



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



**INVESTIGAÇÃO NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DO
ESCOAMENTO GRANULAR E DOS FENÔMENOS DE
SEGREGAÇÃO RADIAL E AXIAL EM TAMBOR ROTATÓRIO**

Rodolfo Junqueira Brandão

Uberlândia – MG

2019



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



**INVESTIGAÇÃO NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DO
ESCOAMENTO GRANULAR E DOS FENÔMENOS DE
SEGREGAÇÃO RADIAL E AXIAL EM TAMBOR ROTATÓRIO**

Rodolfo Junqueira Brandão

Orientadores:

Marcos Antonio de Souza Barrozo

Claudio Roberto Duarte

Tese de doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Uberlândia – MG

2019

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

B817 2019	<p>Brandão, Rodolfo Junqueira, 1992- INVESTIGAÇÃO NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DO ESCOAMENTO GRANULAR E DOS FENÔMENOS DE SEGREGAÇÃO RADIAL E AXIAL EM TAMBOR ROTATÓRIO [recurso eletrônico] / Rodolfo Junqueira Brandão. - 2019.</p> <p>Orientador: Marcos Antonio Souza Barrozo. Coorientador: Claudio Roberto Duarte. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós- graduação em Engenharia Química. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://doi.org/10.14393/ufu.te.2019.2562 Inclui bibliografia. Inclui ilustrações.</p> <p>1. Engenharia química. I. Barrozo, Marcos Antonio Souza, 1961-, (Orient.). II. Duarte, Claudio Roberto, 1975-, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Química. IV. Título.</p> <p>CDU: 66.0</p>
--------------	---

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1K, Sala 206 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34)3239-4249 - www.ppgeq.feq.ufu.br - secppgeq@feq.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Química				
Defesa de:	Tese de Doutorado, 16/2019, PPGEQ				
Data:	16 de Dezembro de 2019	Hora de início:	08:30	Hora de encerramento:	10:40
Matrícula do Discente:	11723EQU006				
Nome do Discente:	Rodolfo Junqueira Brandão				
Título do Trabalho:	Investigação numérica e experimental do escoamento granular e dos fenômenos de segregação radial e axial em tambor rotatório				
Área de concentração:	Desenvolvimento de processos químicos				
Linha de pesquisa:	Processos de Separação				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	Estudo experimental e numérico da dinâmica de partículas em um tambor rotatório				

Reuniu-se na sala 1K228, *Campus Santa Mônica*, da Universidade Federal de Uberlândia, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Professores Doutores: Ricardo de Andrade Medronho - DEQ/UFRJ; Dyrney Araújo dos Santos - IQ/UFG; Ubirajara Coutinho Filho - PPGEQ/UFU; Carlos Henrique Ataíde - PPGEQ/UFU, Claudio Roberto Duarte - PPGEQ/UFU, coorientador e Marcos Antonio de Souza Barrozo - PPGEQ/UFU orientador do candidato. Ressalta-se que o Prof. Dr. Ricardo de Andrade Medronho participou da defesa por meio de videoconferência desde a cidade do Rio de Janeiro/RJ e o Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos desde a cidade de Goiânia/GO. Os demais membros da banca e o aluno participaram *in loco*.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Prof. Dr. Marcos Antonio de Souza Barrozo, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Claudio Roberto Duarte, Professor(a) do Magistério Superior**, em 16/12/2019, às 10:45, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Carlos Henrique Ataíde, Professor(a) do Magistério Superior**, em 16/12/2019, às 10:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ubirajara Coutinho Filho, Presidente**, em 16/12/2019, às 10:53, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Marcos Antonio de Souza Barrozo, Professor(a) do Magistério Superior**, em 16/12/2019, às 10:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Dyrney Araújo dos Santos, Usuário Externo**, em 16/12/2019, às 10:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **RICARDO DE ANDRADE MEDRONHO, Usuário Externo**, em 16/12/2019, às 10:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1748658** e o código CRC **1DE69D3E**.

Dedico à minha mãe Eliana, ao meu pai Aguinaldo, à minha namorada Thais,
aos meus orientadores e amigos que acompanharam esta jornada.

“Todas as vitórias ocultam uma abdicação”
Simone de Beauvoir

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela força nos momentos difíceis e por ter me concedido a oportunidade de desenvolver este trabalho.

Aos meus pais, Aguinaldo e Eliana, pelo amor e pela paciência, pessoas que sempre incentivaram os estudos em minha vida e a quem sou eternamente grato.

À minha namorada Thais Logetto pelo carinho, compreensão, incentivo e paciência, por ser uma companheira que acredita nos meus sonhos e me apoia em cada decisão tomada.

Aos meus amigos do laboratório, Rondinelli, Jeniffer, Suellen, Marcela, Angélica, Priscilla, Geraldo, Neiton, Marielle, Marcio, Lidja, Gregori, Raissa, Janaína, Natália, Argileu, Grazielle, Raphael, Carlos, Larissa, Glaucia e o Massarani, pelos agradáveis momentos de convivência e incentivo.

Aos alunos de iniciação científica, Patrik e Iury que em diversos momentos me auxiliaram neste trabalho.

Aos meus amigos Felipe Freire, Igor Santos, Eduardo Virgili, Ismael Melo, Matheus Matos, Edson Bento e Rogério Brito, que mesmo distantes, sempre me apoiaram e estiveram ao meu lado.

A todos os professores e colegas do PPGEQ/UFU pelo convívio e aprendizado.

Um agradecimento especial aos meus orientadores e amigos, Prof. Marcos Barrozo e Prof. Cláudio Duarte. A vocês agradeço pela oportunidade de desenvolver este trabalho, pela confiança em mim depositada e pelos diversos ensinamentos transmitidos durante este tempo, que tanto contribuíram para minha formação pessoal e profissional.

Enfim, a todos amigos que estão longe ou perto que passaram, chegaram, e continuam na minha vida e acompanharam mais essa etapa da minha vida, serei eternamente grato a cada um de vocês!

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	i
LISTA DE TABELAS	iv
LISTA DE SÍMBOLOS	i
RESUMO.....	i
ABSTRACT	ii
Capítulo 1 INTRODUÇÃO	1
Capítulo 2 PARÂMETROS DEM	3
2.1. Introdução	3
2.2. Revisão bibliográfica	4
Coeficiente de restituição	6
Coeficiente de atrito estático	10
Coeficiente de atrito de rolamento	13
Ângulo de repouso estático	15
2.3. Materiais e métodos	20
Coeficiente de restituição	21
Coeficiente de atrito estático	22
Coeficiente de atrito de rolamento	24
Ângulo de repouso estático	25
2.4. Resultados e discussão.....	28
Coeficiente de restituição	28
Coeficiente de atrito estático	33
Coeficiente de atrito de rolamento	36
Ângulo de repouso estático	39
2.5. Conclusão	43
Capítulo 3 REGIMES DE ESCOAMENTO	44
3.1. Introdução	44
3.2. Revisão bibliográfica	45
Regimes de escoamento	45
3.3. Materiais e métodos	54
Investigação experimental	54
Investigação numérica	56
3.4. Resultados e discussão.....	58

Investigação experimental	58
Investigação numérica	67
3.5. Conclusão	74
Capítulo 4 DIFUSIVIDADE GRANULAR.....	75
4.1. Introdução	75
4.2. Revisão bibliográfica	76
Difusão granular	76
Traçadores	77
4.3. Materiais e métodos	79
4.4. Resultados e discussão.....	82
4.5. Conclusão	87
Capítulo 5 SEGREGAÇÃO GRANULAR.....	88
5.1. Introdução	88
5.2. Revisão bibliográfica	89
Índice de Segregação	90
Fenômeno de segregação em tambores rotatórios.....	93
5.3. Materiais e métodos	95
Índice de Segregação	95
5.4. Resultados e discussão.....	101
Efeito da densidade	101
Efeito do tamanho	107
Efeito combinado	113
Disposição inicial	119
5.5. Conclusão	122
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	123
APÊNDICE	136

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1: (A) Colisão Perfeitamente inelástica; (B) Colisão perfeitamente elástica (Adaptado de DIAS e BARROSO, 2006).	7
Figura 2-2: Impacto oblíquo de uma partícula (Adaptado de DIAS e BARROSO, 2006).	7
Figura 2-3: Esquema de plano inclinado (Adaptado de BLAU, 2001).	11
Figura 2-4: Dispositivo tipo "Trenó" (Adaptado de LUIZ, 2013).	12
Figura 2-5: Balanço de forças durante o rolamento.	13
Figura 2-6: Metodologias para determinação de ângulo de repouso	16
Figura 2-7: Avaliação do ângulo de repouso utilizando o método dos elementos discretos. (Adaptado de AL-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018).	18
Figura 2-8: Materiais granulares: (a) Soja; (b) Vidro; (c) Poliacetal; (d) Aço 6; (e) Aço 4.	20
Figura 2-9: Aparato experimental para a determinação do coeficiente de restituição. ...	21
Figura 2-10: Aparato experimental para determinação do coeficiente de atrito estático	23
Figura 2-11: Aparato experimental para determinação do coeficiente de atrito de rolamento.	24
Figura 2-12: Aparato experimental para determinação do ângulo de repouso estático.	25
Figura 2-13: Medida experimental do ângulo de repouso estático.	26
Figura 2-14: Coeficiente de restituição do Aço 4 (a); Vidro (b); Aço 6 (c) e do Poliacetal (d). .	28
Figura 2-15: Influência do material granular sobre o coeficiente de restituição em diferentes superfícies.	30
Figura 2-16: Comparação entre restituição experimental com o modelo proposto por Zener (1941).	32
Figura 2-17: Influência da rugosidade sobre o coeficiente de atrito estático.	33
Figura 2-18: Influência da rugosidade sobre o coeficiente de atrito de rolamento.	37
Figura 2-19: Representação esquemática do efeito do módulo de Young e da rugosidade relativa sobre o atrito de rolamento.	37
Figura 2-20: Ângulos de repouso estáticos medidos experimentalmente: (a) Aço 4; (b) Vidro; (c) Aço 6; (d) Poliacetal; (e) Soja	39
Figura 2-21: Procedimento de calibração de parâmetros DEM.	42
Figura 3-1: Regimes de escoamento no interior de tambores rotatórios.	46

Figura 3-2: Obtenção do ângulo do segmento circular e do ângulo de repouso dinâmico.	48
Figura 3-3: Diagramas de comportamento granular no interior de tambores rotatórios	49
Figura 3-4: Regiões ativa e passiva do leito granular em um tambor rotatório operando em regime de rolamento.	51
Figura 3-5: Geometrias geradas a partir do planejamento 3^2	54
Figura 3-6: Representação esquemática do tambor rotatório.	55
Figura 3-7: Medição do ângulo de repouso dinâmico.	56
Figura 3-8: Avaliação qualitativa do comprimento e velocidade do tambor na dinâmica no escoamento granular de partículas de poliacetal	58
Figura 3-9: Avaliação quantitativa do comprimento do tambor na dinâmica granular..	59
Figura 3-10: Avaliação qualitativa do diâmetro e velocidade do tambor na dinâmica do escoamento granular de partículas de poliacetal	60
Figura 3-11: Avaliação quantitativa do diâmetro do tambor na dinâmica granular.	61
Figura 3-12: Comparação entre velocidades críticas de centrifugação obtidas experimentalmente com a relação proposta por Rose e Sullivan (1957).	64
Figura 3-13: Avaliação qualitativa da densidade da partícula na dinâmica granular.....	65
Figura 3-14: Avaliação qualitativa do tamanho da partícula na dinâmica granular.	66
Figura 3-15: Comparação qualitativa da dinâmica granular experimental e numérica..	67
Figura 3-16: Perfil de velocidade média de todas as partículas em função da velocidade de rotação: verificação numérica.	70
Figura 3-17: Perfil de velocidade média de todas as partículas em função da velocidade de rotação: PCC.	72
Figura 4-1: Representação das partículas formadoras do leito granular (P1) e das partículas traçadoras (P2).	80
Figura 4-2: Distribuição de frequência da difusividade ao longo do tempo.	82
Figura 4-3: Comportamento transiente da difusividade granular.	83
Figura 4-4: Comparação de magnitude da difusividade granular radial e axial.	86
Figura 5-1: Etapas para determinação do índice de mistura.	95
Figura 5-2: Gradeamento das imagens para a obtenção do índice de segregação.	96
Figura 5-3: Disposição inicial do leito granular.	97
Figura 5-4: Divisão axial do tambor rotatório.	99

Figura 5-5: Efeito da RD sobre o índice de segregação estacionário(a) e sobre a constante cinética de segregação (b).	102
Figura 5-6: Vista transversal do leito granular – Efeito da RD.	103
Figura 5-7: Cinéticas de segregação para RD de 0,1, 0,5 e 0,9.	104
Figura 5-8: Vista isométrica do leito granular –RD = 0,3.	104
Figura 5-9: Avaliação transiente do perfil de concentração volumétrica axial de partículas para RD de 0,1, 0,5 e 0,9.....	106
Figura 5-10: Segregação axial no estado estacionário para RD de 0,1, 0,5, e 0,9.....	106
Figura 5-11: Efeito da RT sobre o índice de segregação estacionário e na constante cinética de segregação.	108
Figura 5-12: Vista transversal do leito granular – Efeito da RT	108
Figura 5-13: Cinéticas de segregação para RT de 0,1, 0,5 e 0,9.	110
Figura 5-14: Vista isométrica do leito granular – Efeito da RT.	110
Figura 5-15: Avaliação transiente do perfil de concentração axial para RT de 0,1, 0,5 e 0,9.	111
Figura 5-16: Segregação axial no estado estacionário para RT de 0,1, 0,5, e 0,9.....	112
Figura 5-17: Influência do efeito combinado das propriedades granulares sobre as cinéticas de segregação.....	115
Figura 5-18: Influência do efeito combinado das propriedades granulares sobre o perfil de concentração axial ao longo do tempo.....	117
Figura 5-19: Influência do efeito combinado das propriedades granulares o perfil de concentração axial em regime permanente.....	118
Figura 5-20: Comparação da cinética de segregação avaliando a influência da disposição granular inicial.	120

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Formulação DEM.	5
Tabela 2.2: Modelos semi-empíricos de coeficiente de restituição.....	9
Tabela 2.3: Classificação de fluidez granular (Ai <i>et al.</i> , 2011b).	16
Tabela 2.4: Propriedades físicas dos materiais granulares.	20
Tabela 2.5: Espessuras das chapas de aço e vidro para a avaliação da restituição.....	22
Tabela 2.6: Rugosidade das superfícies para avaliação do atrito estático.	23
Tabela 2.7: Planejamento composto central para avaliação numérica do ângulo de repouso.	26
Tabela 2.8: Coeficientes de restituição obtidos experimentalmente para aplicação da abordagem numérica Lagrangeana.	31
Tabela 2.9: Coeficientes de atrito estático mensurados experimentalmente.	34
Tabela 2.10: Coeficientes de atrito estático obtidos experimentalmente para aplicação da abordagem numérica Lagrangeana.	35
Tabela 2.11: Coeficientes de atrito de rolamento mensurados experimentalmente.	36
Tabela 2.12: Coeficientes de atrito estático obtidos experimentalmente para aplicação da abordagem numérica Lagrangeana.	38
Tabela 2.13: Avaliação quantitativa do ângulo de repouso estático.....	40
Tabela 3.1: Condições de Fr, preenchimento e atrito estático para a obtenção dos regimes de escoamento granular no interior do tambor rotatório (Adaptado de Mellmann, 2001).	47
Tabela 3.2: Equações de velocidades críticas de centrifugação.	53
Tabela 3.3: Condições experimentais avaliadas na investigação dos regimes de escoamento.	55
Tabela 3.4: Planejamento composto central para investigação de variáveis independentes sobre o comportamento granular em tambores rotatórios.	57
Tabela 3.7: Efeito das dimensões do equipamento sobre a velocidade crítica de centrifugação.	63
Tabela 3.10: Velocidades críticas de centrifugação para diferentes materiais granulares.	67
Tabela 3.12: Comparação quantitativa da dinâmica granular experimental e numérica.	68

Tabela 3.13: Avaliação da velocidade crítica de centrifugação a partir das simulações Lagrangeanas.	71
Tabela 4.1: Utilização de traçadores em sistemas granulares.	78
Tabela 4.2: Planejamento composto central: influência das propriedades granulares e de interação e da velocidade de rotação na difusividade granular.	79
Tabela 4.3: Parâmetros DEM aplicados às simulações Lagrangeanas.	81
Tabela 4.4: Influência das propriedades granulares, de interação e da velocidade de rotação sobre a difusividade radial e axial granular.	84
Tabela 5.1: Variáveis que influenciam na mistura granular.	90
Tabela 5.2: Índices de segregação.	91
Tabela 5.3: Avaliação da razão de densidade sobre a segregação granular utilizando partículas de diâmetro de 6 mm.	98
Tabela 5.4: Avaliação da razão de tamanho sobre a segregação granular utilizando partículas de densidade 2500 kg/m ³	98
Tabela 5.5: Níveis do planejamento composto central: efeito do tamanho e da densidade granular sobre a segregação granular.	99
Tabela 5.6: Avaliação da disposição inicial sobre a cinética de segregação.	100
Tabela 5.7: Índice de segregação – Efeito da razão de densidade.	101
Tabela 5.8: Índice de segregação – Efeito da razão de tamanho.	107
Tabela 5.9: Avaliação qualitativa do efeito combinado da densidade e tamanho granular.	114
Tabela 5.10: Comparação do índice de segregação estacionário avaliando a influência da disposição granular inicial.	120
Tabela 5.11: Avaliação qualitativa do efeito da disposição granular inicial.	121

LISTA DE SÍMBOLOS

a	aceleração	$M^0 L^1 T^{-2}$
d_{ij}	distância entre os centros de massa das partículas i e j	$M^0 L^1 T^0$
E^*	módulo de Young equivalente	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
E_c	módulo de Young da chapa	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
E_i	módulo de Young da partícula i	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
E_j	módulo de Young da partícula j	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
E_p	módulo de Young da partícula	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
e_p	coeficiente de restituição	$M^0 L^0 T^0$
e_n	coeficiente normal restituição	$M^0 L^0 T^0$
e_t	coeficiente tangencial 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 preenchimento	$M^0 L^0 T^0$
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	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
G_j	módulo de cisalhamento da partícula j	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
h	altura	$M^0 L^1 T^0$
h_1	altura de soltura	$M^0 L^1 T^0$

h_2	altura de ricochete	$M^0 L^1 T^0$
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	$M^1 L^0 T^{-2}$
I_i	momento de inercia da partícula i	$M^1 L^2 T^0$
L	espessura da chapa	$M^0 L^1 T^0$
M	índice de mistura	$M^0 L^0 T^0$
m	massa	$M^1 L^0 T^0$
m^*	massa equivalente	$M^1 L^0 T^0$
m_i	massa da partícula i	$M^1 L^0 T^0$
m_i	massa da partícula i	$M^1 L^0 T^0$
m_j	massa da partícula j	$M^1 L^0 T^0$
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_j	raio da partícula j	$M^0 L^1 T^0$
s	vetor unitário tangencial	$M^0 L^0 T^0$
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	$M^0 L^1 T^{-1}$
V_r	velocidade de ricochete	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_x	velocidade linear direção x	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_y	velocidade linear direção y	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_z	velocidade linear direção z	$M^0 L^1 T^{-1}$
x_j	posição da partícula j	$M^0 L^1 T^0$
símbolos gregos		
α	ângulo de inclinação do plano	$M^0 L^0 T^0$
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	$M^1 L^0 T^{-1}$
ε	metade do ângulo do segmento circular ocupado com sólidos	$M^0 L^0 T^0$
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	$M^0 L^0 T^0$
ρ_c	densidade da chapa	$M^1 L^{-3} T^0$
ρ_f	densidade da fase fluída	$M^1 L^{-3} T^0$
ρ_s	densidade da fase sólida	$M^1 L^{-3} T^0$
σ	desvio padrão da composição da mistura	$M^0 L^0 T^0$
σ_0	desvio padrão inicial da composição da mistura	$M^0 L^0 T^0$
σ_0^2	variância inicial da composição da mistura	$M^0 L^0 T^0$
σ^2	variância da composição da mistura	$M^0 L^0 T^0$
σ_p	razão de Poisson	$M^0 L^0 T^0$
σ_r	desvio padrão final da composição da mistura	$M^0 L^0 T^0$
σ_r^2	variância final da composição da mistura	$M^0 L^0 T^0$
τ_{ij}	torque entre a partícula i e j	$M^1 L^2 T^{-2}$
Ω	velocidade angular de rotação do tambor	$M^0 L^0 T^{-1}$
ω_c	velocidade angular crítica de rotação do tambor	$M^0 L^0 T^{-1}$
ω_i	velocidade angular da partícula i	$M^0 L^1 T^{-1}$

RESUMO

A compreensão acerca do comportamento de escoamentos granulares e da dinâmica de partículas é de fundamental importância no que diz respeito à concepção de projetos e otimização de equipamentos industriais. Dentre eles, os tambores rotatórios têm ganhado destaque devido à sua geometria relativamente simples, que consiste em uma estrutura cilíndrica horizontal que gira em torno do próprio eixo. Entretanto, a segregação de partículas tem se tornado um dos recorrentes problemas na utilização deste equipamento, podendo afetar negativamente a eficiência do processo de mistura. Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo estudar o fenômeno de segregação de partículas em um tambor rotatório por meio de técnicas numéricas e experimentais. No estudo numérico, foi utilizada a abordagem Lagrangeana, na qual cada partícula é acompanhada, individualmente, com a consequente aplicação do balanço de forças, levando em consideração as interações com as demais partículas através de leis de contato. Experimentalmente, foram mensurados os coeficientes de restituição, atrito estático e atrito de rolamento, baseado nas normas da ASTM G194-08, além da determinação do ângulo de repouso estático e da velocidade crítica de centrifugação, avaliando o efeito das variáveis de projeto do equipamento e das propriedades físicas granulares. Quanto à abordagem Lagrangeana, realizou-se a utilização dos parâmetros DEM obtidos experimentalmente para quantificação da difusividade granular e da cinética de segregação no interior do tambor rotatório, avaliando a influência das propriedades físicas granulares como diâmetro e densidade. Para isto, foram empregadas razões de tamanho e densidade variando de 0,1 a 1,0, com o tambor operando nas velocidades de rotação de 1,0 rad/s e grau de preenchimento de 25%. Tanto as diferenças de diâmetro quanto as diferenças de densidade promoveram o fenômeno de segregação nas direções radial e axial. Uma análise mais aprofundada foi realizada em relação à constante cinética de segregação e o índice de segregação estacionário, para os quais foi avaliado a influência das propriedades granulares. Ao comparar as imagens do leito granular no estudo dos regimes de escoamento obtidas experimentalmente com as geradas pelo resolvidor numérico, foi observada a similaridade entre as mesmas, permitindo afirmar que a ferramenta numérica se mostrou promissora na análise do fenômeno.

Palavras-chave: Tambor rotatório, abordagem Lagrangeana, segregação de partículas, dinâmica de partículas, simulação numérica.

ABSTRACT

Understanding the behavior of granular flows and particle dynamics is of fundamental importance with regard to project design and optimization of industrial equipment. Among them, the rotating drums have gained prominence due to their relatively simple geometry, which consists of a horizontal cylindrical structure that rotates around the axis itself. However, particle segregation has become one of the recurring problems in the use of this equipment, which may negatively affect the efficiency of the mixing process. In this context, the present work aimed to study the phenomenon of particle segregation in a rotating drum by numerical and experimental techniques. In the numerical study, the Lagrangian approach was used, in which each particle is accompanied individually, with the consequent application of the balance of forces, taking into account the interactions with the other particles through contact laws. Experimentally, the coefficients of restitution, static friction and rolling friction were measured, based on ASTM G194-08 norms, as well as the determination of the static angle of repose and the critical speed of centrifugation, evaluating the effect of equipment design variables and of granular physical properties. As for the Lagrangian approach, the experimentally obtained DEM parameters were used to quantify the granular diffusivity and segregation kinetics inside the rotating drum, evaluating the influence of granular physical properties such as diameter and density. For this, size and density ratios ranging from 0.1 to 1.0 were employed, with the drum operating at rotational speeds of 1.0 rad / s and 25% fill degree. Both diameter differences and density differences promoted the phenomenon of segregation in the radial and axial directions. Further analysis was performed in relation to the segregation kinetic constant and the stationary segregation index, for which the influence of granular properties was evaluated. When comparing the granular bed images in the study of the experimentally obtained flow regimes with those generated by the numerical resolver, the similarity between them was observed, allowing to affirm that the numerical tool was promising in the analysis of the phenomenon

Keywords: Rotary drum, Lagrangian approach, particle segregation, particle dynamics, numerical simulation.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Os tambores rotatórios são largamente utilizados em diversos processos industriais devido à sua versatilidade, que permite a operação de materiais granulares com diferentes propriedades físicas. Além disso, estes equipamentos possibilitam elevadas taxas de transferência de calor, massa e quantidade de movimento, sendo aplicados em diversas operações, como na secagem, calcinação, moagem, granulação, dentre outros.

Um dos motivos da utilização de tambores rotatórios em operações industriais está associado à sua geometria relativamente simples, que consiste em uma estrutura cilíndrica horizontal que gira em torno do seu próprio eixo. Apesar das amplas aplicações com materiais particulados na indústria, o conhecimento sobre a dinâmica e segregação de partículas sólidas no interior deste equipamento ainda encontra-se como oportunidade de aprofundamento científico (ALCHIKH-SULAIMAN *et al.*, 2016).

Dentre as problemáticas recorrentes apresentadas na utilização do tambor rotatório, pode-se destacar a segregação ou ineficiência de mistura granular que ocorre em processos em que há a necessidade de utilização de partículas de diferentes tamanhos e densidades (KUO *et al.*, 2005; PIRKER *et al.*, 2010; SANTOS *et al.*, 2013), promovendo uma redução da eficiência e da qualidade do produto final. Essa diminuição de eficiência é atribuída à redução do número de colisões entre as partículas e à migração para regiões preferenciais (ALIAN *et al.*, 2015; CHO *et al.*, 2012; GRAJALES *et al.*, 2012; LOMMEN *et al.*, 2014).

A modelagem e a simulação numérica de tambores rotatórios ainda são, juntamente com os trabalhos experimentais, um grande desafio devido à complexa dinâmica granular no interior do equipamento. No entanto, como uma ferramenta complementar, as simulações numéricas surgem como um auxílio à compreensão do escoamento dos materiais granulares, superando as limitações impostas por questões de segurança de operação e de custo na confecção de plantas piloto, além de possibilitar, com maior nível de detalhamento, a visualização de fenômenos que ocorrem em nível granular, como o fenômeno de segregação.

Em princípio, a modelagem numérica para tratar este tipo de problema pode ser abordada de duas diferentes formas, a Euleriana e a Lagrangeana. Na primeira abordagem, a fase particulada é tratada como continua sendo o conceito de fração de volume aplicado à cada uma das fases presentes. Neste caso, um conjunto de equações diferenciais parciais de conservação de massa, energia e *momentum* para cada uma das fases presentes. Na segunda



abordagem, as partículas individuais ou grupos representativos de partículas são rastreados por meio da aplicação de um balanço de forças na posição real da partícula ou grupos de partículas (ALCHIKH-SULAIMAN *et al.*, 2016; ZHENG e YU, 2015).

Para aprofundar no conhecimento da fluidodinâmica neste equipamento torna-se necessário o estudo experimental e numérico da dinâmica de partículas no interior de tambores rotatórios e do fenômeno de segregação. Neste contexto, as simulações numéricas foram realizadas através da aplicação da abordagem Lagrangeana, mensurando experimentalmente os parâmetros inerentes à abordagem, com posterior verificação, recorrendo aos dados experimentais. Nesta tese isso foi realizado utilizando o software livre LIGGGHTS para o estudo numérico, que foram comparados com os resultados obtidos experimentalmente no Laboratório de Sistemas Particulados (LSP) do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia (PPGEQ-UFU), permitindo assim, a determinação de parâmetros físicos, como os coeficientes de atrito estático, rolamento e restituição.

OBJETIVO GERAL

Este trabalho tem como objetivo geral estudar, experimentalmente e por meio de técnicas numéricas, a dinâmica de partículas e o fenômeno de segregação no interior de tambores rotatórios.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Investigar experimental e numericamente os coeficientes de restituição, de atrito estático e de atrito de rolamento;
- Verificar a influência das propriedades físicas granulares, tamanho e densidade, bem como das características geométricas do tambor como diâmetro e comprimento sobre a dinâmica de partículas;
- Investigar a difusividade granular, as variáveis que a influenciam e seus efeitos sobre o fenômeno de segregação;
- Avaliar o efeito da variação das condições operacionais e das propriedades granulares sobre o fenômeno de segregação radial e axial.

CAPÍTULO 2

PARÂMETROS DEM

2.1. Introdução

Nos últimos anos, o método dos elementos discretos (DEM) tem sido amplamente utilizado para descrever o fluxo granular em diversas aplicações, tais como: escoamento em tambores rotatórios (Cunha *et al.*, 2016; Kumar *et al.*, 2015; Pezo *et al.*, 2016; Santos *et al.*, 2016), processos de mistura e segregação (Alchikh-Sulaiman *et al.*, 2016; Liu, Yang e Yu, 2012; Remy, 2010; Xu *et al.*, 2010), processos farmacêuticos (Freireich *et al.*, 2015; Toschkoff *et al.*, 2013), dentre outras.

Na abordagem DEM, as interações entre partículas e entre as partículas e as superfícies são modeladas com o intuito de prever o comportamento do leito granular no interior de diversos equipamentos. A viabilidade da aplicação do DEM depende da qualidade do modelo de contato escolhido, bem como dos respectivos parâmetros de entrada. Os parâmetros de entrada estão relacionados às propriedades de partículas e às propriedades de interação entre elas. Medições confiáveis desses parâmetros ainda são um desafio. De acordo com Cunha *et al.* (2016), uma abordagem comumente usada na literatura seria escolher os parâmetros de entrada do DEM, calibrando o modelo em relação às medições experimentais, ou seja, os resultados numéricos são confrontados com as observações experimentais até que haja uma correspondência entre elas. No entanto, essas calibrações podem apresentar como resultado parâmetros obtidos com ausência de significados físicos (AI *et al.*, 2011a). A abordagem de calibração é mais usual na escolha dos parâmetros de entrada do DEM devido às dificuldades associadas às suas medidas diretas (GONZÁLEZ-MONTELLANO *et al.*, 2011), principalmente devido à falta de procedimentos confiáveis para representar o parâmetro real. Assim, é necessário o estudo de metodologias para medir experimentalmente e também analisar numericamente os parâmetros de entrada do DEM, como os coeficientes de restituição, de atrito estático e de rolamento.



2.2. Revisão bibliográfica

Na abordagem DEM, todas as trajetórias das partículas são rastreadas e uma integração temporal é aplicada em cada uma delas usando a segunda lei de Newton, levando em consideração as interações partícula-partícula e partícula-parede. A segunda lei de Newton fornece o movimento da partícula como resultado das forças que atuam sobre ela (Equações 2.1 e 2.2). Esta lei pode ser também avaliada para encontrar as forças de contato que promoverão o deslocamento granular (SANTOS *et al.*, 2016).

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j (F_n^{ij} + F_t^{ij}) + m_i g \quad (2.1)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j (R_i \times F_t^{ij}) + \tau_{rij} \quad (2.2)$$

sendo m_i , v_i , I_i , ω_i e R_i a massa, a velocidade linear, o momento de inércia, a velocidade angular e o raio da partícula i , respectivamente, enquanto F_n^{ij} , F_t^{ij} e τ_{rij} são as forças normais e tangenciais e o torque entre as partículas i e j .

Em geral, os modelos DEM são classificados em duas categorias: modelos de esfera rígida e modelos de esfera macia. Em simulações usando a abordagem de esfera rígida, as colisões são consideradas binárias e instantâneas. Essas suposições são válidas para sistemas de baixa concentração granular. Já os modelos de esferas macias, também chamados de modelo não-linear de Hertz-Mindlin, são modelos adequados para sistemas com alta concentração granular e longos períodos de contato entre as partículas (KLOSS *et al.*, 2012).

A Tabela 2.1 apresenta as equações fundamentais da formulação não-linear de Hertz-Mindlin aplicada neste estudo.

Das equações apresentadas na Tabela 1, tem-se que: ν é a razão de Poisson, e_p é o coeficiente de restituição, δ_n é a sobreposição normal, δ_t é a sobreposição tangencial, $\overline{v_n^{rel}}$ é a velocidade normal relativa e $\overline{v_t^{rel}}$ é a velocidade tangencial relativa.



Tabela 2.1: Formulação DEM.

Força normal	$F_n = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R^*} \delta_n^{3/2}$	(2.3)
Força normal de amortecimento	$F_n^d = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_n m^*} v_n'^{ei}$	(2.4)
Raio equivalente de contato	$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}$	(2.5)
Massa equivalente	$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$	(2.6)
Modulo de Young equivalente	$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_i^2}{E_i} + \frac{1-\nu_j^2}{E_j}$	(2.7)
Rigidez normal	$S_n = 2E^* \sqrt{R^*} \delta_n$	(2.8)
Coeficiente de amortecimento	$\beta = \frac{\ln e_p}{\sqrt{\ln^2 e_p + \pi^2}}$	(2.9)
Força tangencial	$F_t = -\delta_t S_t$	(2.10)
Força tangencial de amortecimento	$F_t^d = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_t m^*} v_t'^{ei}$	(2.11)
Rigidez tangencial	$S_t = 8G^* \sqrt{R^*} \delta_n$	(2.12)
Modulo de cisalhamento equivalente	$\frac{1}{G^*} = \frac{2-\nu_i}{G_i} + \frac{2-\nu_j}{G_j}$	(2.13)

Para aplicações em que o atrito de rolamento tem um papel importante, é possível contabilizá-lo aplicando um torque às superfícies de contato, Equação 2.14 (KLOSS *et al.*, 2012).

$$\tau_{rij} = \frac{-\mu_R F_n R_i \omega_i}{|\omega_i|} \quad (2.14)$$

sendo μ_R o coeficiente de atrito de rolamento e ω_i a velocidade angular no ponto de contato.



Coefficiente de restituição

O coeficiente de restituição (e_p), é um parâmetro relacionado à energia mecânica conservada após o choque entre partículas ou entre partículas e superfícies, podendo ser obtido pela razão entre as velocidades depois e antes do impacto, como mostrado na Equação 2.15:

$$e_p = \frac{V_r}{V_i} \quad (2.15)$$

sendo V_r e V_i são as velocidades de rebote e impacto respectivamente.

Para corpos de prova, submetidos a condições experimentais de queda livre, e desprezando a resistência do ar, podemos também, a partir da Equação 2.15 e da lei de conservação de energia, transcrever a equação na forma:

$$e_p = \sqrt{\frac{h_2}{h_1}} \quad (2.16)$$

em que h_1 e h_2 são a altura inicial e altura atingida após o choque, respectivamente (WANG *et al.*, 2015).

O valor do coeficiente de restituição pode variar entre 0 e 1 (Figura 2-1). Em uma colisão perfeitamente inelástica ($e_p=0$), uma partícula solta a uma altura h_1 , ao se chocar com a superfície, dissipa toda a energia durante choque. Já numa colisão perfeitamente elástica ($e_p=1$), a partícula solta a uma altura h_1 se choca com a superfície e volta a sua altura inicial ($h_2=h_1$), indicando que não houve nenhuma perda de energia. Assim, no caso de choques naturais entre corpos ou entre corpos e superfícies, o coeficiente de restituição apresenta valores variando de 0 a 1, havendo perda parcial de energia durante o choque.

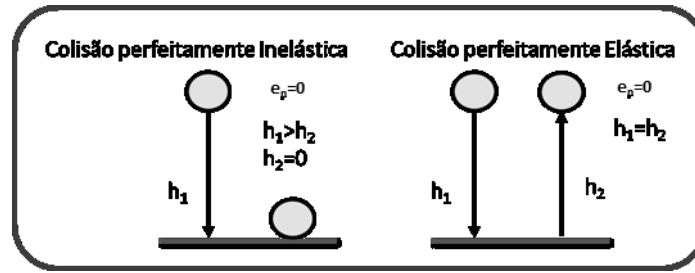


Figura 2-1: (A) Colisão Perfeitamente inelástica; (B) Colisão perfeitamente elástica (Adaptado de DIAS e BARROSO, 2006).

Segundo Imre *et al.* (2008), toda a energia absorvida em uma deformação elástica não é completamente recuperada quando ocorre a descarga de energia. Assim, os autores sugerem uma definição para o coeficiente de restituição baseada na própria deformação elástica, na qual este parâmetro seria a razão entre a energia elástica investida durante uma carga (absorção de energia) e a recuperada durante uma descarga (liberação de energia).

Para a determinação do coeficiente de restituição, diversas metodologias são apresentadas na literatura, como a que foi proposta por Zhu *et al.* (2008), na qual se efetua o lançamento de partículas sobre superfícies inclinadas, sendo aplicada preferencialmente para materiais com superfícies irregulares. Há também o método da queda livre, “*drop test*”, no qual as partículas colidem com a superfície horizontal plana, sendo preferencialmente aplicado às partículas com elevada esfericidade. Neste caso, o coeficiente de restituição é calculado conforme a Equação 2.16.

Ao analisar partículas processadas industrialmente, as quais apresentam formas irregulares em sua grande maioria, Zhu *et al.* (2008) utilizaram a metodologia de colisão numa superfície inclinada (Figura 2-2). Deste modo, o vetor coeficiente de restituição e o vetor velocidade, se dividem em duas componentes: a normal e a tangencial.

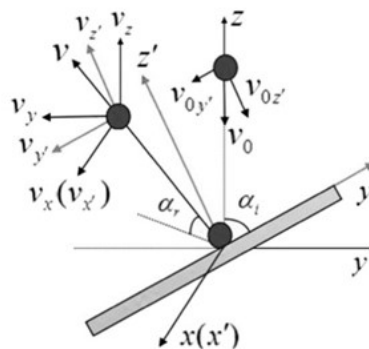


Figura 2-2: Impacto oblíquo de uma partícula (Adaptado de DIAS e BARROSO, 2006).



As velocidades da partícula antes e após o impacto podem ser determinadas a partir das Equações 2.17 e 2.18, respectivamente, e os ângulos de impacto e rechaço são definidos como α_i e α_r respectivamente.

$$v_0 = \sqrt{2gH} \quad (2.17)$$

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} \quad (2.18)$$

$$e_p = \frac{v}{v_0} = \frac{\sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}}{\sqrt{2gH}} \quad (2.19)$$

Labous *et al.* (1997) avaliaram a dependência do coeficiente de restituição com o tamanho e a massa das partículas. Os autores notaram que o aumento do tamanho das partículas promoveu o aumento deste coeficiente. Entretanto, no trabalho de Sondergaard *et al.* (2008), foi observada uma redução do coeficiente de restituição com o aumento da razão do diâmetro da esfera em relação à espessura da placa. Este fenômeno também foi observado por Aryaei *et al.* (2010), que ao medir o e_p e a perda de energia durante o impacto de esferas de diferentes tamanhos, verificaram que o aumento no tamanho da esfera levou à uma diminuição no valor do e_p .

Diversos modelos de predição de coeficiente de restituição vêm sendo desenvolvidos baseados em diferentes mecanismos de dissipação de energia, elástica ou plástica, que ocorrem devido à diferença de características dos materiais envolvidos durante os choques. Johnson e Jackson (1987) aplicaram o modelo proposto por Kuwabara e Kono (1987), verificando uma boa concordância quando comparado aos resultados obtidos experimentalmente. González-Montellano *et al.* (2011) e Wu *et al.* (2003) avaliaram algumas propriedades de grãos, incluindo densidade, tamanho, módulo de Young e velocidade de impacto. Nos trabalhos, constatou-se que apenas a velocidade apresentou influência significativa sobre o coeficiente de restituição, obtendo-se assim um modelo empírico independente do diâmetro das esferas utilizadas.

A Tabela 2.2 apresenta quatro dos principais modelos semi-empíricos para o cálculo do coeficiente de restituição, embasados nos princípios da mecânica estatística e em observações experimentais, que avaliam a influência da velocidade de impacto bem como as propriedades dos materiais, como a geometria, o tamanho e a densidade.



Tabela 2.2: Modelos semi-empíricos de coeficiente de restituição

Autor	(e_p)	
Zener (1941)	$e = \frac{(1 - 0,84\lambda)}{(1 + 0,84\lambda)}$	(2.20)
Kuwabara e Kono (1987)	$e_p = 1 - v_i^{1/5}$	(2.21)
Labous <i>et al.</i> (1997)	$e_p = 1,185 \left(\frac{v_i}{v_r} \right)^{-1/4}$	(2.22)
Lu <i>et al.</i> (2015)	$e_p = \exp \left(- \frac{\pi \lambda}{\sqrt{4 - \lambda}} \right)$	(2.23)

O modelo proposto por Kuwabara e Kono (1987) como método de predição do coeficiente de restituição aplica o modelo de choque viscoelástico, que se baseia na teoria de Hertz.

Labous *et al.* (1997) propuseram em seu modelo a inclusão da dissipação de energia devido à deformação plástica durante o impacto, verificando que a dimensão da partícula não apresenta influência significativa sobre o coeficiente de restituição. Por outro lado, notou-se a influência da velocidade sobre este parâmetro.

Considerando que a energia durante o impacto é dividida entre tensões hertzianas e ondas elásticas, Zener (1941) definiu o parâmetro de inelasticidade (λ), Equação 2.24, permitindo que o e_p pudesse ser calculado para diferentes combinações de materiais e razões de diâmetro de esfera e espessura da superfície.

$$\lambda = \left(\frac{\pi \rho_p}{\rho_s} \right)^{3/5} \frac{1}{4\sqrt{3}} \left(\frac{r}{l} \right)^2 \left[\frac{V_i^2 \rho_s (1 - \nu_s^2)}{E_s} \right]^{1/10} \left[1 + \frac{E_s (1 - \nu_p^2)}{E_p (1 - \nu_s^2)} \right]^{-2/5} \quad (2.24)$$

sendo: ρ a densidade, ν a razão de Poisson, E o módulo de Young, V_i a velocidade de impacto da partícula, r o raio da partícula e l a espessura da superfície de impacto. Os subscritos p e s se referem à partícula e à superfície, respectivamente.

Lu *et al.* (2015) propuseram uma nova expressão para a determinação do coeficiente de restituição, entretanto, mantiveram a utilização do parâmetro de inelasticidade. Os autores concluíram que a razão diâmetro da partícula/espessura da superfície não é o único fator que influencia consideravelmente na dissipação da energia de impacto. Logo, as diferenças entre os coeficientes de restituição experimentais e teóricos foram oriundas de mecanismos dissipativos não contabilizados pelo modelo.



Coefficiente de atrito estático

O coeficiente de atrito estático de um corpo é definido como a força de resistência ao movimento relativo entre corpos ou entre corpos e superfícies. Esta força atua ao longo dos pontos de contato entre as duas superfícies em direção oposta ao movimento. Existem ainda outras definições, leis empíricas e teorias que são usadas para descrever os coeficientes de atrito (DUNKIN e KIM, 1996).

Um grande número de diferentes mecanismos de dissipação de energia, referente ao movimento relativo entre corpos, foi proposto, e algumas leis foram formuladas para o atrito proveniente da observação fenomenológica (HUTCHINGS, 2016). Historicamente, tais formulações foram inicialmente estabelecidas por Leonardo da Vinci, Guillaume Amontons e Charles Augustin Coulomb, sendo elas:

- 1º lei de atrito: Coeficientes de atrito estático ou de deslizamento são independentes da carga ou força normal aplicada sobre o corpo.
- 2º lei de atrito: Coeficientes de atrito estático ou de deslizamento são independentes da área de contato.
- 3º lei de atrito: Coeficiente de atrito de deslizamento independente da velocidade relativa entre corpos.

Segundo Maegawa *et al.* (2015), em contatos entre superfícies planas com movimento relativo entre elas, o atrito pode ser modelado como forças de deformação elástica e plástica das rugosidades presentes no material, que são responsáveis pelo contato interfacial. Para cada contato, a deformação tangencial é denominada elástica até que a força tangencial aplicada exceda o limite de resistência superficial do material, tornando-se assim uma deformação do tipo plástica.

Hutchings (2016) estudou o deslizamento entre placas de aço e alumínio polido para avaliar a influência da intensidade da força normal aplicada nas placas sobre o coeficiente de atrito. Com isso, foi verificado que o coeficiente de atrito permaneceu constante, mesmo após o aumento na ordem de 10^6 N na força normal, corroborando com o enunciado da 1º lei de atrito.

Assim como realizado com a força normal, Hutchings (2016) também apresenta resultados experimentais onde foi avaliada a influência da área de contato entre superfícies de madeira e aço sobre o coeficiente de atrito. Neste caso, conforme apresentado na 2º lei



de atrito, variações na área de contato entre as superfícies também não promoveram mudanças significativas no coeficiente de atrito.

Diversas metodologias foram propostas e empregadas para a determinação do coeficiente de atrito estático, sendo estas agrupadas em categorias baseadas nas geometrias e no modo de contato. Um dos dispositivos mais comumente aplicados na medição do coeficiente de atrito estático utiliza o sistema de plano inclinado (Figura 2-3), que é de construção simples e de baixo custo. Este tipo de dispositivo tem como principal característica a distribuição de carga, que irá se deslocar para frente conforme ocorre o aumento do ângulo de inclinação do plano móvel (BLAU, 2001). A força de atrito estático é proporcional à força normal, como mostrado na Equação 2.25, e é definida como a força necessária para um objeto iniciar o deslizamento.

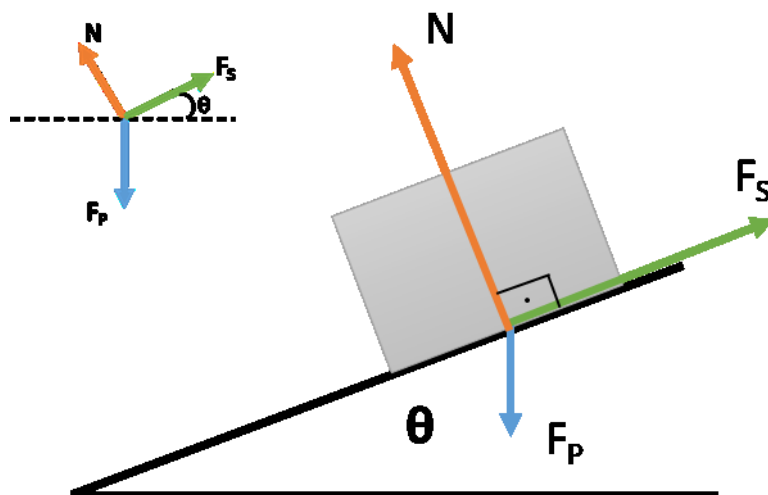


Figura 2-3: Esquema de plano inclinado (Adaptado de BLAU, 2001).

Blau (2001) afirma também que antes do movimento relativo entre o corpo de prova e o plano inclinado, a força de atrito apresenta magnitude superior à componente da força peso. Entretanto, ao aumentar o ângulo de inclinação do plano, θ , as forças paralelas ao plano horizontal atuantes no corpo de prova se igualam, $F_s = F_p$, fazendo com que o corpo se encontre na eminência do movimento, sendo este ponto referente à definição de atrito estático, em que o ângulo de inclinação do plano é denominado ângulo de atrito ou ângulo de repouso, o qual pode ser expresso a partir da Equação 2.25.



$$\mu_s = \frac{F_P}{N} = \frac{\text{sen}(\theta)mg}{\cos(\theta)mg} = \text{tg}(\theta) \quad (2.25)$$

Alguns autores, tais como Hutchings (2016), apontam que, usualmente, valores de coeficiente de atrito estático em superfícies não lubrificadas estão na faixa de 0,10 a 2,00 e que precauções devem ser tomadas durante as medidas, tais como a limpeza da superfície a ser analisada, tipo de acabamento superficial e características vibracionais da máquina de teste.

Outra metodologia também bastante aplicada para a obtenção do coeficiente de atrito estático, é dada pelo sistema “trenó”, proposta por Leonardo da Vinci, Figura 2-4, (LUIZ, 2013). A força normal é determinada a partir da massa do corpo de prova, e a força tangencial é aplicada horizontalmente, a qual pode ser aplicada de diversas formas, por exemplo, a partir do auxílio de uma polia, sendo controlada a partir da utilização de células de carga ou com um motor de acionamento. Assim, o coeficiente de atrito, na eminência de movimento, pode ser obtido a partir da aplicação da Equação 2.29.

