum Mixer. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 85, n. 7, p. 963–973, 2007. <https://doi.org/10.1205/cherd06216>.

HEMA, V. **Mathematical modelling of the dynamics of granular materials in a rotating cylinder**. Tese de Doutorado - The Cochin University of Science and Technology, India, 2003.

HENEIN, H.; BRIMACOMBE, J. K.; WATKINSON, A. P. The Modeling of transverse Solids Motion in Rotary Kilns. **Metallurgical Transactions B**, v. 14, n. 2, p. 207–220, 1983. <https://doi.org/10.1007/BF02661017>.

HERTZ, H. On the contact of elastic solids. **J. reine und angewandte Mathematik**. 92 (1882) 156–171.

- HEYDENRYCH, M. **Modelling of rotary kilns**. Tese de Doutorado – University of Twente, 2001.
- HUANG, A. N.; KAO, W. C.; KUO, H. P. Numerical studies of particle segregation in a rotating drum based on Eulerian continuum approach. **Advanced Powder Technology**, v. 24, n. 1, p. 364–372, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.apr.2012.08.010>.
- IMOLE, O. I. **Discrete element simulations and experiments : towards applications for cohesive powders**. Tese de Doutorado – University of Twente, 2001.
- JAUHARI, R. **Gas-solid mass transfer in a rotary drum**. Dissertação de Mestrado – University of Alberta, 1997.
- JIANG, M.; ZHAO, Y.; LIU, G.; ZHENG, J. Enhancing mixing of particles by baffles in a rotating drum mixer. **Particuology**, v. 9, n. 3, p. 270–278, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2010.06.008>.
- KHAKHAR, D. V.; MCCARTHY, J. J.; OTTINO, J. M.; SHINBROT, T. Transverse Flow and Mixing of Granular Materials in a Rotating Cylinder. **Phys. Fluids**, v. 9, n. January 1997, p. 3600–3614, 1997. <https://doi.org/10.1063/1.869498>.
- KLOSS, C.; GONIVA, C. **LIGGGHTS manual**. CFDEM project—LIGGGHTS3. x. http://cdn.rawgit.com/CFDEMproject/LIGGGHTS-PUBLIC/master/doc/gran_model_hertz.html. Acessado em 10, 2017.
- KLOSS, C.; GONIVA, C. **LIGGGHTS: a new open source discrete element simulation software**. In: Proceedings of The Fifth International Conference on Discrete Element Methods, London, UK. 2010. p. 25-26.
- LACEY, P. M. C. Developments in the theory of particle mixing. **Journal of Applied Chemistry**, v. 4, n. 5, p. 257–268, 1954. <https://doi.org/10.1002/jctb.5010040504>.
- LI, H.; MCCARTHY, J. J. Controlling Cohesive Particle Mixing and Segregation. **Physical Review Letters**, v. 90, n. 18, p. 184301, 2003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.184301>.
- LIMA, R. M. **Estudo da dinâmica de partículas em tambores rotatórios empregando a abordagem numérica lagrangeana**. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia

Química, 2017.

