



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



Vitor Straatmann

Dinâmica de Partículas irregulares

Uberlândia

2023



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



Vitor Straatmann

Dinâmica de Partículas Irregulares

Monografia de graduação apresentada à Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina de Trabalho de Conclusão do Curso de Engenharia Química.

Prof. Dr. Marcos Antonio de Souza Barrozo

**Uberlândia
2023**

DINÂMICA DE PARTÍCULAS IRREGULARES

Monografia de graduação aprovada como parte dos requisitos necessários para a aprovação na disciplina de Trabalho de Conclusão do Curso de Engenharia Química pela banca examinadora formada por:

Uberlândia, 19 de Agosto de 2023.

Prof. Dr. Marcos Antonio de Souza Barrozo - Orientador – FEQUI/UFU

Enga. MSc Natália Pazin Almeida - PPGEQ/UFU

Enga. MSc Gisele Márcia de Souza - PPGEQ/UFU

Agradecimentos

Agradeço a Deus acima de tudo pela vida que me deu e pelas pessoas maravilhosas que colocou no meu caminho. Agradeço a meus pais Lauro e Mara e ao meu irmão Beto pelo apoio e incentivo que sempre tive em todas as fases da minha vida, sem eles eu nada seria. Agradeço a Bianca minha companheira que está comigo em todos os momentos da minha vida me dando apoio, carinho e amor sempre e me fazendo sentir capaz de tudo aquilo que me propor. Agradeço a meus amigos Felipe, Tanaka e Rodrigo que foram irmãos que a vida me deu e sempre me ajudaram em tudo o que precisei e me deram incontáveis momentos de felicidade ao longo da minha jornada. E por último, mas não menos importante agradeço aos meus mestres, Francisco Vieira Barros, o Chico Potiguar, ao Marquinhos e a todos os outros mestres que tive por essa vida que me ensinaram um pouco sobre o mundo em que vivo, realizando meu sonho de entender melhor a linguagem que Deus usou enquanto criava esse universo.

Resumo

Este trabalho tem como objetivo analisar a influência da forma das partículas no seu comportamento fluidodinâmico e em equipamentos industriais. Primeiramente é realizado uma abordagem teórica da forma e como esta é caracterizada, seus parâmetros mais tradicionais e por consequência a influência no comportamento de leitos particulados. Foram avaliados diversos trabalhos experimentais e simulações numéricas, com ênfase nos parâmetros relacionados à forma das partículas. Os resultados destacaram a importância desses parâmetros na descrição precisa do comportamento das partículas em sistemas fluídos, afetando a resistência ao fluxo, a dispersão, a aglomeração e a sedimentação. A consideração adequada desses parâmetros pode otimizar a eficiência de equipamentos industriais. No entanto, desafios como a complexidade das interações partícula-fluido e a diversidade de formas e tamanhos de partículas requerem mais investigações e validação experimental contínua.

Palavras chave: Partículas Irregulares. Dinâmica de Particulares. Esfericidade.

Abstract

This work aims to analyze the influence of particle shape on their fluidodynamic behavior and industrial equipment. Firstly, a theoretical approach is presented on how particle shape is characterized, including its traditional parameters and their consequent influence on the behavior of particulate beds. Several experimental studies and numerical simulations were evaluated, with a focus on parameters related to particle shape. The results highlighted the importance of these parameters in accurately describing the behavior of particles in multiphase systems, affecting flow resistance, dispersion, agglomeration, and sedimentation. Proper consideration of these parameters can optimize the efficiency of industrial equipment. However, challenges such as the complexity of particle-fluid interactions and the diversity of particle shapes and sizes require further investigation and ongoing experimental validation.

Keywords: Irregular Particles. Particle Dynamics. Sphericity.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	7
1.1 Caracterização da Partícula.....	8
1.2 Parâmetros para partículas Individuais.....	9
1.3 Parâmetros para leitos Particulados.....	10
1.4 Parâmetros de Simulação.....	10
2. DESCRIÇÃO DA FORMA DE PARTÍCULAS.....	11
2.1 Análise de imagens para o estudo da forma de partículas.....	13
2.2 Medidas quantitativas da forma da partícula.....	15
2.3 Descrição dos diâmetros da partícula.....	17
2.3.1 Razão de aspecto (φ).....	18
2.3.2 Esfericidade(ψW).....	19
2.3.3 Circularidade (C).....	19
2.3.4 Razão de convexidade.....	20
2.3.5 Simetria.....	20
3. REVISÃO DE LITERATURA.....	21
3.1 METODOLOGIAS EXPERIMENTAIS.....	21
3.2 TRABALHOS EXPERIMENTAIS.....	23
3.3. SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS.....	27
3.3.1 Abordagem Euleriana.....	28
3.3.2 Abordagem Lagrangeana.....	29
3.3.3. Métodos de Discretização e resolução das equações.....	30
3.4 TRABALHOS COMPUTACIONAIS	31
4. CONCLUSÕES.....	36
5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	37

1. INTRODUÇÃO

De acordo com Ortega, (2022) pelo menos 70% das indústrias utilizam sistemas particulados, como exemplo se destacam as indústrias da mineração, farmacêutica, alimentícia, automotiva, tintas, cosméticos, aerossóis, polímeros, dentre outras. Para Cremasco 2014, é fundamental o entendimento fonomenológico da interação sólido-líquido e sólido-sólido envolvendo ou não o efeito de dispositivos fluidomecânicos, ou seja de equipamentos industriais e suas aplicações nas operações unitárias. Os sistemas particulados portanto estão relacionados com as operações de transporte, mistura, separação e modificação do tamanho de sólidos; escoamentos em leitos móveis e fixos centrifugações, agitações entre outros.

O envolvimento de sistemas particulados demanda tratamentos mais complexos nas operações unitárias quando comparados a líquidos ou gases puros, pois os sólidos podem se apresentar sob uma infinidade de aparências, formas angulares, formatos que lembram lâminas ou pós de diferentes tamanhos. Ainda podem ser duros e abrasivos, resistentes ou frágeis, coesivos e de fluidez livre ou pegajosa.

As operações unitárias, por sua vez, são definidas como as Etapas individuais, visando ao tratamento e/ou operação e/ou transporte físico de matéria e/ou energia presentes em um processo (bio) químico. Independente da forma na qual o sólido se apresenta, é preciso encontrar meios para sua manipulação de maneira a preservar ou melhorar suas características físico-químicas no seu processamento. Nos processos físicos e químicos os sólidos estão, na maioria das vezes, na forma de partículas, portanto, é necessário conhecer suas propriedades antes de se prosseguir com quaisquer modificações ou separações dos sólidos na forma de partículas.

Na indústria mineral, por exemplo, a possibilidade de se avaliar a forma das partículas pode ser particularmente interessante em diversas áreas, como a caracterização de partículas geradas por diferentes mecanismos de fragmentação (avaliação de britadores e moinhos), efeitos da morfologia das partículas na eficiência da flotação e de operações unitárias de processamento mineral que dependam do comportamento cinético das partículas (hidrociclones, mesas vibratórias, espirais concentradoras, jígues), dentre outras.

Já na indústria da construção civil, a distribuição granulométrica e a morfologia das partículas são fatores extremamente importantes na utilização de agregados, uma

vez que influenciam diretamente no comportamento reológico do sistema e, conseqüentemente, no desempenho de argamassas e concretos (ORTEGA, 2022).

Em trabalho envolvendo grãos de soja, Djamarani *et al.*, (1997) concluíram que a caracterização do tamanho da partícula nos sistema de particulados é uma das variáveis físicas mais relevantes, uma vez que pode influenciar na eficácia das etapas de extração, combustão, no transporte de grãos, na compactação, entre outros, estando intimamente correlacionada aos processos industriais.

O estudo dos sistemas particulados também é de grande importância para o desenho e dimensionamento de equipamentos, bem como aprimoramento de processos em várias operações unitárias. A distribuição granulométrica e a morfologia das partículas são parâmetros que exercem grande influência na forma, nos materiais e nas dimensões dos equipamentos quando se trabalha com material particulado e, por consequência, nas indústrias que trabalham com sistemas particulados (ORTEGA, 2022).

Todos esses conceitos serão detalhados no decorrer deste trabalho, bem como o seu impacto no estudo da dinâmica de partículas e, em específico, de partículas irregulares, ou seja, com formas complexas, diferentes da esfera usualmente adotada como padrão para esse tipo de estudo.

1.1 Caracterização da Partícula

Independente do processo, o conhecimento minucioso das propriedades físicas e morfológicas relacionadas à partícula e seus conseqüentes leitos particulados como porosidade, tamanho e distribuição de poros, área superficial e massa específica é de grande importância na compreensão de fenômenos que regem uma determinada operação unitária, além de permitir o aperfeiçoamento de tecnologias envolvendo sistemas particulados. As partículas individuais são tradicionalmente caracterizadas pelo seu tamanho, forma e densidade. As partículas de um sólido homogêneo têm a mesma densidade que o material original, enquanto as partículas obtidas de um sólido heterogêneo têm várias densidades, que diferem do material original.

Inúmeros parâmetros tem sido avaliados na tentativa de prever o comportamento de sistemas particulados com parâmetros direcionados à partículas isoladas e aos seus respectivos leitos.

As propriedades das partículas podem ser divididas em duas categorias a depender da sua natureza:

a) Dependentes da “Natureza da Partícula”: forma, dureza, densidade, calor específico, condutividade térmica, etc.

b) Dependentes do Sistema (Leito Poroso): As propriedades passam então a ser característica do conjunto de partículas e não mais do sólido em si; são a densidade aparente, a área específica, a permeabilidade, etc.

Alguns parâmetros são medidas físicas de propriedades da partículas ou de seus respectivos leitos, porém é comum na literatura o emprego de parâmetros de simulação que buscam representar essas propriedades dentro de simulações computacionais. Alguns exemplos ilustrativos de parâmetros físicos e de simulação amplamente utilizados na descrição desses sistemas são descritos no decorrer deste trabalho.

1.2 Parâmetros para partículas Individuais:

Usualmente, os parâmetros são obtidos a partir de observações ou medições realizadas com um exemplar específico ou com uma amostra de material. Entretanto faz-se necessário medir um grande número de partículas e obter uma descrição da distribuição de determinada propriedade dentro do material em análise.