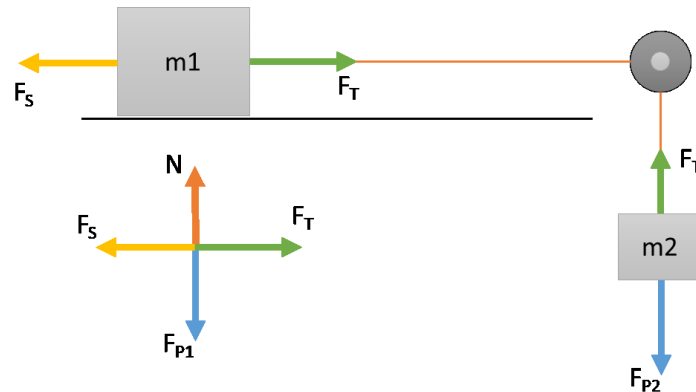


Figura 2-4: Dispositivo tipo "Trenó" (Adaptado de LUIZ, 2013).

$$F_S = \mu_s F_{P1} \quad (2.26)$$

$$F_T = F_{P2} \quad (2.27)$$

$$F_S = F_T \quad (2.28)$$

$$\mu_s = \frac{F_{P2}}{F_{P1}} = \frac{m_2}{m_1} \quad (2.29)$$



Coeficiente de atrito de rolamento

O atrito de rolamento é definido como a força que resiste ao movimento de uma partícula rolando em uma superfície ou sobre outras partículas (MOHAMED e GUTIERREZ, 2010), conforme apresentado na Figura 2-5. O coeficiente de atrito de rolamento é muito menor que o coeficiente de atrito estático ou de deslizamento (WEIZMAN, *et al.*, 2013) e pode ser expresso por meio da Equação 2.30 como um parâmetro adimensional. No entanto, diferentes modelos e equações são apresentados na literatura para condições e aplicações específicas (HUTCHINGS, 2016; MOHAMED e GUTIERREZ, 2010).

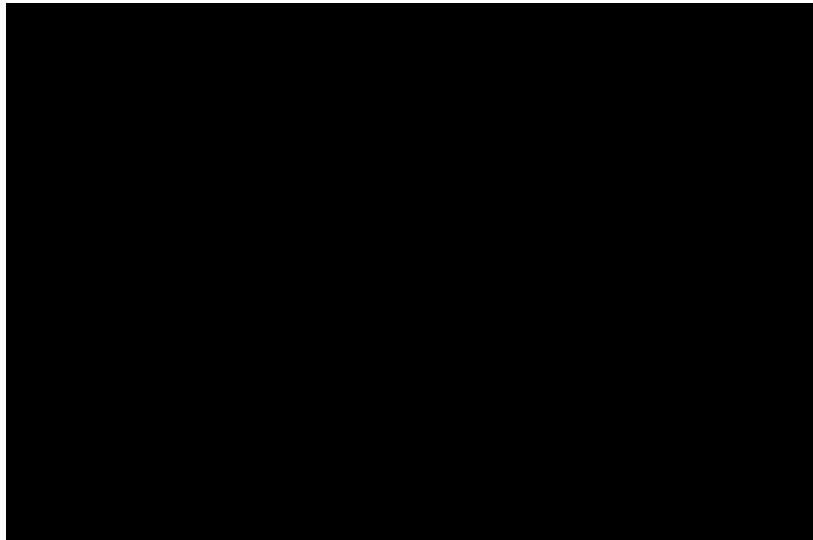


Figura 2-5: Balanço de forças durante o rolamento.

$$F_R = \mu_R F_N \quad (2.30)$$

A resistência ao rolamento é chamada de atrito de rolamento e geralmente se apresenta em ordens de grandeza extremamente baixas, como para materiais de dureza elevada, em que são encontrados na literatura valores da ordem de 0,001 (ZHOU, 1999). De acordo com o autor, um sólido que rola sem escorregar num plano horizontal vai progressivamente ceder energia ao meio no qual se encontra em contato. Além da resistência do ar, verifica-se também o atrito de rolamento causado pelas deformações plásticas sofridas pela superfície e pelo material granular, e de forças de adesão, que podem surgir a depender dos materiais envolvidos no contato. Desta forma, a principal diferença entre o atrito estático



e o atrito de rolamento é que, quando o atrito é estático, ocorre a dissipação de energia mecânica em calor, enquanto que no atrito de rolamento é observada a presença de deformações plásticas no material (ZHOU, 1999).

Em sistemas físicos reais, a perda de energia devido ao rolamento é dada por dois tipos de mecanismos de dissipação. No primeiro mecanismo, a dissipação de energia ocorre no ponto de contato (microdeslizamento, viscoelasticidade, plasticidade, adesão superficial, etc.). Já no segundo mecanismo, os efeitos da forma promovem o aparecimento da força resistiva. A primeira dessas fontes de dissipação é de grande preocupação em uma ampla gama de aplicações de engenharia, tais como transporte rodoviário e ferroviário, transporte através de correias transportadoras e elementos de rolamento. Em um material granular, esses mecanismos podem ser significativos, no entanto, em uma situação prática, os efeitos de dissipação energética devido à forma das partículas exercem influência mais significativa sobre o atrito de rolamento.

O uso do princípio de rolamento em detrimento do deslizamento tem como finalidade a obtenção de baixos coeficientes de atrito, sendo assim amplamente aplicado em diversas situações práticas, como pode ser verificado em rodas e em mancais de rolamento (LI *et al.*, 2016).

Segundo Balevičius *et al.* (2012), o comportamento de rolamento pode ser descrito por uma abordagem padrão que combina o torque de rolamento com o ângulo de rotação. Realisticamente, a dinâmica do rolamento puro de corpos deformáveis é muito complexa e não é claramente compreendida, apesar desse comportamento ter sido extensivamente estudado tanto por abordagens teóricas quanto experimentais.

Fukumoto *et al.*, (2013) realizaram simulações de DEM para investigar os efeitos do coeficiente de rolamento no comportamento de materiais granulares. Os autores verificaram que o coeficiente de atrito de rolamento afeta o arranjo das partículas durante o empacotamento. Além disso, foi também observado que o atrito de rolamento afetou significativamente a distribuição de tensões entre as partículas, alterando a estabilidade do leito granular.

Markauskas e Kačianauskas (2006) modelaram grãos de arroz elipsoidais em uma simulação de DEM que incluiu o atrito de rolamento. A partir deste trabalho, eles provaram que, se o atrito de rolamento for ignorado ou ajustado a zero, mesmo com um elevado coeficiente de atrito estático, o modelo não pode prever corretamente o ângulo de repouso, mas produz um ângulo de repouso inferior ao medido. Além disso, observou-se que à



medida que os coeficientes de atrito estático e de rolamento aumentavam, o ângulo de repouso também aumentava, devido ao incremento da taxa de dissipação da energia cinética e às modificações na distribuição das tensões intergranulares (ZHU e YU, 2006).

Geralmente, o atrito de rolamento é acoplado ao atrito de deslizamento, sendo um fenômeno muito complexo, no qual o papel dos parâmetros de rolamento ainda se apresenta em discussão na literatura (BALEVIČIUS *et al.*, 2012). Por conseguinte, é necessária a calibração dos parâmetros dos modelos de contato, através de trabalhos experimentais e a partir de simulações numéricas, a fim de descrever os fenômenos exibidos pelos materiais granulares em nível macroscópico.

Ângulo de repouso estático

O ângulo de repouso é um importante parâmetro macroscópico que reflete a estabilidade do empacotamento granular, sendo assim, relacionado a muitos fenômenos, incluindo avalanche (HUANG *et al.*, 2013; NOROUZI *et al.*, 2015), estratificação (BOAC *et al.*, 2010; SANTOMASO *et al.*, 2004) e segregação (KHAN, 2006; LIAO, 2019), e é, portanto, um importante tema de pesquisa.

Diversas metodologias para a obtenção do ângulo de repouso são encontradas na literatura (Al-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018). Os diferentes tipos (estático e dinâmico) e as descrições do ângulo de repouso estão associados a aplicações específicas e ao comportamento correspondente, ou seja, fluidez, atrito, etc. Portanto, os objetivos de estudar e determinar o ângulo de repouso de qualquer material granular deve ser predeterminados para que uma definição apropriada e relevante possa ser adotada.

Fisicamente, o ângulo de repouso pode ser definido como o ângulo que diferencia a transição entre o material granular e o meio que o circunda (ROESSLER e KATTERFELD, 2018). A partir desta definição, uma das metodologias mais utilizadas na determinação do ângulo de repouso é o declive acentuado do material granular não confinado medido a partir do plano horizontal, no qual o material pode ser amontoado sem colapso (Al-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018).

Numerosos fatores, como o ângulo de atrito interno, tamanho e forma do grão, densidade, teor de umidade, rugosidade da base na qual o material é amontoado, velocidade de execução da metodologia de medição, massa e morfologia do material, podem afetar o ângulo de repouso. Deste modo, por ser uma resposta de relativa fácil obtenção, o ângulo de repouso é utilizado como indicador de coesão dos materiais granulares e afeta a



escoabilidade dos mesmos (Al-HASHEMI e Al-AMOUDI, 2018), sendo relacionado à fluidez conforme mostra a Tabela 2.3.

Tabela 2.3: Classificação de fluidez granular (Ai *et al.*, 2011b).

Descrição	Ângulo de repouso
Muito fluído	$<30^\circ$
Fluído	$30-38^\circ$
Razoavelmente fluído	$38-45^\circ$
Coesivo	$45-55^\circ$
Muito Coesivo	$>55^\circ$

Analogamente à definição do ângulo de repouso, o método de medição deve ser selecionado com base em objetivos predefinidos e para um material de aplicação específica. Embora existam diferentes métodos e diretrizes disponíveis na literatura, estes não são padronizados (COETZEE, 2016). A seguir, são apresentados alguns métodos relevantes na obtenção do ângulo de repouso de materiais granulares (Figura 2-6).

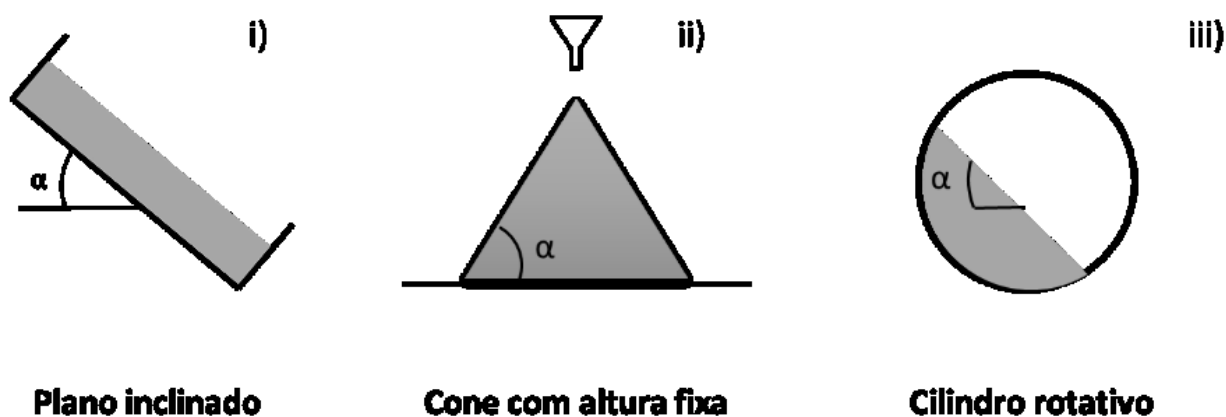


Figura 2-6: Metodologias para determinação de ângulo de repouso (Adaptado de COETZEE, 2016).

i) Método do plano inclinado

O método do plano inclinado é adequado para materiais com diâmetros superiores a 10 mm, sem que haja forças de coesão significativas. O plano deve conter abas laterais



transparentes. Assim, o material granular é inserido sobre o plano, que é inclinado gradualmente a uma taxa de $18^\circ/\text{min}$. O ângulo de repouso é então medido como o ângulo de inclinação em que o material começa a deslizar (AL-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018).

ii) Método de funil fixo

No método do funil fixo, os materiais granulares são inseridos em um funil a uma altura especificada sobre uma base selecionada com propriedades de rugosidade conhecidas. O funil é fixo ou levantado lentamente enquanto a forma cônica do monte de material está se formando, para minimizar o efeito das partículas em queda. Após cessar o escoamento das partículas, o ângulo de repouso formado pode ser então mensurado (AL-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018).

iii) Método do cilindro/tambor rotatório

O método do cilindro/tambor rotatório é usado para determinar o ângulo de repouso dinâmico, que geralmente é cerca de 3 a 10° superior ao ângulo de repouso estático e, frequentemente, está relacionado aos fenômenos de segregação de materiais granulares. Neste método, os materiais granulares são colocados em um cilindro que tem um lado transparente. Em seguida, o cilindro é rotacionado em uma velocidade fixa fazendo com que ocorra a movimentação dos materiais granulares, até que seja atingido um ângulo máximo, denominado ângulo de repouso dinâmico (AL-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018).

Segundo Dury *et al.* (1998), o ângulo de repouso dinâmico nas extremidades do cilindro rotatório é 5° maior que o ângulo dinâmico de repouso no centro do equipamento, devido ao efeito das paredes terminais. Além disto, Yang *et al.* (2003) notaram um aumento linear no ângulo de repouso dinâmico à medida que a velocidade de rotação do cilindro aumentava. Os autores verificaram também que o ângulo de repouso dinâmico aumentou quando a relação entre o tamanho da partícula e o tamanho do tambor foi intensificada, enquanto que a velocidade de rotação e o grau de enchimento tiveram efeitos menos expressivos nos resultados.

Além dos métodos clássicos anteriormente descritos para determinação do ângulo de repouso, métodos numéricos como o DEM (SOLTANBEIGI *et al.*, 2018), Figura 2-7, e metodologias mais avançadas, tais como, tomografia de capacitância elétrica (ECT) e a ressonância magnética (MRI) vêm sendo aplicadas no estudo do ângulo de repouso.

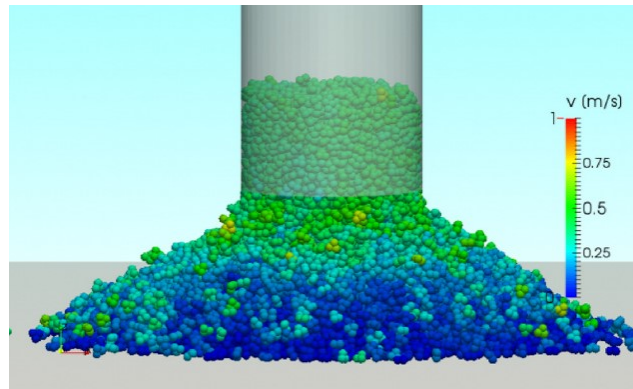


Figura 2-7: Avaliação do ângulo de repouso utilizando o método dos elementos discretos. (Adaptado de AL-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018).

ZHANG *et al.*(2018) estudaram numericamente o ângulo de repouso de partículas de vidro esféricas utilizando o DEM e experimentalmente usando o método de funil. A partir dos resultados obtidos, os autores desenvolveram uma correlação empírica para o ângulo de repouso e a validaram com os resultados de seus experimentos. Eles discorrem que o ângulo de repouso é afetado pelo atrito de rolamento das partículas, pelo diâmetro do recipiente e pelo tamanho da partícula, enquanto não é afetado pela razão de Poisson, módulo de Young ou coeficiente de restituição. Os autores também apresentam também uma correlação preditiva para o ângulo de repouso a partir do tamanho da partícula que foi empregada em uma equação de correção para obter o ângulo de repouso com um erro máximo de estimativa de 3°. Os autores concluíram que, o ângulo de repouso estático está positivamente correlacionado com os coeficientes de atrito estático e de rolamento, tanto partícula-partícula quanto partícula-parede, enquanto é influenciado negativamente com o tamanho da partícula.

Estudos a respeito do ângulo de repouso indicam uma forte dependência com as propriedades dos materiais e com a interação entre eles, como o coeficiente de atrito de deslizamento (AI *et al.*, 2011), o coeficiente de atrito de rolamento (AI *et al.*, 2011; WANG *et al.*, 2018), a densidade das partículas (LIAO, 2019) e outras características de partículas como o tamanho (GRASSELLI e HERRMANN, 1997) e a forma (HÖHNER *et al.*, 2014; FRIEDMAN e ROBINSON, 2002).

De acordo com Roessler e Katterfeld (2018), o comportamento de um conjunto de partículas (comportamento *bulk*) é dependente não apenas da forma e tamanho, como também das propriedades de interações entre as partículas, ou seja, os parâmetros de interação, como os coeficientes de atrito, desempenham um papel crítico sobre



comportamento granular. No passado, várias técnicas de modelagem foram usadas para investigar o comportamento de partículas em meios granulares, incluindo o método de Monte Carlo (MC) e o método dos elementos discretos (DEM) (AL-HASHEMI e AL-AMOUDI, 2018). Entre essas técnicas, o DEM é provavelmente o mais realista, uma vez que leva em conta não apenas os fatores geométricos, mas também as forças envolvidas na formação do ângulo de repouso.

Rotação e translação são os estados primários de movimento de uma partícula. As fricções de deslizamento e de rolamento fornecem um mecanismo efetivo para controlar os dois movimentos e determinar a estabilidade de contato em um leito granular. Portanto, estes têm efeitos significativos no ângulo de repouso ao avaliar o efeito do aumento do coeficiente de atrito de rolamento (HÖHNER *et al.*, 2014).

2.3. Materiais e métodos

Neste tópico serão apresentados os aparatos e as metodologias utilizadas para a determinação experimental e calibração dos parâmetros de interação do material particulado (parâmetros numéricos). Essas propriedades correspondem à parâmetros do modelo matemático, aplicando a abordagem Lagrangeana, que foi utilizado nesse estudo.

Os materiais utilizados nesse trabalho foram os grãos de soja e esferas de vidro, de poliacetal e de aço (Figura 2-8) e suas propriedades físicas são descritas na Tabela 2.4.

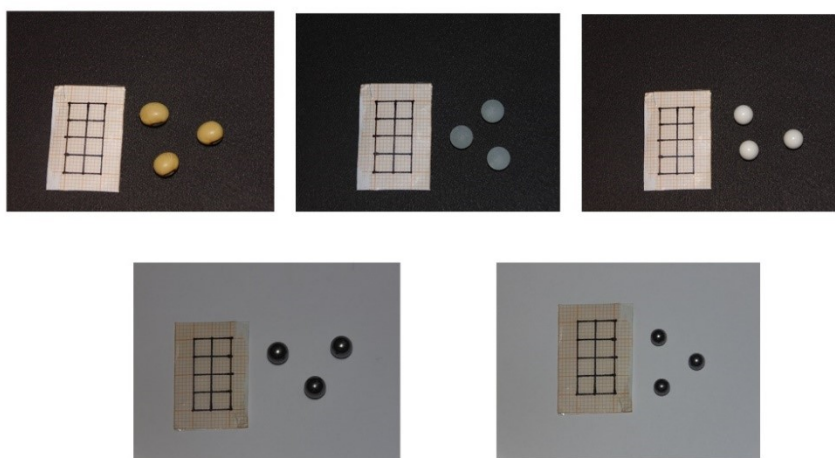


Figura 2-8: Materiais granulares: (a) Soja; (b) Vidro; (c) Poliacetal; (d) Aço 6; (e) Aço 4.

Tabela 2.4: Propriedades físicas dos materiais granulares.

Material	Diâmetro (mm)	Densidade (kg/m³)
(a) Soja	6,64±0,07	1157,46±2,68
(b) Vidro	6,51±0,10	2371,27±70,12
(c) Poliacetal	6,14±0,05	1640,62±43,85
(d) Aço 6	6,04±0,03	7576,21±91,00
(e) Aço 4	4,58±0,01	7130,30±58,31

Todos os experimentos foram realizados no Laboratório de Sistemas Particulados (LSP) da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia (FEQUI/UFU).



Coefficiente de restituição

Para a determinação do coeficiente de restituição, foi utilizado o aparato experimental apresentado na Figura 2-9, o qual era composto por uma chapa de teste (1), um dispositivo de soltura, composto por uma haste metálica com base quadrada (2) e na parte superior do dispositivo, uma bomba de vácuo (3) foi interligada com o intuito de evitar perturbações do sistema durante o lançamento das partículas.

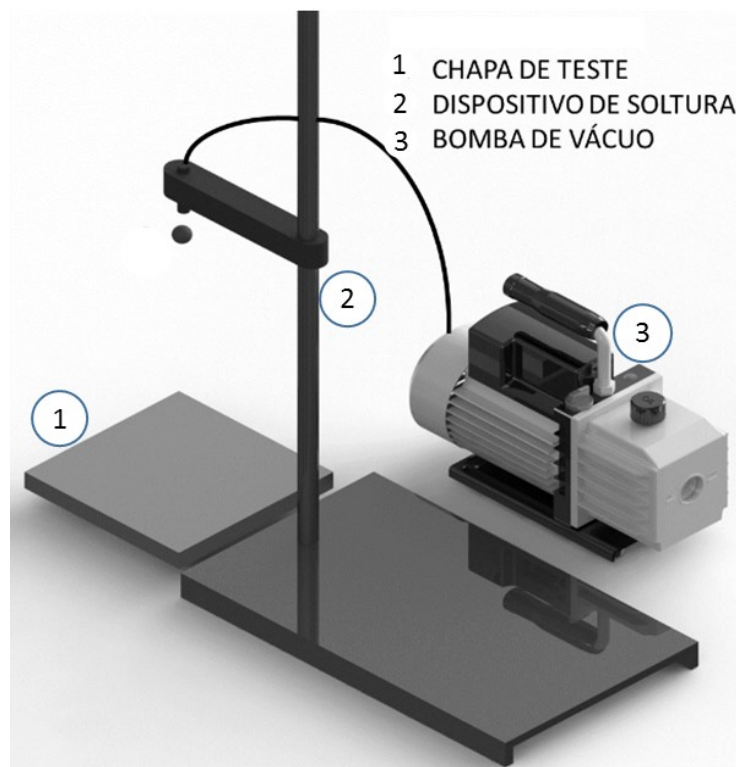


Figura 2-9:Aparato experimental para a determinação do coeficiente de restituição.

Deste modo, ao desligar a bomba de vácuo, a partícula de vidro era abandonada em queda livre a uma altura fixa de 50 mm (h_1), colidindo diretamente com chapas de aço inox e chapas de vidro com diferentes espessuras, conforme apresentado na Tabela 2.5. A altura de soltura de 50 mm foi selecionada com a finalidade de evitar o deslocamento lateral das partículas durante o trajeto, e minimizar os efeitos dissipativos promovidos pela força de arraste.



Tabela 2.5: Espessuras das chapas de aço e vidro para a avaliação da restituição.

L (mm)	Aço	Vidro
1,0	X	
1,2	X	
2,0	X	
3,0	X	X
4,0	X	X
5,0		X
6,0	X	X
8,0		X
10,0	X	X
12,0	X	X
15,0		X
19,0		X

Com o auxílio de uma câmera de alta velocidade, com capacidade de captura de 500 quadros por segundo (modelo Fastec IL5), todos os testes experimentais foram gravados e submetidos à análise de imagem utilizando o software *Meazure* (disponibilizado em <http://www.cthing.com/Meazure.asp> de forma gratuita), que permitiu a determinação da altura máxima das partículas (h_2) obtida após a colisão com as placas. Deste modo, os valores dos coeficientes de restituição foram determinados a partir da Equação 2.16, sendo a análise realizada em quintuplicata.

Em posse dos valores de e_p , foi proposta a realização da técnica de regressão utilizando redes neurais artificiais (epANN). O código criado para formação da rede foi escrito em linguagem Python, sendo este responsável pela otimização do número e seleção do tipo de neurônios aplicados à rede.

Coefficiente de atrito estático

Para a determinação do coeficiente de atrito estático, foi utilizado o aparato experimental conforme apresentado na Figura 2-10.

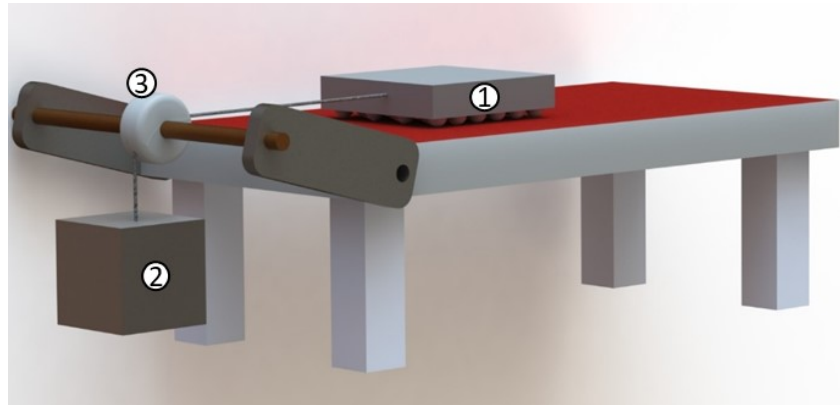


Figura 2-10: Aparato experimental para determinação do coeficiente de atrito estático

Os experimentos foram iniciados a partir da utilização de um corpo rígido (1), no qual as partículas eram coladas na base, de forma que ficassem em contato com a superfície de análise. Com auxílio de um fio inextensível e de massa desprezível, o corpo rígido era interligado a um corpo de massa variável (2) através de um sistema de roldana fixa (3). Ao elevar a massa do corpo 2 (m_2), através da adição de um fluido, a força peso (P_2) tracionava o fio. No momento em que ocorria o equilíbrio entre a força peso e a força de resistência ao movimento do sistema (força de atrito estático), ou seja, quando o sistema apresentava pequenos deslocamentos, a massa do corpo 2 (m_2) era aferida e a partir da utilização da Equação 2.29, determinava-se o coeficiente de atrito estático. Este coeficiente foi avaliado em quintuplicata, tanto para os grãos de soja quanto para as esferas de vidro, poliacetal e de aço diferentes tamanhos, em superfícies com diferentes rugosidades, conforme apresentado na Tabela 2.6.

Tabela 2.6: Rugosidade das superfícies para avaliação do atrito estático.

Superfície	Rugosidade (m)
Lixa P40	$4,25 \times 10^{-4}$
Lixa P60	$2,69 \times 10^{-4}$
Lixa P80	$2,01 \times 10^{-4}$
Lixa P100	$1,62 \times 10^{-4}$
Lixa P120	$1,25 \times 10^{-4}$
Lixa P150	$1,00 \times 10^{-4}$
Aço	$1,69 \times 10^{-6}$
Vidro	$1,63 \times 10^{-6}$



A partir dos resultados de μ_s , foi realizada uma regressão não-linear utilizando redes neurais artificiais (msANN).

Coefficiente de atrito de rolamento

Assim como aplicado na determinação do atrito estático, o coeficiente de atrito de rolamento foi determinado para diferentes superfícies (Tabela 2.6). A metodologia para determinação do coeficiente de atrito de rolamento consistiu na utilização de um dispositivo de lançamento apoiado em uma superfície plana (100x1000 mm), em que a partícula era submetida ao movimento de rolamento. O ponto de inserção da partícula apresentava altura (h_0) de 0,5 cm e o dispositivo de soltura possuía comprimento (L) de 13,5 cm (Figura 2.11), o que promovia um ganho gradativo de velocidade da esfera, que se encontrava inicialmente em repouso (ASTM - G194-08, 2013).

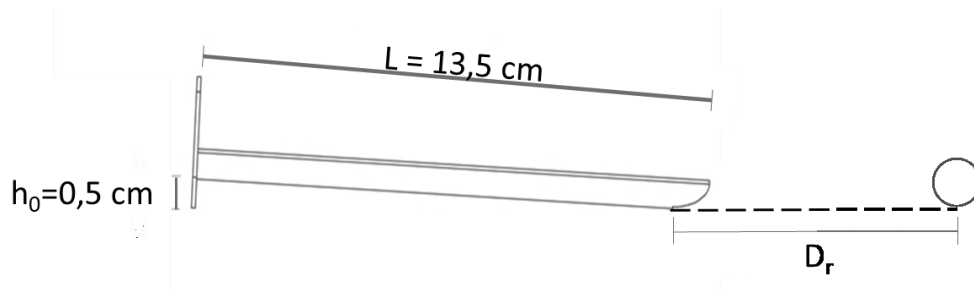


Figura 2-11: Aparato experimental para determinação do coeficiente de atrito de rolamento.

Após percorrer todo o dispositivo, a esfera entrava em contato com a superfície plana, perdendo assim energia durante o trajeto desenvolvido retornando ao repouso. Deste modo, era então medida, com auxílio do software *Meazure*, a distância percorrida pela esfera a partir da base do dispositivo de soltura (D_r), e calculado o coeficiente de atrito de rolamento (μ_r) a partir da Equação 2.31. Vale ressaltar que as medidas foram realizadas em quintuplicata, para garantir a reprodutibilidade do experimento.

$$\mu_r = \frac{h_0}{D_r} \quad (2.31)$$

A metodologia para a determinação do coeficiente de atrito de rolamento tanto partícula-parede quanto partícula-partícula foram conduzidas da mesma maneira. Observa-



se, neste caso, que para ambos os tipos de interação os contatos ocorrem de forma pontual. Assim, para a determinação do coeficiente de atrito partícula-parede, foram utilizadas uma chapa metálica revestida por lixas, a fim de representar a superfície lateral do tambor, e chapas de vidro e de aço, responsáveis por prever o atrito de rolamento entre as superfícies frontal e traseira do tambor, bem como prever a resistência ao rolamento entre as partículas.

Com o intuito de estimar valores de μ_r , foi criada uma rede neural (mrANN) em linguagem Python.

Ângulo de repouso estático

Na determinação do ângulo de repouso estático, foi utilizado o aparato experimental exposto na Figura 2-12. O equipamento consistia em duas seções divididas por uma prateleira fixa (1) e por abas laterais móveis (2), que eram interligadas a partir de uma haste. Ressalta-se que o aparato apresentava parede frontal em vidro com intuito de facilitar a visualização do resultado. As dimensões do aparato experimental foram baseadas no trabalho proposto por Zhou *et al.* (2001).

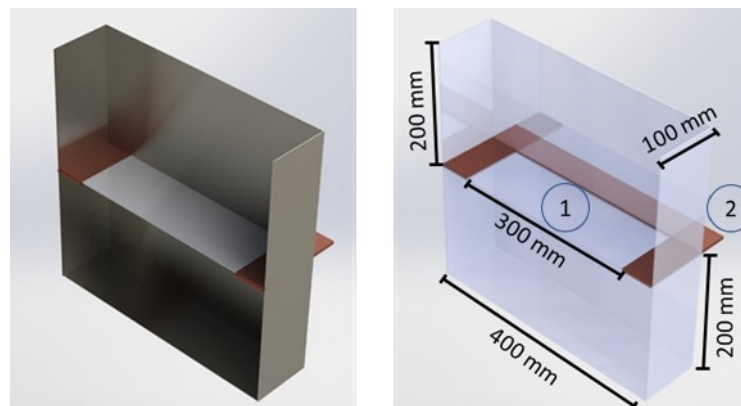


Figura 2-12: Aparato experimental para determinação do ângulo de repouso estático.

A metodologia aplicada para a determinação do ângulo de repouso estático consistia na disposição inicial do material granular na seção superior do dispositivo, até que metade da altura desta seção fosse atingida (Figura 2-12). Após a inserção do material granular, as abas laterais móveis eram retiradas simultaneamente, possibilitando o escoamento das partículas que formavam uma pilha na parte superior do leito e duas pilhas na parte inferior. Após cessar a movimentação do material granular, eram então aferidos os ângulos de repouso formados pelo material granular, tanto na seção superior do dispositivo quanto na



seção inferior (Figura 2-13). O aferimento dos ângulos de repouso superior e inferior foram realizados em quintuplicata.

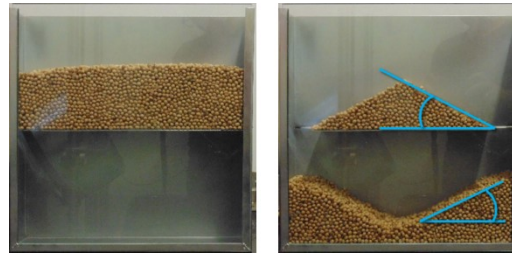


Figura 2-13: Medida experimental do ângulo de repouso estático.

Com o objetivo de avaliar de maneira mais criteriosa os efeitos das propriedades físicas, como tamanho e densidade da partícula, bem como as propriedades de interação, como o coeficiente de restituição, atrito estático e de rolamento tanto partícula-partícula quanto partícula-parede, a metodologia do ângulo de repouso foi reproduzida numericamente, utilizando computadores Xeon, possuindo 24 núcleos de processamento, a partir da aplicação do método dos elementos discretos (DEM), com os parâmetros de entrada variando segundo a um planejamento composto central fracionário de resolução IV, conforme apresentado na Tabela 2.7, resultando em 81 simulações.

Tabela 2.7: Planejamento composto central para avaliação numérica do ângulo de repouso.

Variável codificada	Níveis				
	$-\alpha$ (-2,8284)	-1	0	1	$+\alpha$ (+2,8284)
d (mm)	2,95	4	5	6	7,05
ρ (kg/m³)	1891	4000	6000	8000	10109
μ_{spp} (-)	0,14	0,3	0,45	0,6	0,76
μ_{rpp} (-)	0,014	0,03	0,045	0,06	0,076
μ_{spw} (-)	0,14	0,3	0,45	0,6	0,76
μ_{rpw} (-)	0,014	0,03	0,045	0,06	0,076
e_{pp} (-)	0,34	0,5	0,65	0,8	0,96
e_{pw} (-)	0,34	0,5	0,65	0,8	0,96



Após a realização das simulações Lagrangeanas, foi realizada uma regressão não linear da variável resposta ângulo de repouso estático, com o intuito de quantificar a influência de cada uma das variáveis independentes apresentadas na Tabela 2.7. A regressão foi realizada de duas maneiras. No primeiro caso, os dados foram ajustados a uma equação de regressão, avaliando os efeitos lineares, quadráticos e a interação entre as variáveis. Como alternativa ao ajuste pela equação de regressão, utilizou-se novamente uma rede neural artificial “ReposeAngleANN”.



2.4. Resultados e discussão

Neste tópico serão apresentados os resultados obtidos a partir da aplicação das metodologias para a determinação experimental dos parâmetros DEM: coeficientes de restituição, de atrito estático e de atrito de rolamento.

Coeficiente de restituição

Com o objetivo de determinar o coeficiente de restituição de partículas de aço de 4 mm, vidro, aço de 6 mm e poliacetal, sobre os materiais utilizados no tambor rotatório, foram realizadas medidas empregando chapas de vidro e de aço com diferentes espessuras (Tabela 2.5) e os resultados são apresentados na Figura 2-14.

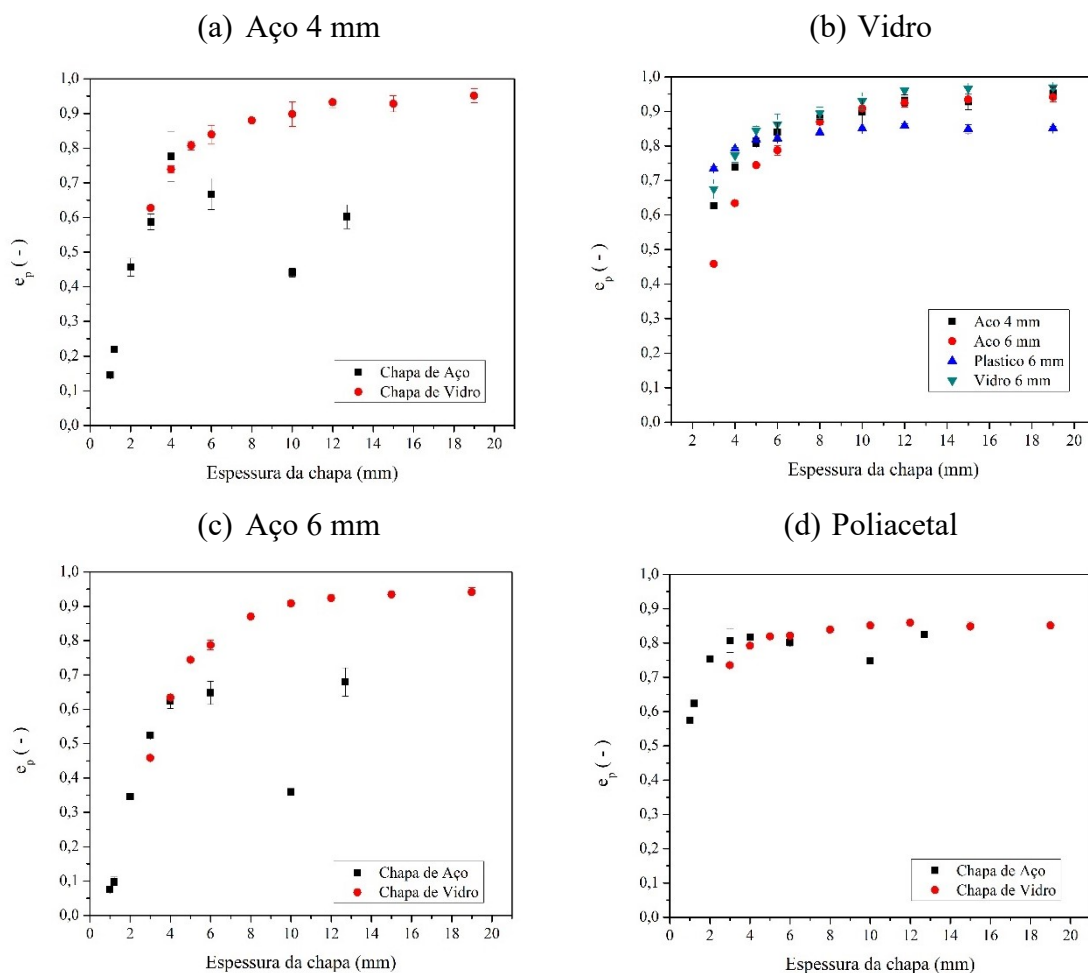


Figura 2-14: Coeficiente de restituição do Aço 4 (a); Vidro (b); Aço 6 (c) e do Poliacetal (d).



A partir da análise da Figura 2-14, nota-se que com o aumento da espessura das placas de vidro e de aço, os valores dos coeficientes de restituição tendem a crescer de maneira assintótica, para todas as partículas avaliadas. Assim, como relatado por Sondergaard *et al.* (2008b) e Wang *et al.* (2015), este comportamento está relacionado ao fato de que, quando a espessura da placa é suficientemente pequena para que as ondas de choque consigam se propagar até a superfície oposta da placa e retornar ao ponto de impacto antes da finalização do mesmo, sucedem-se então interferências destrutivas, promovendo a redução do coeficiente de restituição. Este resultado mostra a importância de avaliar o efeito do material e da espessura da parede nas metodologias de medida do coeficiente de restituição.

Além da visualização do comportamento assintótico através dos gráficos, notam-se também reduções no valor do coeficiente ao se utilizar chapa de aço com espessura próxima a 10 mm. Este fenômeno está relacionado ao fato de que as interferências destrutivas se apresentam em forma de ondas de choque, sendo sua frequência e amplitude dependente dos materiais envolvidos no fenômeno da colisão. Neste caso, credita-se uma maior magnitude na redução do coeficiente, ao fato de que no momento que as ondas de choque retornam ao ponto de colisão, estas se encontram em amplitudes negativas e de elevada intensidade, ou seja, próximo ao vale das ondas de choque.

Em seu trabalho, Sondergaard *et al.* (2008b) apresentam relações para a determinação da velocidade de ondas de choque (c) (Equação 2.32) e do tempo de contato partícula-parede (T_c) (Equação 2.33), em que ambos mostram-se dependentes das propriedades do material.

$$c = k \left[\frac{E_p}{\rho_p} \right]^{1/2} \quad (2.32)$$

$$T_c = 3,21 \left[(1 - \sigma_s^2) + (1 - \sigma_p^2) \cdot \frac{E_s}{E_p} \right]^{2/5} \cdot r \left(\frac{E_s}{\rho_s} \right)^{2/5} (V_i)^{1/5} \quad (2.33)$$

$$L_c = \frac{2c \cdot T_c}{kR} \quad (2.34)$$



sendo k a constante da onda e igual a 0,57, V_i a velocidade de impacto (1 m/s), σ_s e σ_p as razões de Poisson da partícula e da chapa, respectivamente, E_s e E_p os módulos de elasticidade da partícula e da chapa, respectivamente, e r o raio da partícula.

Aplicando as relações aos materiais em estudo, observa-se que os comprimentos críticos (L_c) (Equação 2.34) das chapas de aço e de vidro se encontram próximos a 11 e 15 mm, respectivamente, corroborando com a explicação a respeito da interferência destrutiva das ondas de choque em espessuras próximas à crítica, principalmente no caso da chapa de aço.

Na Figura 2-15 é apresentada uma comparação entre o comportamento do coeficiente de restituição dos diferentes materiais avaliados para a chapa de aço (a) e para a chapa de vidro (b).

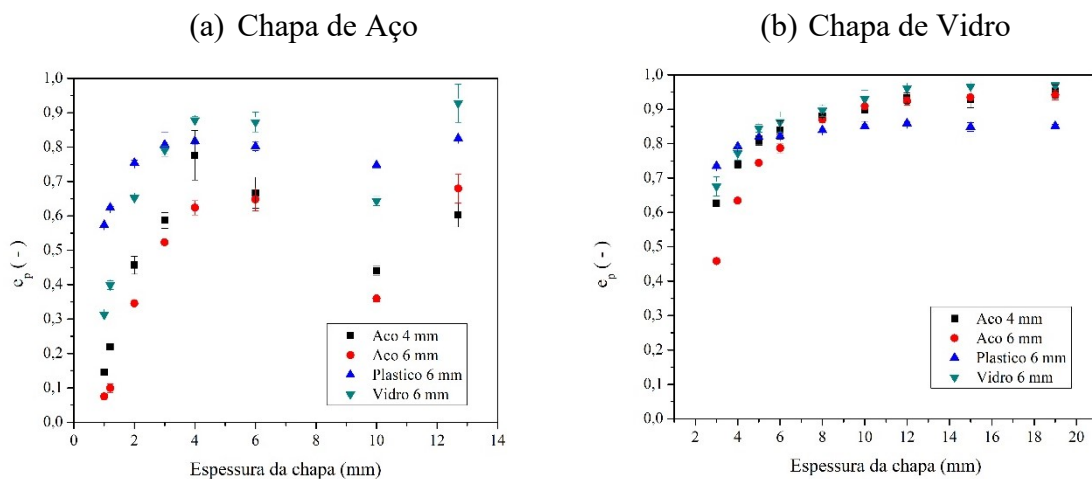


Figura 2-15: Influência do material granular sobre o coeficiente de restituição em diferentes superfícies.

A partir da análise destas figuras, é possível verificar que, para a chapa de vidro o comportamento foi monotônico e assintótico (Figura 2-15.b) em todo o intervalo de espessura avaliado, independente do material granular que promovia a colisão. Entretanto, ao analisar o comportamento do coeficiente de restituição na colisão das partículas com a chapa de aço, é observado a redução do seu valor para espessura de 10 mm, sendo esta proporcional à quantidade de movimento transferida durante o choque, ou seja, partículas de maior diâmetro e maior densidade foram afetadas de maneira mais intensa pela perturbação das ondas de choque, fato este justificado pela proporcionalidade entre a intensidade de colisão e a amplitude das ondas de choque.



Para a aplicação da simulação numérica Lagrangeana presente no tópico do ângulo de repouso estático e nos próximos capítulos, o valor do coeficiente de restituição utilizado tanto para as interações entre partículas, quanto para as interações entre partículas e paredes são apresentadas na Tabela 2.8.

Tabela 2.8: Coeficientes de restituição obtidos experimentalmente para aplicação da abordagem numérica Lagrangeana.

Material	e_{pp}	Parede lateral	Parede terminal
		(aço 2 mm)	(vidro 5 mm)
		e_{pw}	e_{pw}
Aço 4 mm	0,77±0,07	0,45±0,03	0,81±0,01
Vidro	0,86±0,03	0,65±0,01	0,84±0,01
Aço 6 mm	0,65±0,03	0,34±0,01	0,74±0,01
Poliacetel	0,90±0,01	0,75±0,01	0,82±0,01

Em seu trabalho, Wang *et al.* (2015) determinaram valores de coeficiente de restituição para grãos de milho em superfícies planas na faixa de 0,7 a 0,9, enquanto Weir e Tallon (2005) ao estudar o coeficiente de restituição entre partículas, avaliando os impactos de baixa velocidade, determinaram valores próximos a 0,7. Marinack *et al.* (2011), avaliaram o impacto de esferas de polibutadieno, aço, cromo e tungstênio sobre superfícies planas de aço, e obtiveram valores de coeficientes de restituição variando entre 0,55 a 0,86. Dessa forma, os resultados obtidos neste trabalho encontram-se de acordo com os observados na literatura.

Na Figura 2-16 são apresentados os gráficos de coeficiente de restituição da partícula de aço 4 em função das espessuras das chapas de vidro (Figura 2-16a) e de aço (Figura 2-16b), comparando-os aos valores obtidos a partir da correlação proposta por Zener (Equação 2.20).

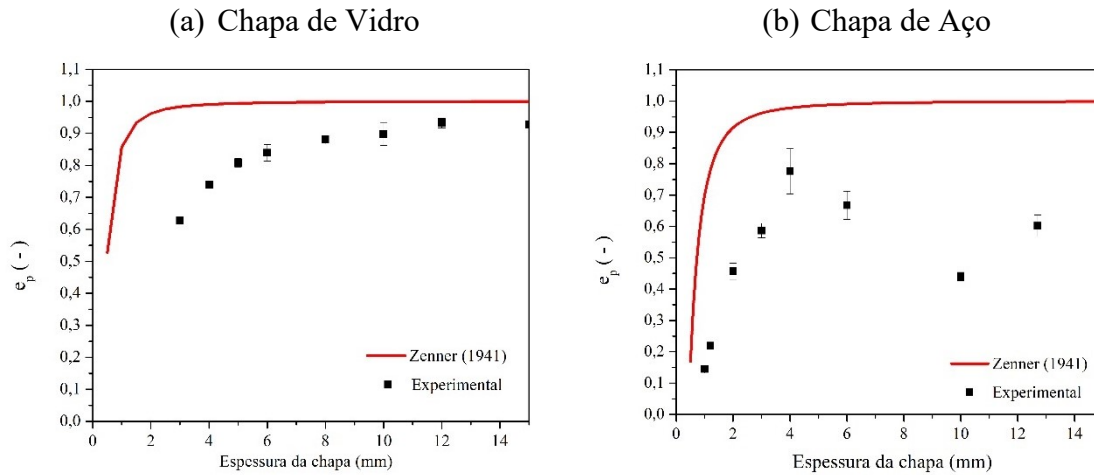


Figura 2-16: Comparação entre restituição experimental com o modelo proposto por Zener (1941).

Verifica-se, através da Figura 2-16, que os valores dos coeficientes de restituição experimentais e aqueles calculados pela correlação (Equação 2.22) apresentaram comportamentos similares. No entanto, os valores de coeficientes calculados foram superiores aos medidos experimentalmente. Isto ocorre, pois, a equação proposta por Zenner (1941) não leva em consideração todas as formas de dissipação de energia, como a deformação plástica e, por isso, os valores de e_p resultantes desta equação são superestimados.

Com a finalidade de estimar o coeficiente de restituição a partir das propriedades físicas do material particulado e das superfícies de impacto, a rede neural artificial, denominada “epANN” (Apêndice 5), foi aplicada ao estudo. A otimização da rede resultou na utilização de 8 neurônios do tipo *Logistic* (Equação 2.35), apresentando um coeficiente de correlação de 0,98, indicando que sua utilização é satisfatória para a determinação do e_p .

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2.35)$$



Coefficiente de atrito estático

A determinação do coeficiente de atrito estático foi realizada utilizando superfícies de diferentes rugosidades e seu resultado é apresentado na Tabela 2.9.

A partir da análise da Figura 2-17, é possível observar que, conforme esperado, o aumento da rugosidade promove a intensificação do μ_s . Isso ocorre uma vez que, ao elevar a rugosidade superficial, maiores obstáculos precisam ser transpostos para que a partícula possa entrar em movimento. Além disso, pode-se notar que a elevação do coeficiente se deu de maneira assintótica, apresentando diferentes patamares ao modificar o material granular.

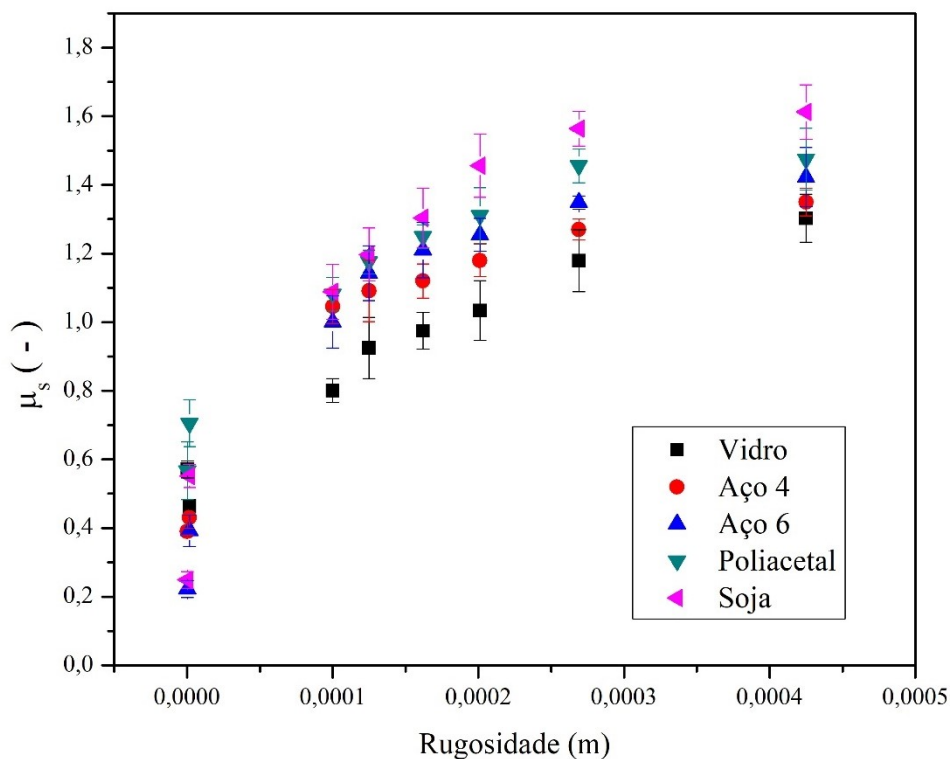


Figura 2-17: Influência da rugosidade sobre o coeficiente de atrito estático.