- MACHADO, M. V. C. Estudo experimental e numérico da dinâmica de corpos moedores em moinhos de bola. p. 99, 2016.
- MARCHELLI, F.; BOVE, D.; MOLINER, C.; BOSIO, B.; ARATO, E. Discrete element method for the prediction of the onset velocity in a spouted bed. **Powder Technology**, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.08.032>.
- MARIGO, M. **Discrete element method modelling of complex granular motion in mixing vessels: evaluation and validation**. Tese de Doutorado – University of Birmingham, 2012.
- MAW, N.; BARBER, J. R.; FAWCETT, J. N. The oblique impact of elastic spheres. **Wear**, v. 38, n. 1, p. 101–114, 1976. [https://doi.org/10.1016/0043-1648\(76\)90201-5](https://doi.org/10.1016/0043-1648(76)90201-5).
- MCELROY, L.; BAO, J.; YANG, R. Y.; YU, A. B. A soft-sensor approach to flow regime detection for milling processes. **Powder Technology**, v. 188, n. 3, p. 234–241, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2008.05.002>.
- MELLMANN, J. The transverse motion of solids in rotating cylinders-forms of motion and transition behavior. **Powder Technology**, v. 118, n. 3, p. 251–270, 2001. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(00\)00402-2](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(00)00402-2).
- MINDLIN, R.D. Compliance of elastic bodies in contact. **J. Appl. Mech.** 16 (1949) 259–268.
- NIEUWLAND, J. J.; SINT ANNALAND, M. VAN; KUIPERS, J. A. M.; SWAAIJ, W. P. M. VAN. Hydrodynamic modeling of gas/particle flows in riser reactors. **AIChE Journal**, v. 42, n. 6, p. 1569–1582, 1996. <https://doi.org/10.1002/aic.690420608>.
- NOROUZI, H. R.; ZARGHAMI, R.; SOTUDEH-GHAREBAGH, R.; MOSTOUFI, N. **Coupled CFD-DEM Modeling: Formulation, Implementation and Application to Multiphase Flows**. [s.l.] John Wiley & Sons, 2016. <https://doi.org/10.1002/9781119005315>.
- O’SULLIVAN, C. **Particulate Discrete Element Modelling: A Geomechanics Perspective**. Spon Press, v. 4, 2011.

- OTTINO, J. M.; LUEPTOW, R. M. MATERIALS SCIENCE: On Mixing and Demixing. **Science**, v. 319, n. 5865, p. 912–913, 2008. <https://doi.org/10.1126/science.1152849>.
- PENG, B. **Discrete Element Method (DEM) Contact Models Applied to Pavement Simulation**. 2014. Dissertação de Mestrado - Faculty the Virginia Polytechnic, Virginia, 2014.
- RAO, K. K.; NOTT, P. R.; SUNDARESAN, S. **An introduction to granular flow**. New York: Cambridge University Press, 2008. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511611513>.
- RAO, S. J.; BHATIA, S. K.; KHAKHAR, D. V. Axial transport of granular solids in rotating cylinders. Part 2: Experiments in a non-flow system. **Powder Technology**, v. 67, n. 2, p. 153–162, 1991.
- SANTOS, D. A. **Estudo experimental e numérico da dinâmica de partículas em um tambor rotatório**. Tese de Doutorado – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2015.
- SANTOS, D. A.; BARROZO, M. A. S.; DUARTE, C. R.; WEIGLER, F.; MELLMANN, J. Segregation phenomenon in a rotary drum: Experimental study and CFD simulation. **Advanced Powder Technology**, v. 27, n. 2, p. 692–703, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.apr.2016.02.027>.
- SANTOS, D. A.; PETRI, I. J.; DUARTE, C. R.; BARROZO, M. A. S. Experimental and CFD study of the hydrodynamic behavior in a rotating drum. **Powder Technology**, v. 250, p. 52–62, 2013.
- SHERRITT, R. G.; CAPLE, R.; BEHIE, L. A.; MEHROTRA, A. K. The movement of solids through flighted rotating drums. Part II solids-gas interaction and model validation. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 72, n. 2, p. 240–248, 1994. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450720210>.
- SINNOTT, M. D.; CLEARY, P. W. The effect of particle shape on mixing in a high shear mixer. **Computational Particle Mechanics**, v. 3, n. 4, p. 477–504, 2016. <https://doi.org/10.1007/s40571-015-0065-4>.
- SMUTS, E. M. **A methodology for coupled CFD-DEM modeling of particulate**

