



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



Investigação numérica e experimental dos fenômenos de segregação e aglomeração em um disco rotatório

Gisele Márcia de Souza

Uberlândia – MG

2023



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



Investigação numérica e experimental dos fenômenos de segregação e aglomeração em um disco rotatório

Gisele Márcia de Souza

Orientadores:

Prof. Dr. Marcos Antônio de Souza Barrozo

Prof. Dr. Claudio Roberto Duarte

Tese 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

2023

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

S729 2023	Souza, Gisele Márcia de, 1990- Investigação numérica e experimental dos fenômenos de segregação e aglomeração em um disco rotatório [recurso eletrônico] / Gisele Márcia de Souza. - 2023. Orientador: Marcos Antônio de Souza Barrozo. Coorientador: Cláudio 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.2023.661 Inclui bibliografia. 1. Engenharia química. I. Barrozo, Marcos Antônio de Souza, 1961-, (Orient.). II. Duarte, Cláudio Roberto, 1975-, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Química. IV. Título. CDU: 66.0
--------------	--

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, 10/2023, PPGEQ				
Data:	15 de dezembro de 2023	Hora de início:	8:00	Hora de encerramento:	11:00
Matrícula da Discente:	11923EQU003				
Nome da Discente:	Gisele Márcia de Souza				
Título do Trabalho:	Investigação numérica e experimental dos fenômenos de segregação e aglomeração em um disco 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				
ODS-ONU:	ODS 9 – Indústria, Inovação e Infraestrutura				

Reuniu-se por meio de webconferência, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Doutora: Rafaella da Fonseca Rodrigues - Cargill (EUA) e Professores Doutores: Dyrney Araújo dos Santos - IQ/UFG, Rodolfo Junqueira Brandão - PPGEQ/UFAL, Ricardo Correa de Santana - FEQUI/UFU, Marina Seixas Pereira - PPGEQ/UFU, Claudio Roberto Duarte - PPGEQ/UFU, coorientador, e Marcos Antonio de Souza Barrozo - PPGEQ/UFU, orientador da candidata.

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

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

Aprovada

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 **Marcos Antonio de Souza Barrozo, Presidente**, em 19/12/2023, às 15:25, 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 **Marina Seixas Pereira, Professor(a) do Magistério Superior**, em 19/12/2023, às 15:40, 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 19/12/2023, às 15:46, 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 **Ricardo Correa de Santana, Professor(a) do Magistério Superior**, em 19/12/2023, às 18:14, 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 **Claudio Roberto Duarte, Professor(a) do Magistério Superior**, em 20/12/2023, às 10:11, 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 **Rodolfo Junqueira Brandao, Usuário Externo**, em 20/12/2023, às 10:12, 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 **Rafaella da Fonseca Rodrigues, Usuário Externo**, em 22/12/2023, às 12:38, 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 **5057384** e o código CRC **0586A4FE**.

Dedico aos meus pais, Lourdes e Cosme, e ao meu companheiro de vida, Gilberto.

“O conhecimento exige uma presença curiosa do sujeito em face do mundo. Requer uma ação transformadora sobre a realidade. Demanda uma busca constante. Implica em invenção e em reinvenção”

Paulo Freire

Agradecimentos

Aos meus pais, Lourdes e Cosme, e ao Gilberto, meu amor e companheiro de vida. Obrigada pelo apoio incondicional e por compreenderem as minhas ausências.

Aos amigos que sempre me incentivaram durante o processo: Fabrício, Thiago, Keycianne, Cassiano, Carolina, Isadora e Kássia.

Ao meu orientador, professor Marcos Antônio de Souza Barrozo, e ao meu coorientador, professor Claudio Roberto Duarte, pela confiança depositada em mim e por contribuírem imensamente para a minha formação como pesquisadora.

Aos amigos do Laboratório de Sistemas Particulados: Rondinelli, Grazielle, Paulo, Natália, Raissa, Dayana, Jeniffer, Rodolfo e Argileu (*in memoriam*). A acolhida e a colaboração de vocês fizeram a jornada mais leve e os levarei para toda a vida.

A todos os trabalhadores da Universidade Federal de Uberlândia, que validam o lema “UFU, um bem público a serviço do Brasil” e às agências de fomento CAPES, CNPq e FAPEMIG.

A todas as pessoas que acreditam na educação e na pesquisa como ferramentas de transformação social. Aos defensores do ensino público, gratuito e de qualidade.

Muito obrigada.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	vi
LISTA DE SÍMBOLOS	vii
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiii
CAPÍTULO 1 Introdução	1
1.1 Objetivos	2
CAPÍTULO 2 Segregação Granular no Disco Rotatório	4
2.1 Introdução	4
2.2 Revisão Bibliográfica.....	4
2.2.1 Disco Rotatório	4
2.2.2 Método dos Elementos Discretos (DEM)	8
2.2.3 Segregação granular	15
2.3 Material e Métodos	24
2.3.1 Estudo experimental do fenômeno de segregação	24
2.3.2 Estudo numérico do fenômeno de segregação	28
2.4 Resultados e Discussão	32
2.4.1 Estudo experimental do fenômeno de segregação	32
2.4.2 Estudo numérico do fenômeno de segregação	37
2.5 Conclusões	67
CAPÍTULO 3 Escoamento e Aglomeração de Partículas Coesas no Disco Rotatório	69
3.1 Introdução	69
3.2 Revisão Bibliográfica.....	69
3.2.1 Fundamentos da aglomeração de partículas.....	69
3.2.2 Forças coesivas no DEM.....	73
3.3 Material e Métodos	80
3.3.1 Estudo experimental.....	80
3.3.2 Estudo numérico do escoamento granular	81
3.4 Resultados e Discussão	90
3.4.1 Validação do modelo numérico não coesivo.....	90
3.4.2 Calibração e validação do modelo numérico coesivo	91

3.4.2 Estudo numérico do disco rotatório operando em regime contínuo.....	96
3.5 Conclusões	114
Referências Bibliográficas.....	116
APÊNDICE A	127
APÊNDICE B.....	132
APÊNDICE C	134
APÊNDICE D	138
APÊNDICE E	139
APÊNDICE F	140
APÊNDICE G	144
APÊNDICE H	148

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Diagrama esquemático do disco rotatório (Adaptado de Chadwick <i>et al.</i> , 2005) ...	5
Figura 2.2: Fluxo de material em um disco rotatório indicando a segregação e descarga das partículas de maior tamanho (Capes, 1980)	5
Figura 2.3: Regimes de escoamento em um disco rotatório (Adaptado de Chadwick e Bridgwater, 1997).....	6
Figura 2.4: Esquema da colisão entre duas partículas esféricas (Adaptado de Chen <i>et al.</i> , 2017).....	9
Figura 2.5: Aparato experimental para a determinação do coeficiente de restituição (Brandão, 2019).....	12
Figura 2.6: Aparato experimental para a determinação do coeficiente de atrito estático (Lima, 2021).....	13
Figura 2.7: Dispositivo de soltura utilizado na medição do coeficiente de atrito de rolamento (Lima, 2021).....	14
Figura 2.8: Número total de publicações na plataforma <i>ScienceDirect</i> de estudos em tambores e discos rotatórios.	22
Figura 2.9: Esquema do disco rotatório.....	24
Figura 2.10: Disposição inicial do leito granular (Adaptado de Brandão, 2019).....	26
Figura 2.11: Disposição dos equipamentos no experimento (Adaptado de LIMA, 2019).....	26
Figura 2.12: Metodologia para a determinação do índice de mistura.	27
Figura 2.13: Esquema de medição do ângulo de partida (Adaptado de Lima, 2022).	30
Figura 2.14: Vista frontal do disco rotatório para a combinação M1, operando com grau de preenchimento de 5,0%.	32
Figura 2.15: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M2, operando com ângulo de inclinação de 40°.	33
Figura 2.16: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M2, operando com ângulo de inclinação de 50°.	34

Figura 2.17: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M2, operando com ângulo de inclinação de 60°.....	35
Figura 2.18: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M3, operando com ângulo de inclinação de 40°.....	36
Figura 2.19: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M3, operando com ângulo de inclinação de 50°.....	37
Figura 2.20: Ângulos de partida numérico e experimental da combinação M1 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0%.....	38
Figura 2.21: Ângulos de partida numérico e experimental da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0%.....	39
Figura 2.22: Índice de Entropia de Mistura da combinação M1 operando com velocidade de rotação de 10rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de μSpw	40
Figura 2.23: Índice de Entropia de Mistura da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de μSpw	41
Figura 2. 24: Efeito dos valores de μSpw no ângulo de partida da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de E.....	42
Figura 2.25: Índice de Entropia de Mistura da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de E.....	43
Figura 2.26: Vista frontal do disco rotatório para os resultados (a) experimental, (b) numérico com $E = 0,0001E_0$ e (c) numérico com $E = 0,01E_0$	43
Figura 2.27: Esquema para o cálculo da sobreposição δn dos contatos partícula-partícula	44
Figura 2. 28: Médias de δn das partículas P1 e P2 e ângulos de repouso para diferentes valores de E.....	45
Figura 2.29: Força de contato média do par partícula-parede e velocidades angulares médias ω das partículas P1 e P2 para diferentes valores de E.....	46
Figura 2.30: Vistas frontais dos resultados numérico e experimental da combinação M2 para o ângulo de inclinação de 40°.....	47
Figura 2.31: Vistas frontais dos resultados numérico e experimental da combinação M2 para o ângulo de inclinação de 50°.....	48

Figura 2.32: Vistas frontais dos resultados numérico e experimental da combinação M2 para o ângulo de inclinação de 60°	49
Figura 2.33: Seção transversal do leito solidificado distante 2 cm em relação ao fundo do disco: (a) experimental e (b) numérico.....	50
Figura 2.34: Vistas frontais dos resultados, numérico e experimental, da combinação M3 para o ângulo de inclinação de 40°	51
Figura 2.35: Vistas frontais dos resultados, numérico e experimental, da combinação M3 para o ângulo de inclinação de 50°	52
Figura 2.36: Índices de Entropia de Mistura da combinação M2 para diferentes ângulos de inclinação: a) 40°, b) 50° e c) 60°	53
Figura 2.37: Perfis de fração volumétrica axial da combinação M2 para diferentes ângulos de inclinação: (a) 40, (b) 50 e (c) 60°.....	56
Figura 2.38: Componentes radial e axial do vetor gravidade.....	57
Figura 2.39: Trajetória ao longo de 60 s de duas partículas, P1 e P2, para a combinação M2, velocidade de 10 rpm e para ângulos de inclinação: (a) 40, (b) 50 e (c) 60°.....	58
Figura 2.40: Índices de Entropia de Mistura da combinação M3 para diferentes ângulos de inclinação: a) 40°, b) 45° e c) 50°	59
Figura 2.41: Perfis de fração volumétrica axial da combinação M3, para diferentes ângulos de inclinação: (a) 40°, (b) 45° e (c) 50°	61
Figura 2.42: Trajetória ao longo de 60 s de duas partículas, P1 e P2, para combinação M3, velocidade de 10 rpm e para diferentes ângulos de inclinação: (a) 40, (b) 50 e (c) 60°.....	62
Figura 2.43: Avaliação qualitativa do efeito combinado da densidade e tamanho granular	64
Figura 2.44: Influência do efeito combinado das propriedades granulares sobre o perfil de concentração axial.	65
Figura 3.1: Estruturas das partículas aglomeradas em função da quantidade de líquido na ligação: a) estado pendular; b) estado funicular; c) estado capilar; d) estado de gota (Adaptado de Newitt e Conway-Jones, 1958).....	70
Figura 3.2: Esquema das etapas do processo de aglomeração (Adaptado de Nascimento <i>et al.</i> , 2023).....	71
Figura 3.3: Diagrama esquemático do mecanismo de granulação do minério de ferro por crescimento em camadas (Adaptado de Shi <i>et al.</i> , 2022).....	72

Figura 3.4: Número total de publicações na plataforma ScienceDirect com as seguintes palavras-chave de pesquisa: “DEM” e “forças coesivas” e “DEM” sem “forças coesivas”....	74
Figura 3.5: Representação geométrica de uma ponte líquida entre duas partículas (a); e detalhes da ponte líquida (b) (Soulié <i>et al.</i> , 2006).....	76
Figura 3.6: Geometria do disco rotatório com raspador: (a) vista em perspectiva e (b) vista frontal.	86
Figura 3.7: Fluxograma da metodologia empregada para a determinação do tamanho e da massa dos aglomerados ejetados do disco rotatório	88
Figura 3.8: Aderência de finos à superfície de uma partícula.	89
Figura 3.9: Vista frontal do disco operando com inclinação de 50° e velocidades de 10, 30 e 50 rpm.....	90
Figura 3.10: Vista frontal do disco operando com velocidade de 10 rpm, ângulo de inclinação de 50° e água pura como líquido intersticial nos instantes 2,0 e 4,0 s.....	93
Figura 3.11: Comparação entre os ângulos de partida observados ao longo do tempo para diferentes modelos.....	94
Figura 3.12: Vista frontal do disco operando com velocidade de 10 rpm, ângulo de inclinação de 50° e solução de maltodextrina como líquido intersticial nos instantes 2,0 e 4,0 s	95
Figura 3.13: Comportamento do <i>holdup</i> dos sólidos (partículas monodispersas) para diferentes velocidades de rotação	96
Figura 3.14: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular de partículas secas monodispersas: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm	97
Figura 3.15: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular monodisperso com água pura como líquido intersticial: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm.....	98
Figura 3.16: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular monodisperso com solução de maltodextrina como líquido intersticial: (a) 10 rpm, (b) 30 e (c) 50 rpm.....	99
Figura 3.17: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular de partículas secas polidispersas: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm.	100
Figura 3.18: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular polidisperso com água pura como líquido intersticial: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm..	100

Figura 3.19: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular polidisperso com solução de maltodextrina como líquido intersticial: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm.	101
Figura 3.20: Distribuições dos tempos de residência do leito granular de partículas secas para o disco operando com inclinação de 50° e diferentes velocidades.	103
Figura 3.21: Distribuições dos tempos de residência do leito granular para o disco operando com inclinação de 50° e diferentes velocidades, tendo água pura como líquido intersticial..	104
Figura 3.22: Distribuições dos tempos de residência do leito granular para o disco operando com inclinação de 50° e diferentes velocidades, tendo solução de maltodextrina como líquido intersticial	105
Figura 3.23: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com água pura como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação monodispersa).....	106
Figura 3.24: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com solução de maltodextrina como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação monodispersa).....	107
Figura 3.25: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com água pura como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação polidispersa).	109
Figura 3.26: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com solução de maltodextrina como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação polidispersa).....	109
Figura 3.27: Número de finos aderidos à superfície das partículas de maior diâmetro para o disco operando com velocidade de 10 rpm e água pura como líquido intersticial.	110
Figura 3.28: Número de finos aderidos à superfície das partículas de maior diâmetro para o disco operando com velocidade de 30 rpm e água pura como líquido intersticial.....	111
Figura 3.29: Número de finos aderidos à superfície das partículas de maior diâmetro para o disco operando com velocidade de 50 rpm e água pura como líquido intersticial.....	111
Figura 3.30: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com solução de maltodextrina como líquido intersticial (alimentação polidispersa): com e sem raspador	112
Figura 3.31: Influência da presença de um raspador no escoamento do leito granular polidisperso com solução de maltodextrina como líquido intersticial: (a) sem raspador (b) com raspador	113

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Variáveis que influenciam a mistura granular	15
Tabela 2.2: Configurações de partículas no estudo de segregação no disco rotatório	25
Tabela 2.3: Parâmetros DEM do material granular	28
Tabela 2.4: Níveis do planejamento composto central: efeito das diferenças de tamanho e de densidade das partículas sobre a segregação granular	31
Tabela 2.5: Valores de ângulos de partida para a inclinação de 50°, grau de preenchimento de 5,0 % e velocidade de rotação de 10rpm	38
Tabela 2.6: Desvios do S_{∞} numérico da combinação M2 em relação à média do S_{∞} experimental para cada valor de μSpw	41
Tabela 3.1: Parâmetros de entrada DEM do material granular	82
Tabela 3.2: Parâmetros de entrada DEM do material granular para o modelo híbrido Easo e SJKR.....	83
Tabela 3.3: Planejamento composto central utilizado na análise de sensibilidade dos parâmetros numéricos DEM para o escoamento coesivo no disco rotatório.....	85
Tabela 3.4: Distribuição de tamanhos do leito polidisperso.....	85
Tabela 3.5: Ângulos de partida encontrados com os respectivos desvios para o disco operando com inclinação de 50°	91
Tabela 3.6: Erro médio dos valores de ângulos de repouso encontrados numericamente em relação ao resultado experimental	94
Tabela 3.7: Tempos de residência médios adimensionais do leito granular de partículas secas com os respectivos desvios.....	103
Tabela 3.8: Tempos de residência médios adimensionais do leito granular com água pura como líquido intersticial	105
Tabela 3.9: Tempo de residência médio adimensional do leito granular com solução de maltodextrina como líquido intersticial	106

LISTA DE SÍMBOLOS

a_{JKR}	Raio de contato da força de adesão	$M^0 L^1 T^0$
A_{cont}	Área de contato da força de adesão	$M^0 L^2 T^0$
D	Diâmetro do disco	$M^0 L^1 T^0$
d_p	Diâmetro da partícula	$M^0 L^1 T^0$
D_p	Distância percorrida pela partícula	$M^0 L^1 T^0$
D_{pp}	Distância entre as partículas de uma ponte líquida	$M^0 L^1 T^0$
D_0	Distância de ruptura da ponte líquida	$M^0 L^1 T^0$
e_p	Coeficiente de restituição	$M^0 L^0 T^0$
e_{pw}	Coeficiente de restituição partícula-parede	$M^0 L^0 T^0$
e_{pp}	Coeficiente de restituição partícula-partícula	$M^0 L^0 T^0$
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_o	Módulo de Young (valor real)	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
E^*	Módulo de Young equivalente	$M^1 L^{-1} T^{-2}$
$E(t)$	Função de distribuição dos tempos de residência	$M^0 L^0 T^0$
F_n	Força normal	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_n^d	Força normal de amortecimento	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_t	Força tangencial	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_t^d	Força tangencial de amortecimento	$M^1 L^1 T^{-2}$
$F_{t,max}$	Força tangencial máxima	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_{JKR}	Força de adesão	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_{PO}	Força de tração crítica	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_{cap}	Força de capilaridade	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_n^{vis}	Força viscosa normal	$M^1 L^1 T^{-2}$
F_t^{vis}	Força viscosa tangencial	$M^1 L^1 T^{-2}$
f	Grau de preenchimento	$M^0 L^0 T^0$
F_r	Número de Froude	$M^0 L^0 T^0$
g	Gravidade	$M^0 L^1 T^{-2}$
G_i	Modulo de Cisalhamento da partícula i	$M^1 L^{-1} T^{-2}$

G_j	Módulo de Cisalhamento da partícula j	$M^1L^{-1}T^{-2}$
G^*	Módulo de Cisalhamento equivalente	$M^1L^{-1}T^{-2}$
L	Altura da lateral do disco rotatório	$M^0L^1T^0$
h_{disp}	Altura do dispositivo	$M^0L^1T^0$
h_1	Altura do rebote	$M^0L^1T^0$
h_0	Altura inicial	$M^0L^1T^0$
I_i	Momento de inercia da partícula i	$M^1L^2T^0$
m	Massa	$M^1L^0T^0$
m_i	Massa da partícula i	$M^1L^0T^0$
m_j	Massa da partícula j	$M^1L^0T^0$
m^*	Massa equivalente	$M^1L^0T^0$
n_i	Número de partículas em cada célula	$M^0L^0T^0$
N_i	Número de partículas traçadoras	$M^0L^0T^0$
Q	Vazão mássica	$M^1L^0T^{-1}$
R	Raio	$M^0L^1T^0$
R_{min}	Raio da menor partícula	$M^0L^1T^0$
R_i	Raio da partícula i	$M^0L^1T^0$
R_j	Raio da partícula j	$M^0L^1T^0$
R^*	Raio equivalente	$M^0L^1T^0$
R_c	Distância entre o centro da partícula e o ponto de contato da força de adesão	$M^0L^1T^0$
S_n	Rigidez normal	$M^1L^0T^{-2}$
S_t	Rigidez tangencial	$M^1L^0T^{-2}$
s_i	Entropia de mistura local	$M^0L^0T^0$
$S(t)$	Entropia global no tempo t	$M^0L^0T^0$
S_m	Entropia de mistura completa	$M^0L^0T^0$
S_ϕ	Índice de Entropia de mistura	$M^0L^0T^0$
S_∞	índice de entropia de mistura no estado estacionário	$M^0L^0T^0$
x_x	Fração de partículas do tipo x em cada amostra i	$M^0L^0T^0$
t_s	Tempo requerido para atingir o estado estacionário	$M^0L^0T^1$
t_R	Tempo de uma onda de Rayleigh	$M^0L^0T^1$
$\bar{t}$	Tempo teórico de residência	$M^0L^0T^1$

$\overrightarrow{v_n^{rel}}$	Velocidade normal relativa	$M^0 L^1 T^{-1}$
$\overrightarrow{v_t^{rel}}$	Velocidade tangencial relativa	$M^0 L^1 T^{-1}$
v_{Pi}	Volume total de partículas	$M^0 L^3 T^0$
V_{disco}	Volume do disco rotatório	$M^0 L^3 T^0$
V_{lb}	Volume da Ponte Líquida	$M^0 L^3 T^0$
V_{sLi}	Volume líquido na superfície da partícula i	$M^0 L^3 T^0$
V_{sLj}	Volume líquido na superfície da partícula j	$M^0 L^3 T^0$

Símbolos gregos

α	Ângulo	$M^0 L^0 T^0$
β	Coefficiente de amortecimento	$M^1 L^0 T^{-1}$
δ_n	Sobreposição normal	$M^0 L^1 T^0$
δ_t	Sobreposição tangencial	$M^0 L^1 T^0$
η	<i>Holdup</i> dos sólidos	$M^0 L^0 T^0$
θ	Inclinação do disco rotatório	$M^0 L^0 T^0$
θ_c	Ângulo de contato da ponte líquida	$M^0 L^0 T^0$
θ_t	Tempo de residência adimensional	$M^0 L^0 T^0$
μ_s	Coefficiente de atrito estático	$M^0 L^0 T^0$
μ_{spp}	Coefficiente de atrito estático partícula-partícula	$M^0 L^0 T^0$
μ_{spw}	Coefficiente de atrito estático partícula-parede	$M^0 L^0 T^0$
μ_r	Coefficiente de atrito de rolamento	$M^0 L^0 T^0$
μ_{rpp}	Coefficiente de atrito de rolamento partícula-partícula	$M^0 L^0 T^0$
μ_{rpw}	Coefficiente de atrito de rolamento partícula-parede	$M^0 L^0 T^0$
ρ	Densidade	$M^1 L^{-3} T^0$
ρ_p	Densidade da partícula	$M^1 L^{-3} T^0$
σ	Ângulo de partida	$M^0 L^0 T^0$
σ^2	Variância de partículas	$M^0 L^0 T^0$
σ_0^2	Variâncias de partículas em situação de completa segregação	$M^0 L^0 T^0$
σ_r^2	Variâncias de partículas em situação de completa mistura	$M^0 L^0 T^0$
τ	Torque	$M^1 L^2 T^{-2}$
τ_{ij}	Torque entre as partículas i e j	$M^1 L^2 T^{-2}$
ν	Razão de Poisson	$M^0 L^0 T^0$
ν_i	Razão de Poisson da partícula i	$M^0 L^0 T^0$
ν_j	Razão de Poisson da partícula j	$M^0 L^0 T^0$
φ	Esfericidade	$M^0 L^0 T^0$
ω	Velocidade de rotação	$M^0 L^1 T^{-1}$
ω_c	Velocidade de rotação crítica	$M^0 L^1 T^{-1}$
ω_i	Velocidade angular da partícula i	$M^0 L^0 T^{-1}$
$\Delta\gamma$	Energia de contato de superfície	$M^1 L^1 T^{-3}$
γ_i	Tensão superficial da partícula i	$M^1 L^1 T^{-3}$

Ω_{CED}	Densidade de energia de coesão	$M^1L^1T^{-3}$
μ	Viscosidade cinemática do líquido intersticial	$M^0L^2T^{-1}$

RESUMO

Entre os equipamentos utilizados para a granulação, o disco rotatório se destaca por apresentar uma geometria relativamente simples e uma pronunciada ação segregadora por diferença de tamanho de material. Entretanto, não há uma compreensão consolidada acerca da dinâmica das partículas no interior do equipamento. Neste contexto, o presente trabalho teve como objetivo estudar o fenômeno de segregação de partículas por diferenças de tamanho e densidade de material em um disco rotatório por meio de técnicas numéricas e experimentais. Para isso, foram utilizadas partículas de vidro e de soja. Ao comparar os resultados experimentais e numéricos, verificou-se que a modelagem DEM representou adequadamente a dinâmica de segregação no disco, permitindo avaliar a influência do ângulo de inclinação, da velocidade de rotação e do grau de preenchimento nesse fenômeno. Tanto para a segregação por diferença de tamanho, quanto para a segregação por diferença de densidade, foi verificado que todas as condições operacionais apresentaram influência significativa no tempo para se atingir o estado estacionário e na intensidade de segregação. O efeito combinado da diferença de tamanho e de densidade também foi investigado e foi observado que o efeito da diferença de tamanhos é maior do que o efeito da diferença de densidades. Adicionalmente, a abordagem DEM para as forças coesivas foi empregada para modelar a presença de líquido intersticial no leito granular, o que ocorre nos processos de aglomeração a úmido. Na etapa de validação do modelo numérico, a utilização do modelo híbrido composto pelo modelo de capilaridade de Easo, para os contatos partícula-partícula, e pelo modelo SJKR, para os contatos partícula-parede, se mostrou satisfatória, representando adequadamente os resultados experimentais. A presença de umidade ocasionou em mudanças nos regimes de escoamento quando foram consideradas as mesmas velocidades. Por meio de análise de curvas DTR, foi verificado que a velocidade de rotação do disco rotatório teve efeito significativo na distribuição dos tempos de residência e foi identificado o efeito de curto-circuito nos leitos granulares com líquido intersticial. Ao avaliar a intensidade da aglomeração no disco rotatório, foi observado que as frações mássicas de grânulos mais finos formados aumentaram e as dos grânulos maiores diminuíram à medida que a velocidade de rotação foi aumentada.

Palavras-chave: dinâmica de partículas, DEM, segregação de partículas, granulação, forças de coesão.

ABSTRACT

Among the equipment used for granulation, the rotating dish stands out for having a relatively simple geometry and a pronounced size-induced granular segregation. However, there is no consolidated understanding regarding the particle dynamic within the equipment. In this context, the present work aimed to study the segregating phenomenon of particles due to differences in size and material density in a rotating dish through numerical and experimental techniques. For this, glass and soy particles were used as granular material. By comparing the experimental and numerical results, it was verified that the DEM modeling adequately represented the segregation dynamics within the dish, allowing to evaluate the effect of the inclination angle, the rotational speed and the filling degree on this phenomenon. For both size and density-induced segregation, it was found that all operating conditions had a significant influence on the time to reach steady state and on the segregation intensity. The combined effect of size difference and density was also investigated. It was observed that the effect of the difference in granular size is greater than the effect of the difference in density. Additionally, the DEM approach to cohesive forces was used to model the presence of interstitial liquid in the granular bed, which occurs in wet agglomeration processes. In the numerical model validation stage, the use of the hybrid model composed of the Easo capillarity model for particle-particle contacts and the SJKR model for particle-wall contacts proved to be satisfactory, representing adequately the experimental results. The presence of humidity caused changes in flow regimes when the same velocities were considered. Through analysis of DTR curves, it was verified that the rotational speed of the rotating dish had a significant effect on the distribution of residence times and the effect of the short circuit in the granular beds with interstitial liquid was identified. When evaluating the intensity of agglomeration on the rotating dish, it was observed that the mass fractions of finer granules formed increased and those of larger granules decreased as the rotational speed was increased.

Keywords: particle dynamic, DEM, particle segregation, granulation, cohesive forces

CAPÍTULO 1

Introdução

A operação de granulação de finos em partículas maiores é utilizada em diferentes processos industriais, como a produção de fertilizantes, medicamentos e alimentos, metalurgia do pó e pelletização do minério de ferro. O aumento do tamanho do grão modifica as propriedades reológicas do material e pode melhorar a fluidez, aumentar a permeabilidade de gás intersticial entre os grãos, reduzir a quantidade de pós em suspensão e permitir o controle da liberação de ativos (Capes, 1980; Pietsch, 1991).

Esse processo se inicia com a adição de um líquido aglutinante que causará a aglomeração de partículas a partir de núcleos granulares. Equipamentos industriais promovem a granulação por meio de agitação das partículas e colisões entre os grânulos. Destes equipamentos, destaca-se o disco rotatório. Na literatura, o disco rotatório também é conhecido como granulador em disco (Ball, 1959; Chadwick e Bridgwater, 1997; Cleary e Sinnott, 2008; Obraniak e Lawinska, 2018), disco inclinado (Capes, 1980; Chadwick, Rough e Bridgwater, 2005) e panela granuladora (Azrar *et al.*, 2016; Chai *et al.*, 2017; Fujihashi *et al.*, 2013).

Discos rotatórios são equipamentos que consistem basicamente em uma estrutura cilíndrica inclinada que gira em torno de seu próprio eixo. Em grande escala, são empregados na granulação de minerais, fertilizantes e de matérias-primas da indústria do cimento. Recentemente, há também uma maior utilização deste equipamento na produção em pequena e média escala de produtos de maior valor agregado, tais como detergentes e produtos farmacêuticos (Chadwick, Rough e Bridgwater 2005).

A escolha do disco rotatório para a granulação se dá por sua pronunciada ação segregadora por tamanho de material. O comportamento fluidodinâmico no disco faz com que as partículas maiores sejam preferencialmente descarregadas, permitindo que as partículas menores permaneçam no equipamento por mais tempo, possibilitando a aglomeração e consequente aumento de tamanho. Assim, o produto tem uma distribuição estreita de tamanho (Capes, 1980; Litster e Ennis, 2004). Além disso, o uso do disco é atrativo em termos de custo-benefício, tendo em vista os baixos custos de construção e operação.

Apesar dos granuladores em disco serem extensivamente estudados desde as décadas de 1950 e 1960, apenas análises empíricas qualitativas foram realizadas, uma vez que o foco

era a definição de melhores condições de granulação (Chadwick e Bridgwater, 1997). Há poucas informações quantitativas acerca do escoamento dos sólidos no interior do equipamento e a escassez é ainda maior quando se trata dos fenômenos de segregação e de aglomeração.

Como ferramenta complementar aos ensaios experimentais, os modelos numéricos podem auxiliar na compreensão do escoamento de materiais granulares, superando as limitações impostas por questões de segurança de operação e de custo na confecção de plantas piloto. Além disso, possibilitam a visualização de fenômenos que ocorrem em nível microscópico. O Método dos Elementos Discretos (DEM) tem sido amplamente empregado em estudos envolvendo o comportamento de materiais granulares. Esse método aplica um balanço de forças em cada partícula no sistema, levando em consideração as interações partícula-partícula e partícula-parede (Cundall e Strack, 1980; Tsuji, Tanaka e Ishida, 1992).

A maior parte da investigação numérica sobre escoamentos granulares na literatura tem-se centrado em sistemas não coesivos. Os estudos que envolvem o fluxo de materiais granulares coesivos não são tão comuns. De fato, o desenvolvimento de modelos DEM que incluem forças coesivas é relativamente recente e ainda tem sido objeto de estudo para aprimoramento (Kosaku *et al.*, 2023; Shi *et al.*, 2022; Vo, Nguyen e Nguyen, 2022; Eidevåg *et al.*, 2020). O emprego desses modelos para o estudo do disco rotatório pode auxiliar no entendimento do processo de granulação, uma vez que ele ocorre na presença de umidade.

Diante das informações expostas, a seguir são apresentados os objetivos do presente estudo.

1.1 Objetivos

Este estudo tem como objetivo geral investigar, experimentalmente e por meio de técnicas numéricas, os fenômenos de segregação e de aglomeração no interior de discos rotatórios. Tem-se como objetivos específicos:

- Analisar qualitativa e quantitativamente os fenômenos de segregação por diferenças de tamanho e densidade de material no disco rotatório;
- Aplicar e validar o Método dos Elementos Discretos (DEM) para caracterizar esses fenômenos;
- Avaliar o efeito da variação das condições operacionais e das propriedades granulares sobre a segregação;

- Investigar numericamente o escoamento do leito granular no disco rotatório operando em regime contínuo;
- Aplicar a abordagem DEM para investigar a ação das forças coesivas quando há líquido intersticial no leito granular e avaliar o efeito das condições operacionais e das propriedades desse líquido na aglomeração de partículas.

Para uma melhor organização dessa tese, os assuntos abordados são apresentados em capítulos. O Capítulo 2 se refere ao estudo do fenômeno de segregação no disco rotatório e apresenta uma descrição do equipamento e da modelagem DEM. Em seguida, o Capítulo 3 se refere ao estudo numérico do escoamento e da aglomeração de partículas no equipamento.

CAPÍTULO 2

Segregação Granular no Disco Rotatório

2.1 Introdução

Sistemas particulados estão presentes em uma grande variedade de indústrias. Estima-se que cerca de 60% de todos os produtos fabricados requerem algum tipo de processamento de partículas (Bridgwater, 2003). Em muitos casos, os materiais particulados devem ser uniformemente misturados para que se obtenham produtos com grau de qualidade adequado, sendo que a ocorrência do fenômeno de segregação reduz o grau de mistura. Entretanto, em outras aplicações, como é o caso do uso do disco rotatório para granulação, a ação segregadora é de interesse industrial.

Diversos estudos tratam da influência das propriedades granulares e das condições operacionais sobre a mistura de materiais em tambores rotatórios (Brandão *et al.*, 2020; Liao, 2019; He *et al.*, 2019; Yamamoto, Ishihara, e Kano, 2016; Bridgwater, 2012). Para o disco rotatório, em particular, a literatura é escassa e, em grande parte, se restringe a análises qualitativas (Chadwick, Rough e Bridgwater, 2005; Cleary e Sinnott, 2008; Ward e Hourigan, 2012).

Com a finalidade de se obter uma maior compreensão a respeito do fenômeno de mistura no interior de discos rotatórios, neste capítulo foi avaliada a influência das diferenças das propriedades do material granular (tamanho e densidade), assim como das condições de operação (ângulo de inclinação, grau de preenchimento e velocidade de rotação) sobre o fenômeno de segregação de partículas em um disco rotatório. Para tanto, foram realizados estudos experimentais e numéricos.

2.2 Revisão Bibliográfica

2.2.1 Disco Rotatório

O disco rotatório consiste em um prato rotativo de diâmetro D e altura h , que pode operar com inclinação θ de 0° a 90° em relação ao plano horizontal (Figura 2.1).

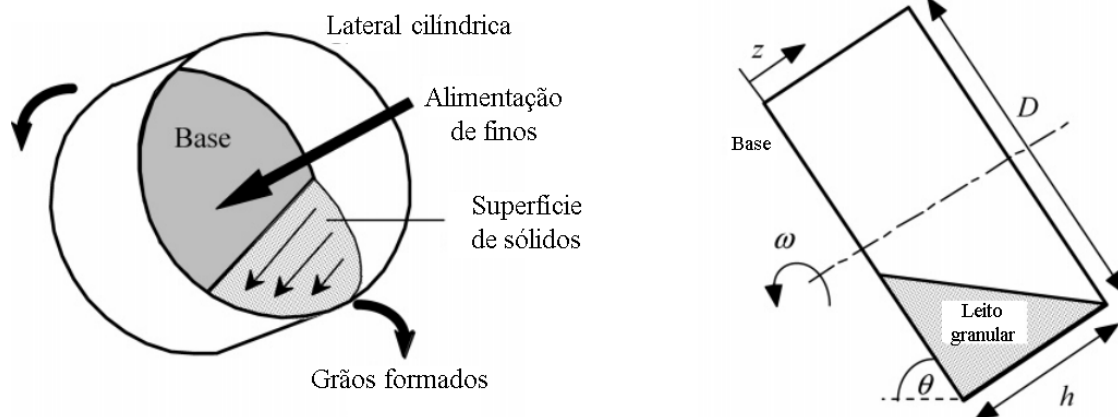


Figura 2.1: Diagrama esquemático do disco rotatório (Adaptado de Chadwick *et al.*, 2005)

Quando comparado aos tambores rotatórios, o disco apresenta maior ação classificatória (Capes, 1980). O comportamento do fluxo granular nesse equipamento faz com que as partículas maiores sejam direcionadas às bordas, onde são descarregadas, enquanto as partículas menores são retidas para um maior crescimento em se tratando do processo de granulação (Figura 2.2).

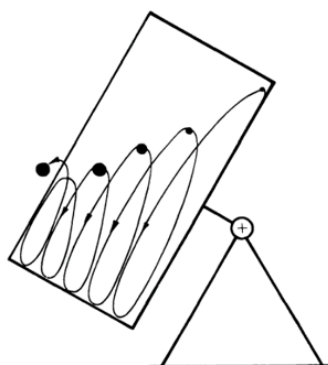


Figura 2.2: Fluxo de material em um disco rotatório indicando a segregação e descarga das partículas de maior tamanho (Capes, 1980)

Regimes de escoamento

Apesar da simplicidade da geometria, o comportamento granular no interior do disco rotatório é complexo. O movimento do leito de partículas pode apresentar até seis regimes de escoamento que são classificados em: deslizamento, avalanche, rolamento, cascadeamento, catarateamento e centrifugação (Figura 2.3). A transição entre os regimes é influenciada pelo número de Froude, o grau de preenchimento, bem como as propriedades das partículas e do material do equipamento. Definido pela Equação 2.1, o número de Froude (Fr) é a razão entre as forças centrífuga e gravitacional.

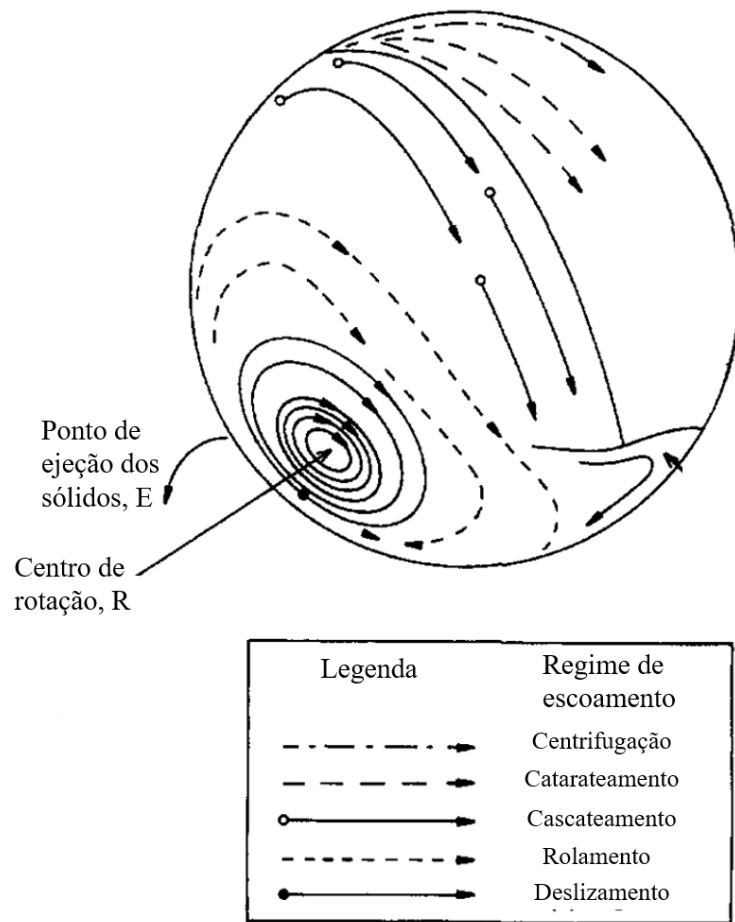


Figura 2.3: Regimes de escoamento em um disco rotatório (Adaptado de Chadwick e Bridgwater, 1997).

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

em que ω , R e g são a velocidade angular de rotação, o raio do equipamento e a aceleração da gravidade, respectivamente.

O regime de deslizamento é caracterizado por um leito praticamente estático, dada à baixa velocidade de rotação e baixos valores de atrito entre o leito granular e a parede do equipamento. Por apresentar pouca movimentação das partículas, esse regime não apresenta aplicação industrial. Para evitá-lo, é comum a utilização de superfícies de rugosidade elevada.

Com o aumento da velocidade de rotação e/ou da rugosidade da parede, ocorre o regime de avalanche, o qual apresenta dois ângulos de repouso. Esse regime não é apresentado na Figura 2.3. O leito de partículas é erguido como um corpo rígido até um ângulo de repouso superior e se desprende da superfície, caindo em avalanche até um ângulo

de repouso inferior. Valores de velocidades de rotação mais elevados diminuem a variação entre esses ângulos, atingindo um fluxo uniforme, iniciando o regime de rolamento (Hlosta *et al.*, 2020).

O regime de rolamento apresenta duas regiões: passiva e ativa. Na primeira, as partículas movimentam-se como um corpo sólido no mesmo sentido da rotação do eixo. Na segunda, as partículas apresentam maior dinâmica e se movimentam em sentido oposto (Dubé *et al.*, 2013; Santos *et al.*, 2013). De acordo com Chadwick e Bridgwater (1997) e Cleary e Sinnott (2008), o processo de granulação é favorecido nesse regime, dado o rolamento das partículas e o elevado número de contatos entre elas.