Ao comparar os valores do coeficiente de atrito estático numa mesma rugosidade superficial, conforme a Tabela 2.9, é possível observar que os maiores valores deste parâmetro foram obtidos para os grãos de soja. Este fato pode estar relacionado à presença de maiores rugosidades superficiais nos grãos de soja quando comparados aos materiais granulares produzidos industrialmente, que geralmente são polidos durante o processo de fabricação.



Tabela 2.9: Coeficientes de atrito estático mensurados experimentalmente.

Superfície	Rugosidade (m)	Vidro	Material Granular			
			Aço 6 mm	Aço 4 mm	Poliacetel	Soja
Lixa P40	$4,25 \times 10^{-4}$	$1,30 \pm 0,07$	$1,42 \pm 0,09$	$1,35 \pm 0,04$	$1,48 \pm 0,09$	$1,61 \pm 0,08$
Lixa P60	$2,69 \times 10^{-4}$	$1,18 \pm 0,09$	$1,35 \pm 0,02$	$1,27 \pm 0,03$	$1,46 \pm 0,05$	$1,56 \pm 0,05$
Lixa P80	$2,01 \times 10^{-4}$	$1,03 \pm 0,09$	$1,25 \pm 0,05$	$1,18 \pm 0,05$	$1,31 \pm 0,08$	$1,46 \pm 0,09$
Lixa P100	$1,62 \times 10^{-4}$	$0,98 \pm 0,05$	$1,21 \pm 0,08$	$1,12 \pm 0,05$	$1,25 \pm 0,03$	$1,30 \pm 0,09$
Lixa P120	$1,25 \times 10^{-4}$	$0,93 \pm 0,09$	$1,14 \pm 0,08$	$1,09 \pm 0,09$	$1,18 \pm 0,04$	$1,20 \pm 0,08$
Lixa P150	$1,00 \times 10^{-4}$	$0,80 \pm 0,03$	$1,00 \pm 0,08$	$1,05 \pm 0,05$	$1,08 \pm 0,05$	$1,09 \pm 0,08$
Aço	$1,69 \times 10^{-6}$	$0,46 \pm 0,02$	$0,22 \pm 0,05$	$0,39 \pm 0,01$	$0,57 \pm 0,07$	$0,25 \pm 0,03$
Vidro	$1,63 \times 10^{-6}$	$0,57 \pm 0,01$	$0,39 \pm 0,02$	$0,43 \pm 0,01$	$0,71 \pm 0,08$	$0,55 \pm 0,02$

Apesar das superfícies de vidro e aço apresentarem rugosidades semelhantes, verifica-se que os valores dos coeficientes de atrito estático apresentam magnitudes distintas ao avaliar cada partícula isoladamente. Assim, acredita-se que o atrito estático está relacionado não apenas à rugosidade da superfície e do material granular, mas também ao módulo de elasticidade do mesmo. Materiais que apresentam maiores módulos de elasticidade (E) tendem a se deformar com menor intensidade do que os materiais de menor módulo, influenciando no aumento μ_s . No trabalho realizado por Seifi e Abbasi (2015), bem como por Benabdallah (2007), foram avaliadas outras variáveis que possuem a capacidade de influenciar o coeficiente de atrito estático, dentre elas estão a temperatura e o módulo de elasticidade, corroborando com a análise realizada.

Para a aplicação da simulação numérica Lagrangeana presente no tópico do ângulo de repouso estático e nos próximos capítulos, os valores do coeficiente de atrito estático utilizados são apresentados na Tabela 2.10.



Tabela 2.10: Coeficientes de atrito estático obtidos experimentalmente para aplicação da abordagem numérica Lagrangeana.

Material	μ_{spp}	Parede lateral	Parede terminal
		(Lixa P80)	(Vidro)
		μ_{spw}	μ_{spw}
Aço 4 mm	0,39±0,01	1,18±0,05	0,46±0,02
Vidro	0,46±0,02	1,03±0,09	0,57±0,01
Aço 6 mm	0,22±0,05	1,25±0,05	0,39±0,02
Poliacetal	0,57±0,07	1,31±0,08	0,71±0,08
Soja	0,25±0,03	1,46±0,09	0,55±0,02

De modo semelhante ao realizado para o coeficiente de restituição, para estimação do coeficiente de atrito estático, a partir das propriedades do material granular e da superfície de análise, foi realizada uma regressão não linear aplicando a rede neural “msANN” (Apêndice 6). Esta rede neural é composta por uma camada e dois neurônios do tipo *Logistic* (Equação 2.35) apresentando r^2 de aproximadamente 0,96.



Coefficiente de atrito de rolamento

De modo semelhante ao realizado para o coeficiente de atrito estático, o atrito de rolamento também foi avaliado sobre superfícies de diferentes rugosidades e seus resultados são apresentados na Tabela 2.11.

Tabela 2.11: Coeficientes de atrito de rolamento mensurados experimentalmente.

Superfície	Rugosidade (m)	Material Granular			
		Vidro	Aço 6 mm	Aço 4 mm	Poliacetal
Lixa P40	$4,25 \times 10^{-4}$	$0,14 \pm 0,01$	$0,12 \pm 0,01$	$0,15 \pm 0,01$	$0,14 \pm 0,01$
Lixa P60	$2,69 \times 10^{-4}$	$0,10 \pm 0,01$	$0,08 \pm 0,01$	$0,10 \pm 0,01$	$0,10 \pm 0,01$
Lixa P80	$2,01 \times 10^{-4}$	$0,08 \pm 0,01$	$0,07 \pm 0,01$	$0,08 \pm 0,01$	$0,08 \pm 0,01$
Lixa P100	$1,62 \times 10^{-4}$	$0,08 \pm 0,01$	$0,06 \pm 0,01$	$0,09 \pm 0,02$	$0,10 \pm 0,01$
Lixa P120	$1,25 \times 10^{-4}$	$0,07 \pm 0,01$	$0,06 \pm 0,02$	$0,08 \pm 0,02$	$0,07 \pm 0,01$
Lixa P150	$1,00 \times 10^{-4}$	$0,07 \pm 0,01$	$0,04 \pm 0,01$	$0,08 \pm 0,01$	$0,07 \pm 0,01$
Aço	$1,69 \times 10^{-6}$	$0,01 \pm 0,01$	$0,01 \pm 0,01$	$0,01 \pm 0,01$	$0,01 \pm 0,01$
Vidro	$1,63 \times 10^{-6}$	$0,01 \pm 0,01$	$0,01 \pm 0,01$	$0,01 \pm 0,01$	$0,01 \pm 0,01$

Nota-se a partir da análise da tabela acima que, como esperado, a elevação da rugosidade superficial promoveu uma intensificação nos coeficientes de atrito de rolamento. Este comportamento também foi identificado por Cross (2015), que avaliou o efeito da rugosidade superficial e do diâmetro de esferas de elevada dureza, reportando coeficientes variando entre 0,001 a 0,1, mostrando que os resultados reportados neste trabalho encontram-se de acordo com os apresentados na literatura.

Além da verificação da influência da rugosidade sobre o atrito de rolamento, a partir da análise da Figura 2-18 dois comportamentos podem ser avaliados: o efeito do diâmetro e do material da partícula.

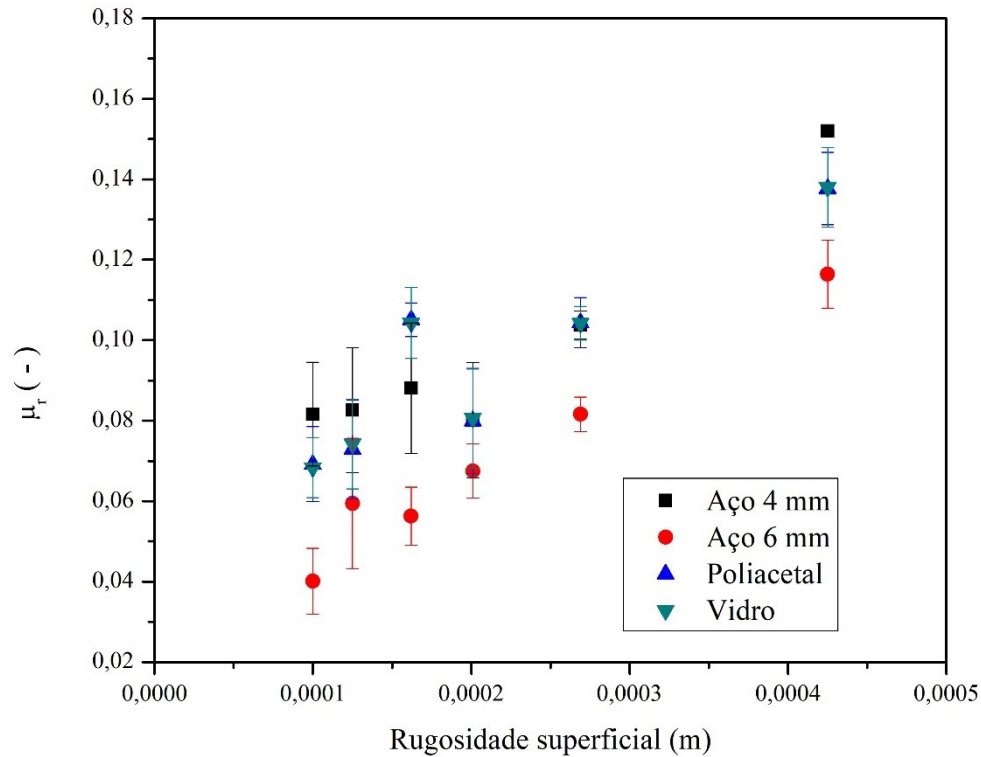


Figura 2-18: Influência da rugosidade sobre o coeficiente de atrito de rolamento.

Inicialmente avaliando o efeito do material granular, verifica-se que ao comparar materiais de mesmo diâmetro, as partículas que apresentavam menor módulo de elasticidade levaram a maiores valores coeficiente de atrito de rolamento (Figura 2-19.a). Este fenômeno está relacionado ao fato de que as deformações sofridas durante o movimento são inversamente proporcionais a este módulo, fazendo com que partículas mais deformáveis apresentem também maiores dissipações de energia. Utilizando como exemplo a superfície com rugosidade superficial de 1×10^{-4} m (P150), ao avaliar o μ_r foi observado valores de 0,04 para partículas de aço, cujo módulo de Young é de $1,8 \times 10^{11}$ Pa (ZHOU, 1999) e de 0,07 para partículas de poliacetal, cujo módulo de Young é de $2,3 \times 10^9$ Pa (ZHOU, 1999).

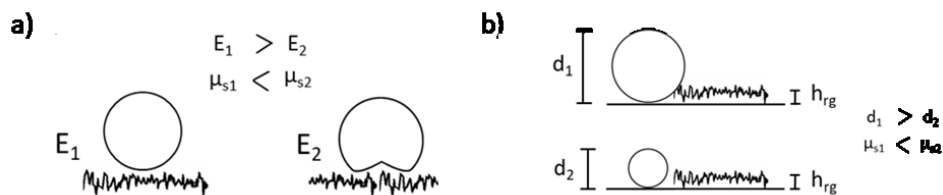


Figura 2-19: Representação esquemática do efeito do módulo de Young e da rugosidade relativa sobre o atrito de rolamento.



A influência das propriedades do material também já foi reportada em outros trabalhos na literatura, como o de Zhou (1999), no qual foi verificado que materiais que apresentavam maiores razões de Poisson conduziram a menores valores de atrito de rolamento. Já no trabalho de Mohamed e Gutierrez (2010), foram estudados os efeitos elásticos, dilatacionais e cisalhantes sobre os materiais granulares durante o movimento de rolamento, no qual foi verificado que a redução no módulo de Young do material granular promoveu a intensificação do atrito de rolamento.

Outro efeito que também pode ser visualizado na Figura 2-18, é a influência do diâmetro da partícula sobre o rolamento. Utilizando a superfície com rugosidade superficial de 1×10^{-4} m (P150), foi observado que partículas de aço 6 mm apresentaram coeficiente de atrito de rolamento de 0,04 enquanto que as partículas de aço 4 mm apresentaram um valor de 0,08. Este aumento do valor do coeficiente está relacionado ao fato de que, ao manter a rugosidade superficial, a rugosidade relativa (h_{rg}/d) será maior para as partículas de menor diâmetro, dificultando assim o movimento de rolamento (Figura 2-19b).

Para a aplicação da simulação numérica Lagrangeana presente no tópico do ângulo de repouso estático e nos próximos capítulos, os valores do coeficiente de atrito de rolamento utilizados são apresentados na Tabela 2.12.

Tabela 2.12: Coeficientes de atrito estático obtidos experimentalmente para aplicação da abordagem numérica Lagrangeana.

		Parede lateral (Lixa P80)	Parede terminal (Vidro)
Material	μ_{rpp}	μ_{rpw}	μ_{rpw}
Aço 4 mm	0,01±0,01	0,08±0,01	0,01±0,01
Vidro	0,01±0,01	0,08±0,01	0,01±0,01
Aço 6 mm	0,01±0,01	0,07±0,01	0,01±0,01
Poliacetel	0,01±0,01	0,08±0,01	0,01±0,01

Para a predição do coeficiente de atrito de rolamento, utilizou-se a rede neural “mrANN” (Apêndice 7). Nesta rede são utilizadas as propriedades da partícula e da superfície em que é feito o contato, podendo ser utilizada na análise do μ_r de outros materiais granulares e outras superfícies. Essa rede neural é composta por dois neurônios do tipo *Logistic* apresentando r^2 de aproximadamente 0,95.

Ângulo de repouso estático

Com o intuito de avaliar o comportamento *bulk* dos materiais granulares, foi realizado o aferimento dos ângulos de repouso estático superior e inferior (Figura 2-20) e os resultados são apresentados na Tabela 2.13.

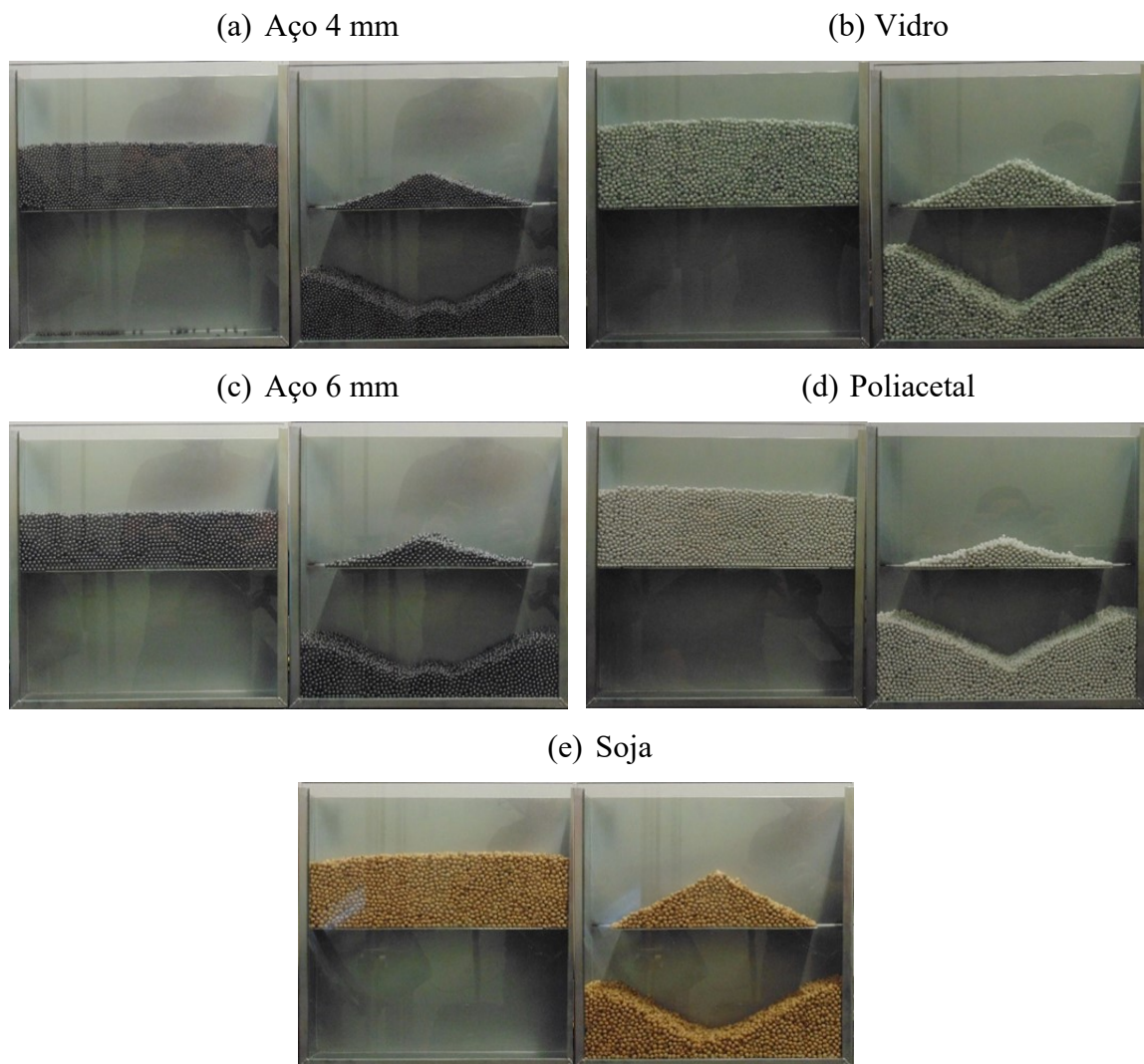


Figura 2-20: Ângulos de repouso estáticos medidos experimentalmente: (a) Aço 4; (b) Vidro; (c) Aço 6; (d) Poliacetal; (e) Soja

A partir da análise da Tabela 2.13, observa-se que mudanças nas propriedades físicas dos materiais granulares promoveram variações nos ângulos de repouso estático superior e inferior. Verifica-se ainda que os ângulos de repouso superior e inferior exibem valores distintos, apresentando assim diferentes significados físicos. De acordo com o trabalho de Zhou *et al.* (1999), no qual os autores aplicaram a mesma metodologia utilizada



neste trabalho, o ângulo de repouso superior está relacionado com a distribuição de forças friccionais no interior do leito granular, enquanto que o ângulo de repouso estático inferior se mostra mais intimamente relacionado ao módulo de elasticidade e cisalhamento. A forma superficial de uma pilha é na verdade o resultado macroscópico de vários mecanismos internos envolvendo fatores físicos.

Tabela 2.13: Avaliação quantitativa do ângulo de repouso estático.

Material	Ângulo de repouso estático superior	Ângulo de repouso estático inferior
Aço 4 mm	17,42±0,75	26,15±2,59
Aço 6 mm	12,92±1,95	25,65±3,56
Vidro	22,82±1,21	28,10±1,15
Poliacetel	15,20±1,80	22,73±1,77
Soja	27,13±0,46	26,10±1,59

Ao avaliar o efeito do tamanho da partícula sobre o ângulo de repouso, nota-se que a elevação no diâmetro de 4,58 para 6,04 mm de partículas de aço promoveu o aumento de aproximadamente 26% no ângulo de repouso superior. Este fenômeno também é reportado na literatura por autores como Buchholtz *et al.* (1995) e Zhou *et al.* (1999), os quais verificaram que a diminuição do diâmetro do material granular reduz a sua escoabilidade, promovendo assim o aumento do ângulo de repouso. Apesar da ocorrência de variações no ângulo de repouso devido às propriedades físicas dos materiais granulares, observa-se que em todos os casos os seus valores foram inferiores a 30°. Dessa forma, pode-se afirmar que as partículas utilizadas no presente estudo apresentam boa escoabilidade quando avaliadas na classificação de fluidez (Tabela 2.3).



Além dos testes experimentais, foi realizado também o estudo numérico dos ângulos de repouso superior (α_s) e inferior (α_i). A tabela de resultados do planejamento é apresentada no Apêndice 1.

Considerando todas as simulações numéricas (1-81), os valores de α_s variaram de 12,9° a 27,1°, enquanto os valores de α_i variaram de 22,7° a 28,1°. As expressões para predições de α_s e α_i , Equações 2.36 e 2.37, foram ajustadas aos dados presentes na Tabela 2.13 usando técnicas de regressão múltipla, apresentando coeficiente de correlação (r^2) de 0,89 e 0,90, respectivamente, permitindo, assim, quantificar os efeitos das variáveis independentes sobre a resposta.

$$\alpha_s = 28,15 + 0,63x_1 - 0,55x_2 + 2,90x_3 - 1,07x_3^2 + 1,53x_4 \quad (2.36)$$

$$\alpha_i = 24,26 - 0,76x_1 - 0,64x_2 + 2,75x_3 - 1,11x_3^2 + 1,70x_4 + 1,41x_5 - 1,64x_5^2 + 0,99x_6 + 0,54x_1x_4 + 0,53x_3x_5 \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{d-5}{1} & x_2 &= \frac{\rho-6000}{2000} & x_3 &= \frac{\mu_{spp}-0,45}{0,15} & x_4 &= \frac{\mu_{rpp}-0,045}{0,015} \\ x_5 &= \frac{\mu_{spw}-0,45}{0,15} & x_6 &= \frac{\mu_{rpw}-0,045}{0,015} & x_7 &= \frac{e_{pp}-0,65}{0,15} & x_8 &= \frac{e_{pw}-0,65}{0,15} \end{aligned}$$

A partir da análise da regressão, verifica-se que os coeficientes de restituição tanto partícula-partícula quanto partícula-parede não apresentam influência significativa sobre as respostas. Isto pode estar associado ao fato de que o ângulo é apenas mensurado após cessar a movimentação do material granular. Como a restituição está relacionada à conservação de energia durante os impactos, sua influência não pode ser observada em leitos estáticos.

Ao analisar os efeitos dos coeficientes de atrito estático e de rolamento, observa-se que no ângulo de repouso superior apenas as interações entre as partículas apresentaram influência significativa, quando avaliado em um grau de significância de 95%. Zhou *et al.* (1991) ao avaliar a formação de pilhas de materiais granulares, observaram que tanto o coeficiente de atrito estático quanto o de rolamento afetam a estabilidade do leito granular, sendo a combinação adequada fundamental para a geração de resultados comparáveis àqueles medidos fisicamente.

O atrito estático é intimamente relacionado ao movimento translacional das partículas. Um elevado coeficiente de atrito estático pode tolerar uma grande magnitude da deformação na direção tangencial, uma vez que é elevada a estabilidade dos contatos individuais entre as partículas. Já o atrito de rolamento, é principalmente influenciado pela forma da partícula e pela sua tendência deformacional. Elevados valores de coeficiente de atrito de rolamento resultam em maiores forças de resistência ao movimento rotacional, proporcionando um mecanismo efetivo para a dissipação de energia cinética. De modo



geral, maiores coeficientes de atrito promovem a intensificação do ângulo de repouso estático.

Além da importância das interações entre partículas, as fricções entre partículas e paredes são também parâmetros relevantes e conferem ao sistema um torque resistente ao movimento de rotação das partículas, seja em relação à placa intermediária ou às paredes frontal e traseira do dispositivo. Como pode ser avaliado a partir da Equação 2.36, a elevação do atrito estático e de rolamento entre a partícula e a parede podem aumentar significativamente o ângulo de repouso inferior.

Como alternativa a regressão múltipla polinomial, os ângulos de repouso superior e inferior obtidos experimentalmente também foram aplicados a uma nova rede neural, “ReposeAngleANN” (Apêndice 8). Esta rede é composta por uma camada e dois neurônios do tipo *tanh* (Equação 2.38), apresentando r^2 de aproximadamente 0,90.

$$f(x) = \tanh(x) \quad (2.38)$$

Para obter resultados realistas de simulações numéricas de materiais particulados, os parâmetros de entrada e as propriedades das partículas devem ser precisos. Diante disto, neste trabalho é proposto um método de calibração indireta (Figura 2-21), utilizando os parâmetros obtidos através das metodologias apresentadas anteriormente como valores de referência. Através da comparação dos resultados experimentais e numéricos da metodologia do ângulo de repouso estático, foi realizado um ajuste fino dos parâmetros, a fim de melhor representar a dinâmica das partículas.

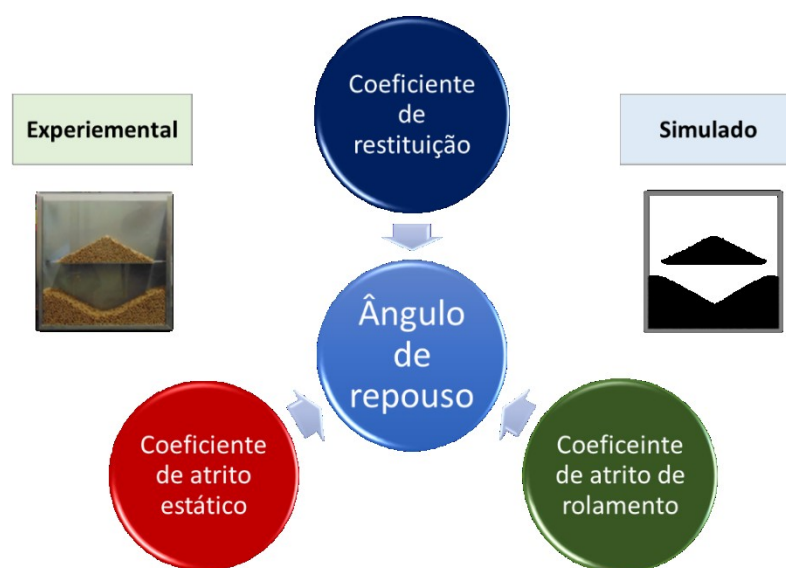


Figura 2-21: Procedimento de calibração de parâmetros DEM.



2.5. Conclusão

Com base nos objetivos propostos e diante dos resultados obtidos acerca dos parâmetros DEM, tem-se as conclusões descritas a seguir:

- ✓ O coeficiente de restituição (e_p) mostrou-se dependente da espessura e do tipo de material das chapas de teste. Além disso, foi verificado que este coeficiente apresenta um comportamento assintótico em função do aumento da espessura da chapa teste. Entretanto, no caso da chapa de aço com espessura próxima de 10 mm, foi observada uma redução no valor do coeficiente devido às interferências destrutivas oriundas das ondas de choque. A utilização da rede neural “epANN” se deu de maneira satisfatória, apresentando coeficiente de correlação de 0,98;
- ✓ Os valores dos coeficientes de atrito estático (μ_s) foram determinados empregando a metodologia do trenó, a partir da qual foi observado que a elevação da rugosidade superficial promove o aumento do coeficiente, e que partículas que possuem maiores imperfeições superficiais, como os grãos de soja, também apresentam maiores coeficientes de atrito estático quando avaliadas em superfícies de mesma rugosidade. Além disso, aplicou-se a rede neural “msANN” para a predição dos coeficientes de atrito estático, a qual apresentou r^2 de 0,96;
- ✓ O coeficiente de atrito de rolamento foi determinado aplicando a metodologia adaptada da ASTM, a partir da qual foi observado que a elevação das rugosidades promove o aumento do coeficiente, e que partículas de menor tamanho ou com menores valores de módulo de elasticidade, também apresentam maiores coeficientes de atrito rolamento quando avaliados em superfícies de mesma rugosidade. Foi implementado a rede “mrANN”, para predição do atrito de rolamento, a qual apresentou r^2 de 0,95.
- ✓ A partir da análise do ângulo de repouso foi verificado experimentalmente que as propriedades granulares, diâmetro e densidade, exercem influência sobre a resposta. Este fato pôde ser melhor avaliado com auxílio das simulações numéricas, nas quais verificou-se também a importância dos parâmetros de entrada do modelo, como os coeficientes de atrito estático e de rolamento. Pelo fato da análise ser realizada com o leito em repouso, o coeficiente de restituição não apresentou influência significativa sobre o ângulo de repouso. Além da regressão múltipla polinomial, também foi atribuído ao ângulo de repouso a aplicação da rede neural “ReposeAngleANN”, que permitiu estimar o ângulo de repouso de materiais granulares e, conseqüentemente, auxiliar no processo de calibração a partir das propriedades físicas das partículas.

CAPÍTULO 3

REGIMES DE ESCOAMENTO

3.1. Introdução

O conhecimento sobre o comportamento da dinâmica dos materiais granulares em tambores rotatórios é de fundamental importância para um projeto adequado de unidades industriais (HÖHNER *et al.*, 2014).

A compreensão a respeito do fluxo de material granular em tambores rotatórios é de grande interesse para aplicações industriais e tem sido estudado experimentalmente (HUANG *et al.*, 2009; INGRAM *et al.*, 2005; WATANABE, 1999; WU *et al.*, 2003), bem como numericamente (ALCHIKH-SULAIMAN *et al.*, 2016; BUCHHOLTZ *et al.*, 1995; DING *et al.*, 2001; YANG, *et al.*, 2003).

Dependendo da condição operacional, seis regimes de fluxo são identificados para descrever o movimento de partículas em um tambor rotatório: deslizamento, avalanche, rolamento, cascadeamento, catarateamento e centrifugação. Esses regimes têm uma ampla aplicação em diferentes processos, tais como mistura, secagem e moagem. Estudos foram realizados na tentativa de melhor descrever as regiões de manifestação de cada um desses regimes e suas transições (HENEIN *et al.*, 1983a; MELLMANN, 2001).

Com a finalidade de obter uma melhor compreensão a respeito dos regimes de escoamento e da dinâmica de partículas no interior do tambor rotatório, será investigado neste capítulo os efeitos das condições operacionais (velocidade de rotação e grau de preenchimento), da geometria (diâmetro, comprimento do tambor e rugosidade interna) e das propriedades granulares (tamanho, forma e densidade de partícula), trazendo informações intimamente relacionadas com o foco principal deste trabalho, o fenômeno de segregação.



3.2. Revisão bibliográfica

Tambores rotatórios possuem como uma de suas características a capacidade de prover elevadas taxas de transferência de calor e massa, o que os torna adequados para uso em muitos processos, como mistura de pós, secagem, calcinação, revestimento, granulação, moagem e pirólise (FANTOZZI *et al.*, 2007). Estes equipamentos são capazes de lidar com vários tipos de materiais, sejam eles úmidos ou secos, grânulos finos ou pastosos, esféricos ou não-esféricos. Embora sua geometria e operação sejam simples, o escoamento granular em tambores rotatórios apresenta grandes complexidades e ainda não é compreendido completamente.

Regimes de escoamento

O comportamento do escoamento granular num tambor rotatório pode ser identificado através dos regimes de escoamento, que são baseados no movimento das partículas (LIU *et al.*, 2005). Assim, a conduta do movimento das partículas, bem como os mecanismos de mistura e segregação, pode ser diferente em cada regime de escoamento.

Mellmann (2001) apresenta uma revisão dos seis regimes de fluxo identificáveis em um sistema granular (deslizamento, avalanche, rolamento, cascadeamento, catarateamento e centrifugação), Figura 3-1, que podem ser utilizados para descrever a movimentação de partículas em um tambor rotatório, dependendo de diferentes condições operacionais, incluindo a velocidade de rotação, o coeficiente de atrito na parede e o grau de enchimento.

A forma mais comum de caracterizar o escoamento de partículas em um tambor rotatório é pelo número adimensional de Froude, Fr (MELLMANN, 2001), que é dado pela razão entre a força inercial e a força gravitacional aplicada sobre uma partícula, conforme apresentado na Equação 3.1.

$$F_r = \frac{\omega^2 R}{g} \quad (3.1)$$

sendo ω a velocidade de rotação do tambor, R o raio do tambor e g a aceleração gravitacional.

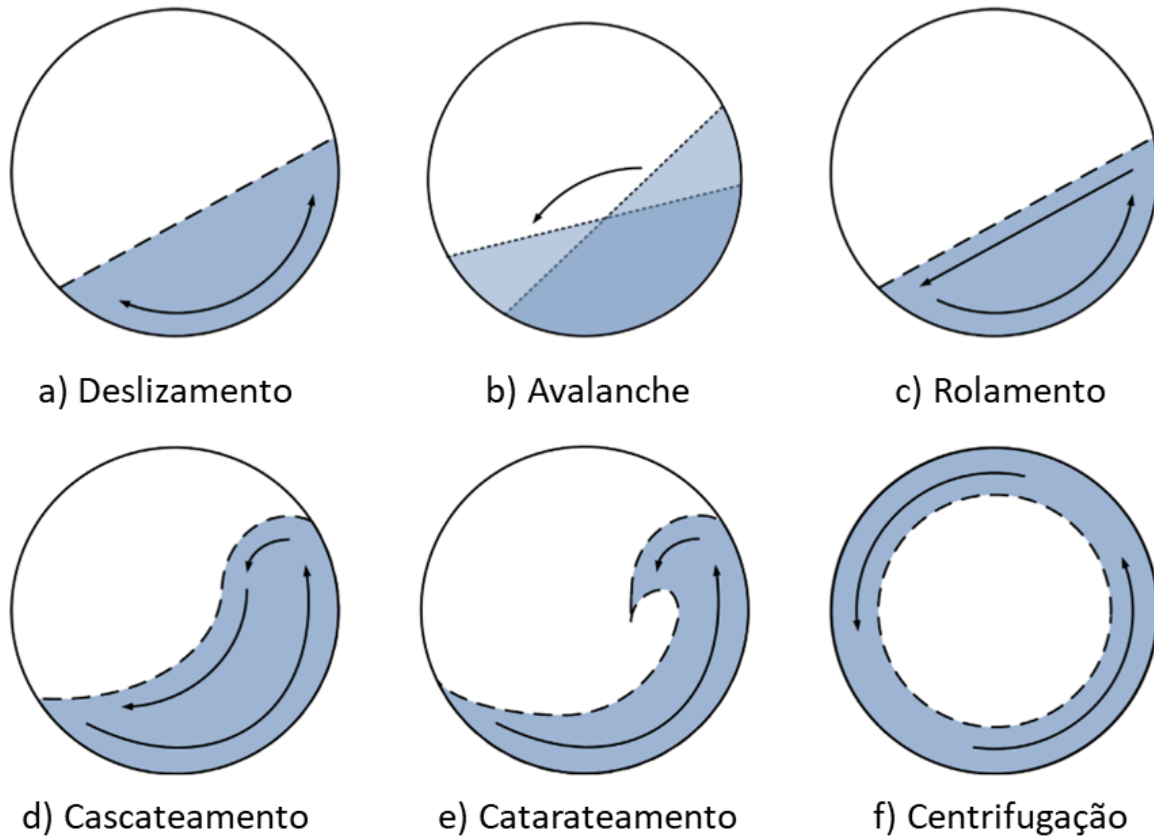
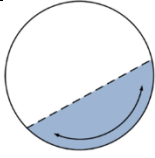
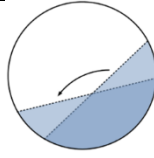
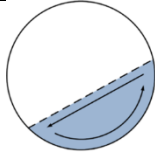

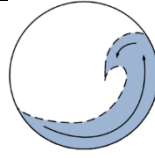
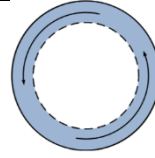


Figura 3-1: Regimes de escoamento no interior de tambores rotatórios.

Segundo Mellmann (2001), o número de Froude juntamente com o grau de preenchimento podem ser utilizados para prever o regime de escoamento granular. Além disso, também é necessário conhecer as propriedades do material granular e suas propriedades de interações, sejam elas entre partículas ou entre partícula e superfície interna do equipamento, uma vez que estas desempenham um papel não trivial na dinâmica do sistema. Na Tabela 3.1, é exposta uma síntese do estudo realizado por Mellmann (2001) a respeito dos regimes de escoamento com suas respectivas aplicações e faixas de número de Froude.



Tabela 3.1: Condições de Fr , preenchimento e atrito estático para a obtenção dos regimes de escoamento granular no interior do tambor rotatório (Adaptado de Mellmann, 2001).

Regime	Deslizamento	Avalanche	Rolamento	Cascadeamento	Catarateamento	Centrifugação
Desenho esquemático						
Número de Froude	$10^{-10} < Fr < 10^{-4}$	$10^{-5} < Fr < 10^{-3}$	$10^{-4} < Fr < 10^{-2}$	$10^{-3} < Fr < 10^{-1}$	$10^{-1} < Fr < 10^0$	$Fr > 10^0$
Grau de preenchimento	$f < 0,1$		$f > 0,1$		$f > 0,2$	
Atrito partícula-parede	$\mu_{pw} < \mu_{pw,c}$	$\mu_{pw} > \mu_{pw,c}$				
Aplicação	Não utilizado	Mistura, secagem, granulação e etc			Moagem	Não utilizado

Observa-se, assim, que dependendo do grau de preenchimento, da rugosidade interna do tambor e do número de Froude, haverá mudança no regime de escoamento. A maioria dos tambores industriais operam em regime de rolamento ou em cascadeamento devido ao baixo consumo de energia e por proporcionarem elevadas taxas de mistura e de transferência de calor e massa. Os regimes de deslizamento e centrifugação não apresentam grande aplicabilidade industrial (NOROUZI *et al.*, 2015).

Yang *et al.* (2008) obtiveram, utilizando simulações Lagrangeanas, o número de Froude crítico (Froude quando o regime de centrifugação é atingido) de 3,35, sendo este valor superior ao valor unitário proposto por Watanabe (1999). Em seu trabalho, Mellmann (2001) identificou também números de Froude críticos superiores à unidade. Além disso, o autor discorre sobre a ausência do regime de deslizamento, mesmo para condições de baixas velocidades de rotação. Mellmann explica que, por utilizar uma superfície rugosa, que resultava num coeficiente de atrito partícula-parede (Equação 3.2) superior ao valor crítico, o regime de deslizamento era oprimido.



$$\mu_{pw,c} = \frac{2\text{sen}^3(\varepsilon)\text{sen}(\theta)}{3\pi f(1 + \text{Fr})} \quad (3.2)$$

sendo: ε a metade do ângulo do segmento circular ocupado com sólidos (Figura 3-2), θ o ângulo de repouso dinâmico e f o grau de enchimento. As condições de operação utilizadas por Mellmann (2001) foram: $f = 0,35$, $\varepsilon = 75^\circ$, $\theta = 30^\circ$ e $\text{Fr}=0,1$, resultando em um coeficiente de atrito partícula-parede crítico ($\mu_{pw,c}$) de aproximadamente 0,2. Deste modo, como o valor do coeficiente de atrito (0,5) encontrava-se superior ao $\mu_{pw,c}$, o regime de deslizamento não pôde ser evidenciado.

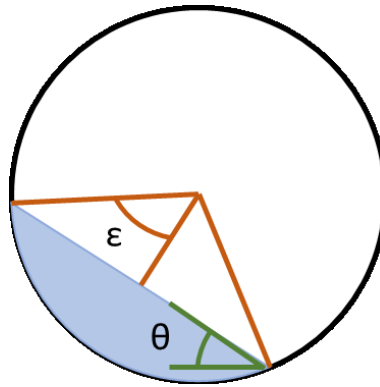


Figura 3-2: Obtenção do ângulo do segmento circular e do ângulo de repouso dinâmico.

Henein *et al.* (1983a), realizaram estudos sobre o comportamento do movimento transversal de sólidos granulares em cilindros rotatórios, permitindo a confecção de diagramas de comportamento do leito em tambores rotatórios, avaliando o efeito do grau de preenchimento e do coeficiente de atrito entre partícula e parede.

Os tópicos a seguir elucidam sucintamente as principais características dos regimes de escoamento no interior de tambores rotatórios.

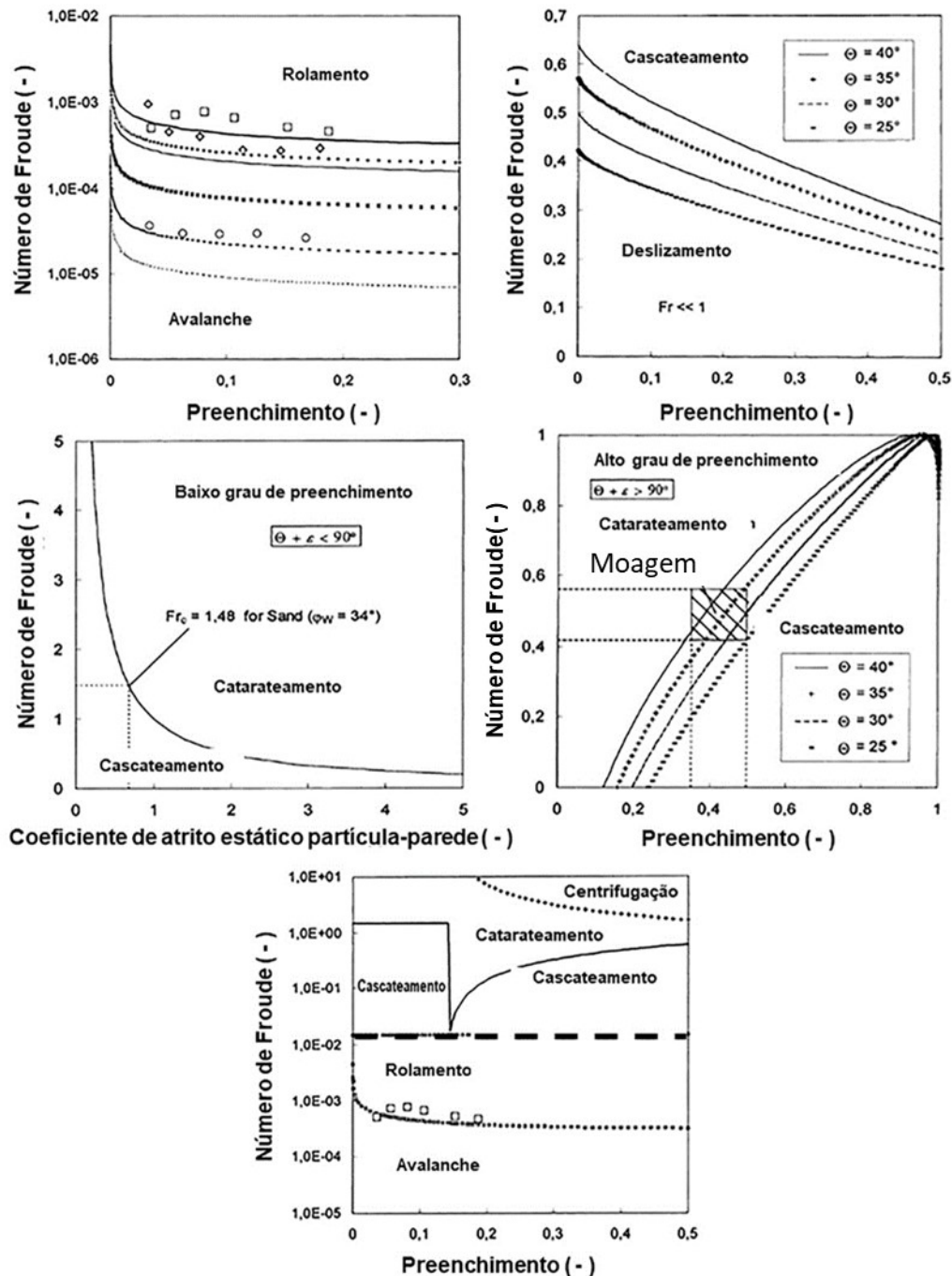


Figura 3-3: Diagramas de comportamento granular no interior de tambores rotatórios (Adaptado de Henein *et al.*, 1983a).

i) Regime de deslizamento

O regime de deslizamento ocorre a partir da combinação de duas condições de operação: baixa velocidade de rotação e baixa rugosidade superficial interna do tambor, que culminam em baixos valores de coeficientes de atrito. Este regime é caracterizado por um leito estático de material deslizando sobre a parede do tambor, como ilustrado na Figura



3-1a. Nota-se que, nenhum grau de mistura do material particulado é observado, uma vez que não há uma movimentação relativa efetiva das partículas no interior do equipamento. Deste modo, aplicações industriais de tambores rotatórios operando em regime de deslizamento é praticamente nula, sendo considerado indesejável. Na prática, a ocorrência deste regime é evitada através da utilização de paredes internas de maior rugosidade, adição de suspensores e elevação da velocidade de rotação do tambor (MELLMANN, 2001).

ii) Regime de avalanche

Conforme ocorre o aumento da velocidade de rotação do tambor ou da rugosidade da parede, o regime de avalanche é atingido, o qual é caracterizado pela periodicidade de movimento do leito, alternando entre os ângulos de repouso superior e inferior (SANTOS *et al.*, 2015), Figura 3.1.b. Inicialmente, o material particulado é aderido à parede do tambor, se comportando como um corpo rígido, sendo deslocado no sentido da rotação do tambor, até alcançar o ângulo de repouso dinâmico superior, θ_U . Com isso, o material granular começa a deslizar no sentido contrário ao de rotação, até ser atingindo o ângulo de repouso dinâmico inferior, θ_L (HENEIN *et al.*, 1983b).

No trabalho realizado por Xiao *et al.* (2005), foi avaliada a influência da velocidade de rotação do tambor sobre os ângulos de repouso superior e inferior. Os autores observaram que, ao elevar a velocidade de rotação de 0,07 para 0,5 rpm, ocorreu um incremento de apenas 5% no valor do ângulo de repouso dinâmico superior, que passou de $29,7^\circ$ para $31,3^\circ$, mostrando que a velocidade exerceu pouca influência sobre a resposta. Entretanto, a frequência de alternância entre os ângulos superior e inferior foi elevada com o aumento da velocidade de rotação do equipamento, ou seja, o tempo de transição entre os ângulos de repouso superior e inferior foi diminuindo até que ocorresse a estabilização do leito, resultando no ângulo de repouso dinâmico (θ_D), o qual caracteriza o regime de rolamento. Além disso, os autores observaram que o valor do ângulo obtido após a estabilização do leito se encontrava próximo à média aritmética dos ângulos de repouso dinâmico superior e inferior.

iii) Regime de rolamento

O regime de rolamento (Figura 3-1c) tem como particularidade a formação de uma superfície de leito plana com uma inclinação constante, caracterizando o ângulo de repouso dinâmico (θ_D).



Diversas aplicações industriais de tambores rotatórios ocorrem preferencialmente no regime de rolamento, cujo leito granular pode ser dividido em duas regiões: a região passiva, na qual as partículas são transportadas para cima pela parede do tambor, e a região ativa, na qual as partículas fluem para baixo a partir da superfície inclinada do leito (DING *et al.*, 2001), como apresentado na Figura 3-4.

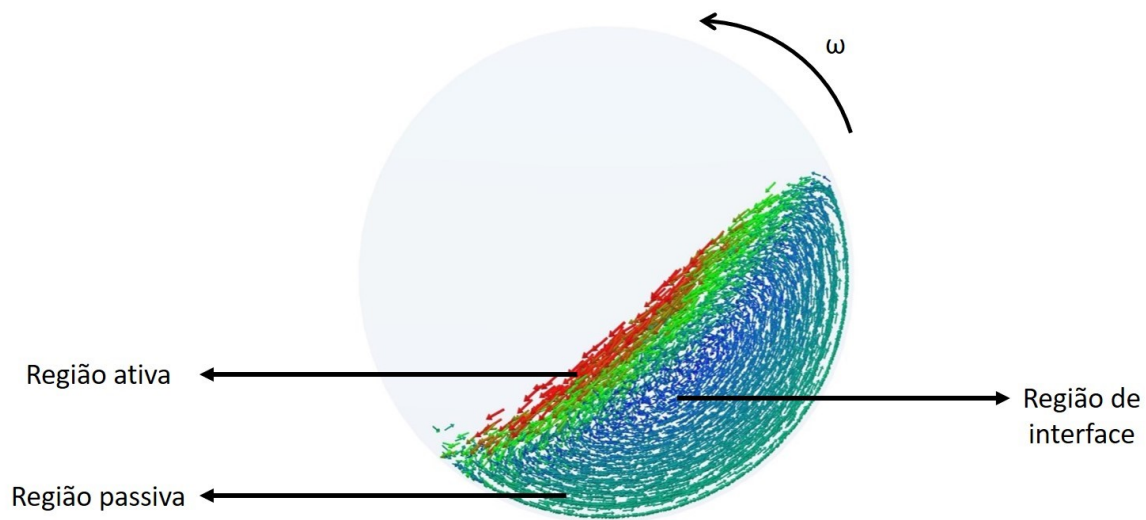


Figura 3-4: Regiões ativa e passiva do leito granular em um tambor rotatório operando em regime de rolamento.