- suspension rheology.** Tese de Doutorado – University of Cape Town, 2015.
- SONAVANE, Y. **Influence of the Wall on the Heat Transfer Process in Rotary Kiln.** Tese de Doutorado – Magdeburg University, 2010.
- SUZZI, D.; TOSCHKOFF, G.; RADL, S.; MACHOLD, D.; FRASER, S. D.; GLASSER, B. J.; KHINAST, J. G. DEM simulation of continuous tablet coating: Effects of tablet shape and fill level on inter-tablet coating variability. **Chemical Engineering Science**, v. 69, n. 1, p. 107–121, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.10.009>.
- THAKUR, S. C. **Mesoscopic discrete element modelling of cohesive powders for bulk handling applications.** Tese de Doutorado – University of Edinburgh, 2014.
- UCHIYAMA, Y. ICHIRO; ARAKAWA, M.; OKAMOTO, C.; YASUI, M. Restitution coefficients and sticking velocities of a chondrule analogue colliding on a porous silica layer at impact velocities between 0.1 and 80ms⁻¹. **Icarus**, v. 219, n. 1, p. 336–344, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2012.03.008>.
- VALLE, R. **Numerical Modelling of Granular Beds in Rotary Kilns.** Tese de Doutorado – Delft University of Technology, 2012.
- WANG, L.; ZHOU, W.; DING, Z.; LI, X.; ZHANG, C. Experimental determination of parameter effects on the coefficient of restitution of differently shaped maize in three-dimensions. **Powder Technology**, v. 284, p. 187–194, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.06.042>.
- WENSRICH, C. M.; KATTERFELD, A. Rolling friction as a technique for modelling particle shape in DEM. **Powder Technology**, v. 217, p. 409–417, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2011.10.057>.
- XIAO, Y. L.; SPECHT, E.; MELLMANN, J. Experimental study of the lower and upper angles of repose of granular materials in rotating drums. **Powder Technology**, v. 154, n. 2–3, p. 125–131, 2005. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.04.040>.
- YIN, Z.; ZHANG, H.; HAN, T. Simulation of particle flow on an elliptical vibrating screen using the discrete element method. **Powder Technology**, v. 302, p. 443–454, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.08.061>.

- ZHENG, Q. J.; YU, A. B. Modelling the granular flow in a rotating drum by the Eulerian finite element method. **Powder Technology**, v. 286, p. 361–370, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.08.025>.
- ZHOU, Z.; LI, J.; ZHOU, J.; LI, S.; FENG, J. Enhancing mixing of cohesive particles by baffles in a rotary drum. **Particuology**, v. 25, p. 104–110, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2015.03.008>.
- ZHU, H. P.; ZHOU, Z. Y.; YANG, R. Y.; YU, A. B. Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 13, p. 3378–3396, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.12.089>.
- ZHU, H. P.; ZHOU, Z. Y.; YANG, R. Y.; YU, A. B.. Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 23, p. 5728–5770, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.08.006>.

APÊNDICES

APÊNDICE 1- PLANEJAMENTO DO COMPOSTO CENTRAL PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DEM

Simulação	Parâmetros				Resposta	
	$\mu_{SPP} (-)$	$\mu_{RPP} (-)$	$\mu_{SPW} (-)$	$\mu_{RPW} (-)$	Ângulo de repouso (°)	$k (s^{-1})$
1	0,50	0,03	0,20	0,02	28,20±0,19	0,007±1,0E-03
2	0,50	0,03	0,20	0,06	27,87±0,60	0,006±9,8E-04
3	0,50	0,08	0,20	0,02	28,03±0,40	0,004±4,6E-04
4	0,50	0,08	0,20	0,06	28,35±0,27	0,003±2,7E-04
5	0,50	0,03	0,50	0,02	31,46±0,69	0,137±4,9E-03
6	0,50	0,03	0,50	0,06	32,59±0,75	0,193±7,2E-03
7	0,50	0,08	0,50	0,02	33,72±0,65	0,196±1,1E-02
8	0,50	0,08	0,50	0,06	34,38±0,63	0,211±9,5E-03
9	0,80	0,03	0,20	0,02	28,60±0,31	0,005±6,5E-04
10	0,80	0,03	0,20	0,06	28,91±0,19	0,007±9,2E-04
11	0,80	0,08	0,20	0,02	29,26±0,23	0,002±4,3E-04
12	0,80	0,08	0,20	0,06	27,81±0,22	0,002±2,8E-04
13	0,80	0,03	0,50	0,02	32,63±0,88	0,153±6,7E-03
14	0,80	0,03	0,50	0,06	33,04±0,95	0,194±1,6E-02
15	0,80	0,08	0,50	0,02	34,84±0,86	0,207±1,3E-02
16	0,80	0,08	0,50	0,06	34,82±0,70	0,203±9,5E-03
17	0,43	0,06	0,35	0,04	31,68±0,42	0,148±8,0E-03
18	0,87	0,06	0,35	0,04	33,80±0,54	0,165±7,3E-03
19	0,65	0,06	0,13	0,04	18,36±0,14	0,002±2,9E-04
20	0,65	0,06	0,57	0,04	33,91±0,80	0,212±8,0E-03
21	0,65	0,02	0,35	0,04	31,09±0,60	0,136±8,9E-03
22	0,65	0,09	0,35	0,04	34,95±0,64	0,183±1,0E-02
23	0,65	0,06	0,35	0,01	33,02±0,40	0,146±7,4E-03
24	0,65	0,06	0,35	0,07	33,76±0,41	0,186±1,2E-02
25	0,65	0,06	0,35	0,04	33,00±0,56	0,205±8,5E-03