- **Diâmetro da partícula:** A medida do diâmetro de uma partícula esférica é facilmente obtida com um instrumento de medição (por exemplo, paquímetro), mas para partículas não esféricas essa propriedade é mais complexa de se medir. Portanto, define-se o diâmetro equivalente (D_{eq}) e o diâmetro médio da partícula D_p , que são utilizados em escoamentos de leitos, no cálculo de perda de carga e na classificação dos sólidos.

- **Densidade:** A densidade de um material é definida como a relação entre massa de material e o volume ocupado por ele. As diferentes definições de densidade são provenientes de como o volume da partícula é considerado. O volume visível de uma amostra é composto pelo volume da matriz sólida e pelo volume de vazios (poros). A massa do material é facilmente determinada por uma balança analítica, enquanto o volume, em se tratando de sólidos com geometria conhecida, é calculado diretamente da definição de seu volume geométrico.

- **Porosidade da Partícula:** A porosidade aparente da partícula é a razão entre o ar total ou espaços vazios e o volume total do material. Portanto, tanto a porosidade de uma única partícula como a porosidade de um pó, podem ser definidas pela razão entre o volume de poros abertos, pelo volume total da partícula.

- **Área Superficial Específica:** Medida muito utilizada nas operações unitárias de

escoamento de fluidos: secagem, filtração, extração sólido-líquido entre outras. É definida como a razão entre a área superficial da partícula e seu volume.

- Coeficiente de restituição: O coeficiente de restituição (COR) é uma medida da quantidade de energia cinética que é conservada após o choque entre as partículas.
- Coeficiente de atrito estático: O coeficiente de atrito representa o atrito oposto ao início do movimento relativo (iminente) entre os corpos.

1.3 Parâmetros para leitos Particulados:

A análise de sistemas particulados exige que as partículas sejam consideradas não mais como corpos isolados mas também como um sistema com interações e distribuições de propriedades que quando combinadas resultam em características do sistema particulado como um todo e que exigem conhecimento aprofundado do seu comportamento em conjunto.

- Densidade global (bulk) do leito: A densidade global do leito é definida quando o material está empacotado ou empilhado em um leito, portanto, é a razão entre a massa do material e o volume total que ele ocupa.
- A porosidade do leito: A Porosidade mede a fração de vazios do leito. Quanto mais as partículas que compõem se afastam da forma esférica, ou seja, menor a esfericidade, maior a porosidade do leito.
- Área superficial específica do leito: A área superficial específica do leito é definida pela relação entre a área de superfície do leito exposta por unidade de volume do leito. Em razão da porosidade do leito, a área superficial específica do leito não coincide com a área superficial da partícula.

1.4 Parâmetros de Simulação

No caso de simulações computacionais o conjunto de parâmetros a ser utilizado depende da abordagem que se esteja utilizando. Tradicionalmente as simulações de fenômenos físicos característicos das operações unitárias são feitas utilizando-se abordagens Euleriana ou Lagrangeana. As diferenças, vantagens e desvantagens de ambas as metodologias serão abordadas mais a fundo no decorrer deste trabalho (MACHADO, 2016)

Mesmo as simulações representando uma ferramenta amplamente aplicada em

diversos processos de engenharia, a dificuldade na apresentação precisa dos parâmetros de entrada ainda impõe limitações na obtenção de soluções numérica capazes de representar adequadamente fenômenos físicos (SANTOS, 2008). A depender da abordagem utilizada nas simulações há a possibilidade de adoção de diferentes modelos físicos para representação de fenômenos como a colisão de partículas, escoamento, interação entre fases, entre outros. Uma solução é a determinação dos parâmetros por medida indireta, também conhecida como calibração, ou seja, os valores são fornecidos na simulação até que o resultado coincida com as propriedades observadas no material. No entanto, o ajuste dos parâmetros DEM por calibração pode levar a um conjunto de valores que não necessariamente têm um significado físico (CHUNG, OOI, 2008; COETZEE, 2017).

Alguns exemplos de parâmetros de simulação fundamentais na descrição de colisões entre partículas são:

- Constante de rigidez K_n e K_T : Provenientes da força normal e tangencial de contato entre as partículas, são fornecidos ao modelo de colisão como uma função de outros parâmetros como o diâmetro da partícula, a massa específica da partícula, entre outros.
- Coeficientes de Amortecimento, δ_n e δ_T : Representam a perda de energia em uma colisão frontal entre duas partículas. Segundo Lima (2017), o coeficiente de amortecimento normal pode ser obtido em função do coeficiente de restituição (e) referente à colisão entre as partículas.

2. DESCRIÇÃO DA FORMA DE PARTÍCULAS

A forma das partículas constitui uma das propriedades de maior dificuldade em se analisar na tecnologia dos pós. No estudo da forma das partículas inclui-se todos as suas características morfológicas externas. Emerge, então, três aspectos fundamentais, sendo eles: Formato; Curvatura e Textura da superfície.

Esses parâmetros são analisados de forma independente, assim tem-se a possibilidade de variações em um determinado aspecto sem influências diretas nos demais, principalmente em análises bidimensionais, nas quais a imagem da partícula é projetada sobre um plano. Em mais detalhe os aspectos podem ser descritos da seguinte maneira (BAGHERI, 2015):

- Formato: Representa as proporções geométricas da partícula, ou seja, é um reflexo

da proporção entre as dimensões da partícula quando analisadas sob diferentes eixos geométricos. A partir do formato emergem parâmetros amplamente utilizados nos estudos dos pós como a esfericidade ou circularidade que será abordado em mais detalhe no decorrer deste trabalho.

- **Curvatura:** Independe do formato não refletindo, por tanto, o grau de esfericidade. Existem duas maneiras de se avaliar a curvatura da partícula: pelo arredondamento dos seus vértices ou aspecto curvo da partícula, ou seja, pela convexidade. A Curvatura reflete diretamente em propriedades bulk do material particulado como o empacotamento ou a densidade de empacotamento.

- **Textura da Superfície:** Reflete o nível de rugosidade em seu menor nível. Devido as suas características, a rugosidade de partícula está diretamente relacionada com parâmetros de simulação que buscam modelar as colisões entre partículas bem como o atrito sofrido entre as partículas e entre uma partícula e uma determinada superfície (BAGHERI, 2015).

A figura um esquematiza as propriedades de Textura, Curvatura e Formato em um conjunto de partículas.

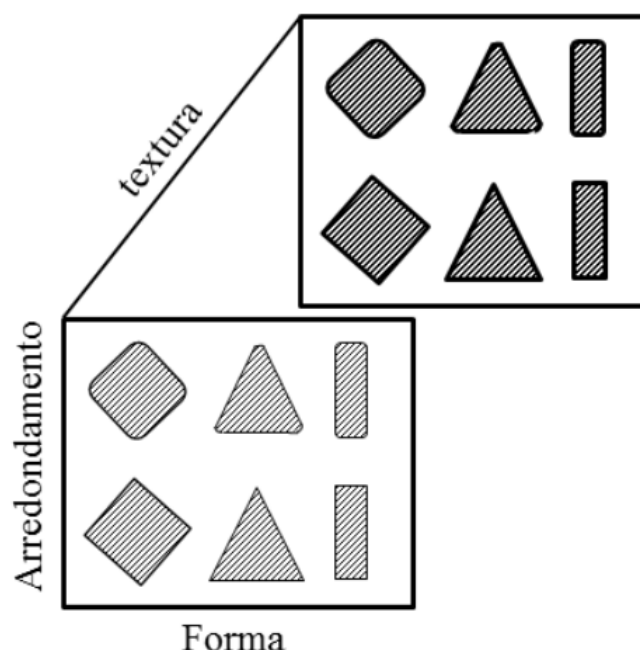


Figura 1: Representação simplificada de formato, curvatura e textura de superfície. (Adaptado de Barret, 1980)

A forma das partículas é fator determinante no empacotamento final do material em um pó compacto. Em partículas irregulares, ou seja, formas diferentes de esferas ou cubos, a caracterização da sua forma se torna uma tarefa mais complexa. Não há na

literatura uma modelagem exata para avaliar os efeitos de partículas irregulares no empacotamento de um leito, normalmente esse processo é feito de maneira qualitativa onde se avalia o desvio da forma de uma partícula em relação a geometrias regulares (FERNANDES, 2017).

Para a caracterização de formas de partículas diversas metodologias foram descritas na literatura nas últimas décadas. As descrições de formas são feitas utilizando funções matemáticas que requerem análise prévia das dimensões do material como comprimento, diâmetro, perímetro, área e volume ou em muitos casos a combinação simultânea desses parametros nos modelos matemáticos (BAGHERI, 2015).

Uma forma de se caracterizar descritores de forma é através da classificação 1D, 2D ou 3D baseando-se na metodologia e nas informações obtidas da amostra. Como exemplo de análise 1D tem-se o fator de forma o qual é baseado no comprimento da partícula.

Descritores 2D, por sua vez, utilizam duas informações obtidas da amostra de partículas as quais são, usualmente, determinadas via projeções de imagem. Como exemplo de fatores de forma determinados via projeção de imagem tem-se o perímetro, a área e o diâmetro do círculo circunscrito na projeção da partícula. Historicamente as projeções são realizadas com microscópios ópticos porém já existem equipamentos modernos capazes de prover análises mais compreensivas sobre um conjunto de partículas como Scanners Lases ou a Termografia computadorizada que são capazes de reconstruir a geometria das partículas tridimensionais em diversas projeções 2D (BAGHERI, 2015).

Descritores 3D são mais complexos e normalmente necessitam de equipamentos para que as medidas sejam tomadas com assertividade e com escala adequada para seu uso prático. A esfericidade é o exemplo mais comum de descritor de forma 3D. É definida como sendo a razão entre a área superficial da esfera de mesmo volume e da área da partícula em análise. Esses e outros descritores de forma serão abordados em mais detalhe no decorrer deste trabalho

2.1 Análise de imagens para o estudo da forma de partículas

O uso de análise de imagem para obtenção de informações quanto à forma de partículas é especialmente conveniente devido a sua praticidade na análise de um conjunto de partículas. Entretanto alguns fatores devem ser levados em consideração no uso de metodologias baseadas em projeções de imagens.