Na região passiva, o material granular se move lentamente como um corpo rígido, fazendo com que a mistura seja desprezível. Deste modo, a mistura de partículas ocorre principalmente na região ativa. Santos *et al.* (2015), ao avaliar o perfil de velocidade de esferas de vidro em regime de rolamento, identificaram a localização do ponto em que ocorre a inversão do sentido da velocidade das partículas (interface das regiões ativa e passiva). Na região passiva, as partículas se deslocam no sentido de rotação do tambor, e na região ativa no sentido contrário. Neste trabalho os autores também discutiram a respeito da espessura da camada ativa e a influência da velocidade de rotação e do grau de preenchimento sobre ela. Outros trabalhos podem ser encontrados na literatura sobre a espessura das camadas ativa e passiva, tais como: Dubé *et al.* (2013); Jain *et al.* (2013) e Santomaso *et al.* (2003), que avaliaram a espessura da camada ativa em leito de partículas esféricas. Dubé *et al.* (2013) também avaliaram a formação da camada ativa e a influência



da velocidade de rotação sobre o leito de partículas não esféricas. McCarthy (2003) investigou o efeito das forças de coesão e da umidade na formação das camadas ativa e passiva.

iv) Regime de cascadeamento

Com o aumento da velocidade de rotação, uma superfície curva em formato de “S” é formada (Figura 3-1d), caracterizando a transição entre os regimes de rolamento e de cascadeamento. Conforme a velocidade aumenta, o formato curvo superficial se torna mais expressivo, se assemelhando a um “grão de feijão”. Neste regime há a ocorrência do aumento das forças cisalhantes entre as partículas, fazendo com que estas sejam cominuídas através do processo de abrasão. Diante disto, este regime apresenta como uma de suas aplicabilidades, o controle granulométrico de materiais granulares.

v) Regime de catarateamento

À medida que a velocidade de rotação aumenta, a energia cinética das partículas é elevada, ocasionando em sua separação do leito, sendo lançadas no espaço livre do interior do tambor, Figura 3.1e. Dessa forma, as partículas podem se chocar com a superfície lateral oposta do equipamento ou diretamente com o leito granular, caracterizando assim o regime de catarateamento (GRAJALES *et al.*, 2012; WEIGLER e MELLMANN, 2014).

Com o aumento da velocidade de rotação, o número de partículas lançadas no espaço vazio é intensificado até que um véu de partículas se forme ao longo do espaço interno do tambor rotatório. No momento em que novos incrementos da velocidade de rotação promovem a aderência de partículas na superfície lateral, tem-se então a região de transição de regimes, no qual ocorrerá a migração para o regime de centrifugação.

A aplicação do regime de catarateamento se dá principalmente em processos de moagem, que devido ao intenso choque entre as partículas lançadas e o leito granular, promove um ambiente propício para o fenômeno de cominuição. Segundo Machado (2016), o catarateamento deve ser operado com cautela para que a queda das partículas ocorra sobre o leito de material granular e não sobre o revestimento do moinho, o que levaria ao seu rápido desgaste e reduziria a efetividade dos eventos de quebra.



vi) Regime de centrifugação

Por fim, após o regime de catarateamento, o aumento da velocidade de rotação promove a aderência das partículas na superfície lateral do tambor, Figura 3-1f, formando uma camada de material particulado, caracterizando o regime de centrifugação (GRAJALES *et al.*, 2012). Neste caso, verifica-se a ocorrência do equilíbrio da força inercial e gravitacional que atua sobre as partículas, resultando em um número de Froude unitário (WATANABE, 1999). A partir da utilização dos conceitos da mecânica clássica, a velocidade crítica de centrifugação (w_c) para um corpo sólido, Equação 3.3 (avaliação da equação 3.1 para número de Froude unitário), é definida como sendo a velocidade para que o leito de partículas transite do regime de catarateamento para o de centrifugação.

$$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R}} \quad (3.3)$$

A velocidade crítica de centrifugação foi alvo de diversos estudos, nos quais autores recomendaram modificações no formato da Equação 3.3, a fim de considerar as propriedades e variáveis do sistema que poderiam influenciar no seu valor resultando em diversas equações de previsão para w_c (Tabela 3.2) (ROSE e SULLIVAN, 1957; WALTON e BRAUN, 1993; RISTOW, 1998; WATANABE, 1999; JUAREZ *et al.*, 2011, SANTOS 2015).

Tabela 3.2: Equações de velocidades críticas de centrifugação.

Rose e Sullivan, 1957	$\omega_c = \sqrt{\frac{2g}{D-d}} \quad (3.4)$
Walton e Braun, 1993	$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R \sin(\theta_D)}} \quad (3.5)$
Ristow, 1998	$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R \sqrt{1-f}}} \quad (3.6)$
Watanabe, 1999	$\omega_c = \sqrt{\frac{g}{R \sin(\theta_D) \sqrt{1-f}}} \quad (3.7)$
Juarez <i>et al.</i> , 2011	$\omega_c = \sqrt{\frac{g(1-\rho_f/\rho_s)}{R \sin(\theta_D) \sqrt{1-f}}} \quad (3.8)$
Santos, 2015	$\omega_c = \sqrt{\frac{g[1+\lambda \exp(-\tau f)]}{R}} \quad (3.9)$



3.3. Materiais e métodos

Neste tópico serão apresentados os aparatos e metodologias utilizadas no estudo experimental e numérico para a identificação dos regimes de escoamento em tambores rotatórios, avaliando a influência de diferentes variáveis tais como: diâmetro, comprimento e revestimento interno (coeficiente de atrito) do tambor, grau de preenchimento e propriedades do material granular, como densidade e diâmetro.

Investigação experimental

No estudo experimental da dinâmica de partículas no interior de tambores rotatórios revestido pela lixa P80, foi investigada a influência do diâmetro (D) e do comprimento do tambor (L), variando estas dimensões através de um planejamento fatorial 3^2 (Figura 3-5), que foi realizado para cada material granular, a fim de também avaliar a influência das propriedades físicas das partículas, como diâmetro (d) e densidade (ρ), conforme apresentado na Tabela 3.3. As propriedades físicas dos materiais utilizados foram apresentadas na Tabela 2.4. Ressalta-se o uso da codificação da nomenclatura do tambor utilizado, por exemplo, um tambor com 100 mm de diâmetro de 300 mm de comprimento é apresentado na forma codificada como D100L300.



Figura 3-5: Geometrias geradas a partir do planejamento 3^2 .



Tabela 3.3: Condições experimentais avaliadas na investigação dos regimes de escoamento.

Dimensões									
D (mm)	200	150	100	200	150	100	200	150	100
L (mm)	500	500	500	300	300	300	100	100	100

Na Figura 3.6 é representado o tambor rotatório utilizado nos experimentos. Para cada uma das combinações apresentadas na Tabela 3.3, a velocidade de rotação do tambor foi variada desde 1 rad/s até alcançar o regime de centrifugação, sendo cada incremento de velocidade igual a 1 rad/s. Todos os testes foram realizados para tambores rotatórios operando em grau de preenchimento de 20%.

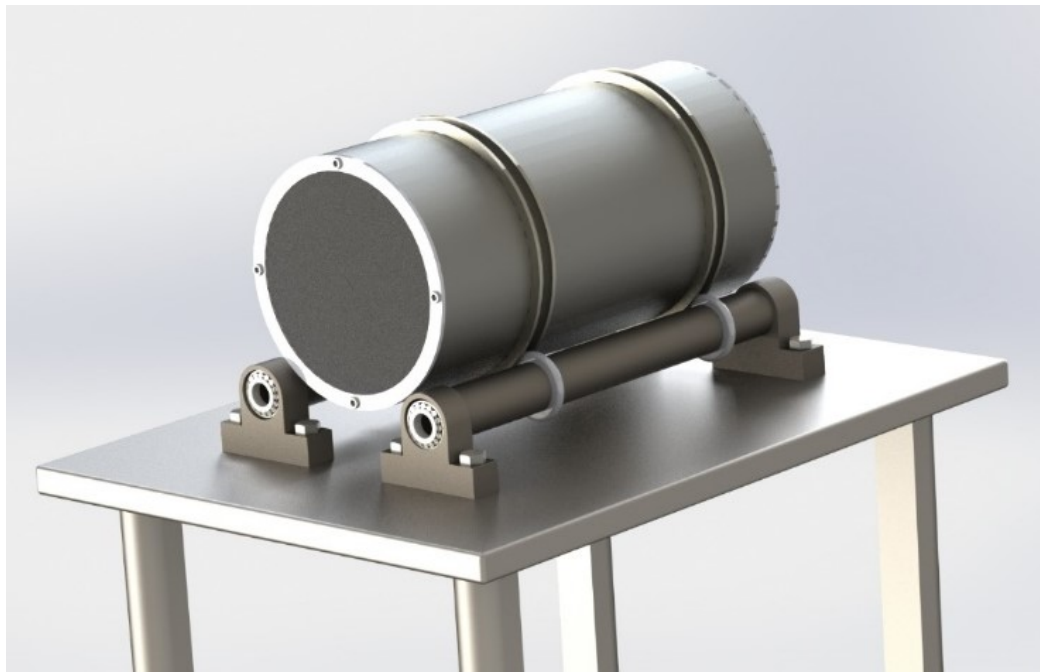


Figura 3-6: Representação esquemática do tambor rotatório.

Com o auxílio de uma câmera de alta velocidade, com capacidade de captura de 500 quadros por segundo (modelo Fastec IL5), todos os testes experimentais foram gravados e submetidos à análise de imagem utilizando o software *Meazure* (disponibilizado em <http://www.cthing.com/Meazure.asp> de forma gratuita), permitindo a determinação dos ângulos de repouso dinâmico do leito granular em diferentes velocidades, conforme apresentado esquematicamente na Figura 3-7.

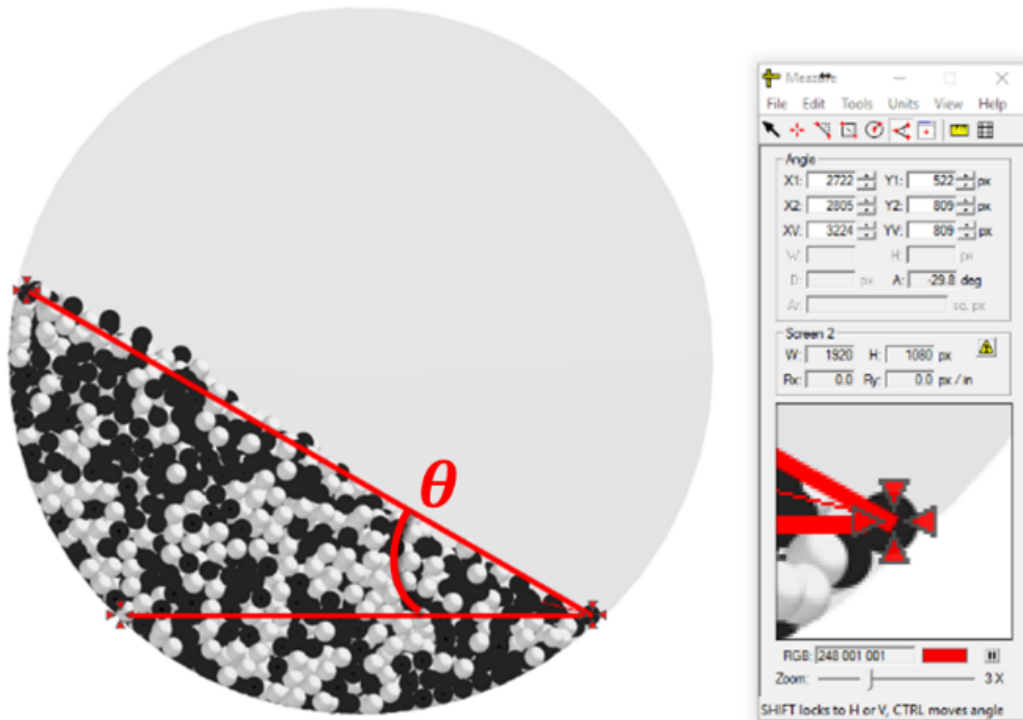


Figura 3-7: Medição do ângulo de repouso dinâmico.

Em posse das velocidades críticas de centrifugação das combinações avaliadas, foi realizado, utilizando o software Statistica® 7, um estudo quantitativo da influência das variáveis estudadas por meio de técnicas de regressão múltipla.

Investigação numérica

O estudo numérico dos regimes de escoamento se deu em duas etapas. Na primeira delas, todas as condições investigadas experimentalmente foram reproduzidas numericamente (45 simulações), com o intuito de validar a utilização da abordagem numérica Lagrangeana, junto aos parâmetros (e_p , μ_s e μ_r) obtidos experimentalmente no Capítulo 2.

Na segunda etapa, após a validação do uso da abordagem Lagrangeana, fez-se uma expansão da análise realizada experimentalmente, através da aplicação de um planejamento composto central (Tabela 3.4), resultando na realização de 50 simulações.



Tabela 3.4: Planejamento composto central para investigação de variáveis independentes sobre o comportamento granular em tambores rotatórios.

Variável independente	Níveis				
	$-\alpha (-2,0)$	-1	0	1	$+\alpha (+2,0)$
D (mm)	100	150	200	250	300
L (mm)	100	200	300	400	500
f (-)	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30
d (mm)	2,0	4,0	6,0	8,0	10
ρ (kg/m³)	500	2500	4500	6500	8500

Haja visto+ que alguns dos materiais particulados presentes no planejamento não foram avaliados experimentalmente devido a disponibilidade comercial, os parâmetros DEM destes materiais foram calculados a partir da utilização das redes neurais apresentadas no capítulo 2: “epANN”, “msANN” e “mrANN”.

Utilizando técnicas de regressão múltipla, em um nível de significância de 95%, foram investigadas, quantitativamente, as implicações sobre a velocidade crítica de centrifugação em função das variáveis independentes, dispostas na Tabela 3.4.

Destaca-se que, ao realizar as simulações, incrementos de 0,5 rad/s foram realizados, permitindo extrair um perfil mais detalhado da influência da velocidade de rotação sobre a dinâmica de partículas no interior do equipamento. O tambor rotatório operava em cada velocidade durante 5 s, tempo suficiente para que um novo regime estacionário fosse alcançado.



3.4. Resultados e discussão

Investigação experimental

Neste tópico serão apresentados os resultados obtidos a partir da aplicação da metodologia para a determinação, qualitativa e quantitativa, dos regimes de escoamento no interior de tambores rotatórios. Para isto, foi observada a influência de características físicas do equipamento (comprimento, diâmetro e revestimento interior), bem como as propriedades do material granular (diâmetro e densidade).

Na Figura 3.8 é apresentada uma avaliação qualitativa da influência do comprimento do tambor rotatório sobre a transição para o regime de centrifugação. Para isto, foram dispostas imagens do equipamento com 150 mm de diâmetro (diâmetro intermediário) e comprimentos de 100 e 500 mm, operando em velocidades de 5, 15 e 25 rad/s, utilizando partículas de poliacetal.

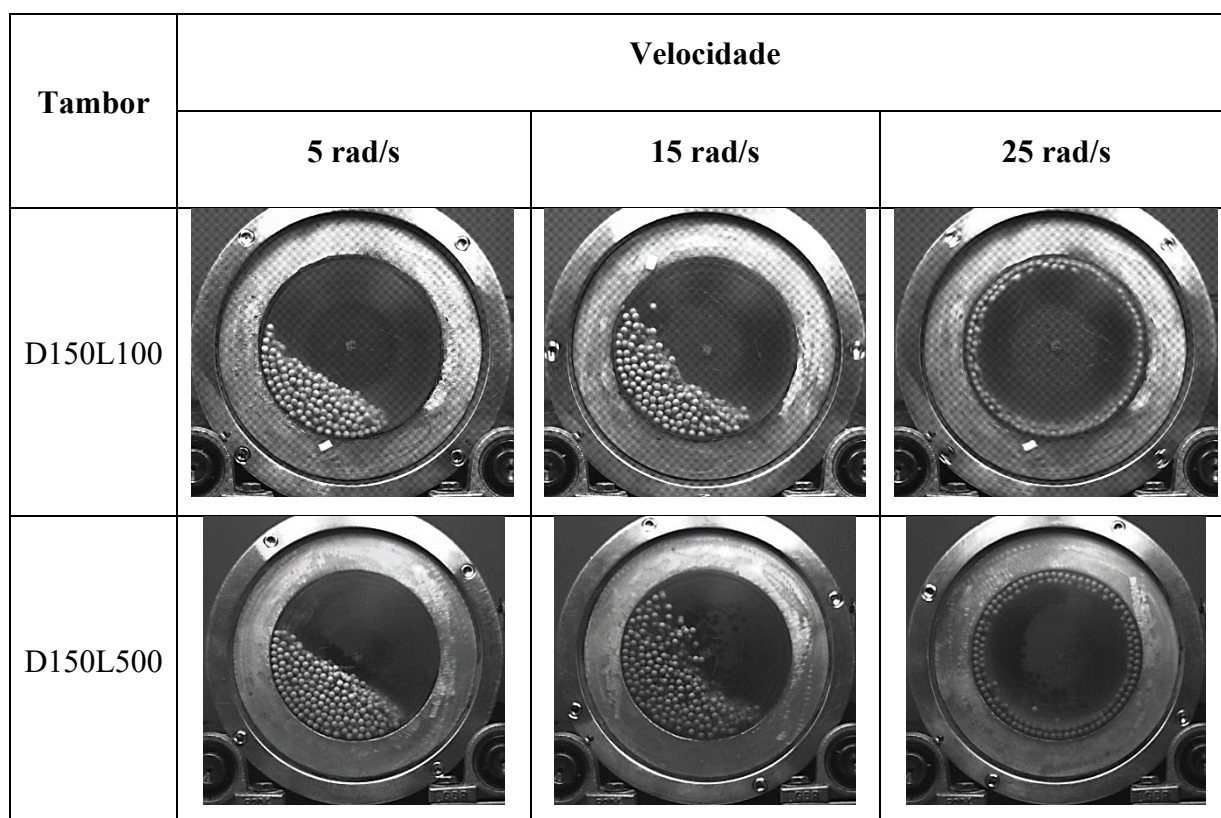


Figura 3-8: Avaliação qualitativa do comprimento e velocidade do tambor na dinâmica no escoamento granular de partículas de poliacetal

Diante das imagens expostas, observa-se, qualitativamente, que o comportamento granular não apresentou alterações significativas com o aumento do comprimento do



tambor. Por exemplo, ao avaliar as imagens referentes à velocidade de 5 rad/s, tanto para L igual a 100 mm quanto para 500 mm, os leitos se encontram na transição do regime de rolamento para o cascadeamento. Todavia, para a velocidade de 15 rad/s, o leito granular no tambor de 100 mm de comprimento apresenta o regime de catarateamento mais incipiente, quando comparada com o leito mais profundo. Ademais, ambos os leitos se encontram no regime de centrifugação, para a velocidade de 25 rad/s.

Na Figura 3-9 são dispostas as velocidades críticas de centrifugação de todos os materiais granulares investigados: soja (1), vidro (2), aço 4 (3), aço 6 (4) e poliacetal (5), mantendo-se constante o diâmetro de 150 mm e variando apenas o comprimento do equipamento (100, 300 e 500 mm).

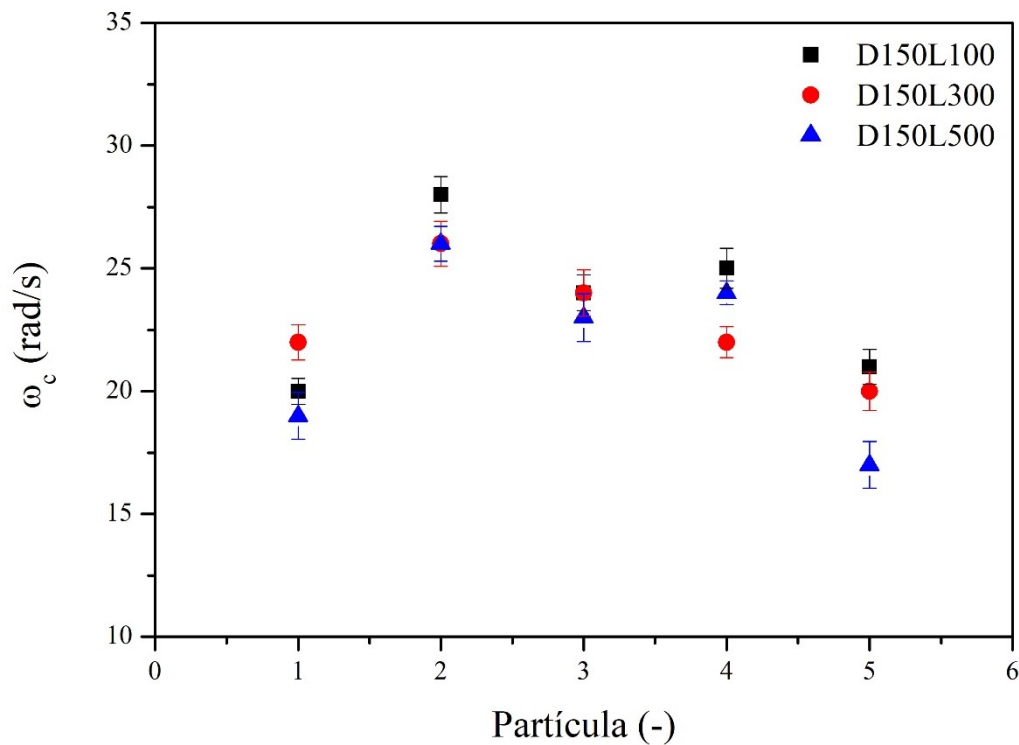


Figura 3-9: Avaliação quantitativa do comprimento do tambor na dinâmica granular.

A partir da análise da Figura 3-9, nota-se que, de modo geral, os tambores de maior comprimento apresentaram velocidades de centrifugação inferiores aos de menor comprimento. Entretanto, ao realizar o teste de Tukey para comparação das médias, estas não apresentaram diferenças significativas sob o ponto de vista estatístico.



Similarmente ao que foi realizado para a avaliação da influência do comprimento do tambor, também é discutido neste trabalho o efeito promovido pela alteração do diâmetro do equipamento. Na Figura 3.10 são apresentadas as imagens do leito de partículas de poliacetal em tambores com 300 mm de comprimento e diâmetros de 100 e 200 mm, nas velocidades de rotação de 5, 15 e 25 rad/s.

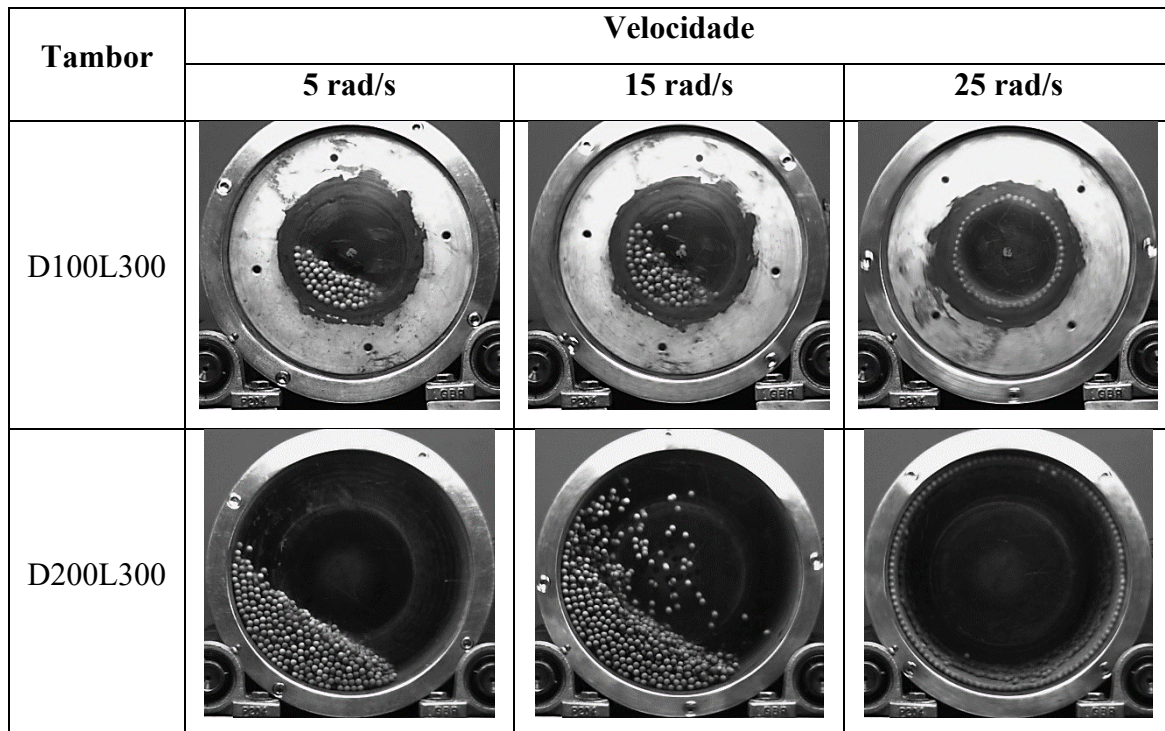


Figura 3-10: Avaliação qualitativa do diâmetro e velocidade do tambor na dinâmica do escoamento granular de partículas de poliacetal

A partir das imagens presentes na Figura 3.10, não é possível identificar, qualitativamente, diferenças significativas no comportamento granular com a variação do diâmetro do equipamento. Observa-se que, na velocidade de 5 rad/s ambos os leitos se encontram em regime de rolamento, na de 15 rad/s em catarateamento e na de 25 rad/s em centrifugação. Todavia, ao investigar quantitativamente a velocidade crítica de centrifugação (Figura 3.9), é verificada a presença de diferentes valores desta variável ao modificar o diâmetro do equipamento.

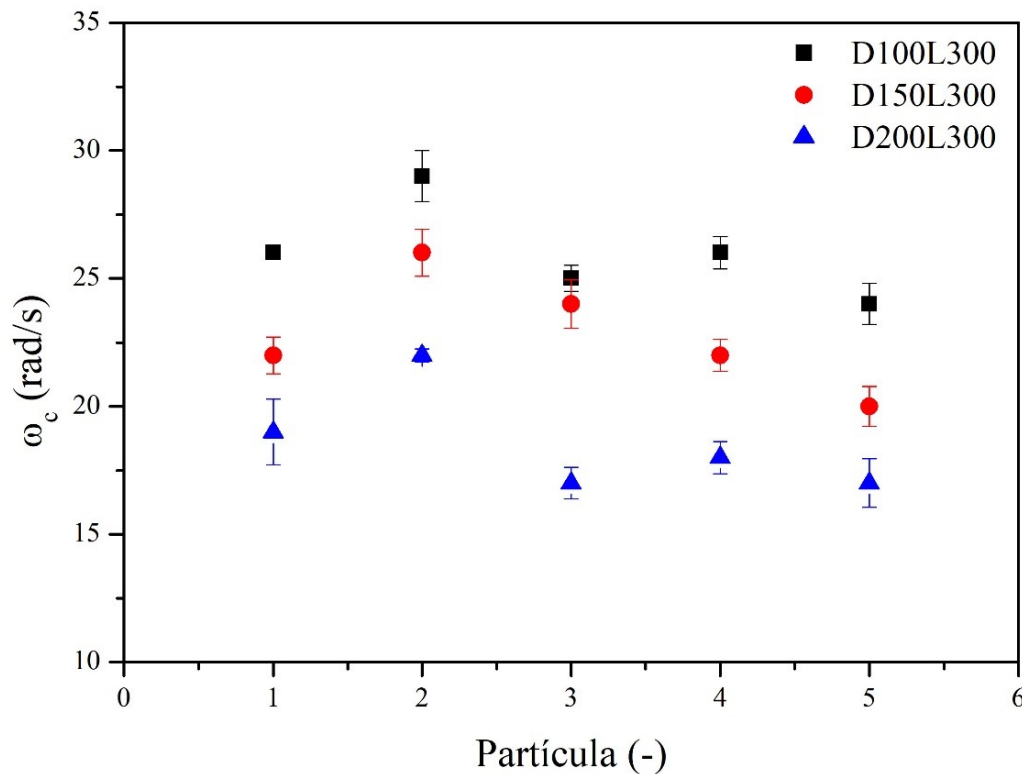


Figura 3-11: Avaliação quantitativa do diâmetro do tambor na dinâmica granular.

O efeito do diâmetro do equipamento para diferentes partículas mostrado na Figura 3-11, sendo possível observar que o aumento do diâmetro do tambor possui um efeito inversamente proporcional a velocidade crítica. Dessa forma, uma mesma partícula atinge o regime de centrifugação mais facilmente com o aumento do diâmetro do equipamento. Este comportamento também foi evidenciado no trabalho reportado por Liu *et al.* (2005), no qual os autores alegaram que o diâmetro do equipamento exerce influência significativa sobre a velocidade crítica de centrifugação.

Diante dos resultados expostos sobre a influência das dimensões do equipamento sobre a velocidade de transição para a centrifugação, foram avaliados, através de um planejamento 3^2 (Tabela 3.5), os efeitos lineares, quadráticos e de interação, do diâmetro e comprimento do tambor.

A partir da análise estatística dos dados apresentados na Tabela 3.5, foi realizada uma análise utilizando a técnica de regressão para a identificação dos efeitos das variáveis avaliadas sobre a velocidade crítica de centrifugação, sendo possível observar, através da Equação 3.10, que apenas o diâmetro do equipamento influencia significativamente a resposta. Este resultado está de acordo com as análises qualitativas realizadas anteriormente.



$$\omega_{c \text{ exp.}} = 22,97 - 4,1x_1 \quad (3.10)$$

$$x_1 = \frac{D-150}{50} \quad (3.11)$$

De acordo com a teoria da mecânica clássica, as partículas no interior de tambores rotatórios encontram-se na transição para o regime de centrifugação ao atingir o número de Froude unitário. Todavia, no presente estudo o regime de centrifugação apenas foi atingido em valores de número de Froude próximo a 4. Possivelmente este fato ocorreu devido à condição de deslizamento que existe entre as partículas e a parede do tambor, sendo assim necessário maiores valores de velocidade de rotação para que a força centrífuga e gravitacional entre em equilíbrio e, conseqüentemente, promova a migração do leito para a superfície lateral do equipamento. Resultados similares foram reportados por Juarez *et al.* (2011), e Mellmann (2001), que também observaram que o regime de centrifugação só foi atingido para valores de Froude superiores a unidade. De acordo com os autores, isto ocorre devido ao deslizamento entre as partículas e a superfície interna do tambor, sendo assim necessário superfícies de elevada rugosidade para satisfazer a condição ideal de centrifugação ($Fr=1$).

A fim de facilitar a determinação da velocidade crítica de centrifugação, algumas relações são apresentadas na literatura. Dentre elas a mais utilizada foi definida por Rose e Sullivan (1957), devido a sua simplicidade (Equação 3.12). Entretanto, ao aplicar esta relação nos casos avaliados no presente trabalho, são verificados valores de desvio de aproximadamente 48% em relação aos dados experimentais. Diante dos desvios apresentados pela relação matemática de Rose e Sullivan, foi proposto a inserção de um novo parâmetro relacionado à rugosidade da parede (ϕ), apresentado pela Equação 3.13

$$\omega_{c \text{ est.}} = \frac{4,43}{\sqrt{D}} \quad (3.12)$$

$$\omega_{c \text{ est.}} = \frac{4,43}{\phi\sqrt{D}} \quad (3.13)$$

A partir da Equação 3.13 foram estimados os valores de velocidade crítica para as condições avaliadas na Tabela 3.5, e foi encontrado um desvio de 9% em relação aos dados experimentais. Assim, verifica-se que a inserção do parâmetro relacionado a rugosidade

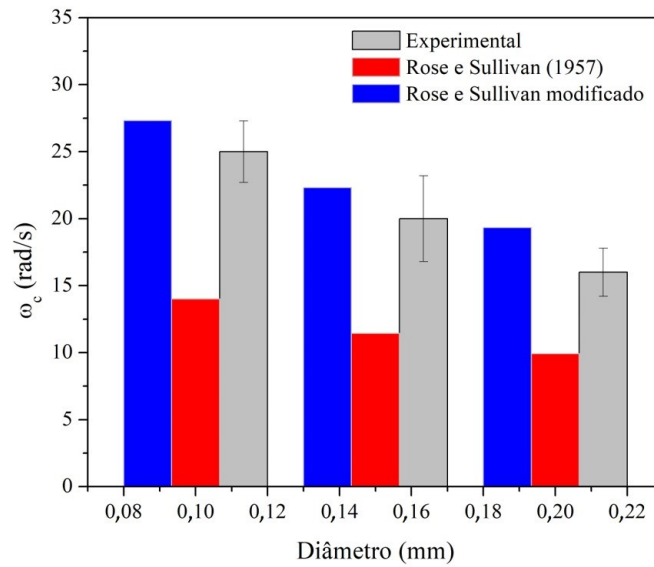


promoveu um melhor ajuste aos dados experimentais. Similarmente, outros trabalhos presentes na literatura utilizaram parâmetros análogos para a descrição do comportamento granular no interior de tambores rotatórios, como o estudo realizado por Machado *et al.*, (2017), no qual foi avaliada a influência do coeficiente de especularidade em simulações Eulerianas.

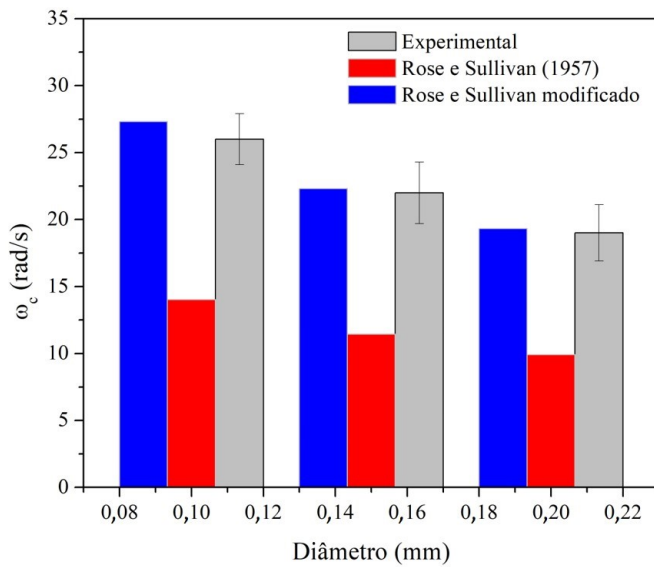
Tabela 3.5: Efeito das dimensões do equipamento sobre a velocidade crítica de centrifugação.

D (mm)	L (mm)	ω_c (rad/s)	ω_c (rad/s)	ω_c (rad/s)	Fr_c (-)
		Experimental	Rose e Sullivan, 1957	Rose e Sullivan Modificado	
200	500	20,2±0,8	9,9	19,3	4,2
150	500	21,8±3,7	11,4	22,3	3,6
100	500	27,6±1,8	14,0	27,3	3,9
200	300	18,6±2,1	9,9	19,3	3,5
150	300	22,8±2,3	11,4	22,3	4,0
100	300	26,0±1,9	14,0	27,3	3,4
200	100	18,2±1,8	9,9	19,3	3,4
150	100	23,6±3,2	11,4	22,3	4,2
100	100	28,0±2,3	14,0	27,3	4,0

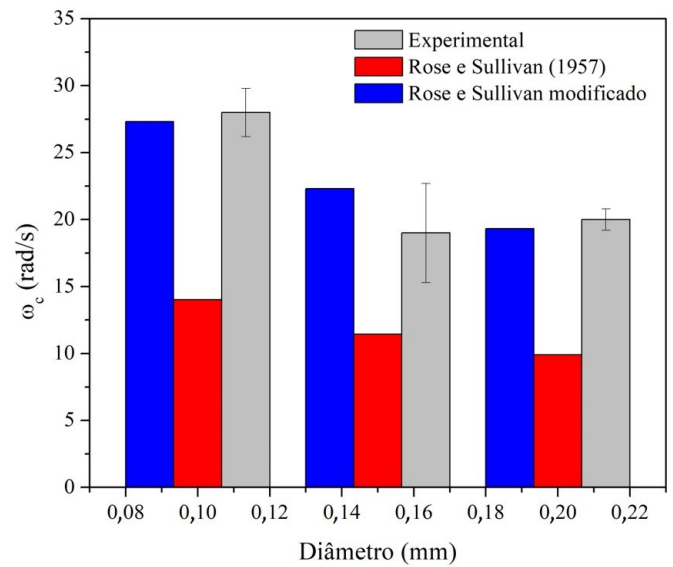
Na Figura 3-12 são apresentados os histogramas comparativos dos valores de velocidade crítica de centrifugação que foram obtidos experimentalmente para cada comprimento de tambor avaliado (100 mm (a), 300 mm (b) e 500 (c)), estimados pela relação de Rose e Sullivan (1957) e aqueles estimados pela relação de Rose e Sullivan modificada, que foi proposta neste trabalho. É possível observar uma maior proximidade entre os valores após a inserção do parâmetro relacionado a rugosidade da parede do tambor.



(a) Tambor com comprimeto de 100 mm



(b) Tambor com comprimeto de 300 mm



(c) Tambor com comprimeto de 500 mm

Figura 3-12: Comparação entre velocidades críticas de centrifugação obtidas experimentalmente com a relação proposta por Rose e Sullivan (1957).



Além de verificar a influência da geometria do equipamento, foi também analisado o efeito das propriedades físicas das partículas sobre a velocidade crítica de centrifugação.

Na Figura 3.13 são apresentadas as imagens do leito com partículas de aço 6, cujo diâmetro é de 6,04 mm e densidade de $7576,21 \text{ kg/m}^3$, e partículas de poliacetal com diâmetro de 6,14 mm e densidade de $1640,62 \text{ kg/m}^3$, respectivamente, as quais se diferem majoritariamente pela densidade.

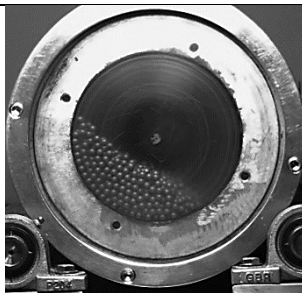
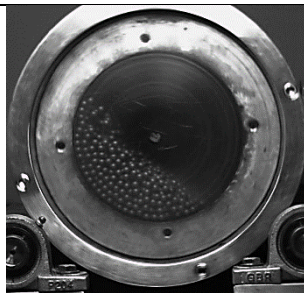
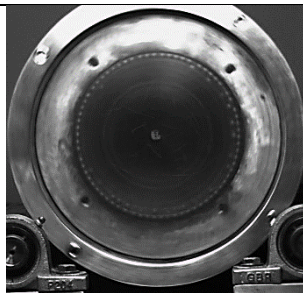
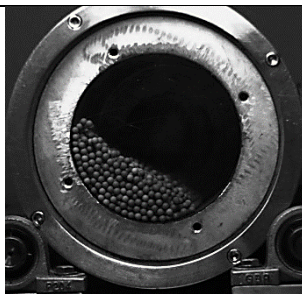
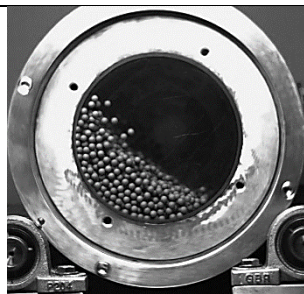
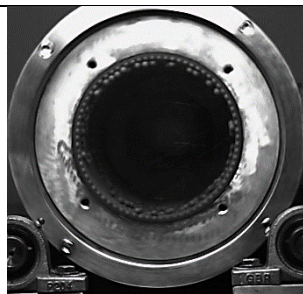
Tambor	Velocidade		
	5 rad/s	15 rad/s	25 rad/s
D150L300 Aço 6 mm			
D150L300 Poliacetal			

Figura 3-13: Avaliação qualitativa da densidade da partícula na dinâmica granular

Ao avaliar o comportamento das partículas, é perceptível a correspondência entre as imagens presentes na Figura 3.13 em cada velocidade estudada. A semelhança das dinâmicas, indica que o aumento de densidade granular não acarreta em modificações expressivas nos regimes de escoamento.

Na Figura 3.14 são apresentadas as imagens do leito utilizando partículas de aço 6 ($d = 6,04 \text{ mm}$; $\rho = 7576,21 \text{ kg/m}^3$) e aço 4 ($d = 4,58 \text{ mm}$; $\rho = 7130,30 \text{ kg/m}^3$), respectivamente, para a verificação da influência do diâmetro de partícula na velocidade de centrifugação crítica.



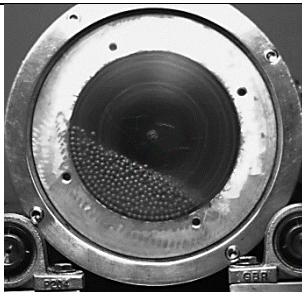
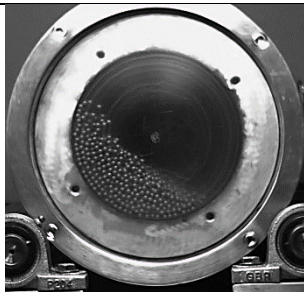

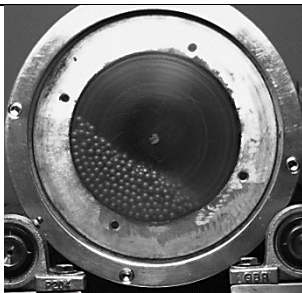
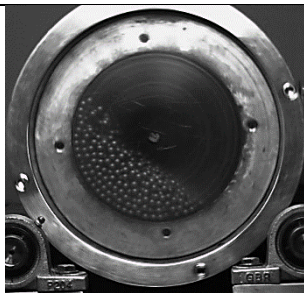
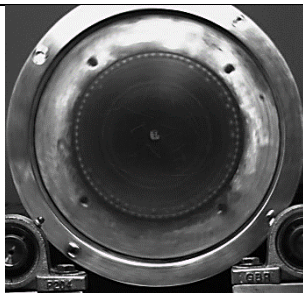
Tambor	Velocidade		
	5 rad/s	15 rad/s	25 rad/s
D150L300 Aço 4 mm			
D150L300 Aço 6 mm			

Figura 3-14: Avaliação qualitativa do tamanho da partícula na dinâmica granular.

Analogamente ao que foi avaliado para o efeito da densidade da partícula, a variação do tamanho da partícula também não acarretou em mudanças na dinâmica granular a para as velocidades de 5, 15 e 25 rad/s. Juarez *et al.* (2011) observaram que, para tambores rotatórios operando em níveis de preenchimento inferior a 0,75, que as propriedades físicas dos materiais granulares, como tamanho e densidade, não apresentaram influência sobre a velocidade crítica de centrifugação, mostrando que os resultados obtidos neste trabalho encontram-se de acordo com os reportados na literatura.

Diante das avaliações qualitativas reportadas nas Figuras 3.13 e 3.14, a respeito da influência das propriedades físicas granulares, foi realizado o teste de Tukey para a verificação da diferença estatística das velocidades críticas médias de centrifugação das partículas avaliadas (Tabela 3.10). Através do teste realizado, verifica-se que as velocidades observadas são equivalentes, corroborando com a análise qualitativa e com o trabalho reportado por Juarez *et al.* (2011).



Tabela 3.6: Velocidades críticas de centrifugação para diferentes materiais granulares.

Material	Diâmetro (mm)	Densidade (kg/m ³)	ω_c (rad/s)
Soja	6,64±0,07	1157,46±2,68	21,7±3,9
Vidro	6,51±0,10	2371,27±70,12	25,9±3,7
Poliacetel	6,14±0,05	1640,62±43,85	20,8±3,5
Aço 6 mm	6,04±0,03	7576,21±91,00	23,4±4,1
Aço 4 mm	4,58±0,01	7130,30±58,31	23,1±4,1

Investigação numérica

Com o intuito de se obter mais informações acerca da dinâmica de partículas, foi aplicada a técnica numérica Lagrangeana ao estudo dos regimes de escoamento, sendo realizadas simulações das condições apresentadas na Tabela 3.3. Vale ressaltar que os parâmetros DEM empregados neste tópico foram determinados experimentalmente no Capítulo 2 e foram apresentados nas Tabela 2.8, 2.10 e 2.12.

Na Figura 3.15 são comparadas as imagens do leito granular experimental e simulado na condição de 20% de grau de preenchimento do tambor, nas velocidades de rotação de 5, 15 e 25 rad/s, utilizando partículas de poliacetal.

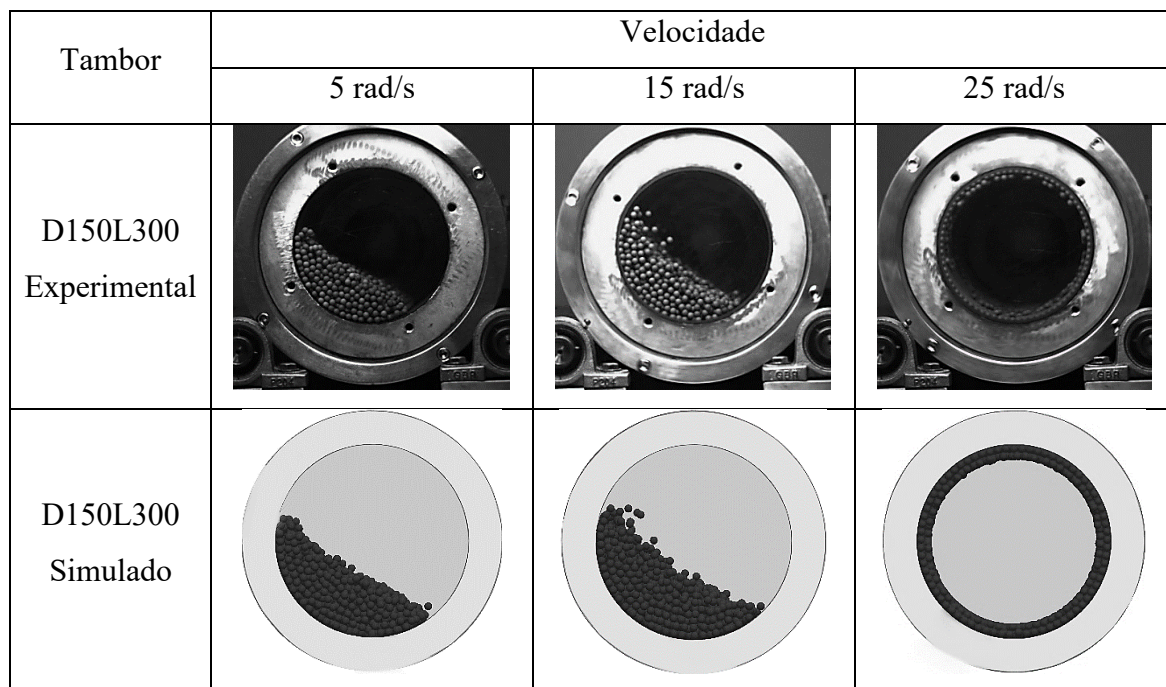


Figura 3-15: Comparação qualitativa da dinâmica granular experimental e numérica



Ao comparar as imagens provenientes das simulações Lagrangeanas com as obtidas experimentalmente, em cada velocidade de rotação, é observado uma boa correspondência entre as mesmas, indicando que a utilização do método dos elementos discretos representa satisfatoriamente a dinâmica de partículas no interior do tambor rotatório. Diversos autores também reportam na literatura resultados satisfatórios ao utilizar a abordagem numérica Lagrangeana para o estudo da dinâmica granular em tambores, tais como Alchikh-Sulaiman *et al.* (2016), Chou *et al.* (2016), Gui *et al.* (2018) e Liao *et al.* (2015).

Tendo em vista que houve uma boa concordância qualitativa entre as imagens experimentais e numéricas, realizou-se uma comparação entre as velocidades críticas de centrifugação experimentais e as obtidas numericamente, conforme apresentado na Tabela 3.7. É importante ressaltar que tanto as velocidades de centrifugação experimental quanto as numéricas foram determinadas a partir do momento em que a primeira camada de partículas centrifugava, ou seja, na formação do primeiro recobrimento de partículas na superfície lateral interna do equipamento.

Tabela 3.7: Comparação quantitativa da dinâmica granular experimental e numérica.