**APÊNDICE 2- RESULTADOS DO ÍNDICE DE LACEY FINAL
PARA AS SIMULAÇÕES DO PLANEJAMENTO 3³**

Simulação	Fatores			M _L final (-)	
	Número de suspensores (-)	Tamanho do suspensor (L/R) (-)	Grau de enchimento (%)	Configuração C1	Configuração C2
1	2	0,25	25,0	0,71	0,71
2	2	0,25	37,5	0,76	0,62
3	2	0,25	50,0	0,68	0,52
4	2	0,50	25,0	0,71	0,86
5	2	0,50	37,5	0,76	0,63
6	2	0,50	50,0	0,70	0,57
7	2	0,75	25,0	0,80	0,86
8	2	0,75	37,5	0,86	0,81
9	2	0,75	50,0	0,80	0,78
10	4	0,25	25,0	0,74	0,76
11	4	0,25	37,5	0,80	0,71
12	4	0,25	50,0	0,67	0,53
13	4	0,50	25,0	0,78	0,89
14	4	0,50	37,5	0,86	0,82
15	4	0,50	50,0	0,72	0,64
16	4	0,75	25,0	0,95	0,87
17	4	0,75	37,5	0,93	0,91
18	4	0,75	50,0	0,89	0,92
19	6	0,25	25,0	0,75	0,78
20	6	0,25	37,5	0,82	0,73
21	6	0,25	50,0	0,68	0,55
22	6	0,50	25,0	0,87	0,91
23	6	0,50	37,5	0,88	0,84
24	6	0,50	50,0	0,78	0,68
25	6	0,75	25,0	0,97	0,91
26	6	0,75	37,5	0,94	0,93
27	6	0,75	50,0	0,90	0,94
28	0	0,00	25,0	0,79	0,76
29	0	0,00	37,5	0,70	0,60
30	0	0,00	50,0	0,68	0,51

**APÊNDICE 3- RESULTADOS DA CONSTANTE CINÉTICA DE
MISTURA PARA AS SIMULAÇÕES DO PLANEJAMENTO 3³**

Simulação	Fatores			Constante cinética de mistura k (s ⁻¹)
	Número de suspensores (-)	Tamanho do suspensor (L/R) (-)	Grau de enchimento (%)	
1	2	0,25	25,0	0,198
2	2	0,25	37,5	0,126
3	2	0,25	50,0	0,078
4	2	0,50	25,0	0,266
5	2	0,50	37,5	0,134
6	2	0,50	50,0	0,078
7	2	0,75	25,0	0,146
8	2	0,75	37,5	0,134
9	2	0,75	50,0	0,107
10	4	0,25	25,0	0,204
11	4	0,25	37,5	0,099
12	4	0,25	50,0	0,075
13	4	0,50	25,0	0,363
14	4	0,50	37,5	0,155
15	4	0,50	50,0	0,080
16	4	0,75	25,0	0,296
17	4	0,75	37,5	0,214
18	4	0,75	50,0	0,142
19	6	0,25	25,0	0,202
20	6	0,25	37,5	0,111
21	6	0,25	50,0	0,070
22	6	0,50	25,0	0,377
23	6	0,50	37,5	0,147
24	6	0,50	50,0	0,070
25	6	0,75	25,0	0,252
26	6	0,75	37,5	0,220
27	6	0,75	50,0	0,142
28	0	0,00	25,0	0,194
29	0	0,00	37,5	0,152
30	0	0,00	50,0	0,096