Ao aumentar mais a velocidade de rotação, o leito granular começa a apresentar uma curvatura, semelhante a um “S”, indicando a transição entre os regimes de rolamento e cascadeamento. É possível observar, também, que há uma região na superfície onde os sólidos se movimentam com o centro de rotação R e uma região adjacente à lateral do disco, em que os sólidos deslizam, se movimentando com velocidade menor que o disco (Chadwick e Bridgwater, 1997). Assim como o regime de rolamento, o regime de cascadeamento é amplamente utilizado no processo de granulação por também apresentar número de contatos significativos entre as partículas (Capes, 1980; Walker, 2007).

O regime de catarateamento é verificado quando as partículas começam a se desprender do leito granular, sendo lançadas no espaço vazio do interior do equipamento. Nesse regime, a força das colisões pode ser muito intensa, ocasionando a degradação do aglomerado formado e prejudicando o processo de granulação (Pietsch, 1991).

Por fim, tem-se o regime de centrifugação, no qual as partículas aderem parcialmente ou totalmente à parede do cilindro. Neste regime, as forças gravitacional e centrífuga se equilibram. Lima (2021) avaliou a transição dos regimes de escoamento em um disco rotatório por análise de imagens e análise acústica. O autor propôs incluir o grau de preenchimento do equipamento no modelo de Papadakis e Bombled (1961) para o cálculo da velocidade crítica de centrifugação (em rpm), resultando na Equação 2.2.

$$\omega_c = 42,3 \sqrt{\frac{\text{sen}(\theta) - \text{sen}(\varphi)}{D\sqrt{f}}} \quad (2.2)$$

em que φ é o ângulo de repouso dinâmico do leito de partículas e D , θ e f são o diâmetro, a inclinação e o grau de preenchimento do disco rotatório, respectivamente.

2.2.2 Método dos Elementos Discretos (DEM)

O Método dos Elementos Discretos (DEM, do inglês *Discrete Element Method*) tem sido amplamente empregado em estudos de escoamento granular em tambores rotatórios (Rong *et al.*, 2020; Kumar *et al.*, 2015; Ma e Zhao, 2017), nos processos de mistura e segregação (He *et al.*, 2019; Zhang *et al.*, 2018; Alchikh-Sulaiman *et al.*, 2016), de granulação (Barrasso *et al.*, 2014; Kulju *et al.*, 2016; Trung Vo *et al.*, 2019), entre outros (Cui *et al.*, 2020; Peters *et al.*, 2016).

O DEM calcula as trajetórias de um número finito de partículas modelando suas interações com o leito granular e com as superfícies. Cada contato é avaliado e o movimento individual dessas partículas é atualizado a cada passo de tempo (“*time-step*”). Para tanto, a segunda lei de Newton é empregada, fornecendo a trajetória da partícula como resultado das forças que atuam sobre ela. As equações para os movimentos de translação e rotação de uma partícula i com massa m_i e momento de inércia I_i podem ser escritas como (Cundall e Strack, 1979):

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_n^{ij} + \mathbf{F}_t^{ij}) + m_i \mathbf{g} \quad (2.3)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_j (R_i \times \mathbf{F}_t^{ij}) + \boldsymbol{\tau}_{rij} \quad (2.4)$$

sendo $\mathbf{v}_i$, $\boldsymbol{\omega}_i$ e R_i a velocidade linear, a velocidade angular e o raio da partícula, respectivamente. $\mathbf{F}_n^{ij}$, $\mathbf{F}_t^{ij}$ e $\boldsymbol{\tau}_{rij}$ são as forças normais e tangenciais e o torque entre as partículas i e j , respectivamente.

A estratégia adotada no DEM consiste em verificar a ocorrência de contatos da partícula i a partir de sua posição. As forças atuantes sobre a partícula, como consequência dos contatos, são calculadas por meio de modelos adequados. As equações dos movimentos são resolvidas e, então, a posição e a velocidade da partícula i são atualizadas.

Os modelos DEM de contato entre duas partículas são classificados em duas abordagens: a de esfera rígida e a de esfera macia. Na primeira, as colisões são consideradas binárias e instantâneas, desconsiderando, assim, forças significativas entre as partículas. Normalmente, essas suposições são válidas apenas para fluxos dispersos. Por outro lado, os modelos de esferas macias assumem que as partículas se deformam mutuamente ao entrar em contato. Cundall e Strack (1979) propuseram uma aproximação para descrever essa

deformação, possibilitando a estimativa da força originada pelo contato. Tal aproximação assume a interpenetração dos corpos, representada pela sobreposição δ , que tem magnitude consideravelmente menor que o tamanho das partículas. Um esquema da colisão entre duas partículas esféricas é mostrado na Figura 2.4, em que δ_n é a sobreposição normal e δ_t é a sobreposição tangencial. Uma característica dos modelos de esfera macia é a sua capacidade de contabilizar múltiplos contatos entre partículas, tornando-os adequados para sistemas com alta concentração granular e longos períodos de contato (Zhu e Yu, 2006).

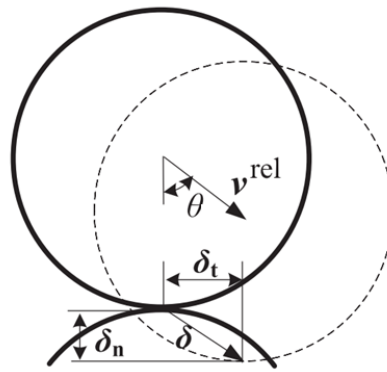


Figura 2.4: Esquema da colisão entre duas partículas esféricas (Adaptado de Chen *et al.*, 2017)

Para determinar as forças e os torques resultantes do contato entre partículas, o método de elementos discretos adota modelos ou equações simplificadas. Em geral, os modelos de força de contato são função da magnitude das sobreposições e das velocidades das partículas envolvidas no contato. Esses modelos são classificados como linear e não-linear.

O modelo linear mais empregado é o modelo proposto por Cundall e Strack (1979) (*linear spring-dashpot model*). Ele se caracteriza por uma analogia a um sistema mecânico mola-amortecedor, em que a mola representa a deformação elástica devido ao contato, enquanto o amortecedor representa a dissipação viscosa (Zhu *et al.*, 2007). Esse modelo é denominado linear porque propõe uma relação linear entre a força normal e a sobreposição δ_n (Malone e Xu 2008).

Já o modelo não-linear mais utilizado é uma combinação da teoria de Hertz (1881), para descrever o contato elástico entre duas esferas na direção normal, com a teoria de Mindlin e Deresiewicz (1953), que modela a força tangencial (Cundall, 1988). No modelo não-linear de Hertz-Mindlin, as forças de contato normal e tangencial são calculadas pelas Equações 2.5 e 2.6, respectivamente. Em ambas, o primeiro termo é a componente da

deformação elástica (sobrescrito h), enquanto o segundo termo se refere à força de amortecimento (sobrescrito d), ou seja, da dissipação de energia.

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{F}_n^h + \mathbf{F}_n^d = \frac{4}{3}E^*\sqrt{R^*}\delta_n^{3/2} - 2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta\sqrt{S_n m^*}\mathbf{v}_n^{rel} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{F}_t = \mathbf{F}_t^h + \mathbf{F}_t^d = -\delta_t S_t - 2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta\sqrt{S_t m^*}\mathbf{v}_t^{rel} \quad (2.6)$$

sendo $\mathbf{v}_n^{rel}$ a velocidade normal relativa, $\mathbf{v}_t^{rel}$ é a velocidade tangencial relativa e β é o coeficiente de amortecimento, dado pela Equação 2.7, como função do coeficiente de restituição da partícula e_p .

$$\beta = \frac{\ln e_p}{\sqrt{\ln^2 e_p + \pi^2}} \quad (2.7)$$

A lei de Coulomb limita a força tangencial possível, sendo seu máximo dado por:

$$\mathbf{F}_{t,max}^d = \mu_s \mathbf{F}_n \quad (2.8)$$

em que μ_s é o coeficiente de atrito estático.

As variáveis S_n e S_t são a rigidez normal e a rigidez tangencial, respectivamente. Elas podem ser determinadas pelas Equações 2.9 e 2.10:

$$S_n = 2E^*\sqrt{R^*\delta_n} \quad (2.9)$$

$$S_t = 8G^*\sqrt{R^*\delta_n} \quad (2.10)$$

A massa m^* , o raio R^* , o módulo de Young E^* e o módulo de cisalhamento G^* equivalentes podem ser determinadas pelas Equações de 2.11 a 2.14:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \quad (2.11)$$

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (2.12)$$

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - v_i^2}{E_i} + \frac{1 - v_j^2}{E_j} \quad (2.13)$$

$$\frac{1}{G^*} = \frac{1 - \nu_i}{G_i} + \frac{1 - \nu_j}{G_j} \quad (2.14)$$

em que ν é a razão de Poisson das partículas; G e E se relacionam por meio da Equação 2.15. Portanto, é necessária a definição de apenas um destes dois parâmetros.

$$G = \frac{E}{2\nu + 1} \quad (2.15)$$

O coeficiente de atrito de rolamento, μ_r , importante parâmetro a ser considerado quando se tem partículas esféricas, é incluído no cálculo do torque (Equação 2.16):

$$\tau_{rij} = -\mu_r \mathbf{F}_n R_i \boldsymbol{\omega}_i \quad (2.16)$$

Passo de tempo de integração

De acordo com Cundall e Strack (1979), o passo de tempo utilizado na integração das equações de movimento deve ser escolhido de forma que seja suficientemente pequeno a fim de garantir que as perturbações não se propaguem além das partículas vizinhas imediatas.

O impacto das colisões entre as partículas gera uma onda que se propaga ao longo dos corpos sólidos, denominada onda de Rayleigh. O tempo de uma onda de Rayleigh (t_R) é determinado pela Equação 2.17. Como critério para a definição do intervalo de integração, Potyondy e Cundall (2004) sugeriram que o passo de tempo corresponda a 20% de t_R , a fim de garantir estabilidade dos cálculos numéricos.

$$t_R = \frac{\pi r_{min} \sqrt{\frac{\rho}{G}}}{(0,1613 \cdot \nu + 0,8766)} \quad (2.17)$$

em que r_{min} é o raio da menor partícula no sistema e ρ é a densidade da partícula.

Parâmetros DEM

A acurácia do DEM em prever o comportamento de leitos granulares depende da qualidade do modelo de contato empregado e da correta seleção dos parâmetros de entrada.

Os parâmetros de entrada se relacionam com as propriedades das partículas e as interações entre elas e com superfícies. A metodologia para se medir tais parâmetros ainda não é consolidada.

Coetzee (2017) ressaltou que os parâmetros DEM muitas vezes não são medidos e os valores são assumidos sem justificativa. Rackl e Hanley (2017) ponderam que nem sempre é possível medir experimentalmente esses parâmetros, principalmente quando as partículas têm formato irregular. Além disso, em alguns casos, essa medição não assegura que o modelo reproduza exatamente o comportamento granular *bulk* (Coetzee e Nel, 2014). Há muitos estudos na literatura que investigaram e propuseram melhorias nas metodologias de medição desses parâmetros.

O coeficiente de restituição está relacionado com a conservação da energia mecânica após uma colisão. Os valores do coeficiente podem variar entre 0 e 1, sendo 0 para caracterizar uma colisão perfeitamente inelástica e 1 para uma colisão perfeitamente elástica. Brandão (2019) determinou o coeficiente de restituição utilizando o aparato experimental apresentado na Figura 2.5. Ao desligar a bomba de vácuo, a partícula é abandonada em queda livre a uma altura fixa (h_1), colidindo diretamente com chapas de teste. Os valores dos coeficientes de restituição foram determinados a partir da Equação 2.18.

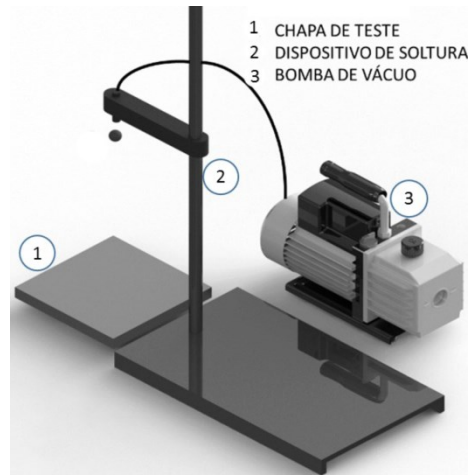


Figura 2.5: Aparato experimental para a determinação do coeficiente de restituição (Brandão, 2019).

$$e_p = \sqrt{\frac{h_1}{h_2}} \quad (2.18)$$

em que h_1 e h_2 são a altura inicial e a altura atingida após o choque na chapa de teste, respectivamente. O autor verificou que o coeficiente de restituição se mostrou dependente da espessura e do tipo de material das chapas de teste. Utilizando o mesmo aparato experimental,

Machado (2017) observou que, ao aumentar o diâmetro da partícula, ocorreu uma diminuição do coeficiente de restituição.

O coeficiente de atrito estático é o atrito oposto ao movimento relativo iminente entre corpos. Ele atua ao longo dos pontos de contato entre duas superfícies. Ao reportar os estudos de Leonardo da Vinci, Hutchings (2016) salientou que os valores para o coeficiente de atrito estático se encontram comumente na faixa de 0,1 a 2,0.

O atrito de rolamento é definido como a resistência ao movimento de rolamento de partículas esféricas. Ele decorre da dissipação de energia durante o contato e do comportamento plástico dos sólidos. O coeficiente de atrito de rolamento tem ordem de grandeza de duas a três vezes menor que o coeficiente de atrito estático (Matuttis e Chen, 2014).

Lima (2021) mediu experimentalmente os coeficientes de atrito estático e de rolamento de esferas de vidro e grãos de soja. O coeficiente de atrito estático (μ_s) foi determinado seguindo a metodologia do plano inclinado proposta pela ASTM G115 - 10 (2013), cujo aparato experimental é ilustrado na Figura 2.6. Dois pistões hidráulicos elevam gradativamente o plano sem perturbação. O μ_s foi determinado a partir da tangente do ângulo (α) no qual as partículas começaram a deslizar (Equação 2.19). O coeficiente de atrito de rolamento (μ_r) foi medido por meio de um dispositivo de soltura apoiado em uma superfície plana na qual a partícula é submetida ao movimento de rolamento (ASTM G194 - 08 2013). A Figura 2.7 ilustra esse dispositivo, em que a partícula é solta na posição 1. A distância D_p percorrida pela partícula da posição 2 até entrar em repouso (posição 3) é medida. O coeficiente de atrito de rolamento foi obtido pela razão da altura do dispositivo h_p pela distância percorrida pela partícula (Equação 2.20).

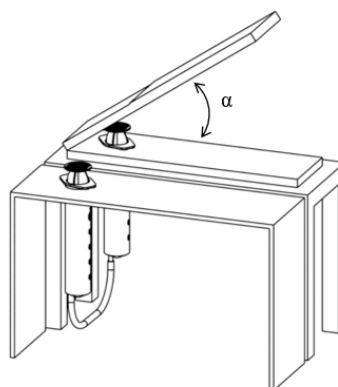


Figura 2.6: Aparato experimental para a determinação do coeficiente de atrito estático (Lima, 2021).

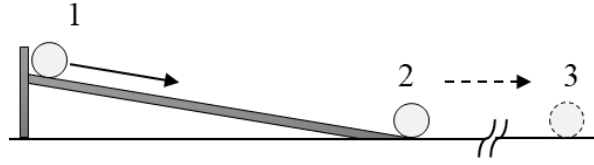


Figura 2.7: Dispositivo de soltura utilizado na medição do coeficiente de atrito de rolamento (Lima, 2021).

$$\mu_s = \tan \alpha \quad (2.19)$$

$$\mu_r = \frac{h_p}{D_p} \quad (2.20)$$

Como alternativa para a determinação do coeficiente de atrito estático, Brandão (2019) utilizou um sistema “treno”. O aparato experimental consistia em uma superfície de teste sobre a qual era posicionado um corpo rígido (1) com partículas coladas na base. Um corpo de massa variável (2) era interligado ao corpo rígido por meio de um sistema de roldana fixa. Por adição de um fluido, a massa do corpo (2) era aumentada até que o corpo (1) entrasse em movimento. O coeficiente de atrito estático foi determinado pela razão entre a massa do corpo (2) e a massa do corpo (1). Ambos os autores encontraram maiores valores de coeficiente de atrito estático para os grãos de soja em relação aos outros materiais, uma vez que apresenta superfície com maior rugosidade.

Coetzee (2017) e Marigo e Stitt (2015) destacaram que, mesmo que os valores dos parâmetros sejam medidos de maneira direta e acurada, o modelo DEM pode não representar adequadamente o comportamento *bulk* das partículas. Para contornar essa limitação, uma estratégia comumente utilizada é a obtenção dos parâmetros DEM por meio de calibração. Nesta abordagem, os valores dos parâmetros são alterados iterativamente até que a resposta predita pelo modelo numérico corresponda ao valor da resposta medida experimentalmente.

Um potencial problema da abordagem *bulk* é que a resposta numérica pode ser influenciada por mais de um parâmetro, indicando que os valores obtidos pelos parâmetros podem não ter significado físico. Ademais, mais de uma combinação de valores de parâmetros pode resultar no mesmo comportamento granular. Roessler *et al.* (2019) sugeriram utilizar uma combinação de diferentes respostas em um mesmo teste para evitar a ambiguidade dos parâmetros DEM.

No estudo da dinâmica de sólidos em tambores rotatórios, o método de calibração DEM é comumente empregado. Cunha *et al.* (2016) empregaram um Planejamento Composto Central (PCC) para quantificar o efeito dos parâmetros DEM no ângulo de repouso dinâmico de um tambor rotatório operando com uma mistura de grãos de soja e sementes de acerola. Os resultados numéricos foram comparados com os experimentais e a melhor combinação de parâmetros foi identificada. Brandão *et al.* (2019) utilizaram a mesma abordagem para identificar os parâmetros DEM de esferas de vidro com diâmetro de 6,35 mm. Os autores, no entanto, encontraram mais de uma combinação de parâmetros que correspondia ao ângulo de repouso dinâmico experimental. O índice de Lacey, uma métrica para se medir a extensão da mistura de sólidos, que será definida em detalhes na próxima seção, foi empregado como resposta adicional para a determinação do conjunto selecionado de parâmetros.

2.2.3 Segregação granular

O fenômeno de segregação de partículas é complexo e ainda não é bem compreendido. Uma mistura previamente homogênea em um equipamento pode segregar em bandas de pequenas e grandes partículas nas direções radial e axial (Remy, 2010). O estado final de mistura é função de variáveis relacionadas às características do material granular e às condições operacionais, as quais são sumarizadas e agrupadas de acordo com Fan *et al.* (1970) na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Variáveis que influenciam a mistura granular

Características do material particulado	Tamanho, forma, densidade, teor de umidade, coeficientes de atrito e restituição, friabilidade, coesividade, escoabilidade e rugosidade superficial
Características do equipamento	Diâmetro, comprimento, revestimento interno e material de construção
Condições operacionais	Proporção de partículas, grau de preenchimento, disposição inicial, velocidade de rotação, tempo de residência, método e taxa de adição de material

Os primeiros estudos foram focados na identificação dos mecanismos de segregação. Mosby *et al.* (1996) e Silva *et al.* (2000) sugeriram como mecanismos de segregação em

sistemas particulados: peneiramento, percolação, trajetória, rolamento, deslocamento, aglomeração, incorporação, cisalhamento e efeitos do ângulo de repouso, de correntes de ar e de fluidização. Essa classificação se relaciona mais às causas da segregação do que aos mecanismos em si. Hogg (2009), Poux *et al.* (1991) e Harnby (1967) propuseram uma abordagem mais geral, na qual a segregação ocorre pelos mesmos mecanismos que a homogeneização descritos por Lacey (1943). Dessa forma, o fenômeno de segregação ocorre por difusão, convecção e cisalhamento.

O mecanismo de segregação por difusão é a distribuição de partículas sobre uma superfície recém-formada e se relaciona com o movimento aleatório de partículas individuais no interior do leito (Lacey, 1954; Hogg, 2009). Esse processo pode ser modelado por equações análogas às aquelas aplicadas em sistemas multicomponentes, como a segunda Lei de Fick (Brandão, 2019). Diversos trabalhos verificaram mecanismos difusivos ou sub-difusivos na direção axial de tambores rotatórios (Taberlet *et al.*, 2006; Fischer *et al.*, 2009; Khan e Morris, 2005).

A segregação convectiva consiste na transferência de grupos de partículas adjacentes de um local para outro, decorrente de uma velocidade característica. No caso de tambores e disco rotatórios, por exemplo, a velocidade característica é a velocidade de rotação. Cantelaube *et al.* (1997) estudaram experimentalmente a cinética de segregação de um tambor rotatório bidimensional e concluíram que o mecanismo de convecção era predominante. A escolha do equipamento permitiu avaliar a segregação radial à parte da segregação axial.

Finalmente, a segregação por cisalhamento ocorre devido a planos de deslizamento formados no interior do leito granular. Ela acontece geralmente em zonas onde há elevada velocidade das partículas, porém na região mais interna no leito, apresentando, assim, características intermediárias à segregação difusiva e à convectiva (Brandão, 2019; Lacey, 1943; Hogg, 2009).

Dada a configuração do disco rotatório, um equipamento cilíndrico inclinado que gira em torno de seu próprio eixo, é possível que todos os mecanismos de segregação descritos estejam presentes.

Avaliação da Segregação - Índices e Amostragem

Para quantificar o grau de homogeneidade de uma mistura de sólidos, são normalmente utilizados índices de mistura ou de segregação. Um índice de mistura adequado

deve representar, tanto quanto possível, as características especificadas da mistura final, deve ser independente dos processos de mistura e facilmente determinado (FAN et al., 1970).

Há vasta disponibilidade de índices na literatura. A maioria deles se baseia em análises estatísticas, mas métodos como a tomografia de emissão de pósitrons e abordagens cinéticas também são empregados (Chou, *et al.*, 2017; FAN *et al.*, 1970). Bhalode e Ierapetritou (2020) classificaram os índices em três grupos: índices baseados na variância, no número de contatos e nas distâncias das partículas no leito granular.

Um dos índices mais antigos baseados na variância é descrito por Lacey (1943):

$$M = \frac{\sigma_0^2 - \sigma^2}{\sigma_0^2 - \sigma_r^2} \quad (2.21)$$

em que σ^2 é a variância da concentração de um determinado tipo de partículas no sistema analisado, σ_0^2 e σ_r^2 são as variâncias de partículas em situação de completa segregação e completa mistura, respectivamente. Trabalhos recentes obtiveram resultados satisfatórios utilizando esse índice em diferentes equipamentos (Brandão *et al.*, 2020; Liu, *et al.*, 2019; Cai e Zhao, 2020; He *et al.*, 2019; Gui *et al.*, 2018; Wen *et al.*, 2015). Zhang *et al.* (2018) ponderaram que a Equação 2.21 não pode ser aplicada para sistemas bidispersos em tamanho. Visando contornar essa limitação, Chandratilleke *et al.* (2010) propuseram o índice de mistura de escala de partículas (PSMI, em inglês), baseado no índice de Lacey:

$$M = \frac{S_0^2 - S^2}{S_0^2 - S_r^2} \quad (2.22)$$

em que a variância de mistura S^2 é definida por:

$$S^2 = \sum_{i=1}^k \frac{N_i}{N} \left(\frac{n_i}{N_i} - P \right)^2 \quad (2.23)$$

A variância de um sistema completamente segregado é:

$$S_0^2 = P(1 - P) \quad (2.24)$$

E a variância de um sistema perfeitamente misturado é:

$$S_r^2 = P(1 - P)/N \quad (2.25)$$

em que P é a proporção total de um tipo de partícula, k é o número total de células de mistura, n_i é o número de um tipo de partículas na célula i , N_i é o número de partículas totais na célula i e N é o número médio de partículas nas células.

Estudos que contemplam sistemas polidispersos (Deng *et al.*, 2021; Finnie *et al.*, 2005; Remy *et al.*, 2011; Arntz, 2008) empregaram um índice baseado na entropia de mistura. Por se relacionar à mecânica estatística, esse índice também contempla a natureza aleatória dos fenômenos de mistura e segregação. A entropia de mistura local s_i em cada amostra i é calculada usando a expressão de Boltzmann (Shannon, 1948):

$$s_i = x_a \ln x_a + x_b \ln x_b \quad (2.26)$$

sendo x_x a fração de partículas do tipo x em cada amostra i . A entropia local é considerada como sendo nula quando não há nenhuma partícula ou há apenas um tipo de partícula. Para o cálculo da entropia global no tempo t , as entropias locais são ponderadas pelo número de partículas n_i em cada uma das amostras:

$$S(t) = \sum_{i=1}^N s_i(t) n_i(t) \quad (2.27)$$

A entropia global é normalizada em relação à entropia global do sistema perfeitamente misturado, S_m . Esse estado de referência é calculado executando o procedimento acima (Equações 2.26 e 2.27) em conjuntos de sistemas criados de forma aleatória, totalmente misturados. Desta forma, o índice de segregação S_ϕ é dado pela Equação 2.28. Ele apresenta dois extremos: valor zero para uma mistura totalmente segregada e aumenta para uma unidade no caso de completa homogeneidade.

$$S_\phi = \frac{S(t)}{S_m} \quad (2.28)$$

Entre os índices baseados no número de contatos, se destacam o índice de segregação (IS) e o número de coordenação (NC), definidos pelas Equações 2.29 (Marigo *et al.*, 2012) e 2.30 (Carter, 1978), respectivamente.

$$IS = \frac{C_{AA}}{C_{AA} + C_{AB}} + \frac{C_{BB}}{C_{BB} + C_{AB}} \quad (2.29)$$

$$NC = \frac{C_{AB}}{C_{AA} + C_{BB}} \quad (2.30)$$

em que C_{AB} é o número de contatos entre as partículas A e B, C_{AA} e C_{BB} são o número de contatos entre as partículas A e as partículas B, respectivamente.

Ambos os índices requerem a medição dos contatos entre as partículas dentro do sistema para a avaliação da mistura. Essas informações são obtidas exclusivamente por meio de simulações DEM ou quando é possível o rastreamento da trajetória de todas as partículas experimentalmente.

A terceira categoria de índices se baseia na avaliação da distância entre as partículas para a medição do grau da mistura. Esta categoria inclui o método NDM (sigla em inglês para método da distância entre vizinhos), definido pela Equação 2.31. Ele avalia a distância entre as partículas vizinhas mais próximas em função do tempo.

$$NDM = \frac{\sum_{N_p} d_{ij} - d_p}{\sum_{N_r} d_{ik} - d_p} \quad (2.31)$$

em que d_{ij} corresponde à distância centro a centro entre pares de partículas vizinhas i e j , d_{ik} corresponde à distância centro a centro entre os pares de partículas selecionados aleatoriamente i e k , d_p corresponde ao diâmetro da partícula, N_p é o número de pares de vizinhos mais próximos e N_r é o número de pares de partículas selecionados aleatoriamente.

A escolha de um índice de mistura apropriado deve levar em consideração as características do material (tamanho, número e tipos de partículas) e o escopo da avaliação da mistura para que seja escolhida corretamente a escala exigida. Bhalode e Ierapetritou (2020) ressaltaram que a aplicabilidade dos índices baseados no número de contatos e na distância entre as partículas se restringe a sistemas granulares com partículas de iguais tamanhos.

Além da escolha do índice de mistura ou segregação, o método de amostragem bem como o tamanho e o número de amostras devem ser levados em consideração. Por isso, nos tópicos a seguir são discutidas, sucintamente, essas variáveis.

a) Método de amostragem

A escolha de uma técnica de amostragem depende das características do equipamento, da mistura e da natureza das partículas. São métodos comumente utilizados:

i) Amostragem por sonda: uma haste contendo um orifício é inserida no interior do leito granular. É então realizada a coleta das partículas e o número e a concentração de cada uma

delas são avaliados na amostragem. Esta haste é projetada de modo a minimizar perturbações no escoamento. Um equipamento de amostragem mais complexo foi descrito por Bridgwater (2012). Ele consiste em um primeiro tubo cilíndrico com uma base cônica com três furos feitos em uma linha ao longo da parede no sentido axial, permitindo a coleta de amostras em três regiões distintas do equipamento.

ii) Fluxo de saída: comumente aplicado para equipamentos que operam continuamente, as amostras são avaliadas na saída do misturador em um intervalo de tempo fixo. Assim, o perfil de concentração é obtido. A avaliação da segregação é indireta, dada pela identificação de variações (Chadwick *et al.*, 2005).

iii) Subdivisão completa da mistura: todo o leito é subdividido e a variação de concentração em cada célula é avaliada estatisticamente. Essa medida é dependente do dimensionamento das células, exigindo, portanto, que ele seja escolhido adequadamente. A seleção de uma malha mais grossa pode negligenciar efeitos de mistura/segregação pontuais, ao passo que uma malha mais refinada pode sobre-estimar erroneamente a segregação, devido ao menor número de partículas presentes em cada célula. Arntz *et al.* (2008) e Remy *et al.* (2011) sugeriram que a dimensão de cada lado das células seja de $4d_p$, em que d_p é o diâmetro da menor partícula, a fim de que cada célula contenha, em média, de 45 a 50 partículas.

b) Tamanho da amostra

O tamanho da amostra tem considerável influência na determinação do índice de segregação. Bridgwater (2012) sugeriu que o tamanho da amostra é motivo de questionamento em muitos trabalhos na literatura. Não há ainda nenhum método sistemático para determinar o tamanho ideal da amostra (Brandão, 2019). Uma amostra deve ser suficientemente grande para representar bem o sistema, mas não a tal ponto de sua retirada alterar o escoamento granular.

c) Número de amostras

Assim como o tamanho, a quantidade de amostras tem pronunciado efeito sobre o índice de segregação. O número de amostras se relaciona diretamente com a quantidade e precisão das informações a respeito do sistema analisado. A quantidade de amostras ideal pode variar de acordo com o tipo de equipamento. Harnby (1967) e Lacey (1943) sugeriram que sejam

necessárias de 5 a 25 amostras. Entretanto, Bridgwater (2012) recomendou que o número de amostras deva ser cerca de 40.

Segregação em discos e tambores rotatórios

Para o disco rotatório, em particular, a literatura acerca dos fenômenos de segregação é escassa. Chadwick *et al.* (2005) realizaram experimentos em um disco rotatório operando com partículas de vidro em fluxo contínuo e concluíram indiretamente a presença de acentuada segregação, dadas às diferenças dos tempos de residência de partículas com tamanhos distintos. Por meio de simulações DEM, Cleary e Sinnott (2008) estudaram a dinâmica das partículas no disco. No entanto, a análise foi apenas qualitativa e se restringiu à conclusão de que o escoamento das partículas se comportou de maneira similar aos modelos de reator pistonado, sugerindo a não homogeneidade no interior do disco rotatório.

Ward e Hourigan (2012) apresentaram resultados experimentais do fenômeno de segregação de uma mistura granular bidispersa em um disco rotatório com lateral alongada. Foram avaliados os efeitos do ângulo de inclinação e da velocidade de rotação do equipamento, em uma faixa que caracteriza o regime de catarateamento. Observou-se que as partículas menores formaram uma única banda segregada na direção axial com localização mais próxima do fundo do disco para os maiores valores de velocidade e do ângulo de inclinação. Os autores ponderaram, no entanto, que não ficou claro se esta segregação era majoritariamente axial ou radial.

Em relação aos tambores rotatórios, os estudos sobre os fenômenos de segregação são frequentes. Para fins de comparação, a Figura 2.8 apresenta um gráfico com o número de estudos em discos e em tambores rotatórios. A partir da plataforma *ScienceDirect* da Elsevier, foi coletado o total de publicações de 1990 a 2023 correlacionando “tambor rotatório” e “mistura” ou “tambor rotatório” e “segregação”. Para a busca de trabalhos em discos rotatórios, além do próprio termo, foram pesquisados também “granulador em disco”, “disco inclinado” e “panela granuladora”.

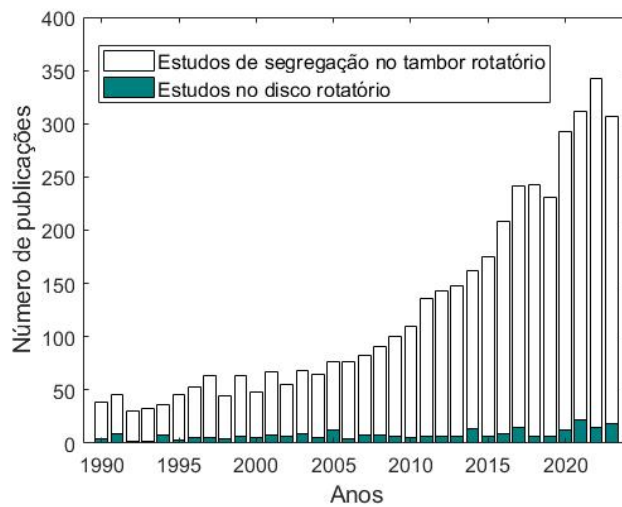


Figura 2.8: Número total de publicações na plataforma *ScienceDirect* de estudos em tambores e discos rotatórios.

Diversos estudos tratam da influência das propriedades granulares e das condições operacionais sobre a mistura de materiais no interior dos tambores rotatórios. As diferenças de tamanho, densidade e forma entre partículas são os principais fatores que levam ao fenômeno de segregação (Brandão *et al.*, 2020; Liao, 2019; He *et al.*, 2019; Yamamoto *et al.*, 2015; Bridgwater, 2012).

Brandão *et al.* (2020) investigaram o comportamento de segregação de partículas em um tambor rotatório. Foram analisadas diferentes combinações de misturas polidispersas que variavam em densidade e tamanho. Foi observado que as partículas menores migraram para o núcleo radial interno nas configurações bidispersas em tamanho. Por causa da diferença de tamanho, as partículas menores se movem percolando os espaços vazios criados pelas partículas maiores (Bridgwater, 2012). Os mesmos resultados haviam sido observados anteriormente por Chen *et al.* (2016), Bhattacharya (2011), Arntz, (2008) e Jain *et al.* (2005).

Ao avaliar partículas de diferentes densidades, diversos estudos (Zuo *et al.*, 2022; Pereira *et al.*, 2011; Xu *et al.*, 2010) também verificaram a formação do núcleo radial em tambores rotatórios. Neste caso, as partículas mais densas migraram para esta região. Este mecanismo de segregação é geralmente atribuído à condensação granular.

Os índices de segregação citados na seção 2.2.3 possibilitam quantificar os efeitos das propriedades granulares e das condições de operação na intensidade e na dinâmica de segregação. Para todas as combinações binárias estudadas por Brandão *et al.* (2020), um aumento no grau de enchimento causou um aumento no tempo necessário para alcançar um estado estacionário de segregação. Por outro lado, o aumento da velocidade de rotação diminuiu esse tempo, devido ao aumento da mobilidade das partículas. Liao (2019) verificou

que o índice de segregação no estado estacionário de uma mistura binária de diferentes densidades não aumentou de maneira sempre crescente com a velocidade de rotação, apresentando um valor máximo na velocidade intermediária analisada.

2.3 Material e Métodos

Esta seção apresenta a unidade experimental empregada nesse estudo, bem como as metodologias experimentais e numéricas para investigar o fenômeno de segregação no disco rotatório. Todo o trabalho foi realizado no Laboratório de Sistema Particulados da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia (FEQUI/UFU).

2.3.1 Estudo experimental do fenômeno de segregação

O estudo experimental foi realizado em um disco rotatório construído em vidro para facilitar a visualização, representado na Figura 2.9, com diâmetro (D) de 30 cm, altura (L) de 20 cm e ângulo de inclinação (θ) variável, inferido por um inclinômetro digital. A velocidade angular de rotação (ω) era manipulada por um inversor de frequência e medida por um tacômetro digital.

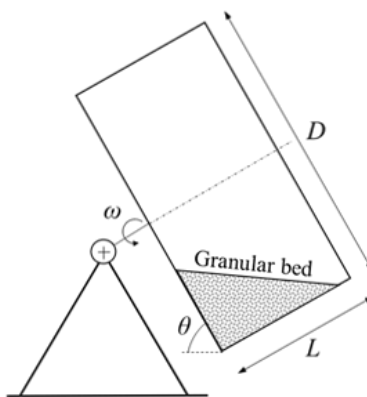


Figura 2.9: Esquema do disco rotatório.

Para avaliar a segregação por tamanho e densidade no disco, foram analisadas diferentes combinações binárias de material granular, as quais são apresentadas na Tabela 2.2. A caracterização dos diâmetros, das densidades e esfericidades do material granular foi realizada por Lima (2021).

Tabela 2.2: Configurações de partículas no estudo de segregação no disco rotatório

Combinação	Material I	Material II	Efeito analisado
M1	Esferas de vidro	Esferas de vidro	Equipamento
	$d_1 = 6,35 \text{ mm}$	$d_2 = 6,35 \text{ mm}$	
	$\rho_1 = 2455 \text{ kg/m}^3$	$\rho_2 = 2455 \text{ kg/m}^3$	
	$\varphi = 1,00$	$\varphi = 1,00$	
M2	Esferas de vidro	Partículas de vidro	Segregação por diferença de tamanho
	$d_1 = 6,35 \text{ mm}$	$d_2 = 3,20 \text{ mm}$	
	$\rho_1 = 2455 \text{ kg/m}^3$	$\rho_2 = 2455 \text{ kg/m}^3$	
	$\varphi = 1,00$	$\varphi = 0,91$	
M3	Esferas de vidro	Grãos de soja	Segregação por diferença de densidade
	$d_1 = 6,35 \text{ mm}$	$d_2 = 6,39 \text{ mm}$	
	$\rho_1 = 2455 \text{ kg/m}^3$	$\rho_2 = 1164 \text{ kg/m}^3$	
	$\varphi = 1,00$	$\varphi = 0,84$	

Na configuração M1, foi utilizado o mesmo material (vidro) com o mesmo diâmetro a fim de verificar a influência do equipamento e a métrica utilizada para quantificar a segregação, uma vez que essa combinação é uma mistura completa quando está no estado estacionário. As esferas foram pintadas para ser possível a observação visual. Nas combinações M2 e M3, diferentes tamanhos e densidades foram utilizados, respectivamente. Na combinação M3, em específico, há diferença também em relação à esfericidade. No entanto, essa diferença é pequena e é admitido que não causam efeitos significativos na segregação (Liao *et al.*, 2016).

A Figura 2.10 exibe a disposição espacial inicial dos materiais granulares no interior do disco. Uma câmera de alta velocidade foi posicionada defronte à abertura do disco (Figura 2.11), acompanhando cada um dos ângulos θ analisados, a fim de se evitar distorções de angulação nas imagens. O disco então foi colocado em movimento com velocidade de rotação ω e a movimentação das partículas foi acompanhada ao longo de 60s, tempo suficiente para se alcançar o regime estacionário. Esse procedimento foi realizado em triplicata para cada um dos casos. A segregação por diferença de tamanho foi avaliada para os ângulos de inclinação de 40, 50 e 60°, para os graus de preenchimento de 2,5; 5 e 7,5% e para as velocidades de 10, 15 e 20 rpm. A segregação por diferença de densidade foi avaliada para os ângulos de

inclinação de 40 e 50° e para os mesmos graus de preenchimento e mesmas velocidades anteriores. O ângulo de inclinação de 60° não foi considerado porque o disco apresentou o regime de deslizamento para todas as velocidades e graus de preenchimento quando operou na combinação M3.

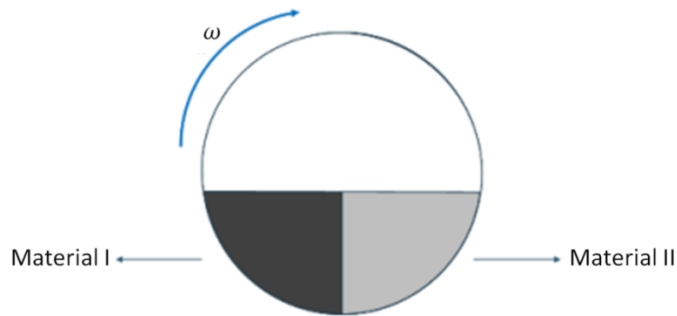


Figura 2.10: Disposição inicial do leito granular (Adaptado de Brandão, 2019).

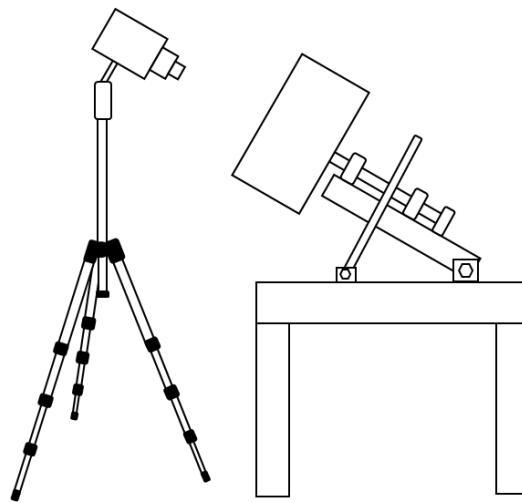


Figura 2.11: Disposição dos equipamentos no experimento (Adaptado de LIMA, 2019).