D (mm)	L (mm)	ω_c exp. (rad/s)	ω_c sim. (rad/s)	Desvio (%)
200	500	20,2±0,8	19,7±1,6	2,48
150	500	21,8±3,7	21,2±1,7	2,75
100	500	27,6±1,8	26,0±0,5	5,80
200	300	18,6±2,1	16,8±1,9	9,68
150	300	22,8±2,3	21,0±1,8	7,89
100	300	26,0±1,9	24,5±1,7	5,77
200	100	18,2±1,8	18,4±1,2	1,10
150	100	23,6±3,2	22,5±2,0	4,66
100	100	28,0±2,3	27,7±2,3	1,07

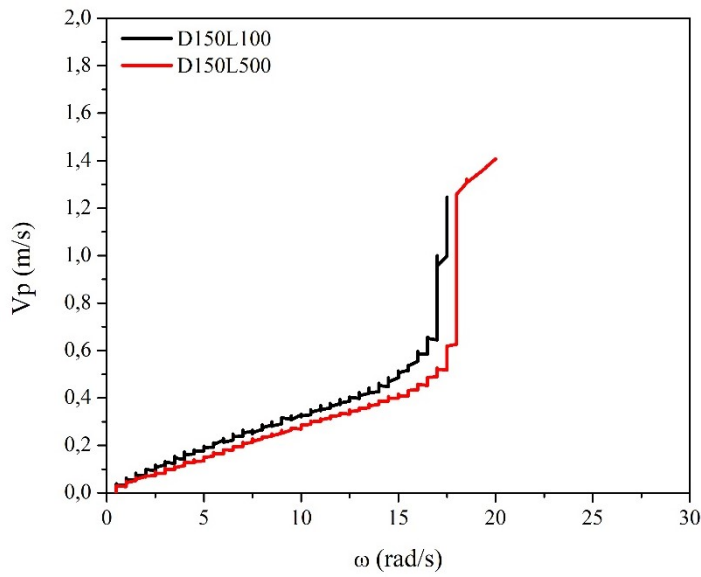
Ao comparar as velocidades críticas de centrifugação é possível verificar que os valores encontrados nas simulações Lagrangeanas se mostraram equivalentes aos obtidos experimentalmente, corroborando com a avaliação qualitativa realizada anteriormente. A



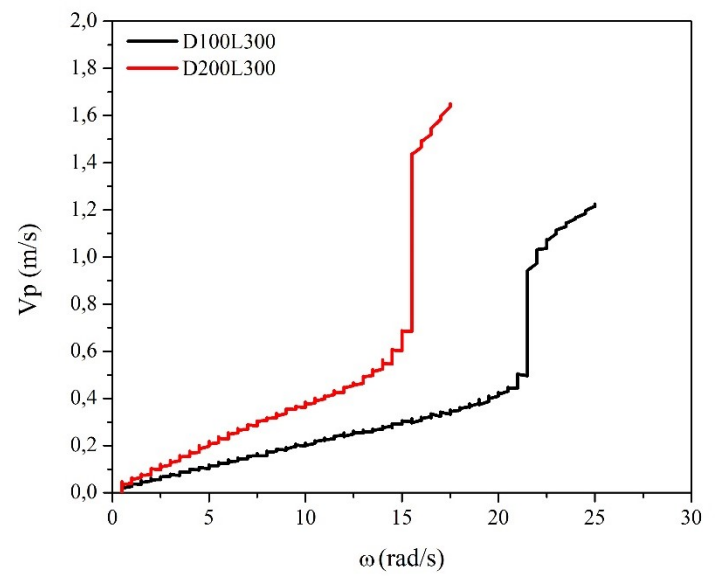
adequação das simulações perante os experimentos realizados, demonstra que os parâmetros DEM determinados experimentalmente neste trabalho podem ser incorporados ao modelo, resultando em simulações fidedignas com as análises experimentais, apresentando significados físicos e de obtenção através das metodologias descritas no Capítulo 2.

Na Figura 3-16 são apresentados os perfis de velocidade média de todas as partículas em função da velocidade de rotação do tambor rotatório obtidos por simulação. Ao avaliar a Figura 3-16a, na qual é estudado o efeito do comprimento do equipamento, observa-se que os perfis de velocidade se encontram próximos durante toda a faixa de velocidade analisada. A proximidade entre os perfis de velocidade demonstra, quantitativamente, que a mudança no comprimento não acarretou em alterações significativas sobre a dinâmica das partículas. Ao avaliar o efeito do diâmetro (Figura 3-16b), nota-se que, ao elevar a velocidade de rotação, os perfis ficam cada vez mais discrepantes. Este comportamento pode ser melhor visualizado avaliando a diferença de magnitude da velocidade crítica de centrifugação, representado pelo ponto de transição correspondente à mudança abrupta de velocidade média das partículas. Neste ponto, parte das partículas se aderem à superfície lateral do equipamento, promovendo a intensificação da sua velocidade e, conseqüentemente, a velocidade média do leito é alterada, formando uma descontinuidade no perfil de velocidade média das partículas.

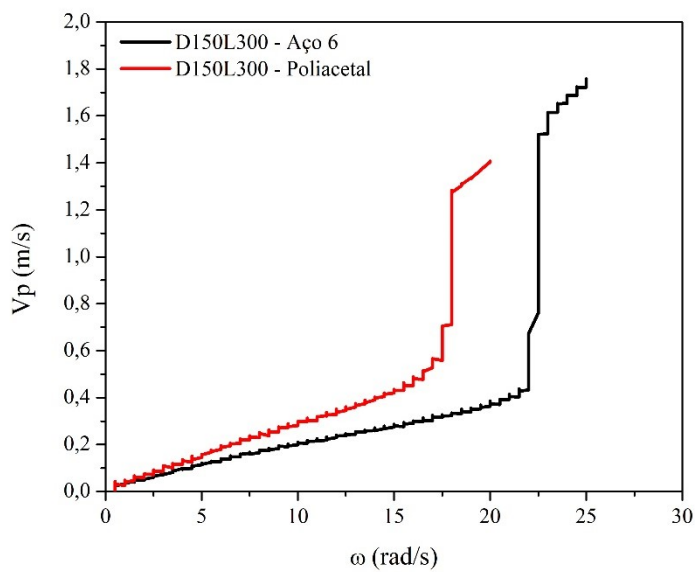
Além da avaliação da influência das dimensões do equipamento sobre os perfis de velocidade média das partículas, foi investigada as alterações promovidas pela variação nas propriedades físicas das partículas. Nota-se que, tanto na Figura 3.16c quanto na Figura 3.16d, os perfis de velocidade apresentam pontos de transição diferentes, ou seja, avaliando os perfis de velocidade, existem indicativos de que a mudança de densidade e do diâmetro granular promovem mudanças na dinâmica das partículas, resultado este diferente das avaliações realizadas anteriormente, conforme apresentado nas Figuras 3.13, 3.14 e Tabela 3.10. Isto ocorre pois, além das mudanças nas propriedades granulares, é necessária a adequação dos parâmetros DEM para cada tipo de partícula avaliada. Deste modo, a diferença nos perfis de velocidade está atrelada aos valores destes parâmetros.



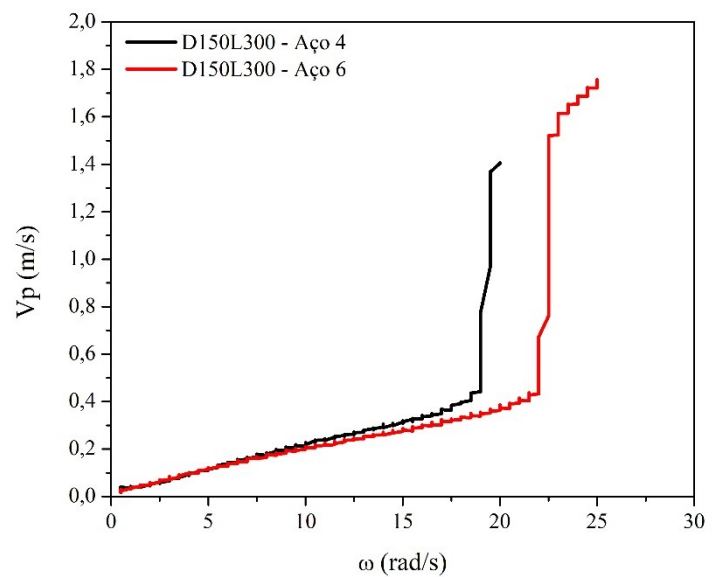
(a) Efeito do comprimento do tambor



(b) Efeito do diametro do tambor



(c) Efeito da densidade granular



(d) Efeito do tamanho granular

Figura 3-16: Perfil de velocidade média de todas as partículas em função da velocidade de rotação: verificação numérica.



Diante da necessidade de uma observação mais cautelosa, foi realizado um planejamento composto central para avaliar os efeitos das dimensões do equipamento, das propriedades da partícula e do grau de preenchimento, mantendo-se constantes os parâmetros, e_p , μ_s e μ_r , em todos os casos avaliados. Na Tabela 3.8 são apresentados os resultados da velocidade crítica de centrifugação nos pontos limites do planejamento, $\pm\alpha$. A tabela completa dos resultados obtidos no planejamento é apresentada no Apêndice 2.

Tabela 3.8: Avaliação da velocidade crítica de centrifugação a partir das simulações Lagrangeanas.

Simulação	d (mm)	ρ (kg/m ³)	D (m)	L (m)	f (-)	ω_c sim. (rad/s)
33	2,0	4500,0	0,2	0,3	0,2	16,5
34	10,0	4500,0	0,2	0,3	0,2	16,5
35	6,0	500,0	0,2	0,3	0,2	16,5
36	6,0	8500,0	0,2	0,3	0,2	16,5
39	6,0	4500,0	0,1	0,3	0,2	22,0
40	6,0	4500,0	0,3	0,3	0,2	13,5
41	6,0	4500,0	0,2	0,1	0,2	15,5
42	6,0	4500,0	0,2	0,5	0,2	16,0
43	6,0	4500,0	0,2	0,3	0,1	19,0
44	6,0	4500,0	0,2	0,3	0,3	15,5

Ao verificar apenas a mudança do comprimento do equipamento (Figura 3-17a), simulações 41 e 42, como discutido anteriormente, não foi observado mudanças significativas na velocidade crítica de centrifugação. Em contrapartida, ao elevar o diâmetro de 0,1 para 0,3 m (Figura 3-17b), simulações 39 e 40, ocorreu uma redução de aproximadamente 39% na velocidade crítica, ou seja, o aumento do diâmetro do equipamento antecipou o surgimento do regime de centrifugação, estando de acordo com as observações realizadas experimentalmente neste trabalho.

Ao avaliar isoladamente o efeito do tamanho das partículas (Figura 3-17c), simulações 33 e 34, e de suas densidades (Figura 3-17d), simulações 35 e 36, verifica-se que as velocidades críticas são equivalentes e que os perfis são coincidentes, indicando que a variáveis avaliadas não exercem influência sobre a resposta. Os efeitos do tamanho e da densidade da partícula foram avaliados nos trabalhos de Rose e Sullivan (1986) e Meier *et*



al. (2007). Nestes estudos os autores também concluíram que as propriedades granulares não exercem influência sobre a resposta, exceto na utilização de um nível de preenchimento do tambor superior a 75%.

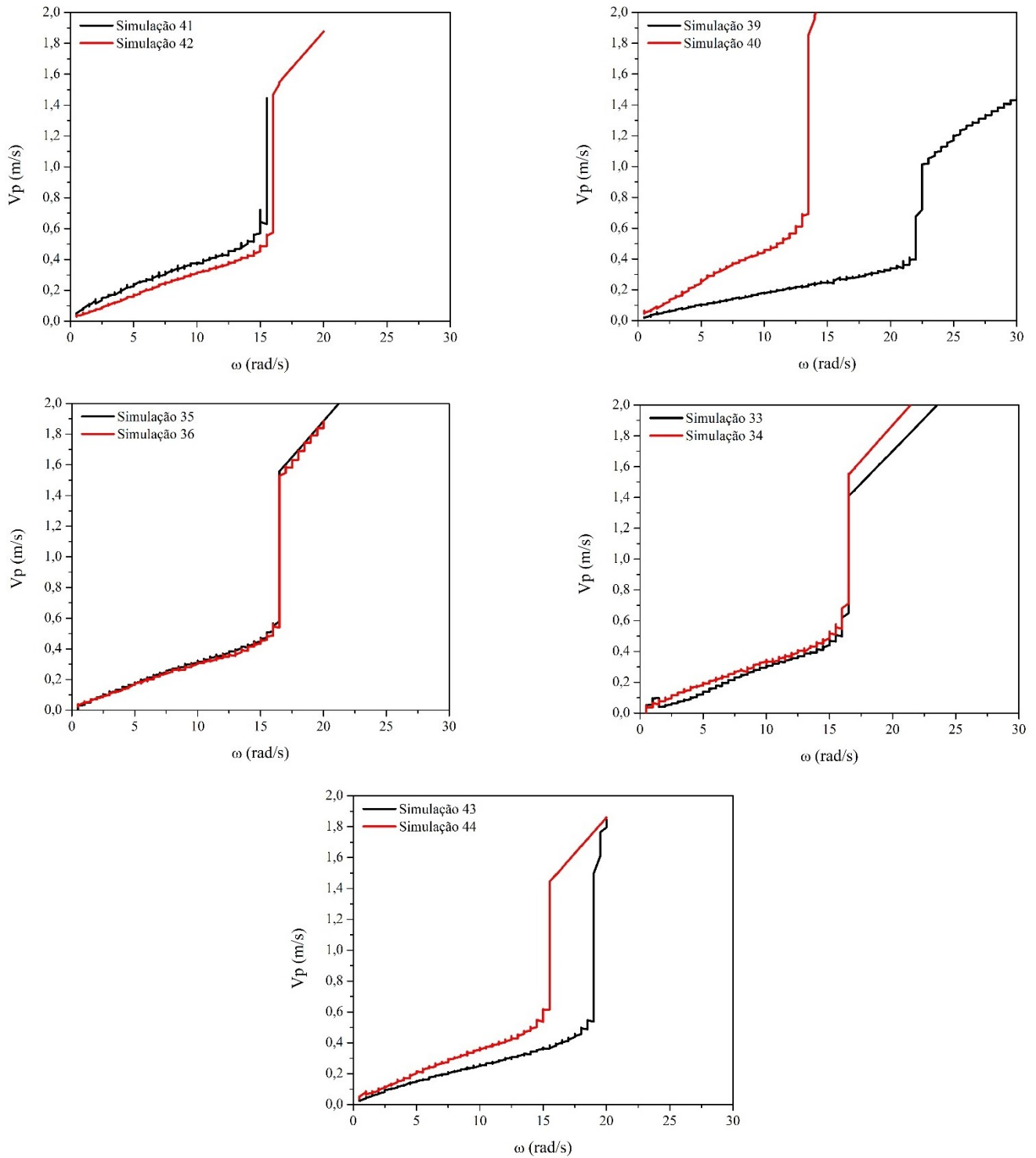


Figura 3-17: Perfil de velocidade média de todas as partículas em função da velocidade de rotação: PCC.



O efeito do grau de preenchimento do tambor sobre a velocidade crítica de centrifugação também foi investigado. Nas simulações 43 e 44 é verificado que, ao elevar o grau de preenchimento de 0,1 para 0,3, a velocidade de rotação do equipamento, necessária para atingir a centrifugação, diminui de 19,0 para 15,5 rad/s, mostrando que o efeito do preenchimento se assemelha ao que foi encontrado para diâmetro do equipamento. Maiores valores de preenchimentos promovem a antecipação da centrifugação do material granular. Watanabe (1999) concluiu em seu estudo que tanto experimentalmente quanto através de simulações Lagrangeanas, a velocidade crítica de centrifugação é reduzida com a elevação do grau de preenchimento, apresentando um comportamento linear até valores próximos a 50% de preenchimento.

A partir dos resultados do planejamento composto central (Apêndice 2), foi realizada uma regressão não linear, avaliando os resultados em nível de significância de 5%, com auxílio do software Statistica® 7. A Equação 3.14, cujo coeficiente de correlação quadrático é de 0,87, mostra que, conforme avaliado isoladamente, apenas o diâmetro (variável x_3) e o grau de preenchimento (variável x_5) apresentaram influência significativa sobre a resposta.

$$\omega_c = 16,52 - 2,22x_3 + 0,32x_3^2 - 0,96x_5 - 0,19x_1x_2 + 0,15x_1x_4 + 0,42x_2x_3 - 0,33x_2x_5 \quad (3.14)$$

$$x_1 = \frac{d-6}{2} \quad x_2 = \frac{\rho-4500}{2000} \quad x_3 = \frac{D-200}{50} \quad x_4 = \frac{L-300}{100} \quad x_5 = \frac{f-0,20}{0,05}$$

sendo x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 a codificação das variáveis diâmetro da partícula, densidade, diâmetro do tambor, comprimento, e grau de preenchimento, respectivamente.

Uma vez concluído que apenas o diâmetro do equipamento e o grau de preenchimento influenciam a resposta, foi proposto uma nova modificação sobre a equação de Rose e Sullivan, na qual foi incorporada o grau de preenchimento (f) e o parâmetro relacionado à rugosidade da parede (ϕ), conforme apresentado na Equação 3.15. A estimação destes parâmetros frente às simulações e aos dados experimentais, apresentou um coeficiente de correlação de 0,90. O grau de preenchimento possui uma dependência não linear, cujo expoente estimado foi de 0,22 e o parâmetro de rugosidade estimado em 0,86, sendo esta relação válida para graus de preenchimento variando de 0,1 a 0,3 e diâmetro do tambor de 0,1 a 0,3 m.

$$\omega_{c \text{ est.}} = \frac{4,43}{\phi f^{0,22} \sqrt{D}} \quad (3.15)$$



3.5. Conclusão

Com base nos objetivos propostos e diante dos resultados obtidos acerca dos regimes de escoamento, tem-se as conclusões descritas a seguir:

- ✓ A velocidade crítica de centrifugação analisada experimentalmente mostrou-se dependente do diâmetro do tambor, porém não foi influenciada significativamente pelo comprimento do equipamento e pelas propriedades físicas granulares como o diâmetro e a densidade na faixa avaliada;
- ✓ A aplicação da abordagem numérica Lagrangeana deu-se de maneira satisfatória. As simulações realizadas puderam ser validadas com os resultados experimentais, apresentando boa concordância;
- ✓ A partir da análise numérica foi avaliado quantitativamente, o perfil de velocidade média das partículas em função da velocidade de rotação do tambor rotatório, permitindo identificar o momento em que o leito migrava para o regime de centrifugação;
- ✓ Ao verificar numericamente os efeitos das variáveis de projeto e operacionais do tambor rotatório (diâmetro, comprimento e grau de preenchimento) bem como as propriedades das partículas, foi observado que apenas o diâmetro do equipamento e o grau de preenchimento apresentou influência sobre a velocidade crítica de centrifugação, corroborando com a avaliação feita experimentalmente;
- ✓ Foi proposta uma relação para a previsão da velocidade crítica de centrifugação em função do diâmetro do equipamento bem como seu grau de preenchimento, além disso é avaliada também a inserção de um novo parâmetro para predição da velocidade crítica de centrifugação, estando este relacionado a rugosidade da parede.

CAPÍTULO 4

DIFUSIVIDADE GRANULAR

4.1. Introdução

Estudos a respeito do fluxo de materiais granulares têm sido realizados na tentativa de determinar mecanismos que permitam explicar os fenômenos envolvidos na dinâmica de partículas. No entanto, a complexidade inerente do fluxo granular faz com que a compreensão dos comportamentos dinâmicos seja de elevada dificuldade.

Um exemplo da elevada complexidade quando se trata de materiais granulares no interior de equipamentos, é o caso do tambor rotatório. Neste equipamento, fenômenos tais como a segregação radial e a axial podem ser observados. Na segregação radial, percebe-se a formação de um núcleo composto por partículas mais densas ou de menor dimensão. Já na segregação axial, é verificada a formação de bandas alternadas que podem vir a apresentar uma dependência com o tempo.

Com o intuito de favorecer o entendimento a respeito do fenômeno de segregação e as possíveis variáveis que a influenciam, neste capítulo será desenvolvida uma avaliação sobre a difusividade granular radial e axial.



4.2. Revisão bibliográfica

Em processos industriais que envolvem materiais granulares, é imprescindível a produção de materiais homogêneos e de boa qualidade. Diante disso, esforços têm sido realizados na tentativa de descrever, através de modelos matemáticos, a dinâmica de partículas e seus fenômenos envolvidos, como o de segregação granular. Um metodologia experimental aplicada ao estudo de fluxos granulares é dado pela utilização de agentes traçadores, que podem ser identificados ou medidos no sistema, apresentando características físicas e/ou químicas específicas, adicionadas ao sistema (RAO *et al.*, 1991).

Difusão granular

No estudo a respeito dos fluxos granulares, duas abordagens são comumente aplicadas para avaliar as características de difusão granular, as abordagens macroscópica e a microscópica (TABERLET *et al.*, 2006). Na abordagem macroscópica, um pulso de material rastreável é injetado no leito, e a mudança do seu perfil de concentração ao longo do comprimento do equipamento e do tempo pode ser monitorada para determinar o comportamento da difusão.

Com base na abordagem macroscópica, o trabalho experimental realizado por Khan e Morris (2005) avaliaram os efeitos do tamanho de partícula e da velocidade de rotação no coeficiente de difusão axial em tambor rotatório. Os autores investigaram a aplicação de dois modelos, a equação da difusão (Equação 4.1) e a equação da difusão fracionária (Equação 4.2), para a avaliação do fenômeno de segregação granular no interior de tambores rotatórios. Na aplicação da equação da difusão, tem-se um sistema governado pela segunda Lei de Fick, sendo a difusão denominada como fickiana. Já a equação de difusão fracionada, é definida pela ordem da derivada do tempo, que é um número fracionário. Sendo este modelo frequentemente utilizado para descrever processos que ocorrem em espaços onde existem restrições temporais ou espaciais, como o fluxo de traçadores através de meios porosos.

$$\frac{\partial}{\partial t} C(z, t) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} C(z, t) \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} C(z, t) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} C(z, t) \quad (4.2)$$



Fischer *et al.* (2009) ao avaliarem um pulso de partículas com 2,4 mm de diâmetro, observaram que o mecanismo difusivo segue a lei de Fick, enquanto que o pulso de partículas com diâmetro de aproximadamente 5 mm apresentou mecanismo sub-difusivo.

Taberlet *et al.* (2006) rastrearam o perfil de concentração de esferas de vidro, e concluíram que o deslocamento médio quadrático aumentou linearmente com o tempo, indicando o mecanismo de difusão fickiana da fase sólida ao longo da direção axial.

Third *et al.* (2010) estudaram, utilizando a abordagem numérica Lagrangeana, a difusão axial no interior de tambores rotatórios. Os autores concluíram que a difusão é dependente do tamanho das partículas e do tamanho do tambor. Além disso, foi observada a formação de regiões preferenciais ao longo da direção axial devido à formação das bandas de concentração.

Por outro lado, no método microscópico, a trajetória de cada partícula é rastreada e os correspondentes coeficientes de difusão são avaliados de acordo com modelos matemáticos, como a equação de Einstein (Equação 4.3).

$$D_z = \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \quad (4.3)$$

Através da abordagem microscópica, Ingram *et al.* (2005) rastrearam experimentalmente uma partícula traçadora radioativa dentro de um tambor rotatório parcialmente preenchido, e concluíram que a difusão axial é independente do diâmetro do equipamento, entretanto significativamente dependente do tamanho da partícula. Experimentos realizados por Taberlet *et al.* (2004), utilizando partículas traçadoras, indicaram que a difusão no tambor rotatório está relacionada à velocidade de rotação e ao tamanho das partículas, e segue uma distribuição normal.

Traçadores

A função dos traçadores nos estudos de sistemas granulares deriva da necessidade da melhor compreensão a respeito dos fenômenos inerentes à sistemas compostos por partículas. A escolha do traçador deve ser realizada de acordo com a natureza do sistema granular, a fim de fornecer informações precisas e evitando perturbações no escoamento. Deste modo, a sua seleção deve levar em consideração características físicas e químicas do meio granular. A principal característica de um traçador é a sua capacidade de distinção em relação as demais partículas formadoras do leito granular, o que facilita a medida da sua concentração/movimentação. Além disto, os traçadores devem fornecer um sinal detectável



ou quantificável e apresentar-se no sistema em quantidades representativas (DOSTA *et al.*, 2016).

Na Tabela 4.1 são apresentados estudos de sistemas granulares com a aplicação de traçadores.

Tabela 4.1: Utilização de traçadores em sistemas granulares.

Tipo de traçador	Aplicação	Referência
Magnético	Estudo do fenômeno de segregação axial.	Kohler <i>et al.</i> (2017)
Coloração	Estudo da cinética de mistura influenciada pela formação de finos.	Nguyen <i>et al.</i> (2014)
Térmico	Estudo da velocidade do misturador e qualidade de mistura em misturadores verticais.	Saberian <i>et al.</i> (2009)
Fluorescente	Determinação da concentração de microesferas fluorescentes em superfícies de folhas.	Burkhardt <i>et al.</i> (2012)]
Radioativo	Avaliação de distribuição granulométrica a partir de traçadores radioativos.	Dale <i>et al.</i> (2014)c



4.3. Materiais e métodos

Neste tópico será apresentada a metodologia aplicada ao estudo da difusividade granular no interior de tambores rotatórios.

No estudo da difusividade granular, foram avaliadas numericamente as influências das propriedades físicas das partículas formadoras do leito (r_{P1} e ρ_{P1}) e traçadoras (r_{P2} e ρ_{P2}), das propriedades de interação entre elas (e_{pp} , μ_{spp} , μ_{rpp}) e da velocidade de rotação do tambor (Tabela 4.2). Os valores das variáveis apresentados na Tabela 4.2, bem como a determinação das condições a serem analisadas, foram obtidos utilizando um planejamento composto central fracionário de resolução IV, resultando na realização de 81 simulações, utilizando um alfa de ortogonalidade de 1,9435.

Tabela 4.2: Planejamento composto central: influência das propriedades granulares e de interação e da velocidade de rotação na difusividade granular.

Variável	Níveis				
	$-\alpha$ (-1,9435)	-1	0	1	$+\alpha$ (+1,9435)
r_{P1} (mm)	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
r_{P2} (mm)	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0
ρ_{P1} (kg/m³)	1113,05	3000,00	5000,00	7000,00	8886,95
ρ_{P2} (kg/m³)	1113,05	3000,00	5000,00	7000,00	8886,95
ω (rad/s)	0,06	1,00	2,00	3,00	3,94
μ_{spp} (-)	0,01	0,20	0,40	0,60	0,79
μ_{rpp} (-)	0,001	0,020	0,040	0,060	0,079

Com o intuito de quantificar a difusividade granular, 10 partículas traçadoras (Figura 4-1), denominadas P2, foram inseridas no leito formado pelas partículas, denominadas P1. A seleção do número de partículas traçadoras no sistema foi baseada em trabalhos da literatura, como o de Ingram *et al.* (2005). Em intervalos de tempo de 1,0 s, era observado o deslocamento das partículas traçadoras no leito granular. A partir da aplicação da equação de Einstein (Equação 4.3), eram então obtidos os valores de difusividade para cada uma delas, e realizado o cálculo da média em cada intervalo de tempo, durante todo o tempo de simulação.



A partir dos resultados obtidos através da equação de Einstein, foi realizada, utilizando a técnica de regressão, a avaliação dos efeitos de cada uma das variáveis estudadas a partir do planejamento composto central.

Além da utilização das técnicas clássicas de regressão, foi também aplicada a técnica de redes neurais artificiais (ANN), utilizando 80% dos dados para o treinamento da rede e 20% para verificação, permitindo estimar com maior acurácia as difusividades nas condições propostas. Para a difusividade granular radial, utilizou-se uma rede composta por uma camada contendo 4 neurônios, e para a análise da difusividade granular axial, uma camada contendo doze neurônios. Em ambas as redes, os neurônios utilizados foram do tipo *ReLu* (*Rectified Linear Units*), conforme exemplificado na Equação 4.4.

$$f(x) = \max(0, x) \quad (4.4)$$

Vale ressaltar que o tempo simulado foi de 50 segundos e que a difusividade granular era computada durante todo o tempo de simulação, permitindo a identificação do período transiente, bem como do estado estacionário.

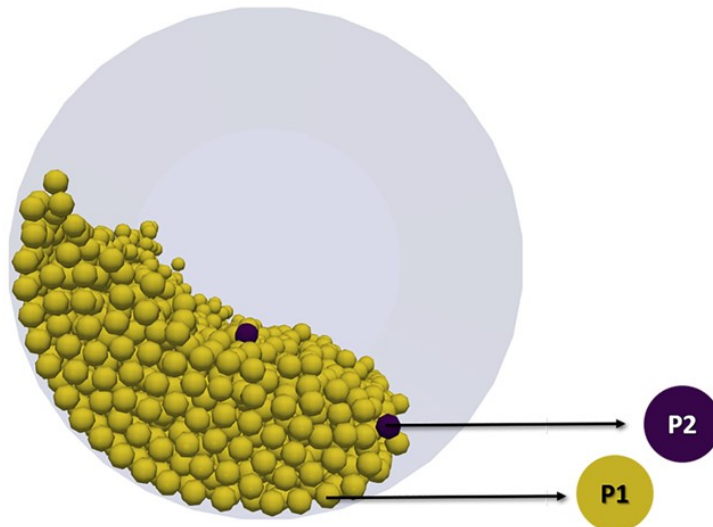


Figura 4-1: Representação das partículas formadoras do leito granular (P1) e das partículas traçadoras (P2).

Como o foco do estudo se encontrava na interação entre partículas, valores *default* de parâmetros de interação entre partículas e parede foram utilizados. Observa-se também que não foi avaliado a influência do coeficiente de restituição tanto partícula-partícula quanto partícula-parede, uma vez que em um estudo prévio, Brandao 2017 já havia



constatado que esses parâmetros não apresentam influência significativa sobre a dinâmica de partículas operando em regime de rolamento. Na Tabela 4.3 são apresentados os valores dos parâmetros utilizados nas simulações numéricas.

O tempo de integração foi determinado utilizando o valor limite de 5% do tempo de Rayleigh (Equação 4.5), com o intuito de garantir a estabilidade numérica das simulações (DANBY *et al.*, 2013). O módulo de cisalhamento empregado em todas as simulações foi de 5×10^6 Pa. Apesar deste valor estar abaixo dos obtidos experimentalmente para cada material, sua magnitude apresenta grande influência sobre o custo computacional, elevando o tempo necessário para a realização das simulações. A técnica de redução do módulo de cisalhamento é largamente aplicada na literatura, como pode ser identificado nos trabalhos de Koynov *et al.* (2016), Lommen *et al.* (2014) e Yoshida *et al.* (2016).

$$T_R = \frac{\pi r \sqrt{\frac{\rho_s}{G}}}{(0,1613 \cdot \sigma_p + 0,8766)} \quad (4.5)$$

sendo σ_p a razão de Poisson da partícula e G seu modulo de cisalhamento.

Tabela 4.3: Parâmetros DEM aplicados às simulações Lagrangeanas.

Parâmetros numéricos	
e_{pp} (-)	0,90
e_{pw} (-)	0,90
μ_{spw} (-)	0,50
μ_{rpw} (-)	0,05
Tempo de integração (s)	1×10^{-6}



4.4. Resultados e discussão

Neste tópico serão apresentados os resultados obtidos a partir da aplicação da metodologia para a determinação numérica da difusividade axial e radial, avaliando a influência das propriedades físicas dos materiais granulares, bem como dos coeficientes de atrito estático e de rolamento.

Avaliando a dispersão dos dados de difusão ao longo do tempo, observa-se que estes seguem uma distribuição normal (Figura 4-2a e 4.2b), permitindo realizar inferências a respeito dos efeitos das variáveis através de um valor representativo do sistema, a média aritmética. Parker *et al.* (1997) estudaram a difusão de partículas esféricas em tambores rotatórios usando o rastreamento de partículas por emissão de pósitrons. Os autores mostram que os valores obtidos seguem uma distribuição normal, confirmando assim que a difusão é regida pela segunda Lei de Fick.

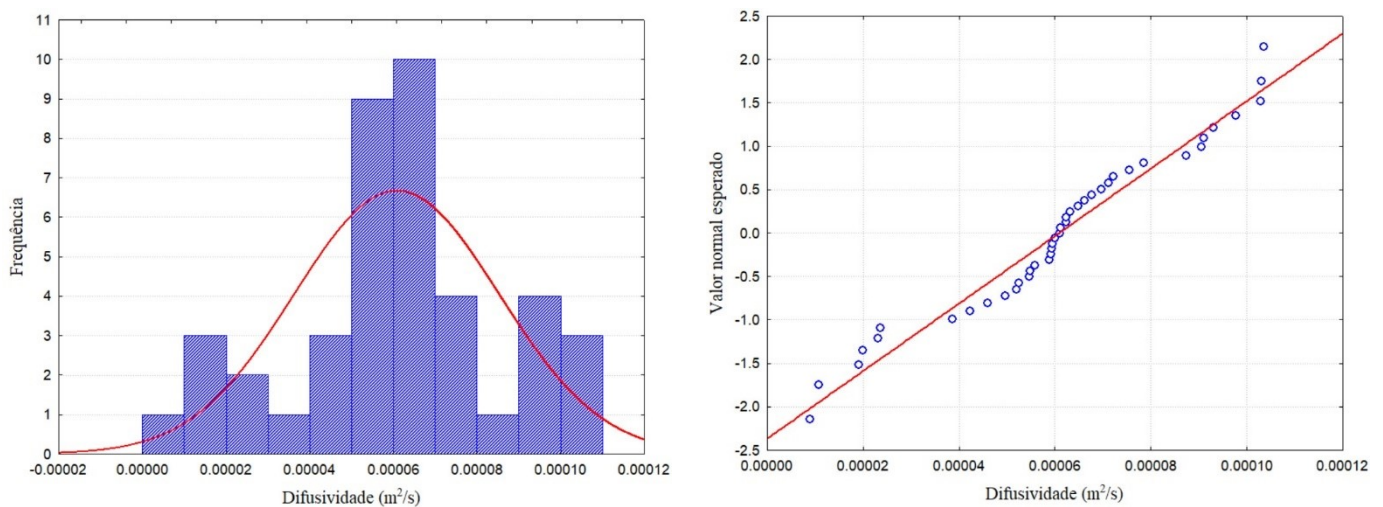


Figura 4-2: Distribuição de frequência da difusividade ao longo do tempo.

Na Figura 4-3 é apresentado o comportamento genérico da difusividade das partículas traçadoras ao longo do tempo, obtidas através da aplicação da equação de Einstein. Nota-se que, apesar da existência de flutuações nos valores da difusividade, estes se encontram em torno de um valor médio.

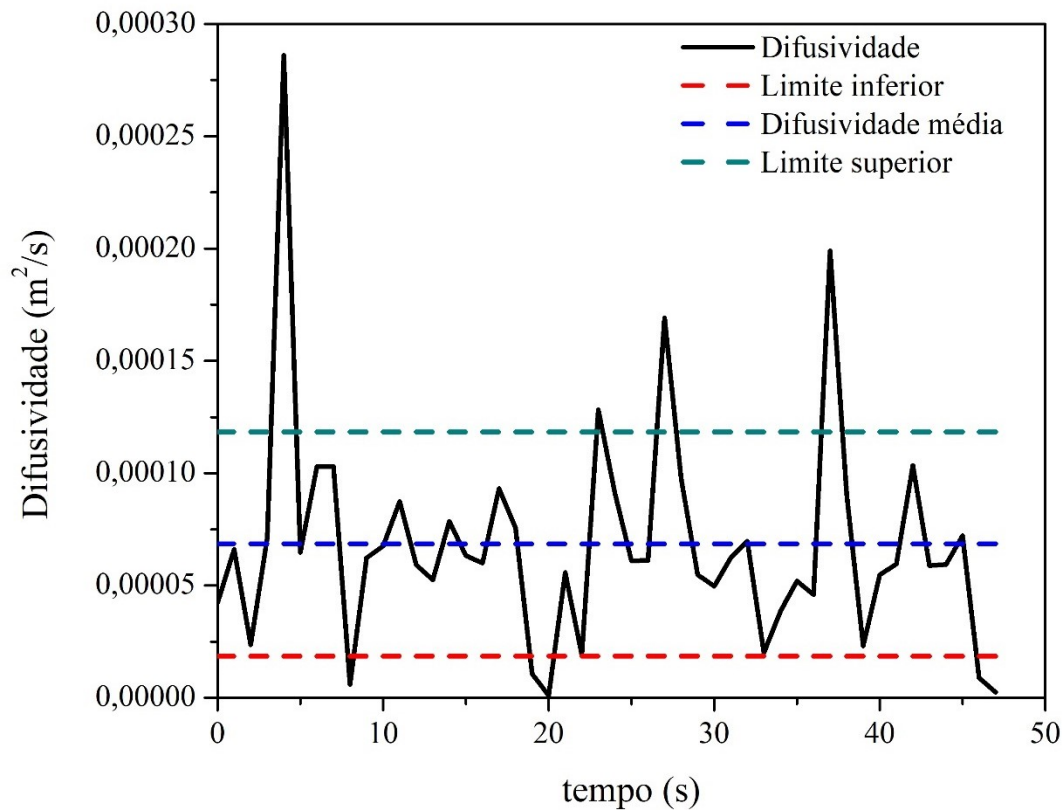


Figura 4-3: Comportamento transiente da difusividade granular.

Ao analisar a Figura 4-3, além das linhas identificadoras do valor médio da difusividade e dos limites superior e inferior, observa-se a existência de picos e de vales de maior amplitude. Estes estão relacionados à posição em que as partículas traçadoras se encontravam naquele instante. Devido a faixa de velocidade de rotação escolhida, o tambor operou em regime de rolamento nas condições avaliadas. Deste modo, caso os traçadores estivessem presentes na região ativa do leito, próximo à superfície livre, maior mobilidade teria estas partículas, promovendo distorções nos valores de difusividade. Este comportamento foi avaliado no estudo realizado por Mou *et al.* (2019), no qual os autores mensuraram as difusividades nas camadas ativa e passiva do leito granular em tambores rotatórios. Neste estudo, os autores demonstram que, a intensidade de dispersão é significativamente maior na região ativa quando comparada com a região passiva, corroborando com a discussão apresentada no presente trabalho.

Na Tabela 4.4 são reportados os resultados quantitativos da difusividade radial (D_R) e axial (D_A) das simulações 67 - 80 (pontos axiais do PCC), permitindo avaliar a influência do tamanho, da densidade e dos coeficientes de fricção entre partículas sobre a segregação granular. O planejamento composto central completo é apresentado no Apêndice 3.



Tabela 4.4: Influência das propriedades granulares, de interação e da velocidade de rotação sobre a difusividade radial e axial granular.

Simulação	r_{P1} (mm)	r_{P2} (mm)	ρ_{P1} (kg/m ³)	ρ_{P2} (kg/m ³)	ω (rad/s)	μ_{spp} (-)	μ_{rpp} (-)	$D_R.10^4$ (m/s ²)	$D_A.10^5$ (m/s ²)
67	1,1	3,0	5000	5000	2,00	0,400	0,040	7,81	8,50
68	4,9	3,0	5000	5000	2,00	0,400	0,040	13,42	9,60
69	3,0	1,1	5000	5000	2,00	0,400	0,040	33,15	12,72
70	3,0	4,9	5000	5000	2,00	0,400	0,040	5,53	3,97
71	3,0	3,0	1113	5000	2,00	0,400	0,040	25,51	10,88
72	3,0	3,0	8887	5000	2,00	0,400	0,04	2,50	2,51
73	3,0	3,0	5000	1113	2,00	0,400	0,040	0,37	0,49
74	3,0	3,0	5000	8887	2,00	0,400	0,040	33,17	12,07
75	3,0	3,0	5000	5000	0,06	0,400	0,040	0,13	0,16
76	3,0	3,0	5000	5000	3,94	0,400	0,040	33,37	5,95
77	3,0	3,0	5000	5000	2,00	0,010	0,040	10,87	5,94
78	3,0	3,0	5000	5000	2,00	0,790	0,040	13,19	9,57
79	3,0	3,0	5000	5000	2,00	0,400	0,0010	14,69	8,99
80	3,0	3,0	5000	5000	2,00	0,400	0,079	12,61	6,71

Ao avaliar a Tabela 4.4, nota-se que ao comparar as simulações 67 e 68, apenas o raio das partículas formadoras (P1) do leito foi modificado. O aumento do raio de P1, promoveu a intensificação das difusividades radial e axial, sendo este fato justificado pelo aumento da distância de vazios interpartículas P1, facilitando a movimentação dos traçadores (P2). Ding *et al.* (2001) também identificaram que a dimensão das partículas exerce um papel crítico sobre a sua mobilidade no interior de tambores rotatórios. Examinando o efeito do aumento de tamanho da partícula traçadora (P2), simulações 69 e 70, bem como o aumento da sua densidade, simulações 73 e 74, verifica-se que a difusividade também foi intensificada. Estes casos podem ser justificados através do fenômeno de condensação granular. Ao elevar o tamanho ou a densidade das partículas traçadoras, a sua massa aumenta, fazendo com que haja uma migração mais rápida dessas partículas para o centro do leito, justificando a diferença nas difusividades reportadas.



De maneira inversa as situações reportadas, ao verificar o efeito do aumento da densidade das partículas P1, simulações 71 e 72, é observada uma redução de aproximadamente 10 vezes na difusividade radial. Isto ocorre pelo fato do aumento da densidade promover a intensificação do momento de inércia do leito granular, dificultando o deslocamento das partículas no instante em que se chocam com os traçadores, reduzindo assim a sua mobilidade.

Ademais, ao elevar a velocidade de rotação do leito, bem como o coeficiente de atrito entre partículas, é constatado que, por conta da intensificação da transferência da quantidade de movimento, as partículas adquirem maior mobilidade, promovendo o aumento da difusividade radial e axial. Nota-se ainda que o aumento do atrito de rolamento apresentou efeito inferior a velocidade de rotação e ao atrito estático. O aumento da velocidade de rotação elevou em mais de 30 vezes a difusividade, enquanto que o atrito de rolamento promoveu um aumento de apenas 1,3 vezes. Este fato ocorre devido a forma de movimentação das partículas durante o regime de rolamento, no qual a maior parte delas se encontram na região passiva, onde o leito se move de forma similar a um “bloco”, ou seja, sem movimento significativo entre as partículas, justificando o menor efeito do coeficiente de atrito de rolamento.

Na Tabela 4.4 é verificado que, ao comparar os valores da difusividade radial e axial no interior de tambores rotatórios, as difusividades radiais computadas são em média de 10 vezes maiores que aquelas na direção axial. Isto ocorre devido a movimentação natural de operação do equipamento. Este fato também pode ser observado através da Figura 4-4, na qual a difusividade radial se encontra próxima a $6,3 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ enquanto que a difusividade axial é de $6,7 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$.

Em posse dos valores de difusividades radial e axial das simulações do planejamento, foi realizada uma regressão com o intuito de quantificar a influência de cada uma das variáveis independentes.

$$D_R = \left(12,50 + 3,21x_1 + 1,94x_1^2 - 3,18x_2 - 5,79x_3 + 2,14x_3^2 + 5,21x_4 + 7,40x_5 + 2,86x_6 + 1,18x_7 \right. \\ \left. + 2,16x_2x_3 - 1,76x_2x_4 + 2,19x_2x_5 - 2,67x_2x_6 - 1,71x_3x_5 + 1,53x_4x_5 - 1,97x_5x_6 \right) \cdot 10^{-4} \quad (4.6)$$

$$D_A = \left(7,70 + 1,61x_1^2 - 1,94x_3 + 2,06x_4 + 5,03x_5 - 1,13x_6 - 1,07x_1x_2 + 1,51x_2x_6 + 0,90x_4x_5 - 0,91x_5x_6 \right) \cdot 10^{-5} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{r_{P1} - 3,0}{1,0} & x_2 &= \frac{r_{P2} - 3,0}{1,0} & x_5 &= \frac{\omega - 2,0}{1,0} & x_7 &= \frac{\mu_{rpp} - 0,040}{0,020} \\ x_3 &= \frac{\rho_{P1} - 5000}{2000} & x_4 &= \frac{\rho_{P2} - 5000}{2000} & x_6 &= \frac{\mu_{spp} - 0,40}{0,20} \end{aligned}$$

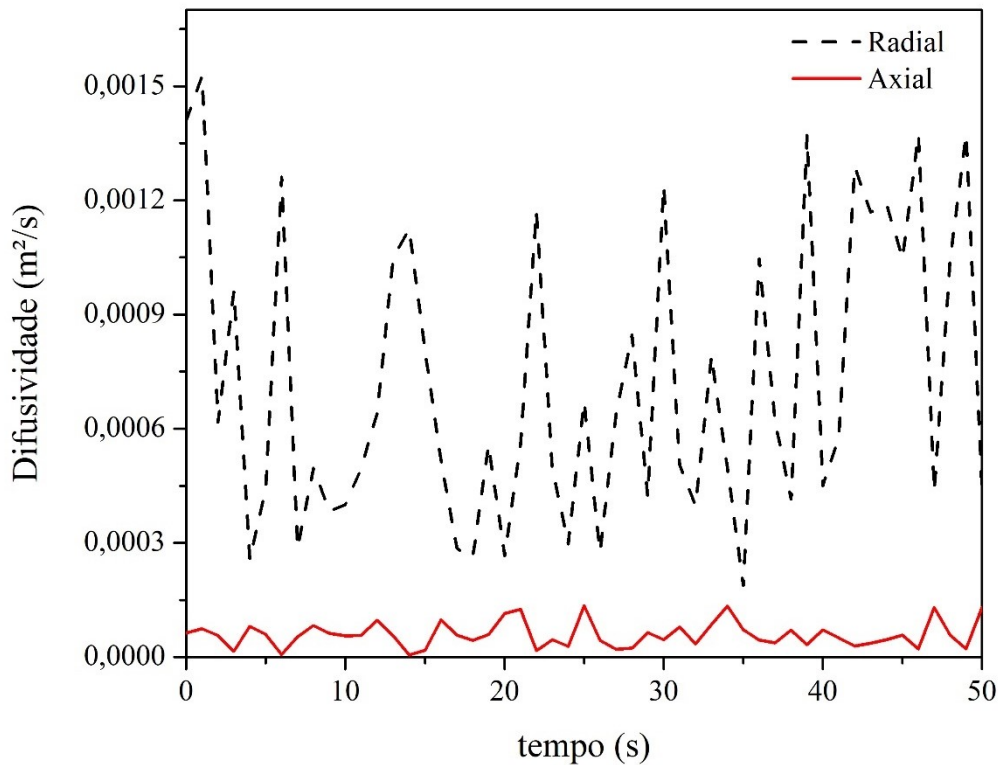


Figura 4-4: Comparação de magnitude da difusividade granular radial e axial.

A partir da análise da regressão, verifica-se que todas as variáveis apresentaram influência significativa sobre as difusividades, seja através de contribuições individuais lineares e quadráticas ou através de combinações de efeitos, quando avaliado em um nível de significância de 95%. De modo geral, as contribuições das variáveis avaliadas possuem efeito direto nas repostas, com exceção de x_3 , ou seja, a elevação dos valores das variáveis independentes, faz com que as difusividades sejam intensificadas. As regressões das difusividades radial e axial apresentaram coeficiente de correlação quadrático de 0,88 e 0,57, respectivamente. Diante disto, foi aplicado os dados do planejamento composto central à redes neurais artificiais. As redes empregadas foram nomeadas como: “DeffRadialANN” (Apêndice 9) e “DeffAxialANN” (Apêndice 10). Estas redes foram escritas em linguagem Python, apresentando 4 e 12 neurônios do tipo *ReLU* e coeficientes de correlação de 0,91 e 0,99, respectivamente. Dessa forma, foi possível estimar com maior exatidão a difusividade das partículas diante de suas características físicas, de interação e da velocidade de rotação do equipamento.



4.5. Conclusão

Com base nos objetivos propostos e diante dos resultados obtidos acerca da difusividade granular, tem-se as conclusões descritas a seguir:

- ✓ A aplicação da abordagem numérica Lagrangeana deu-se de maneira satisfatória, permitindo utilizar traçadores para a determinação da difusividade granular no interior de tambores rotatórios;
- ✓ Foi verificado que a difusão granular apresenta uma distribuição normal ao longo do tempo, permitindo assim utilizar o valor médio desta grandeza para a avaliação da influência dos parâmetros de interação, da velocidade de rotação e das propriedades granulares, com auxílio de um planejamento composto central;
- ✓ Foi verificado que a difusividade granular radial se mostrou em média 10 vezes superior à axial, sendo este fato atribuído à movimentação natural do equipamento.
- ✓ A partir dos dados presentes no planejamento composto central, foi observado que o aumento do tamanho da partícula formadora do leito granular (P1) promoveu o aumento da difusividade granular, sendo isto devido ao aumento do tamanho dos espaços interpartículas, facilitando a movimentação das partículas traçadoras. Foi também observado que tanto o aumento do tamanho quanto da densidade da partícula traçadora promoveu a elevação da difusividade granular, sendo este fato atribuído ao fenômeno de condensação granular;
- ✓ Ao verificar o efeito do aumento da densidade das partículas P1, é observada uma redução de aproximadamente 10 vezes na difusividade radial, sendo este fenômeno possivelmente devido à intensificação do momento de inércia do leito granular.
- ✓ A elevação da velocidade de rotação do leito, bem como do coeficiente de atrito, intensifica a taxa de transferência da quantidade de movimento entre as partículas, promovendo o aumento da difusividade radial e axial;
- ✓ Além da regressão múltipla polinomial, também foi atribuído à estimação da difusividade granular radial e axial o uso de redes neurais artificiais “DeffRadialANN” e “DeffAxialANN”, permitindo estimar estas grandezas com maior acurácia.

CAPÍTULO 5

SEGREGAÇÃO GRANULAR

5.1. Introdução

Em operações industriais, dois ou mais tipos de materiais granulares são frequentemente misturados, visando alcançar um certo grau de homogeneidade ao fim do processo. Todavia, na utilização de materiais com diferentes propriedades, tais como tamanho, densidade e forma, existe uma tendência de segregação ou diminuição da eficiência de mistura, prejudicando assim a qualidade do produto final.