Primeiramente, para condução do experimento a amostra deve ser disposta sobre um substrato e nesse processo tendem a cair sobre a sua maior dimensão, assim os resultados podem mascarar a verdadeira forma das partículas. Outro ponto a ser observado é que não há um consenso na literatura quanto ao número total de partículas que deve ser analisado para representação adequada da amostra. Além disso a depender da quantidade de partículas o processo pode ser demorado e a resolução da imagem pode influenciar as medidas (PEÇANHA, 2014).

As técnicas de análise de imagem podem ser classificadas de diversas formas com a mais comum sendo a baseada na escala adotada. A forma é a medida de maior dimensão com a curvatura vindo em seguida e a rugosidade por último. Com as informações obtidas a partir das análises de imagem diversas equações podem ser modeladas para descrever o comportamento da forma da amostra, as quais utilizam diversas técnicas para o levantamento de parâmetros como por exemplo a utilização de mapas de pixels para a caracterização de perímetro, área, e diâmetros de partículas (BAGHERI, 2015).

A análise de imagens estão em constante evolução e novas técnicas e softwares de análise estão sendo constantemente sendo propostos com intuito de minimizar erros de medidas e aperfeiçoar as informações obtidas. A ideia de continuamente avaliar as características morfológicas de uma amostra mostra grande potencial tanto para efeito de precisão devido aos ganhos estatísticos obtidos pelo grande volume de medições realizados como também permite aplicações práticas em processos integrando as informações obtidas das amostras em tempo real com as características do processo em que as amostras estão sendo geradas. As análises dinâmicas de amostras são comuns na literatura atual com parâmetros como Diâmetro, comprimento, razão de aspecto, simetria, circularidade e convexidade na direção da projeção da partícula. Uma vista esquemática da metodologia utilizada para análise de imagem dinâmica é apresentada na figura 2.

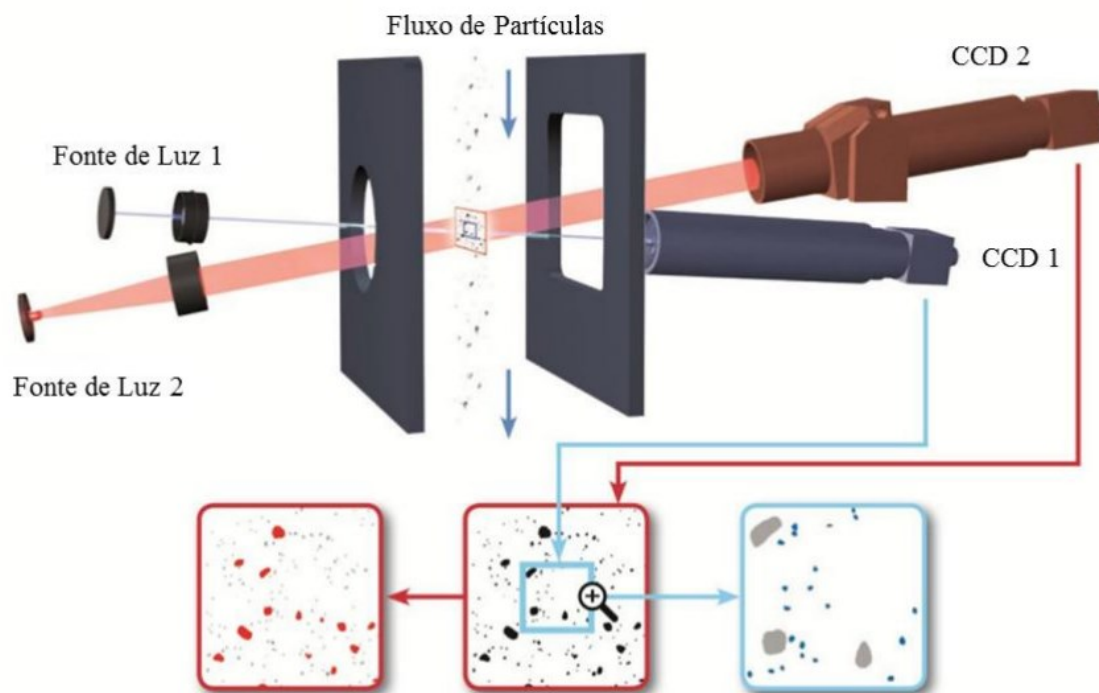


Figura 2: Esquema de análise dinâmica de imagens de partículas. CAMSIZER™

No esquema duas câmeras são adotadas referidas como CCD1 e CCD2 o objetivo desse arranjo é a captura de informações em uma maior multitude de tamanhos, enquanto a primeira utiliza foco em partículas muito finas a segunda busca partículas de maior dimensão, as informações são então compiladas por um software especializado resultando nos parâmetros numéricos da amostra. Com as informações obtidas encontra-se na literatura uma série de parâmetros descritores da forma de partículas. Neste trabalho se abordará os mais comuns na literatura.

2.2 Medidas quantitativas da forma da partícula

Alguns esforços já foram feitos na tentativa de classificar qualitativamente partículas quanto a sua forma, porém seu uso é limitado na determinação das propriedades dos materiais particulados. Desta forma essas classificações gerais possuem poucas aplicações práticas na determinação de fatores de forma que podem ser incorporados como parâmetros em equações práticas capazes de modelar as propriedades dos sistemas particulados. É necessário, então, avaliar quantitativamente os aspectos relacionados com a forma das partículas (ALLEN, 1981).

A principal abordagem na tentativa de se avaliar quantitativamente a forma de partículas é o uso de técnicas de reconhecimento de padrões nos quais os dados de entrada

são categorizados. O potencial de uso dessas técnicas de grande no estudo de materiais particulados porém vale ressaltar dois aspectos fundamentais relacionados com a avaliação da forma de partículas. O primeiro é avaliado a forma real propriamente dita mas obtém-se um parâmetro geral que é usado comparativamente. O segundo aspecto é que, em teoria deve ser possível regenerar a forma original da partícula a partir dos dados de medição para garantir que a informação está fidedigna à medida realizada (ALLEN, 1981).

As relações numéricas entre os diversos tamanhos aferidos em diferentes eixos dependem da forma observada nas partículas e os valores adimensionais das razões entre essas medidas são chamados de fatores de forma. Por outro lado, as relações entre as medidas da partícula sobre as sua área superficial ou seu volume são denominados coeficientes de forma. Neste contexto Heywood (1947) definiu o termo “forma” como referindo-se a duas características da partícula: a sua geometria e as suas proporções. No caso da geometria refere-se à semelhança que a forma da partícula guarda em comparação a uma forma geométrica conhecida como por exemplo uma esfera. As proporções por sua vez distinguem partículas com a mesma geometria entre si como por exemplo um cubo é diferido de um paralelepípedo retangular.

A forma como as medidas são tomadas em uma partículas também foi definida por Heywood (1947) e é estabelecida na figura 3 na qual considera-se que a partícula está inscrita em um cubo com lados mutualmente perpendiculares.

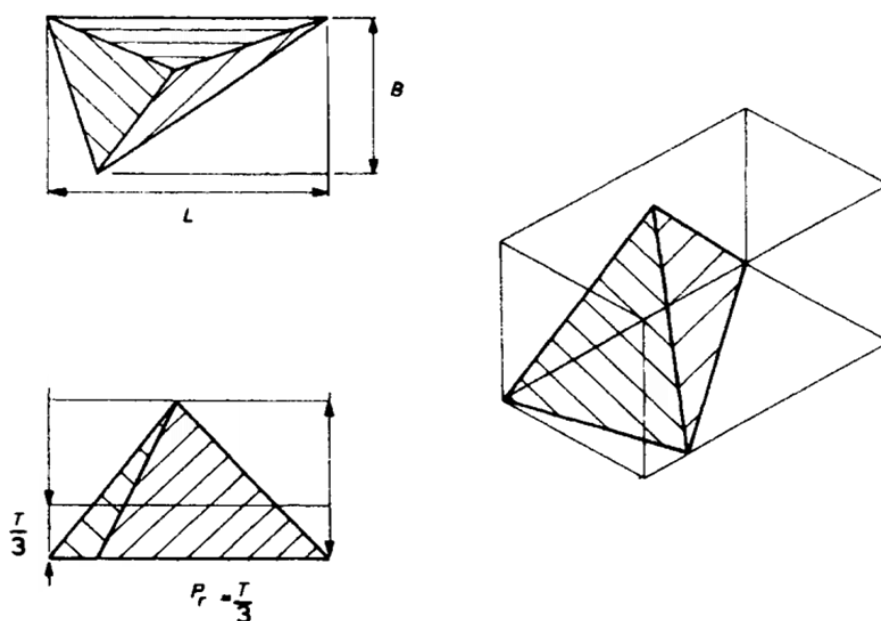


Figura 3: Vista esquemática da avaliação de forma da partícula (ALLEN, 1981).

Na figura 3 pode-se visualizar as três dimensões avaliadas no estudo da forma, bem como suas respectivas projeções a variável P_r refere-se a razão prismóide da figura. Estabelece-se assim as seguintes regras para avaliação de cada um dos parâmetros:

- Espessura (T) é a distância mínima entre dois planos paralelos que são tangenciais às superfícies opostas da partícula, um plano sendo o plano de máxima estabilidade.
- Largura (B) é a distância mínima entre dois planos paralelos que são perpendiculares aos planos que definem a espessura e são tangente aos lados opostos da partícula.
- Comprimento (L) é a distância entre dois planos paralelos que são perpendiculares aos planos que definem espessura e largura e são tangente aos lados opostos da partícula.

No caso de medidas macroscópicas a forma, então, pode ser bem descritas por parâmetros e coeficientes. Entretanto pode-se considerar a necessidade de análises em nível microscópico. Nesse caso as propriedades relacionadas com a textura são mais adequadas e para avaliá-las ferramentas matemáticas como equações fractais ou transformadas de Fourier são de grande ajuda. O surgimento de técnicas de análise de imagens mais avançadas permite que tais metodologias seja realizadas, visto que essas possuem diversas aplicações práticas no estudo, por exemplo, de leitos catalíticos (ALLEN, 1981).