Adicionalmente, a metodologia proposta por Moraes *et al.* (2020) para investigar qualitativamente o fenômeno de segregação no interior de um leito de jorro foi aplicada no disco. Neste caso, foi escolhida uma configuração específica, a saber: disco operando com a combinação M2, inclinação de 50°, grau de preenchimento de 5,0% e velocidade de rotação de 10 rpm. A metodologia não intrusiva consiste nas seguintes etapas:

Etapas I: Após o disco operar por 60s, sua rotação foi suspensa. Uma solução gelatinosa aquosa com concentração de 21% m/m foi cuidadosamente derramada sobre o leito das partículas. Em temperatura ambiente, o leito estava solidificado após 4 horas;

Etapa II: O leito solidificado foi retirado do disco e foi cortado longitudinalmente, 2 cm em relação ao fundo. Essa vista transversal foi comparada com o resultado numérico.

2.3.1.1 Medida do Índice de Mistura

Para a determinação do índice de mistura e validação do modelo numérico, foi empregada uma metodologia baseada no trabalho de Santos *et al.* (2016), conforme apresentado na Figura 2.12 e cujas etapas são descritas a seguir.

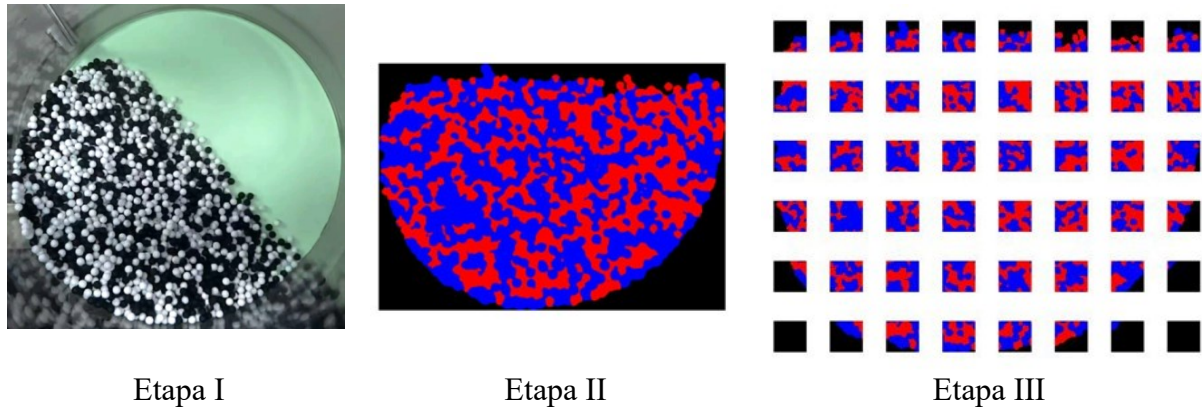


Figura 2.12: Metodologia para a determinação do índice de mistura.

Etapa I: Imagens experimentais do leito granular foram extraídas, em tempos predeterminados, para análise da cinética de segregação. Foram consideradas imagens frontais do disco. A região da imagem contendo o leito de partículas foi recortada manualmente por meio do *software Paint 3D*;

Etapa II: Por meio de um código *Matlab*, as imagens extraídas foram então rotacionadas até que o leito se encontrasse na posição horizontal, e posteriormente convertidas para o formato RGB;

Etapa III: As imagens foram divididas em um número determinado de células, de modo que a dimensão de cada lado das células fosse de 4 vezes o diâmetro da partícula de maior diâmetro, conforme discutido por Arntz *et al.* (2008) e Remy *et al.* (2011). As concentrações dos pixels vermelhos e azuis em todas as células foram então calculadas também por um código *Matlab* e a entropia de mistura local s_i em cada amostra i foi calculada usando a expressão de Boltzmann, conforme a Equação 2.26, descrita na seção 2.2.3. Para o cálculo da entropia global $S(t)$ no tempo t , as entropias locais foram ponderadas pelo número de pixels n_i em cada uma das amostras, conforme a Equação 2.27. A entropia global foi normalizada em relação à entropia global do sistema perfeitamente misturado, S_m . Desta forma, o índice de segregação S_ϕ foi obtido por meio da Equação 2.28. Conforme

mentionado anteriormente, ele apresenta dois extremos: valor zero para uma mistura totalmente segregada e valor unitário no caso de completa homogeneidade. Os códigos das Etapas II e III são apresentados no Apêndice A.

2.3.2 Estudo numérico do fenômeno de segregação

O Método dos Elementos Discretos (DEM) foi utilizado no estudo do fenômeno de segregação no disco rotatório. Todas as simulações foram conduzidas por meio do código numérico livre LIGGGHTS 3.8, utilizando o modelo de contato de Hertz-Mindlin. As condições de simulação são apresentadas na Tabela 2.3. Os índices pp e pw se referem aos pares partícula-partícula e partícula-parede, respectivamente. Todos os casos avaliados experimentalmente foram simulados sob as mesmas condições. O tempo real simulado foi de 60 s, assim como no ensaio experimental. A estabilidade numérica foi garantida ao usar passos de tempo equivalentes a 20% do tempo de Rayleigh (Equação 2.17). Para os valores dos coeficientes de restituição, de atrito estático e de rolamento do par de partículas soja-vidro, foram considerados os mesmos do par partícula soja-parede de vidro.

Tabela 2.3: Parâmetros DEM do material granular

Parâmetros	Material granular	
	Vidro	Soja
Coeficiente de restituição:		
$e_{pp}(-)$	0,86	0,67
$e_{pw}(-)$	0,86	0,48
Coeficiente de atrito estático:		
$\mu_{spp}(-)$	0,82	0,68
$\mu_{spw}(-)$	0,15-0,50	0,54
Coeficiente de atrito de rolamento:		
$\mu_{Rpp}(-)$	0,014	0,050
$\mu_{Rpw}(-)$	0,014	0,024
Razão de Poisson (-)	0,22	0,40
Módulo de Young (Pa):	$1,0 \times 10^6 - 5,0 \times 10^{10}$	$1,0 \times 10^7$
Passo de tempo (s)	$1,0 \times 10^{-4} - 4,0 \times 10^{-6}$	$2,0 \times 10^{-5}$

Os valores das razões de Poisson para o material granular estudado, vidro e soja, foram obtidos nos trabalhos de Makishima e Mackenzie (1975) e Boac *et al.* (2010), respectivamente. Os valores dos coeficientes de atrito estático e de rolamento considerados são os medidos por Lima (2021), e os valores dos coeficientes de restituição por Brandão (2019), conforme as metodologias descritas na seção 2.2.2.

Para o coeficiente de atrito estático partícula-parede das partículas de vidro, uma faixa de valores foi considerada, uma vez que o valor medido experimentalmente por Brandão *et al.* (2019), $\mu_{spw} = 0,24$, não reproduziu de forma satisfatória os ensaios experimentais. Maiores detalhes são apresentados na seção 2.4.2. A escolha por calibrar apenas esse parâmetro se deve aos resultados da análise de sensibilidade paramétrica realizada por Lima (2019), pela qual foi verificado que o coeficiente de atrito estático partícula-parede (μ_{spw}) foi o parâmetro que teve maior efeito na dinâmica de partículas no disco rotatório.

Uma faixa de valores também foi considerada para o Módulo de Young (E) das partículas de vidro (ver Tabela 2.3). O valor medido experimentalmente desse parâmetro (E_o) foi de $5,6 \times 10^{10}$ Pa (Makishima e Mackenzie, 1975). Com o objetivo de contornar a necessidade de um passo de tempo muito pequeno, grande parte dos estudos empregaram valores 10000 vezes menores do que o real ($E = 0,0001E_o$) na modelagem DEM de diversos equipamentos (Alian *et al.*, 2015; Zhao *et al.*, 2021; Zhou *et al.*, 2001). O presente estudo optou por investigar se a utilização de valores reduzidos do módulo de Young tem influência na segregação das partículas no disco, cujos resultados serão mostrados na seção 2.4.2.

2.3.2.1 Calibração e validação do modelo numérico

Para a calibração e a validação do modelo DEM, os resultados numéricos foram confrontados com os resultados experimentais. Inicialmente, a resposta utilizada para a comparação foi o ângulo de partida. O ângulo de partida (σ) é o ponto onde as partículas começam a se desprender da parede do equipamento. A Figura 2.13 exemplifica a medição deste ângulo. As medidas foram realizadas no intervalo de 40 a 60 s para garantir que o estado estacionário havia sido atingido.

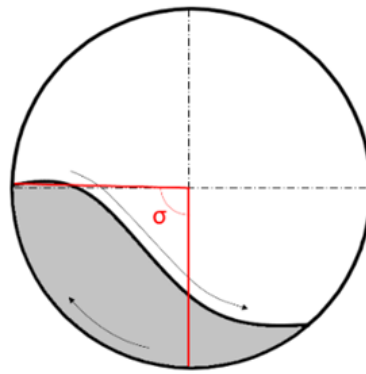


Figura 2.13: Esquema de medição do ângulo de partida (Adaptado de Lima, 2022).

Em seguida, a metodologia para a medida do índice de mistura foi empregada para os resultados numéricos e os índices de entropia de mistura ao longo do tempo foram comparados com os dados experimentais.

Uma vez validado o modelo DEM, informações acerca da dinâmica das partículas no interior do disco podem ser extraídas das simulações numéricas com confiabilidade. Após a realização de cada simulação, arquivos contendo informações de todas as partículas presentes no sistema, como posição e velocidade, foram gerados pelo *software* de pós-processamento *Paraview* 5.11. As análises realizadas com esses dados são descritas a seguir.

2.3.2.2 Influência das condições operacionais na segregação por diferenças de tamanho e densidade

Para avaliar a influência das condições operacionais na segregação no disco rotatório, foi quantificado o índice de Entropia de Mistura em todo o leito, passando a considerar também a direção axial do disco rotatório. Para isso, foi criado um código *Matlab*, apresentado no Apêndice B. O domínio do disco era subdividido em células tridimensionais de mesma dimensão. Novamente, tomou-se o cuidado de que a dimensão de cada lado das células fosse de 4 vezes o diâmetro da partícula. Nesse caso, no lugar do número de pixels, foi mensurada a quantidade de partículas de cada tipo em cada uma das células volumétricas. Foi realizado o mesmo cálculo do índice de Entropia de Mistura citado anteriormente. Foram considerados dois planejamentos 3^k , considerando as mesmas condições operacionais avaliadas experimentalmente (ângulo de inclinação, velocidade de rotação e grau de preenchimento) para a combinação M2. Para a combinação M3, além dos ângulos de inclinação de 40 e 50°, foi considerado também o ângulo de 45° no estudo numérico.

Efeito combinado das diferenças de tamanho e de densidade

Adicionalmente, foi avaliado o efeito combinado da utilização de partículas de densidades e tamanhos distintos. Nessa análise, foi considerado o caso com ângulo de inclinação de 45°, grau de preenchimento de 5,0% e velocidade de rotação de 15 rpm, por se tratar de condições intermediárias às analisadas. A combinação das propriedades entre as partículas foi realizada através da utilização de um planejamento composto central (Tabela 2.4) resultando em 26 simulações.

Tabela 2.4: Níveis do planejamento composto central: efeito das diferenças de tamanho e de densidade das partículas sobre a segregação granular

Variável	Níveis				
	$-\alpha$ (-1,4826)	-1	0	1	$+\alpha$ (+1,4826)
r_{P1} (mm)	0,8	1,0	1,5	2,0	2,3
r_{P2} (mm)	0,8	1,0	1,5	2,0	2,3
ρ_{P1} (kg/m ³)	1500	2000	3000	4000	4500
ρ_{P2} (kg/m ³)	1500	2000	3000	4000	4500

Para todas as simulações, foi avaliado, também, o perfil de fração volumétrica da partícula do Material I ao longo do eixo axial do disco rotatório. Uma vez que a disposição do leito de partículas se difere ao longo do eixo axial do disco, a fração volumétrica foi calculada considerando o volume total de partículas em cada seção, conforme a Equação 2.32.

$$\text{Fração volumétrica} = \frac{v_{P1}}{v_{P1} + v_{P2}} \quad (2.32)$$

sendo v_{P1} o volume somado de todas as partículas de Material I (Tabela 2.2), $d_1 = 6,35$ mm e $\rho_1 = 2455$ kg/m³, e v_{P2} o volume somado de todas as partículas de Material II, em que $d_2 = 6,35$ mm e $\rho_2 = 2455$ kg/m³ para a combinação M2 e $d_2 = 6,35$ mm e $\rho_2 = 1164$ kg/m³ para a combinação M3.

2.4 Resultados e Discussão

Neste tópico são apresentados os resultados obtidos no estudo do fenômeno de segregação no interior de discos rotatórios, avaliando a influência das propriedades físicas dos materiais granulares e das condições operacionais.

2.4.1 Estudo experimental do fenômeno de segregação

A Figura 2.14 apresenta a vista frontal do disco depois de 60 s de operação. As imagens correspondem à combinação M1 (mesma densidade e mesmo diâmetro), operando nas três velocidades analisadas e com grau de preenchimento de 5,0%. Esses experimentos foram realizados para avaliar o efeito do equipamento e da efetividade da medida do índice de mistura, uma vez que o estado de mistura completa era esperado para esses casos. Os valores desse índice ao longo do tempo serão apresentados na seção 2.4.2.

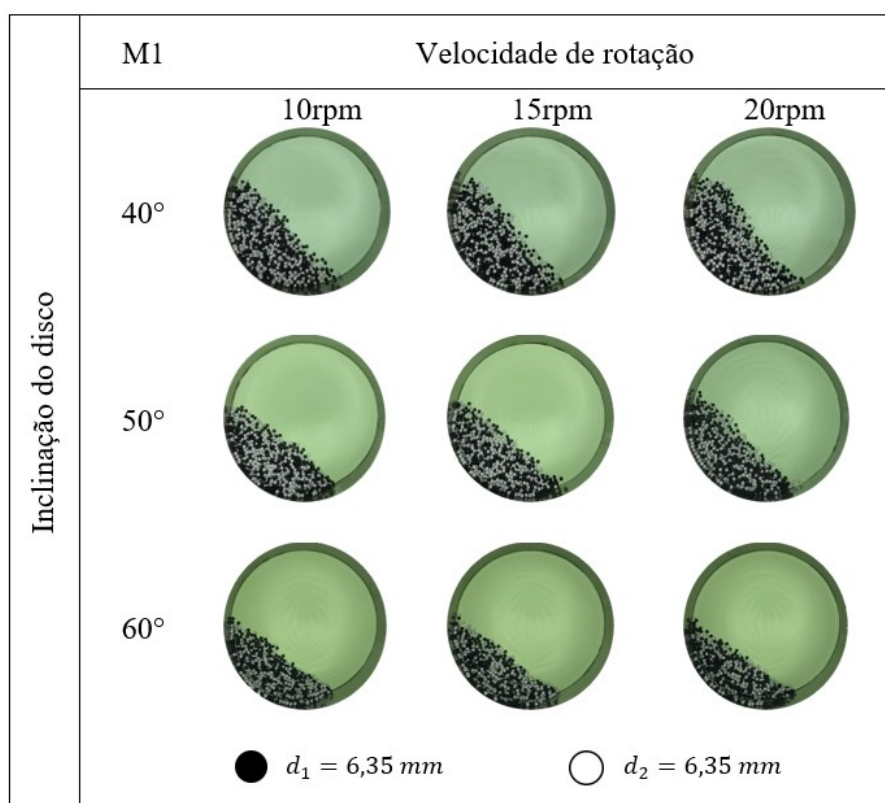


Figura 2.14: Vista frontal do disco rotatório para a combinação M1, operando com grau de preenchimento de 5,0%.

É possível observar que, independentemente da inclinação do disco ou da velocidade de rotação, o leito granular apresenta uma disposição aleatória das partículas, sugerindo qualitativamente uma mistura aproximadamente completa. Portanto, o equipamento por si só

não promove segregação e os casos apresentados podem, de fato, serem usados para avaliar se a análise por imagem do leito e o índice de mistura podem ser empregados para a validação do modelo numérico. Se o índice de mistura calculado para esse caso for próximo de 1, o que caracteriza o estado de mistura completa, a metodologia é efetiva.

Nas Figuras 2.15, 2.16 e 2.17, são apresentadas as vistas frontal e lateral do disco para a combinação M2 (partículas com diâmetros diferentes, mas mesma densidade) para os ângulos de inclinação de 40, 50 e 60°, respectivamente. Nessa combinação, foi avaliado o efeito da diferença de tamanhos entre as partículas na segregação no disco. De uma maneira geral, verifica-se que o disco tem pronunciada ação segregadora para partículas de tamanho diferentes. Uma discussão quantitativa acerca dos fenômenos de segregação bem como da influência das condições operacionais será apresentada na seção 2.4.2.2 desse trabalho.

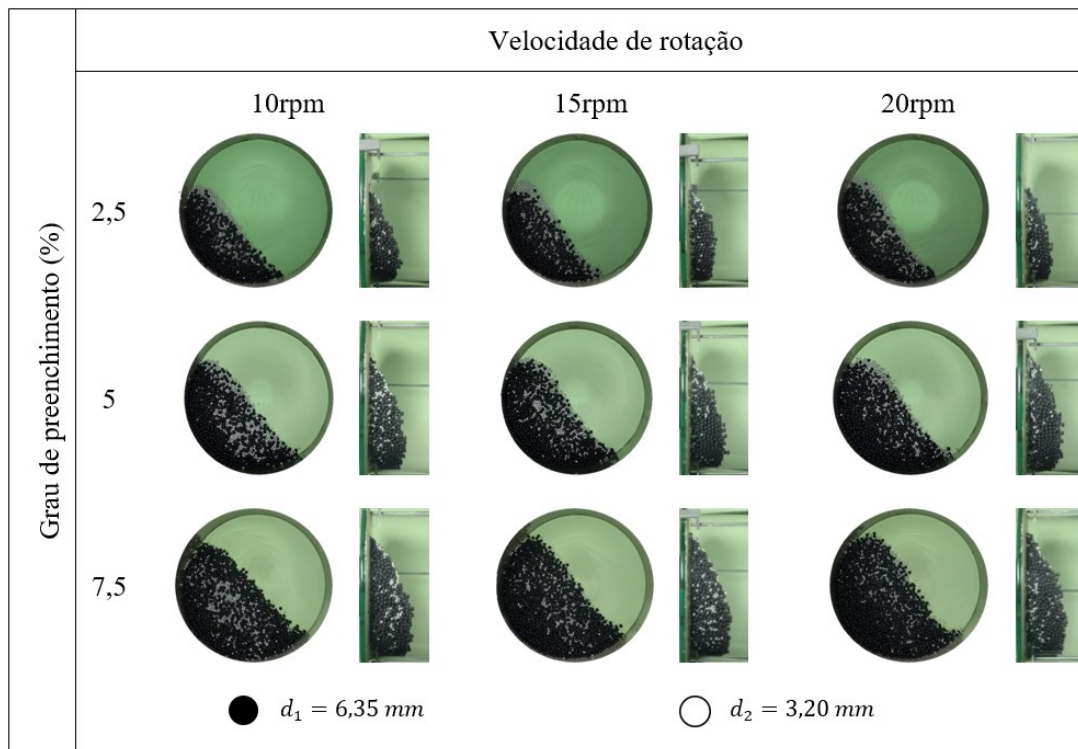


Figura 2.15: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M2, operando com ângulo de inclinação de 40°.

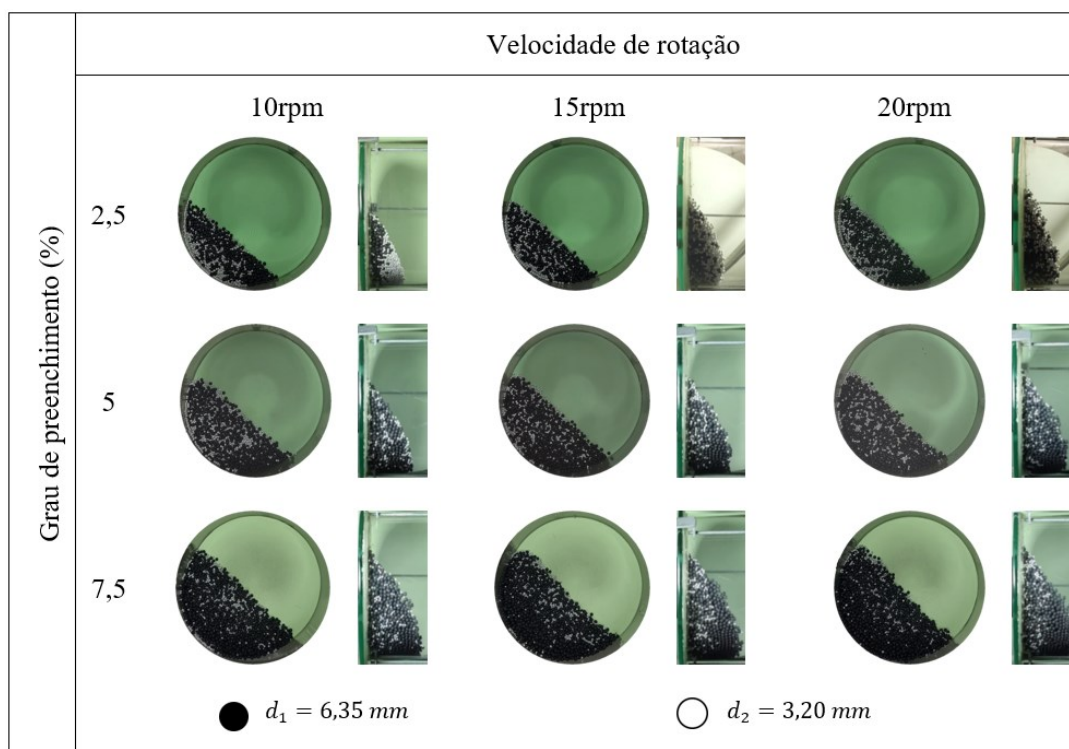


Figura 2.16: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M2, operando com ângulo de inclinação de 50°.

Por meio das Figuras 2.15 e 2.16, é possível inferir que as partículas de maior diâmetro migram radialmente em direção à parede do disco e axialmente em direção à superfície do leito granular. Essa segregação axial é desejada para a operação do disco como equipamento aplicado à granulação, uma vez que os grânulos maiores são direcionados à borda, onde são descarregados, enquanto as partículas menores são retidas para um maior crescimento. Qualitativamente, pode-se afirmar que, quanto menor o ângulo de inclinação, maior a velocidade de rotação e maior o grau de preenchimento do disco, mais pronunciado é o estado de segregação em que as partículas maiores se direcionam à borda do equipamento. Vale lembrar que o ângulo de inclinação é medido em relação à horizontal, conforme a Figura 2.9.

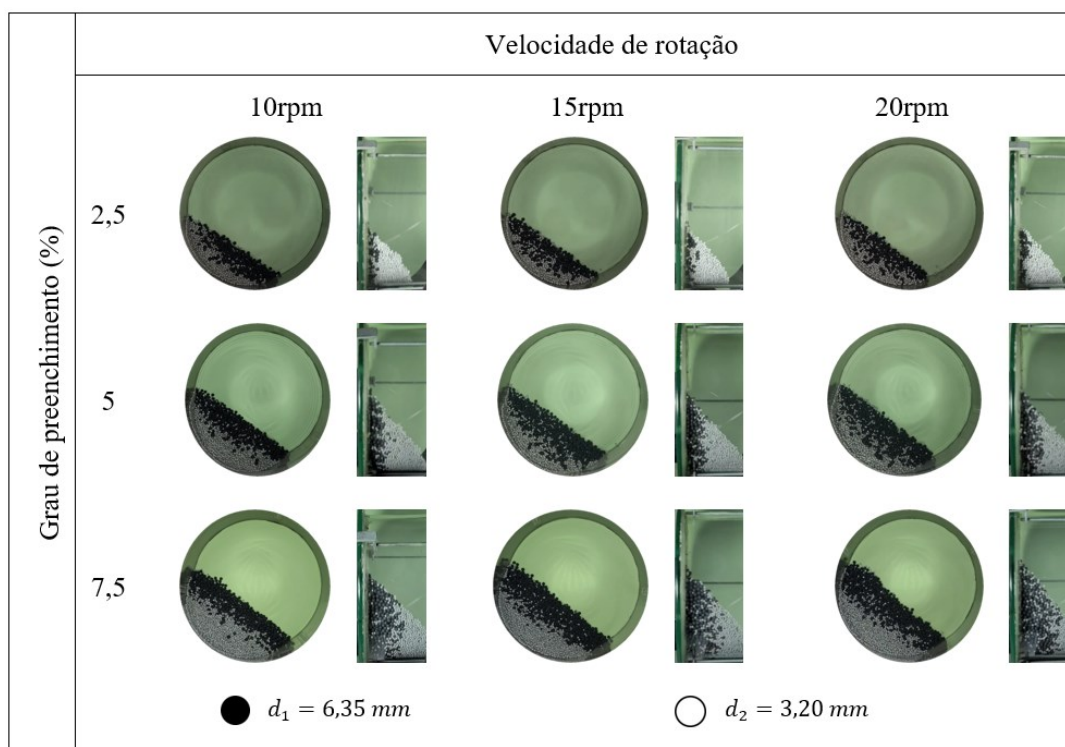


Figura 2.17: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M2, operando com ângulo de inclinação de 60°.

Para o caso particular de inclinação de 40° e grau de preenchimento de 7,5% (Figura 2.15), as poucas partículas de menor diâmetro que podem ser vistas próximas à lateral do disco tendem a formar uma banda, cuja posição se desloca para mais próxima do fundo à medida que a velocidade aumenta. Ao avaliar as imagens laterais de um tambor rotatório inclinado, Ward e Hourigan (2012) verificaram a formação de bandas axiais bem destacadas para as partículas de menor diâmetro em diferentes condições de operação ao utilizar uma razão de tamanho 1:8. Os autores, no entanto, salientam que não se pode afirmar que essas bandas são exclusivamente formadas por partículas do mesmo tipo, uma vez que não há informações acerca do interior do leito granular.

Observa-se pela Figura 2.17 que, quando o disco opera na inclinação de 60°, a segregação se dá de maneira contrária à observada para as inclinações de 40 e 50°: as partículas de menor diâmetro é que estão dispostas mais distantes do fundo do disco, formando uma banda. Ward e Hourigan (2012) verificaram que as bandas formadas pelas partículas de menor diâmetro se distanciavam do fundo do tambor para a inclinação de 60° ao operar com menores velocidades de rotação.

O efeito da diferença de densidade entre as partículas (combinação M3) na segregação no disco para as inclinações de 40 e 50° pode ser verificado nas Figuras 2.18 e 2.19,

respectivamente. As partículas menos densas (grãos de soja) estavam presentes em maior quantidade na superfície do leito granular, indicando que as mais densas se concentraram no interior do leito granular. A segregação foi mais pronunciada para a inclinação de 40°, principalmente na direção axial.

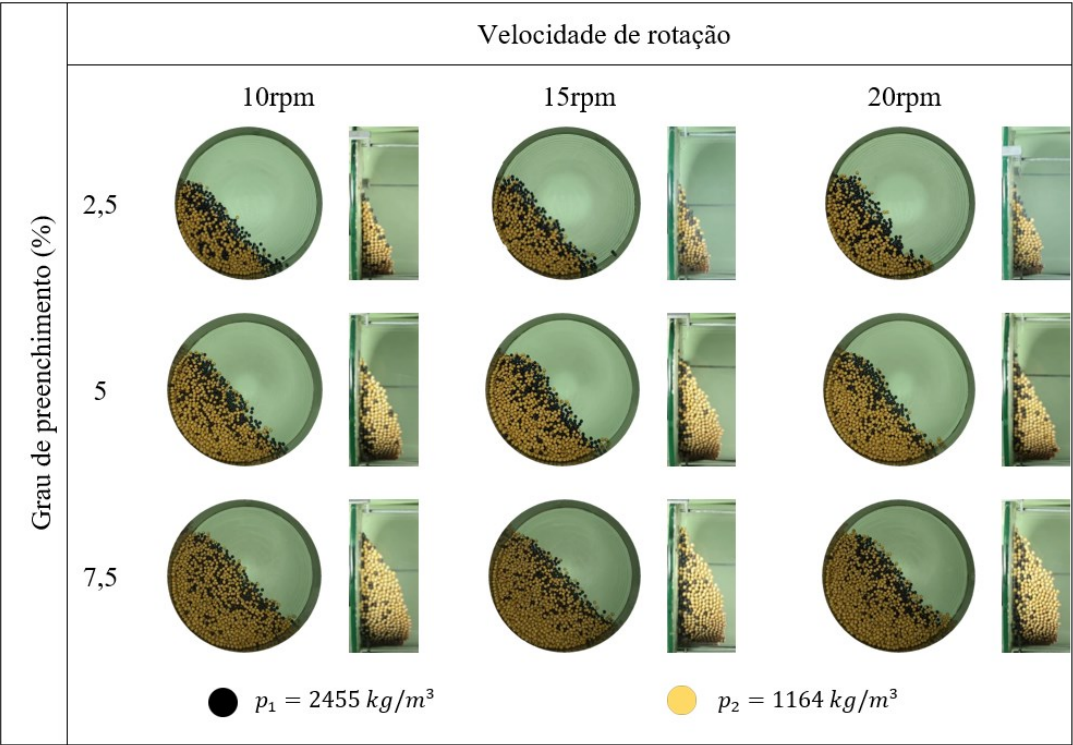


Figura 2.18: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M3, operando com ângulo de inclinação de 40°.

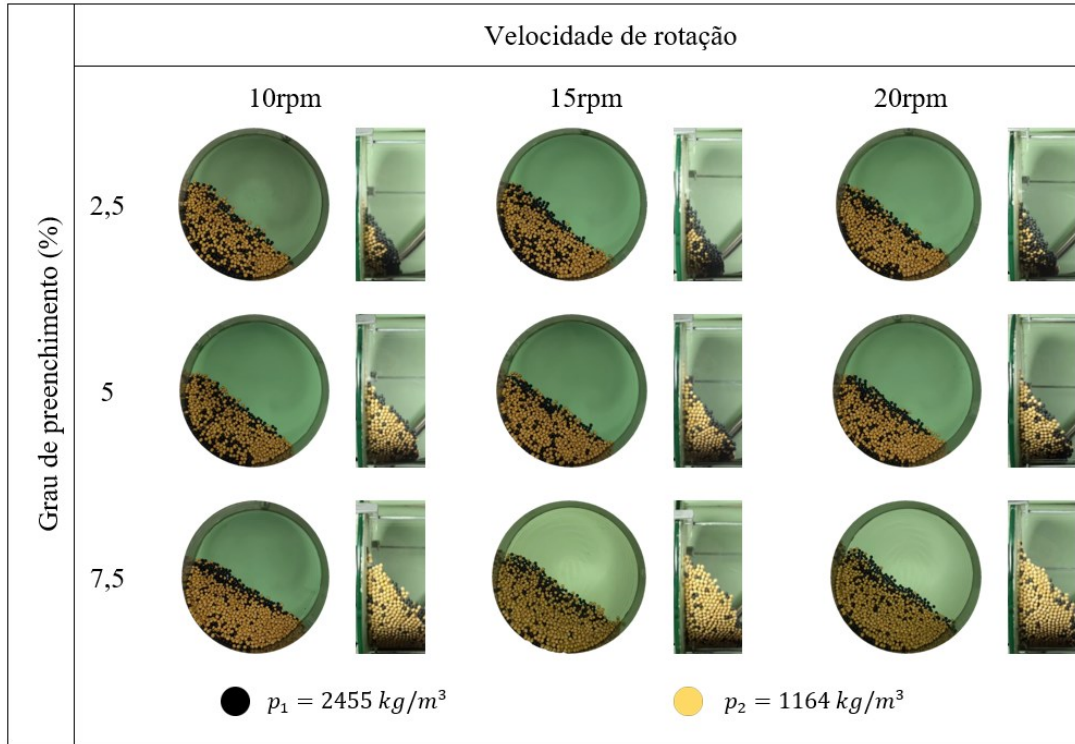


Figura 2.19: Vistas frontais e laterais do disco rotatório para a combinação M3, operando com ângulo de inclinação de 50°.

2.4.2 Estudo numérico do fenômeno de segregação

2.4.2.1 Calibração e validação do modelo numérico

Os resultados numéricos e experimentais foram confrontados com o objetivo de calibrar e validar a modelagem DEM. Para a etapa de calibração dos parâmetros DEM, foram investigados os casos de inclinação de 50°, grau de preenchimento de 5,0% e velocidade de 10 rpm das combinações M1 e M2. Primeiramente, foram comparados os resultados numéricos e experimentais do ângulo de partida. O valor do coeficiente de atrito estático partícula-parede utilizado nas simulações numéricas foi o valor medido experimentalmente por Brandão *et al.* (2019): $\mu_{spw} = 0,24$. Como pode ser visto na Tabela 2.5, os resultados numéricos não corresponderam aos resultados experimentais, apresentando desvio elevado do ângulo de partida numérico em relação ao experimental para a combinação M2. Optou-se, portanto, por avaliar diferentes valores de μ_{spw} , conforme descrito na seção 2.3.2.

Tabela 2.5: Valores de ângulos de partida para a inclinação de 50°, grau de preenchimento de 5,0 % e velocidade de rotação de 10rpm

	Ângulo de partida (°)		
	Experimental	Numérico	Desvio (%)
Combinação M1	109,4 ± 1,7	104,3 ± 2,1	4,7
Combinação M2	106,3 ± 1,4	93,1 ± 1,9	12,4

As Figuras 2.20 e 2.21 apresentam os ângulos de partida numéricos e experimentais das combinações M1 e M2 para diferentes valores do coeficiente de atrito estático partícula-parede. Em ambos os casos, verificou-se que o μ_{spw} tem influência nos valores dos ângulos de partida encontrados numericamente. Além disso, para a faixa de valores do coeficiente de atrito estático empregada no presente estudo, há valores críticos do coeficiente de atrito estático abaixo dos quais o modelo DEM não representa os resultados experimentais: 0,35 para a combinação M1 e 0,40 para a combinação M2. Alizadeh *et al.* (2014) destacaram que simulações DEM podem ser realizadas com valores de coeficientes de atrito mais elevados que os valores experimentais para compensar valores extremamente pequenos do módulo de Young. Vale lembrar que, até então, o presente estudo utilizou o valor de módulo de Young de 5,0 MPa, valor 10000 vezes inferior ao valor real do material ($E = 0,0001E_o$).

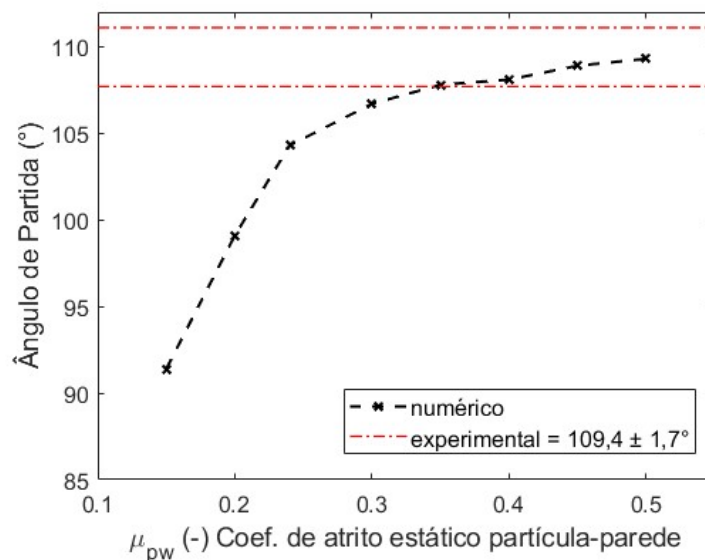


Figura 2.20: Ângulos de partida numérico e experimental da combinação M1 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0%.

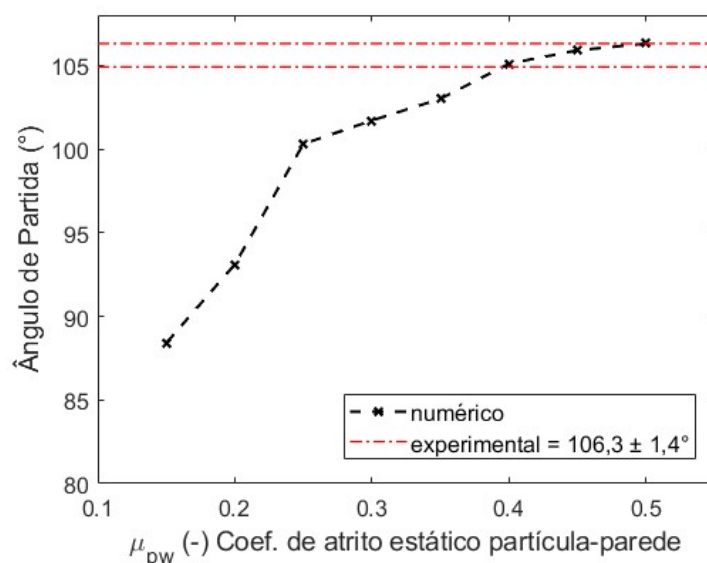


Figura 2.21: Ângulos de partida numérico e experimental da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0%.

Em seguida, foram confrontados os índices de entropia de mistura experimentais e numéricos em função do tempo. Os resultados para a combinação M1 são apresentados na Figura 2.22. Essa combinação levou a um estado próximo da mistura completa. O valor do índice de entropia de mistura experimental calculado depois de atingido o estado estacionário (S_{∞}) é de $0,97 \pm 0,01$, validando a metodologia descrita na seção 2.3.1. Vale lembrar que esse índice tem dois extremos: valor zero para uma mistura totalmente segregada e valor unitário no caso de completa homogeneidade. Outra observação a partir da Figura 2.22 é a de que a entropia de mistura no estado estacionário é pouco sensível à variação dos valores do coeficiente de atrito estático partícula-parede quando não há diferença de tamanho entre as partículas.

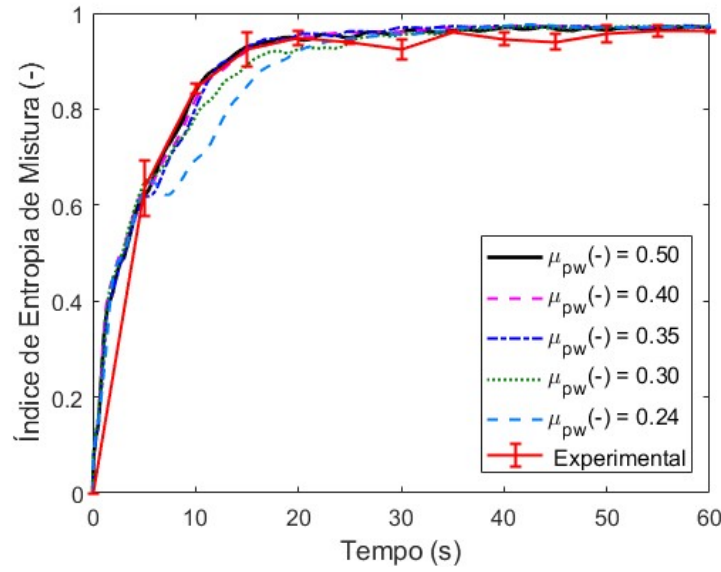


Figura 2.22: Índice de Entropia de Mistura da combinação M1 operando com velocidade de rotação de 10rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de μ_{spw} .

Os resultados para a combinação M2 são apresentados na Figura 2.23. O valor de S_{∞} experimental dessa combinação foi de $0,81 \pm 0,04$. Nenhum dos valores de coeficiente de atrito estático partícula-parede correspondeu a esse resultado experimental. A Tabela 2.6 apresenta os desvios do índice de entropia de mistura no tempo de 60 s encontrados para cada valor do coeficiente μ_{spw} em relação à média do S_{∞} experimental. Pode-se inferir que, apesar dos resultados numéricos de ângulo de partida e do índice S_{∞} para a combinação monodispersa (combinação M1) estarem de acordo com os resultados experimentais, não há garantia de que os resultados para a combinação bidispersa também estarão.

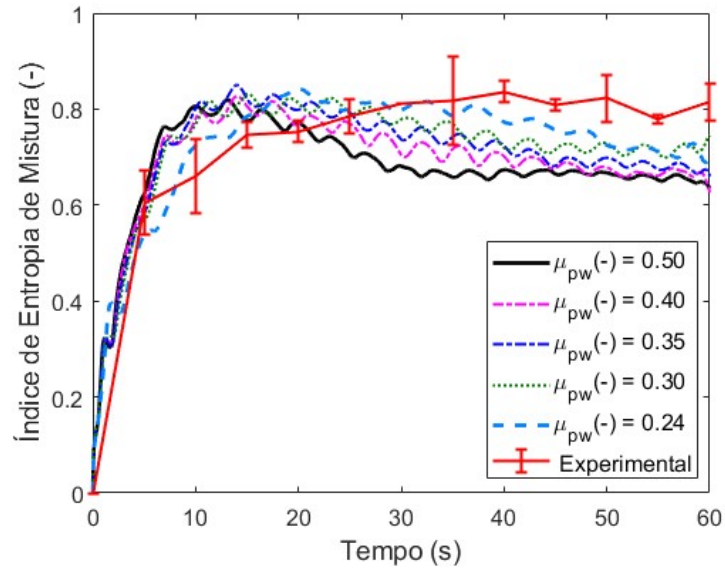


Figura 2.23: Índice de Entropia de Mistura da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de μ_{spw} .

Tabela 2.6: Desvios do S_{∞} numérico da combinação M2 em relação à média do S_{∞} experimental para cada valor de μ_{spw}

μ_{pw}	0,24	0,30	0,35	0,40	0,50
Desvio (%)	9,88	11,11	17,28	18,52	19,75

Ainda sobre a Figura 2.23, pode-se observar que, enquanto o S_{∞} experimental atingiu o estado estacionário aproximadamente no tempo de 30 s, após uma tendência crescente, todos os índices obtidos numericamente apresentaram uma tendência decrescente de valor após 20 s.