Na utilização de tambores rotatórios, dois tipos de fenômenos que influenciam negativamente a eficiência de mistura são identificados: a segregação radial e a segregação axial. No caso da segregação radial, pesquisadores como He *et al.* (2018), Jain *et al.* (2013) e Jain *et al.* (2005), identificaram a formação do núcleo radial formado por partículas menores e/ou de maior densidade. Entretanto, métodos de quantificação da influência das propriedades das partículas sobre a eficiência de mistura ainda carecem de maior aprofundamento. Já a segregação axial, caracterizada pela formação de bandas alternadas de concentração de partículas, autores como Cui *et al.* (2014), Kuo *et al.* (2005), Lee *et al.* (2013), Liu *et al.* (2018), Santomaso *et al.* (2013) e Tang e Puri (2004), observaram a formação destas bandas, porém explicações físicas ainda se encontram escassas na literatura.

Com a finalidade de obter uma maior compreensão a respeito do fenômeno de mistura no interior de tambores rotatórios, neste capítulo será avaliada e quantificada a influência nas diferenças das propriedades do material granular (tamanho e densidade), bem como nas condições de operação (disposição inicial, grau de preenchimento e velocidade de rotação) sobre os fenômenos de segregação radial e axial.



5.2. Revisão bibliográfica

A mistura de materiais particulados é uma das operações básicas em diversos processos industriais, como por exemplo, na produção de produtos químicos, alimentícios, plásticos, cerâmicos, fármacos, fertilizantes e minerais. Na maioria dos casos, os materiais particulados devem ser uniformemente misturados para que se obtenham produtos com grau de qualidade adequado. Entretanto, devido à ocorrência do fenômeno de segregação, ocorre uma redução na eficiência de mistura, prejudicando a qualidade do produto final (ALCHIKH-SULAIMAN *et al.*, 2016).

A definição mais comum de uma mistura perfeitamente aleatória é aquela em que a probabilidade de encontrar uma partícula de um constituinte da mistura é a mesma em qualquer ponto do leito granular. Para quantificar o grau de homogeneidade de uma mistura de sólidos, são geralmente utilizados índices de mistura ou de segregação. Um índice de mistura deve estar relacionado, tanto quanto possível, com as características especificadas da mistura final, deve ser independente dos processos de mistura e facilmente determinado (FAN *et al.*, 1970).

Na última década, diversos estudos experimentais e numéricos, a respeito do fenômeno de mistura no interior de tambores rotatórios foram realizados (COMBARROS *et al.*, 2014; HE *et al.*, 2007). As características do material, como tamanho, forma e densidade, bem como propriedades de interação, como por exemplo, o coeficiente de atrito estático, o coeficiente de atrito de rolamento e o coeficiente de restituição e condições operacionais, como o grau de preenchimento, velocidade de rotação e disposição inicial, apresentam influência sobre comportamento da mistura de materiais granulares (YAMAMOTO *et al.*, 2016). Portanto, o índice e a cinética de mistura são funções de muitas variáveis relacionadas às características do material granular e as condições operacionais, as quais podem ser agrupadas de acordo com as classificações propostas por FAN *et al.* (1970), Tabela 5.1.

De acordo com Harnby (1967) e Lacey (1997), o fenômeno de segregação está relacionado a três mecanismos, isto é, a segregação difusiva, a segregação por cisalhamento e a segregação convectiva. A segregação difusiva está relacionada ao movimento browniano das partículas no interior do leito granular, sendo este processo governado por equações análogas aquelas aplicadas em sistemas fluidos, como por exemplo a segunda Lei de Fick. Já a segregação convectiva, apresenta como característica uma movimentação mais intensa de partículas, principalmente aquelas localizadas próximas à superfície livre do leito granular. Por fim, a segregação por cisalhamento ocorre geralmente em zonas do leito granular onde há elevada velocidade das partículas, porém na região mais interna no leito, apresentando assim características intermediárias à segregação difusiva e à convectiva.



Tabela 5.1: Variáveis que influenciam na mistura granular.

Características dos sólidos	Características do equipamento	Condições operacionais
Tamanho	Diâmetro	Proporção de partículas
Forma	Comprimento	Grau de preenchimento
Densidade	Revestimento interno	Disposição inicial
Teor de umidade	Material de construção	Velocidade de rotação
Ângulo de repouso		Tempo de residência
Coeficiente de atrito		Método e taxa de adição de material granular
Coeficiente de restituição		
Friabilidade		
Coesividade		
Escoabilidade		
Rugosidade superficial		

Diante das características expostas a respeito dos mecanismos de segregação, alguns autores mencionam que os tambores rotatórios apresentam majoritariamente o mecanismo de segregação difusiva, uma vez que a superfície livre apresenta um número de partículas inferior à região interna do leito (ALCHIKH-SULAIMAN *et al.*, 2016). Além disso, conforme discutido no Capítulo 3, referente aos regimes de escoamento, com exceção do catarateamento, a movimentação entre as partículas ocorre de maneira “sutil”, minimizando assim o efeito das forças cisalhantes.

Índice de Segregação

Diversos critérios para a determinação do grau de mistura foram propostos na literatura, sendo que a maioria destes foram concebidos com base em análises estatísticas, enquanto que outros utilizam métodos de fotometria ou até mesmo abordagens cinéticas (FAN *et al.*, 1970). A diferença nas definições e critérios para a determinação do índice, revela a complexidade do processo de mistura e a incerteza em relação a sua quantificação. Devido à natureza aleatória do fenômeno, a análise estatística tornou-se a abordagem mais frequentemente utilizada. Na Tabela 5.2, são apresentadas algumas equações para determinação do índice de segregação.



Tabela 5.2: Índices de segregação.

Autores	Índice de Segregação
Lexis (1877)	$M = \frac{\sigma}{\sigma_r}$ (5.1)
Beaudry (1948)	$M = \frac{\frac{\sigma_o}{\sigma_r} - 1}{\frac{\sigma_o}{\sigma_r} - 1}$ (5.2)
Leggatt (1951)	$M = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{\bar{x}}$ (5.3)
Smith (1955)	$M = \frac{\sigma_o}{\sigma}$ (5.4)
Yano <i>et al.</i> (1956)	$M = \frac{\sigma}{\sigma_o}$ (5.5)
Adams e Baker (1956)	$\sigma^2 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}$ (5.6)
Herdan (1960)	$M = \frac{\sigma^2 - \sigma_r^2}{\bar{x}^2}$ (5.7)
Westmacott e Linehan (1960)	$M = \frac{\sigma^2}{\sigma_o^2}$ (5.8)
Miles (1962)	$M = \frac{\sigma^2}{\sigma_o^2} - 1$ (5.9)
Kramer (1968)	$M = \frac{\sigma_o - \sigma}{\sigma_o - \sigma_r}$ (5.10)
Lacey (1997)	$M = \frac{\sigma_o^2 - \sigma^2}{\sigma_o^2 - \sigma_r^2}$ (5.11)

Zhou *et al.* (2016), utilizando o índice de segregação proposto por Lacey (1997), Equação 5.4, avaliaram a cinética de segregação de partículas de vidro no interior de tambores rotatórios. Neste estudo, os autores mostram que o índice representou de maneira satisfatória a cinética de segregação. Na equação, σ^2 é a variância de partículas no tambor rotatório, σ_o^2 e σ_r^2 representam as variâncias de partículas quando completamente segregadas e bem misturadas, respectivamente. O índice de segregação obtido apresenta, então, duas condições limítrofes, um



valor zero para uma mistura completamente segregada e aumenta para a unidade na condição de máxima homogeneidade de mistura.

Além do método de quantificação do índice de segregação, outras variáveis devem ser levadas em consideração para uma análise adequada do mesmo, entre elas estão o método de amostragem, o tamanho e o número de amostras. Desta forma, nos tópicos a seguir são discutidas, sucintamente, a relevância das mesmas.

i) Método de amostragem

A escolha de uma técnica de amostragem depende das características do misturador e da mistura. Métodos comumente usados são apresentados a seguir:

(a) Amostragem por sonda: Neste tipo de amostragem, é inserido uma haste contendo um orifício no interior do leito granular, sendo esta haste projetada de forma a minimizar perturbações no escoamento. É então realizada a coleta das partículas e avaliado o número ou concentração de cada uma delas na amostragem.

(b) Subdivisão completa da mistura: Neste método, todo o leito é subdividido e então avaliado estatisticamente a variação de concentração em cada célula.

(c) Fluxo de saída: Este método é comumente aplicado para equipamentos que operam continuamente. As amostras são avaliadas na saída do misturador em um intervalo de tempo fixo, permitindo a confecção do perfil de concentração e consequentemente identificação de variações devido o fenômeno de segregação.

ii) Tamanho da amostra

Um importante parâmetro para a correta determinação do índice de segregação é o tamanho da amostra. Autores como FAN *et al.* (1970) e Lacey (1997), reportam que o menor tamanho de amostra possível é uma única partícula, neste caso a amostra sempre apresentará índice de segregação máximo, não fornecendo assim qualquer informação da mistura, e o maior tamanho de amostra possível é todo o sistema, representando uma mistura perfeita. Observa-se que, ao avaliar o índice nestes extremos pouca informação sobre o sistema pode ser obtida. Ainda hoje, nenhum método sistemático foi proposto para determinar o tamanho ideal da amostra, sendo está comumente definida de acordo com a aplicação. Se uma amostra muito grande for retirada do sistema, pode haver alterações no escoamento granular, deste modo, regras heurísticas são aplicadas, limitando o tamanho da amostra a 5% do volume total de material granular

Lacey (1997) mostrou que para processos de mistura a variância da composição da amostra decai inversamente com o tamanho da amostra. Neste trabalho, foi também avaliado a influência da forma das amostras sobre o índice de segregação. Para misturas difusivas, mistura



devido ao movimento aleatório de partículas no interior do leito granular, o autor afirma que o grau de segregação (M), deve ser independente do tamanho da amostra.

iii) Número de amostras

O número de amostras está diretamente relacionado à quantidade e precisão das informações a respeito do sistema. Desta forma, para obter uma maior confiabilidade sobre os resultados, um maior número de amostragem torna-se necessário. Harnby (1967) e Lacey (1997) avaliaram, em seus trabalhos, a quantidade ideal de amostras, sendo estas dependentes do tipo de equipamento. Os autores relatam a necessidade de coleta na faixa de 5 a 25 amostras.

Fenômeno de segregação em tambores rotatórios

Na utilização de tambores rotatórios, um fenômeno recorrente durante a operação é a segregação, tanto radial quanto axial. Diversos trabalhos na literatura discorrem sobre a influência das propriedades granulares bem como das condições operacionais sobre a mistura de materiais granulares no interior de tambores (BHATTACHARYA, 2011; CHEN *et al.*, 2016; KUO *et al.*, 2005).

O fenômeno de segregação ocorre principalmente de duas formas, através da diferença de tamanho entre partículas, *S-system*, e através da diferença de densidade, *D-system*. Ambos os casos apresentam um elevado grau de complexidade no entendimento dos mecanismos que promovem a segregação. Soltanbeigi *et al.* (2018), avaliaram o fenômeno de segregação no interior de tambores rotatórios. No estudo realizado pelos autores foi investigada a influência tanto do tamanho quanto da densidade das partículas envolvidas nas misturas binárias. Os autores discorrem que, devido a diferença de tamanho, as partículas menores começam a percolar os espaços vazios criados pelas partículas maiores, migrando para uma região preferencial no centro do leito, denominado núcleo radial. Ao avaliar partículas com diferentes densidades, foi também observado a formação do núcleo radial. Porém, neste caso, as partículas mais densas migraram para esta região, sendo este fenômeno devido a maior massa das mesmas. Os autores avaliaram também, sistemas onde ambas as propriedades eram variadas, *SD-system*, observando a existência de duas possibilidades. Na primeira, o mecanismo de percolação contribui com o de condensação granular, intensificando a formação do núcleo radial. Isto acontece quando as partículas menores também apresentam maior densidade. Na segunda possibilidade avaliada, partículas menores e menos densas, os mecanismos são competitivos entre si, fazendo com que em alguns casos a formação do núcleo radial seja extinta (YAMAMOTO *et al.*, 2016).

Alonso *et al.* (1991) realizaram o primeiro estudo de segregação granular em um *SD-system*, avaliando o fenômeno em um tambor rotatório que os autores denominaram como semi-2D, devido ao pequeno comprimento. Neste estudo, os autores abordam a competição entre os mecanismos de percolação e condensação granular, utilizando 13 combinações de diferentes



materiais com densidades variando de 1,08 a 7,78 g/cm³ e diâmetros de 0,7 a 5,0 mm. Neste estudo, concluiu-se que o mecanismo de percolação apresentou predominância sobre a condensação. Além disto, os autores citam que o índice de segregação teórico obtido através do modelo se mostrou em concordância com os dados experimentais.

Bhattacharya (2011), investigou a segregação de partículas, avaliando uma mistura bi dispersas em tamanho, dispostas inicialmente na configuração lado a lado no interior do tambor rotatório. O autor observou que as partículas menores migraram para o centro do leito, formando um núcleo. Já as partículas maiores preferencialmente encontravam-se na periferia do sistema. Fenômeno semelhante também foi relatado por Kuo *et al.* (2005), que além de observarem a formação do núcleo radial, também avaliaram, experimentalmente, que este apresenta-se de maneira mais intensa para materiais particulados com razão de tamanho próximo a 2,5 avaliado em um intervalo de tamanho de 1 a 3. Os autores observaram também que mudanças na razão de diâmetro entre partículas, promoveram variações na largura das bandas axiais.

A aplicação de técnicas numéricas se dá de modo satisfatória no estudo do fenômeno de segregação no interior de tambores rotatórios. Rao *et al.* (1991) utilizando dados experimentais combinado a aplicação da abordagem numérica Lagrangeana desenvolveram um modelo para explicar o fenômeno de segregação radial em mistura binárias com partículas de diferentes densidades. No modelo proposto pelos autores, aplicado a tambores rotatórios operando em regime de rolamento, tem-se a possibilidade de identificação dos padrões de segregação e da eficiência de mistura do processo. Outros trabalhos, nos quais há a proposição de modelos matemáticos também podem ser citados, como por exemplo o estudo realizado por Bridgwater, (2012), que explica o mecanismo de segregação através do modelo difusivo proposto por Fick, obtendo respostas satisfatórias tanto para *S-systems* quanto para *D-systems*.

Ademais o fenômeno de segregação radial, Kuo *et al.* (2005) analisaram os efeitos da velocidade de rotação sobre a segregação axial, verificando que esta variável apresenta influência sobre a largura das bandas formadas, em que a largura das bandas diminuiu com o aumento da velocidade de rotação do tambor. Além disto, observou-se que junto a velocidade de rotação, o grau de preenchimento promoveu modificações na formação das bandas axiais, a largura das bandas diminuiu significativamente quando o nível de enchimento aumentou de 10% para 20% e foram aproximadamente constantes para os níveis de preenchimentos de 20%, 30% e 40%, para todas as velocidades de rotação estudadas pelos autores. Estes efeitos também já foram avaliados por outros pesquisadores, como Gupta *et al.* (1991), que utilizando técnicas numéricas investigaram a formação do núcleo radial e de bandas axiais no interior de tambores rotatórios devido a diferença nas propriedades granulares.



5.3. Materiais e métodos

Neste tópico será apresentada a metodologia aplicada ao estudo da segregação granular no interior de tambores rotatórios.

Índice de Segregação

Para realização da quantificação do índice de segregação nas simulações Lagrangeanas, foi executado um procedimento a fim de padronizar as amostragens e eliminar erros sistemáticos. A Figura 5-1 ilustra o procedimento utilizado.

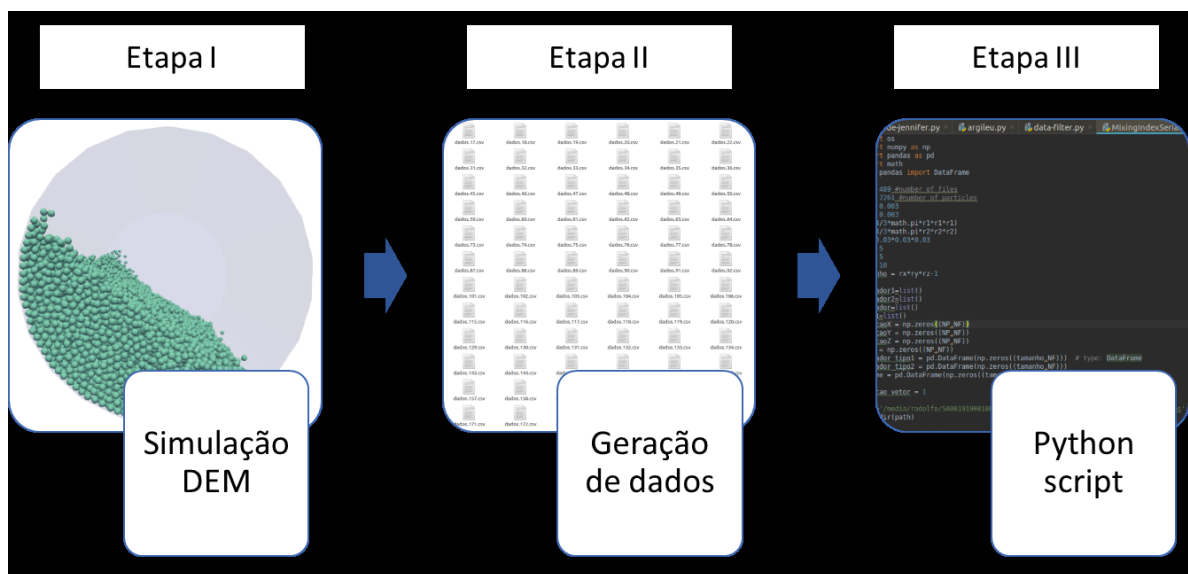


Figura 5-1: Etapas para determinação do índice de mistura.

Etapa I: As simulações Lagrangeanas eram realizadas utilizando o resolvedor numérico de código aberto, LIGGGHTS 3.8.

Etapa II: Após a realização da simulação, eram gerados arquivos contendo informações de todas as partículas presentes no sistema, como posição e velocidade, com auxílio do software de pós processamento Paraview 5.7.

Etapa III: Para a quantificação do índice de segregação, foi criado um código computacional em linguagem Python. A ação do código consistia em subdividir o domínio de simulação em 25 células de mesma dimensão (Figura 5-2), conforme discutido por LI *et al.* (2016), e computar a concentração volumétrica de cada tipo de partícula no interior de cada célula



do sistema. Após isso, era então calculado o desvio padrão das concentrações ao longo de todo o domínio. Este procedimento era realizado em intervalos de tempo de 0,1 s.

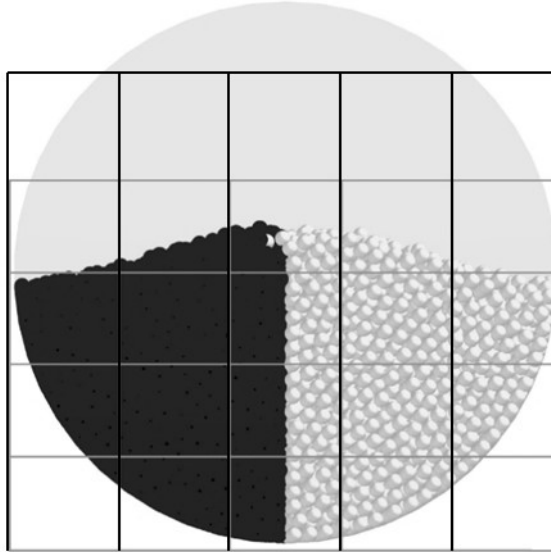


Figura 5-2: Gradeamento das imagens para a obtenção do índice de segregação.

Com o intuito de favorecer a comparação entre as cinéticas de segregação, os dados obtidos foram dispostos ao longo do tempo em forma gráfica. De forma a permitir a contabilização dos efeitos da diferença do diâmetro e densidade, bem como da disposição inicial, um ajuste dos dados, utilizando a Equação 5.12, foi realizado utilizando o software Statistica® 7, possibilitando a estimação da constante cinética de segregação (k) e do valor do índice após atingir o regime estacionário (σ_∞).

$$\sigma = (\sigma_0 - \sigma_\infty)e^{-kt} + \sigma_\infty \quad (5.12)$$

Em que σ_0 , σ_∞ , k e t representam os índices de segregação inicial e de segregação após atingir o estado estacionário, a constante cinética de segregação e o tempo respectivamente.

Nesta etapa do estudo, os materiais granulares eram dispostos lado a lado no interior do equipamento (Figura 5-3). As simulações foram realizadas com o tambor rotatório operando em regime de rolamento, conforme avaliado no Capítulo 3, em velocidade de rotação de 1 rad/s e grau de preenchimento de 20%.

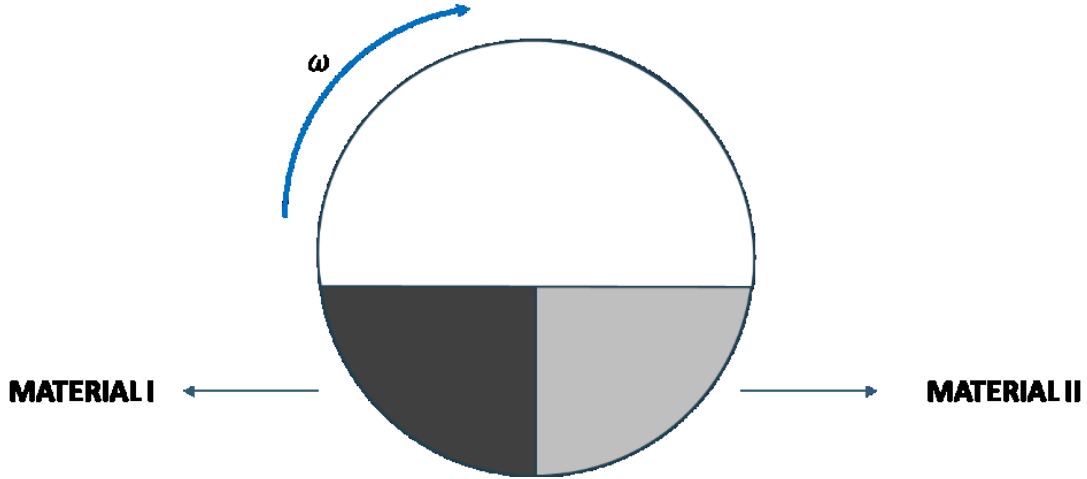


Figura 5-3: Disposição inicial do leito granular.

Destaca-se ainda, que em todas as configurações empregadas no estudo da segregação de materiais, os materiais 1 e 2 foram coloridos diferentemente, para melhor visualização dos resultados.

O tempo simulado foi definido de modo a permitir atingir o estado estacionário, ou seja, a partir do momento em que o leito granular não apresentasse mudanças no comportamento ou na qualidade da mistura, sendo estimado em 50 segundos (Brandao, 2017). Assim como discutido no Capítulo 3, nesta seção o tempo de integração foi definindo como sendo 5% do número de Rayleigh, 1×10^{-6} s, e o módulo de cisalhamento ajustado em 5×10^6 Pa. Os parâmetros DEM aplicados às simulações numéricas foram estimados a partir das redes neurais artificiais (ANN) apresentadas no Capítulo 2: epANN, msANN e mrANN.

As simulações numéricas foram realizadas em três diferentes etapas: avaliação do efeito da densidade (i), do tamanho (ii) e a combinação destas duas variáveis (iii). As etapas (i) e (ii), foram realizadas com intuito de obter um perfil mais detalhado, avaliando através da análise de sensibilidade, o efeito da razão de densidade (RD), Equação 5.13, e da razão de tamanho (RT), Equação 5.14. As propriedades das partículas em cada condição avaliada são apresentadas nas Tabelas 5.3 e 5.4.

$$RD = \frac{\rho_{P2}}{\rho_{P1}} \quad (5.13)$$

$$RT = \frac{r_{P2}}{r_{P1}} \quad (5.14)$$



Tabela 5.3: Avaliação da razão de densidade sobre a segregação granular utilizando partículas de diâmetro de 6 mm.

ρ_{P1} (kg/m ³)	ρ_{P2} (kg/m ³)	RD (-)
10000	1000	0,1
10000	2000	0,2
10000	3000	0,3
10000	4000	0,4
10000	5000	0,5
10000	6000	0,6
10000	7000	0,7
10000	8000	0,8
10000	9000	0,9

Tabela 5.4: Avaliação da razão de tamanho sobre a segregação granular utilizando partículas de densidade 2500 kg/m³.

r_{P1} (mm)	r_{P2} (mm)	RT (-)
3	0,3	0,1
3	0,6	0,2
3	0,9	0,3
3	1,2	0,4
3	1,5	0,5
3	1,8	0,6
3	2,1	0,7
3	2,4	0,8
3	2,7	0,9

Na etapa (iii), foi avaliado o efeito combinado da utilização de partículas de densidade e tamanho distintos. A combinação das propriedades entre as partículas foi realizada através da utilização de um planejamento composto central (Tabela 5.5) resultando em 25 simulações. Uma



vez que, alguns dos materiais particulados presentes no planejamento não foram obtidos para realização experimental de medição de seus parâmetros DEM, as redes neurais apresentadas no capítulo 2: “epANN”, “msANN” e “mrANN”, foram aplicadas para a determinação dos mesmos.

Tabela 5.5: Níveis do planejamento composto central: efeito do tamanho e da densidade granular sobre a segregação granular.

Variável	Níveis				
	$-\alpha$ (-1,4826)	-1	0	1	$+\alpha$ (+1,4826)
r_{P1} (mm)	0,6	0,9	1,5	2,1	2,4
r_{P2} (mm)	0,6	0,9	1,5	2,1	2,4
ρ_{P1} (kg/m³)	2000	3000	5000	7000	8000
ρ_{P2} (kg/m³)	2000	3000	5000	7000	8000

Após a realização das simulações DEM, e análise dos resultados do planejamento, avaliando o índice de segregação após atingir o estado estacionário bem como a constante cinética de segregação, foi realizada através da regressão múltipla utilizando o software Statistica® 7 e também utilizando duas redes neurais denominadas como: SegregInfANN e SegregKANN.

Além da determinação do índice de segregação radial, foi avaliado, também, o perfil de fração volumétrica ao longo do eixo axial do tambor (Figura 5-4), permitindo, assim, inferir sobre a segregação axial no interior do mesmo. Esta avaliação foi realizada sobre todas as simulações propostas nas etapas anteriores.

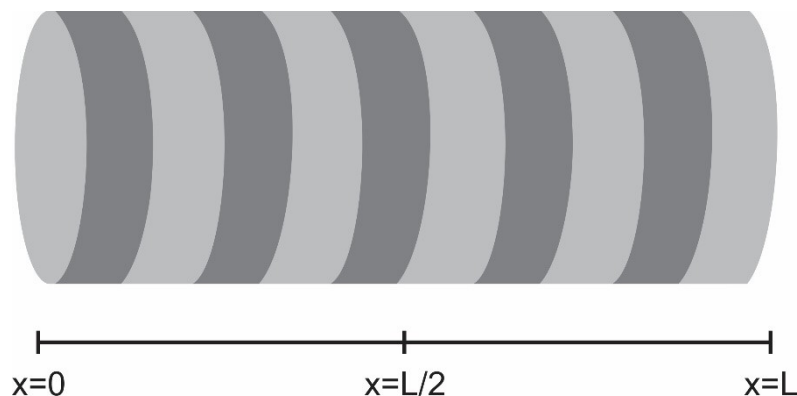


Figura 5-4: Divisão axial do tambor rotatório.



Outro aspecto importante avaliado, foi a influência da disposição inicial dos materiais granulares no interior do tambor rotatório. Para isto, simulações Lagrangeanas foram realizadas, em cada condição apresentada na Tabela 5.6, avaliando duas situações: um leito completamente segregado, configuração lado a lado, e um leito granular perfeitamente misturado.

Tabela 5.6: Avaliação da disposição inicial sobre a cinética de segregação.

r_{P1} (mm)	r_{P2} (mm)	ρ_{P1} (kg/m ³)	ρ_{P2} (kg/m ³)
3	3	7000	7000
3	3	2000	2000
2	2	7000	7000
2	2	2000	2000
3	2	7000	7000
3	2	2000	2000
3	3	7000	2000
2	2	7000	2000



5.4. Resultados e discussão

Neste tópico serão apresentados os resultados obtidos no estudo dos fenômenos de segregação radial e axial no interior de tambores rotatórios, avaliando a influência das propriedades físicas dos materiais granulares, bem como a disposição inicial dos mesmos.

Efeito da densidade

Como discorrido no tópico 5.3, o estudo do fenômeno de segregação foi subdividido em três etapas. Na primeira etapa, referente à análise de sensibilidade da diferença de densidade granular, observou-se que ao diminuir o valor de RD, ou seja, materiais particulados com diferenças maiores desta propriedade, tanto o índice de segregação após atingir o estado estacionário, variável que indica o estado da segregação ao termino da operação, quanto a constante cinética de segregação (k), aumentaram de maneira linear, este comportamento por ser observado na Tabela 5.7 e na Figura 5-5.

Tabela 5.7: Índice de segregação – Efeito da razão de densidade.

ρ_{P1} (kg/m ³)	ρ_{P2} (kg/m ³)	RD (-)	σ_{∞} (-)	k (s ⁻¹)	r^2
10000	1000	0,1	0,2827	0,3645	0,9192
10000	2000	0,2	0,2414	0,3026	0,9255
10000	3000	0,3	0,1985	0,2747	0,9551
10000	4000	0,4	0,1982	0,2562	0,9520
10000	5000	0,5	0,1779	0,2645	0,9347
10000	6000	0,6	0,1574	0,2375	0,9069
10000	7000	0,7	0,1361	0,2178	0,9354
10000	8000	0,8	0,1213	0,2092	0,9699
10000	9000	0,9	0,1157	0,2053	0,9784
10000	10000	1,0	0,1055	0,1666	0,8756

O fenômeno de elevação do índice de segregação após atingir o estado estacionário ao reduzir RD, está relacionado ao aumento da tendência do mecanismo de condensação granular,



sendo principalmente influenciado pela densidade dos materiais granulares envolvidos na segregação. Tao *et al.* (2010), observaram experimentalmente um comportamento similar ao determinado neste estudo, entretanto devido a limitação da disponibilidade de materiais granulares, não foi proposto pelos autores uma relação direta entre o RD e o índice de segregação após atingir o estado estacionário (Equação 5.12).

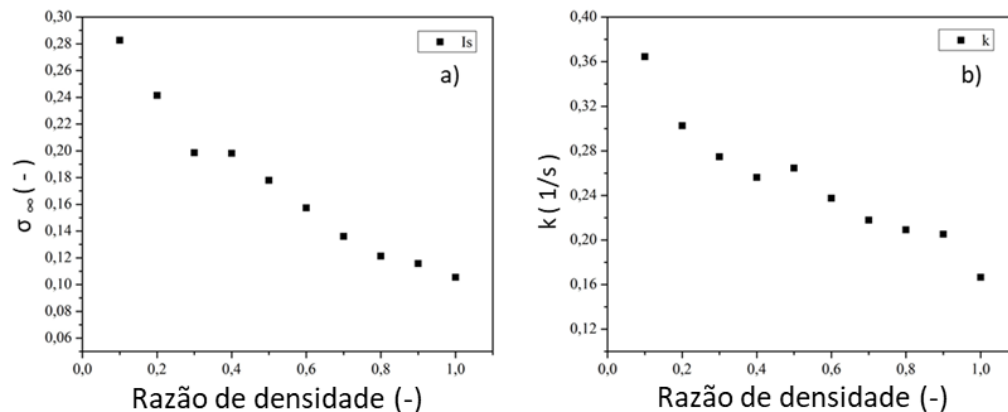


Figura 5-5: Efeito da RD sobre o índice de segregação estacionário(a) e sobre a constante cinética de segregação (b).

Além da análise do índice de segregação, foi avaliada também a influência do RD sobre a constante cinética, permitindo verificar que, a diminuição de RD promoveu o aumento de k (Figura 5-5b). Apesar de existir na literatura trabalhos que avaliam o efeito da diferença de densidade no fenômeno de segregação, pouco se discuti a respeito da cinética do mesmo. Isto ocorre principalmente devido à dificuldade de mensurar o índice de segregação durante o decorrer do processo.

Ao avaliar o comportamento do parâmetro k , verifica-se que este apresenta um comportamento similar ao do índice de segregação estacionário. Durante o processo de segregação, as partículas mais densas migram para o núcleo radial, ficando circundadas pelas partículas mais leves (Figura 5-6). A velocidade com que ocorre a migração das partículas para suas respectivas regiões preferenciais está intimamente relacionado à constante cinética. Deste modo, tem-se que, quanto maior a heterogeneidade dos materiais granulares envolvidos na segregação, mais intensa e mais rápida será a segregação e consequentemente a formação do núcleo radial. Como avaliado na Capítulo 4, a difusão granular é elevada juntamente com a densidade da partícula que irá migrar para o centro do leito, justificando, assim, o aumento da constante cinética.

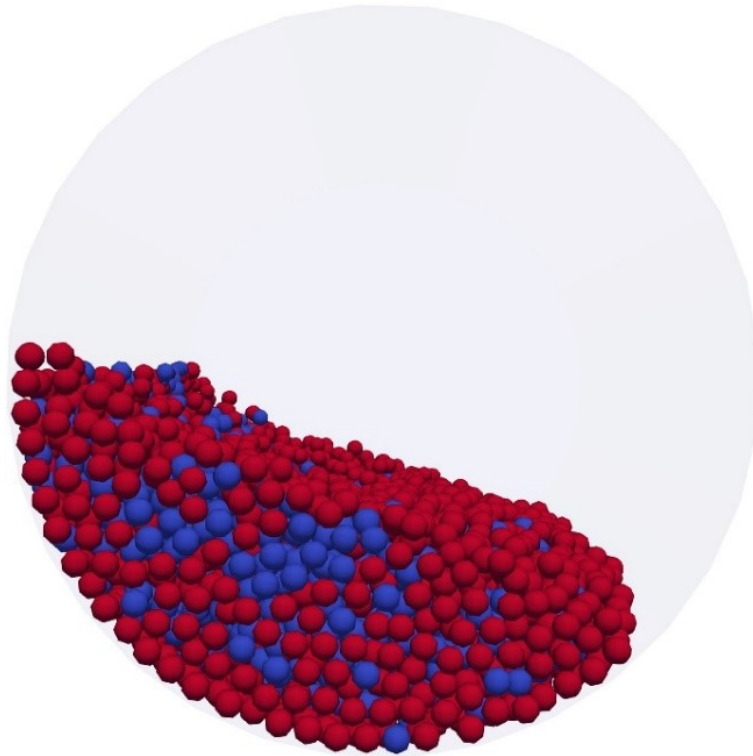


Figura 5-6: Vista transversal do leito granular – Efeito da RD.

As Equações 5.15 e 5.16, apresentam a relação linear entre a razão de densidade e o índice de segregação estacionário e a constante cinética de segregação, apresentando coeficientes de correlação de 0,95 em ambos os casos.

$$\sigma_{\infty} = 0,2757 - 0,1859RD \quad (5.15)$$

$$k = 0,3476 - 0,1777RD \quad (5.16)$$

A Figura 5-7, apresenta 3 cinéticas de segregação no interior do tambor rotatório, avaliando a razão de densidade em 0,1, 0,5 e 0,9. Conforme esperado, a cinética de segregação com RD de 0,1 apresenta o patamar mais elevado. A redução do patamar ocorre de acordo com o aumento de RD. Com o intuito de definir um critério para a avaliação da qualidade de segregação de materiais granulares, foi determinado, a partir de uma análise qualitativa, que índices de segregação estacionários inferiores a 0,1 indicam uma dispersão homogênea das partículas no leito. Já valores de índices superiores a 0,1 aponta para uma mistura menos eficiente e, portanto, mais heterogênea e segregada.

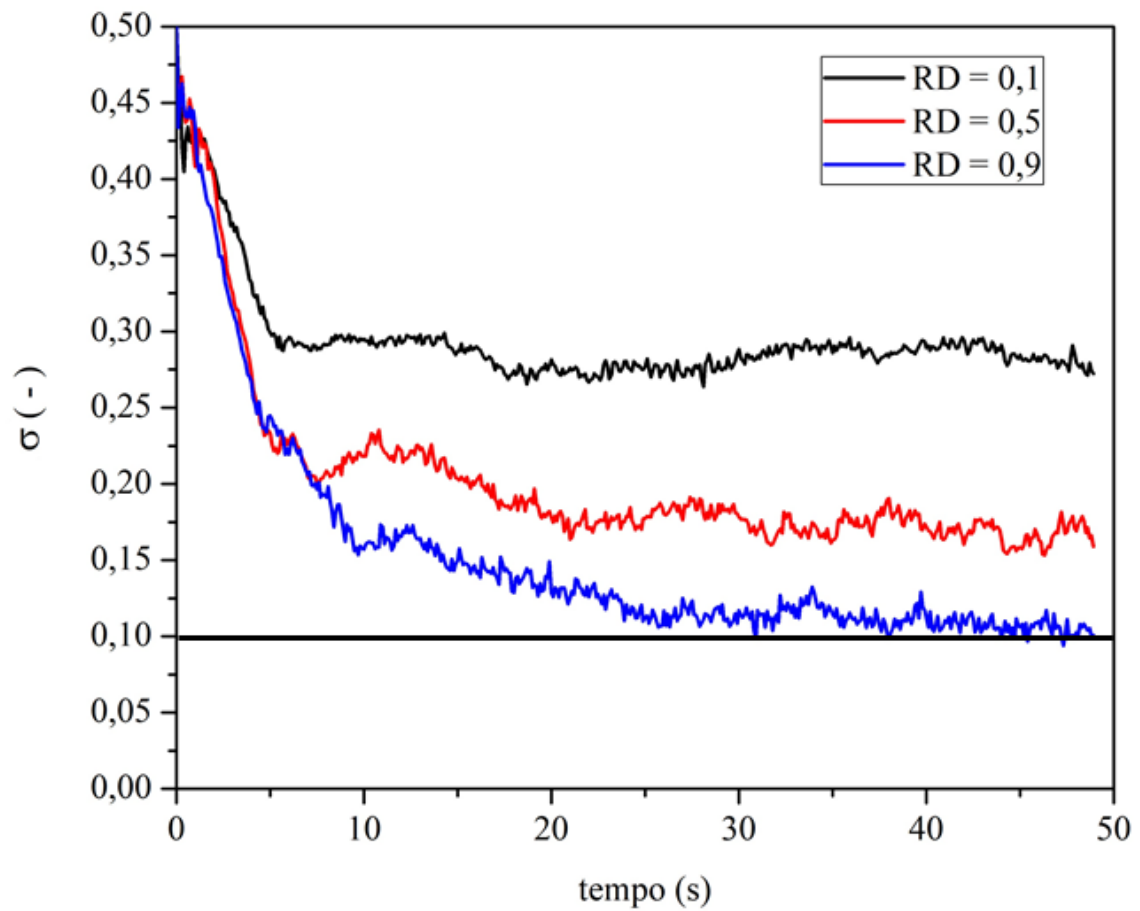


Figura 5-7: Cinéticas de segregação para RD de 0,1, 0,5 e 0,9.

Na Figura 5-8 é apresentada como exemplo do fenômeno de segregação a simulação Lagrangeana, cujo RD é igual a 0,3, após atingir o estado estacionário.

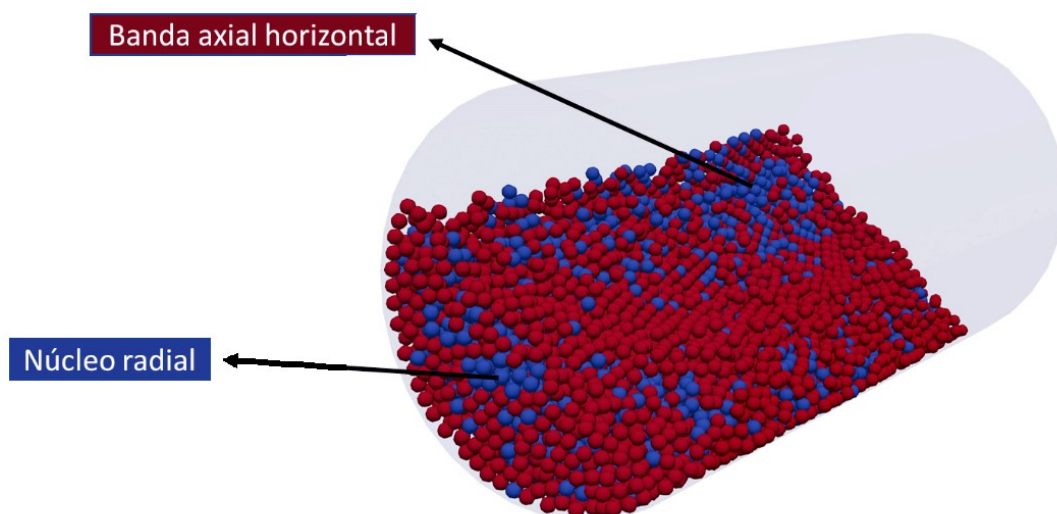


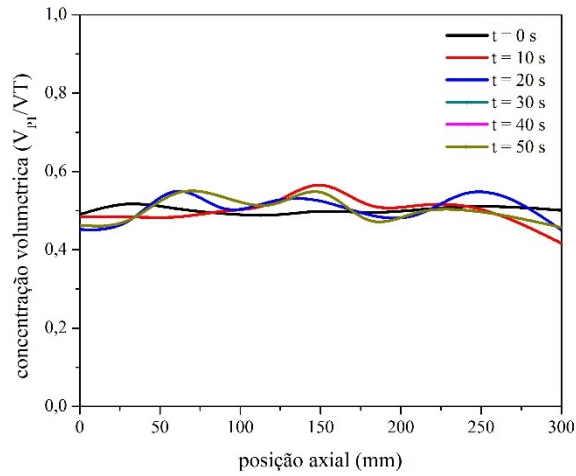
Figura 5-8: Vista isométrica do leito granular –RD = 0,3.



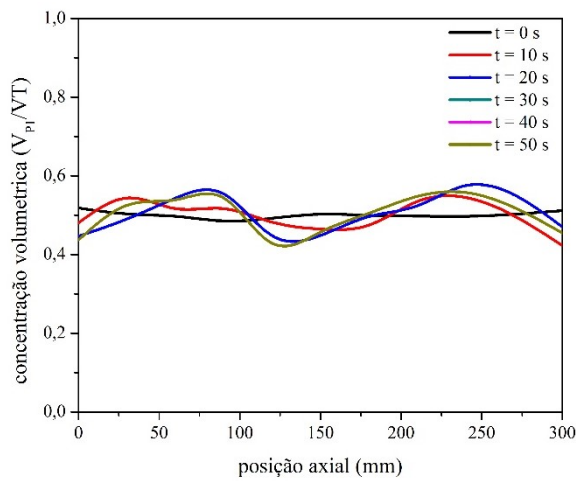
A partir da análise da figura anterior pode-se observar que, devido ao RD ser diferente da unidade, dois comportamentos podem ser identificados: a formação do núcleo radial e de uma incipiente banda axial. De acordo com alguns trabalhos publicados (ALIAN *et al.*, 2015; CANTELAUBE *et al.*, 1997; SANTOMASO *et al.*, 2005), a formação do núcleo radial ocorre de maneira mais intensa e rápida que as bandas axiais, isto é devido a movimentação natural das partículas no interior do equipamento. Este fato pode, também, ser observado no resultados da Tabela 4.4, apresentada no Capítulo 4, sendo possível verificar que valores de difusividades radiais encontram-se 10 vezes superiores a difusividade axial, apresentando-se em concordância com o trabalho de FISCHER *et al.* (2009).

Na Figura 5-9 é apresentado o perfil de concentração volumétrica axial de partículas nos tempos de 0, 10, 20, 30, 40, e 50 segundos para as condições com RD de 0,9 (a), 0,5 (b) e 0,1 (c). Nota-se que, para a condição com RD igual a 0,9, pequenas flutuações de concentração são observadas ao longo da posição axial. Isto indica que para esta condição, não há tendência que ocorra a segregação axial. Todavia, nas condições com RD de 0,5 e 0,1, picos de concentração, embora apresentem magnitudes relativamente baixas, ficam mais evidenciados, mantendo-se praticamente constantes após 20 segundos.

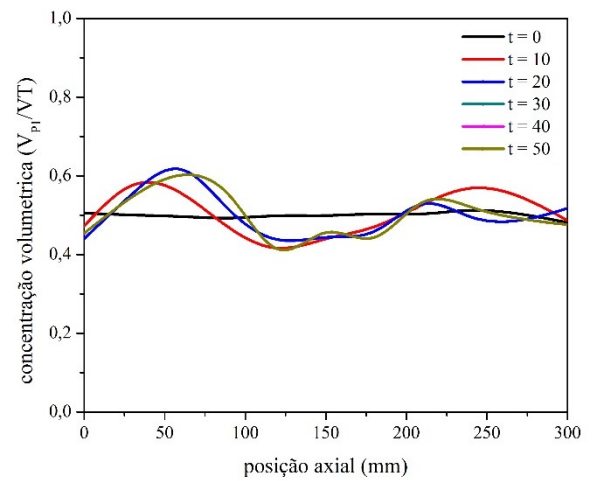
É apresentado na Figura 5-10, o perfil de concentração axial das condições com RD de 0,9, 0,5 e 0,1 no tempo de 50 segundos, isto é, após atingir o estado estacionário. Fica evidente que com a redução de RD, as partículas com densidades mais distintas, picos mais definidos e de maior magnitude são observados, resultando em um leito mais segregado axialmente. Maione *et al.* (2017), também avaliaram no estudo a formação de bandas axiais no interior do tambor rotatório, observando, experimentalmente e numericamente, que partículas com diferentes densidades promoveram a segregação axial. Entretanto no trabalho de Maione *et al.* (2017) apenas uma razão de RD foi avaliada.



(a) RD de 0,9



(b) RD de 0,5



(c) RD de 0,1

Figura 5-9: Avaliação transiente do perfil de concentração volumétrica axial de partículas para RD de 0,1, 0,5 e 0,9.

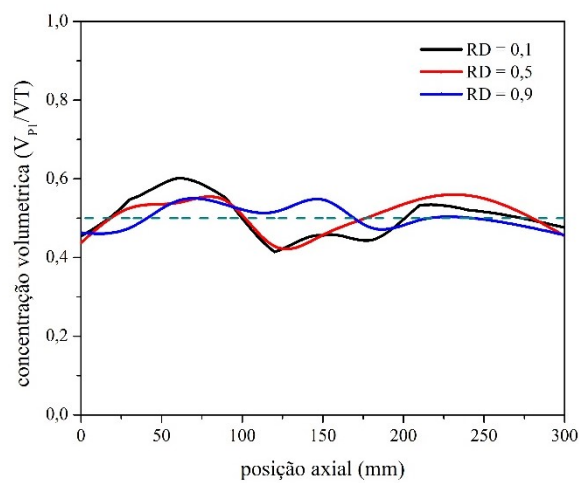


Figura 5-10: Segregação axial no estado estacionário para RD de 0,1, 0,5, e 0,9.



Efeito do tamanho

Na segunda etapa do estudo do fenômeno de segregação, foi realizada uma nova análise de sensibilidade, porém, desta vez, avaliando o efeito da diferença de tamanho entre as partículas formadoras do leito granular. Nesta etapa foi observado que, assim como no caso da redução do RD, a diminuição de RT também promoveu o aumento do índice de segregação estacionário e da constante cinética de segregação, porém isto não ocorreu em todo o espectro de RT avaliado, conforme pode ser observado na Tabela 5.8 e na Figura 5-11.

Tabela 5.8: Índice de segregação – Efeito da razão de tamanho.

rp1 (mm)	rp2 (mm)	RT (-)	σ_{∞} (-)	k (s ⁻¹)	r ²
3	0,3	0,1	0,1217	0,1468	0,9217
3	0,6	0,2	0,1499	0,2015	0,8423
3	0,9	0,3	0,2100	0,2857	0,8602
3	1,2	0,4	0,2221	0,2671	0,9231
3	1,5	0,5	0,2348	0,3209	0,8464
3	1,8	0,6	0,2354	0,3261	0,8196
3	2,1	0,7	0,1904	0,2924	0,8143
3	2,4	0,8	0,1351	0,2274	0,9456
3	2,7	0,9	0,0857	0,1831	0,9863
3,0	3,0	1,0	0,1055	0,1666	0,8756

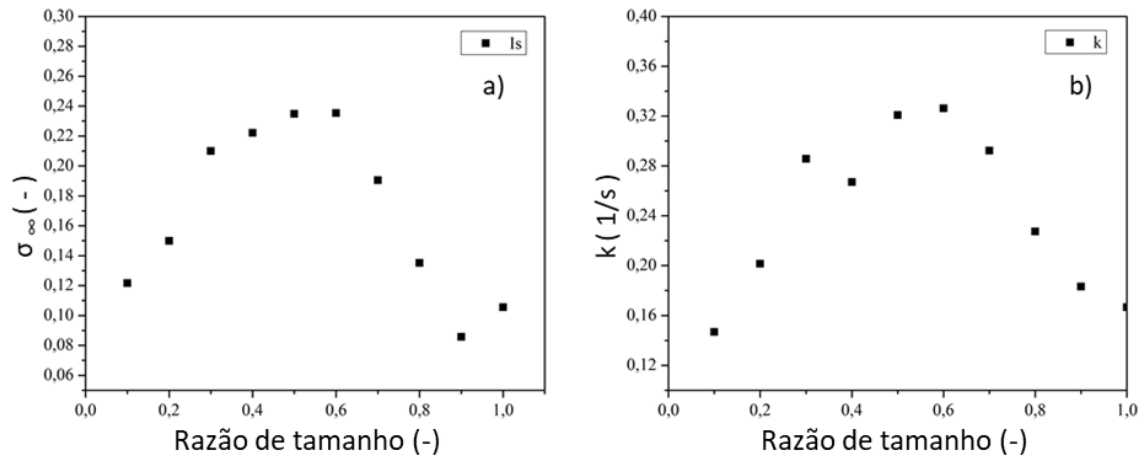


Figura 5-11: Efeito da RT sobre o índice de segregação estacionário e na constante cinética de segregação.