Diversas propostas de avaliação quantitativa estão disponíveis na literatura, porém devido a fatores como a maior praticidade e assertividade das informações alguns parâmetros são mais amplamente utilizados os quais serão abordados a seguir.

2.3 Descrição dos diâmetros da partícula

Diversos descritores de forma utilizam relações estabelecidas através do diâmetro da partícula em análise, entretanto, no caso de partículas irregulares a definição de diâmetro pode variar de acordo com o estudo e com a aplicação desejada.

Partindo-se de uma projeção 2D de uma partícula encontra-se na literatura diversas metodologias para traçar o diâmetro da partícula com as mais relevantes sendo apresentadas abaixo na figura 4.

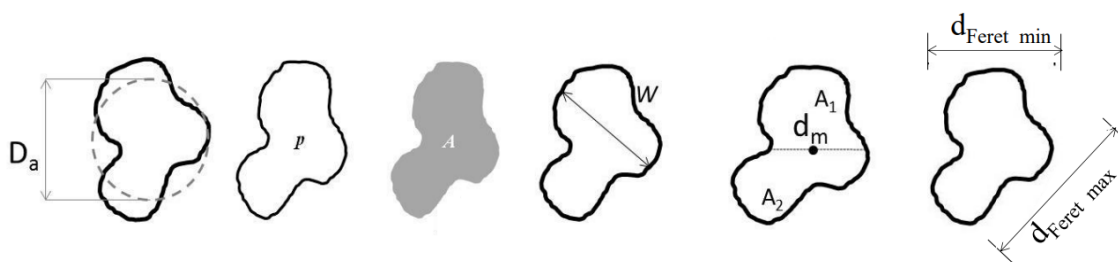


Figura 4: Parâmetros geométricos de análise de imagem para diâmetro de partículas

- Diâmetro de uma área circular equivalente (D_a): é um dos mais utilizados e pode ser encontrado a partir da área A da imagem.

$$D_a = 2 \sqrt{\frac{A}{\pi}}$$

- Diâmetro de Feret (d_{Feret} ou d_F): é a distância entre duas retas paralelas e tangentes à partícula, onde os diâmetros de Feret máximo e mínimo ($d_{F \text{ max}}$ e $d_{F \text{ min}}$) são os maiores e menores valores de d_F , respectivamente.
- Diâmetro de Martin (d_m): comprimento da corda que divide a área A em duas áreas iguais na direção de projeção da partícula.

Existem ainda outros parâmetros mais específicos cujo detalhamento foge ao escopo deste trabalho. A partir desses parâmetros de tamanho alguns fatores de forma podem ser derivados (ALLEN, 1981).

2.3.1 Razão de aspecto (φ)

Um dos métodos mais utilizados na caracterização quantitativa da forma de partículas é a razão de aspecto (φ_{AR} , do inglês *aspect ratio*). É definido como a razão entre os comprimentos do maior e menor eixo da imagem da partícula projetada em um plano. O eixo maior é uma linha reta que conecta os dois pontos mais distantes da área projetada, e o eixo menor é a linha reta perpendicular ao eixo maior e que liga a maior distância no interior da área projetada nessa direção.

Esse fator reflete apenas a alongação da partícula e, por tanto, não é capaz de diferir entre um quadrado ou círculo, por exemplo. Também é comum a adoção da razão entre o diâmetro de Feret mínimo e máximo para o cálculo da razão de aspecto. Para softwares comerciais é normalmente adotado a razão entre largura W e o diâmetro de Feret máximo. Seu cálculo é definido abaixo:

$$\varphi_{AR} = \frac{W}{d_{F \max}}$$

2.3.2 Esfericidade (ψ_w)

O conceito de esfericidade foi proposto pela primeira vez por Wadell em 1932 como a seguinte razão:

$$\psi_w = \frac{\text{Área Superficial de uma esfera de mesmo volume da partícula}}{\text{Área superficial da partícula}}$$

O valor numérico da esfericidade de Wadell será menor que a unidade para partículas não esféricas visto que a esfera é a entidade geométrica com menor área superficial para um dado volume, por consequência a esfericidade tem valores restritos entre zero e um além de se tratar de um parâmetro adimensional o que facilita sua aplicação em diversos estudos.

A sua recíproca matemática da esfericidade, por sua vez, possui outras aplicações no estudo da forma das partículas, sendo referida em alguns trabalhos da literatura como coeficiente de rugosidade ou coeficiente de angularidade (ALLEN, 1981).

É interessante pontuar-se que, em se tratando de leitos particulados, faz-se necessário assumir que todas as partículas nele presentes possuem a mesma forma ou assumir-se uma esfericidade média calculada a partir de amostras. Tal hipótese possui controversas na literatura porém é consenso que a forma das partículas de um leito depende do processo que as originou e portanto está correlacionada entre os diversos extratos que compõem o leito.

A avaliação das áreas superficiais pode se tornar difícil para partículas irregulares em três dimensões. Assim pode-se utilizar a análise de imagem para avaliar parâmetros análogos à esfericidade com o mais comum sendo a Circularidade (C).

2.3.3 Circularidade (C)

A Circularidade é definida com a partícula em repouso sobre uma superfície plana na sua configuração de máxima estabilidade possível, esta pode ser definida como aquela em que o centro de gravidade da partícula tenha a menor cota em relação ao plano de apoio. A partir disso toma-se a sua projeção e calcula-se:

$$C = \frac{\text{Circunferência do círculo de área igual à da sua projeção no plano sobre o qual ela se apoia}}{\text{Perímetro da projeção da partícula}}$$

Similarmente à Esfericidade a Circularidade também é adimensional e tem seus valores possíveis restritos entre zero e a unidade. O perímetro da projeção da partícula é obtido pela contagem de pixels presentes no contorno da projeção.

2.3.4 Razão de convexidade

A razão de convexidade mede o grau de convexidade da partícula em relação à sua área superficial.

$$Conv = \sqrt{\frac{A}{\text{área convexa}}}$$

Apesar de possível é razoavelmente mais complexa a obtenção de descrições tridimensionais da partícula, desta forma a medida da razão de convexidade é realizada a partir de uma projeção 2D sendo definida como a razão da área da partícula pela área convexa, conforme ilustra a figura 5.

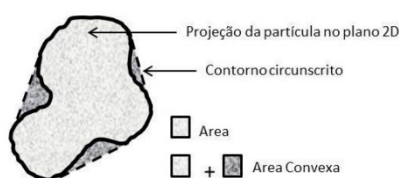


Figura 5: Representação bidimensional das áreas projetadas e convexas da partícula

2.3.5 Simetria

Simetria é definida como:

$$Symm = \frac{1}{2} \left(1 + \left(\min \frac{r_1}{r_2} \right) \right)$$

Onde r_1 e r_2 são as distâncias do centro da partícula até o contorno da projeção seguindo a mesma direção conforme ilustra a figura 6.

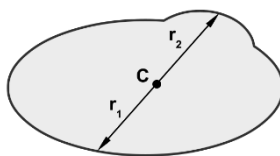


Figura 6: Definição esquemática da simetria.

O centro da partícula (C) é determinado via software de análise de imagem, a partir deste muitas linhas são traçadas cruzando a projeção da partícula por seu centro até os limites do contorno. A simetria é calculada usando a menor razão entre os segmentos resultantes r_1 e r_2 . Para partículas altamente simétricas como discos ou elipses o valor de Simetria se aproxima da unidade (TRUBETSKAYA, *et al* 2017).

3. REVISÃO DE LITERATURA

Como já postulado neste trabalho os sistemas de particulados são onipresentes na engenharia química, abrangendo uma variedade de setores industriais, incluindo produtos farmacêuticos, processamento de alimentos e extração mineral, etc. O comportamento dos sistemas de partículas desempenha um papel significativo na eficiência, produtividade e confiabilidade dos processos de engenharia química. A forma das partículas é um fator crítico no comportamento dos sistemas particulados, influenciando propriedades como fluxo, segregação, empacotamento e transporte. Como resultado, o entendimento do impacto da forma das partículas nos sistemas de partículas é essencial para o projeto e a otimização dos processos e equipamentos de engenharia química.

Esta revisão de literatura visa fornecer uma visão abrangente da importância da análise da forma na investigação dos sistemas de particulados em engenharia química, bem como as metodologias e resultados presentes na literatura do tema. Ao revisar uma série de estudos que empregaram abordagens experimentais e numéricas demonstra-se o papel crítico que esta variável desempenha na compreensão do comportamento, da otimização e da inovação dos sistemas de particulados.

3.1 METODOLOGIAS EXPERIMENTAIS

Para investigar o efeito da forma das partículas nos sistemas de particulados, a análise experimental é crucial. Técnicas experimentais fornecem informações valiosas sobre os mecanismos físicos que governam o comportamento destes fenômenos. Além

disso, a análise experimental permite a validação de modelos teóricos, aprimorando nossa compreensão do comportamento do sistema de particulados e o design de processos mais eficientes e confiáveis.

Ao longo dos anos, várias técnicas experimentais foram usadas para investigar o efeito da forma, tamanho, distribuição e outras características das partículas nos sistemas de particulados. Essas técnicas incluem imageamento de alta velocidade (*high-speed imaging*), rastreamento de partículas (*Particle tracking*), reologia, medições de pressão, entre outras. Cada técnica fornece informações valiosas sobre diferentes aspectos do comportamento do sistema de particulados, e seu uso geralmente depende da aplicação específica e do sistema em estudo. Detalha-se um pouco mais sobre cada abordagem abaixo:

- O imageamento de alta velocidade é uma técnica experimental comumente usada para estudar sistemas de partículas, fornecendo informações visuais detalhadas sobre o comportamento de partículas individuais e em leitos. Por exemplo, em um estudo de
- O rastreamento de partículas é outra técnica experimental que fornece informações sobre o comportamento de partículas individuais em um sistema particulado. Essa técnica envolve o rastreamento do movimento de partículas individuais e pode fornecer informações sobre a velocidade das partículas, difusão, segregação, mistura e comportamento do fluxo.
- A reologia é uma técnica usada para medir o comportamento de fluxo e deformação de materiais, incluindo sistemas particulados. Ao medir as propriedades reológicas dos sistemas de partículas, é possível obter informações sobre o comportamento do sistema sob diferentes condições.
- As medições de pressão são uma técnica comumente usada para estudar o comportamento do fluxo de sistemas de partículas, fornecendo informações sobre a queda de pressão e a taxa de fluxo do sistema. Medições de pressão são usadas para investigar o impacto da forma da partícula no comportamento do fluxo de materiais granulares em diversas situações como leitos, transportes e interações com fluídos.