Ao avaliar a dinâmica de mistura de partículas monodispersas em um tambor rotatório, Chen *et al.* (2017) verificaram que o valor do módulo de Young (E) escolhido no estudo numérico teve influência nos resultados. Para valores de $E = E_o$ até $E = 0,001E_o$, os autores encontraram resultados numéricos de mistura comparáveis entre si, e de acordo com os resultados experimentais. No entanto, foi observada uma redução significativa na taxa de mistura do leito granular para valores de $E < 0,001E_o$. De acordo com os autores, isso ocorre devido à diminuição dos efeitos de cisalhamento das partículas. Uma vez que o presente estudo não alcançou a conformidade dos resultados numéricos com o experimental ao utilizar $E = 0,0001E_o$, optou-se por avaliar diferentes valores desse parâmetro para a combinação M2.

A Figura 2.24 apresenta o efeito dos coeficientes de atrito partícula-parede nos ângulos de partida para diferentes valores de módulo de Young. É possível verificar que, quanto maior o valor de E , menor é a influência do valor de μ_{spw} no ângulo de partida. Além disso, quando $E \geq 0,001E_o$, valores menores do que $\mu_{spw} = 0,40$ também estiveram em concordância com o resultado experimental.

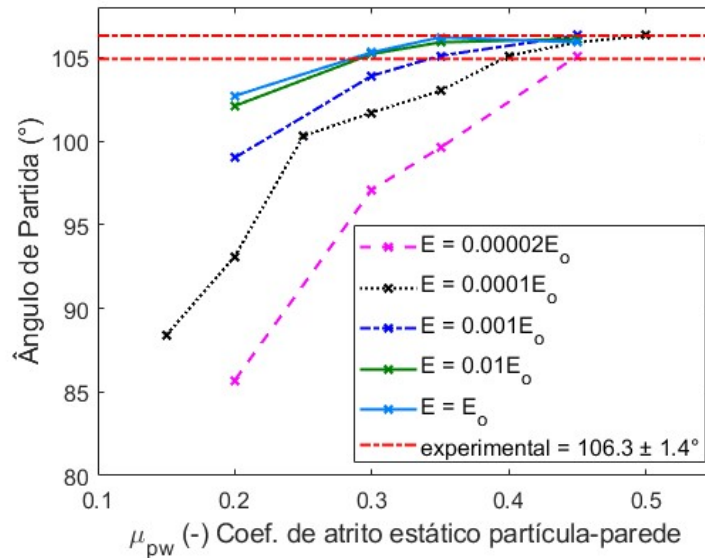


Figura 2. 24: Efeito dos valores de μ_{spw} no ângulo de partida da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de E .

Os resultados de S_∞ para diferentes valores de módulos de Young são plotados na Figura 2.25. Nesse caso, o μ_{spw} foi fixado em 0,35. Observou-se que, os valores mais altos de módulo de Young ($E = E_o$ e $E = 0,001E_o$) reproduziram adequadamente os resultados experimentais. Abaixo desses valores, foi verificada uma tendência decrescente dos valores de S_∞ . A mesma análise foi realizada para as velocidades de 15 e 20 rpm e foram obtidos resultados similares. Os resultados qualitativos visualizados na Figura 2.26 se referem aos valores de $E = 0,0001E_o$ e $E = 0,01E_o$ para a velocidade de 10 rpm.

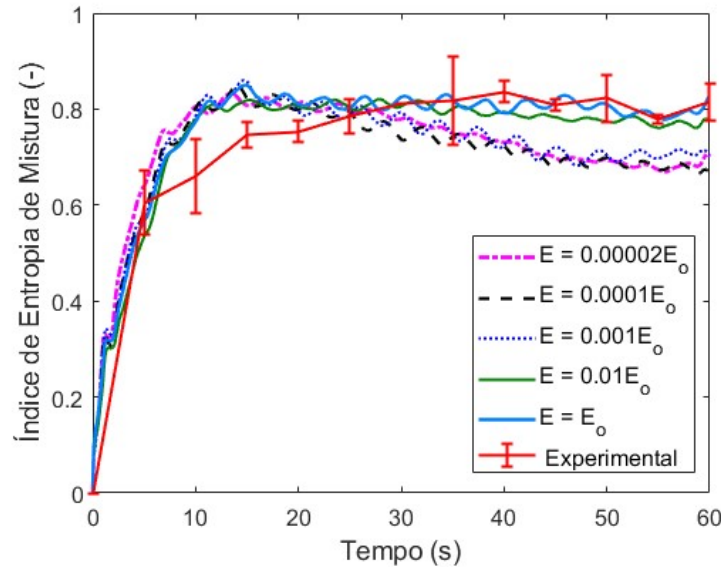


Figura 2.25: Índice de Entropia de Mistura da combinação M2 operando com velocidade de rotação de 10 rpm, 50° de inclinação e grau de preenchimento de 5,0% para diferentes valores de E .

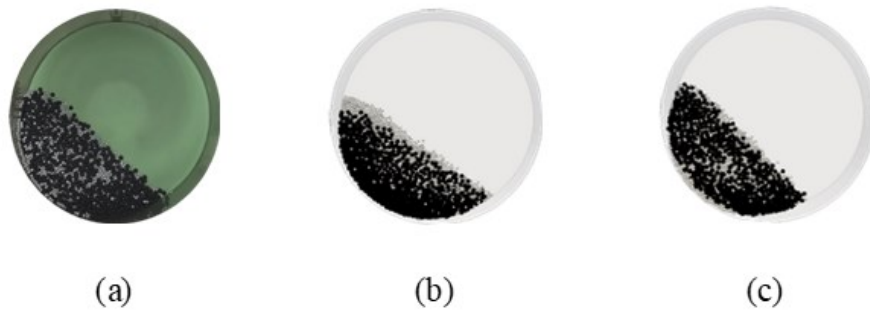


Figura 2.26: Vista frontal do disco rotatório para os resultados (a) experimental, (b) numérico com $E = 0,0001E_o$ e (c) numérico com $E = 0,01E_o$.

Retornando ao equacionamento do modelo DEM apresentado na seção 2.2.2, tem-se que reduzir o valor do Módulo de Young implica na diminuição da rigidez normal (Equação 2.7) e na rigidez tangencial (Equação 2.8) e, conseqüentemente, no cálculo das Forças de Contato normal e tangencial (Equações 2.5 e 2.6). Lommen *et al.* (2014) destacaram que a maneira como se dá o contato entre as partículas é dependente também da energia cinética delas, logo, essa deve ser considerada quando se avalia a redução da rigidez. De acordo com Malone e Xu (2008), isto pode ser feito quantificando a sobreposição normal das partículas, δ_n , a qual é resultado do momento e da rigidez delas.

Para investigar como a redução do módulo de Young utilizada impactou nos resultados encontrados nesse estudo, a média das sobreposições normais dos contatos partícula-partícula foi calculada. Para isso, da soma dos raios das partículas em contato i e j ,

foi subtraída a distância entre os centros delas, d_{ij} , conforme ilustrado na Figura 2.27. Esse procedimento foi realizado para todas as partículas do leito.

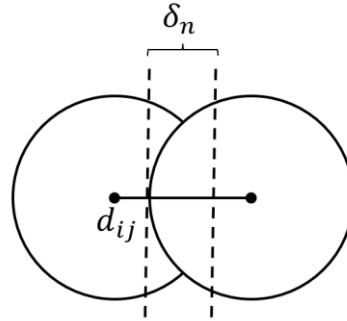


Figura 2.27: Esquema para o cálculo da sobreposição δ_n dos contatos partícula-partícula

As médias das sobreposições normais das partículas P1 ($r_1 = 3,18mm$) e P2 ($r_2 = 1,60mm$) em relação aos seus raios são apresentadas na Figura 2.28, juntamente com os ângulos de partida para cada um dos valores de módulo de Young estudados. É possível verificar que a δ_n média aumenta à medida que o valor de E diminui do valor real. Quando o ângulo de partida encontrado numericamente diminuiu com maior intensidade e deixou de representar o ângulo de partida experimental ($E = 0,0001E_o$), a média de δ_n dos contatos foi de 0,82% do raio da partícula P1 e de 0,98% do raio da partícula P2. Essa observação é compatível com o estudo de Cleary (2010), que sugere um limite de sobreposições médias de 0,1-0,5% para garantir que o comportamento do escoamento granular independa da rigidez escolhida para os materiais nas simulações.

Apesar dessa análise sugerir que o uso de $E = 0,001E_o$ seja suficiente para que os resultados numéricos correspondam aos experimentais, os resultados do Índice de Entropia de Mistura mostraram que pode ser necessária a utilização de valores mais elevados. Vale lembrar que as médias das sobreposições normais das partículas foram calculadas apenas para os contatos partícula-partícula.

Uma vez que os resultados de Lima (2022) demonstraram que o contato partícula-parede exerce grande influência no escoamento granular no interior do disco, os efeitos da redução da rigidez dos materiais nesse contato também devem ser investigados. Para isso, a força média de contato partícula-parede (F_{pw}) e as velocidades angulares médias (ω) das partículas próximas à parede também foram computadas. A Figura 2.29 apresenta esses resultados para cada um dos valores de módulo de Young estudados. Pode-se observar que, quando a rigidez da partícula é reduzida, a força de contato média diminui, como é previsto pela Equação 2.5. Ao mesmo tempo, as velocidades médias encontradas para as partículas também são diminuídas, sendo esse efeito mais intenso para as partículas P1, que tem maior

massa. Por meio desses resultados, pode-se inferir que a redução da rigidez dos materiais no modelo DEM pode resultar na diminuição dos efeitos de cisalhamento e, conseqüentemente, na diminuição da transferência da quantidade de movimento do disco para as partículas. Portanto, existe um limite inferior para a utilização do módulo de Young reduzido para diminuir os custos computacionais, abaixo do qual os resultados simulados não são confiáveis.

Diante de todos os resultados apresentados, verifica-se que o uso de um valor de módulo de Young 100 vezes menor que o valor real garante uma maior concordância entre os resultados numéricos e experimentais. Portanto, os valores de $\mu_{spw} = 0,35$ e $E = 0,01E_0$ foram fixados para as simulações numéricas de todos os casos da combinação M2.

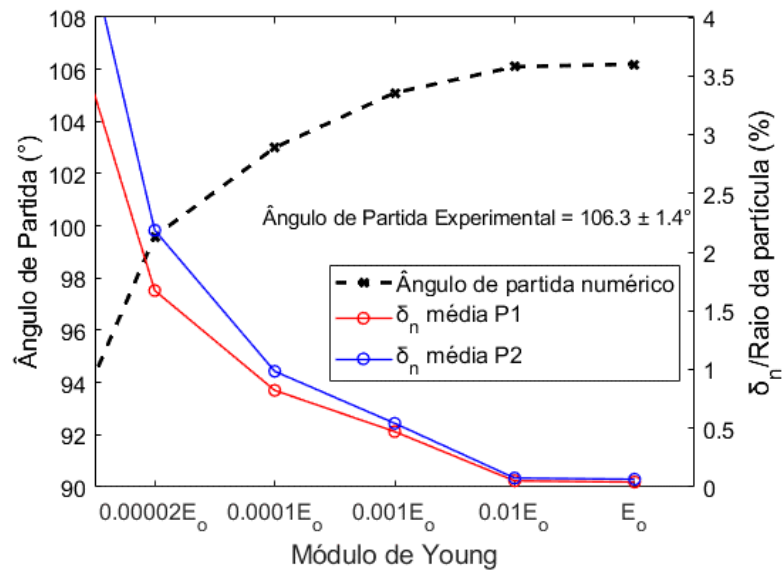


Figura 2. 28: Médias de δ_n das partículas P1 e P2 e ângulos de repouso para diferentes valores de E .

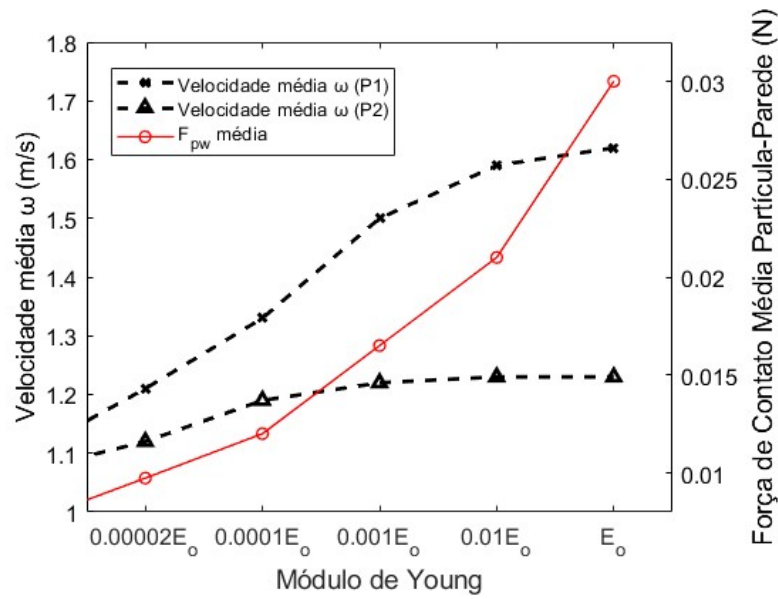


Figura 2.29: Força de contato média do par partícula-parede e velocidades angulares médias ω das partículas P1 e P2 para diferentes valores de E .

As Figuras 2.30 a 2.32 apresentam o comparativo das imagens numérica e experimental do estado de segregação no tempo $t = 60$ s da combinação M2, para os ângulos de inclinação de 40, 50 e 60°, respectivamente. Os resultados referentes aos índices de entropia de mistura experimentais e numéricos em função do tempo são apresentando no Apêndice B.

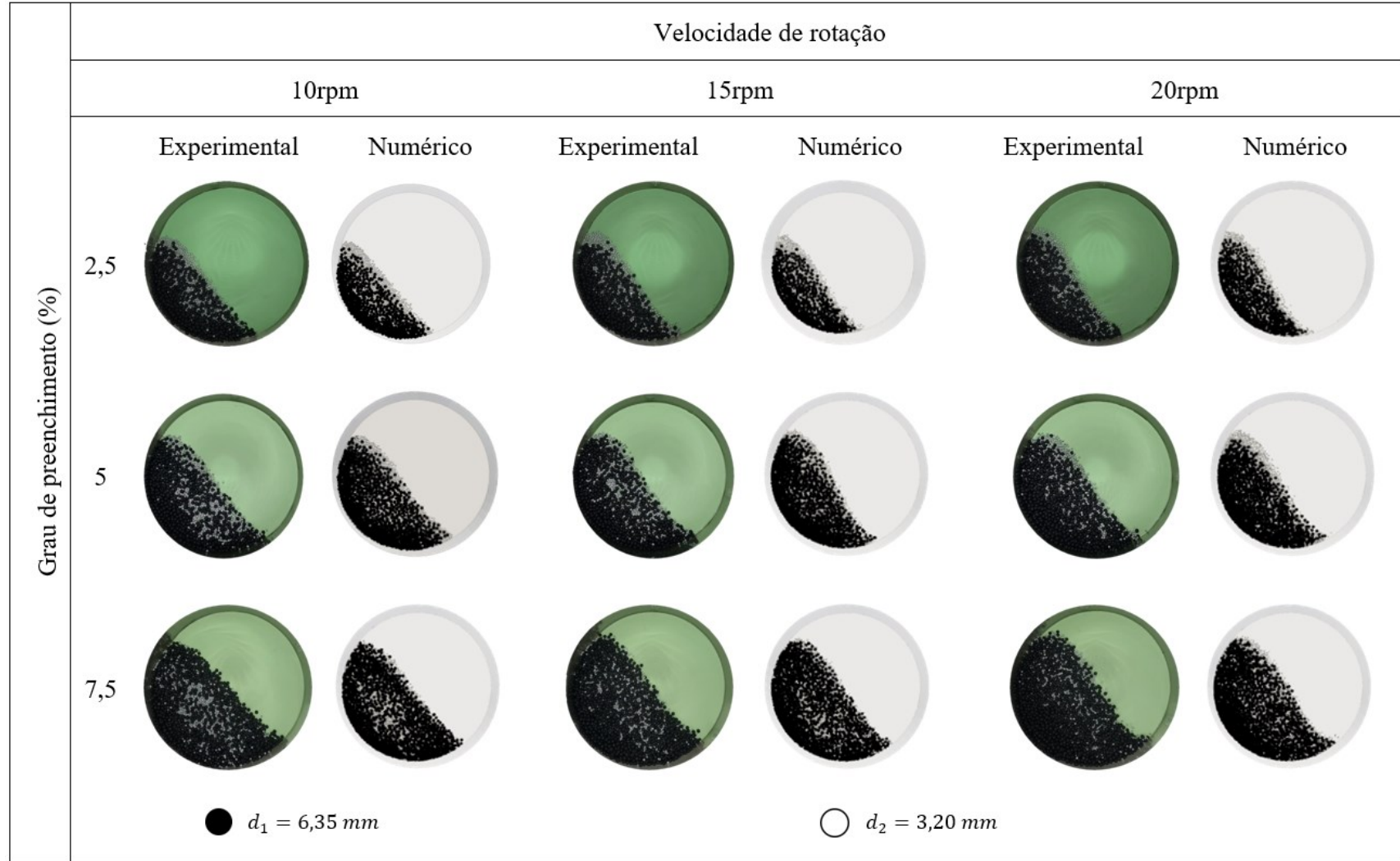


Figura 2.30: Vistas frontais dos resultados numérico e experimental da combinação M2 para o ângulo de inclinação de 40°

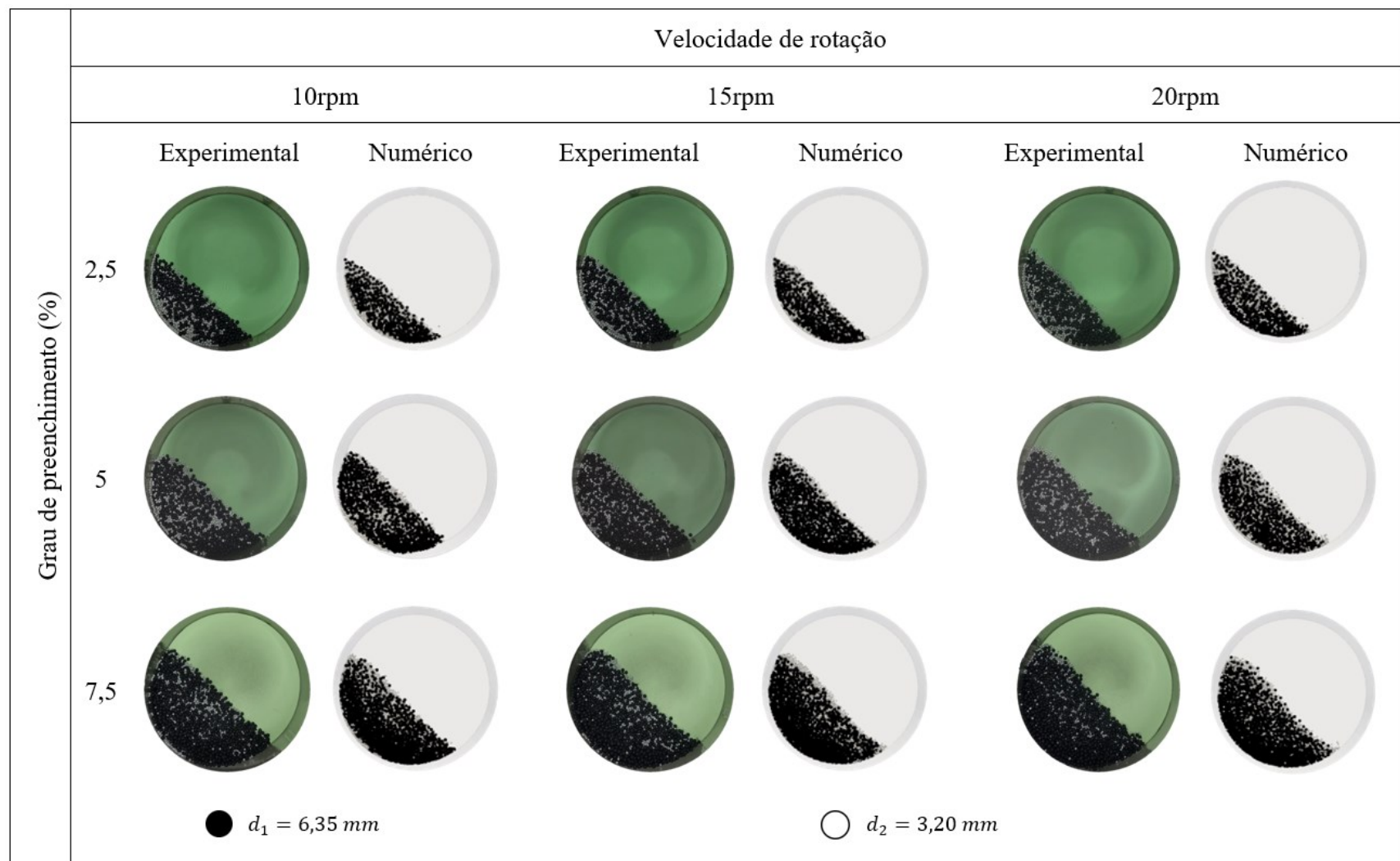


Figura 2.31: Vistas frontais dos resultados numérico e experimental da combinação M2 para o ângulo de inclinação de 50°

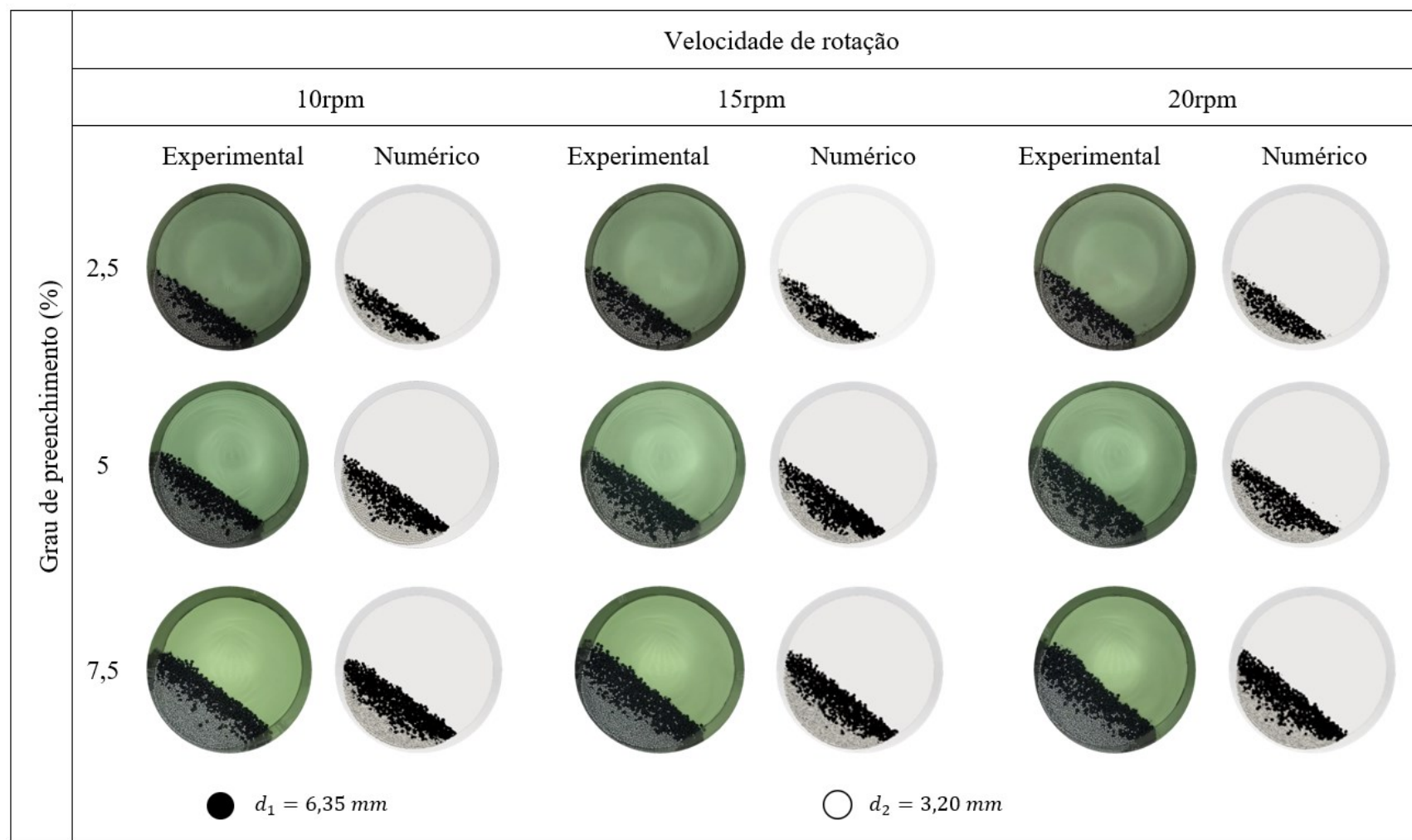


Figura 2.32: Vistas frontais dos resultados numérico e experimental da combinação M2 para o ângulo de inclinação de 60°

Após as análises qualitativas por meio das Figuras 2.30 a 2.32 e a análise quantitativa por meio dos gráficos do Apêndice B, pode-se afirmar que o modelo DEM conseguiu representar de forma adequada os escoamentos granulares estudados.

Adicionalmente, por meio de uma solução gelatinosa, conforme descrito na seção 2.3.1, tem-se a imagem da seção transversal do leito solidificado distante 2 cm em relação ao fundo do disco. Esse resultado se refere à combinação M2, ângulo de inclinação de 50°, grau de preenchimento de 5,0 % e velocidade de rotação de 10 rpm. Ela é apresentada na Figura 2.32, juntamente com o resultado numérico. Embora até então as análises para se verificar a correspondência dos resultados experimentais e numéricos se restringiam às imagens superficiais do leito granular, a Figura 2.33 indica que também há compatibilidade dos resultados no interior do leito.

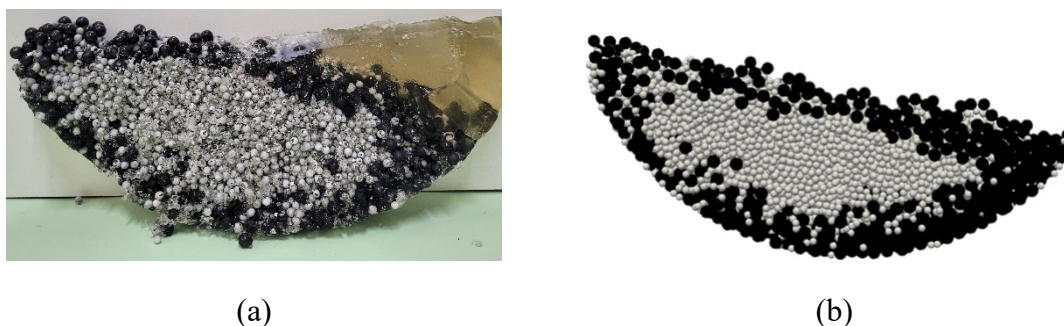


Figura 2.33: Seção transversal do leito solidificado distante 2 cm em relação ao fundo do disco: (a) experimental e (b) numérico

As Figuras 2.34 e 2.35 apresentam o comparativo das imagens numérica e experimental do estado de segregação no tempo $t = 60$ s da combinação M3, para os ângulos de inclinação de 40 e 50°, respectivamente. É possível verificar que o modelo DEM conseguiu representar de forma adequada os escoamentos granulares estudados. Não foram realizados estudos para verificar a influência dos parâmetros DEM sobre os índices de mistura.

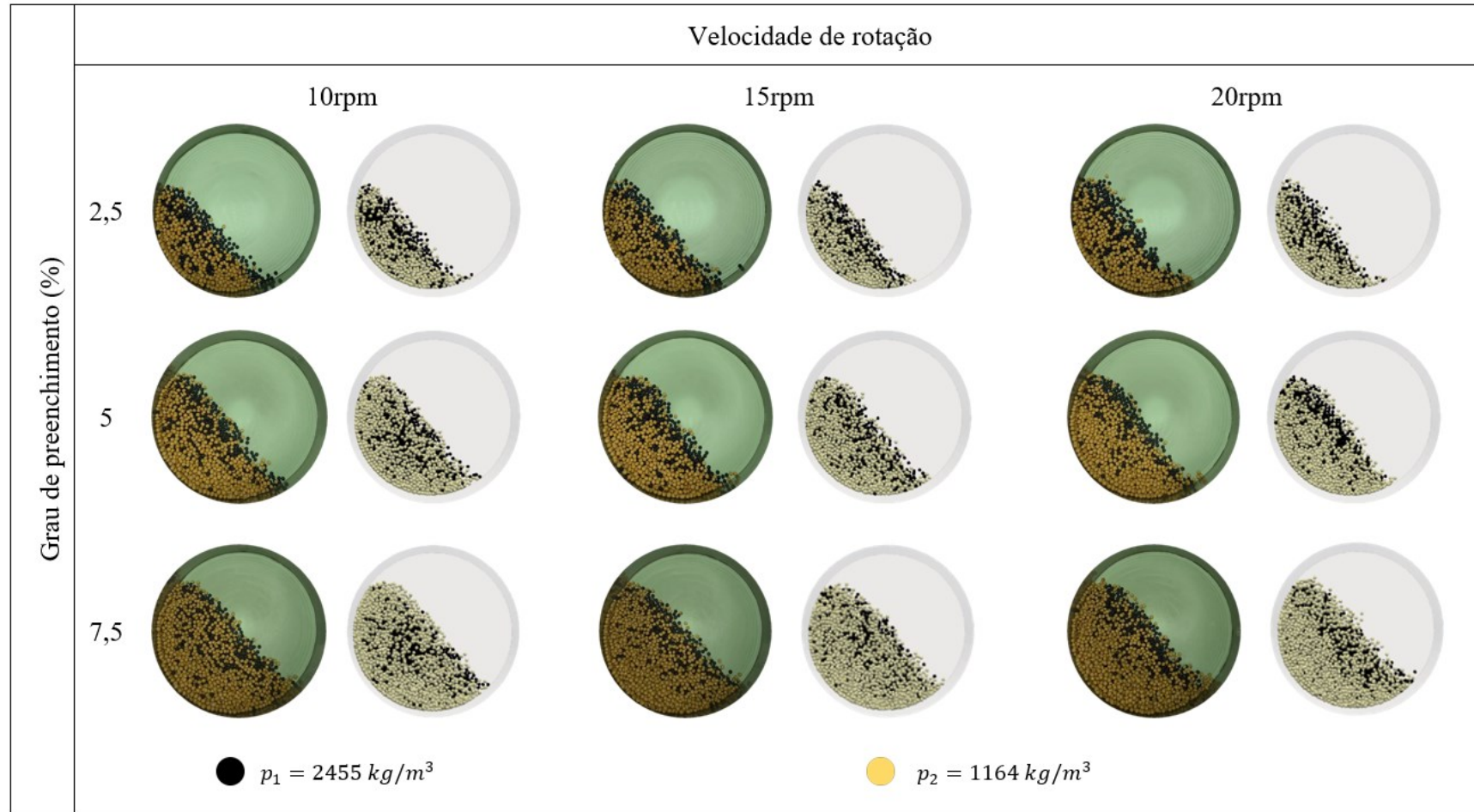


Figura 2.34: Vistas frontais dos resultados, numérico e experimental, da combinação M3 para o ângulo de inclinação de 40°

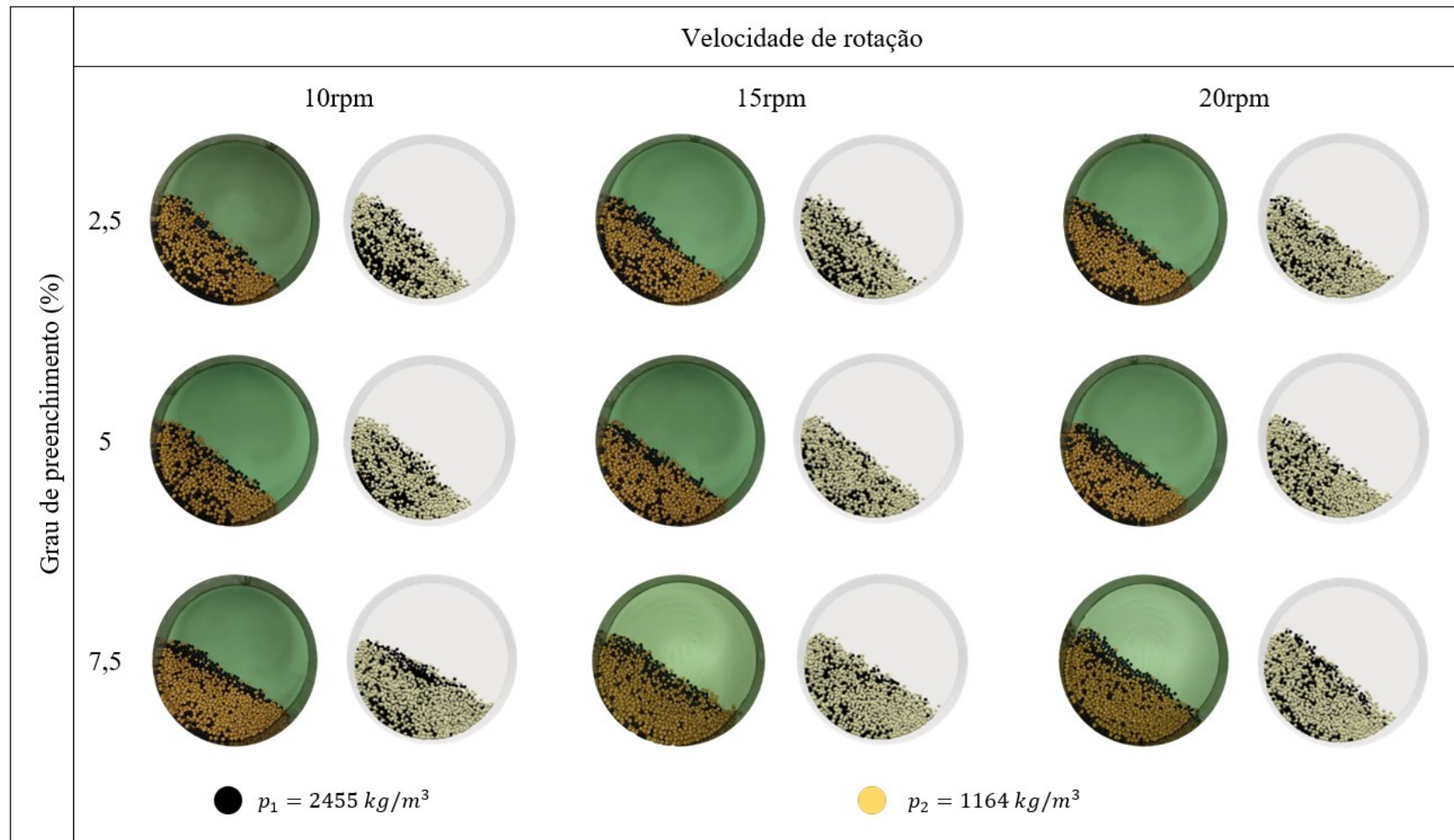


Figura 2.35: Vistas frontais dos resultados, numérico e experimental, da combinação M3 para o ângulo de inclinação de 50°

2.4.2.2 Influência das condições operacionais na segregação por diferenças de tamanho e densidade

Para avaliar a influência das condições operacionais sobre a segregação de partículas no disco rotatório, as entropias de mistura ao longo do tempo foram determinadas a partir dos dados de posição das partículas em todo o leito.

A Figura 2.36 se refere à combinação M2 (diferentes tamanhos de partículas), com graus de preenchimento (GP) de 5,0% e ângulos de inclinação (AI) de 40, 50 e 60°. Os gráficos referentes às outras condições operacionais são apresentados no Apêndice D.

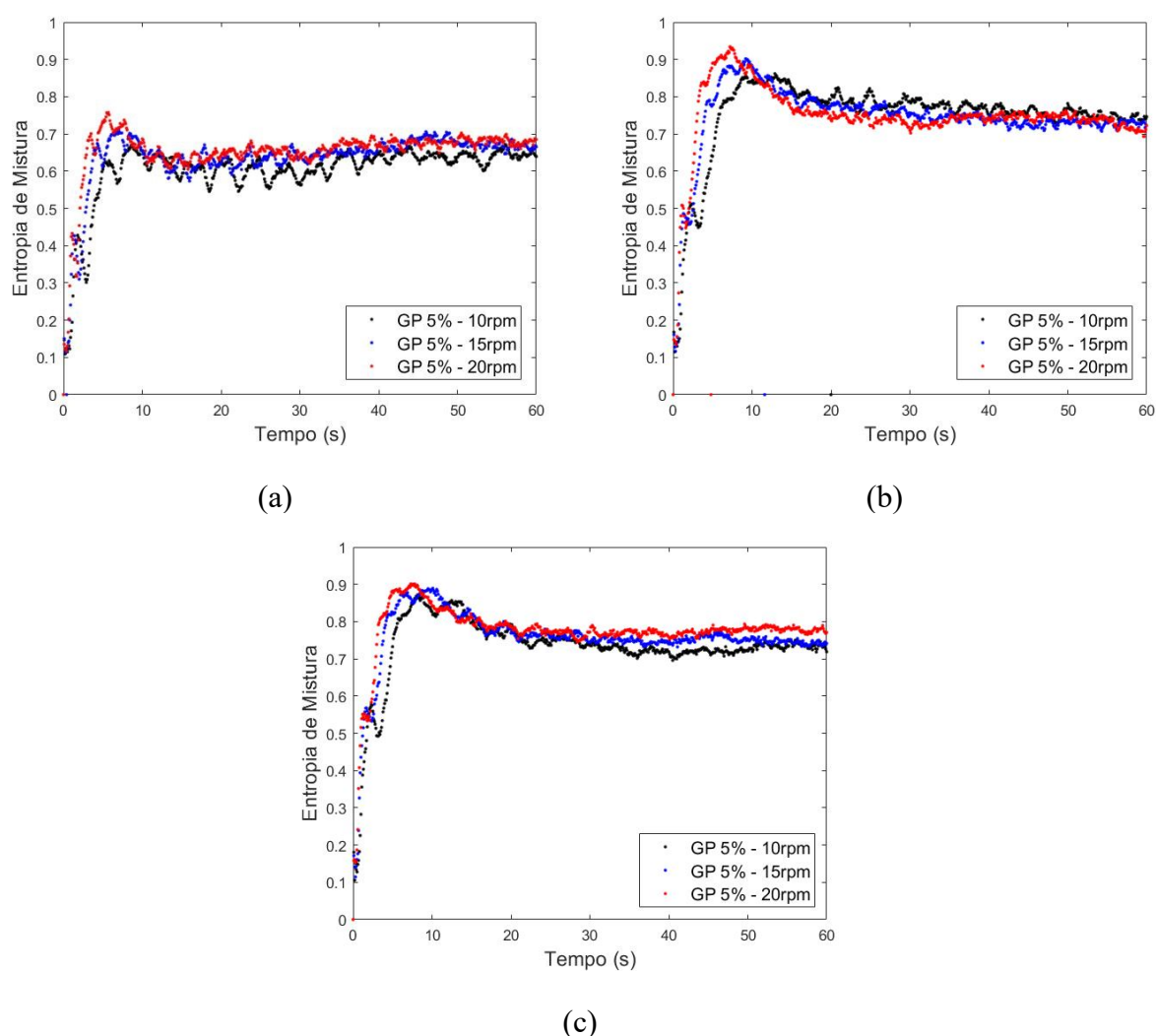


Figura 2.36: Índices de Entropia de Mistura da combinação M2 para diferentes ângulos de inclinação: a) 40°, b) 50° e c) 60°

Os valores do índice de entropia de mistura após atingir o estado estacionário (S_{∞}) e o tempo requerido para atingir esse estado (t_s) foram estimados a partir de um ajuste de curva

aproximando a dinâmica a um sistema de segunda ordem submetido a um degrau unitário. Considerou-se aqui que o estado estacionário foi atingido quando não havia mais de 2% de variação no seu valor.

O t_s e o S_∞ foram analisadas com base em planejamentos 3^k . Para a combinação M2, foram considerados os ângulos de inclinação de 40, 50 e 60°, nos graus de preenchimento de 2,5; 5,0 e 7,5% e velocidades de rotação (VR) de 10, 15 e 20 rpm. As equações para as previsões de $t_{s\infty}$ e S_∞ (Equações 2.33 e 2.34) foram ajustadas aos dados presentes no Apêndice F utilizando técnicas de regressão, apresentando coeficiente de determinação (r^2) de 0,82 e 0,91, respectivamente, permitindo, assim, quantificar os efeitos das variáveis independentes (na forma codificada) sobre a resposta.

$$t_{s\infty} = 22,85 + 5,19x_1 + 6,19x_2 - 3,48x_3 \quad (2.33)$$

$$S_\infty = 0,75 + 0,06x_1 + 0,03x_1^2 - 0,05x_2 - 0,02x_2^2 - 0,02x_3 - 0,03x_1x_2 \quad (2.34)$$

$$x_1 = \frac{AI - 50}{5} \quad x_2 = \frac{GP - 5}{2,5} \quad x_3 = \frac{VR - 15}{5}$$

em que: GP está em %, AI em ° e VR em rpm.