A partir da análise da Figura 5.11 observa-se que, para valores de RT inferiores a 0,5, maiores reduções promoviam também a diminuição do índice de segregação estacionário e da constante cinética, sendo este fenômeno possivelmente relacionado ao fato de que partículas menores tendem a migrar para o núcleo radial (Figura 5-12), porém, ao ter dimensões muito inferiores ao das partículas maiores, o efeito de aprisionamento é reduzido, limitando assim a segregação. Este comportamento é relatado também por Alonso *et al.* (1991) que observaram a redução da segregação ao elevar a diferença de tamanho de partículas, os autores encontraram o valor RT_c , referente a mudança de comportamento, próximo de 0,43.

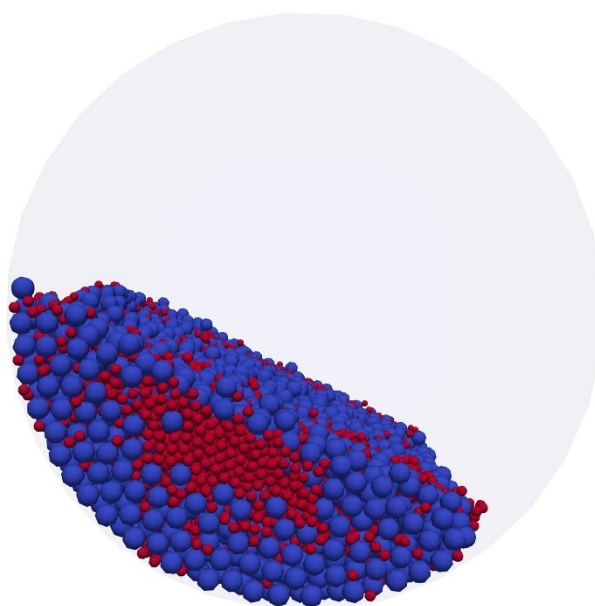


Figura 5-12: Vista transversal do leito granular – Efeito da RT



No caso da segregação por diferença de tamanho de partículas, o mecanismo que age sobre o fenômeno é a percolação, ou seja, as partículas menores conseguem migrar para o núcleo radial devido aos espaços vazios interpartículas formados momentaneamente durante a movimentação das partículas maiores. Assim como avaliado na primeira etapa do estudo, efeito da densidade, o parâmetro k apresentou um comportamento similar ao índice de segregação estacionário, demonstrando um perfil quadrático em relação a RT . As Equações 5.17 e 5.18, exibem, quantitativamente, a relação quadrática entre a razão de tamanho e o índice de segregação estacionário e a constante cinética de segregação, apresentando coeficientes de correlação de 0,91 e 0,92, respectivamente.

$$\sigma_{\infty} = 0,0688 + 0,6144RT - 0,6172RT^2 \quad (5.17)$$

$$k = 0,0696 + 0,8778RT - 0,8068RT^2 \quad (5.18)$$

Conforme discutido no Capítulo 4, a difusão granular é elevada ao reduzir a dimensão da partícula que irá migrar para o centro do leito, justificando assim o aumento da constante cinética. Porém, quando as partículas se tornam menores, ocorre uma competição entre os mecanismos de percolação, parte das partículas migram em direção ao núcleo, enquanto outras se desprendem do mesmo, resultando num retardo na mistura, promovendo a redução da constante cinética.

A Figura 5-13, apresenta 3 cinéticas de segregação no interior do tambor rotatório, avaliando a razão de tamanho em 0,1, 0,5 e 0,9. É possível observar que, diferentemente do ocorrido com a razão de densidade, a razão de tamanho de 0,1 apresentou um índice de segregação estacionário inferior a RT de 0,5.

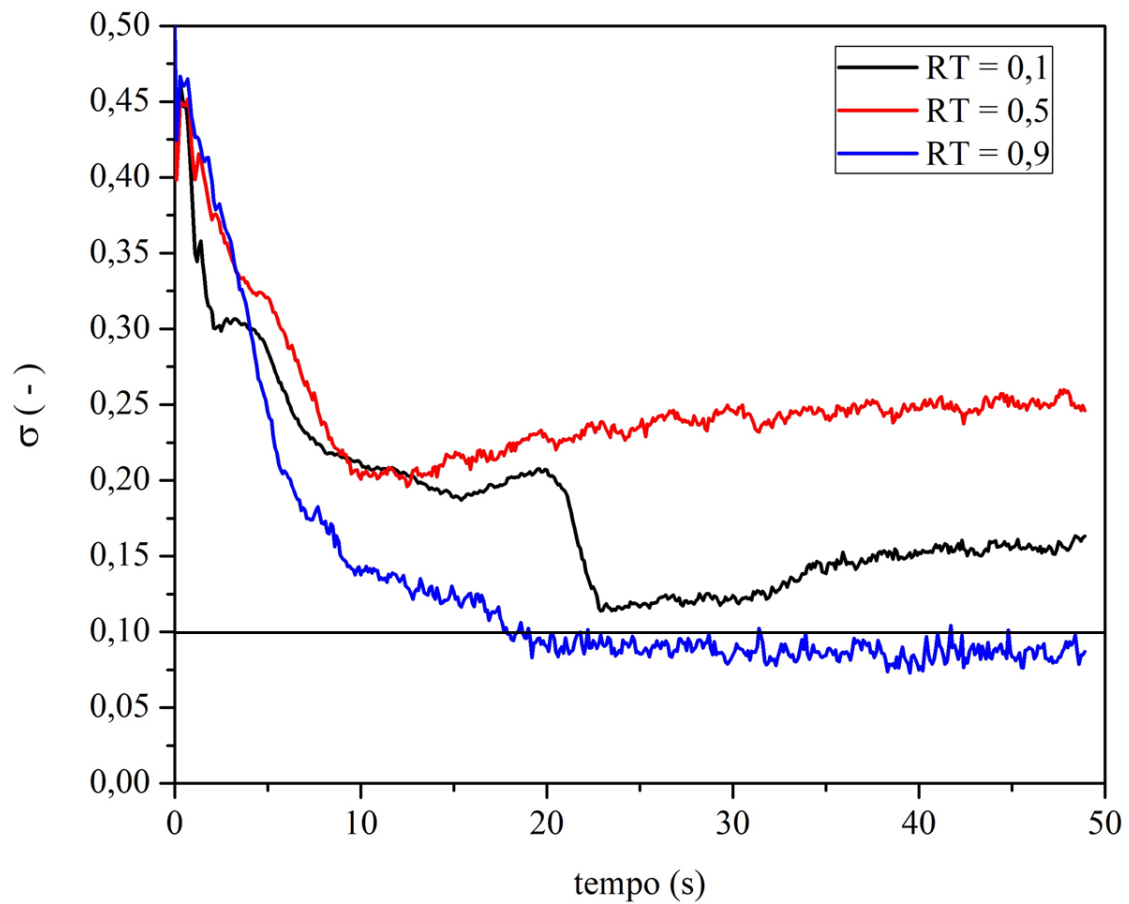


Figura 5-13: Cinéticas de segregação para RT de 0,1, 0,5 e 0,9.

Na Figura 5-14 é apresentado, como exemplo, do fenômeno de segregação, a simulação Lagrangeana, cujo RT é igual a 0,3, após atingir o estado estacionário.

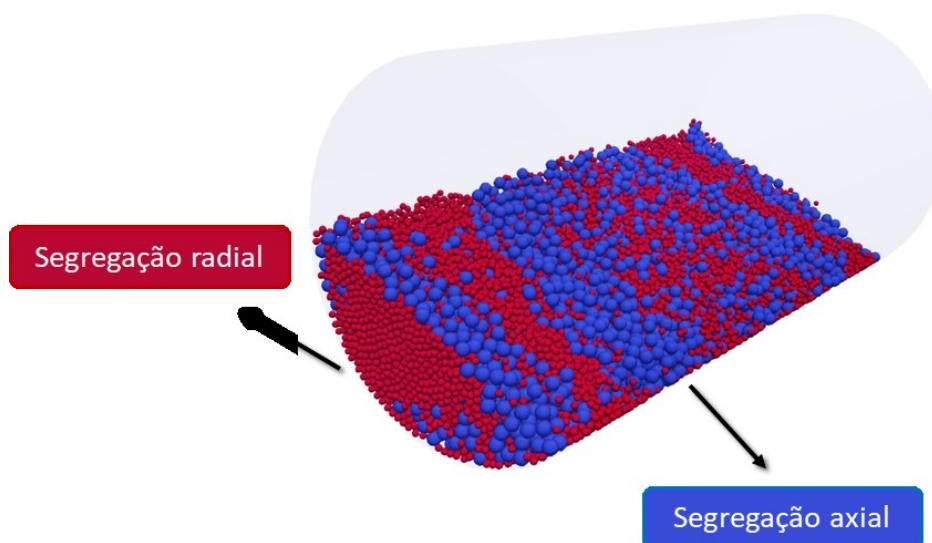
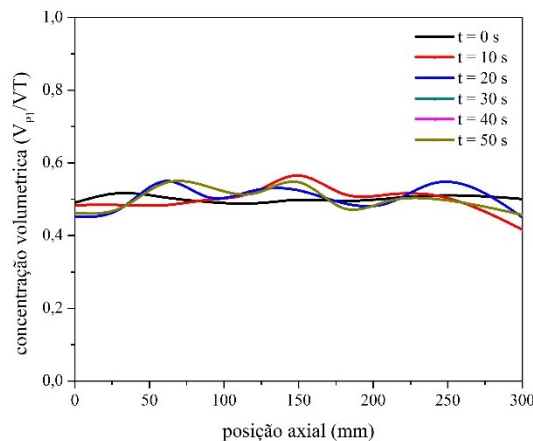


Figura 5-14: Vista isométrica do leito granular – Efeito da RT.

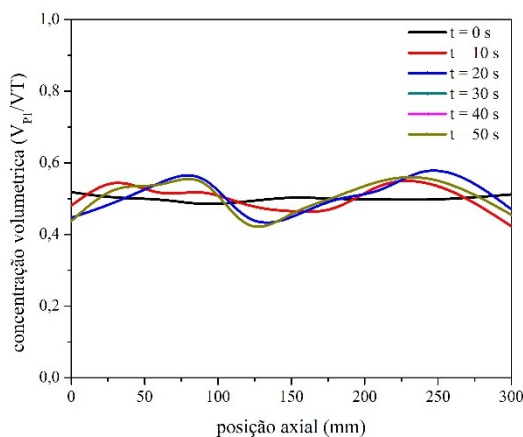


A partir da análise da Figura 5.14 pode-se observar que, devido ao RT ser diferente da unidade, tanto a segregação radial, quanto a axial pode ser identificada. Apesar do núcleo radial exibir maior velocidade de formação quando comparada as bandas axiais, a redução do tamanho de partículas, promove também a intensificação do aparecimento das bandas.

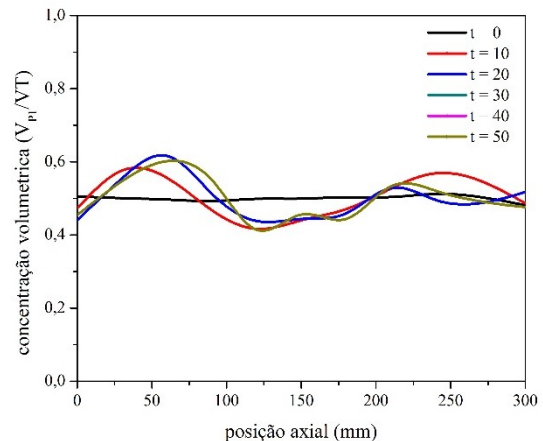
Na Figura 5-15 é apresentado o perfil de concentração volumétrica axial de partículas nos tempos de 0, 10, 20, 30, 40, e 50 segundos para as condições com RT de 0,9 (a), 0,5 (b) e 0,1 (c). Haja vista que, para a condição com RT igual a 0,9, as flutuações de concentração encontram-se inferiores a 0,05, sendo assim, não permitindo afirmar que existe uma significativa segregação axial está nesta condição (RT = 0,9). Contudo, nas condições com RT de 0,5 e 0,1, picos ou até mesmo patamares de concentração são observados, apontando para a formação de bandas de concentração. Observa-se ainda que, o tempo necessário para atingir o estado estacionário foi de aproximadamente 10 segundos, para as condições avaliadas.



(a) RT de 0,9



(b) RT de 0,5



(c) RT de 0,1

Figura 5-15: Avaliação transiente do perfil de concentração axial para RT de 0,1, 0,5 e 0,9.



Na Figura 5-16, são apresentados os perfis de concentração axial, após atingir o estado estacionário, nas condições de RT de 0,9, 0,5 e 0,1. No caso de RT igual a 0,1 um patamar de 120 mm (90 – 210 mm) com concentração volumétrica de $0,61 \pm 0,01$ foi formado no centro do tambor, enquanto que nas extremidades a concentração era de $0,42 \pm 0,05$, indicando, através desta discrepância entre concentrações, o fenômeno de segregação axial. Enquanto que, na condição com RT de 0,9, o centro do tambor apresentou concentração de $0,52 \pm 0,2$ e próximos as tampas de $0,47 \pm 0,3$. Ao realizar o teste de Tukey para comparar os valores médios obtidos e o respectivos desvio padrão, em RT de 0,9, estes encontram-se equivalentes, permitindo inferir mais uma vez, a ausência da formação de bandas axiais. Kuo *et al.* (2005), avaliaram a influência de utilização de partículas de diferentes tamanhos no interior de tambores rotatórios, os autores observaram que a formação de bandas axiais começa a se tornar expressiva para valores de RT inferiores a 0,83. Assim, os resultados obtidos neste estudo, apresentam boa concordância com os valores reportados por Kuo *et al.* (2005).

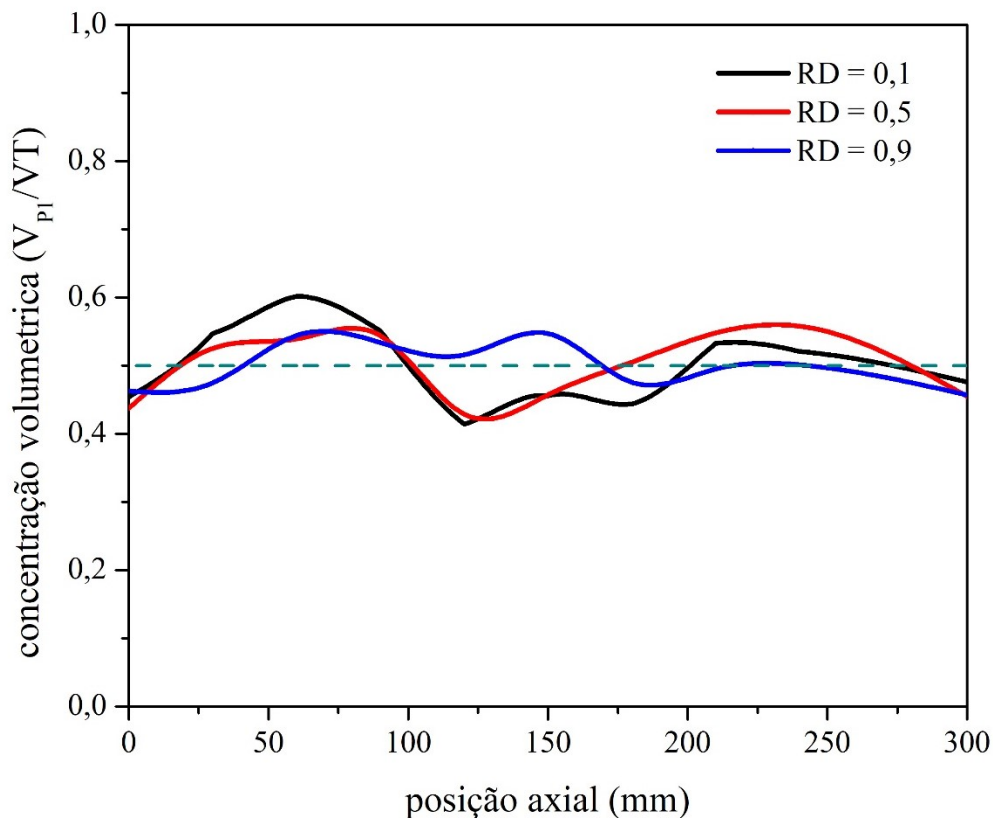


Figura 5-16: Segregação axial no estado estacionário para RT de 0,1, 0,5, e 0,9.



Efeito combinado

A fim de avaliar o efeito combinado da diferença de tamanho e densidade de partículas sobre o fenômeno de segregação granular, na terceira etapa do estudo, foi aplicado um planejamento composto central, conforme reportado na seção 5.3. Na Tabela 5.9, é reportado os resultados qualitativos das simulações 11, 12, 18, 07 e 04, nas quais é avaliado a segregação granular respectivamente: sem diferença de propriedades, diferentes densidades, diferentes tamanhos, diferentes densidades e tamanhos de duas formas: partículas menores mais densas e partículas menores menos densas.

A partir da análise das figuras presentes na tabela, conforme esperado e avaliado nas seções anteriores, a mistura de materiais granulares com a ausência de diferença de propriedades físicas (Simulação 11), apresentaram uma mistura eficiente. Este fato também pode ser observado quantitativamente na Figura 5-17, em que o índice de segregação, após 50 s, para esta simulação, apresentou valor abaixo de 0,1.

Observa-se, ainda, que, tanto a camada adjacente as paredes terminais ($x=0$; $x=L$), quanto no centro do equipamento ($x=L/2$), a mistura deu-se de maneira equivalente, indicando a ausência da segregação axial. A Figura 5-18a, exibe o comportamento quantitativo, do perfil de concentração ao longo do eixo longitudinal do tambor, permitindo constatar que não há diferenças significativas de C_{PI} .

Analisando as Simulação 12 e 18, na qual ocorre apenas a mudança de densidade, e apenas a mudança de tamanho, respectivamente, a migração de partículas ocorreu de maneira discrepante nas terminações do tambor em relação ao seu centro. Isto evidencia que, não somente há movimentação das partículas em direção ao núcleo radial, como também para o “núcleo axial”. Um comportamento similar foi observado por Santomaso *et al.* (2005), em que o autor infere sobre a influência da rugosidade das paredes terminais sobre a formação de bandas axiais ao longo do tambor rotatório. No estudo realizado, foi observado que as partículas que tendiam a migrar para o núcleo radial, também apresentavam tendência de afastamento das terminações do equipamento, promovendo a formação de bandas axiais.



Tabela 5.9: Avaliação qualitativa do efeito combinado da densidade e tamanho granular.

	$x = 0; x = L$	$x = L/2$
<u>Simulação 11</u> $r_{P1} \text{ (m)} = 0,0021$ $\rho_{P1} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 3000$ $r_{P2} \text{ (m)} = 0,0021$ $\rho_{P2} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 3000$		
<u>Simulação 12</u> $r_{P1} \text{ (m)} = 0,0021$ $\rho_{P1} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 3000$ $r_{P2} \text{ (m)} = 0,0021$ $\rho_{P2} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 7000$		
<u>Simulação 18</u> $r_{P1} \text{ (m)} = 0,0024$ $\rho_{P1} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 5000$ $r_{P2} \text{ (m)} = 0,0015$ $\rho_{P2} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 5000$		
<u>Simulação 07</u> $r_{P1} \text{ (m)} = 0,0009$ $\rho_{P1} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 7000$ $r_{P2} \text{ (m)} = 0,0021$ $\rho_{P2} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 3000$		
<u>Simulação 04</u> $r_{P1} \text{ (m)} = 0,0009$ $\rho_{P1} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 3000$ $r_{P2} \text{ (m)} = 0,0021$ $\rho_{P2} \text{ (kg/m}^3\text{)} = 7000$		



Nas Simulações 07 e 04 as partículas apresentam densidade e tamanho distintos. No primeiro caso (Simulação 07), as partículas menores apresentam densidade maior, enquanto que na Simulação 04, estas apresentam densidade menor. Deste modo, os dois mecanismos promotores da segregação, percolação e condensação granular, atuam concomitantemente, porém de diferentes maneiras.

Na Simulação 07, na qual as partículas menores apresentam maior densidade, é verificado um sinergismo destes mecanismos, ou seja, quando avaliado individualmente, as partículas menores tendem a migrar para o núcleo radial. O mesmo comportamento acontece com as partículas de maior densidade. A combinação destas características faz com que ocorra a intensificação do fenômeno de segregação. Este fato pode ser observado qualitativamente na Tabela 5.9, por um núcleo com alta concentração de partículas de coloração azul, e quantitativamente pelo maior valor do índice de segregação após atingir o estado estacionário (Figura 5-17).

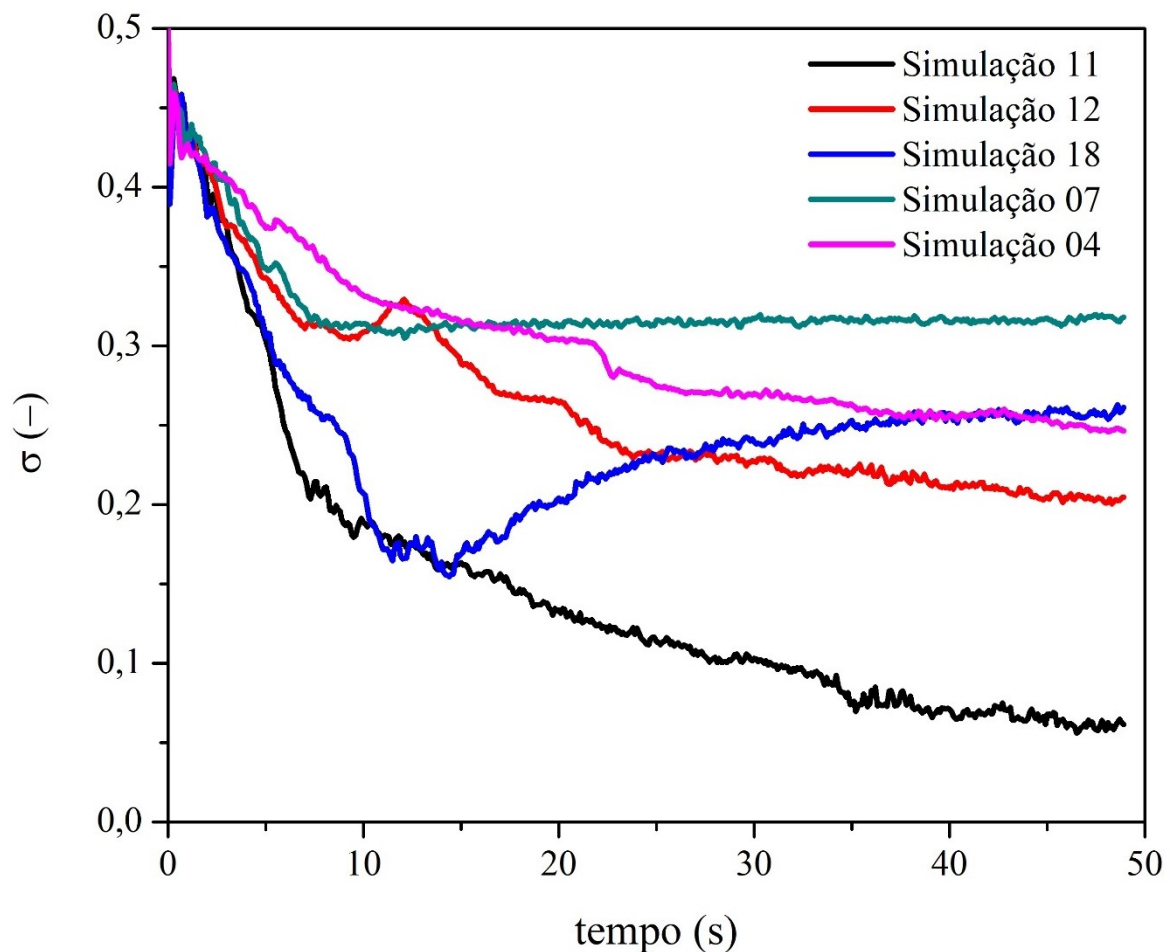


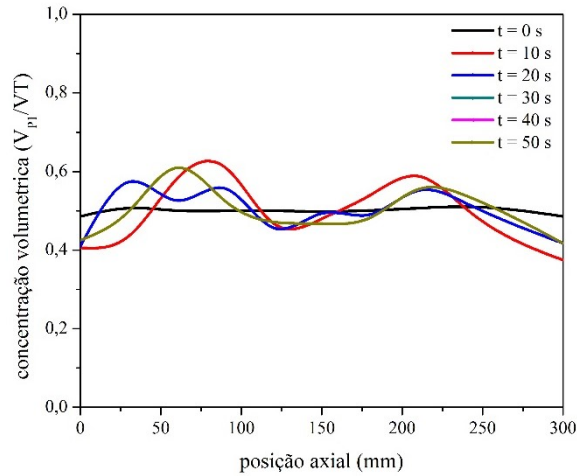
Figura 5-17: Influência do efeito combinado das propriedades granulares sobre as cinéticas de segregação.



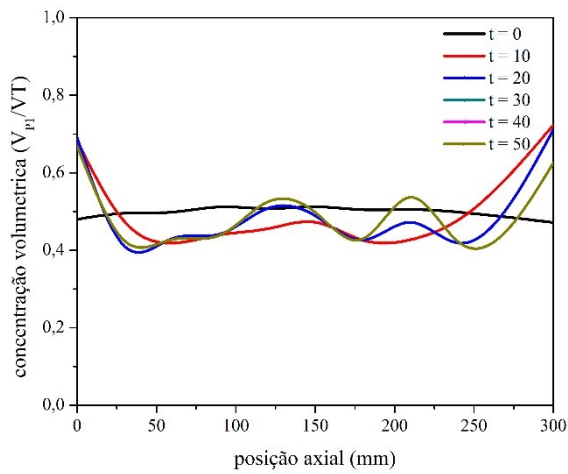
Haja vista que, na Simulação 04 as partículas menores apresentam densidades menores, ao avaliar a influência destas propriedades isoladamente, verifica-se que devido ao menor tamanho, o mecanismo de percolação faz com que estas migrem para o núcleo radial, todavia, por conta da menor densidade, o mecanismo de condensação granular tende a deslocá-las em direção à periferia do leito. Neste contexto, estes dois mecanismos competem entre si, promovendo o enfraquecimento da segregação. Este fenômeno é observado qualitativamente na Tabela 5.9 e avaliado quantitativamente, devido ao menor índice de segregação estacionário quando comparado a Simulação 07, na Figura 5-17.

Nas Figura 5-18, são apresentados os perfis de concentração das partículas do tipo 1 ao longo do eixo axial, nos tempos de 0, 10, 20, 30, 40 e 50 segundos, para as Simulações 11, 12, 18, 07 e 04. A partir da análise dos gráficos presentes na Figura 5-18, nota-se a diferença na concentração volumétrica de partículas ao longo do eixo; verifica-se, também, uma relação entre a formação do núcleo radial (Figura 5-17) e a tendência de formação das bandas. As partículas que migram para o núcleo, de modo geral, também tenderam a se concentrar no centro axial do tambor.

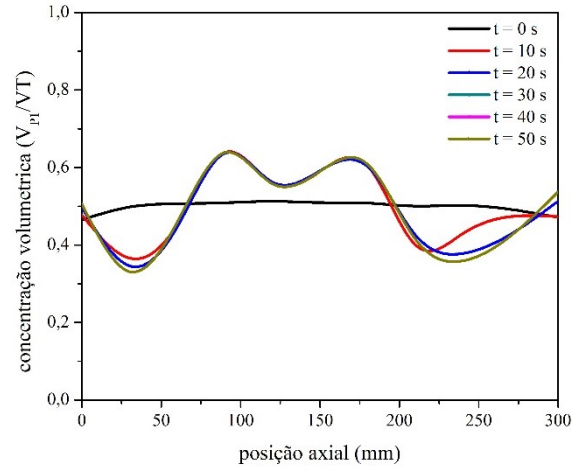
No estudo realizado por Santomaso *et al.* (2005), foi também observado a formação de bandas axiais, porém, os autores atribuíram a este fenômeno apenas a influência da rugosidade das paredes terminais, não avaliando a contribuição das propriedades físicas das partículas no interior do equipamento. Conforme pode ser visualizada na Figura 5-19, próximo às paredes terminais, após atingir o estado estacionário, o leito apresenta comportamentos distintos, provocado pela diferença de difusividade das partículas. Utilizando a Simulação 07 como exemplo, uma vez que apresentou um patamar de banda axial bem definido com 200 mm de comprimento, as difusividades axiais das partículas foram estimadas através da rede neural “DeffAxialANN”, resultando no valor de $3,6 \times 10^{-5}$ para as partículas de coloração azul (Tipo 1) e de $9,4 \times 10^{-5}$ para as partículas de coloração vermelha (Tipo 2). Esta diferença de difusividade acarreta, em padrões de movimentação diferentes entre as partículas, promovendo a segregação radial e axial. Este fato está de acordo com as considerações feitas por Cui *et al.* (2014), que observaram que as partículas de diferentes tamanhos e densidades interagem de maneira diferente com as paredes terminais, o que pode promover ou intensificar a formação de bandas axiais.



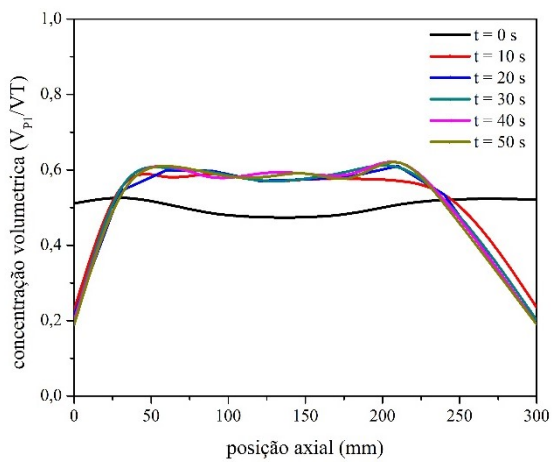
a) Simulação 11



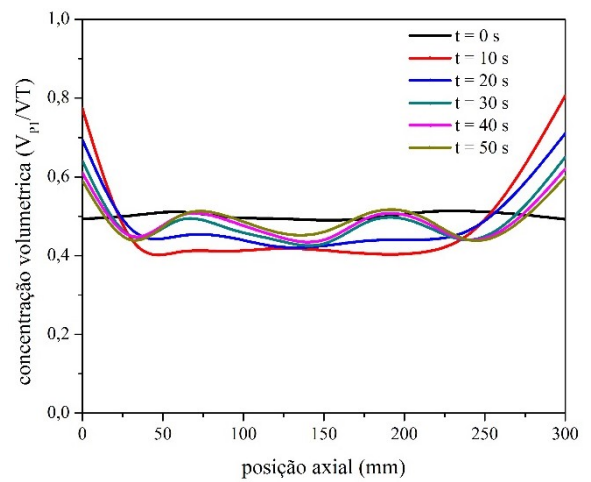
b) Simulação 12



c) Simulação 18



d) Simulação 07



e) Simulação 04

Figura 5-18: Influência do efeito combinado das propriedades granulares sobre o perfil de concentração axial ao longo do tempo.

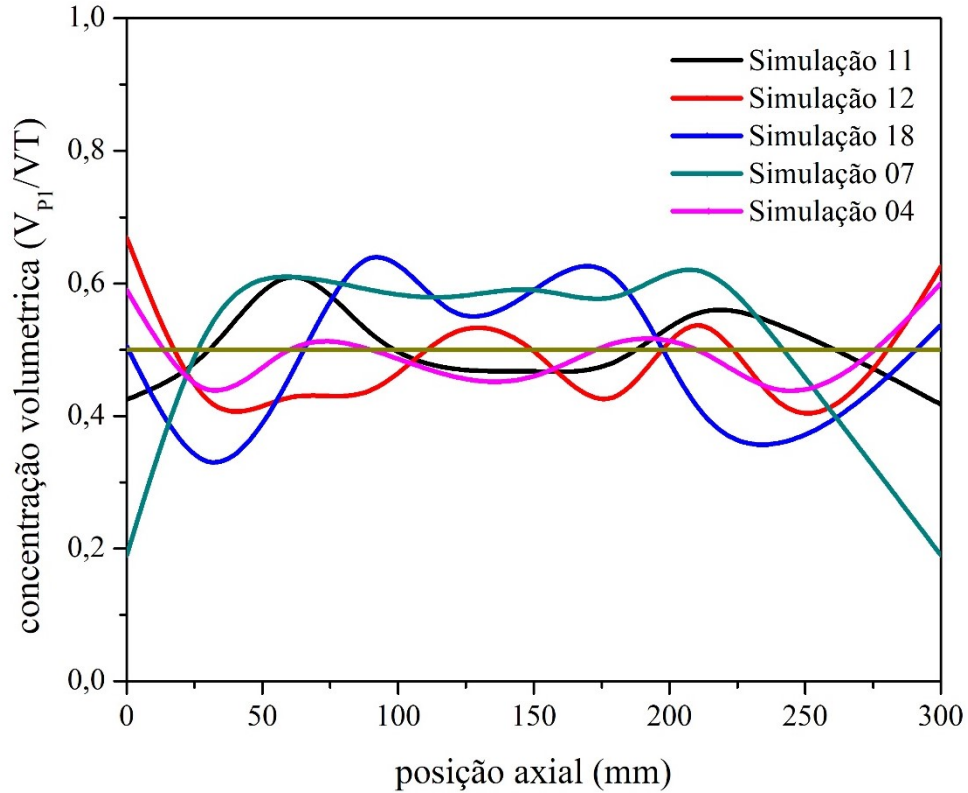


Figura 5-19: Influência do efeito combinado das propriedades granulares o perfil de concentração axial em regime permanente.

Considerando todas as simulações numéricas presentes no planejamento composto central (1-26), os valores do σ_{∞} variaram de 0,08 a 0,31, enquanto os valores de k variaram de 0,11 a 0,43 s^{-1} . As equações para as predições de σ_{∞} e k (Equações 5.19 e 5.20) foram ajustadas aos dados presentes no Apêndice 4 utilizando técnicas de regressão, apresentando coeficiente de correlação (r^2) de 0,72 e 0,76, respectivamente, permitindo assim quantificar os efeitos das variáveis independentes sobre a resposta.

$$\sigma_{\infty} = 0,1809 + 0,0300x_2^2 + 0,0169x_4 + 0,0298x_4^2 + 0,0173x_1x_4 - 0,0177x_2x_4 \quad (5.19)$$

$$k = 0,2314 - 0,0468x_1^2 - 0,0481x_3^2 + 0,0548x_4^2 - 0,0443x_2x_4 \quad (5.20)$$

$$x_1 = \frac{r_{P1} - 1,5}{0,6} \quad x_2 = \frac{r_{P2} - 1,5}{0,6} \quad x_3 = \frac{\rho_{P1} - 5000}{2000} \quad x_4 = \frac{\rho_{P2} - 5000}{2000}$$



A partir da análise da regressão, verifica-se que tanto o tamanho das partículas do tipo 1 e do tipo 2, quanto as suas densidades, apresentam influência significativa sobre as respostas. De modo geral, as contribuições das variáveis avaliadas possuem efeito direto nas repostas, ou seja, o aumento de x_1 , x_2 , x_3 ou x_4 faz com que tanto o índice de segregação estacionário quanto a constante cinética sejam elevadas. Isto está relacionado ao fato de que, na elevação de uma destas variáveis, devido a diferença nas propriedades físicas, ocorrerá a promoção da segregação, salvo para os casos avaliados na seção “Efeito do tamanho” ($RT < 0,5$), onde foi observado que partículas menores tem a capacidade de movimentar-se através dos poros criados pelas maiores, atenuando o aprisionamento no núcleo radial.

Como alternativa a regressão múltipla polinomial, foi aplicado ao índice de segregação estacionário e a constante cinética de segregação a técnica de rede neural, “SegregInfANN” (Apêndice 11) e “SegregKANN” (Apêndice 12). Estas redes eram compostas por uma camada com 10 e 17 neurônios do tipo *tanh e logistic*, respectivamente, apresentando r^2 superior a 0,99, permitindo assim, determinar a velocidade de segregação de um sistema através da constante cinética, e sua qualidade, a partir das propriedades físicas das partículas do sistema.

Disposição inicial

Além da avaliação dos efeitos do tamanho e da densidade das partículas no fenômeno de segregação, foi observado, também, a influência da disposição inicial do leito granular. Na Tabela 5.10, são apresentadas as simulações numéricas nas quais foram avaliadas as duas condições limítrofes de disposição inicial: o leito completamente misturado (M) e o leito completamente segregado (S), sendo computado o índice de segregação estacionário em cada uma das condições.

Analisando a Tabela 5.10, é possível notar que, nas condições avaliadas, os índices de segregação estacionários, tanto quando o processo iniciou-se completamente misturado ($\sigma_{\infty M}$), quanto no caso em que o leito estava completamente segregado ($\sigma_{\infty S}$), eram estatisticamente equivalentes (teste de Tukey), permitindo, assim, inferir que a disposição inicial não promove a mudança do comportamento de mistura após atingir o estado estacionário. Este comportamento também pode ser observado a partir da Figura 5-20, a qual exemplifica a cinética de segregação



ao alterar a disposição inicial das partículas. Apesar do perfil cinético ser discrepante, devido as condições iniciais, ambas convergem para valores equivalentes.

Tabela 5.10: Comparação do índice de segregação estacionário avaliando a influência da disposição granular inicial.

Simulação	R _{P1} (mm)	R _{P2} (mm)	ρ_{P1} (kg/m ³)	ρ_{P2} (kg/m ³)	$\sigma_{\infty M}$ (-)	$\sigma_{\infty S}$ (-)
1	3	3	7000	7000	0,0781±0,0015	0,0794±
2	3	3	2000	2000	0,0812±0,0006	0,0806±
3	2	2	7000	7000	0,0424±0,0021	0,0468±
4	2	2	2000	2000	0,0430±0,0017	0,0413±
5	3	2	7000	7000	0,1463±0,0005	0,1502±
6	3	2	2000	2000	0,1434±0,0034	0,1469±
7	3	3	7000	2000	0,1270±0,0042	0,1258±
8	2	2	7000	2000	0,1317±0,00012	0,1309±

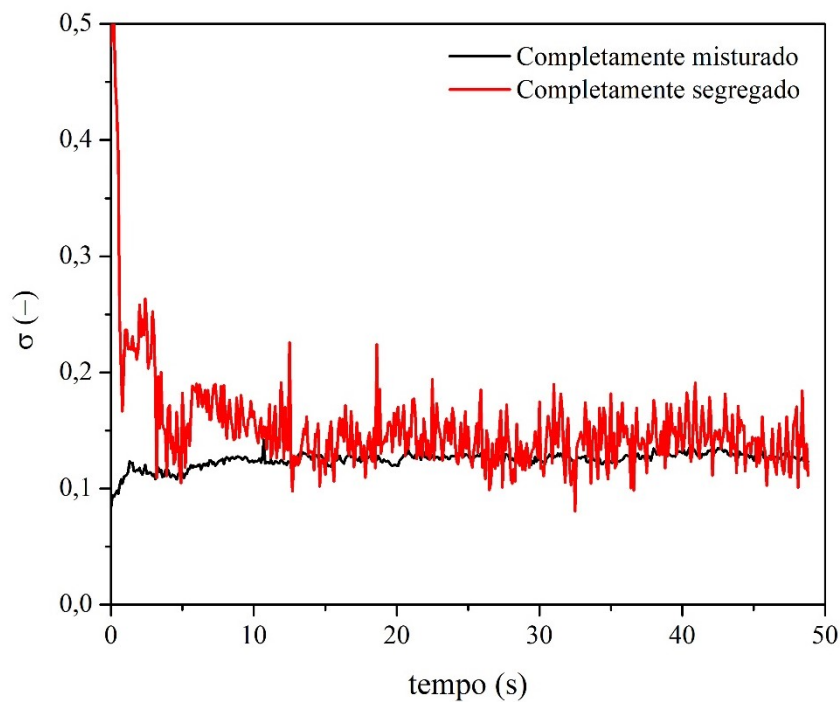
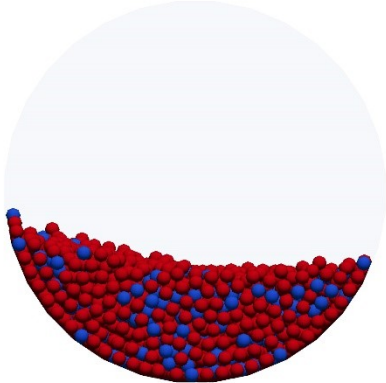
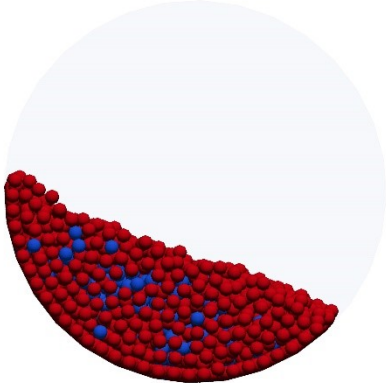
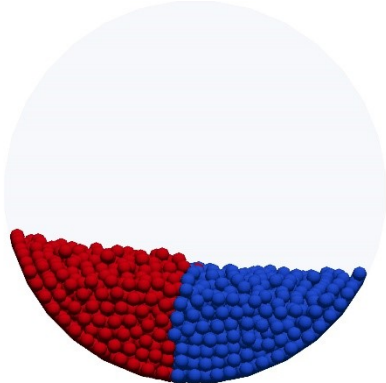
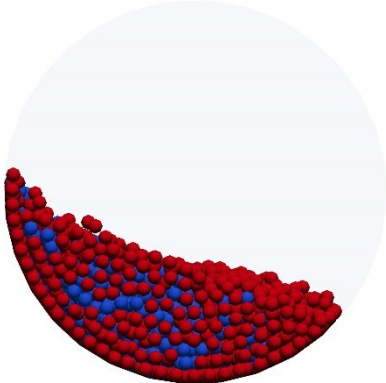


Figura 5-20: Comparação da cinética de segregação avaliando a influência da disposição granular inicial.



Na Tabela 5.11, são apresentadas imagens da Simulação 7, nos tempos de 0 e 50 segundos para ambos os casos: leito inicialmente completamente misturado e completamente segregado, sendo possível observar qualitativamente a correspondência entre as imagens após 50 segundos de simulação, corroborando com os dados apresentados na Figura 5-20.

Tabela 5.11: Avaliação qualitativa do efeito da disposição granular inicial.

Disposição inicial	t = 0 s	t = 50 s
Completamente misturado		
Completamente segregado		



5.5. Conclusão

Com base nos objetivos propostos e diante dos resultados obtidos acerca da segregação granular, tem-se as conclusões descritas a seguir:

- ✓ A aplicação da abordagem numérica Lagrangeana se deu de maneira satisfatória, permitindo avaliar o fenômeno de segregação no interior de tambores rotatórios;
- ✓ Foi investigado numericamente a influência da utilização de partículas de diferentes densidades, RD, permitindo notar que tanto o índice de segregação após atingir o estado estacionário quanto a constante cinética de segregação foram intensificados linearmente com a diminuição da razão de densidade;
- ✓ Foi observado que assim como no caso da redução do RD, a diminuição de RT também promoveu o aumento do índice de segregação estacionário e da constante cinética de segregação, porém isto não ocorreu em todo espectro de RT avaliado. Para valores de RT inferiores a 0,5, maiores reduções promoviam também a diminuição do índice e da constante cinética, sendo este fenômeno possivelmente relacionado ao fato de que partículas menores tendem a migrar para o núcleo radial. Porém, ao ter dimensões muito inferiores ao das partículas maiores, o efeito de aprisionamento é reduzido, limitando assim a segregação.
- ✓ Foi aplicado um planejamento composto central para investigação do efeito simultâneo da utilização de partículas com diferentes tamanhos e densidades. No caso em que as partículas menores apresentam densidade maior é verificado um sinergismo dos mecanismos de percolação e condensação granular fazendo com que ocorresse a intensificação do fenômeno de segregação. Já no caso em que as partículas menores eram menos densas, ao avaliar a influência destas propriedades isoladamente, verifica-se que devido ao menor tamanho, o mecanismo de percolação faz com que estas migrem para o núcleo radial. Todavia, por conta da menor densidade, o mecanismo de condensação granular tende a deslocá-las em direção a periferia do leito. Neste contexto, estes dois mecanismos competem entre si, promovendo o enfraquecimento da segregação.
- ✓ Além da avaliação dos efeitos do tamanho e da densidade das partículas no fenômeno de segregação, foi observado também a influência da disposição inicial do leito granular. Nas condições avaliadas, verificando que os índices de segregação estacionários, tanto quando o processo iniciou-se completamente misturado ($\sigma_{\infty M}$), quanto no caso em que o leito estava completamente segregado ($\sigma_{\infty S}$), eram estatisticamente equivalentes permitindo inferir que a disposição inicial não promoveu mudanças no comportamento de mistura após atingir o estado estacionário.

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, 2011a. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.09.030>

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>

ARYAEI, A.; HASHEMNIA, K.; JAFARPUR, K. Experimental and numerical study of ball size effect on restitution coefficient in low velocity impacts. *International Journal of Impact Engineering*, v. 37, n. 10, p. 1037-1044, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2010.04.005>

BALEVIČIUS, R.; SIELAMOWICZ, I.; MRÓZ, Z.; KAČIANAUSKAS, R. Effect of rolling friction on wall pressure, discharge velocity and outflow of granular material from a flat-bottomed bin. *Particuology*, v. 10, n. 6, p. 672-682, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2012.07.002>

BEAKAWI AL-HASHEMI, H. M.; BAGHABRA AL-AMOUDI, O. S. A review on the angle of repose of granular materials. *Powder Technology*, v. 330, n. May, p. 397-417, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.02.003>

BENABDALLAH, H. S. Static friction coefficient of some plastics against steel and aluminum under different contact conditions. *Tribology International*, v. 40, n. 1, p. 64-73, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2006.02.031>

BHATTACHARYA, T. CONTROLLING MIXING AND SEGREGATION IN by Tathagata Bhattacharya Master of Technology , Indian Institute of Technology (IIT), Kanpur , India , 2002 Bachelor of Engineering , The University of North Bengal , Darjeeling , India , 2000 Submitted to the Grad. 2011.

BLAU, P. J. The significance and use of the friction coefficient. *Tribology International*, v. 34, n. 9, p. 585-591, 2001. [https://doi.org/10.1016/S0301-679X\(01\)00050-0](https://doi.org/10.1016/S0301-679X(01)00050-0)

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>

BUCHHOLTZ, V.; PÖSCHEL, T.; TILLEMANS, H. J. Simulation of rotating drum experiments using non-circular particles. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 216, n. 3, p. 199-212, 1995.
[https://doi.org/10.1016/0378-4371\(95\)00045-9](https://doi.org/10.1016/0378-4371(95)00045-9)

CANTELAUBE, F.; BIDEAU, D.; ROUX, S. Kinetics of segregation of granular media in a two-dimensional rotating drum. *Powder Technology*, v. 93, n. 1, p. 1-11, 1997.
[https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(97\)03213-0](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(97)03213-0)

CHEN, H.; ZHAO, X. Q.; XIAO, Y. G.; LIU, Y. L.; LIU, Y. Radial mixing and segregation of granular bed bi-dispersed both in particle size and density within horizontal rotating drum. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China (English Edition)*, v. 26, n. 2, p. 527-535, 2016.
[https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(16\)64110-9](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(16)64110-9)

CHO, J.; ZHU, Y.; LEWKOWICZ, K.; LEE, S.; BERGMAN, T.; CHAUDHURI, B. Solving granular segregation problems using a biaxial rotary mixer. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 57-58, p. 42-50, 2012.
<https://doi.org/10.1016/j.cep.2012.04.002>

CHOU, S. H.; HSIAU, S. S. Dynamic properties of immersed granular matter in different flow regimes in a rotating drum. *Powder Technology*, v. 226, p. 99-106, 2012.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.04.024>

CHOU, S. H.; HU, H. J.; HSIAU, S. S. Investigation of friction effect on granular dynamic behavior in a rotating drum. *Advanced Powder Technology*, v. 27, n. 5, p. 1912-1921, 2016.
<https://doi.org/10.1016/j.appt.2016.06.022>

COETZEE, C. J. Calibration of the discrete element method and the effect of particle shape. *Powder Technology*, v. 297, p. 50-70, 2016.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.04.003>

COMBARROS, M.; FEISE, H. J.; ZETZENER, H.; KWADE, A. Segregation of particulate solids: Experiments and DEM simulations. *Particuology*, v. 12, n. 1, p. 25-32, 2014.
<https://doi.org/10.1016/j.partic.2013.04.005>

CROSS, R. Effects of surface roughness on rolling friction. *European Journal of Physics*, v. 36, n. 6, 2015.
<https://doi.org/10.1088/0143-0807/36/6/065029>

CUI, Z.; ZHAO, Y.; CHEN, Y.; LIU, X.; HUA, Z.; ZHOU, C.; ZHENG, J. Transition of axial segregation patterns in a long rotating drum. *Particuology*, v. 13, n. 1, p. 128-133, 2014.