3.2 TRABALHOS EXPERIMENTAIS

Liu *et al.*, (2017) examinou as distribuições de tensão em pilhas (amontoados) de material particulado de diferentes tamanhos e formas. Para as pilhas de material foram utilizados pilhas em forma de cunha e cônicas com diferentes formatos de partículas em cada. Os resultados revelaram que, à medida que o tamanho da pilha aumentava, a distribuição normalizada da tensão vertical ao longo da direção radial permanecia relativamente constante para um determinado tipo de material granular. Todas as pilhas mostraram uma queda na tensão vertical no centro.

A relação $S_{\max}/S_{\text{imerso}}$ (do inglês *Shear* traduz-se Tensão ou Stress mecânico) foi proposta como um índice para avaliar o desenvolvimento da profundidade da imersão em relação à tensão experimentada pela partícula em diferentes tipos de pilhas. Observou-se que as partículas com maior alongamento produziram uma relação $S_{\max}/S_{\text{imerso}}$ mais alta, indicando um aumento no efeito da imersão da partícula sob a pilha na tensão. Pilhas cônicas exibiram uma queda de tensão mais pronunciada em comparação com pilhas em forma de cunha. A forma das partículas teve uma influência mais significativa no desenvolvimento da tensão de imersão em estacas cônicas. Essas descobertas fornecem informações valiosas para compreender o comportamento das variações de tensão em pilhas de materiais granulares.

Outro estudo conduzido por Mahajan *et al.*, (2018) investigou o comportamento de fluidização de partículas alongadas, classificadas como Geldart-D, por meio de métodos experimentais. Foram realizadas medições de queda de pressão e altura do leito em duas escalas diferentes com configurações semelhantes com intuito de confirmar que os efeitos observados eram consequência da forma da partícula e não do seu tamanho ou do tamanho do leito. Revelou-se, com esse estudo que há a presença de regimes distintos formados com base na velocidade do gás. Em baixa velocidade do gás, as partículas se compactam densamente, mas à medida que a taxa de fluxo aumenta, canais começam a se formar. Inicialmente, esses canais exibem canalização passiva, onde não há movimento de partículas. Em configurações maiores e a uma velocidade um pouco maior do gás, observa-se a canalização ativa, caracterizada pelo fluxo de partículas pelos canais e a formação de fontes.

Quando a velocidade do gás excede a velocidade mínima de fluidização, as partículas transitam para o regime de fluidização borbulhante. Mesmo em altas taxas de fluxo, as partículas exibem comportamento de bloqueio, movendo-se em grandes grupos

compactados. A forma das partículas desempenha um papel fundamental nesses comportamentos, conforme evidenciado por experimentos envolvendo partículas esféricas e partículas alongadas semelhantes a bastões. O estudo também utilizou a Análise de Imagem Digital para analisar a orientação das partículas, demonstrando que elas tendem a ficar horizontalmente em baixa velocidade do gás e se alinham na direção do fluxo em altas taxas de fluxo. Além disso, foram investigadas correlações espaciais e velocidades das partículas, bem como a influência das forças hidrodinâmicas no movimento das partículas.

Um estudo mais recente realizado por Verma *et al.*, (2021) concentrou-se em determinar os efeitos de forma no fenômeno de mistura em um leito fluidizado aplicado a dois conjuntos de partículas divididos com base em seus respectivos tamanhos (maiores ou grossas e menores ou finas).

Os resultados revelaram que a forma das partículas é crucial para determinar o grau de segregação dentro do sistema. O aumento da não esfericidade das partículas geralmente leva a uma melhor mistura. Para partículas maiores, a tendência de segregação seguiu a ordem: cúbicas > esféricas > oblato > prolato, sendo as partículas prolatas as que apresentaram menor segregação e melhor mistura. Para as partículas maiores notou-se uma correlação entre a dispersão e a presença de frações de empacotamento monodispersa. Além disso, a angularidade das partículas finas também influenciou a tendência de segregação, com maior angularidade resultando em menor segregação. A densidade e o tamanho das partículas, bem como a proporção inicial de partículas finas introduzidas no sistema, foram fatores significativos na determinação da segregação. A altura de preenchimento inicial do leito teve um efeito mínimo ou nenhum na segregação.

Essas descobertas têm implicações importantes para investigações numéricas em escala de partículas e em escala de laboratório, fornecendo orientação para a seleção de arranjos de partículas representativos em simulações e validação de simulações com dados experimentais.

O estudo realizado por Vollmari *et al.*, (2017) investigou a qualidade da mistura de partículas com quatro diferentes formas usando abordagens experimentais e numéricas em um leito fluidizado em escala de laboratório. O método acoplado DEM-CFD foi empregado nas simulações numéricas, levando em consideração as formas e orientações das partículas. Os resultados mostraram que as simulações numéricas estavam geralmente em concordância com os resultados experimentais para várias combinações de partículas, incluindo a relação entre as velocidades de mistura para diferentes misturas de partículas.

Houveram, no entanto, discrepâncias entre os resultados experimentais e de simulação foram observadas em misturas de esferas e cubóides alongados, bem como esferas e placas. As simulações apresentaram ligações de partículas mais altas e menos dinâmicas, sugerindo que os modelos atuais de força de arrasto utilizados em sistemas polidispersos envolvendo partículas esféricas e não esféricas podem não ser adequados. Essa questão levanta a necessidade de investigar a inclusão de forças de sustentação e torque, bem como examinar o comportamento da força de arrasto de partículas não esféricas sob distribuições de tamanho não uniformes.

Além disso, a utilização de modelos resolvidos mais realistas para o tratamento do **limite de parede** pode fornecer informações adicionais. O estudo também destacou a influência significativa da forma das partículas no processo de mistura. A adição de partículas planas, como as placas, resultou geralmente em taxas de mistura mais rápidas devido às variações na área da face das partículas com base em suas orientações. As misturas que envolviam partículas esféricas apresentaram as taxas de mistura mais lentas, enquanto as placas alcançaram a mistura monodispersa mais rápida, seguidas pelos cubos e cubóides alongados.

O estudo também investigou a mistura de sistemas de partículas bidispersas e observou que, em geral, a mistura foi mais lenta em comparação com sistemas monodispersos. Partículas esféricas em ambas as abordagens experimentais e simulações exibiram taxas de mistura mais lentas em comparação com aquelas contendo partículas de formato complexo. Esses efeitos foram atribuídos à área de face uniforme das partículas esféricas e às forças fluido-partículas mais uniformes resultantes. Por outro lado, a adição de cubos ou cubóides alongados a misturas com placas resultou em uma desaceleração da taxa de mistura em comparação com o caso monodisperso.

Em outro estudo, Abbireddy e Clayton (2015) examinaram o impacto da forma das partículas dada pela esfericidade na densidade de empacotamento e subsequente comportamento de cisalhamento de materiais granulares. Os experimentos foram realizados em areias uniformemente graduados de acordo com o tamanho médio de partículas. Observou-se um aumento do índice de vazios à medida que a forma das partículas diminuía a esfericidade. O estudo comparou dois tipos de materiais, esferas de vidro (diâmetro médio entre 0.6–1.18 mm), areia de sílica Leighton Buzzard (diâmetro médio entre 0.6–1.18 mm), pepitas de vidro sieve (diâmetro médio entre 0.6–2.0 mm) e glitter fino (diâmetro médio entre 0.6–1.18 mm) e glitter grosso (diâmetro médio entre 1.18–2.0 mm) destacando as diferenças na angularidade.

Foram observadas correlações entre a forma das partículas e vários fatores, como ângulo de fricção de pico, ângulo de fricção mobilizado no início da dilatação, ângulo de fricção de volume constante e quebra de partículas. À medida que as partículas se tornavam planas e angulares, o ângulo de fricção de pico aumentava significativamente, enquanto a dilatação, por outro lado, era reduzida e, para as partículas mais achatadas, não existente. Isso levou à postulação de que o aumento no ângulo de fricção de pico resultava da quebra de partículas e do trabalho de deslizamento. Portanto, sugere-se que partículas planas flexíveis exibam menor dilatação e ângulos de fricção efetivos de pico em comparação com partículas volumosas.

O estudo conduzido por Mayerhofer *et al.*, (2011) teve como objetivo analisar experimentalmente o efeito da porosidade, tamanho médio das partículas e orientação das partículas na queda de pressão em leitos compactados compostos por lascas de madeira de formato irregular. Foram realizadas medições experimentais para determinar as distribuições de tamanho das partículas, porosidades e quedas de pressão em diferentes velocidades de fluido. A queda de pressão do fluido através dos leitos porosos foi modelada utilizando as equações de Forcheimer e Ergun.

Para os diferentes leitos compactados, o coeficiente de forma C e a permeabilidade K da equação de Forcheimer foram calculados, obtendo valores que variaram de 1,2 a $13,0 \times 10^{(-m^2)}$. Além disso, foram derivados fatores de forma adaptados A (Constante de Blake–Kozeny–Carman) e B (Constante de Burke–Plummer) que usualmente são definidos para partículas cuja forma não desvia muito de esferas, agora tiveram seus valores definidos especificamente para as partículas de madeira a partir dos experimentos de queda de pressão.

Esses fatores de forma apresentaram uma excelente correspondência com os dados experimentais, sendo determinados utilizando a porosidade medida do leito e o diâmetro de partícula equivalente médio calculado a partir da distribuição de tamanho das partículas.

No estudo realizado por Cho, Dodds e Santamarina (2016), os pesquisadores compilaram novos dados experimentais juntamente com resultados de estudos publicados anteriormente para investigar os efeitos da forma das partículas na densidade de compactação e nas propriedades mecânicas dos solos arenosos para uma ampla faixa de tensões aplicadas. A esfericidade, arredondamento e suavidade foram utilizados para caracterizar diferentes escalas associadas à forma das partículas.