Para um nível de significância de 5,0%, foi possível verificar que todas as variáveis operacionais analisadas influenciaram tanto no tempo para se atingir o estado estacionário quanto na intensidade de segregação. O aumento do ângulo de inclinação bem como do grau de preenchimento aumentou o $t_{s\infty}$, ao passo que a velocidade de rotação teve influência negativa. Quanto ao índice de entropia de mistura, verificou-se que o aumento do ângulo continuou tendo efeito positivo, mas o grau de preenchimento passou a ter efeito negativo junto com a velocidade, ou seja, maiores velocidades e graus de preenchimento promoveram leitos mais segregados, ressaltando também que existiu um efeito de interação de AI e GP nesta resposta. Foi observado que esse efeito de interação foi inferior aos valores dos efeitos principais de AI e GP . Vale lembrar que, quanto mais segregado for o leito de partículas, menor é o valor de S_∞ . Tais resultados podem ser atribuídos ao fato de que velocidades de rotação mais elevadas aumentam a mobilidade das partículas, enquanto que o aumento do ângulo de inclinação a limita. O aumento do grau de preenchimento também limita a mobilidade das partículas. Isso ocasiona no aumento de $t_{s\infty}$, mas reduz o valor de S_∞ . Com

uma maior quantidade de partículas no leito granular, o estado estacionário demanda mais tempo para ser atingido, mas, uma vez alcançado, há menor circulação de partículas e ele não se altera.

Apesar de fornecer uma medida da intensidade de segregação, o índice de Entropia de Mistura não elucida sobre a segregação axial no disco rotatório. Como mencionado anteriormente, é de interesse industrial a ação segregadora do disco na direção axial. Os perfis de fração volumétrica axial da combinação M2, com grau de preenchimento de 5,0 % e ângulos de inclinação de 40, 50 e 60° são apresentados na Figura 2.37. Os perfis do restante dos casos são apresentados no Apêndice E. A fração volumétrica se refere à partícula de maior raio. Em geral, as distribuições axiais confirmam os resultados qualitativos observados nas vistas laterais dos experimentos (Figuras 2.14 a 2.16).

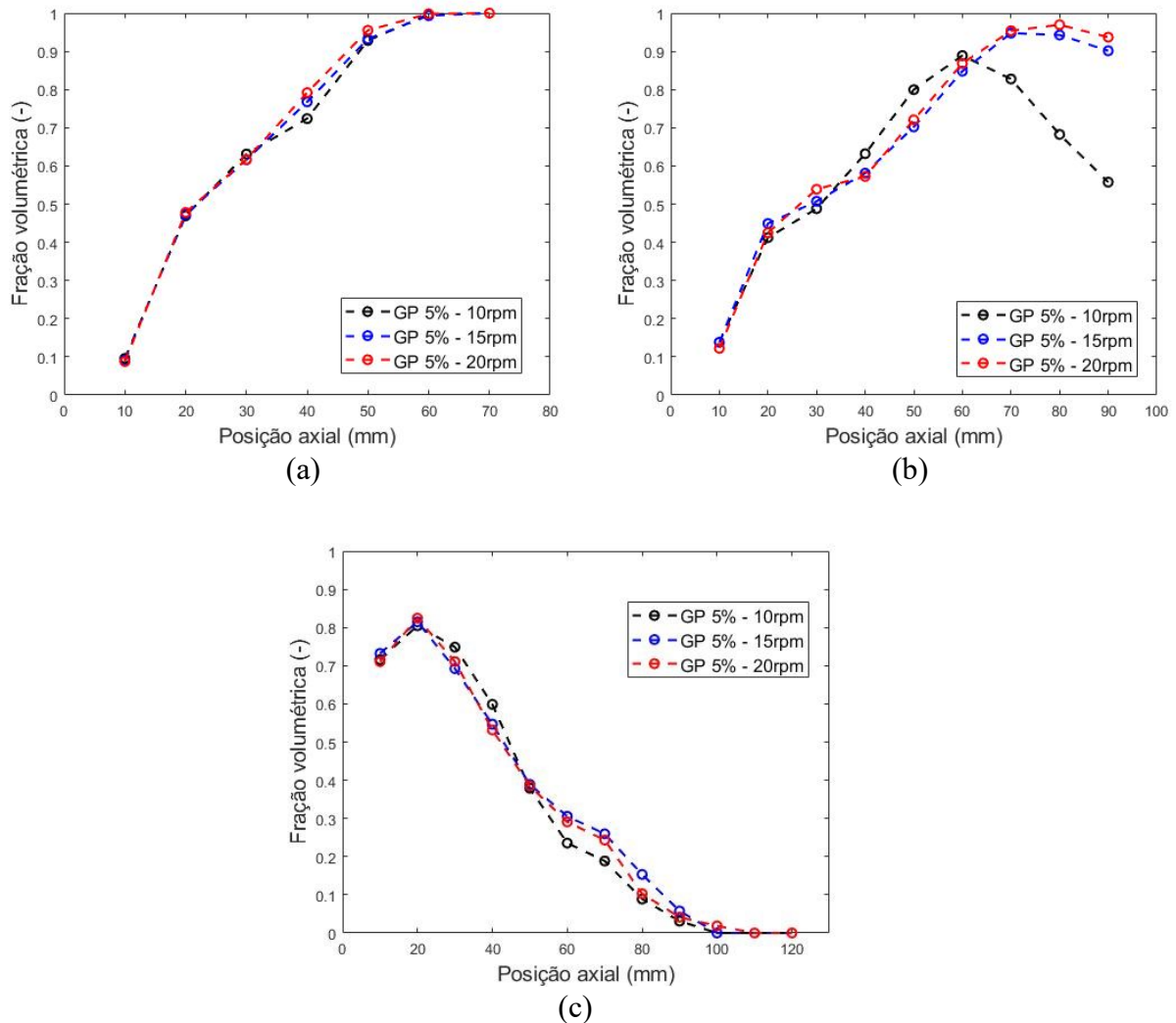


Figura 2.37: Perfis de fração volumétrica axial da combinação M2 para diferentes ângulos de inclinação: (a) 40°, (b) 50° e (c) 60°.

Para o ângulo de inclinação de 40°, em particular, verifica-se uma gradual segregação axial. Esse é um resultado esperado dada a inclinação do equipamento. A ação da gravidade favorece o mecanismo de percolação. Assim, as partículas menores são direcionadas para o fundo, enquanto as maiores permanecem próximas à borda. Ao avaliar o efeito das velocidades de rotação, observa-se que não há influência significativa desta variável.

Ao analisar os resultados para o ângulo de inclinação de 50°, é possível inferir que a segregação axial é menos acentuada e que a velocidade de rotação passa a ter influência sobre ela. Ao avaliar a segregação axial em tambores rotatórios operando com misturas bidispersas em tamanho, Brandão *et al.* (2019) e Kuo *et al.* (2005) não observaram efeito significativo da velocidade de rotação na formação de bandas axiais. Entretanto, Ward e Hourigan (2012)

verificaram que há um valor crítico da velocidade de rotação na formação de uma faixa segregada de partículas de menor diâmetro na parte inferior de um disco rotatório.

Quanto aos resultados para o ângulo de inclinação de 60° , verifica-se que a segregação axial também é gradual, mas oposta a que é verificada para a inclinação de 40° . Ao aumentar o ângulo de inclinação, verifica-se que a inércia passa a dominar o escoamento das partículas em detrimento da gravidade, prejudicando o mecanismo de percolação. As partículas menores que, por causa do movimento aleatório, se distanciam do fundo do disco, formam um bloco que não percola o leito na direção axial.

A fim de compreender se o fenômeno de segregação por diferença de tamanho de material no disco rotatório é majoritariamente axial ou radial, as componentes radial e axial do vetor gravidade teóricas foram avaliadas para cada ângulo de inclinação, como mostrado na Figura 2.38. É possível verificar que, quanto menor o ângulo de inclinação, menor será a componente radial e maior será a componente axial do vetor gravidade. Vale lembrar que o mecanismo de percolação é favorecido pela ação da gravidade. Portanto, os resultados sugerem que a percolação na direção axial é mais pronunciada em ângulos de inclinação menores.

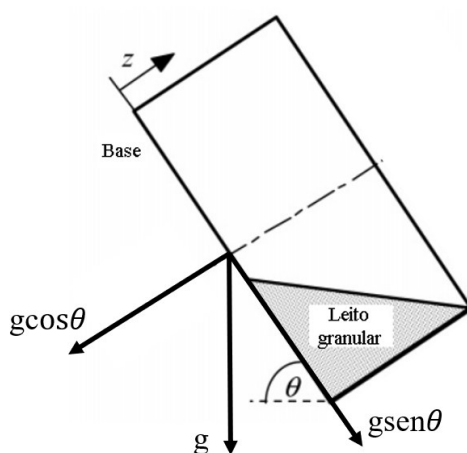


Figura 2.38: Componentes radial e axial do vetor gravidade.

A Figura 2.39 apresenta a trajetória ao longo de 60 s de duas partículas, P1 com $d_1 = 6,35$ mm e P2 com $d_2 = 3,20$ mm, selecionadas aleatoriamente. A direção z (axial) se refere ao eixo do disco rotatório e a direção y se refere à direção radial. Tais trajetórias exemplificam as inferências acerca dos mecanismos de segregação dos casos estudados. Para

os ângulos de 40 e 50°, verifica-se que as trajetórias das partículas P2, de menor diâmetro, se concentraram no fundo do disco rotatório ($z = 0$ m), ao passo que as trajetórias das partículas de maior diâmetro, P1, se concentraram mais distante dele. Para o ângulo de 60°, observa-se que a partícula P2 não chega a percolar o leito em direção ao fundo do disco, conforme mencionado anteriormente.

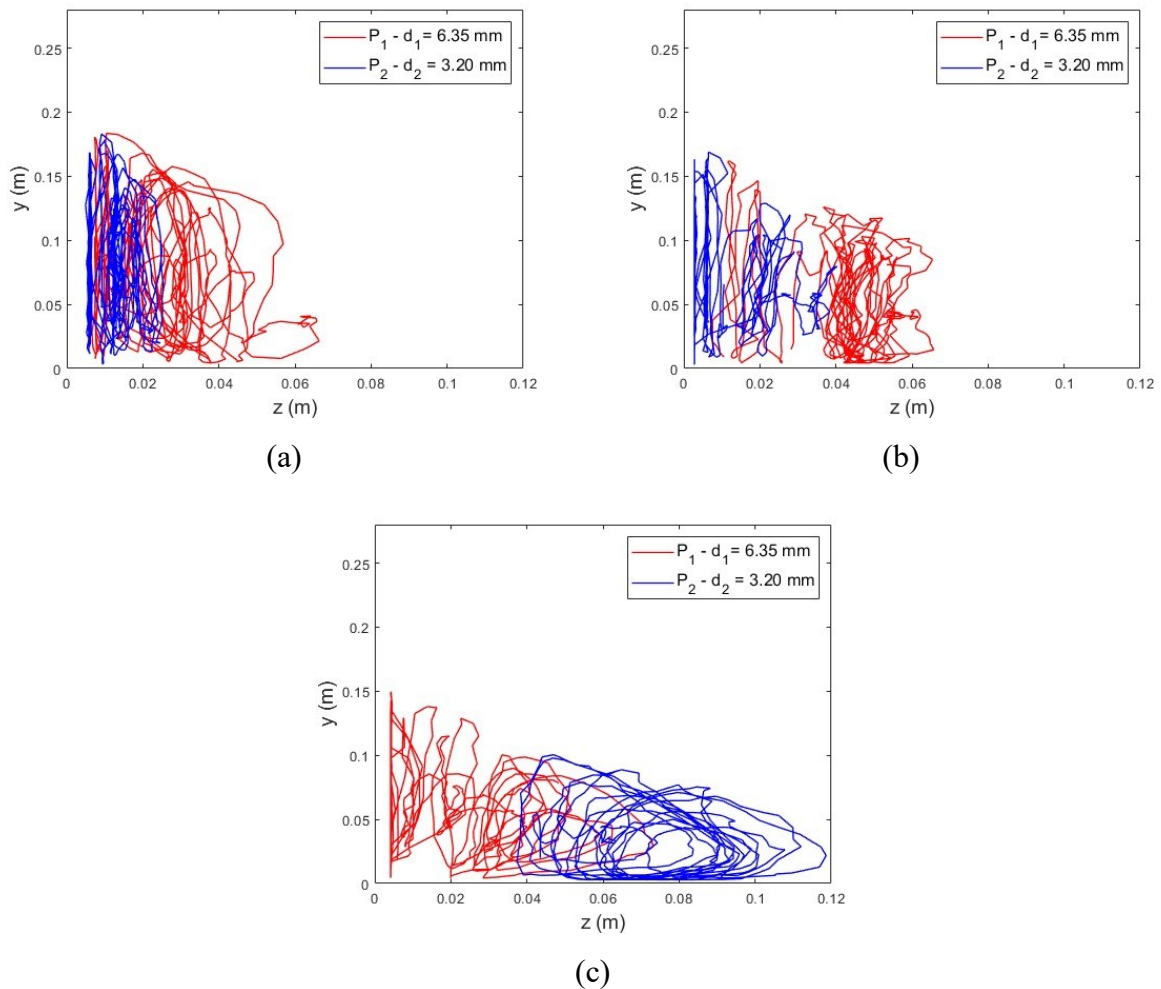


Figura 2.39: Trajetória ao longo de 60 s de duas partículas, P1 e P2, para a combinação M2, velocidade de 10 rpm e para ângulos de inclinação: (a) 40, (b) 50 e (c) 60°

A Figura 2.40 é referente à combinação M3 (diferentes densidades), com mesmo grau de preenchimento, mas ângulos de inclinação de 40, 45 e 50°. As equações para as predições de $t_{S\infty}$ e S_{∞} (Equações 2.35 e 2.36) foram ajustadas aos dados presentes no Apêndice F

utilizando técnicas de regressão, apresentando coeficientes de determinação (r^2) de 0,74 e 0,93, respectivamente.

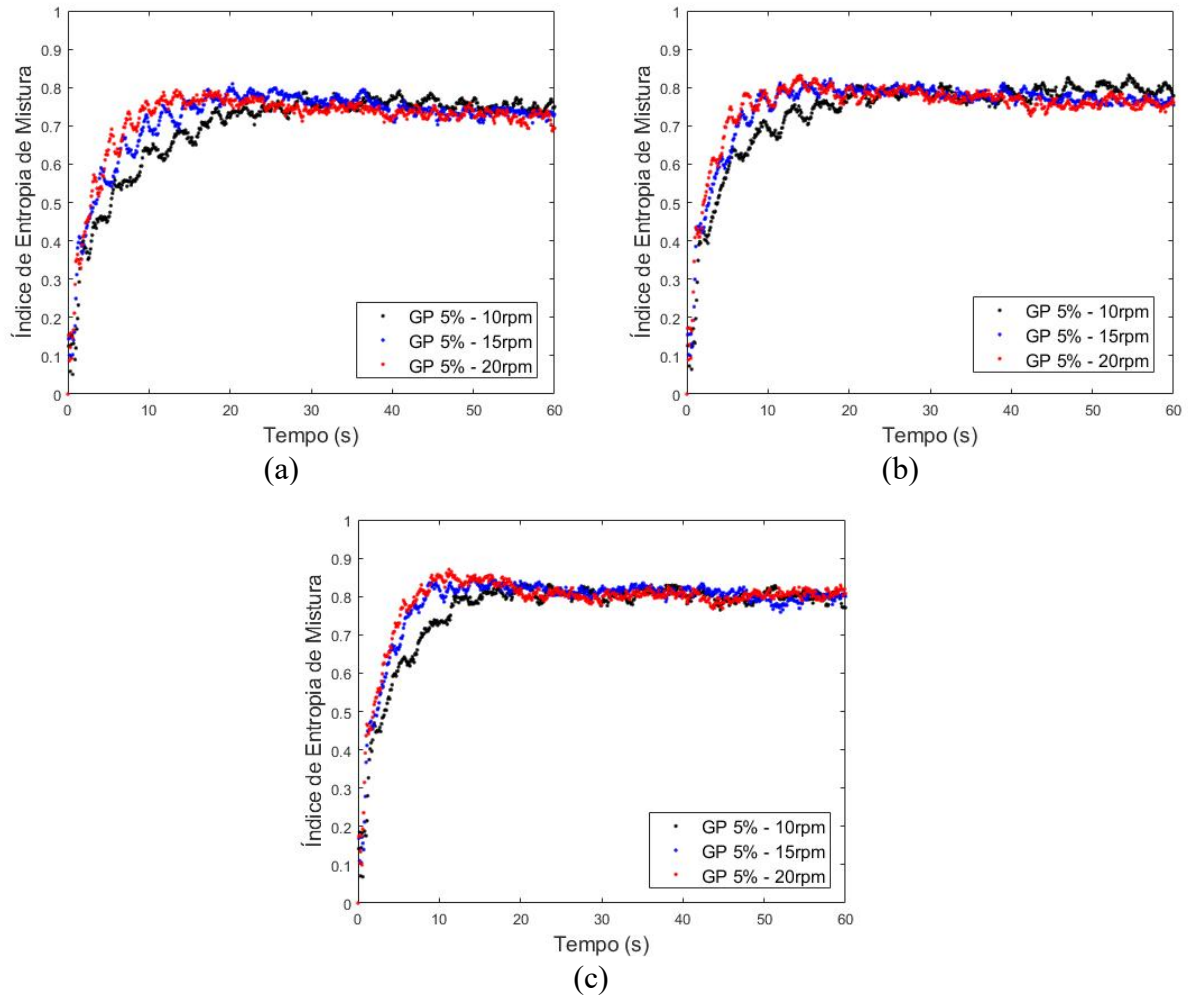


Figura 2.40: Índices de Entropia de Mistura da combinação M3 para diferentes ângulos de inclinação: a) 40°, b) 45° e c) 50°

$$t_{S\infty} = 16,13 - 5,83x_1 + 8,61x_2 - 4,03x_3 \quad (2.35)$$

$$S_{\infty} = 0,77 + 0,07x_1 - 0,15x_2 - 0,02x_3 \quad (2.36)$$

$$x_1 = \frac{AI - 45}{5} \quad x_2 = \frac{GP - 5}{2,5} \quad x_3 = \frac{VR - 15}{5}$$

Para um nível de significância de 5,0%, é possível verificar que todas as variáveis operacionais analisadas influenciaram tanto no tempo para se atingir o estado estacionário

quanto na intensidade de segregação. O aumento do grau de preenchimento aumenta o $t_{S\infty}$, ao passo que a velocidade de rotação e o ângulo de inclinação tem influência negativa. Não foi possível verificar de que maneira o ângulo de inclinação influencia a natureza dinâmica da segregação por diferença de densidade. Quanto ao índice de entropia de mistura, verifica-se que o aumento do ângulo tem efeito positivo e o grau de preenchimento junto com a velocidade tem efeito negativo, ou seja, assim como na combinação M2, menores ângulos de inclinação e maiores velocidades e graus de preenchimento promovem leitos mais segregados. Para uma melhor compreensão dos resultados, os perfis de fração volumétrica axial da combinação M3 são apresentados na Figura 2.41. A fração volumétrica se refere à partícula de maior densidade. Novamente, as distribuições axiais confirmam os resultados qualitativos observados nas vistas laterais dos experimentos (Figuras 2.17 e 2.18).

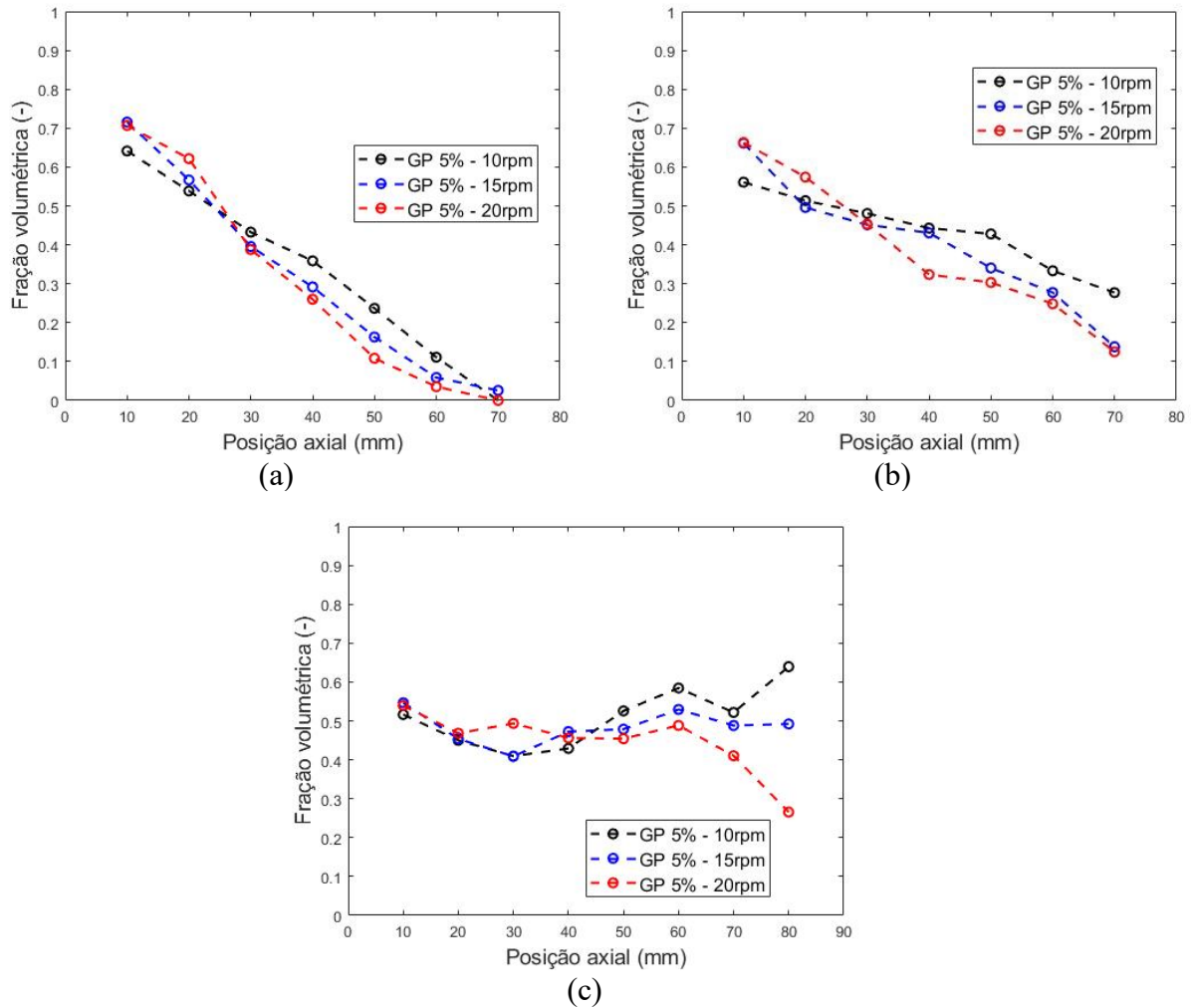


Figura 2.41: Perfis de fração volumétrica axial da combinação M3, para diferentes ângulos de inclinação: (a) 40°, (b) 45° e (c) 50°.

Para o ângulo de inclinação de 40°, observa-se uma gradual segregação axial. Mais uma vez, a ação da gravidade tem efeito positivo na segregação, uma vez que favorece o fenômeno de condensação granular. Nesse mecanismo, as partículas mais densas, quando atingem o ângulo de partida, não rolam ao longo da superfície livre como as menos densas; elas tendem a adentrar no leito. À medida que o ângulo de inclinação é aumentado, a segregação axial diminui, uma vez que a condensação granular é prejudicada.

A Figura 2.42 apresenta a trajetória ao longo de 60 s de duas partículas, P1 com $\rho_1 = 2455 \text{ kg/m}^3$ e P2 com $\rho_2 = 1164 \text{ kg/m}^3$, selecionadas aleatoriamente. Para os ângulos de 40 e 50°, é possível verificar que as trajetórias das partículas P1, de maior densidade, se

concentraram no interior do leito granular e no fundo do disco rotatório, ao passo que as trajetórias das partículas de menor densidade se concentraram ao longo da superfície livre.

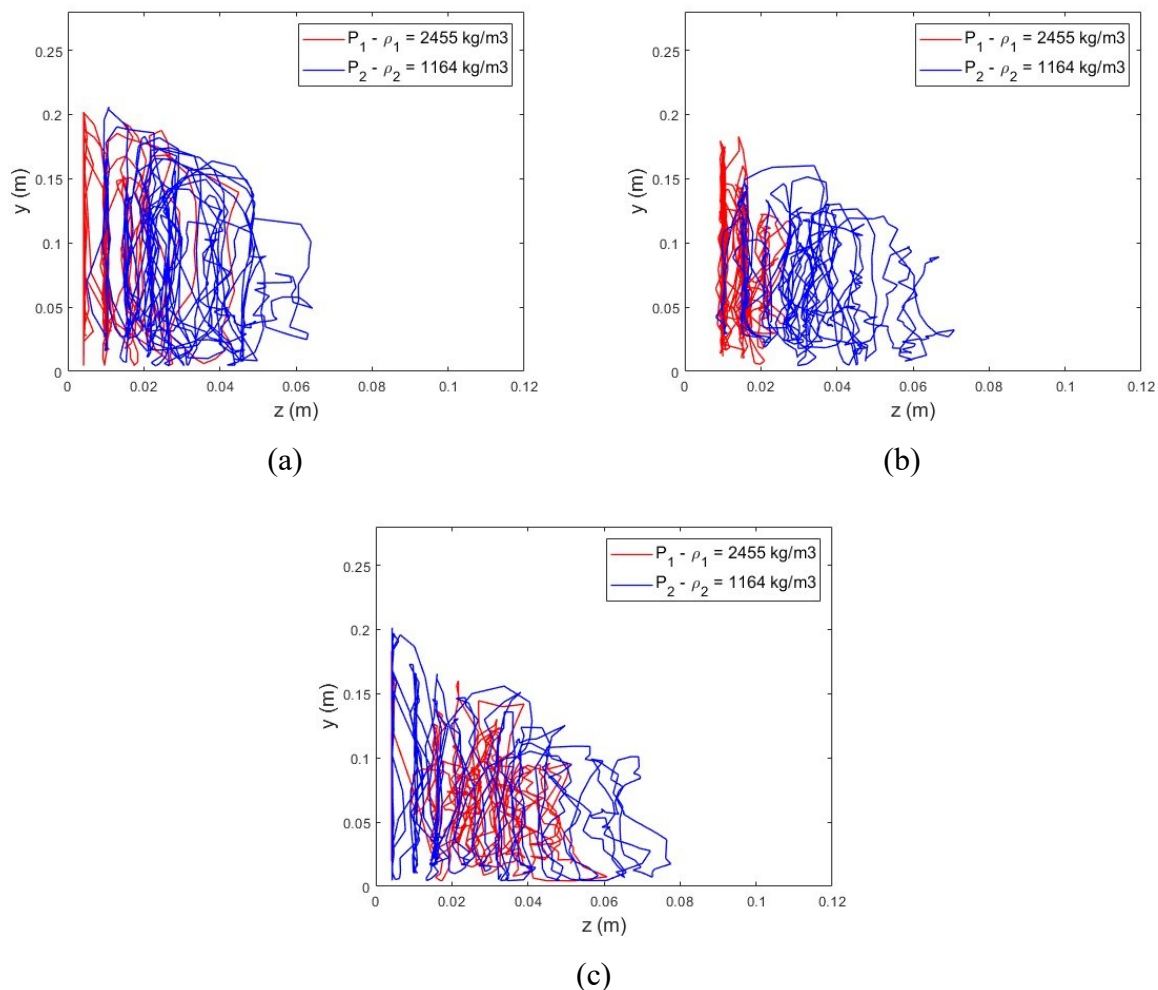


Figura 2.42: Trajetória ao longo de 60 s de duas partículas, P1 e P2, para combinação M3, velocidade de 10 rpm e para diferentes ângulos de inclinação: (a) 40°, (b) 50° e (c) 60°.

Efeito combinado das diferenças de tamanho e de densidade

Com o objetivo de avaliar o efeito combinado da diferença de tamanho e de densidade sobre o fenômeno de segregação no disco rotatório, foi aplicado um planejamento composto central, conforme descrito na seção 2.3.2. Os resultados qualitativos das simulações 1, 2, 5, 6 e 7 são apresentados na Figura 2.43. Essas simulações se referem às respectivas combinações: sem diferença de propriedades, diferentes densidades, diferentes tamanhos, partículas menores mais densas e partículas menores menos densas.

A partir da análise das imagens da Figura 2.43, pode-se afirmar que, conforme esperado, o leito granular apresentou um estado próximo do estado de mistura completa quando não houve diferença de propriedades físicas entre as partículas (Simulação 1). Na Simulação 2, em que ocorreu apenas a diferença de densidade entre as partículas, percebeu-se a formação de um núcleo radial de partículas mais densas no fundo do disco rotatório, assim como é observado em estudos de tambores rotatórios (Pereira *et al.*, 2011; Liao, 2019; Zuo *et al.*, 2022). No entanto, na vista frontal, não é possível visualizar claramente esse núcleo. Quando havia apenas diferença de tamanho entre as partículas (Simulação 5), não houve a formação do núcleo radial, sugerindo que a segregação é majoritariamente axial.

As Simulações 06 e 07 se referem ao caso com partículas de densidade e tamanho distintos. No primeiro caso, as partículas menores apresentam densidade maior, ao passo que na Simulação 07, elas apresentam densidade menor. Assim, em ambas as simulações, os dois mecanismos promotores da segregação, percolação e condensação granular, estão presentes. Na simulação 6, é observada uma intensificação do fenômeno de segregação, uma vez que há sinergismo entre os mecanismos. Brandão (2019), Yamamoto *et al.* (2016) e Soltanbeigi *et al.* (2018) observaram resultados semelhantes ao avaliar a segregação em tambores rotatórios. Na Simulação 07, é possível observar um estado de segregação atenuado, uma vez que os mecanismos de percolação e condensação granular competem entre si.

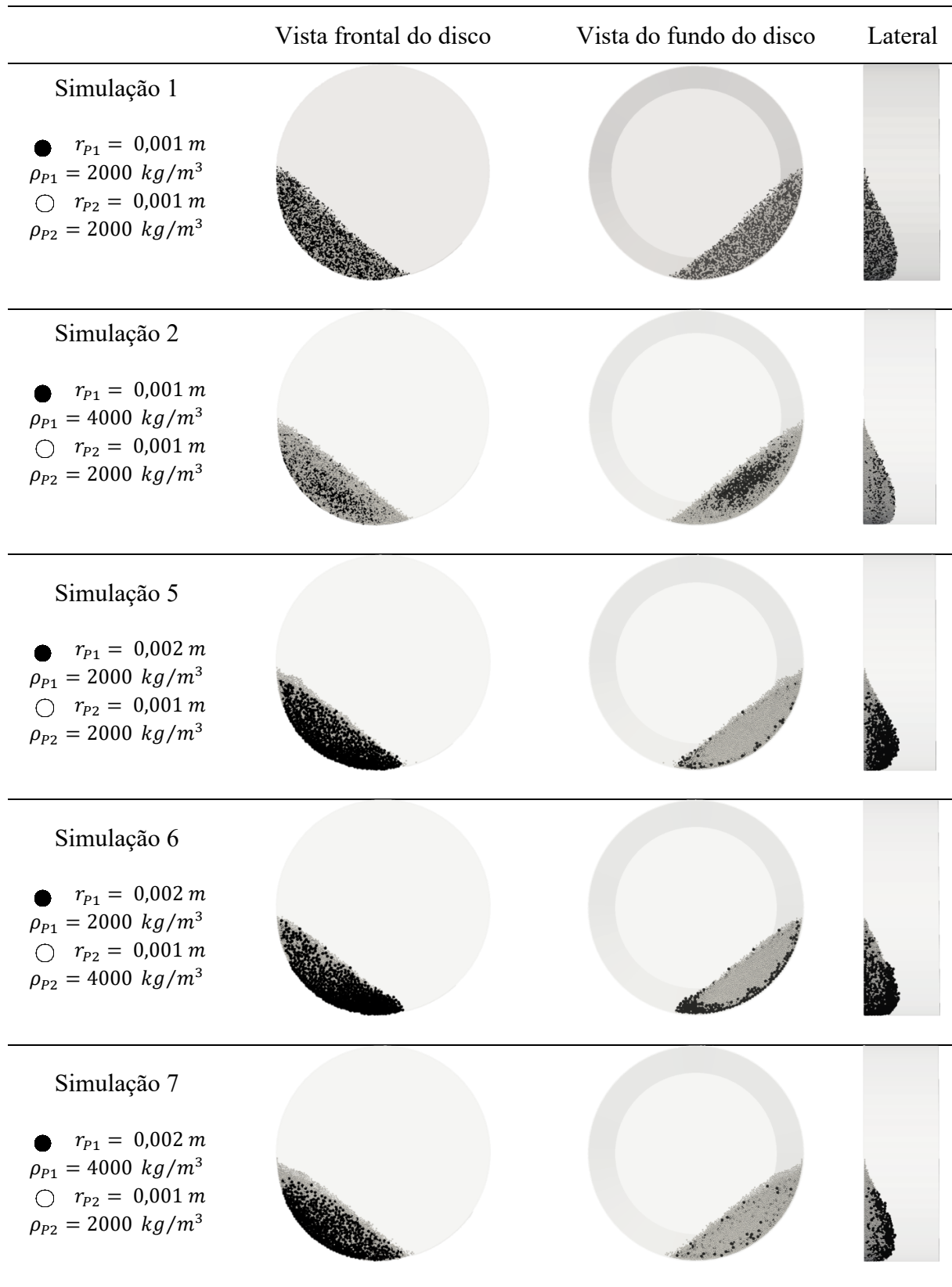


Figura 2.43: Avaliação qualitativa do efeito combinado da densidade e tamanho granular

A equação para a predição de S_{∞} (Equação 2.37) foi ajustada aos dados presentes no Apêndice F utilizando técnicas de regressão, apresentando coeficientes de determinação (r^2) de 0,82, permitindo, assim, quantificar os efeitos das variáveis independentes (na forma codificada) sobre a resposta.

$$S_{\infty} = 0,89 - 0,09x_1^2 - 0,09x_2^2 + 0,17x_1x_2 + 0,07x_3x_4 \quad (2.37)$$

$$x_4 = \frac{r_{P1} - 1,5}{0,5} \quad x_5 = \frac{r_{P2} - 1,5}{0,5} \quad x_6 = \frac{\rho_{P1} - 3000}{1000} \quad x_7 = \frac{\rho_{P2} - 3000}{1000}$$

Para um nível de significância de 5,0%, é possível verificar que, tanto o tamanho das partículas do tipo 1 e do tipo 2, quanto as suas densidades, apresentaram influência na intensidade de segregação. Para as faixas de valores avaliados nesse planejamento, verificou-se que o efeito da diferença de tamanho foi maior do que o efeito da diferença de densidades. Resultados similares foram encontrados por Fan *et al.* (2023) ao avaliar a segregação de misturas binárias em um granulador por cisalhamento.

Na Figura 2.44, são apresentados os perfis de concentração das partículas do tipo 2 ao longo do eixo axial para as Simulações 1, 2, 5, 6 e 7.

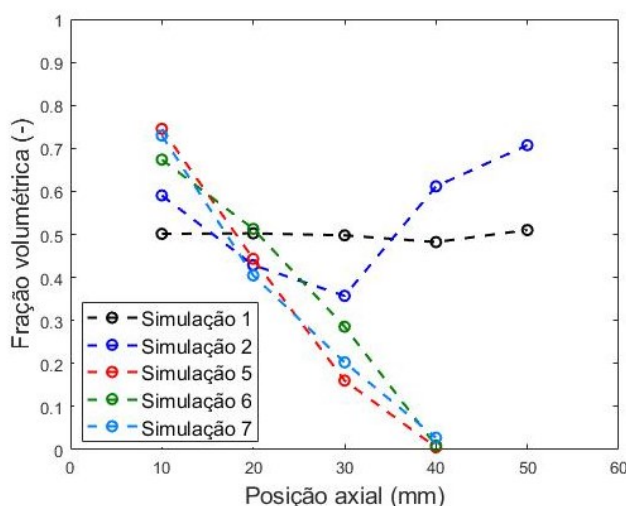


Figura 2.44: Influência do efeito combinado das propriedades granulares sobre o perfil de concentração axial.

Por meio da Figura 2.44, é possível verificar que não houve segregação na direção axial quando não há diferenças de tamanho e densidade das partículas (simulação 1). Verificou-se também que a segregação axial foi mais pronunciada quando houve diferença de

tamanho de material (simulações 5, 6 e 7). Para a simulação 2 em particular, em que ocorreu apenas a diferença de densidade entre as partículas, observou-se a formação de uma banda intermediária, o que pode ser verificado na imagem lateral do equipamento (Figura 2.43).

2.5 Conclusões

Com base nos objetivos propostos e nos resultados obtidos acerca da segregação granular no disco rotatório, têm-se as seguintes conclusões:

- Foi possível verificar qualitativamente a ação segregadora por diferenças de tamanho e densidade das partículas no disco rotatório. Foram realizados experimentos variando o ângulo de inclinação, a velocidade de rotação e o grau de preenchimento;
- Foi verificado que as simulações numéricas que utilizaram os parâmetros DEM obtidos experimentalmente não corresponderam às respostas experimentais quando valores reduzidos do Módulo de Young foram empregados. Foi possível observar também que o coeficiente de atrito estático partícula-parede (μ_{spw}) teve grande influência nos valores dos ângulos de partida encontrados numericamente, tanto para a configuração monodispersa quanto bidispersa em tamanho. Quanto à dinâmica de mistura/segregação no disco rotatório, apenas a configuração bidispersa foi sensível à variação desse parâmetro, sugerindo que analisar somente os resultados de combinações monodispersas não é suficiente para a validação da modelagem DEM;
- Ao avaliar diferentes valores do módulo de Young (E), observou-se que, quanto mais próximo do valor original (E_o), menor é a influência do μ_{spw} no ângulo de partida. Com o valor de E variando de E_o a $0,01E_o$, os resultados numéricos da dinâmica de mistura/segregação foram comparáveis entre si e estavam de acordo com os dados experimentais. Foi observado que esse o valor do módulo de Young afetou consideravelmente o comportamento de colisão das partículas em termos da magnitude das sobreposições e das velocidades das partículas. Portanto, existe um limite inferior para a escolha do valor do módulo de Young utilizado para diminuir os custos computacionais;
- Uma vez validada a modelagem DEM, foi possível inferir sobre a influência das condições operacionais na segregação de partículas no disco rotatório por meio de dois planejamentos 3^k sendo um para a segregação por diferença de tamanho e outro para a segregação por diferença de densidade;

- Para a segregação por diferença de tamanho, foi verificado que todas as condições operacionais analisadas possuíram influência significativa tanto no tempo para se atingir o estado estacionário quanto na intensidade de segregação. Maiores velocidades e graus de preenchimento promoveram leitos granulares mais segregados. Quanto à inclinação do disco, observou-se que, quanto menos inclinado, menor foi a intensidade de segregação. A distribuição axial das partículas foi fortemente influenciada pelo ângulo de inclinação. À medida que o ângulo de inclinação aumentava, a inércia passava a dominar a dinâmica das partículas em detrimento do mecanismo de percolação;
- Para a segregação por diferença de densidade, foi também verificado que todas as condições operacionais analisadas possuíram influência significativa tanto no tempo para se atingir o estado estacionário quanto na intensidade de segregação. As mesmas condições operacionais que favoreceram a percolação para a segregação por diferença de tamanho, favoreceram a condensação granular para a segregação por diferença de densidade;
- Para investigar o efeito combinado da diferença de tamanho e de densidade sobre a segregação no disco rotatório, foi aplicado um planejamento composto central. Para as faixas de valores avaliados nesse planejamento, verificou-se que o efeito da diferença de tamanho foi maior do que o efeito da diferença de densidades na intensidade de segregação. Quando as partículas menores apresentaram densidade maior, foi observado sinergia entre os mecanismos de percolação e de condensação granular, intensificando a segregação. Quando as partículas menores eram menos densas, esses dois mecanismos competiram entre si, diminuindo a intensidade de segregação.

CAPÍTULO 3

Escoamento e Aglomeração de Partículas Coesas no Disco Rotatório

3.1 Introdução

O presente estudo até então centrou-se no comportamento de partículas sem coesão no disco rotatório. No entanto, o processo de granulação e outros processos industriais são realizados com umidade presente no sistema. A presença da umidade em um leito granular leva a um aumento da coesão entre as partículas, o que possibilita a aglomeração e tem impacto direto na escoabilidade do material.

Diversos estudos se dedicaram à investigação das melhores condições operacionais para a granulação no disco rotatório por meio de ensaios experimentais (Rehder *et al.*, 2022; Chai *et al.*, 2017; Obraniak e Gluba, 2017). No entanto, não há clareza acerca do escoamento no interior desse equipamento e como ele se relaciona com o mecanismo de aglomeração do material granular. Nesse sentido, a utilização da modelagem DEM que incorpore forças de coesão pode fornecer importantes contribuições. O desenvolvimento desses modelos é relativamente recente e parte deles ainda carece de otimizações, dado o elevado custo computacional (Kosaku *et al.*, 2023; Eidevåg *et al.*, 2020).

Com a finalidade de se obter uma maior compreensão a respeito do escoamento no disco rotatório, estudos numéricos utilizando os modelos DEM supracitados foram realizados para avaliar o efeito da presença de líquido intersticial na dinâmica das partículas no interior do equipamento. Foi considerada a operação do equipamento em regime contínuo, assim como ocorre em grande parte dos processos de aglomeração.