<https://doi.org/10.1016/j.partic.2013.02.013>

CUNHA, R. N.; SANTOS, K. G.; LIMA, R. N.; DUARTE, C. R.; BARROZO, M. A. S. Repose angle of monoparticles and binary mixture: An experimental and simulation study. *Powder Technology*, v. 303, p. 203-211, 2016.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.09.023>

DALE, S.; WASSGREN, C.; LITSTER, J. Measuring granule phase volume distributions using X-ray microtomography. *Powder Technology*, v. 264, p. 550-560, 2014.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.06.009>

DANBY, M.; SHRIMPTON, J.; PALMER, M. On the optimal numerical time integration for DEM using Hertzian force models. *Computers and Chemical Engineering*, v. 58, p. 211-222, 2013.

<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.06.018>

DING, Y. L.; SEVILLE, J. P. K.; FORSTER, R.; PARKER, D. J. Solids motion in rolling mode rotating drums operated at low to medium rotational speeds. *Chemical Engineering Science*, v. 56, n. 5, p. 1769-1780, 2001.

[https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(00\)00468-1](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(00)00468-1)

DOSTA, M.; DALE, S.; ANTONYUK, S.; WASSGREN, C.; HEINRICH, S.; LITSTER, J. D. Numerical and experimental analysis of influence of granule microstructure on its compression breakage. *Powder Technology*, v. 299, p. 87-97, 2016.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.05.005>

DUBÉ, O.; ALIZADEH, E.; CHAOUKI, J.; BERTRAND, F. Dynamics of non-spherical particles in a rotating drum. *Chemical Engineering Science*, v. 101, p. 486-502, 2013.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.07.011>

DUNKIN, J. E.; KIM, D. E. Measurement of static friction coefficient between flat surfaces. *Wear*, v. 193, n. 2, p. 186-192, 1996.

[https://doi.org/10.1016/0043-1648\(95\)06706-X](https://doi.org/10.1016/0043-1648(95)06706-X)

DURY, C. M.; RISTOW, G. H.; MOSS, J. L.; NAKAGAWA, M. Boundary effects on the angle of repose in rotating cylinders. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, v. 57, n. 4, p. 4491-4497, 1998.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.4491>

FAN, L. T.; CHEN, S. J.; WATSON, C. A. Solids Mixing. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 62, n. 7, p. 53-69, 1970.

<https://doi.org/10.1021/ie50727a009>

FANTOZZI, F.; COLANTONI, S.; BARTOCCI, P.; DESIDERI, U. Rotary kiln slow pyrolysis for syngas and char production from biomass and waste - Part I: Working envelope of the reactor. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, v. 129, n. 4, p. 901-907, 2007.

<https://doi.org/10.1115/1.2720521>

FISCHER, D.; FINGER, T.; ANGENSTEIN, F.; STANNARIUS, R. Diffusive and subdiffusive axial transport of granular material in rotating mixers. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, v. 80, n. 6, p. 1-5, 2009.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.80.061302>

FREIREICH, B.; KUMAR, R.; KETTERHAGEN, W.; SU, K.; WASSGREN, C.; ZEITLER, J. A. Comparisons of intra-tablet coating variability using DEM simulations, asymptotic limit models, and experiments. *Chemical Engineering Science*, v. 131, p. 197-212, 2015.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.03.013>

FRIEDMAN, S. P.; ROBINSON, D. A. Particle shape characterization using angle of repose measurements for predicting the effective permittivity and electrical conductivity of saturated granular media. *Water Resources Research*, v. 38, n. 11, p. 18-1-18-11, 2002.

<https://doi.org/10.1029/2001WR000746>

FUKUMOTO, Y.; SAKAGUCHI, H.; MURAKAMI, A. The role of rolling friction in granular packing. *Granular Matter*, v. 15, n. 2, p. 175-182, 2013.

<https://doi.org/10.1007/s10035-013-0398-8>

G194-08, A. Standard Test Method for Measuring Rolling Friction Characteristics of a Spherical Shape on a Flat Horizontal Plane. *Am. Soc. Test. Mater.*, 2013.

GONZÁLEZ-MONTELLANO, C.; RAMÍREZ, Á.; GALLEGU, E.; AYUGA, F. Validation and experimental calibration of 3D discrete element models for the simulation of the discharge flow in silos. *Chemical Engineering Science*, v. 66, n. 21, p. 5116-5126, 2011.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.07.009>

GRAJALES, L. M.; XAVIER, N. M.; HENRIQUE, J. P.; THOMÉO, J. C. Mixing and motion of rice particles in a rotating drum. *Powder Technology*, v. 222, p. 167-175, 2012.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.02.028>

GRASSELLI, Y.; HERRMANN, H. J. On the angles of dry granular heaps. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 246, n. 3-4, p. 301-312, 1997.

[https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(97\)00326-9](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(97)00326-9)

GUI, N.; YANG, X.; TU, J.; JIANG, S. Numerical study of the motion behaviour of three-dimensional cubic particle in a thin drum. *Advanced Powder Technology*, v. 29, n. 2, p. 426-437, 2018.

<https://doi.org/10.1016/j.apr.2017.11.033>

HARNBY, N. A comparison of the performance of industrial solids mixers using segregating materials. *Powder Technology*, v. 1, n. 2, p. 94-102, 1967.

[https://doi.org/10.1016/0032-5910\(67\)80017-2](https://doi.org/10.1016/0032-5910(67)80017-2)

HE, S. Y.; GAN, J. Q.; PINSON, D.; ZHOU, Z. Y. Particle shape-induced radial segregation of binary mixtures in a rotating drum. *Powder Technology*, p. 2-11, 2018.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.08.075>

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 A, p. 963-973, 2007.

<https://doi.org/10.1205/cherd06216>

HENEIN, H.; BRIMACOMBE, J. K.; WATKINSON, A. P. Experimental study of transverse bed motion in rotary kilns. *Metallurgical Transactions B*, v. 14, n. 2, p. 191-205, 1983a.

<https://doi.org/10.1007/BF02661016>

HÖHNER, D.; WIRTZ, S.; SCHERER, V. A study on the influence of particle shape and shape approximation on particle mechanics in a rotating drum using the discrete element method. *Powder Technology*, v. 253, p. 256-265, 2014.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.11.023>

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>

HUANG, Q.; ZHANG, H.; ZHU, J. Experimental study on fluidization of fine powders in rotating drums with various wall friction and baffled rotating drums. *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 9, p. 2234-2244, 2009.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.01.047>

HUTCHINGS, I. M. Leonardo da Vinci's studies of friction. *Wear*, v. 360-361, p. 51-66, 2016.

<https://doi.org/10.1016/j.wear.2016.04.019>

IMRE, B.; RÄBSAMEN, S.; SPRINGMAN, S. M. A coefficient of restitution of rock materials. *Computers and Geosciences*, v. 34, n. 4, p. 339-350, 2008.

<https://doi.org/10.1016/j.cageo.2007.04.004>

INGRAM, A.; SEVILLE, J. P. K.; PARKER, D. J.; FAN, X.; FORSTER, R. G. Axial and radial dispersion in rolling mode rotating drums. *Powder Technology*, v. 158, n. 1-3, p. 76-91, 2005.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.04.030>

J. M. BOAC; M. E. CASADA; R. G. MAGHIRANG; J. P. HARNER III. Material and Interaction Properties of Selected Grains and Oilseeds for Modeling Discrete Particles. Transactions of the ASABE, v. 53, n. 4, p. 1201-1216, 2010.

<https://doi.org/10.13031/2013.32577>

JAIN, A.; METZGER, M. J.; GLASSER, B. J. Effect of particle size distribution on segregation in vibrated systems. Powder Technology, v. 237, p. 543-553, 2013.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.12.044>

JAIN, N.; OTTINO, J. M.; LUEPTOW, R. M. Regimes of segregation and mixing in combined size and density granular systems: An experimental study. Granular Matter, v. 7, n. 2-3, p. 69-81, 2005.

<https://doi.org/10.1007/s10035-005-0198-x>

JUAREZ, G.; CHEN, P.; LUEPTOW, R. M. Transition to centrifuging granular flow in rotating tumblers: A modified Froude number. New Journal of Physics, v. 13, 2011.

<https://doi.org/10.1088/1367-2630/13/5/053055>

KHAN, Z. Granular segregation dynamics in a rotating drum. 2006.

KHAN, Z. S.; MORRIS, S. W. Subdiffusive axial transport of granular materials in a long drum mixer. Physical Review Letters, v. 94, n. 4, p. 1-4, 2005.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.048002>

KLOSS, C.; GONIVA, C.; HAGER, A.; AMBERGER, S.; PIRKER, S. Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM. Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal, v. 12, n. 2/3, p. 140, 2012.

<https://doi.org/10.1504/PCFD.2012.047457>

KOYNOV, S.; WANG, Y.; REDERE, A.; AMIN, P.; EMADY, H. N.; MUZZIO, F. J.; GLASSER, B. J. Measurement of the axial dispersion coefficient of powders in a rotating cylinder: Dependence on bulk flow properties. Powder Technology, v. 292, p. 298-306, 2016.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.01.039>

KUMAR, R.; FREIREICH, B.; WASSGREN, C. DEM-compartment-population balance model for particle coating in a horizontal rotating drum. Chemical Engineering Science, v. 125, p. 144-157, 2015.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.06.046>

KUO, H. P.; HSU, R. C.; HSIAO, Y. C. Investigation of axial segregation in a rotating drum. Powder Technology, v. 153, n. 3, p. 196-203, 2005.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.03.018>

- LACEY, P. M. C. The mixing of solid particles. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 75, p. S49-S55, 1997.
[https://doi.org/10.1016/S0263-8762\(97\)80004-4](https://doi.org/10.1016/S0263-8762(97)80004-4)
- LEE, C. F.; CHOU, H. TER; CAPART, H. Granular segregation in narrow rotational drums with different wall roughness: Symmetrical and asymmetrical patterns. *Powder Technology*, v. 233, p. 103-115, 2013.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.08.034>
- LI, D.; LIU, G.; LU, H.; ZHANG, Q.; WANG, Q.; YU, H. Numerical simulation of different flow regimes in a horizontal rotating ellipsoidal drum. *Powder Technology*, v. 291, p. 86-96, 2016.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.12.007>
- LIAO, C. C. Effect of dynamic properties on density-driven granular segregation in a rotating drum. *Powder Technology*, v. 345, p. 151-158, 2019.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.12.093>
- LIAO, C. C.; HSIAU, S. S.; NIEN, H. C. Effects of density ratio, rotation speed, and fill level on density-induced granular streak segregation in a rotating drum. *Powder Technology*, v. 284, p. 514-520, 2015.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.07.030>
- LIU, P. Y.; YANG, R. Y.; YU, A. B. DEM study of the transverse mixing of wet particles in rotating drums. *Chemical Engineering Science*, v. 86, p. 99-107, 2012.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.06.015>
- LIU, X.; MA, W.; HOU, Q.; ZHANG, Q.; GONG, B.; FENG, Y. End-wall effects on the mixing process of granular assemblies in a short rotating drum. *Powder Technology*, v. 339, p. 497-505, 2018.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.08.027>
- LIU, X. Y.; SPECHT, E.; MELLMANN, J. Slumping-rolling transition of granular solids in rotary kilns. *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 13, p. 3629-3636, 2005.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.02.020>
- LOMMEN, S.; SCHOTT, D.; LODEWIJKS, G. DEM speedup: Stiffness effects on behavior of bulk material. *Particuology*, v. 12, n. 1, p. 107-112, 2014.
<https://doi.org/10.1016/j.partic.2013.03.006>
- LU, G.; THIRD, J. R.; MÜLLER, C. R. Discrete element models for non-spherical particle systems: From theoretical developments to applications. *Chemical Engineering Science*, v. 127, p. 425-465, 2015.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.11.050>

LUIZ, P.; DO, F. Influência da pressão nominal de contato no coeficiente de atrito estático em plano inclinado automatizado. 2013.

MACHADO, M. V. C.; NASCIMENTO, S. M.; DUARTE, C. R.; BARROZO, M. A. S. Boundary conditions effects on the particle dynamic flow in a rotary drum with a single flight. *Powder Technology*, v. 311, p. 341-349, 2017.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.01.076>

MAEGAWA, S.; ITOIGAWA, F.; NAKAMURA, T. Effect of normal load on friction coefficient for sliding contact between rough rubber surface and rigid smooth plane. *Tribology International*, v. 92, p. 335-343, 2015.
<https://doi.org/10.1016/j.triboint.2015.07.014>

MAIONE, R.; KIESGEN DE RICHTER, S.; MAUVIEL, G.; WILD, G. Axial segregation of a binary mixture in a rotating tumbler with non-spherical particles: Experiments and DEM model validation. *Powder Technology*, v. 306, p. 120-129, 2017.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.10.073>

MARINACK, M. C.; JASTI, V. K.; CHOI, Y. E.; HIGGS, C. F. Couette grain flow experiments: The effects of the coefficient of restitution, global solid fraction, and materials. *Powder Technology*, v. 211, n. 1, p. 144-155, 2011.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2011.04.012>

MCCARTHY, J. J. Micro-modeling of cohesive mixing processes. *Powder Technology*, v. 138, n. 1, p. 63-67, 2003.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2003.08.042>

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)

MOHAMED, A.; GUTIERREZ, M. Comprehensive study of the effects of rolling resistance on the stress-strain and strain localization behavior of granular materials. *Granular Matter*, v. 12, n. 5, p. 527-541, 2010.
<https://doi.org/10.1007/s10035-010-0211-x>

MOU, S. H.; YANG, H.; LI, R.; ZHANG, G. H.; SUN, Q. C.; KONG, P. Particle dynamics of the passive layer within a granular drum using wavelet analysis. *Powder Technology*, v. 344, p. 1-9, 2019.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.11.108>

NDIAYE, L. G.; CAILLAT, S.; CHINNAYYA, A.; GAMBIER, D.; BAUDOIN, B. Application of the dynamic model of Saeman to an industrial rotary kiln incinerator: Numerical and experimental results. *Waste Management*, v. 30, n. 7, p. 1188-1195, 2010.
<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2009.09.023>

- NOROUZI, H. R.; ZARGHAMI, R.; MOSTOUFI, N. Insights into the granular flow in rotating drums. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 102, p. 12-25, 2015.
<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.06.010>
- PEZO, M.; PEZO, L.; JOVANOVIĆ, A.; LONČAR, B.; ČOLOVIĆ, R. DEM/CFD approach for modeling granular flow in the revolving static mixer. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 109, p. 317-326, 2016.
<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2016.02.003>
- PIRKER, S.; KAHRIMANOVIC, D.; KLOSS, C.; POPOFF, B.; BRAUN, M. Simulating coarse particle conveying by a set of Eulerian, Lagrangian and hybrid particle models. *Powder Technology*, v. 204, n. 2-3, p. 203-213, 2010.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.07.033>
- 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.
[https://doi.org/10.1016/0032-5910\(91\)80152-9](https://doi.org/10.1016/0032-5910(91)80152-9)
- REMY, B. Granular flow, segregation and agglomeration In bladed mixers, 2010.
- ROESSLER, T.; KATTERFELD, A. Scaling of the angle of repose test and its influence on the calibration of DEM parameters using upscaled particles. *Powder Technology*, v. 330, p. 58-66, 2018.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.01.044>
- SANTOMASO, A. C.; ARTONI, R.; CANU, P. Controlling axial segregation in drum mixers through wall friction: Cellular automata simulations and experiments. *Chemical Engineering Science*, v. 90, p. 151-160, 2013.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.12.039>
- SANTOMASO, A. C.; DING, Y. L.; LICKISS, J. R.; YORK, D. W. Investigation of the Granular Behaviour in a Rotating Drum Operated over a Wide Range of Rotational Speed. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 81, n. 8, p. 936-945, 2003.
<https://doi.org/10.1205/026387603322482176>
- SANTOMASO, A.; OLIVI, M.; CANU, P. Mechanisms of mixing of granular materials in drum mixers under rolling regime. *Chemical Engineering Science*, v. 59, n. 16, p. 3269-3280, 2004.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.04.026>
- SANTOMASO, A.; OLIVI, M.; CANU, P. Mixing kinetics of granular materials in drums operated in rolling and cataracting regime. *Powder Technology*, v. 152, n. 1-3, p. 41-51, 2005.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.01.011>

SANTOS, D. A.; BARROZO, M. A. S.; DUARTE, C. R.; WEIGLER, F.; MELLMANN, J. Investigation of particle dynamics in a rotary drum by means of experiments and numerical simulations using DEM. *Advanced Powder Technology*, v. 27, n. 2, p. 692-703, 2016.

<https://doi.org/10.1016/j.appt.2016.02.027>

SANTOS, D. A.; DADALTO, F. O.; SCATENA, R.; DUARTE, C. R.; BARROZO, M. A. S. A hydrodynamic analysis of a rotating drum operating in the rolling regime. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 94, n. August, p. 204-212, 2015.

<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2014.07.028>

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.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.10.003>

SEIFI, R.; ABBASI, K. Friction coefficient estimation in shaft/bush interference using finite element model updating. *Engineering Failure Analysis*, v. 57, p. 310-322, 2015.

<https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2015.08.006>

SOLTANBEIGI, B.; PODLOZHNYUK, A.; PAPANICOLOPULOS, S. A.; KLOSS, C.; PIRKER, S.; OOI, J. Y. DEM study of mechanical characteristics of multi-spherical and superquadric particles at micro and macro scales. *Powder Technology*, v. 329, p. 288-303, 2018.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.01.082>

SONDERGAARD, R.; CHANEY, K.; BRENNEN, C. E. Measurements of Solid Spheres Bouncing Off Flat Plates. *Journal of Applied Mechanics*, v. 57, n. 3, p. 694, 2008a.

<https://doi.org/10.1115/1.2897079>

TABERLET, N.; LOSERT, W.; RICHARD, P. Understanding the dynamics of segregation bands of simulated granular material in a rotating drum. *Europhysics Letters*, v. 68, n. 4, p. 522-528, 2004.

<https://doi.org/10.1209/epl/i2004-10227-1>

TABERLET, N.; NEWAY, M.; RICHARD, P.; LOSERT, W. On axial segregation in a tumbler: An experimental and numerical study. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, n. 7, 2006.

<https://doi.org/10.1088/1742-5468/2006/07/P07013>

TANG, P.; PURI, V. M. Methods for minimizing segregation: A review. *Particulate Science and Technology*, v. 22, n. 4, p. 321-337, 2004.

<https://doi.org/10.1080/02726350490501420>

TAO, H.; JIN, B.; ZHONG, W.; WANG, X.; REN, B.; ZHANG, Y.; XIAO, R. Discrete element method modeling of non-spherical granular flow in rectangular hopper. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 49, n. 2, p. 151-158, 2010.
<https://doi.org/10.1016/j.cep.2010.01.006>

THIRD, J. R.; SCOTT, D. M.; SCOTT, S. A. Axial dispersion of granular material in horizontal rotating cylinders. *Powder Technology*, v. 203, n. 3, p. 510-517, 2010.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.06.017>

TOSCHKOFF, G.; JUST, S.; FUNKE, A.; DJURIC, D.; KNOP, K.; KLEINEBUDDE, P.; SCHARRER, G.; KHINAST, J. G. Spray models for discrete element simulations of particle coating processes. *Chemical Engineering Science*, v. 101, p. 603-614, 2013.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.06.051>

WANG, L.; LI, R.; WU, B.; WU, Z.; DING, Z. Determination of the coefficient of rolling friction of an irregularly shaped maize particle group using physical experiment and simulations. *Particuology*, v. 38, p. 185-195, 2018.
<https://doi.org/10.1016/j.partic.2017.06.003>

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>

WATANABE, H. Critical rotation speed for ball-milling. *Powder Technology*, v. 104, n. 1, p. 95-99, 1999.
[https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(99\)00031-5](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(99)00031-5)

WEIGLER, F.; MELLMANN, J. Investigation of grain mass flow in a mixed flow dryer. *Particuology*, v. 12, n. 1, p. 33-39, 2014.
<https://doi.org/10.1016/j.partic.2013.04.004>

WEIR, G.; TALLON, S. The coefficient of restitution for normal incident, low velocity particle impacts. *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 13, p. 3637-3647, 2005.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.01.040>

WEIZMAN, Y.; FUSS, F. K.; DOLJIN, B. A method for accurate measurement of the non-linear rolling friction coefficient between an instrumented ball and a surface. *Procedia Engineering*, v. 60, p. 496-500, 2013.
<https://doi.org/10.1016/j.proeng.2013.07.046>

WU, C. Y.; COCKS, A. C. F.; GILLIA, O. T.; THOMPSON, D. A. Experimental and numerical investigations of powder transfer. *Powder Technology*, v. 138, n. 2-3, p. 216-228, 2003.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2003.09.011>

- 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>
- XU, Y.; XU, C.; ZHOU, Z.; DU, J.; HU, D. 2D DEM simulation of particle mixing in rotating drum: A parametric study. *Particuology*, v. 8, n. 2, p. 141-149, 2010.
<https://doi.org/10.1016/j.partic.2009.10.003>
- YAMAMOTO, M.; ISHIHARA, S.; KANO, J. Evaluation of particle density effect for mixing behavior in a rotating drum mixer by DEM simulation. *Advanced Powder Technology*, v. 27, n. 3, p. 864-870, 2016.
<https://doi.org/10.1016/j.apr.2015.12.013>
- YANG, R. Y.; YU, A. B.; MCELROY, L.; BAO, J. Numerical simulation of particle dynamics in different flow regimes in a rotating drum. *Powder Technology*, v. 188, n. 2, p. 170-177, 2008.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2008.04.081>
- YANG, R. Y.; ZOU, R. P.; YU, A. B. Microdynamic analysis of particle flow in a horizontal rotating drum. *Powder Technology*, v. 130, n. 1-3, p. 138-146, 2003.
[https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(02\)00257-7](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(02)00257-7)
- YOSHIDA, M.; TAKATSUKI, R.; SAKAMOTO, G.; OSHITANI, J.; GOTOH, K. DEM simulation and analysis of the effects of adhesive forces and rotations of admixed particles on improving main particle flowability. *Advanced Powder Technology*, v. 27, n. 5, p. 2084-2093, 2016.
<https://doi.org/10.1016/j.apr.2016.07.021>
- ZENER, C. Large plates. v. 59, 1941.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.59.669>
- ZHANG, T. F.; GAN, J. Q.; PINSON, D.; ZHOU, Z. Y. Size-induced segregation of granular materials during filling a conical hopper. *Powder Technology*, v. 340, p. 331-343, 2018.
<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.09.031>
- 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, Y. C. C.; WRIGHT, B. D. D.; YANG, R. Y. Y.; XU, B. H.; YU, A.-B. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 269, n. 2-4, p. 536-553, 1999.
[https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(99\)00183-1](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(99)00183-1)

ZHOU, Y. C.; XU, B. H.; YU, A. B.; ZULLI, P. Numerical investigation of the angle of repose of monosized spheres. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, v. 64, n. 2, p. 8, 2001.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.021301>

ZHOU Y.C. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation.pdf. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 269, n. 15 July 1999, p. Pages 536-553, 1999.

[https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(99\)00183-1](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(99)00183-1)

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.; YU, A. B. A theoretical analysis of the force models in discrete element method. *Powder Technology*, v. 161, n. 2, p. 122-129, 2006.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.09.006>

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>

APÊNDICE

Apêndice 1: Planejamento ângulo de repouso.

	d (mm)	ρ (kg/m³)	μ_{spp} (-)	μ_{rpp} (-)	μ_{spw} (-)	μ_{rpw} (-)	e_{pp} (-)	e_{pw} (-)	α_I (°)	α_S (°)
1	4,00	4,000,00	0,30	0,030	0,30	0,030	0,80	0,80	24,46	20,79
2	4,00	4,000,00	0,30	0,030	0,30	0,060	0,80	0,50	24,84	21,54
3	4,00	4,000,00	0,30	0,030	0,60	0,030	0,80	0,50	25,68	21,46
4	4,00	4,000,00	0,30	0,030	0,60	0,060	0,80	0,80	24,74	22,41
5	4,00	4,000,00	0,30	0,060	0,30	0,030	0,50	0,80	26,64	22,31
6	4,00	4,000,00	0,30	0,060	0,30	0,060	0,50	0,50	25,56	23,00
7	4,00	4,000,00	0,30	0,060	0,60	0,030	0,50	0,50	27,07	22,60
8	4,00	4,000,00	0,30	0,060	0,60	0,060	0,50	0,80	25,81	24,60
9	4,00	4,000,00	0,60	0,030	0,30	0,030	0,50	0,80	26,71	23,48
10	4,00	4,000,00	0,60	0,030	0,30	0,060	0,50	0,50	27,62	24,37
11	4,00	4,000,00	0,60	0,030	0,60	0,030	0,50	0,50	27,37	25,27
12	4,00	4,000,00	0,60	0,030	0,60	0,060	0,50	0,80	26,68	24,77
13	4,00	4,000,00	0,60	0,060	0,30	0,030	0,80	0,80	28,88	24,00
14	4,00	4,000,00	0,60	0,060	0,30	0,060	0,80	0,50	29,74	25,32
15	4,00	4,000,00	0,60	0,060	0,60	0,030	0,80	0,50	29,42	24,98
16	4,00	4,000,00	0,60	0,060	0,60	0,060	0,80	0,80	29,70	26,57
17	4,00	8,000,00	0,30	0,030	0,30	0,030	0,50	0,50	25,85	19,12
18	4,00	8,000,00	0,30	0,030	0,30	0,060	0,50	0,80	25,10	19,83
19	4,00	8,000,00	0,30	0,030	0,60	0,030	0,50	0,80	24,84	22,55
20	4,00	8,000,00	0,30	0,030	0,60	0,060	0,50	0,50	24,63	21,65

21	4,00	8,000,00	0,30	0,060	0,30	0,030	0,80	0,50	25,21	22,21
22	4,00	8,000,00	0,30	0,060	0,30	0,060	0,80	0,80	27,13	22,45
23	4,00	8,000,00	0,30	0,060	0,60	0,030	0,80	0,80	25,85	22,36
24	4,00	8,000,00	0,30	0,060	0,60	0,060	0,80	0,50	26,18	23,18
25	4,00	8,000,00	0,60	0,030	0,30	0,030	0,80	0,50	28,50	22,75
26	4,00	8,000,00	0,60	0,030	0,30	0,060	0,80	0,80	27,35	22,94
27	4,00	8,000,00	0,60	0,030	0,60	0,030	0,80	0,80	28,63	24,83
28	4,00	8,000,00	0,60	0,030	0,60	0,060	0,80	0,50	26,21	25,50
29	4,00	8,000,00	0,60	0,060	0,30	0,030	0,50	0,50	28,31	22,99
30	4,00	8,000,00	0,60	0,060	0,30	0,060	0,50	0,80	28,48	24,32
31	4,00	8,000,00	0,60	0,060	0,60	0,030	0,50	0,80	28,77	25,40
32	4,00	8,000,00	0,60	0,060	0,60	0,060	0,50	0,50	29,99	26,45
33	6,00	4,000,00	0,30	0,030	0,30	0,030	0,50	0,50	24,62	19,96
34	6,00	4,000,00	0,30	0,030	0,30	0,060	0,50	0,80	25,06	21,70
35	6,00	4,000,00	0,30	0,030	0,60	0,030	0,50	0,80	26,63	19,50
36	6,00	4,000,00	0,30	0,030	0,60	0,060	0,50	0,50	26,27	21,62
37	6,00	4,000,00	0,30	0,060	0,30	0,030	0,80	0,50	27,83	22,39
38	6,00	4,000,00	0,30	0,060	0,30	0,060	0,80	0,80	27,33	23,18
39	6,00	4,000,00	0,30	0,060	0,60	0,030	0,80	0,80	28,37	21,43
40	6,00	4,000,00	0,30	0,060	0,60	0,060	0,80	0,50	27,37	24,06
41	6,00	4,000,00	0,60	0,030	0,30	0,030	0,80	0,50	27,78	21,72
42	6,00	4,000,00	0,60	0,030	0,30	0,060	0,80	0,80	28,20	22,95
43	6,00	4,000,00	0,60	0,030	0,60	0,030	0,80	0,80	27,93	22,97
44	6,00	4,000,00	0,60	0,030	0,60	0,060	0,80	0,50	27,66	24,49

45	6,00	4,000,00	0,60	0,060	0,30	0,030	0,50	0,50	29,54	24,47
46	6,00	4,000,00	0,60	0,060	0,30	0,060	0,50	0,80	28,20	23,94
47	6,00	4,000,00	0,60	0,060	0,60	0,030	0,50	0,80	30,44	26,96
48	6,00	4,000,00	0,60	0,060	0,60	0,060	0,50	0,50	29,76	25,71
49	6,00	8,000,00	0,30	0,030	0,30	0,030	0,80	0,80	25,99	18,93
50	6,00	8,000,00	0,30	0,030	0,30	0,060	0,80	0,50	25,43	20,17
51	6,00	8,000,00	0,30	0,030	0,60	0,030	0,80	0,50	24,28	18,53
52	6,00	8,000,00	0,30	0,030	0,60	0,060	0,80	0,80	24,73	20,74
53	6,00	8,000,00	0,30	0,060	0,30	0,030	0,50	0,80	27,45	20,50
54	6,00	8,000,00	0,30	0,060	0,30	0,060	0,50	0,50	26,54	22,21
55	6,00	8,000,00	0,30	0,060	0,60	0,030	0,50	0,50	27,19	21,06
56	6,00	8,000,00	0,30	0,060	0,60	0,060	0,50	0,80	26,35	23,26
57	6,00	8,000,00	0,60	0,030	0,30	0,030	0,50	0,80	28,66	21,16
58	6,00	8,000,00	0,60	0,030	0,30	0,060	0,50	0,50	28,20	21,86
59	6,00	8,000,00	0,60	0,030	0,60	0,030	0,50	0,50	28,47	22,13
60	6,00	8,000,00	0,60	0,030	0,60	0,060	0,50	0,80	29,41	23,61
61	6,00	8,000,00	0,60	0,060	0,30	0,030	0,80	0,80	29,62	23,70
62	6,00	8,000,00	0,60	0,060	0,30	0,060	0,80	0,50	30,01	24,13
63	6,00	8,000,00	0,60	0,060	0,60	0,030	0,80	0,50	29,96	26,27
64	6,00	8,000,00	0,60	0,060	0,60	0,060	0,80	0,80	29,51	25,75
65	2,95	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	28,75	25,42
66	7,05	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	28,78	24,21
67	5,00	1,890,72	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	27,31	24,92
68	5,00	10,109,28	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	27,43	24,31

69	5,00	6,000,00	0,14	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	21,31	18,02
70	5,00	6,000,00	0,76	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	31,24	25,36
71	5,00	6,000,00	0,45	0,014	0,45	0,045	0,65	0,65	26,56	23,60
72	5,00	6,000,00	0,45	0,076	0,45	0,045	0,65	0,65	29,43	26,01
73	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,14	0,045	0,65	0,65	27,44	17,45
74	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,76	0,045	0,65	0,65	27,86	23,70
75	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,014	0,65	0,65	28,56	21,80
76	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,076	0,65	0,65	28,16	24,92
77	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,34	0,65	28,50	23,45
78	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,96	0,65	28,63	24,56
79	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,34	28,20	22,68
80	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,96	28,56	24,18
81	5,00	6,000,00	0,45	0,045	0,45	0,045	0,65	0,65	28,27	24,37

Apêndice 2: Planejamento velocidade crítica de centrifugação.

Simulação	r (mm)	ρ (kg/m³)	D (m)	Lt (m)	f (-)	wc (rad/s)
1	0.002	2500	0.15	0.2	0.15	20.5
2	0.002	2500	0.15	0.4	0.25	17.0
3	0.002	2500	0.25	0.2	0.25	13.5
4	0.002	2500	0.25	0.4	0.15	15.5
5	0.002	2500	0.15	0.2	0.25	18.1
6	0.002	2500	0.15	0.4	0.15	19.5
7	0.002	2500	0.25	0.2	0.15	14.5
8	0.002	2500	0.25	0.4	0.25	13.0
9	0.002	6500	0.15	0.2	0.25	18.0
10	0.002	6500	0.15	0.4	0.15	19.5
11	0.002	6500	0.25	0.2	0.15	16.0
12	0.002	6500	0.25	0.4	0.25	13.0
13	0.002	6500	0.15	0.2	0.15	21.0
14	0.002	6500	0.15	0.4	0.25	17.0
15	0.002	6500	0.25	0.2	0.25	14.0
16	0.002	6500	0.25	0.4	0.15	15.5
17	0.004	2500	0.15	0.2	0.25	18.5
18	0.004	2500	0.15	0.4	0.15	20.0
19	0.004	2500	0.25	0.2	0.15	16.0
20	0.004	2500	0.25	0.4	0.25	14.0
21	0.004	2500	0.15	0.2	0.15	20.5
22	0.004	2500	0.15	0.4	0.25	24.0
23	0.004	2500	0.25	0.2	0.25	13.5
24	0.004	2500	0.25	0.4	0.15	15.5
25	0.004	6500	0.15	0.2	0.15	20.0
26	0.004	6500	0.15	0.4	0.25	16.0
27	0.004	6500	0.25	0.2	0.25	14.5
28	0.004	6500	0.25	0.4	0.15	15.5
29	0.004	6500	0.15	0.2	0.25	16.0

30	0.004	6500	0.15	0.4	0.15	20.0
31	0.004	6500	0.25	0.2	0.15	16.0
32	0.004	6500	0.25	0.4	0.25	14.0
33	0.001	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
34	0.005	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
35	0.003	500	0.2	0.3	0.2	16.5
36	0.003	8500	0.2	0.3	0.2	16.5
37	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
38	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
39	0.003	4500	0.1	0.3	0.2	22.0
40	0.003	4500	0.3	0.3	0.2	13.5
41	0.003	4500	0.2	0.1	0.2	15.5
42	0.003	4500	0.2	0.5	0.2	16.0
43	0.003	4500	0.2	0.3	0.1	19.0
44	0.003	4500	0.2	0.3	0.3	15.5
45	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
46	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
47	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
48	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
49	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5
50	0.003	4500	0.2	0.3	0.2	16.5

Apêndice 3: Planejamento difusividade granular.

Simulação	r_{P1} (m)	r_{P2} (m)	ρ_{P2} (kg/m³)	ρ_{P1} (kg/m³)	w_c (rad/s)	μ_{spp} (-)	μ_{rpp} (-)	D_R (m/s²)	D_A (m/s²)
1	0,002	0,002	3000	3000	1,0	0,20	0,060	4,32E-04	5,71E-05
2	0,002	0,002	3000	3000	1,0	0,60	0,020	1,30E-03	2,55E-05
3	0,002	0,002	3000	3000	3,0	0,20	0,020	1,51E-03	2,62E-04
4	0,002	0,002	3000	3000	3,0	0,60	0,060	1,90E-03	9,49E-05
5	0,002	0,002	3000	7000	1,0	0,20	0,020	6,67E-04	4,85E-05
6	0,002	0,002	3000	7000	1,0	0,60	0,060	2,80E-03	4,40E-05
7	0,002	0,002	3000	7000	3,0	0,20	0,060	2,28E-03	1,63E-04
8	0,002	0,002	3000	7000	3,0	0,60	0,020	2,84E-03	8,98E-05
9	0,002	0,002	7000	3000	1,0	0,20	0,020	1,42E-04	3,72E-05
10	0,002	0,002	7000	3000	1,0	0,60	0,060	6,79E-04	8,75E-06
11	0,002	0,002	7000	3000	3,0	0,20	0,060	3,38E-04	1,13E-04
12	0,002	0,002	7000	3000	3,0	0,60	0,020	6,66E-04	6,89E-05
13	0,002	0,002	7000	7000	1,0	0,20	0,060	2,66E-04	4,47E-05
14	0,002	0,002	7000	7000	1,0	0,60	0,020	8,78E-04	1,77E-05
15	0,002	0,002	7000	7000	3,0	0,20	0,020	1,33E-03	2,34E-04
16	0,002	0,002	7000	7000	3,0	0,60	0,060	1,92E-03	8,71E-05
17	0,002	0,004	3000	3000	1,0	0,20	0,020	3,07E-04	5,04E-05
18	0,002	0,004	3000	3000	1,0	0,60	0,060	2,57E-04	3,77E-05
19	0,002	0,004	3000	3000	3,0	0,20	0,060	1,95E-03	2,60E-04
20	0,002	0,004	3000	3000	3,0	0,60	0,020	8,05E-04	9,71E-05
21	0,002	0,004	3000	7000	1,0	0,20	0,060	3,02E-04	4,41E-05
22	0,002	0,004	3000	7000	1,0	0,60	0,020	3,70E-04	5,27E-05

23	0,002	0,004	3000	7000	3,0	0,20	0,020	1,87E-03	3,17E-04
24	0,002	0,004	3000	7000	3,0	0,60	0,060	1,80E-03	3,71E-04
25	0,002	0,004	7000	3000	1,0	0,20	0,060	2,16E-04	5,35E-05
26	0,002	0,004	7000	3000	1,0	0,60	0,020	9,76E-05	2,76E-05
27	0,002	0,004	7000	3000	3,0	0,20	0,020	1,37E-03	1,07E-04
28	0,002	0,004	7000	3000	3,0	0,60	0,060	6,78E-04	8,87E-05
29	0,002	0,004	7000	7000	1,0	0,20	0,020	3,00E-04	6,16E-05
30	0,002	0,004	7000	7000	1,0	0,60	0,060	1,13E-04	2,40E-05
31	0,002	0,004	7000	7000	3,0	0,20	0,060	1,76E-03	1,93E-04
32	0,002	0,004	7000	7000	3,0	0,60	0,020	1,51E-03	1,79E-04
33	0,004	0,002	3000	3000	1,0	0,20	0,020	9,73E-04	6,67E-05
34	0,004	0,002	3000	3000	1,0	0,60	0,060	2,42E-03	1,68E-05
35	0,004	0,002	3000	3000	3,0	0,20	0,060	2,03E-03	2,33E-04
36	0,004	0,002	3000	3000	3,0	0,60	0,020	2,41E-03	8,94E-05
37	0,004	0,002	3000	7000	1,0	0,20	0,060	1,52E-03	7,22E-05
38	0,004	0,002	3000	7000	1,0	0,60	0,020	2,23E-03	4,02E-05
39	0,004	0,002	3000	7000	3,0	0,20	0,020	2,83E-03	2,12E-04
40	0,004	0,002	3000	7000	3,0	0,60	0,060	2,63E-03	7,24E-05
41	0,004	0,002	7000	3000	1,0	0,20	0,060	8,96E-05	2,32E-05
42	0,004	0,002	7000	3000	1,0	0,60	0,020	6,28E-04	1,44E-05
43	0,004	0,002	7000	3000	3,0	0,20	0,020	2,22E-04	6,53E-05
44	0,004	0,002	7000	3000	3,0	0,60	0,060	9,42E-04	7,42E-05
45	0,004	0,002	7000	7000	1,0	0,20	0,020	9,55E-04	7,36E-05
46	0,004	0,002	7000	7000	1,0	0,60	0,060	2,45E-03	1,51E-05

47	0,004	0,002	7000	7000	3,0	0,20	0,060	1,80E-03	3,05E-04
48	0,004	0,002	7000	7000	3,0	0,60	0,020	2,40E-03	9,12E-05
49	0,004	0,004	3000	3000	1,0	0,20	0,060	4,50E-04	3,92E-05
50	0,004	0,004	3000	3000	1,0	0,60	0,020	5,32E-04	4,22E-05
51	0,004	0,004	3000	3000	3,0	0,20	0,020	1,98E-03	1,39E-04
52	0,004	0,004	3000	3000	3,0	0,60	0,060	2,27E-03	1,21E-04
53	0,004	0,004	3000	7000	1,0	0,20	0,020	6,51E-04	6,00E-05
54	0,004	0,004	3000	7000	1,0	0,60	0,060	1,39E-03	7,34E-05
55	0,004	0,004	3000	7000	3,0	0,20	0,060	2,39E-03	1,71E-04
56	0,004	0,004	3000	7000	3,0	0,60	0,020	2,42E-03	1,59E-04
57	0,004	0,004	7000	3000	1,0	0,20	0,020	2,09E-04	1,90E-05
58	0,004	0,004	7000	3000	1,0	0,60	0,060	2,02E-04	1,77E-05
59	0,004	0,004	7000	3000	3,0	0,20	0,060	8,63E-04	7,62E-05
60	0,004	0,004	7000	3000	3,0	0,60	0,020	6,32E-04	8,88E-05
61	0,004	0,004	7000	7000	1,0	0,20	0,060	4,58E-04	4,30E-05
62	0,004	0,004	7000	7000	1,0	0,60	0,020	6,56E-04	3,89E-05
63	0,004	0,004	7000	7000	3,0	0,20	0,020	1,37E-03	1,25E-04
64	0,004	0,004	7000	7000	3,0	0,60	0,060	1,95E-03	1,34E-04
65	0,001	0,003	5000	5000	2,0	0,40	0,040	6,21E-04	9,26E-05
66	0,005	0,003	5000	5000	2,0	0,40	0,040	1,71E-03	1,44E-04
67	0,003	0,001	5000	5000	2,0	0,40	0,040	4,36E-04	8,57E-05
68	0,003	0,005	5000	5000	2,0	0,40	0,040	1,01E-03	1,10E-04
69	0,003	0,003	1113	5000	2,0	0,40	0,040	1,97E-03	1,22E-04
70	0,003	0,003	8887	5000	2,0	0,40	0,040	3,49E-04	4,34E-05

71	0,003	0,003	5000	1113	2,0	0,40	0,040	1,46E-04	4,13E-05
72	0,003	0,003	5000	8887	2,0	0,40	0,040	1,57E-03	1,08E-04
73	0,003	0,003	5000	5000	0,1	0,40	0,040	1,77E-05	4,21E-06
74	0,003	0,003	5000	5000	3,9	0,40	0,040	1,86E-03	1,29E-04
75	0,003	0,003	5000	5000	2,0	0,01	0,040	1,85E-05	2,98E-06
76	0,003	0,003	5000	5000	2,0	0,79	0,040	1,98E-03	5,97E-05
77	0,003	0,003	5000	5000	2,0	0,40	0,001	6,27E-04	6,74E-05
78	0,003	0,003	5000	5000	2,0	0,40	0,079	8,19E-04	9,84E-05
79	0,003	0,003	5000	5000	2,0	0,40	0,040	8,86E-04	8,74E-05
80	0,003	0,003	5000	5000	2,0	0,40	0,040	8,44E-04	6,96E-05

Apêndice 4: Planejamento mistura granular.

Simulação	r_{P1} (m)	ρ_{P2} (kg/m³)	r_{P2} (m)	ρ_{P1} (kg/m³)	σ_∞ (-)	k (s⁻¹)
1	0,0021	3000	0,0021	3000	0,1798	0,1684
2	0,0021	3000	0,0021	7000	0,3039	0,1141
3	0,0021	7000	0,0021	3000	0,2605	0,2065
4	0,0021	7000	0,0021	7000	0,2595	0,1128
5	0,0024	5000	0,0015	5000	0,2917	0,1624
6	0,0015	5000	0,0024	5000	0,1937	0,1289
7	0,0015	2000	0,0015	5000	0,3139	0,3294
8	0,0015	8000	0,0015	5000	0,2442	0,2175
9	0,0015	5000	0,0015	2000	0,2535	0,3037
10	0,0015	5000	0,0015	8000	0,3038	0,4343
11	0,0015	5000	0,0015	5000	0,0804	0,1260
12	0,0009	3000	0,0021	3000	0,2156	0,1133
13	0,0009	3000	0,0021	7000	0,2691	0,3038
14	0,0009	7000	0,0021	3000	0,2513	0,2902
15	0,0009	7000	0,0021	7000	0,2106	0,1698
16	0,0021	3000	0,0009	3000	0,1014	0,1367
17	0,0021	3000	0,0009	7000	0,2309	0,2176
18	0,0021	7000	0,0009	3000	0,2278	0,3001
19	0,0021	7000	0,0009	7000	0,2496	0,1157
20	0,0009	3000	0,0009	3000	0,2379	0,1356
21	0,0009	3000	0,0009	7000	0,2081	0,2191
22	0,0009	7000	0,0009	3000	0,2475	0,2013

23	0,0009	7000	0,0009	7000	0,2618	0,1910
24	0,0006	5000	0,0015	5000	0,2070	0,1183
25	0,0015	5000	0,0006	5000	0,1472	0,1458

Apêndice 5: rede neural “epANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='logistic',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=15
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("epANN.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5,6,7,8]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normatiza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]
    Index=[8]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['ep'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['ep'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['ep'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```

Apêndice 6: rede neural “msANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='logistic',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=15
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("msANN.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normatiza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3,4]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3,4]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3,4]]
    Index=[5]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['ms'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['ms'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['ms'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```


Apêndice 7: rede neural “mrANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='logistic',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=15
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("mrANN.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normatiza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3,4]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3,4]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3,4]]
    Index=[5]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['mr'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['mr'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['mr'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```

Apêndice 8: rede neural “ReposeAngleANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='tanh',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=10
M=10
O=10
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("ReposeAngleANN.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5,6,7,8,9]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normaliza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6,7]]
    Index=[9]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['Superior'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['Superior'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['Superior'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```

Apêndice 9: rede neural “DiffRadialANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='relu',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=10
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("difusividade.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5,6,7,8]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normatiza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6]]
    Index=[7]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['Difusividade_radial'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['Difusividade_radial'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['Difusividade_radial'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```

Apêndice 10: rede neural “DiffAxialANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='relu',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=15
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("difusividade.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5,6,7,8]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normaliza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3,4,5,6]]
    Index=[8]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['Difusividade_axial'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['Difusividade_axial'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['Difusividade_axial'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```


Apêndice 11: rede neural “SegregInfANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='tanh',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=10
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("segregacao.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normaliza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3]]
    Index=[4]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['sig'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['sig'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['sig'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```

Apêndice 12: rede neural “SegregKANN”.

```
def rede(i,j):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs',activation='logistic',alpha=1e-5,
hidden_layer_sizes=(i),random_state=j)
    return clf
Melhor=1e99
N=20
M=10
O=15
for k in range(0,O):
    DAT=pd.read_csv("segregacao.csv")
    Index=[0,1,2,3,4,5]
    Dat_Select=[]
    Dat_Select=DAT.iloc[:,Index].copy()
    DAT_OLD=[]
    DAT_OLD=Dat_Select.copy()
    DAT=Normatiza(Dat_Select)
    train=[]
    test=[]
    train=DAT.sample(frac=0.8,random_state=k).copy()
    test=DAT.drop(train.index).copy()
    x_train=train.iloc[:,[0,1,2,3]]
    x_test=test.iloc[:,[0,1,2,3]]
    X_OLD=DAT_OLD.iloc[:,[0,1,2,3]]
    Index=[5]
    y_train=train.iloc[:,Index]
    y_test=test.iloc[:,Index]
    Y_OLD=DAT_OLD.iloc[:,Index]
    test=Original(y_test,Y_OLD)
    resist_obs_test=[]
    resist_obs_train=[]
    resist_obs_test=test['k'].copy()
    for i in range(1,N):
        for j in range(0,M):
            col_names=list(y_train)
            clf=rede(i,j)
            clf.fit(x_train, y_train)
            y_calc_train=[]
            y_calc_test=[]
            y_calc_train=clf.predict(x_train)
            y_calc_test=clf.predict(x_test)
            y_calc_train=pd.DataFrame(y_calc_train)
            y_calc_test=pd.DataFrame(y_calc_test)
            y_calc_train.columns = col_names
            y_calc_test.columns = col_names
            y_calc_train=Original(y_calc_train,Y_OLD)
            y_calc_test=Original(y_calc_test,Y_OLD)
```

```

resist_calc_train=[]
resist_calc_test=[]
resist_calc_train=y_calc_train['k'].copy()
resist_calc_test=y_calc_test['k'].copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_test,resist_calc_test)
R2_teste=r2_score(resist_obs_test,resist_calc_test)
if(mse<Melhor):
    Melhor=mse.copy()
    ix=i
    jx=j
    R2r=R2_teste
    seed_sample = k
    resist_obs_train_top=Original(y_train,Y_OLD)
    resist_calc_train_top = resist_calc_train.copy()
    resist_obs_test_top = resist_obs_test.copy()
    resist_calc_test_top = resist_calc_test.copy()
mse=mean_squared_error(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)
R2=r2_score(resist_obs_train_top,resist_calc_train_top)

```