De acordo com estudos anteriores e confirmados pelos dados obtidos no estudo,

o aumento da angularidade ou da excentricidade das partículas resulta em um aumento nos índices de vazios e na discrepância entre esses índices ao longo da matriz particulada. Além disso, foi observado que o aumento da irregularidade das partículas leva a uma diminuição da rigidez, mas um aumento na sensibilidade às tensões aplicadas. Também constatou-se um aumento na compressibilidade sob carga vertical, no ângulo de fricção estática a volume constante e na interceptação da linha de estado crítico, com um efeito fraco na inclinação da linha de estado crítica.

Portanto, a forma das partículas emerge como uma propriedade significativa para a caracterização dos solos, especialmente em areias limpas e cascalhos. Uma avaliação sistemática da forma das partículas contribuirá para uma melhor compreensão do comportamento desses materiais granulares.

3.3. SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

As técnicas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) são amplamente empregadas para a análise e resolução de aplicações de engenharia complexas, abrangendo escoamentos de fluidos, transferência de calor e problemas de transferência de massa. A utilização de modelos CFD na otimização e desenvolvimento de equipamentos e estratégias de processamento na indústria de maneira geral experimentou um crescimento exponencial nos últimos anos, conforme demonstrado por Norton e Sun (2006). Em seu estudo, eles revelaram que a aplicação de modelos CFD apenas na indústria de alimentos testemunhou uma expansão significativa. Oshinowo e Bakker (2002) discutiram o notável progresso feito na utilização de modelos CFD para fluxo multifásico gás-sólido, particularmente em leitos fluidizados, risers, linhas de transporte pneumático diluído e precipitadores. Esses avanços melhoraram significativamente os recursos de projeto de processo relacionados às interações gás-sólido em uma ampla gama de aplicações industriais.

A literatura em geral destaca o potencial do CFD como uma ferramenta poderosa no projeto de equipamentos industriais, oferecendo manuseio e compreensão superiores do processo de projeto em comparação com a experimentação tradicional. No entanto, a aplicação de CFD em alguns processos pode apresentar desafios devido aos complexos fenômenos envolvidos, principalmente quando há turbulência de gases presente. O desenvolvimento de um modelo CFD confiável requer uma implementação precisa das condições iniciais e de contorno, juntamente com uma descrição significativa do

problema físico. Os principais fatores a serem considerados incluem definir com precisão as variáveis a serem determinadas, selecionar equações matemáticas e métodos numéricos adequados, estabelecer limites apropriados e condições iniciais e incorporar correlações empíricas relevantes (JAMALEDDINE E RAY, 2010).

Para simular os processos físicos de interesse para a indústria normalmente, as equações de Navier-Stokes são resolvidas numericamente através de um esquema iterativo, considerando o acoplamento entre os campos de velocidade e pressão. Equações de transporte adicionais são incorporadas para levar em conta a turbulência e, no caso de fluxo granular, equações para sedimentação sólida e temperatura granular também são incluídas (NORTON E SUN, 2006).

Essas equações permitem que o sistema seja representado em formas bidimensionais ou tridimensionais que se adaptam à forma física real do sistema. No entanto, essas técnicas geralmente exigem tempos de computação significativos e podem encontrar problemas de convergência. Consequentemente, é prática comum simplificar o modelo computacional reduzindo a dimensionalidade e a complexidade do modelo. Para geometrias que exibem simetria, como formas circulares, a modelagem ao longo do plano de simetria é uma abordagem viável.

Várias formulações matemáticas são empregadas para representar as equações governantes, com os modelos Euleriano-Euleriano (dois fluidos) e Euleriano-Lagrangiano (partícula discreta) sendo amplamente utilizados. O domínio computacional é dividido em células (malha) e os balanços de massa são calculados sobre essas células usando métodos de discretização como elemento finito, diferença finita ou volume finito. As equações algébricas linearizadas resultantes são então resolvidas para cada grade ou célula no domínio computacional usando solucionadores de equações lineares com métodos numéricos como Gauss-Seidel ou método de eliminação de Gauss (JAMALEDDINE E RAY, 2010).

A qualidade da malha é de extrema importância e deve ser cuidadosamente avaliada e testada, pois tem uma influência substancial na precisão da simulação numérica e no tempo de convergência do modelo. A busca por uma malha ideal que melhore os critérios de convergência e reduza o esforço e o tempo computacional é altamente recomendável.

3.3.1 Abordagem Euleriana-Euleriana

A abordagem euleriana é fundamentada nas equações macroscópicas de balanço

de massa, momento e energia para ambas as fases, partículas e gás. Os modelos eulerianos tratam a fase de partículas e a fase gasosa como dois meios contínuos interpenetrantes assumindo que ambas as fases ocupam todos os pontos do domínio computacional (ENWALD, PEIRANO, ALMSTEDT, 1996).

A fase gasosa é chamada de fase primária ou contínua, enquanto a fase sólida é chamada de fase granular ou dispersa. Ambas as fases são representadas por suas frações volumétricas e estão conectadas através da força de arraste na equação de momento. Uma técnica de média para as variáveis de campo, como velocidades do gás e sólidas, fração volumétrica sólida e temperatura granular sólida, é adotada. A teoria cinética para escoamento granular é utilizada para derivar relações constitutivas baseadas em informações empíricas, a fim de descrever a interação entre partículas e fechar o conjunto de equações de conservação (MACHADO, 2020)

3.3.2 Abordagem Euleriana-Lagrangeana

Os modelos lagrangianos, ou modelos de partículas discretas, são derivados aplicando a lei de Newton do movimento à fase particulada. Essa abordagem permite o cálculo da trajetória e movimento de partículas individuais. As interações entre as partículas são descritas por meio de uma força potencial (dinâmica de partículas suaves) ou por dinâmica de colisões (dinâmica de partículas rígidas) (MACHADO, 2020).

Nessa abordagem, a fase fluida é tratada separadamente, resolvendo um conjunto de equações de Navier-Stokes com média temporal, enquanto a fase dispersa é simulada rastreando um grande número de partículas, bolhas ou gotas através do campo de fluxo calculado. Ao calcular o desenvolvimento temporal de uma amostra suficientemente grande de partículas, é possível avaliar grandezas médias de conjunto que descrevem o desempenho do sistema. Além disso, utilizando a abordagem lagrangiana, a fase dispersa pode trocar massa, momento e energia com a fase fluida através de um termo fonte adicionado às equações de conservação. Essas equações também consideram as variações na fração volumétrica de cada fase (TSUJI, KAWAGUCHI, TANAKA; 1993).

À medida que cada partícula individual se move pelo campo de fluxo, sua trajetória, cálculos de massa e transferência de calor são obtidos a partir de um equilíbrio de forças juntamente com as condições locais atualizadas da fase contínua. Assim, as forças externas atuando na partícula sólida, como forças aerodinâmicas, gravitacionais, de empuxo e de contato devido a colisões entre as partículas e entre as partículas e a

parede do tubo, podem ser calculadas simultaneamente com o movimento da partícula utilizando parâmetros locais do gás e dos sólidos. Embora a forma da equação de momento euleriana possa ser derivada de sua equivalente lagrangiana através de uma média sobre a fase de partículas, cada modelo possui suas vantagens e desvantagens dependendo dos objetivos do estudo e do tipo de sistema utilizado (JAMALEDDINE E RAY, 2010).

3.3.3. Métodos de Discretização e resolução das equações

As equações governantes usadas para representar sistemas de fluxo multifásico precisam ser moldadas em uma forma compatível com algoritmos numéricos, caso essas equações sejam resolvidas numericamente. As equações governantes podem ter a forma de ODE (equações diferenciais ordinárias) ou PDE (equações diferenciais parciais) não lineares, dependendo da formulação utilizada e das suposições implementadas para sua formulação. Como não existem métodos diretos disponíveis para resolver esses tipos de equações, uma alternativa (soluções aproximadas) seria transformá-las em formas mais simples, que sejam menos complexas matematicamente e numericamente. Isso pode ser alcançado usando uma das técnicas de discretização comumente usadas: diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos (MORTON; MAYERS, 2005).

Uma discretização por diferenças finitas (FDD, na sigla em inglês) é baseada na forma diferencial da EDP a ser resolvida. Cada derivada é substituída por uma fórmula de diferenças aproximada (diferença regressiva, central e progressiva) que geralmente pode ser derivada de uma expansão em série de Taylor. O domínio computacional geralmente é dividido em células hexaédricas (grade) e a solução é obtida em cada ponto nodal (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

A discretização por volumes finitos (FVD, na sigla em inglês) é baseada na divisão do domínio computacional em pequenos volumes geométricos ou células que definem numericamente a região de interesse. A forma integral das equações de conservação de massa, momento e energia é resolvida para cada volume de controle, além das equações constitutivas que descrevem turbulência, reações químicas, transporte de partículas e radiação. Conseqüentemente, a qualidade da solução no domínio computacional depende em grande parte do tamanho, forma e posicionamento dos volumes de controle (HÖLLIG, 2003).

Por fim, uma discretização por elementos finitos (FED, na sigla em inglês) é

baseada em uma representação segmentada da solução em termos de funções de base especificadas. O FED usa uma abordagem mais geral do que a FDD e a FVD, ambas sendo tipos do FED. Sua generalidade permite que seja usado em domínios complexos e problemas geometricamente desafiadores. Com a técnica do FED, o domínio computacional é dividido em subdomínios menores (ou seja, elementos finitos) e a solução em cada elemento é construída a partir das funções de base (HÖLLIG, 2003).

A principal vantagem do FVD em relação à FDD é sua capacidade de resolver as variáveis de solução sem a necessidade de uma malha estruturada, evitando completamente o esforço de converter a malha dada em uma grade numérica estruturada internamente. Assim como a FDD, a solução aproximada resultante é discreta, mas as variáveis geralmente são colocadas nos centros das células em vez de nos pontos nodais. Nos casos em que as variáveis de campo devem ser estimadas em locais não nodais, é utilizada uma técnica de interpolação (HÖLLIG, 2003).