3.2 Revisão Bibliográfica

3.2.1 Fundamentos da aglomeração de partículas

A aglomeração de partículas é realizada, usualmente, por via seca ou úmida. A aglomeração por via seca é resultado da compactação de partículas por meio da aplicação de pressão. São exemplos desse processo a briquetagem (Dehont *et al.*, 1989) e a granulação de

fármacos (Fan *et al.*, 2023). Na aglomeração por via úmida, uma solução líquida ligante é atomizada sobre um leito de partículas em constante agitação (Iveson e Luster, 1998).

Quando um líquido, água ou outro material ligante, é adicionado a um leito de partículas secas, as partículas se tornam coesas, formando pontes líquidas. Newitt e Conway-Jones (1958) e Barlow (1968) classificaram quatro regimes característicos dessas pontes líquidas de acordo com a quantidade de água: pendular, funicular, capilar e de gota (Figura 3.1). No regime pendular, a umidade livre é atraída para as interfaces entre as partículas sólidas devido à tensão superficial (Pietsch *et al.*, 1969). Ao aumentar a quantidade de material ligante, todas as superfícies sólidas internas estão envoltas por líquido, o que caracteriza o regime funicular. Se houver adição constante de líquido após atingida essa fase, as forças das pontes líquidas começam a enfraquecer. Quando o material fica totalmente saturado, tem-se o regime capilar. Nesse estado, o material aglomerado tende a se comportar como uma pasta, dado os níveis elevados de umidade. Caso ocorra uma sobressaturação, há o estado de "gota".

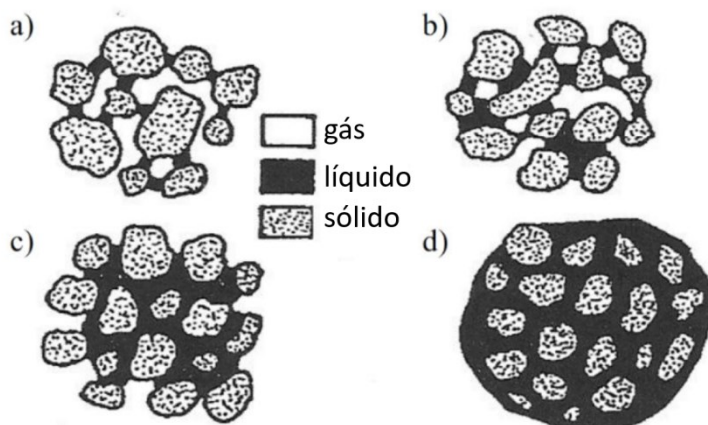


Figura 3.1: Estruturas das partículas aglomeradas em função da quantidade de líquido na ligação: a) estado pendular; b) estado funicular; c) estado capilar; d) estado de gota (Adaptado de Newitt e Conway-Jones, 1958)

A primeira etapa do processo típico de aglomeração por via úmida é a distribuição do líquido ligante sobre um leito de partículas secas. As gotículas penetram o leito por capilaridade e começam a se formar os aglomerados iniciais (nucleação). De acordo com Iveson *et al.* (2001), a formação dos núcleos é função das propriedades físico-químicas do material sólido e do líquido ligante. Se essas etapas iniciais são bem controladas, o tamanho e

a densidade dos grânulos formados são governados pelas fases de coalescência e consolidação, respectivamente. A coalescência consiste na colisão de dois aglomerados já formados. A colisão apenas é efetiva se as forças das pontes líquidas forem suficientes para manter unido o aglomerado recém-formado (Sochon e Salman, 2010). A consolidação do grânulo é dependente da sua deformação, causada pelo impacto durante as colisões entre partículas no granulador. Essa deformação é função das propriedades mecânicas da estrutura do grânulo e da energia de colisão (Litster, 2003). As etapas da aglomeração são ilustradas na Figura 3.2.

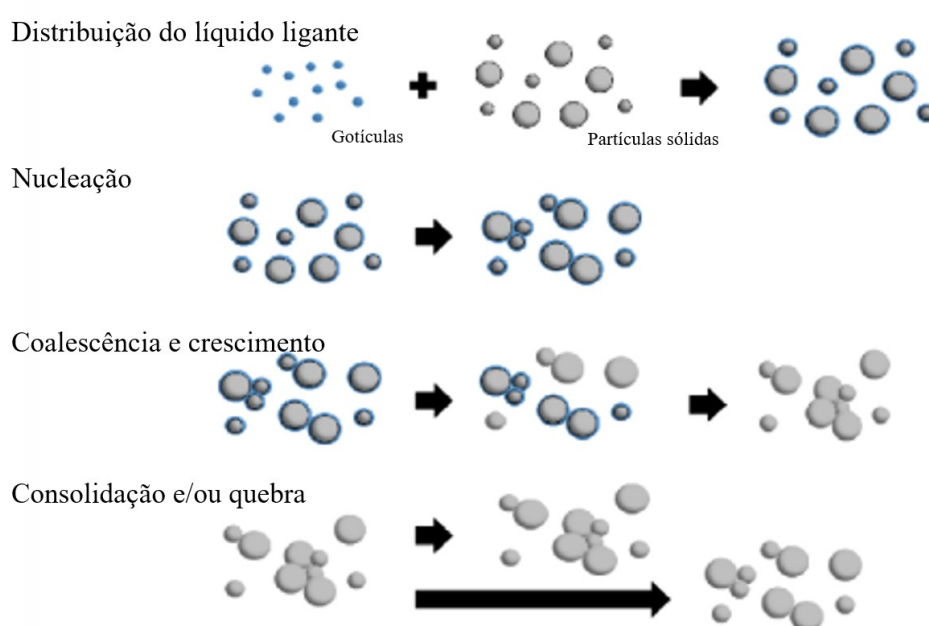


Figura 3.2: Esquema das etapas do processo de aglomeração (Adaptado de Nascimento *et al.*, 2023)

Além do processo de coalescência, o crescimento dos grânulos também pode se dar por meio de camadas (*layering*), em que as partículas menores e a fase líquida se depositam em volta de grãos pré-existent (núcleos). Sindén (2010) salientou que o diâmetro das partículas que formarão os núcleos deve ser de 5 a 15 vezes o diâmetro das partículas que formarão as camadas. Enquanto a granulação de fertilizantes ocorre tanto por coalescência quanto por crescimento em camadas (Adetayo *et al.*, 1993), a granulação de minério de ferro acontece majoritariamente por meio desse último (Litster e Waters, 1990). Na Figura 3.3, um esquema do mecanismo de granulação do minério de ferro por camadas é apresentado. Um

grânulo de minério de ferro é geralmente composto por uma partícula núcleo e uma camada externa de partículas finas em torno dela. As partículas de tamanho intermediário podem atuar como núcleos, como componentes da camada aderente ou deixar o equipamento sem aglomerar (Shi *et al.*, 2022).

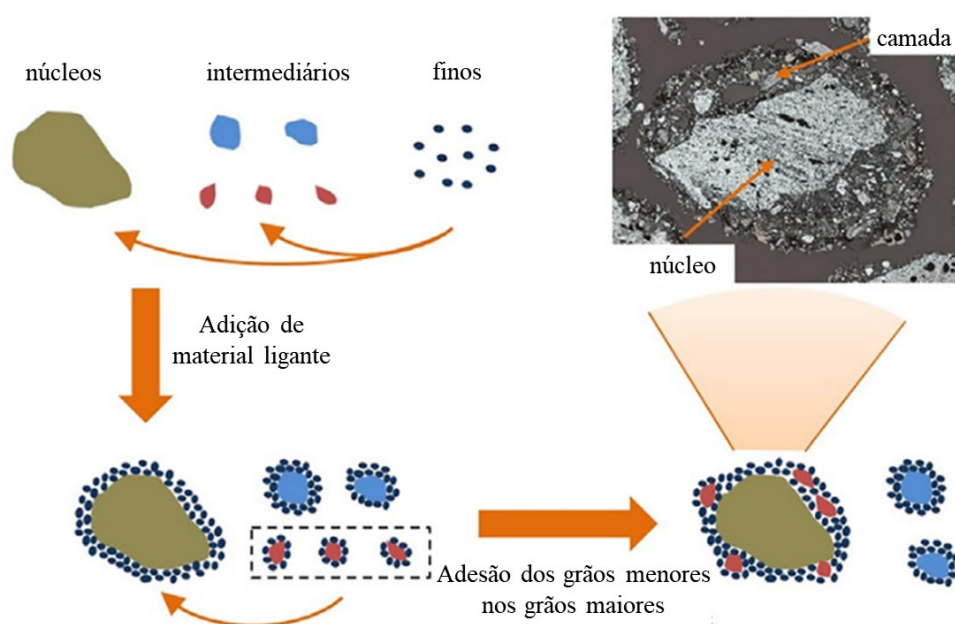


Figura 3.3: Diagrama esquemático do mecanismo de granulação do minério de ferro por crescimento em camadas (Adaptado de Shi *et al.*, 2022)

Os métodos e os equipamentos utilizados para a aglomeração a nível industrial dependem das propriedades desejadas para o produto final e da possibilidade de o sistema operar em processo contínuo ou em batelada. Além disso, a capacidade de produção requerida também determina o tipo de sistema de aglomeração utilizado.

O disco rotatório, foco do presente estudo, é amplamente utilizado para a granulação de fertilizantes e químicos agrícolas e para a pelotização de minérios de ferro e outros metais não-ferrosos. Como mencionado no Capítulo 2, a escolha do disco para a aglomeração de partículas se dá por sua pronunciada ação segregadora por diferença de tamanho de material.

O desempenho da aglomeração no disco rotatório é influenciado por diversas variáveis: velocidade de rotação, grau de preenchimento e ângulo de inclinação do equipamento; quantidade e teor de ligante da solução adicionada, bem como seu local de

adição (Bouffard, 2005). Adicionalmente, também afetam as características do produto final o tempo de granulação e a altura da borda do equipamento (Chadwick *et al.*, 2005).

A granulação de fosfogesso no disco rotatório empregando fécula de mandioca como material ligante foi estudada por Rezende *et al.* (2015). Ao variar a composição do material ligante na solução aspergida e a inclinação do disco rotatório, os autores verificaram que essas variáveis têm efeitos significativos na granulometria desejada para o produto.

Rehder (2019) estudou a granulação de um *blend* de chás em um disco rotatório operando em batelada. A autora verificou que maiores velocidades de rotação do equipamento favoreceram o crescimento dos grânulos e que havia proporções ideais para a relação de volume da solução aspergida e a massa de sólidos, pois elevados volumes da solução levaram à formação de pastas.

Oliveira *et al.* (2022) também avaliaram o desempenho de um disco rotatório operando em batelada. Nesse caso, o material granular era superfosfato. Os autores verificaram que velocidades de rotação moderadas conduziram à formação de partículas muito grandes, ao passo que, em altas rotações, ocorreram catarateamento do pó, aumentando a fração de finos.

3.2.2 Forças coesivas no DEM

A grande maioria dos estudos numéricos sobre escoamentos granulares é centrada em escoamentos não coesivos, como pode ser verificado na Figura 3.4, em que apresenta o número total de publicações na plataforma *ScienceDirect* com as seguintes palavras-chave de pesquisa: “DEM” e “forças coesivas” e “DEM” sem “forças coesivas”. Apesar da teoria a respeito dos modelos de forças coesivas não ter sido desenvolvida recentemente (Johnson *et al.*, 1971 e Israelachvili, 1992), sua aplicação em códigos DEM se deu nas últimas duas décadas (Soulié *et al.*, 2006; Easo e Wassgren, 2014; Tsunazawa *et al.*, 2016).

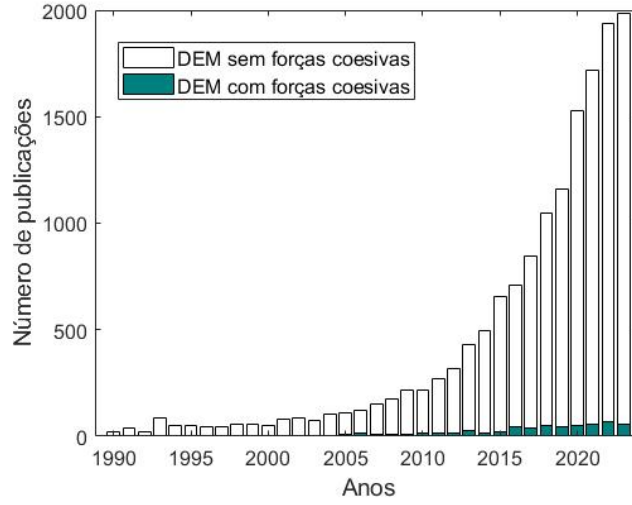


Figura 3.4: Número total de publicações na plataforma ScienceDirect com as seguintes palavras-chave de pesquisa: “DEM” e “forças coesivas” e “DEM” sem “forças coesivas”.

O efeito da presença de umidade em escoamentos granulares pode ser modelado via DEM por meio da inclusão de uma força adicional de coesão no cálculo do movimento de translação das partículas (Equação 2.3). Há diversos modelos de contato para descrever essa força de coesão, os quais podem ser divididos em: modelos de contato de adesão e modelos de contato de forças de capilaridade.

Os modelos de contato de adesão são tipicamente utilizados para a simulação de pós finos coesos que interagem com superfícies. Dentre os modelos disponíveis, um dos mais utilizados é o modelo de Johnson-Kendall-Roberts (JKR), o qual adiciona uma força de adesão governada pela área de contato e por uma densidade de energia que aglutina as partículas (Johnson *et al.*, 1971). O movimento de translação das partículas passa a ser definido pela Equação 3.1:

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_n^{ij} + \mathbf{F}_t^{ij}) + \mathbf{F}_{JKR} + m_i \mathbf{g} \quad (3.1)$$

em que a força de adesão F_{JKR} é definida por:

$$\mathbf{F}_{JKR} = \frac{4E^* a_{JKR}^3}{3R^*} - 4\sqrt{2\pi\Delta\gamma E^* a^3} \quad (3.2)$$

O raio de contato a_{JKR} e a energia de contato de superfície $\Delta\gamma$ entre os sólidos i e j são determinados pelas Equações 3.3 e 3.4, respectivamente.

$$a_{JKR} = \frac{R}{E^*} \left[\mathbf{F}_n + 3\Delta\gamma\pi R + \sqrt{6\Delta\gamma\pi R \mathbf{F}_n + (3\Delta\gamma\pi R)^2} \right] \quad (3.3)$$

$$\Delta\gamma = \gamma_i + \gamma_j - \gamma_{ij} \quad (3.4)$$

O modelo JKR propõe que, para separar dois sólidos em contato, uma força de tração crítica F_{PO} é requerida:

$$\mathbf{F}_{PO} = -\frac{3}{2}\pi\Delta\gamma R^* \quad (3.5)$$

Para a aplicação do modelo JKR ser viável na abordagem DEM, uma versão simplificada é considerada. O modelo de Johnson-Kendall-Roberts Simplificado (SJKR) tem dois parâmetros de entrada: o raio da partícula e a densidade de energia coesiva para as interações partícula-partícula e partícula-parede. Nesse modelo, a força de coesão é determinada por:

$$\mathbf{F}_{SJKR} = \mathbf{F}_n + \Omega_{CED} A_{cont} \quad (3.6)$$

sendo Ω_{CED} a densidade de energia de coesão e A_{cont} é a área de contato, definida como:

$$A_{cont} = \pi(R_i^2 - R_c^2) \quad (3.7)$$

em que R_c é a distância entre o centro da partícula e o ponto de contato.

Por outro lado, as forças de capilaridade ($\mathbf{F}_{cap}$) são resultantes da tensão superficial que existe devido à presença de umidade em um meio granular. Essas forças formam pontes líquidas nas interações partícula-partícula e partícula-parede. Dessa forma, o movimento de translação das partículas passa a ser definido pela Equação 3.8.

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_n^{ij} + \mathbf{F}_t^{ij}) + \mathbf{F}_{cap} + m_i \mathbf{g} \quad (3.8)$$

Israelachvili (1992) desenvolveu uma formulação para determinar a força de capilaridade presente em uma ponte líquida que descreve sua magnitude de forma satisfatória. No entanto, ela falha em capturar a ruptura da ponte líquida para um dado volume de líquido. Para contornar essa limitação, Rabinovich *et al.* (2005) desenvolveram uma abordagem baseada na diferença de pressão encontrada ao longo da ponte líquida.

Uma extensão do modelo de Rabinovich *et al.* (2005) foi proposta por Soulié *et al.* (2006) para permitir modelar as pontes líquidas para esferas de diferentes tamanhos (Figura 3.5).

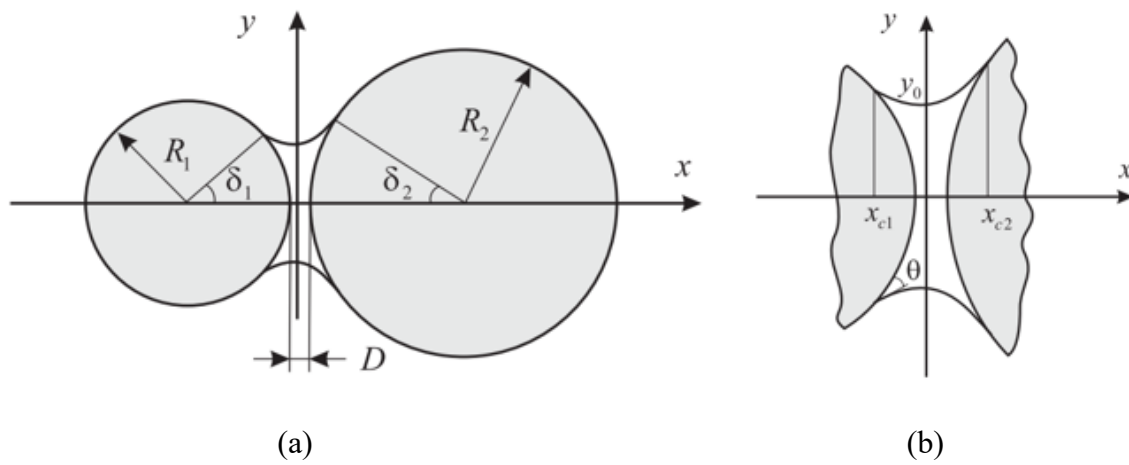


Figura 3.5: Representação geométrica de uma ponte líquida entre duas partículas (a); e detalhes da ponte líquida (b) (Soulié *et al.*, 2006)

Segundo Soulié *et al.* (2006), para o cálculo da força de capilaridade, é necessário primeiramente determinar o volume da ponte líquida (V_{lb}), o qual é definido por:

$$V_{lb} = \int_{x_{c1}}^{x_{c2}} y^2(x) dx - \frac{1}{3} \pi R_1^3 (1 - \cos \delta_1)^2 (2 + \cos \delta_1) - \frac{1}{3} \pi R_2^3 (1 - \cos \delta_2)^2 (2 + \cos \delta_2) \quad (3.9)$$

em que δ_1 e δ_2 são os ângulos formados pela borda da ponte líquida em relação ao centro das partículas i e j ; x_{c1} e x_{c2} são as distâncias no eixo y até a borda da ponte líquida.

Adicionalmente, a distância, D , entre as partículas é dada por:

$$D = R_2(1 - \cos \delta_2) + x_{c2} + R_1(1 - \cos \delta_1) - x_{c1} \quad (3.10)$$

Assim, se a tensão superficial γ_{ij} é conhecida, a força de capilaridade pode ser calculada por:

$$\mathbf{F}_{cap} = -\pi\gamma_{ij}\sqrt{R_i R_j} \left[c + \exp\left(a \frac{D}{R_j} + b\right) \right] \quad (3.11)$$

sendo

$$a = -1,1 \left(\frac{V_{lb}}{R_j^3} \right)^{-0,53} \quad (3.12)$$

$$b = \left(-0,148 \ln\left(\frac{V_{lb}}{R_j^3}\right) - 0,96 \right) \theta_c^2 - 0,0082 \ln\left(\frac{V_{lb}}{R_j^3}\right) + 0,48 \quad (3.13)$$

$$c = 0,0018 \ln\left(\frac{V_{lb}}{R_j^3}\right) + 0,078 \quad (3.14)$$

e θ_c o ângulo de contato da ponte líquida.

A ponte líquida se rompe quando a distância de separação entre as partículas atinge um valor a partir do qual ela se torna energeticamente instável. Lian *et al.* (1993) propuseram a seguinte relação para o cálculo da distância de ruptura, denominada D_0 :

$$D_0 = \left(1 + \frac{\theta_c}{2} \right) (V_{lb})^{\frac{1}{3}} \quad (3.15)$$

Além da força de capilaridade, as partículas estão sujeitas a uma força viscosa, resultante da compressão e tração do líquido que forma a ponte líquida entre elas. As forças viscosas normal e tangencial podem ser calculadas por meio das Equações 3.16 e 3.17, conforme sugerido por Nase *et al.* (2001).

$$\mathbf{F}_n^{vis} = 6\pi\mu R^* \mathbf{v}_n^{rel} \frac{R_{ij}}{D} \quad (3.16)$$

$$\mathbf{F}_t^{vis} = 6\pi\mu R^* \mathbf{v}_t^{rel} \left(\frac{8}{15} \ln\left(\frac{R_{ij}}{D}\right) + 0,9588 \right) \quad (3.17)$$

em que $\mathbf{v}_n^{rel}$ e $\mathbf{v}_t^{rel}$ são as velocidades normal e tangencial relativas das partículas no ponto de contato, μ é a viscosidade cinemática do líquido e R^* é o raio efetivo da partícula, como definido na seção 2.2.2.

A combinação dos modelos de Soulié *et al.* (2006), de Lian *et al.* (1993) e de Nase *et al.* (2001) compõe o modelo proposto por Easo e Wassgren (2014). O modelo Easo se baseia na adição da força de capilaridade devido ao filme líquido formado na superfície de cada uma das partículas que compõem o leito granular. A ponte líquida se forma devido ao contato entre elas e se rompe quando D_0 é atingida. Na implementação do modelo, Easo e Wassgren (2014) simplificaram o cálculo do volume da ponte líquida, anteriormente definido pela Equação 3.9. Desta forma, a nova definição se torna:

$$V_{lb \text{ (simplificado)}} = 0,05(V_{sLi} + V_{sLj}) \quad (3.18)$$

em que V_{sLi} e V_{sLj} são os volumes dos líquidos presentes nas superfícies das partículas i e j .

Outro ajuste proposto por Easo e Wassgren (2014) se refere ao cálculo das forças viscosas normal e tangencial. As Equações 3.16 e 3.17 tendem ao infinito à medida que as partículas se aproximam ($D \rightarrow 0$). Dessa forma, para evitar instabilidades, os autores supracitados assumiram que existe uma distância mínima de separação, D_{min} , que delimita um valor máximo para as forças viscosas. Adicionalmente, uma distância máxima de separação, D_{max} , a partir da qual a força viscosa não é mais aplicável também foi considerada.

Estudos numéricos recentes têm empregado os modelos de contato de adesão (Eidevåg *et al.*, 2020; Roessler *et al.*, 2019; Umer e Siraj, 2018; Bramböck, 2017) e modelos de forças de capilaridade (Kosaku *et al.*, 2023; Danczyk *et al.*, 2022; Kasper *et al.*, 2021; Cui *et al.*, 2021) para representar as forças coesivas em escoamentos granulares. Ao comparar os dois modelos na simulação de minério de ferro úmido, Carr *et al.* (2016) verificaram que apenas o modelo de força de capilaridade foi capaz de representar adequadamente a aglomeração de material observada experimentalmente. Com o objetivo de simular o processo de granulação do mesmo material em um tambor rotativo, Shi *et al.* (2022) utilizaram o modelo Easo de capilaridade e obtiveram resultados numéricos em concordância com os resultados experimentais. Utilizando o mesmo modelo, Wang *et al.* (2023) avaliaram a granulação da

mistura de minério de ferro e coque no mesmo equipamento. Ambos os estudos, no entanto, não consideraram qualquer força coesiva do leito granular com as paredes do tambor.

Em relação ao disco rotatório, em particular, apenas os estudos de Kosaku *et al.* (2023) e Tsunazawa *et al.* (2016) contemplaram a aplicação dos modelos DEM para forças coesivas. Tsunazawa *et al.* (2016) desenvolveram um código para o cálculo das forças de capilaridade baseado na formulação de Israelachvili (1992). O trabalho de Kosaku *et al.* (2023) apresentou um modelo de escalonamento aplicado ao código supracitado. Em ambos os estudos, o uso do equipamento foi apenas para a validação dos modelos propostos, utilizando partículas de vidro e água como material ligante. Não houveram investigações acerca do escoamento do leito granular.

3.3 Material e Métodos

Esta seção apresenta a unidade experimental empregada nesse estudo, bem como as metodologias experimentais e numéricas para investigar o fenômeno de aglomeração no disco rotatório. Todo o trabalho foi realizado no Laboratório de Sistema Particulados da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia (FEQUI/UFU).

3.3.1 Estudo experimental

Para validar o estudo numérico do escoamento no disco rotatório, foi utilizado um disco rotatório construído em aço inoxidável com diâmetro (D) de 35 cm, altura (L) de 20 cm e ângulo de inclinação (θ) variável. As paredes internas do disco foram pintadas com uma tinta impermeabilizante para diminuir a aderência das partículas úmidas.

Como material granular, foram utilizadas partículas de vidro com diâmetro médio de peneira de 2,18 mm. A esfericidade do material com valor de 0,89 foi determinada utilizando o equipamento CAMSIZER®, o qual armazena e processa de forma dinâmica projeções de um conjunto de partículas individuais.

O coeficiente de atrito estático partícula-parede μ_{pw} foi determinado seguindo a metodologia do plano inclinado proposta pela ASTM G115 - 10 (2013), conforme descrito na seção 2.2.2 do Capítulo 2. Uma chapa de aço pintada com a mesma tinta das paredes do disco foi utilizada no plano. Para a determinação do ângulo de inclinação foi utilizada uma câmera de alta velocidade. O valor encontrado foi $\mu_{pw} = 0,42 \pm 0,04$.

Para avaliar o efeito da presença de umidade no disco, foram comparados os escoamentos de partículas secas e de partículas úmidas. Portanto, os testes experimentais para validar a modelagem DEM foram realizados para as duas condições. Uma massa de 200 g de partículas foi fixada, correspondendo a 1,4% de grau de preenchimento do disco rotatório. Assim, como descrito na seção 2.3.1 do Capítulo 2, a câmera de alta velocidade foi posicionada defronte à abertura do disco. O equipamento foi colocado em movimento e a movimentação das partículas foi acompanhada. O ângulo de inclinação foi fixado em 50° e foram consideradas as velocidades de 10, 30 e 50 rpm.

Nos experimentos com umidade, água pura e uma solução aquosa de maltodextrina de concentração de 35,0% m/m foram utilizadas como líquido intersticial do leito granular. Os

líquidos eram adicionados uniformemente às partículas antes de serem colocadas no disco. O teor era de 1,0% v/v em relação ao volume do leito granular para garantir que o sistema estava no estado pendular (Lekhal *et al.*, 2012; Remy *et al.*, 2012). As partículas eram então posicionadas no disco e ele era colocado em movimento.

3.3.2 Estudo numérico do escoamento granular

Para investigar numericamente o escoamento e a aglomeração de partículas coesas no disco rotatório, a modelagem DEM foi utilizada. Todas as simulações foram conduzidas no código numérico livre LIGGGHTS. Para as simulações das partículas secas, foi utilizado o modelo de contato de Hertz-Mindlin. As condições de simulação são apresentadas na Tabela 3.1. Todos os casos avaliados experimentalmente foram simulados numericamente. Novamente, a estabilidade numérica foi garantida ao usar passos de tempo equivalentes a 20% do tempo de Rayleigh (Equação 2.17).

Os valores de coeficiente marcados com asterisco foram obtidos por Nascimento *et al.* (2021) em um estudo que utilizou a mesma partícula de vidro. A escolha pelo valor do módulo de Young se baseou nos resultados do Capítulo 2.

Tabela 3.1: Parâmetros de entrada DEM do material granular

Parâmetros	Valor
Diâmetro (mm)	2,18
Coeficiente de restituição:	
$e_{pp}(-)$	0,80*
$e_{pw}(-)$	0,80
Coeficiente de atrito estático:	
$\mu_{spp}(-)$	0,70*
$\mu_{spw}(-)$	0,42
Coeficiente de atrito de rolamento:	
$\mu_{Rpp}(-)$	0,04*
$\mu_{RpW}(-)$	0,04*
Razão de Poisson:	
Partículas (-)	0,22
Parede (-)	0,30
Módulo de Young:	
Partículas (Pa)	$5,0 \times 10^7$
Parede (Pa)	$5,0 \times 10^8$
Passo de tempo (s)	$8,0 \times 10^{-7}$

3.3.2.1 Validação do modelo numérico não coesivo

Para a validação da modelagem DEM para o escoamento não coesivo, os resultados numéricos foram confrontados com os resultados experimentais. Assim como na seção 2.3.3, a resposta utilizada para a comparação foi o ângulo de partida. Para cada medida, foram consideradas 10 imagens frontais do escoamento no disco.

3.3.2.2 Estudo numérico do escoamento granular coesivo

Para reproduzir numericamente o comportamento das forças coesivas no escoamento granular, foi proposta, no presente estudo, a combinação de dois modelos de contato. Esse modelo híbrido é composto pelo modelo de capilaridade de Easo (Easo e Wassgreen, 2014;

Lian *et al.*, 1993; Nase *et al.*, 2001; Soulié *et al.*, 2006) para os contatos partícula-partícula e pelo modelo SJKR (Johnson *et al.*, 1971) para os contatos partícula-parede, ambos descritos na seção 3.2.1 e já implementados no código LIGGGHTS. Os resultados que serão apresentados na seção 3.4.2 evidenciaram a necessidade do emprego desse modelo híbrido, uma vez que o emprego apenas do modelo Easo falhou em reproduzir o comportamento do leito granular no disco rotatório.

A Tabela 3.2 apresenta os parâmetros DEM de entrada utilizados no presente estudo. Deles, apenas o parâmetro densidade de energia de coesão se refere ao modelo SJKR. Todos os outros são referentes ao modelo Easo. Com exceção dos coeficientes de atrito estático e de rolamento do contato partícula-partícula, foi considerado que os parâmetros do material granular para as forças de contato são os mesmos das partículas secas (Tabela 3.1), assim como no trabalho de Kosaku *et al.* (2023).

Tabela 3.2: Parâmetros de entrada DEM do material granular para o modelo híbrido Easo e SJKR

Parâmetros	Valor	
	Água pura	Solução de maltodextrina
Tensão Superficial (N/m)*	0,073	0,043
Viscosidade do líquido (Pa·s)*	0,001	0,027
Ângulo de contato (°)*	15,0	67,9
Fração volumétrica de líquido	0,01	0,01
D_{min} (m)	$1,01R_{ij}$	$1,01R_{ij}$
D_{max} (m)	$1,10R_{ij}$	$1,10R_{ij}$
Coeficiente de atrito estático $\mu_{Spp}(-)$	(ver Tabela 3.3)	0,70
Coeficiente de atrito de rolamento $\mu_{Rpp}(-)$	(ver Tabela 3.3)	0,04
Densidade de Energia de Coesão ($\cdot 10^5$ J/m ³)	(ver Tabela 3.3)	3 – 9

Os parâmetros assinalados com asterisco foram obtidos na literatura. Para os valores de tensão superficial, viscosidade e ângulo de contato da água pura, foram considerados os trabalhos de Tsunazawa *et al.* (2016) e Remy *et al.* (2012). Para a solução de maltodextrina, o estudo de Nascimento *et al.* (2023) foi considerado. Os valores considerados para D_{min} e

D_{max} no presente estudo foram sugestões dos próprios autores do modelo (Easo e Wassgren, 2014) para evitar custos computacionais elevados.

Ainda sobre a implementação do modelo Easo, as seguintes suposições são necessárias (Easo e Wassgreen, 2014):

1. A quantidade total de líquido intersticial no sistema está perfeitamente misturada ao longo de todo o leito de partículas. Cada partícula se encontra perfeitamente envolvida por líquido;
2. Não ocorre condensação ou evaporação do líquido;
3. Quando a ponte líquida se rompe, assume-se que o volume de líquido da superfície se distribui uniformemente entre as partículas abrangidas por ela.

Não é possível obter experimentalmente o valor da densidade de energia de coesão (DEC). No presente estudo, foi empregada uma etapa de calibração para esse parâmetro, cuja metodologia é descrita a seguir.

3.3.2.3 Calibração e validação do modelo numérico coesivo

Anteriormente à etapa de calibração do parâmetro de entrada DEC, foi realizada uma análise de sensibilidade, por meio de um planejamento composto central (Tabela 3.3) para o caso do disco operando com velocidade de rotação de 10 rpm e com água pura como líquido intersticial. Nesse planejamento, foram consideradas também como variáveis independentes os coeficientes de atrito estático e de rolamento do contato partícula-partícula.

O objetivo dessa abordagem era avaliar a influência do valor da DEC no escoamento do leito de partículas no disco rotatório e verificar se a premissa de que os parâmetros do material granular poderiam ser considerados os mesmos das partículas secas era válida. Os valores dos níveis do planejamento para a variável independente DEC foram escolhidos com base no estudo de Bramböck (2017) e em testes preliminares. Como variável dependente, foi considerado o ângulo de partida dos resultados numéricos. Dada a natureza dinâmica da altura do leito por causa das forças coesivas, as medições foram realizadas em intervalos de 0,2 s a partir do instante 2,0 s após o início da rotação do disco até 4 s, obtendo um valor médio para o ângulo de partida.

Tabela 3.3: Planejamento composto central utilizado na análise de sensibilidade dos parâmetros numéricos DEM para o escoamento coesivo no disco rotatório

Variável	Níveis				
	$-\alpha$ (-1,6818)	-1	0	+1	$+\alpha$ (+1,6818)
μ_{spp} (-)	0,080	0,250	0,500	0,750	0,920
μ_{Rpp} (-)	0,006	0,020	0,040	0,074	0,060
DEC ($\cdot 10^5$ J/m ³)	1,640	3,000	5,000	7,000	8,360

Após a análise de sensibilidade, foi realizada a calibração do valor de DEC, utilizando intervalos de $1,0 \cdot 10^5$ J/m³ para as iterações. Além do ângulo de partida ao longo do tempo, a área total de partículas aderidas à superfície da parede também foi determinada por meio de análise das imagens. Os valores encontrados foram normalizados em relação à área total da superfície do fundo do disco.

3.3.2.4 Estudo numérico do disco rotatório operando em regime contínuo

Uma vez validada a modelagem DEM, foram realizados estudos numéricos para o disco rotatório operando em regime contínuo. Para isso, foi considerado um disco com mesmo diâmetro, mas com altura (L) de 5 cm. A razão L/D utilizada no presente estudo está de acordo com as razões L/D de disco granuladores industriais (FEECO International, 2023).

Em todos os casos simulados, o material foi alimentado a uma vazão mássica Q , correspondente a 10% do volume máximo do disco por minuto. A alimentação foi posicionada sobre o leito, conforme os ensaios experimentais de Chadwick *et al.* (2005). Os limites da área de alimentação, a partir da qual as partículas caíam em queda livre, tem as seguintes coordenadas: $x_1 = 0,01$; $x_2 = 0,05$; $y_1 = 0,00$ e $y_2 = 0,01$ m. Nessa etapa do estudo, além das partículas monodispersas com diâmetro de 2,18 mm, foi também considerado um leito granular polidisperso (Tabela 3.4) com o objetivo de avaliar o mecanismo de crescimento de grãos por camadas.

Tabela 3.4: Distribuição de tamanhos do leito polidisperso

Diâmetro (mm)	1,0	1,5	2,0	3,4	4,8
Fração mássica (%)	21,5	26,8	16,0	12,5	23,2

Adicionalmente aos casos estudados, foi também avaliado como a presença de um raspador influenciaria os resultados. Para isso, foi considerada uma nova geometria do disco rotatório (Figura 3.6).

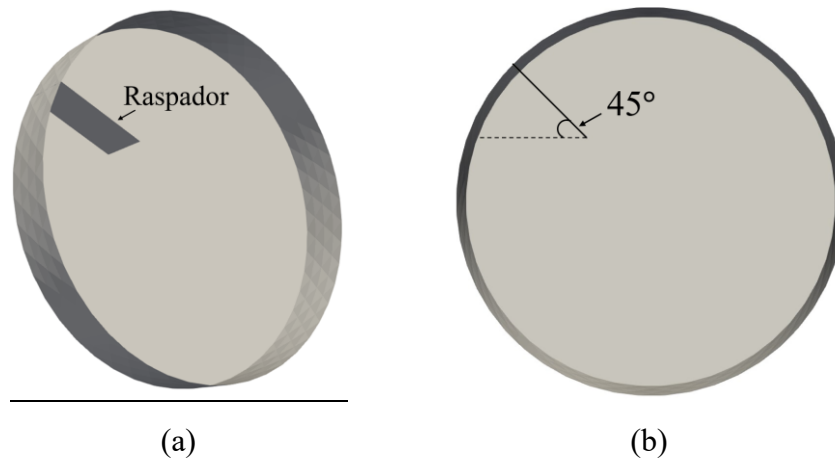


Figura 3.6: Geometria do disco rotatório com raspador: (a) vista em perspectiva e (b) vista frontal.

Após a realização de cada simulação, arquivos contendo informações de todas as partículas presentes no sistema, como posição e velocidade, foram gerados pelo *software* de pós processamento *Paraview* 5.11. As análises realizadas com esses dados são descritas a seguir. Para essas análises, foram desenvolvidos códigos *Matlab*, os quais são apresentados no Apêndice G.

Determinação do holdup dos sólidos no disco rotatório

O *holdup* dos sólidos no disco rotatório foi determinado por meio de simulações numéricas. O equipamento era continuamente alimentado e, a partir do momento em que o material começava a ser descarregado, a massa das partículas retidas era mensurada com base na quantidade delas. Essa análise foi realizada apenas para os casos com leito granular monodisperso.

O *holdup* dos sólidos (η) foi calculado pela Equação 3.19, em que m , ρ e V são a massa retida, a densidade da partícula e o volume do disco rotatório, respectivamente.

$$\eta = \frac{m}{\rho V} \quad (3.19)$$

Análise do comportamento do leito granular

Por meio de análises de imagens dos resultados numéricos, foi observado o comportamento a nível macroscópico do leito granular de todas os casos avaliados. Os regimes de escoamento foram identificados conforme as características descritas na seção 2.2.1 do Capítulo 2.

Análise de Distribuição dos Tempos de Residência

Para determinar a distribuição do tempo de residência (DTR), um pulso de 1200 partículas traçadoras foi inserido na alimentação contínua das simulações no intervalo de tempo de 1 s. O instante da injeção do pulso foi definido a partir do momento em que a taxa de partículas que deixavam o disco apresentava variação menor que 10%, para garantir que o disco estava operando em estado estacionário. A quantidade de partículas traçadoras N_i que deixavam o disco era monitorada ao longo do tempo. Os dados foram divididos em intervalos de tempo $\Delta t = 1,0$ s. A função DTR é dada por (Levenspiel, 1999):

$$E(t) = \frac{N(t)}{\int_0^\infty N(t)dt} \cong \frac{N_i}{\sum_{i=0}^\infty N_i \Delta t_i} \quad (3.20)$$

em que $N(t)$ é o número de partículas traçadoras que deixavam o disco no intervalo de tempo t .

O tempo teórico de residência $\bar{t}$ era obtido pela razão da massa retida no disco m e da vazão mássica Q :

$$\bar{t} = \frac{m}{Q} \quad (3.21)$$

O tempo normalizado foi calculado dividindo o tempo de residência pelo tempo de residência teórico:

$$\theta_t = \frac{t}{\bar{t}} \quad (3.22)$$

Assim, a função DTR adimensional pôde ser calculada por:

$$E(\theta_t) = E(t)\bar{t} \quad (3.23)$$

Análise da Intensidade e da Cinética da Aglomeração das Partículas

Foi proposto, no presente estudo, um método para avaliar a intensidade da aglomeração que ocorre no disco rotatório na presença de umidade. Nesse método, para cada grupo de partículas que eram ejetadas do disco no mesmo intervalo de tempo, $\Delta t = 0,1 \text{ s}$, a distância d_{i-j} entre cada par delas era verificada. Se essa distância fosse igual ou menor do que a soma dos raios das partículas em contato i e j , as partículas eram consideradas aglomeradas. Esse processo era repetido para toda a vizinhança das partículas. Uma vez consideradas aglomeradas, foi verificado o tamanho e a massa de cada aglomerado. O código utilizado nessa etapa é apresentado no Apêndice G. A Figura 3.7 apresenta um fluxograma da metodologia.

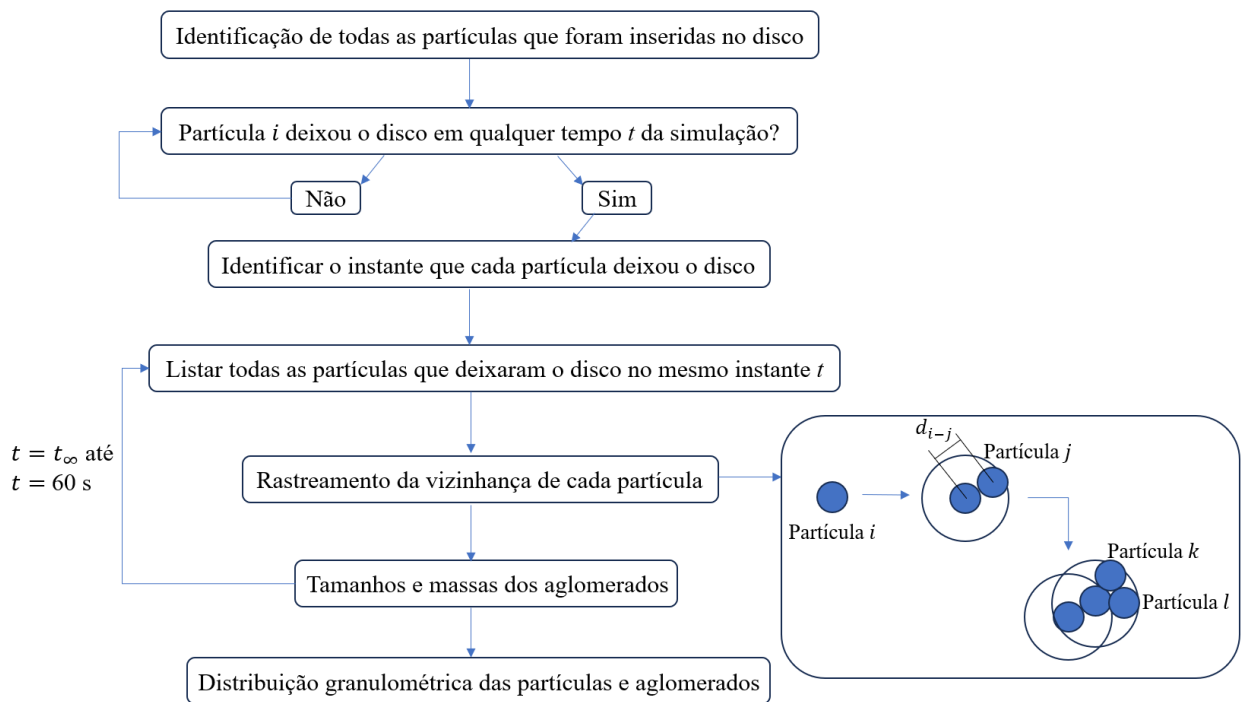


Figura 3.7: Fluxograma da metodologia empregada para a determinação do tamanho e da massa dos aglomerados ejetados do disco rotatório

Essa metodologia se diferencia das demais apresentadas na literatura por permitir monitorar continuamente todas as partículas e aglomerados que são ejetados do equipamento. Estudos mais recentes (Wang *et al.*, 2023; Shi *et al.*, 2022) simularam numericamente o processo de peneiramento afim de obter a distribuição granulométrica de partículas aglomeradas em um tambor rotatório em batelada.

A fim de compreender melhor os mecanismos da formação de aglomerados no interior do disco rotatório, foi contabilizada a aderência de finos (partículas com $r_f = 0,5$ mm) às superfícies das partículas de maior diâmetro ($r_g = 2,4$ mm) ao longo do tempo para os casos com água pura como líquido intersticial. Foram contabilizadas apenas os finos que formavam a primeira camada em volta da superfície da partícula, como exemplifica a Figura 3.8. O fino era considerado aderido se o tempo de contato com a partícula era superior aos tempos de contato verificados para as simulações com partículas secas. Para cada caso, foram selecionadas aleatoriamente cinco partículas. Essas partículas foram monitoradas desde o instante que entraram no disco até o momento que foram ejetadas. Para cada uma, o tempo foi normalizado pelo seu respectivo tempo de residência no equipamento.

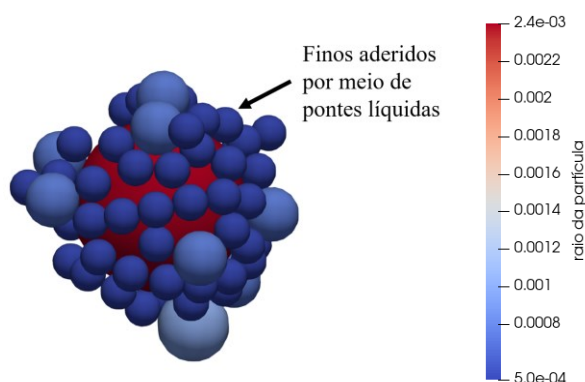


Figura 3.8: Aderência de finos à superfície de uma partícula.

3.4 Resultados e Discussão

3.4.1 Validação do modelo numérico não coesivo

Os resultados numéricos e experimentais foram confrontados com o objetivo de validar a modelagem DEM. As imagens do escoamento granular sem a presença de umidade são apresentadas na Figuras 3.9 e os valores dos ângulos de partida medidos com os respectivos desvios são apresentados na Tabela 3.5.

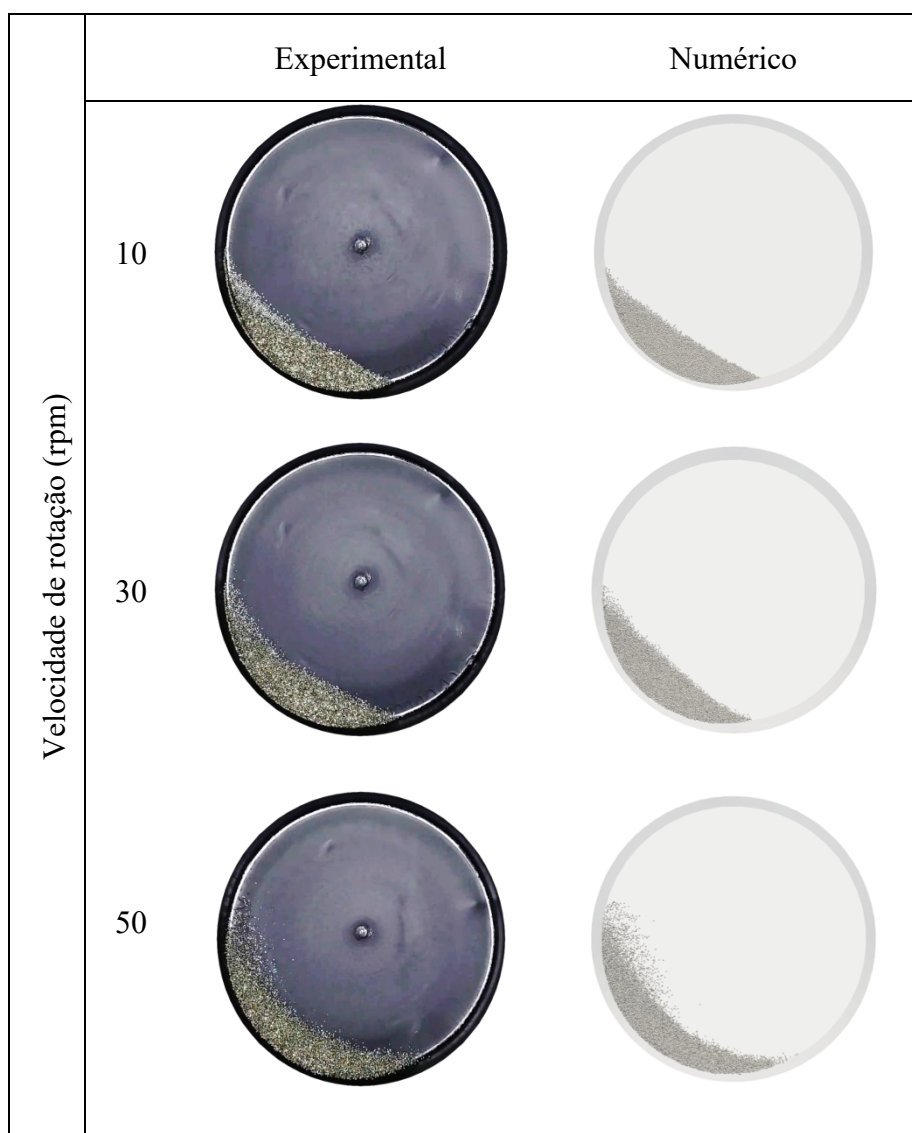


Figura 3.9: Vista frontal do disco operando com inclinação de 50° e velocidades de 10, 30 e 50 rpm

Tabela 3.5: Ângulos de partida encontrados com os respectivos desvios para o disco operando com inclinação de 50°

Velocidade de rotação (rpm)	Ângulo de partida (°)		
	Experimental	Numérico	Desvio (%)
10	88,9 ± 1,9	87,8 ± 0,9	0,9
30	92,4 ± 1,8	90,9 ± 1,1	1,7
50	100,9 ± 3,4	99,0 ± 1,3	1,9

Observando os resultados qualitativos por meio da Figura 3.7 e os resultados quantitativos do ângulo de partida, pode-se inferir que os resultados numéricos corresponderam de forma satisfatória aos resultados experimentais.

3.4.2 Calibração e validação do modelo numérico coesivo

Novamente, os resultados numéricos e experimentais foram confrontados com o objetivo de validar a modelagem DEM. As imagens do escoamento granular coesivo serão apresentadas posteriormente.

Como mencionado na seção 3.3.2.3, para o parâmetro DEC e os coeficientes de atrito estático e de rolamento do contato partícula-partícula, foi realizada uma análise de sensibilidade por meio de um planejamento composto central. A resposta analisada foi o ângulo de partida médio do leito granular no disco rotatório.

A equação para a predição do ângulo de partida médio foi ajustada aos dados presentes na Tabela 4 do Apêndice F utilizando técnicas de regressão, apresentando coeficiente de determinação (r^2) de 0,95, permitindo, assim, quantificar os efeitos das variáveis independentes (na forma codificada) sobre a resposta.

$$\hat{\text{Ângulo de partida médio}} = 100,8 + 8,4x_1 + 7,4x_2 + 19,9x_3 + 7,0x_1x_3 \quad (3.24)$$

$$x_1 = (\mu_{Spp} - 0,500)/0,250 \quad x_2 = (\mu_{Rpp} - 0,040)/0,020 \quad x_3 = ((\text{DEC} - 5,000)/2,000) \cdot 10^5$$

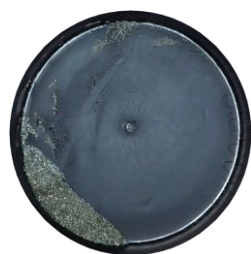
Apesar de todos os parâmetros contribuírem de forma significativa no ângulo de partida médio do leito granular para um nível de significância de 5,0%, é possível verificar

que o efeito do valor de DEC se sobressai em relação aos demais, sendo mais de duas vezes maior. Diante desses resultados, optou-se em manter os valores encontrados na literatura (Tabela 3.1) para os contatos partícula-partícula e calibrar apenas o valor de DEC. Nessa etapa, além do ângulo de partida ao longo do tempo, a área total de partículas aderidas à superfície da parede também foi determinada por meio de análise das imagens.

A Figura 3.10 apresenta os resultados qualitativos experimentais e numéricos do leito granular com água pura como líquido intersticial em dois instantes diferentes (2,0 e 4,0 s). Para fins de comparação, além dos resultados numéricos para diferentes valores de DEC, são também apresentados os resultados do caso que desconsidera as forças de coesão e do caso que emprega apenas o modelo Easo. Qualitativamente, é possível observar a necessidade do emprego do modelo híbrido (Easo e SJKR) para representar a adesão das partículas à parede que foi verificada experimentalmente.

A Figura 3.11 apresenta o comportamento transitório do ângulo de partida ao longo do tempo para os mesmos casos apresentados na Figura 3.10. É possível verificar que a oscilação do ângulo de partida encontrado experimentalmente se estabiliza a partir de aproximadamente 2,0 s. Dentre os resultados numéricos, todos os modelos que empregaram modelos de coesão previram o comportamento oscilatório. No entanto, para verificar quantitativamente qual modelo ou combinação de modelos apresentou maior concordância com o resultado experimental, foi calculado a raiz do erro quadrático médio (REMQ), apresentada na Tabela 3.6. O menor erro foi encontrado para o modelo híbrido Easo e SJKR, sendo $DEC = 5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$. Diante desses resultados, esse valor passou a ser utilizado para todas as simulações numéricas do presente estudo cujo líquido intersticial era a água pura.

$t = 2,0 \text{ s}$



(a) experimental



(b) numérico – sem
forças de coesão



(c) numérico – modelo
Easo



(d) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $3 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)

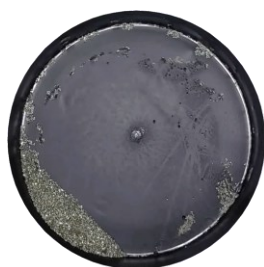


(e) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(f) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)

$t = 4,0 \text{ s}$



(a) experimental



(b) numérico – sem
forças de coesão



(c) numérico – modelo
Easo



(d) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $3 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(e) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(f) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)

Figura 3.10: Vista frontal do disco operando com velocidade de 10 rpm, ângulo de inclinação de 50° e água pura como líquido intersticial nos instantes 2,0 e 4,0 s

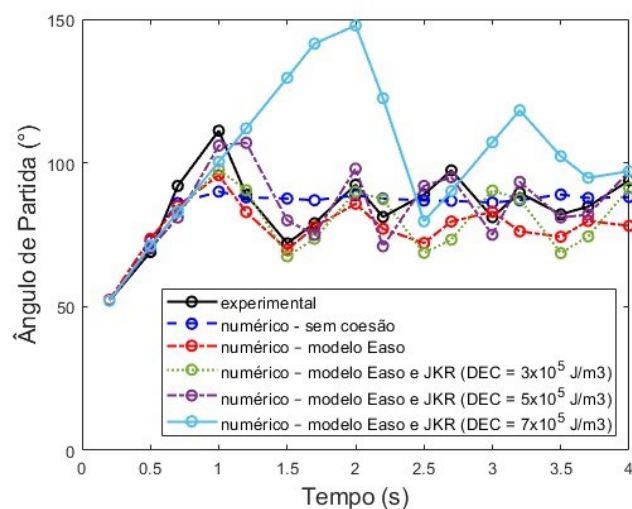


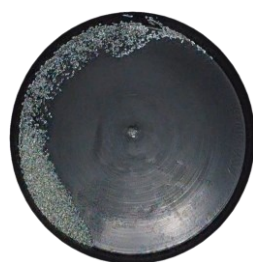
Figura 3.11: Comparação entre os ângulos de partida observados ao longo do tempo para diferentes modelos

Tabela 3.6: Erro médio dos valores de ângulos de repouso encontrados numericamente em relação ao resultado experimental

Modelo	REMQ
Numérico – sem modelo de coesão	8,31
Numérico – modelo Easo	9,80
Numérico – modelo Easo e JKR ($DEC = 3 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)	10,42
Numérico – modelo Easo e JKR ($DEC = 5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)	6,95
Numérico – modelo Easo e JKR ($DEC = 7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)	30,51

Em relação à metodologia para a determinação do valor apropriado do parâmetro DEC proposta do presente estudo, é possível inferir que a combinação da análise de sensibilidade seguida da calibração se mostrou satisfatória. Sendo assim, a mesma estratégia foi empregada para a calibração do valor de DEC quando o líquido intersticial empregado foi a solução de maltodextrina. O valor que melhor representou os resultados experimentais foi $DEC = 7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$. A Figura 3.12 apresenta resultados qualitativos experimentais e numéricos do leito granular em dois instantes diferentes (2,0 e 4,0 s).

$t = 2,0 \text{ s}$



(a) experimental



(b) numérico – sem
forças de coesão



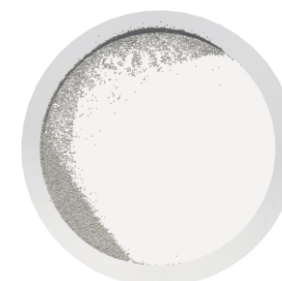
(c) numérico – modelo
Easo



(d) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(e) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(f) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $9 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)

$t = 4,0 \text{ s}$



(a) experimental



(b) numérico – sem
forças de coesão



(c) numérico – modelo
Easo



(d) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(e) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)



(f) numérico – modelo
Easo e JKR (DEC =
 $9 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)

Figura 3.12: Vista frontal do disco operando com velocidade de 10 rpm, ângulo de inclinação de 50° e solução de maltodextrina como líquido intersticial nos instantes 2,0 e 4,0 s

3.4.2 Estudo numérico do disco rotatório operando em regime contínuo

Determinação do holdup dos sólidos no disco rotatório

A Figura 3.13 apresenta os resultados do *holdup* dos sólidos no disco rotatório para as partículas secas e úmidas, monodispersas, sob diferentes condições operacionais.

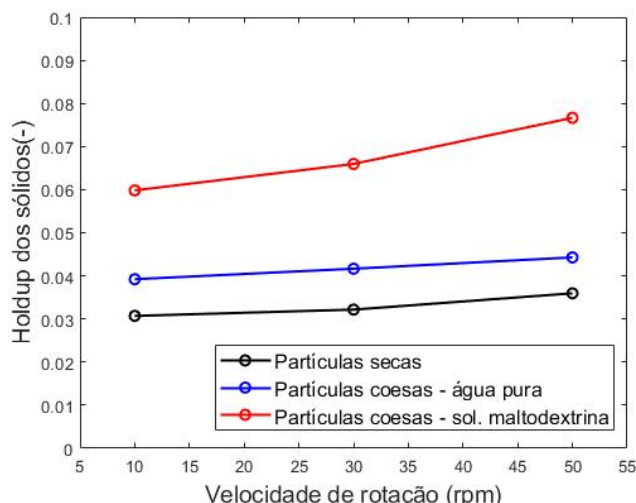


Figura 3.13: Comportamento do *holdup* dos sólidos (partículas monodispersas) para diferentes velocidades de rotação

É possível observar que, em geral, o aumento da velocidade de rotação eleva o *holdup* dos sólidos no interior do equipamento. O aumento da velocidade de rotação resulta em uma maior força centrífuga sobre o leito granular, evitando a sua descarga. Comportamentos similares de *holdup* dos sólidos foram encontrados por Chadwick *et al.* (2005) para partículas de vidro com diâmetro de 400-500 μm e por Lima *et al.* (2022) para partículas de vidro com diâmetro de 6,35 mm.

Além disso, verificou-se que a presença de umidade também faz com que uma maior quantidade de partículas fique retida no disco. As pontes líquidas formadas entre as partículas fazem com que o leito granular fique mais coeso e há também a adesão delas à parede. Quando os leitos coesos são comparados entre si, é possível observar que a solução de maltodextrina promoveu valores de *holdup* mais elevados para uma mesma velocidade de rotação. Logo, pode-se afirmar que, quanto maior o número de capilaridade, descrito na seção 3.3, mais coeso é o leito granular e, portanto, maior é o seu respectivo *holdup*.

Análise do comportamento do leito granular

As Figuras 3.14 a 3.16 apresentam as imagens frontais do escoamento granular das partículas monodispersas no disco para as velocidades de rotação avaliadas. A Figura 3.14 corresponde aos resultados numéricos das partículas secas (sem líquido intersticial) enquanto as Figuras 3.15 e 3.16 correspondem aos resultados numéricos dos leitos granulares com água pura e solução de maltodextrina como líquido intersticial, respectivamente.

Para o leito de partículas secas monodispersas (Figura 3.14), quando o disco opera com velocidades de rotação de 10 e 30 rpm, é possível identificar o regime de rolamento. Enquanto isso, ao operar com velocidade de 50 rpm, pode-se observar que o escoamento do leito granular está próximo da transição do regime de cascadeamento para o de catarateamento.

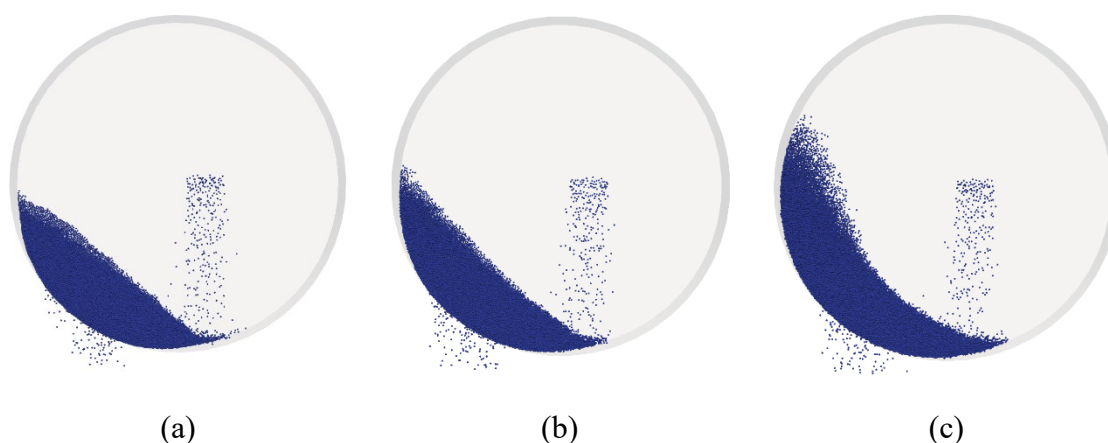


Figura 3.14: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular de partículas secas monodispersas: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm

Por meio da Figura 3.15, é possível verificar que, quando há a presença de água como líquido intersticial, o regime de escoamento continua a ser o de rolamento para a velocidade de rotação de 10 rpm, embora apresente ângulo de partida maior do que o leito formado por partículas secas. Quando o disco opera a 30 rpm, pode-se observar que o escoamento do leito granular se encontra no regime de cascadeamento. Para a velocidade de rotação de 50 rpm, tem-se o regime de catarateamento. Adicionalmente à análise dos regimes, a Figura 3.15 apresenta uma ampliação das regiões onde as partículas deixam o disco rotatório possibilitando observar a aglomeração delas.

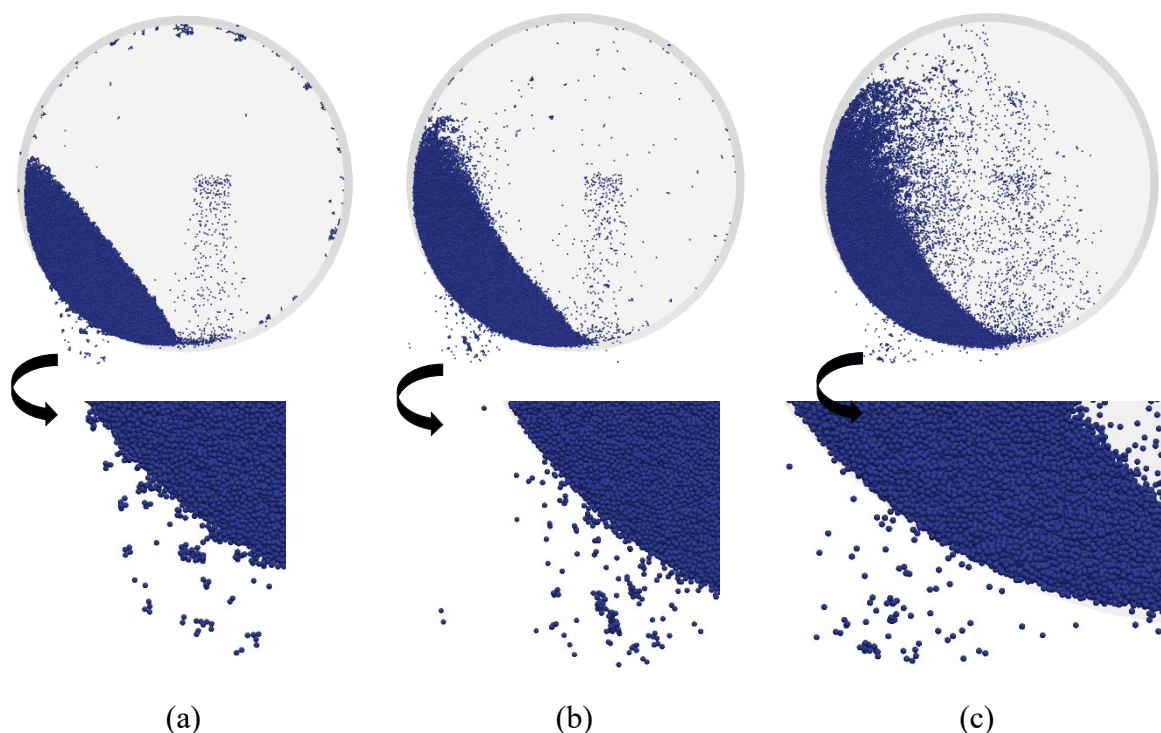


Figura 3.15: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular monodisperso com água pura como líquido intersticial: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm

Quando o líquido intersticial é a solução de maltodextrina (Figura 3.16), foi obtido uma intensificação da aderência das partículas à parede, conforme previsto pelo ensaio experimental utilizado para a validação do modelo numérico. Para a velocidade de rotação de 10 rpm, tem-se regime de rolamento. Ao operar com 30 rpm, observa-se o regime de catarateamento. Quando a velocidade é de 50 rpm, pode-se observar que o escoamento do leito granular se encontra em regime de centrifugação.

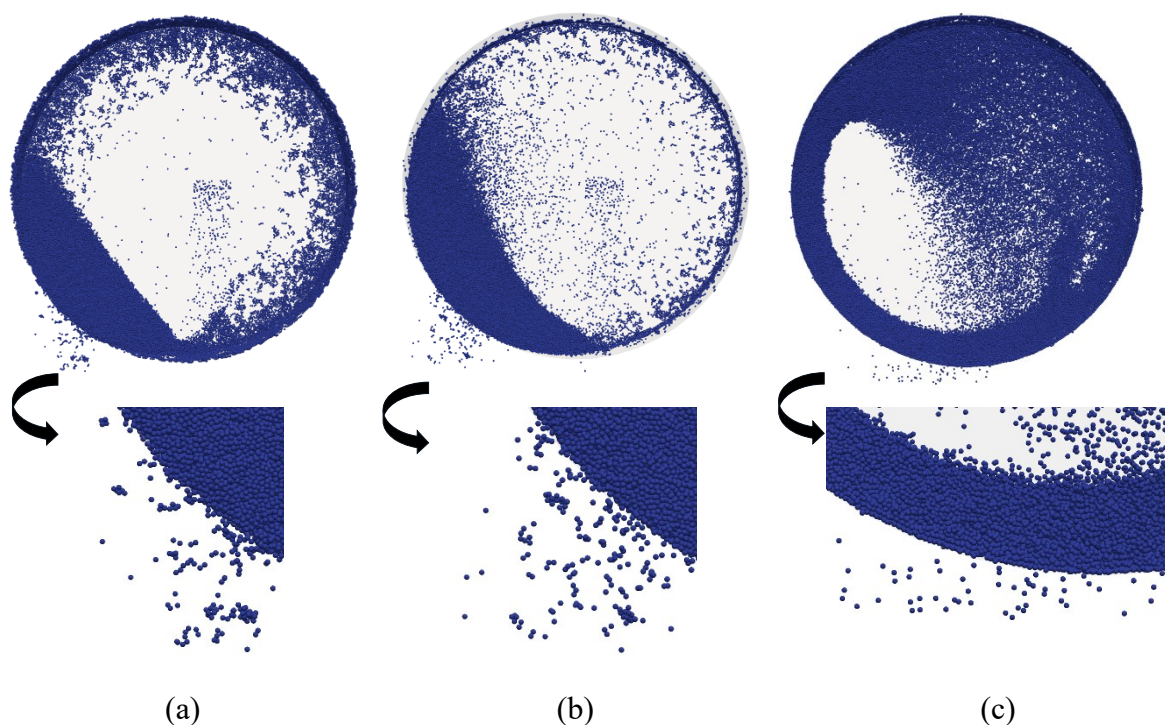


Figura 3.16: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular monodisperso com solução de maltodextrina como líquido intersticial: (a) 10 rpm, (b) 30 e (c) 50 rpm.

Como mencionado na seção 3.3.2.4, foi realizado também o estudo numérico do escoamento granular polidisperso. As imagens frontais do escoamento granular do leito granular polidisperso no disco são apresentadas nas Figuras 3.17 a 3.19. A Figura 3.17 corresponde aos resultados numéricos das partículas secas (sem líquido intersticial) ao passo que as Figuras 3.18 e 3.19 correspondem aos resultados numéricos dos leitos granulares com água pura e solução de maltodextrina como líquido intersticial, respectivamente.

É possível observar, por meio da Figura 3.17, os mesmos regimes de escoamento observados para as partículas secas monodispersas descritos anteriormente. Além disso, é possível verificar qualitativamente o fenômeno de segregação por diferenças de tamanho de material. As partículas de maior diâmetro migraram em direção à borda do disco rotatório enquanto as partículas de menor diâmetro tenderam a se concentrar no fundo do equipamento por meio do mecanismo de percolação descrito no Capítulo 2.

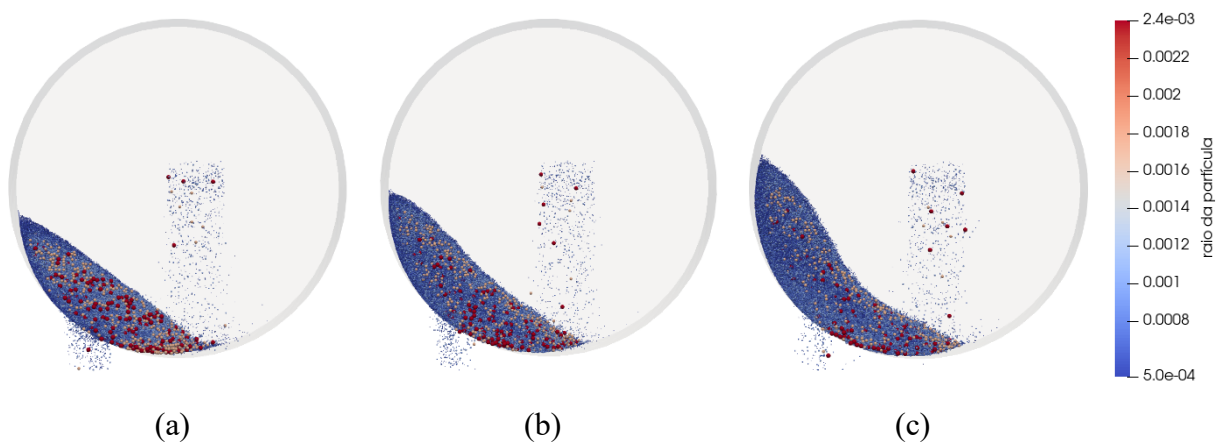


Figura 3.17: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular de partículas secas polidispersas: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm.

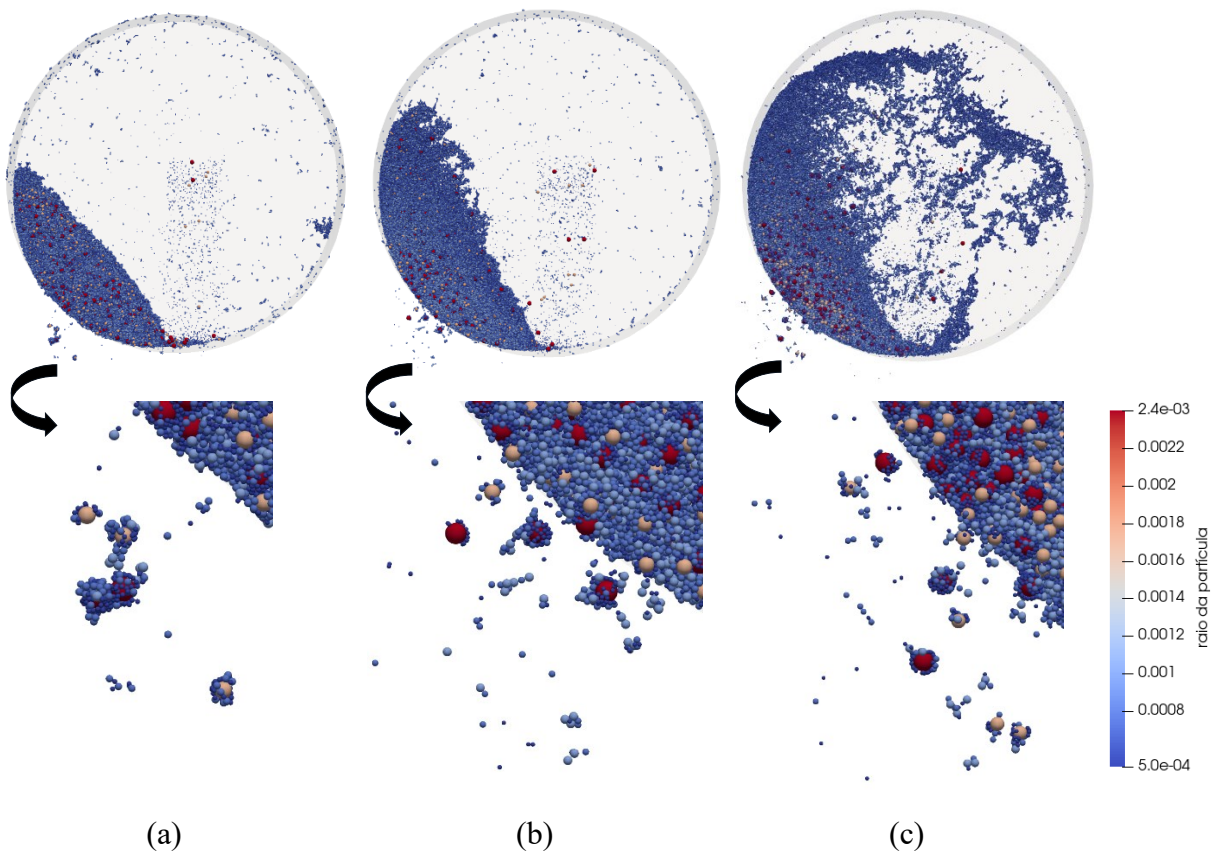


Figura 3.18: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular polidisperso com água pura como líquido intersticial: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm.

Por meio da Figura 3.18, observa-se que, assim como no leito granular monodisperso, a presença da água como líquido intersticial eleva o ângulo de partida para todas as

velocidades de rotação. Foi verificado o regime de rolamento para a velocidade de 10 rpm, cascadeamento para 30 rpm e catarateamento para 50 rpm. Além disso, pôde ser observado o comportamento de aglomeração por camadas, em que as partículas menores aderiram às superfícies das partículas maiores.

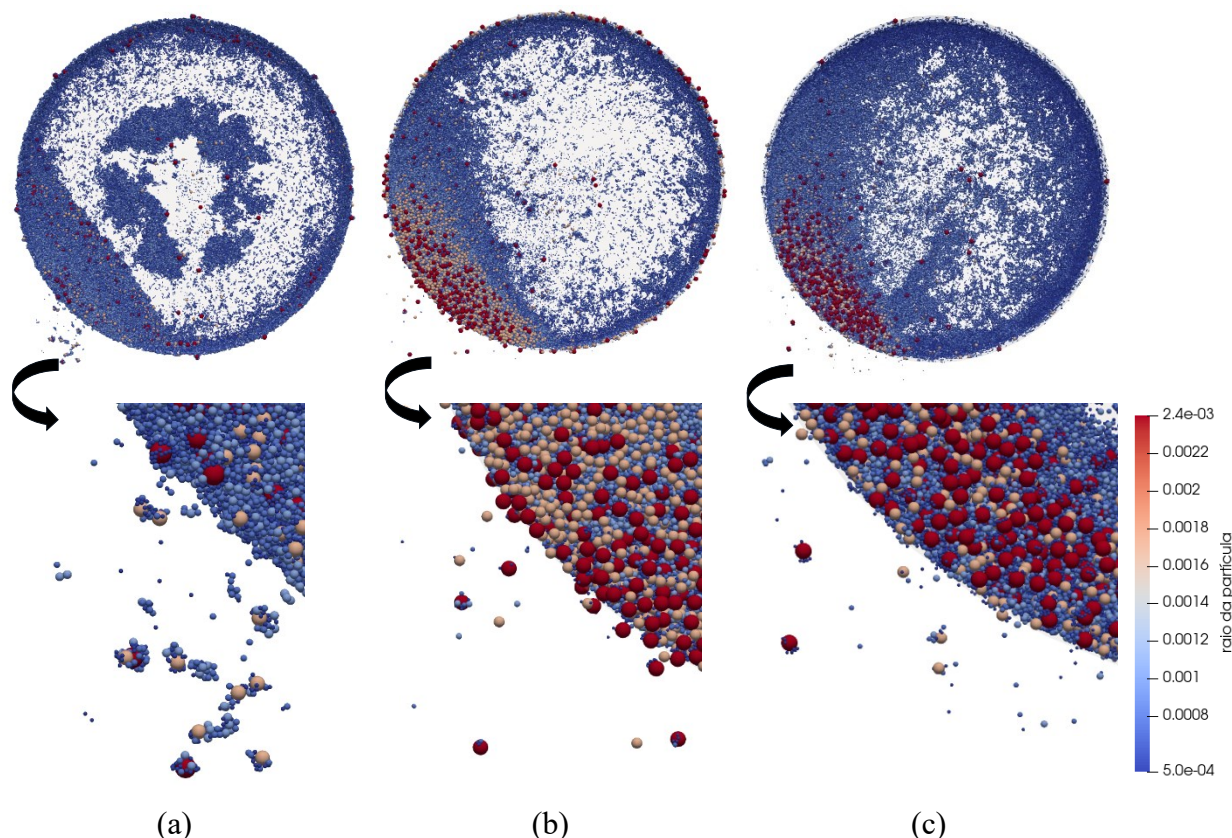


Figura 3.19: Influência das velocidades de rotação nos regimes de escoamento do leito granular polidisperso com solução de maltodextrina como líquido intersticial: (a) 10, (b) 30 e (c) 50 rpm.

Assim como observado no leito granular monodisperso, quando o líquido intersticial é a solução de maltodextrina (Figura 3.19), houve uma intensificação da aderência das partículas à parede. Para a velocidade de rotação de 10 rpm, observa-se o regime de rolamento. Ao operar com 30 rpm, tem-se o regime de cascadeamento. Quando a velocidade foi de 50 rpm, pôde-se observar que o escoamento do leito granular se encontrou na transição do regime de cascadeamento para o regime de centrifugação. Adicionalmente, as imagens também sugeriram que, comparando com os casos com água pura como líquido intersticial,

uma quantidade menor de partículas finas aderiu às superfícies das partículas de maior diâmetro.

Análise de Distribuição dos Tempos de Residência

Os tempos de residência de cada partícula traçadora foram obtidos através do monitoramento do instante em que cada uma delas deixava o disco rotatório. Nessa etapa do estudo, foram considerados apenas os casos com leito granular monodisperso. A Figura 3.20 apresenta o efeito da velocidade de rotação do disco na distribuição dos tempos de residência (DTR) adimensionais do leito granular formado por partículas secas. Observa-se que o pico da curva DTR é mais estreito e mais próximo da origem à medida que a velocidade de rotação aumenta. No entanto, em todas as velocidades avaliadas, a base das curvas é alargada, indicando muita dispersão entre os dados. Para complementar a análise, os tempos de residência médios adimensionais ($\theta_{t_{\text{médio}}}$) foram calculados, bem como seus respectivos desvios padrão (Tabela 3.7).

O $\theta_{t_{\text{médio}}}$ diminui à medida que a velocidade de rotação aumenta, o que é um resultado esperado uma vez que há aumento da mobilidade das partículas. É possível verificar que as razões dos valores dos desvios padrão em relação aos valores dos $\theta_{t_{\text{médio}}}$ são muito elevados, o que corrobora a afirmação de que há grande dispersão dos tempos de residência das partículas. Além disso, essa razão é tão maior quanto maior a velocidade de rotação. Para a velocidade de rotação de 50 rpm, em particular, observa-se que essa razão corresponde a 0,63. Esse valor de razão tão alto pode ser explicado pela transição de regimes de escoamento que pode ser verificada na Figura 3.14.

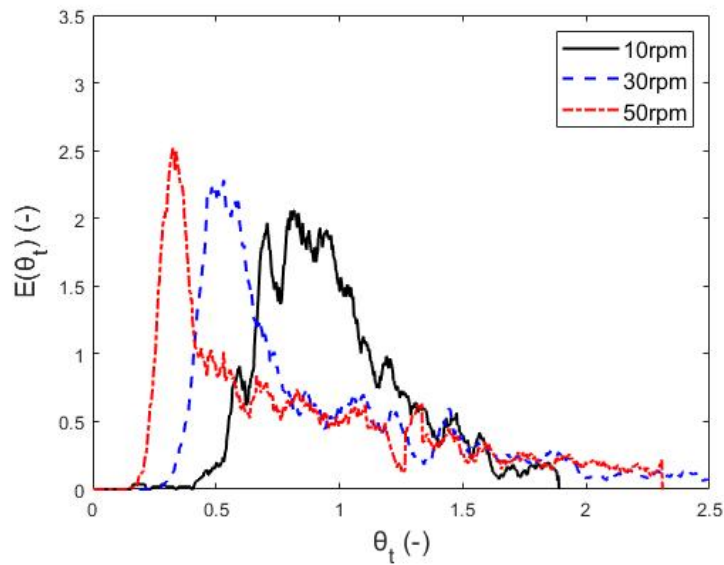


Figura 3.20: Distribuições dos tempos de residência do leito granular de partículas secas para o disco operando com inclinação de 50° e diferentes velocidades.

Tabela 3.7: Tempos de residência médios adimensionais do leito granular de partículas secas com os respectivos desvios

Velocidade de Rotação (rpm)	$\theta_{t_{médio}}$ (—)	Desvio padrão do $\theta_{t_{médio}}$ (—)
10	0,86	0,21
30	0,72	0,36
50	0,62	0,39

A Figura 3.21 apresenta o efeito da velocidade de rotação do disco nas curvas DTR adimensionais do leito granular com água pura como líquido intersticial. Os tempos de residência médios referentes a essas condições são apresentados na Tabela 3.8.