3.4 TRABALHOS COMPUTACIONAIS

Jiang, *et al.*, (2020) investigaram o comportamento de colisão de partículas irregulares de maltodextrina com substratos horizontais usando uma técnica aprimorada de velocimetria de rastreamento de partículas (PTV) para medir as colisões e rastrear as trajetórias de múltiplas partículas durante o processo de queda livre e colisão. Os dados medidos foram então comparados com simulações DEM usando dois modelos: o modelo multi-esfera e o modelo superquádrico.

Os resultados deste estudo revelaram várias conclusões importantes. Em primeiro lugar, os pesquisadores observaram que os coeficientes de restituição (COR) para colisões com substratos de vidro eram maiores do que aqueles com pastilhas de maltodextrina, o que era esperado devido à maior rigidez do vidro. Esta descoberta demonstra a influência do material do substrato no comportamento de colisão.

Além disso, uma diminuição no COR normal foi observada à medida que a velocidade de rotação após a colisão e a diferença absoluta entre o ângulo de incidência e o ângulo de rebote aumentaram. Isso sugere que esses fatores desempenham um papel na determinação do resultado da colisão.

As simulações usando o modelo superquádrico foram significativamente afetadas pela proporção da elipse. Por outro lado, o modelo multiesfera apresentou melhor concordância com os dados medidos em termos das distribuições de COR total e normal,

bem como da velocidade de rotação após a colisão. Isso indica que o modelo multiesfera é mais adequado para prever o comportamento de colisão partícula-parede macroscópica de partículas não convexas irregulares.

Em outro estudo consuzido por Li, *et al.*, (2021) os buscou-se entender o impacto da forma da partícula na filtração sob pressão uma vez que, de acordo com autres estudos anteriores concentram-se principalmente em partículas esféricas, o papel da forma da partícula no comportamento da filtração recebeu atenção limitada. Desenvolveu-se um fluxo de trabalho computacional que combinou a dinâmica do corpo rígido (RBD) e a equação empírica de Ergun para prever a estrutura da torta e o fluxo de filtrado para partículas com distribuições diversas de tamanho e forma.

Para lvar em consideração variações espaciais de densidade e tamanho de partícula uma versão da equação de Ergun foi desenvolvida com intuito de incorporar como parâmetros o diâmetro médio de Sauter e valores de porosidade obtidos através de simulações de corpo rígido (RDB).

Por meio de experimentos numéricos, os pesquisadores investigaram os efeitos da forma das partículas e distribuições de tamanho na estrutura da torta e no comportamento da filtração. Dois cenários foram explorados: cilindros monodispersos com diferentes razões de aspecto (ARs), variando de bastonetes/agulhas a discos/plaquetas, e bastonetes polidispersos com distribuições de tamanho bimodais representando populações distintas de partículas pequenas e grandes.

Verificou-se que o fluxo de filtrado é sensível ao SMD da partícula e à porosidade do bolo, indicando uma diminuição nas taxas de fluxo à medida que o SMD médio e/ou a porosidade diminuem em todas as formas de partícula.

Ao contrário das suposições anteriores, varetas de alta razão de aspecto (AR) foram previstas para gerar as porosidades médias mais altas e fluxos de filtrado entre as partículas cilíndricas estudadas. Em contraste, as partículas em forma de disco de baixa razão de aspecto foram previstas para produzir as menores porosidades médias e fluxos de filtrado entre as partículas cilíndricas, alinhando-se com as observações experimentais.

O fluxo de trabalho computacional forneceu previsões precisas de fluxos de filtrado medidos para esferas de vidro esféricas polidispersas, com resultados ligeiramente melhorados ao utilizar valores locais de SMD e porosidade em vez de valores com média espacial.

Em um estudo conduzido em 2002 por CLEARY e SAWLEY os autores buscaram entender a influência do formato das partículas nos fluxos de descarga de uma

moega ou tremonha usando o Método de Elemento Discreto (DEM) em uma abordagem de modelagem 2D. De acordo com trabalhos anteriormente publicados partículas esféricas, embora amplamente utilizadas em simulações, não representam com precisão materiais granulares reais devido à sua falta de resistência ao cisalhamento e às forças de atrito. Como resultado, as vazões previstas para partículas circulares tendem a ser superestimadas, levando a um fluxo de massa excessivamente fluido nas tremonhas.

Os pesquisadores examinaram os efeitos da razão de aspecto e de um indicador da semelhança das partículas a cubos ou blocos aqui chamado de cubicidade, no escoamento das partículas pela moega separadamente e em combinação. A presença de formas semelhantes a cubos no material teve um impacto mínimo no padrão de fluxo, embora tenha aumentado a resistência ao fluxo e reduzido as taxas mássicas em aproximadamente 28%. A redução na taxa de fluxo estagnou quando a presença de cubos excedeu um certo limite, sugerindo que aumentos adicionais na cubicidade das partículas tiveram pouco efeito nos fluxos da tremonha.

Em contraste, alterar a proporção das partículas teve um efeito mais pronunciado no fluxo. Mudanças comportamentais semelhantes foram observadas para partículas elípticas e retangulares. A transição de partículas circulares para elípticas com uma proporção de 5:1 resultou em uma redução de 29% na taxa de fluxo e mudanças significativas na estrutura do fluxo de partículas. As partículas exibiram um comportamento mais parecido com o de um material contínuo, ou seja, de deformação e fratura, em vez de se comportarem como partículas independentes de fluxo livre. O escoamento das partículas levou ao rompimento do tecido da microestrutura, criando vazios estáveis suportados por tensões arqueadas.

O estudo destacou a importância crítica da forma da partícula nos fluxos da tremonha. No entanto, mais avanços na modelagem DEM são necessários para prever totalmente todos os fenômenos que ocorrem nas tremonhas. As áreas que requerem compreensão adicional incluem a presença de cubos em microestruturas 3D, os efeitos da assimetria das partículas, coesão, variações nas propriedades de atrito parede-partícula e partícula-partícula, bem como o impacto da microrrugosidade nas paredes da tremonha.

Também relatou-se que os recursos de modelagem 3D e seu código DEM passaram por desafios relacionados à geração de geometrias e visualização de sistemas particulados. De acordo com a metodologia usada para paralelizar o código DEM algumas simulações demonstraram que fluxo através de uma peneira vibratória e descarga de tremonhas cilíndricas, mostraram o potencial para contribuir para a

otimização do processo e projeto de equipamentos.

O uso de metodologias computacionais é, por vezes, uma saída elegante para se adereçar questões complexas de modelagem, porém tratando-se de partículas irregulares tem-se maiores dificuldades de convergência das equações governantes exigindo maior esforço computacional. Um exemplo de solução para esse tema é a publicação de Santos, *et al.*, (2020) na qual, foi apresentada uma metodologia para representar partículas não esféricas usando partículas esféricas em simulações DEM. A principal motivação por trás dessa abordagem foi reduzir o tempo computacional. A metodologia envolveu a calibração dos parâmetros do modelo de partícula esférica para atingir o mesmo ângulo de repouso das partículas não esféricas. Os parâmetros de deslizamento e atrito de rolamento na interação partícula-partícula foram identificados como os mais significativos durante o processo de calibração, tendo o atrito de rolamento a maior influência.

Para validar o modelo DEM, um experimento conduzido por Zhou *et al.*, (2002) foi utilizado como referência para calibração. Uma vez validado o modelo de partícula esférica, foram simuladas três montagens diferentes de partículas não esféricas usando partículas esféricas seguindo o procedimento de calibração pré-definido. Os resultados demonstraram que o uso de partículas esféricas em simulações DEM reduziu o tempo de processamento computacional em aproximadamente 80% em comparação com o uso de partículas de formato irregular. Essa redução significativa no tempo computacional destaca a vantagem dessa estratégia.

Observa-se que este estudo não permite generalizações para outras aplicações envolvendo partículas alongadas ou casos em que a razão de aspecto desempenha um papel crucial no fluxo granular, estudos específicos seriam necessários para diferentes casos. Além disso, a metodologia tem potencial para ser estendida ao escoamento granular úmido, considerando os diversos fatores discutidos no artigo.

O estudo conduzido por Ji, *et al.*, (2020) enfoca a análise numérica do processo de escoamento e mistura de partículas não esféricas usando o Método dos Elementos Discretos (DEM) com equações superquádricas adicionadas ao modelo para descrição de partículas esféricas e irregulares. A validade do modelo DEM para mistura dinâmica de materiais granulares é confirmada pela comparação dos resultados do DEM com achados experimentais anteriores.

Os resultados revelam que a taxa de mistura diminui à medida que a relação entre a velocidade de rotação e angularidade diminui, ou à medida que a razão de aspecto das

partículas se desvia de 1,0. A velocidade de rotação tem uma influência significativa na taxa de mistura, enquanto a forma da partícula desempenha um papel secundário em sistemas granulares não esféricos.

Além disso, o estudo destaca diferenças notáveis na taxa de mistura entre sistemas granulares esféricos e não esféricos. As partículas esféricas exibem a menor taxa de mistura, enquanto os cubos mostram taxas de mistura mais altas em comparação com os cilindros. Partículas semelhantes a cubos tendem a formar contatos face a face e estruturas de empacotamento densas, promovendo uma mistura mais eficiente.

Além disso, a forma das partículas afeta a eficiência da transferência de energia externa no tambor rotativo. As partículas não esféricas têm maior resistência à rotação do que as esferas, resultando em maior energia cinética translacional, mas menor energia cinética rotacional em comparação com as esferas. Além disso, os cubos aumentam a eficiência de transferência de energia externa em sistemas não esféricos.

Por último no estudo conduzido por Nan, *et al.* (2016) a abordagem DEM-CFD é empregada para investigar o comportamento de fluidização de partículas em forma de bastão com diferentes proporções. Para simplificar a interação entre as partículas, um método multi-esfera com pequenas modificações é utilizado, e a dependência do arrasto com a forma e a orientação é considerada. A análise se concentra em níveis macroscópicos e microscópicos, examinando padrões de fluxo, números de coordenação e orientações de partículas, com o objetivo de aprimorar a compreensão desse complexo sistema de fluxo.

O modelo desenvolvido neste estudo prevê com precisão a velocidade mínima de fluidização, alinhando-se bem com as correlações empíricas disponíveis. Além disso, em comparação com as partículas em forma de bastão, as partículas esféricas experimentam forças de contato maiores. À medida que a razão de aspecto das partículas em forma de bastão aumenta, a flutuação das velocidades das partículas adimensionais na direção vertical torna-se mais pronunciada.

A permeabilidade do leito e o número de coordenação são influenciados pela porosidade do leito e pelo formato da partícula. Conseqüentemente, parâmetros de forma, como esfericidade ou razão de aspecto, devem ser levados em consideração ao construir o diagrama de fases dos regimes de fluxo, que correlaciona o número de coordenação com a porosidade do leito.

A evolução das bolhas é impactada fortemente com a variação da orientação das partículas. Uma vez que o leito atinge um estado bem fluidizado, a distribuição de

probabilidade das orientações das partículas torna-se não uniforme.

4. CONCLUSÕES

Este trabalho, foi realizado com base um estudo abrangente sobre a influência dos parâmetros de forma das partículas no seu comportamento fluidodinâmico e em equipamentos industriais. Para isso, foram analisados trabalhos experimentais e simulações numéricas, além de abordar a importância desses parâmetros na descrição precisa da geometria das partículas.

Os estudos experimentais investigaram o comportamento de partículas com diferentes formas, tais como esferas, cilindros, elipsoides, entre outras geometrias irregulares. Esses experimentos forneceram dados valiosos sobre parâmetros específicos de forma, como fator de forma, razão de aspecto, área superficial específica e rugosidade. Esses parâmetros foram identificados como cruciais na caracterização da forma das partículas e na compreensão de como ela influencia o seu comportamento em um fluxo de fluido. Além disso os trabalhos experimentais tem se mostrado cada vez mais relevantes na validação de resultados obtidos a partir de simulações computacionais.

Por outro lado, as simulações numéricas permitiem explorar um espectro mais amplo de formas de partículas, com o objetivo de compreender o impacto dessas geometrias nas propriedades fluidodinâmicas. Os parâmetros de forma, juntamente com as propriedades físicas do material das partículas e as condições do escoamento, são incorporados aos modelos de simulação para prever o comportamento das partículas em diferentes cenários industriais. Isso possibilita a investigação de aspectos como velocidade terminal, arrasto hidrodinâmico, padrões de fluxo e distribuição de partículas.

Os resultados obtidos evidenciaram a relevância dos parâmetros de forma na descrição do comportamento das partículas em sistemas particulados. Verificou-se que a variação desses parâmetros afeta a resistência ao fluxo, a capacidade de dispersão, a aglomeração, a sedimentação das partículas, fluidização e muitos outros aspectos de interesse da Engenharia Química. Além disso, a consideração adequada desses parâmetros permite otimizar a eficiência de equipamentos industriais, como misturadores, reatores, separadores e sistemas de transporte de partículas.

Embora muito se tenha avançado na compreensão da influência dos parâmetros de forma no comportamento fluidodinâmico das partículas, é importante ressaltar que ainda existem desafios a serem superados. A complexidade das interações partícula-

fluido, a diversidade de formas e tamanhos de partículas encontradas na indústria e a necessidade de validação experimental contínua dos modelos numéricos são aspectos que requerem atenção e futuras investigações.

5. REFERÊNCIAS

- ABBIREDDY, C. O. R.; CLAYTON, C. R. I. **The impact of particle form on the packing and shear behaviour of some granular materials: an experimental study**. *Granular Matter*, v. 17, p. 427-438, 2015.
- ALLEN, Terence; ALLEN, Terence. Particle size, shape and distribution. **Particle size measurement**, p. 103-164, 1981.
- BAGHERI, G. H. *et al.*, **On the characterization of size and shape of irregular particles**. *Powder Technology*, v. 270, p. 141-153, 2015.
- BARRET, P. J. **The Shape of Rock Particle, a Critical Review**. *Sedimentology* 1980, 27, 291–303.
- CLEARY, Paul W.; SAWLEY, Mark L. **DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge**. *Applied Mathematical Modelling*, v. 26, n. 2, p. 89-111, 2002.
- CHO, G. C.; DODDS, J.; SANTAMARINA, C. J. **Particle shape effects on packing density, stiffness, and strength: natural and crushed sands**. *J Geotech Geoenviron* 132 (5): 591–602. 2006.
- CHUNG, Y. C.; OOI, J. Y. **Influence of discrete element model parameters on bulk behavior of a granular solid under confined compression**. *Particulate Science and Technology*, v. 26, p. 83–96, 2008.
- CREMASCO, Marco Aurélio. **Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos e outros trabalhos**. Editora Blucher, 2014.
- ENWALD, Hans; PEIRANO, Eric; ALMSTEDT, A.-E. **Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization**. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, p. 21-66, 1996.
- FERNANDES, Roger Gomes. **Efeito do tamanho e forma das partículas na cinética de cristalização de pó de vidro de dióxido de silício detectada por DSC**. 2017. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.
- HAWLITSCHKE, Gustav *et al.* **Análise de imagens dinâmica: caracterização da distribuição de tamanho e forma de partículas**. 2013, Anais.. Goiânia, GO: UFG, 2013. . Acesso em: 11 set. 2022.
- HEYWOOD, H. Symposium on particle size analysis. **Ind. Chem. Eng. and Soc. Chem. Ind. Proceeding published by these societies.(London)**, 1947.
- HÖLLIG, Klaus. **Finite element methods with B-splines**. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- JAMALEDDINE, Tarek J.; RAY, Madhumita B. **Application of computational fluid dynamics for simulation of drying processes: A review**. *Drying technology*, v. 28, n. 2, p. 120-154, 2010.

- JI, Shunying; WANG, Siqiang; ZHOU, Zongyan. **Influence of particle shape on mixing rate in rotating drums based on super-quadric DEM simulations.** *Advanced Powder Technology*, v. 31, n. 8, p. 3540-3550, 2020.
- JIANG, Z., Du, J., Rieck, C., Bück, A., & Tsotsas, E.. **PTV experiments and DEM simulations of the coefficient of restitution for irregular particles impacting on horizontal substrates.** *Powder Technology*, 360, 352-365. 2020
- LI, B., Zhang, H., Saranteas, K., & Henson, M. A. **A rigid body dynamics model to predict the combined effects of particle size and shape on pressure filtration.** *Separation and Purification Technology*, 278, 119462, 2021.
- LIMA, R.M. **Estudo da dinâmica de partículas em tambores rotatórios empregando a abordagem numérica Lagrangeana.** Dissertação de Mestrado. 103p. PPGEQ/UFU – Uberlândia/MG, 2017.
- LIU, Yuan-Yuan *et al.* **Experimental study on the effect of particle shape on stress dip in granular piles.** *Powder Technology*, v. 319, p. 415-425, 2017.
- MACHADO, Marcela Vieira Caixeta *et al.* **Estudo experimental e numérico da dinâmica de corpos moedores em moinhos de bola.** 2016.
- MACHADO, Marcela Vieira Caixeta *et al.* **Estudo experimental e numérico da operação de moagem em um moinho de bolas com suspensores.** 2020.
- MAHAJAN, Vinay V. *et al.* **Nonspherical particles in a pseudo-2D fluidized bed: Experimental study.** *AIChE Journal*, v. 64, n. 5, p. 1573-1590, 2018.
- MAYERHOFER, Michael *et al.* **Experimental investigation of pressure drop in packed beds of irregular shaped wood particles.** *Powder Technology*, v. 205, n. 1-3, p. 30-35, 2011
- MORTON, Keith W.; MAYERS, David Francis. **Numerical solution of partial differential equations: an introduction.** Cambridge university press, 2005.
- NAN, Wenguang; WANG, Yueshe; WANG, Jianzhong. **Numerical analysis on the fluidization dynamics of rodlike particles.** *Advanced Powder Technology*, v. 27, n. 5, p. 2265-2276, 2016.
- NORTON, Tomás; SUN, Da-Wen. **Computational fluid dynamics (CFD)—an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: a review.** *Trends in Food Science & Technology*, v. 17, n. 11, p. 600-620, 2006.
- ORTEGA, H., “**Sólidos Particulados**”. Faculdade de Engenharia de Alimentos, Unicamp. Disponível em <www.unicamp.br/fea/ortega/aulas/aula15_sistemasParticulados.ppt>. Acesso em 05/11/2022.
- OSHINOWO, Lanre M.; BAKKER, André. **CFD modeling of solids suspensions in stirred tanks.** In: **Symposium on Computational Modelling of Metals, Minerals and Materials**, TMS Annual Meeting. Seattle, WA. 2002. p. 234-242.
- PECANHA, Ricardo. **Sistemas Particulados#: Operações unitárias envolvendo partículas e fluídos.** Elsevier Brasil, Cap 1 e 2, 2014.
- SANTOS, K.G., **Estudo da fluidodinâmica do leito de jorro por CFD com malhas tridimensionais.** Dissertação de Mestrado, 128p, PPGEQ/UFU, Uberlândia/MG, 2008.

TSUJI, Yutaka; KAWAGUCHI, Toshihiro; TANAKA, Toshitsugu. **Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed.** *Powder technology*, v. 77, n. 1, p. 79-87, 1993.

TRUBETSKAYA, Anna *et al.* **One way of representing the size and shape of biomass particles in combustion modeling.** *Fuel*, v. 206, p. 675-683, 2017.

VERMA, Sanjay Kumar; YOGI, Jeetram; ANAND, Anshu. **Experimental investigation of segregation for nonspherical particles in a fluidized bed solids mixer.** *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 60, n. 6, p. 2642-2651, 2021.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **Computational fluid dynamics.** The finite volume method, p. 1-26, 1995.

VOLLMARI, K.; OSCHMANN, T.; KRUGGEL-EMDEN, H. **Mixing quality in mono-and bidisperse systems under the influence of particle shape: A numerical and experimental study.** *Powder Technology*, v. 308, p. 101-113, 2017.

Zhou, Y. C., Xu, B. H., Yu, A. B., & Zulli, P. **An experimental and numerical study of the angle of repose of coarse spheres.** *Powder technology*, 125(1), 45-54. 2002.