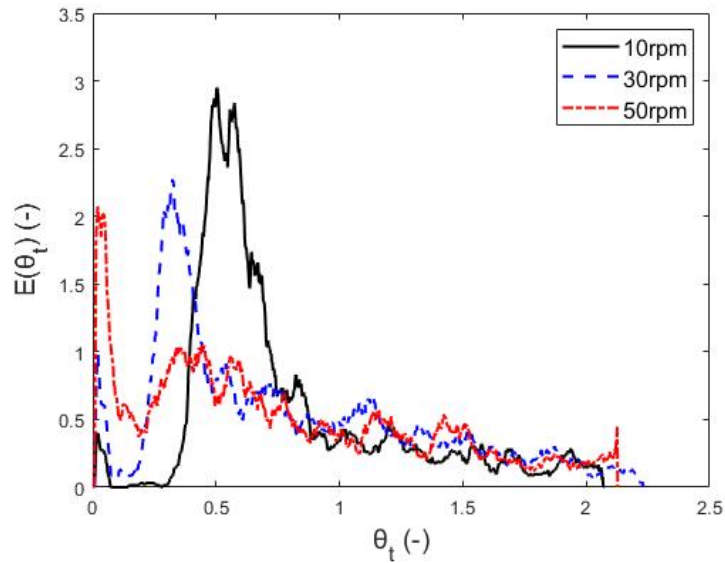


Figura 3.21: Distribuições dos tempos de residência do leito granular para o disco operando com inclinação de 50° e diferentes velocidades, tendo água pura como líquido intersticial

É possível observar que as curvas apresentaram dois picos. Para todas as velocidades, o pico localizado bem próximo da origem de θ_t sugeriram que há o efeito de curto-circuito, em que partículas entraram no disco e foram rapidamente descarregadas. Esse efeito não é desejado, uma vez que limita o contato entre as partículas, prejudicando a aglomeração. Possivelmente, ao operar com líquido intersticial e altas velocidades, o leito granular se tornou tão coeso a ponto de dificultar a percolação de parte das novas partículas para o seu interior.

Por meio da Tabela 3.8, observou-se que os valores do $\theta_{t\text{médio}}$ diminuíram em relação aos verificados para o leito granular de partículas secas. Parte dessa redução pode ser atribuída ao efeito de curto-circuito, mas também pode se relacionar aos fenômenos de segregação por tamanho. Ao formar aglomerados, as partículas são direcionadas para a borda e são descarregadas, diminuindo o tempo de permanência no equipamento.

Tabela 3.8: Tempos de residência médios adimensionais do leito granular com água pura como líquido intersticial

Velocidade de Rotação (rpm)	$\theta_{t_{\text{médio}}} (-)$	Desvio padrão do $\theta_{t_{\text{médio}}} (-)$
10	0,63	0,30
30	0,57	0,40
50	0,43	0,37

A Figura 3.22 apresenta a curva DTR para a velocidade de rotação de 10 rpm do leito granular com a solução de maltodextrina como líquido intersticial. Novamente, para todas as velocidades, as curvas apresentam dois picos, indicando o efeito de curto-circuito. Esse efeito é mais expressivo para a velocidade de rotação de 50 rpm, o que pode ser explicado pelas características do escoamento na respectiva velocidade observada na Figura 3.16 (transição do regime de catarateamento para o de centrifugação).

Ao analisar os $\theta_{t_{\text{médio}}}$ do leito com solução de maltodextrina (Tabela 3.9), verifica-se que eles são menores do que os $\theta_{t_{\text{médio}}}$ do leito com água pura nas mesmas velocidades de rotação.

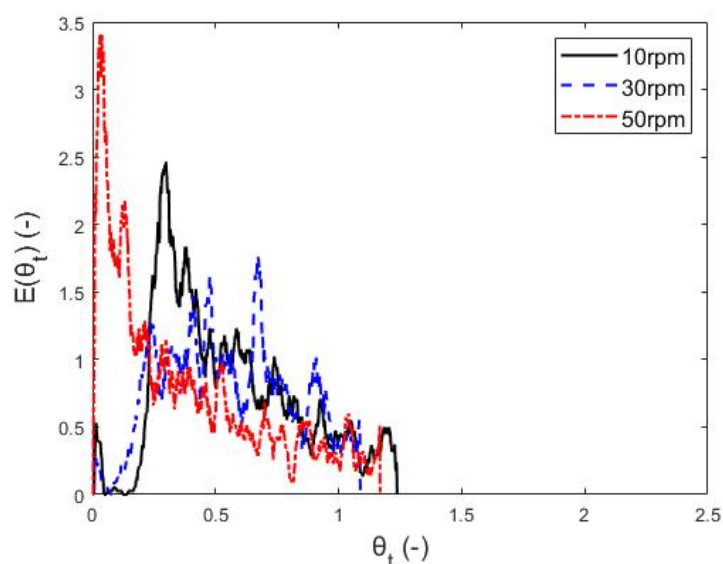


Figura 3.22: Distribuições dos tempos de residência do leito granular para o disco operando com inclinação de 50° e diferentes velocidades, tendo solução de maltodextrina como líquido intersticial

Tabela 3.9: Tempo de residência médio adimensional do leito granular com solução de maltodextrina como líquido intersticial

Velocidade de Rotação (rpm)	$\theta_{t_{médio}}$ (—)	Desvio padrão do $\theta_{t_{médio}}$ (—)
10	0,54	0,19
30	0,39	0,19
50	0,24	0,23

Análise da Intensidade e da Cinética da Aglomeração das Partículas

Como apresentado na seção 3.3.2.4, o presente estudo propôs uma metodologia para avaliar a extensão da aglomeração das partículas no disco rotatório. As Figuras 3.23 e 3.24 apresentam as distribuições granulométricas das partículas que deixaram o disco rotatório no tempo de 60 s, tendo como líquido intersticial água pura e solução de maltodextrina, respectivamente. Esses resultados se referem aos casos cuja alimentação era composta por partículas monodispersas. Vale lembrar que, nesta análise, todas as partículas ejetadas foram monitoradas e não apenas as traçadoras e que os dados foram extraídos após um tempo suficiente para que o sistema operasse em regime estacionário.

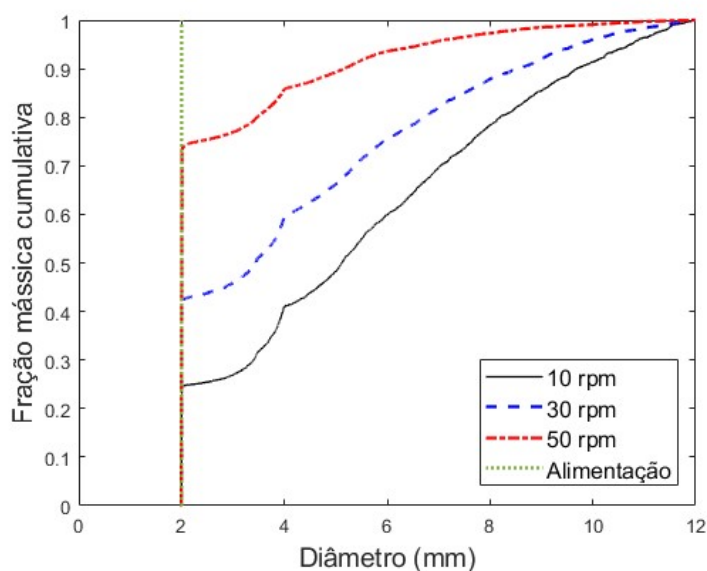


Figura 3.23: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com água pura como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação monodispersa)

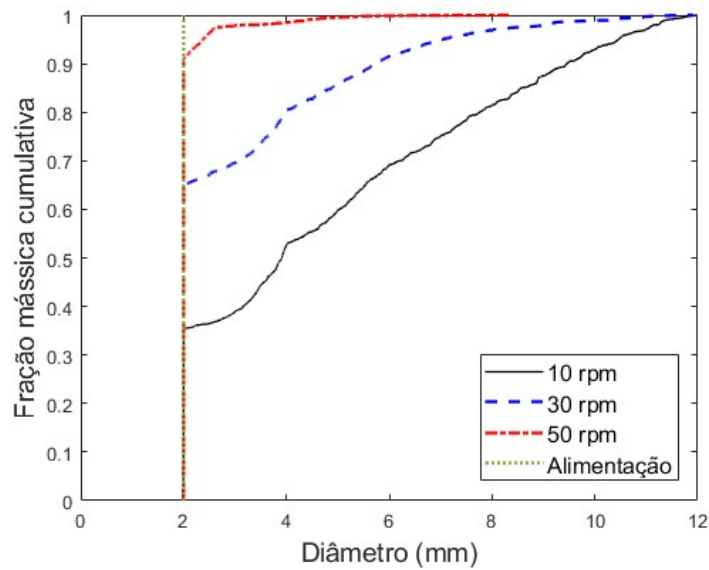


Figura 3.24: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com solução de maltodextrina como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação monodispersa).

É possível perceber que as frações mássicas de grânulos mais finos formados aumentaram e as dos grânulos maiores diminuíram à medida que a velocidade de rotação foi aumentada. Há duas possíveis causas para esse resultado. A primeira se relaciona aos resultados das análises das curvas DTR. Velocidades de rotação mais elevadas tiveram tempos de residência menores, os quais podem ter sido insuficientes para a formação dos aglomerados. Walker (2007) salientou que a extensão da aglomeração pode ser correlacionada com o tempo de residência médio do leito granular. No entanto, o autor ponderou que essa correlação pode ser muito complexa.

A segunda possível causa se refere ao efeito das velocidades de rotação do disco rotatório na magnitude das forças de contato. Lima (2019) demonstrou que velocidades maiores de rotação implicaram em alturas de leito mais elevadas e aumentaram a dinâmica do leito granular, ocasionando maiores velocidades de impacto entre os grânulos. Lian *et al.* (1998) conduziram simulações DEM de colisões de pares de aglomerados úmidos em estado pendular e verificaram que, à medida que a velocidade de impacto entre os pares aumentava, ocorria maior ruptura das pontes líquidas.

Ao confrontar a intensidade da aglomeração com os resultados de análise do comportamento granular, verificou-se que foram formados mais aglomerados e de tamanhos

maiores quando o disco operava em regimes de rolamento e cascadeamento – velocidades de rotação de 10 e 30 rpm para água pura como líquido intersticial e velocidade de rotação de 10 rpm para solução de maltodextrina como líquido intersticial. Capes (1980) e Walker (2007) salientaram que esses regimes de escoamento são os mais aplicados no processo de granulação, uma vez que apresentam elevado contato entre as partículas sem velocidades excessivas de impacto. Enquanto isso, foram obtidas distribuições de tamanhos de aglomerados semelhantes quando o disco operou em regime de catarateamento - velocidade de rotação de 50 rpm para água pura e velocidade de rotação de 30 rpm para solução de maltodextrina. Pietsch (1991) relatou que, no regime de catarateamento, a força das colisões pode ser muito intensa, ocasionando a degradação do aglomerado formado. Por fim, a menor fração mássica de aglomerados formados foi encontrada quando o regime de centrifugação é observado - velocidade de rotação de 50 rpm para solução de maltodextrina. Os resultados sugerem que as características do escoamento têm efeito significativo na intensidade da aglomeração.

Ao comparar a intensidade da aglomeração dos dois líquidos intersticiais empregados operando no mesmo regime de escoamento, verifica-se que a água pura apresentou maior porcentual de aglomerados para as mesmas velocidades. Considerando apenas as propriedades dos líquidos intersticiais, esse não é um resultado esperado, uma vez que a solução de maltodextrina apresenta valores de viscosidade e de ângulo de contato com a superfície da partícula mais elevados (Tabela 3.2), sendo que esses fatores favorecem o processo de formação de aglomerados (Rodrigues, 2012). No entanto, a solução de maltodextrina apresenta tensão superficial menor do que a da água pura, propriedade que também influencia diretamente a aglomeração. Iveson e Litster (1998) concluíram que um valor de tensão superficial mais elevado do material ligante leva à maior resistência contra a quebra dos grânulos, uma vez que ocasiona força de capilaridade de maior magnitude, como prevê a Equação 3.11 do modelo empregado. No presente estudo, não foi possível mensurar qual das propriedades do líquido intersticial – viscosidade, ângulo de contato ou tensão superficial – tem maior efeito na intensidade da aglomeração no disco rotatório.

Quanto à alimentação polidispersa, as Figuras 3.25 e 3.26 apresentam as distribuições granulométricas das partículas que deixaram o disco rotatório no tempo de 60 s, tendo como líquido intersticial água pura e solução de maltodextrina, respectivamente.

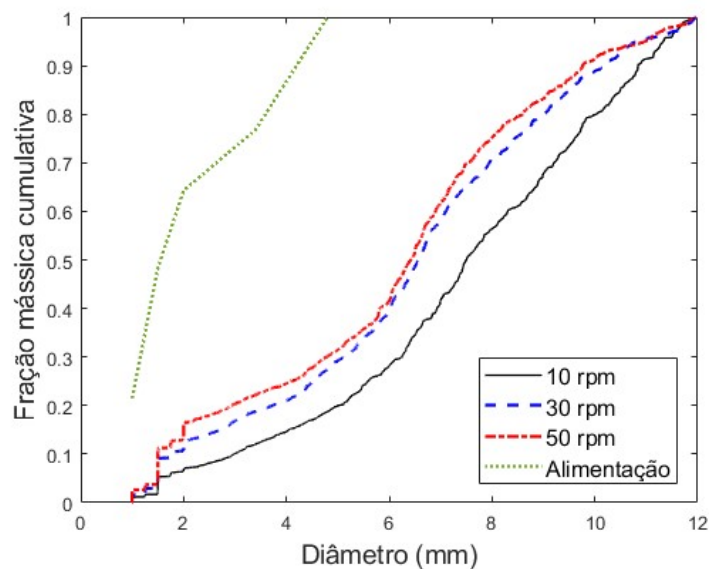


Figura 3.25: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com água pura como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação polidispersa).

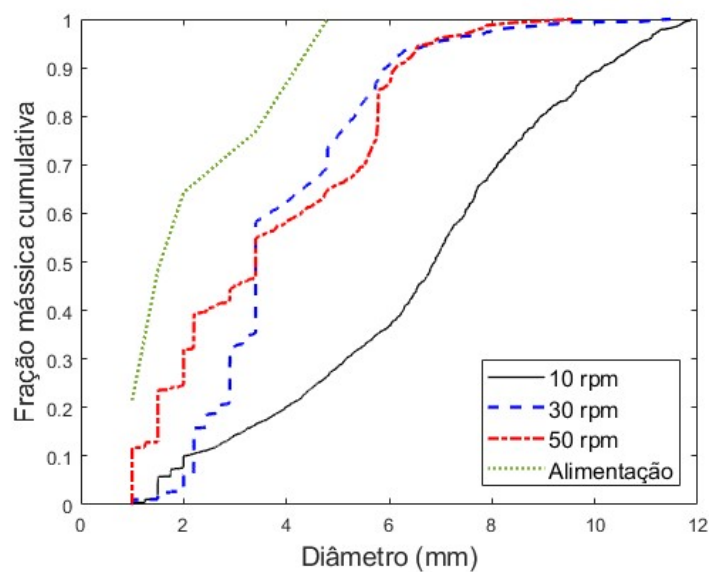


Figura 3.26: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com solução de maltodextrina como líquido intersticial para diferentes velocidades de rotação (alimentação polidispersa).

Assim como nos casos com alimentação monodispersa, em geral, foi verificado que as frações mássicas de grânulos mais finos formados aumentaram e as frações dos grânulos maiores diminuíram à medida que a velocidade de rotação foi aumentada. As possíveis causas

para as distribuições de tamanho encontradas são as mesmas descritas anteriormente para a alimentação monodispersa. A depender da aplicação do grânulo formado, a fração mássica de grossos formada quando o disco opera em velocidades reduzidas pode ser indesejável, assim como a fração mássica de finos formada quando velocidades mais elevadas são empregadas. No caso da granulação de fertilizantes, por exemplo, poderia se otimizar o processo para se ter uma distribuição final entre 2 e 4 mm com baixa dispersão.

Assim como também proposto na seção 3.3.2.4, a fim de compreender os mecanismos da formação de aglomerados no interior do disco rotatório, a aderência de finos (partículas com $r_f = 0,5$ mm) à superfície das partículas grandes ($r_g = 2,4$ mm) foi monitorada ao longo do tempo. Os resultados para o disco operando com velocidades de rotação de 10, 30 e 50 rpm e água como líquido intersticial são apresentados nas Figuras 3.27, 3.28 e 3.29, respectivamente.

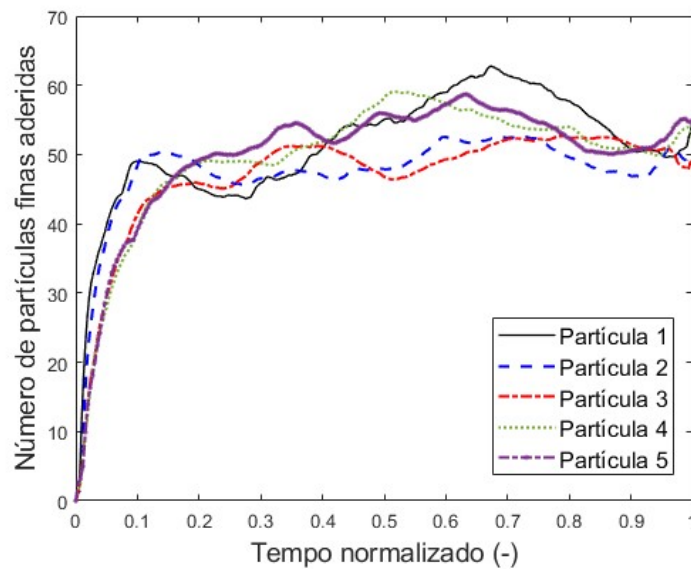


Figura 3.27: Número de finos aderidos à superfície das partículas de maior diâmetro para o disco operando com velocidade de 10 rpm e água pura como líquido intersticial.

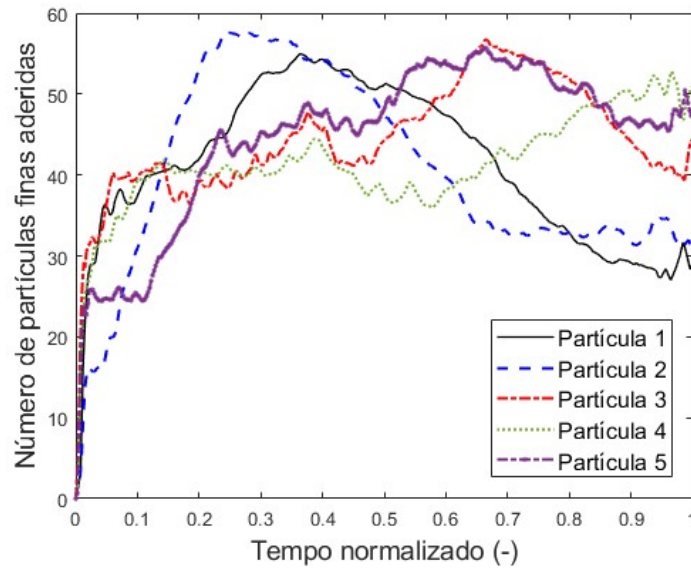


Figura 3.28: Número de finos aderidos à superfície das partículas de maior diâmetro para o disco operando com velocidade de 30 rpm e água pura como líquido intersticial

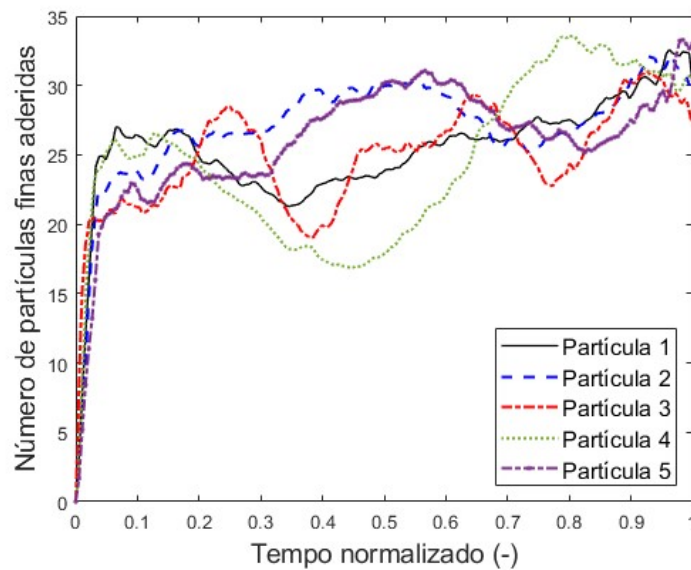


Figura 3.29: Número de finos aderidos à superfície das partículas de maior diâmetro para o disco operando com velocidade de 50 rpm e água pura como líquido intersticial.

No geral, foi observada maior aderência de finos à superfície das partículas grandes para a velocidade de rotação de 10 rpm (Figura 3.27). Vale lembrar que a quantidade de finos aderidos aferida e apresentada nesses gráficos correspondem apenas à primeira camada no entorno da partícula grande. Ao avaliar as quantidades de finos aderidos ao longo do tempo, é

possível inferir que as velocidades de rotação de 30 e 50 rpm apresentaram maior variação. Tal observação corrobora a hipótese apresentada anteriormente de maior incidência de formação e de ruptura de pontes líquidas devido ao aumento do número de contatos, bem como das velocidades de impacto entre os aglomerados já formados.

Efeito da presença de um raspador no disco rotatório

Conforme descrito na seção 3.3.2.4, foi avaliada como a presença de um raspador no disco rotatório influenciaria na aglomeração do material. Foram estudados os casos formados por partículas polidispersas, velocidades de rotação de 10, 30 e 50 rpm e água pura e solução de maltodextrina como líquido intersticial.

A Figura 3.30 apresenta as distribuições granulométricas das partículas que deixaram o disco rotatório no tempo de 60 s, tendo a solução de maltodextrina como líquido intersticial e operando com velocidade de rotação de 50 rpm. Os demais resultados são apresentados no Apêndice H, uma vez que o efeito da adição do raspador não foi tão pronunciado.

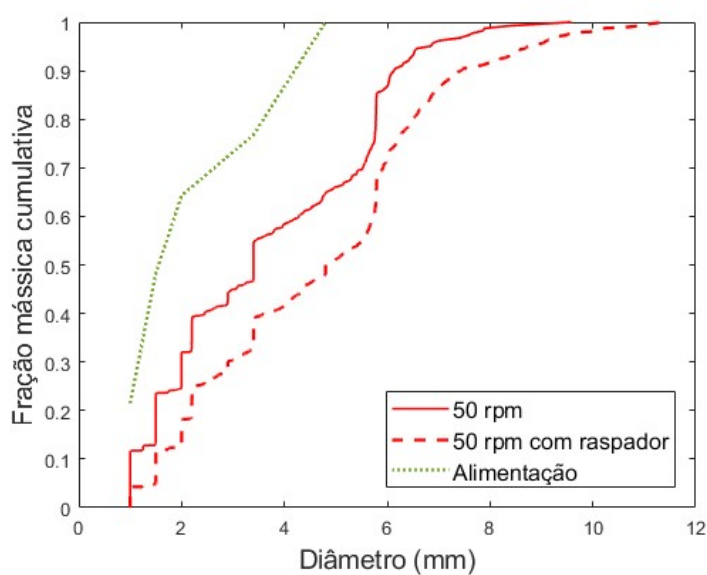


Figura 3.30: Distribuição granulométrica das partículas que deixaram o disco rotatório com solução de maltodextrina como líquido intersticial (alimentação polidispersa): com e sem raspador

É possível verificar que a presença do raspador no disco rotatório aumentou as frações mássicas de grânulos maiores ao passo que diminuiu as frações de grânulos menores. Para

complementar a análise, a Figura 3.31 apresenta as imagens frontais do escoamento granular do disco operando com e sem raspador. A presença do raspador limitou a aderência das partículas de menor tamanho no fundo e nas paredes laterais do disco e fez com que elas caíssem como uma cascata sobre o leito granular, possibilitando a aglomeração. Dessa maneira, os grânulos que deixaram o disco apresentaram maior tamanho.

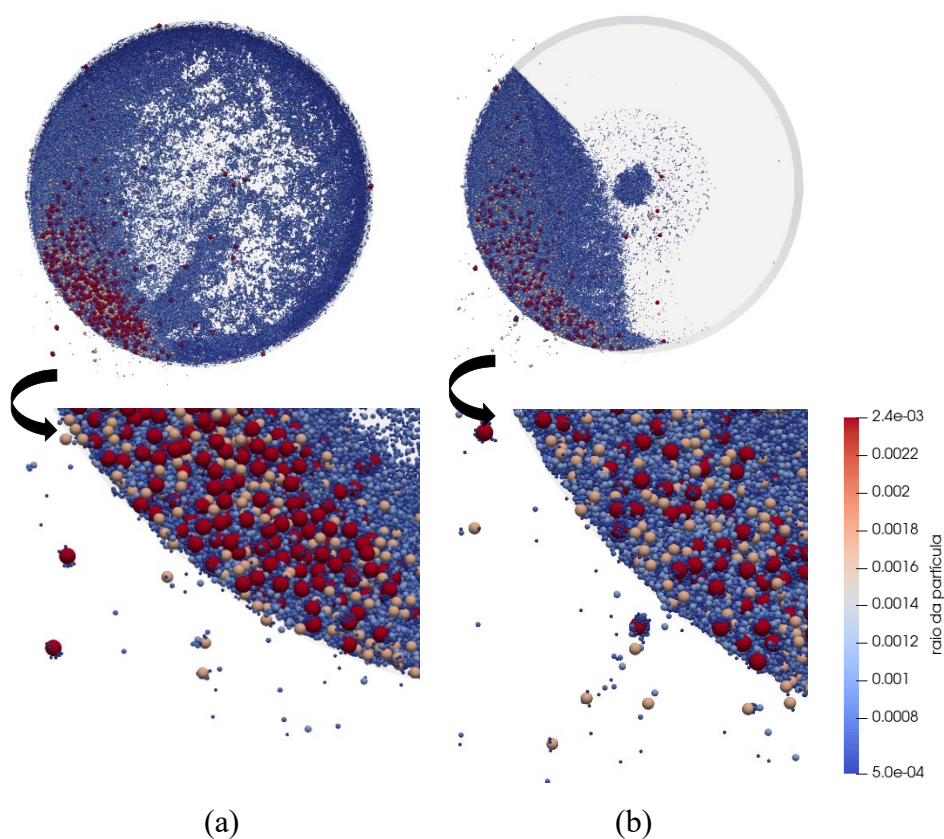


Figura 3.31: Influência da presença de um raspador no escoamento do leito granular polidisperso com solução de maltodextrina como líquido intersticial: (a) sem raspador (b) com raspador

3.5 Conclusões

Com base nos objetivos propostos e nos resultados obtidos acerca do escoamento e do processo de aglomeração de partículas no disco rotatório, tem-se as seguintes conclusões:

- Foi possível verificar que o uso da abordagem DEM para as forças coesivas se deu de maneira satisfatória. Na etapa de validação do modelo numérico, a utilização do modelo híbrido composto pelo modelo de capilaridade de Easo para os contatos partícula-partícula e pelo modelo SJKR para os contatos partícula-parede representou adequadamente os resultados experimentais;
- Foi investigada a influência da velocidade de rotação e da presença de umidade no leito granular no *holdup* dos sólidos no disco rotatório. O aumento da velocidade de rotação aumentou a retenção de sólidos no equipamento assim como a presença de umidade. Ao comparar os dois tipos de líquido intersticial, é possível observar que a solução de maltodextrina tem valores de *holdup* mais elevados;
- Foi verificado que a velocidade de rotação do disco rotatório teve efeito significativo na distribuição dos tempos de residência. O tempo de residência médio diminuiu à medida que a velocidade aumentou, tanto para o leito formado por partículas secas quanto para o leito com líquido intersticial. As curvas DTR do leito com água pura como líquido intersticial possibilitaram a identificação do efeito de curto-circuito, assim como no leito com solução de maltodextrina;
- Ao avaliar a intensidade da aglomeração no disco rotatório, foi observado que a fração mássica de partículas aglomeradas diminuiu à medida que a velocidade de rotação foi aumentada, assim como o tamanho médio dos aglomerados. Os resultados sugeriram que as características do escoamento têm efeito significativo na formação dos aglomerados. Os resultados observados para o disco operando com alimentação monodispersa se relacionaram com os resultados das curvas de DTR. A análise da cinética de aglomeração dos finos à superfície das partículas grandes possibilitou verificar o efeito das velocidades de rotação na quebra das pontes líquidas formadas, corroborando os resultados encontrados para as distribuições granulométricas observadas para o disco operando com alimentação polidispersa;

- Ao investigar o efeito da presença de um raspador no disco rotatório, foi verificado que ele tem efeito significativo no escoamento e na distribuição granulométrica das partículas que foram ejetadas do disco quando havia grande aderência das partículas à parede do equipamento.

Referências Bibliográficas

- Adetayo, A. A., J. D. Litster, and M. Desai. 1993. "The Effect of Process Parameters on Drum Granulation of Fertilizers with Broad Size Distributors." *Chemical Engineering Science* 48 (23): 3951–61. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(93\)80374-Y](https://doi.org/10.1016/0009-2509(93)80374-Y).
- Alchikh-Sulaiman, Basel, Meysam Alian, Farhad Ein-Mozaffari, Ali Lohi, and Simant R. Upreti. 2016. "Using the Discrete Element Method to Assess the Mixing of Polydisperse Solid Particles in a Rotary Drum." *Particuology* 25: 133–42. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2015.05.006>.
- Alian, Meysam, Farhad Ein-Mozaffari, Simant R. Upreti, and Jiangning Wu. 2015. "Using Discrete Element Method to Analyze the Mixing of the Solid Particles in a Slant Cone Mixer." *Chemical Engineering Research and Design* 93 (July): 318–29. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2014.07.003>.
- Alizadeh, Ebrahim, Francois Bertrand, and Jamal Chaouki. 2014. "Comparison of DEM Results and Lagrangian Experimental Data for the Flow and Mixing of Granules in a Rotating Drum." *AIChE Journal* 60 (4): 60–75. <https://doi.org/10.1002/aic>.
- Arntz, M M H D. 2008. "Granular Mixing and Segregation in a Horizontal Rotating Drum : A Simulation Study on the Impact of Rotational Speed and Fill Level" 54 (12): 3133–46. <https://doi.org/10.1002/aic>.
- ASTM G115 - 10. 2013. "Standard Guide for Measuring and Reporting Friction Coefficients." *American Society for Testing and Materials (ASTM)*, no. Reapproved 2013. <https://doi.org/10.1520/G0115-10R13.2>.
- ASTM G194 - 08. 2013. "Standard Test Method for Measuring Rolling Friction Characteristics of a Spherical Shape on a Flat Horizontal Plane." *American Society for Testing and Materials (ASTM)*. <https://doi.org/10.1520/G0194-13>.
- Azrar, Hassane, Rachid Zentar, and Nor Edine Abriak. 2016. "The Effect of Granulation Time of the Pan Granulation on the Characteristics of the Aggregates Containing Dunkirk Sediments." *Procedia Engineering* 143 (Ictg): 10–17. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.06.002>.
- Lekhal, A. Conway, Benjamin J. Glasser, and Johannes G. Khinast. 2012. "Characterization of Granular Flow of Wet Solids in a Bladed Mixer." *AIChE Journal* 59 (4): 215–28. <https://doi.org/10.1002/aic>.
- Ball, F. D. Pelletizing before sintering: some experiments with a disc. *Journal of the iron and steel institute*, p. 40-55, 1959.
- Barrasso, Dana, Ashutosh Tamrakar, and Rohit Ramachandran. 2014. "A Reduced Order PBM-ANN Model of a Multi-Scale PBM-DEM Description of a Wet Granulation Process." *Chemical Engineering Science* 119: 319–29. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.08.005>.

- Bhalode, Pooja, and Marianthi Ierapetritou. 2020. "A Review of Existing Mixing Indices in Solid-Based Continuous Blending Operations." *Powder Technology* 373: 195–209. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.06.043>.
- Bhattacharya, Tathagata. 2011. "Controlling Mixing and Segregation in Time Periodic Granular Flows," 207.
- Boac, J. M., M. E. Casada, R. G. Maghirang, and J. P. Harner. 2010. "Material and Interaction Properties of Selected Grains and Oilseeds for Modeling Discrete Particles." *Transactions of the ASABE* 53 (4): 1201–16. <https://doi.org/10.13031/2013.28840>.
- Bouffard, Sylvie C. 2005. "Review of Agglomeration Practice and Fundamentals in Heap Leaching." *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review* 26 (3–4): 233–94. <https://doi.org/10.1080/08827500590944009>.
- Bramböck, Andreas. 2017. "Correlation of Bulk Properties and DEM Contact Models for Cohesive Powders," no. December.
- Brandao, R. J., Rondinelli M. Lima, Raphael L. Santos, Claudio R. Duarte, and Marcos A.S. Barrozo. 2020. "Experimental Study and DEM Analysis of Granular Segregation in a Rotating Drum." *Powder Technology* 364: 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.01.036>.
- Brandao, Rodolfo Junqueira. 2019. "Investigação Numérica e Experimental Do Escoamento Granular e Dos Fenômenos de Segregação Radial e Axial Em Tambor Rotatório," 184. <https://doi.org/10.14393/ufu.te.2019.2562>.
- Bridgwater, John. 2003. "The Dynamics of Granular Materials - Towards Grasping the Fundamentals." *Granular Matter* 4 (4): 175–81. <https://doi.org/10.1007/s10035-002-0120-8>.
- Bridgwater, John. 2012. "Mixing of Powders and Granular Materials by Mechanical Means - A Perspective." *Particuology* 10 (4): 397–427. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2012.06.002>.
- Cai, Ruihuan, and Yongzhi Zhao. 2020. "An Experimentally Validated Coarse-Grain DEM Study of Monodisperse Granular Mixing." *Powder Technology* 361: 99–111. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.10.023>.
- Cantelaube, Florence, Daniel Bideau, and Stéphane Roux. 1997. "Kinetics of Segregation of Granular Media in a Two-Dimensional Rotating Drum." *Powder Technology* 93 (1): 1–11. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(97\)03213-0](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(97)03213-0).
- Capes, C. E. 1980. "Particle Size Enlargement." *Elsevier* 1 (C): 83–96. <https://doi.org/10.1016/B978-1-4832-5666-5.50009-8>.
- Carr, Michael J., Wei Chen, Kenneth Williams, and Andre Katterfeld. 2016. "Comparative Investigation on Modelling Wet and Sticky Material Behaviours with a Simplified JKR Cohesion Model and Liquid Bridging Cohesion Model in DEM." *ICBMH 2016 - 12th*

International Conference on Bulk Materials Storage, Handling and Transportation, Proceedings, 40–49.

- Carter, F. L. 1978. “Quantifying the Concept of Coordination Number.” *Acta Crystallographica Section B Structural Crystallography and Crystal Chemistry* 34 (10): 2962–66. <https://doi.org/10.1107/s0567740878009838>.
- Chadwick, P. C., and J. Bridgwater. 1997. “Solids Flow in Dish Granulators.” *Chemical Engineering Science* 52 (15): 2497–2509. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(97\)00068-7](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(97)00068-7).
- Chadwick, P. C., S. L. Rough, and J. Bridgwater. 2005. “Holdup and Residence Time Distributions in Inclined Dishes.” *Industrial and Engineering Chemistry Research* 44 (19): 7529–39. <https://doi.org/10.1021/ie040252z>.
- Chai, Xinxin, Le Chen, Bingchun Xue, and Erbao Liu. 2017. “Granulation of Ammonium Chloride Fertilizer and Agglomeration Mechanism.” *Powder Technology* 319: 148–53. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.06.045>.
- Chandratilleke, G. R., Y. C. Zhou, A. B. Yu, and J. Bridgwater. 2010. “Effect of Blade Speed on Granular Flow and Mixing in a Cylindrical Mixer.” *Industrial and Engineering Chemistry Research* 49 (11): 5467–78. <https://doi.org/10.1021/ie901581t>.
- Chen, H., Y. G. Xiao, Y. L. Liu, and Y. S. Shi. 2017. “Effect of Young’s Modulus on DEM Results Regarding Transverse Mixing of Particles within a Rotating Drum.” *Powder Technology* 318: 507–17. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.05.047>.
- Chen, Hui, Xian Qiong Zhao, You Gang Xiao, Yi Lun Liu, and Ying Liu. 2016. “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)* 26 (2): 527–35. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(16\)64110-9](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(16)64110-9).
- Chou, Shih Hao, Yue Lou Song, and Shu San Hsiau. 2017. “A Study of the Mixing Index in Solid Particles.” *KONA Powder and Particle Journal* 2017 (34): 275–81. <https://doi.org/10.14356/kona.2017018>.
- Cleary, Paul W., and Matthew D. Sinnott. 2008. “Assessing Mixing Characteristics of Particle-Mixing and Granulation Devices.” *Particuology* 6 (6): 419–44. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2008.07.014>.
- Cleary, Paul W. 2010. “Particuology DEM Prediction of Industrial and Geophysical Particle Flows &.” *Particuology* 8 (2): 106–18. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2009.05.006>.
- Coetzee, C. J. 2017. “Review: Calibration of the Discrete Element Method.” *Powder Technology* 310: 104–42. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.01.015>.
- Cui, Jiaxin, Qinfu Hou, and Yansong Shen. 2020. “CFD-DEM Study of Coke Combustion in the Raceway Cavity of an Ironmaking Blast Furnace.” *Powder Technology* 362: 539–49. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.12.012>.

- Cui, Xiyuan, Xu Liu, Nan Gui, Xingtuan Yang, Jiyuan Tu, and Shengyao Jiang. 2021. “DEM Study of Flow Characteristics of Wet Cohesive Particles in Packed Bed.” *Annals of Nuclear Energy* 163 (December). <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108538>.
- Cundall, P. A. 1988. *Computer Simulations of Dense Sphere Assemblies. Studies in Applied Mechanics*. Vol. 20. Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-70523-5.50021-7>.
- Cundall, P. A., and O. D.L. Strack. 1979. “A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies.” *Geotechnique* 30 (3): 331–36. <https://doi.org/10.1680/geot.1980.30.3.331>.
- Cunha, R. N., K. G. Santos, R. N. Lima, C. R. Duarte, and M. A.S. Barrozo. 2016. “Repose Angle of Monoparticles and Binary Mixture: An Experimental and Simulation Study.” *Powder Technology* 303: 203–11. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.09.023>.
- Danczyk, Megan, Oscar Punch, Luke Fullard, Mathew Hawken, and Daniel J. Holland. 2022. “A Comparison of Models of Linear Collisions between Spherical Particles in the Pendular Regime.” *Powder Technology* 398 (January). <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117112>.
- Dehont, F. R., Hervieu, P. M., Jerome, E., Delacourte, A., & Guyot, J. C. 1989. “BRIQUETTING AND GRANULATION BY COMPACTION NEW GRANULATOR-COMPACTOR FOR THE PHARMACEUTICAL INDUSTRY.” *Drug Development and Industrial Pharmacy* 21 (20): 2263–85. <https://doi.org/10.3109/03639049509070870>.
- Deng, Shengan, Zhi Wen, Fuyong Su, Zhaoyu Wang, Guofeng Lou, Xunliang Liu, and Ruifeng Dou. 2021. “Radial Mixing of Metallurgical Slag Particles and Steel Balls in a Horizontally Rotating Drum: A Discussion of Particle Size Distribution and Mixing Time.” *Powder Technology* 378: 441–54. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.10.022>.
- Dubé, Olivier, Ebrahim Alizadeh, Jamal Chaouki, and François Bertrand. 2013. “Dynamics of Non-Spherical Particles in a Rotating Drum.” *Chemical Engineering Science* 101: 486–502. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.07.011>.
- Eidevåg, Tobias, Per Abrahamsson, Matthias Eng, and Anders Rasmuson. 2020. “Modeling of Dry Snow Adhesion during Normal Impact with Surfaces.” *Powder Technology* 361: 1081–92. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.10.085>.
- Fan, L. T., S. J. Chen, and C. A. Watson. 1970. “Solids Mixing.” *Industrial and Engineering Chemistry* 62 (7): 53–69. <https://doi.org/10.1021/ie50727a009>.
- Fan, Renyu, Mengtao Zhao, Linxiu Luo, Yuting Wang, Kangming Zhou, Zeng Liu, Yu Zhou, Tianbing Guan, Huimin Sun, and Chuanyun Dai. 2023. “Investigation of Mixing Homogeneity of Binary Particle Systems in High-Shear Wet Granulator by DEM.” *Drug Development and Industrial Pharmacy* 0 (0): 1–10. <https://doi.org/10.1080/03639045.2023.2194993>.
- Finnie, G. J., N. P. Kruyt, M. Ye, C. Zeilstra, and J. A.M. Kuipers. 2005. “Longitudinal and Transverse Mixing in Rotary Kilns: A Discrete Element Method Approach.” *Chemical Engineering Science* 60 (15): 4083–91. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.12.048>.

- Fischer, David, Tilo Finger, Frank Angenstein, and Ralf Stannarius. 2009. "Diffusive and Subdiffusive Axial Transport of Granular Material in Rotating Mixers." *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* 80 (6): 1–5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.80.061302>.
- Fujihashi, Daiki, Yuki Tsunazawa, Kazuki Tahara, Chiharu Tokoro, and Shuji Owada. 2013. "DEM Simulation of Agglomerated Particle Behavior in Pan-Type Pelletizer Using Liquid Bridge Model."
- Gui, Nan, Xingtuan Yang, Jiyuan Tu, Shengyao Jiang, and Zhen Zhang. 2018. "Numerical Simulation of Tetrahedral Particle Mixing and Motion in Rotating Drums." *Particuology* 39: 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2017.08.004>.
- Harnby, N. 1967. "A Comparison of the Performance of Industrial Solids Mixers Using Segregating Materials." *Powder Technology* 1 (2): 94–102. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(67\)80017-2](https://doi.org/10.1016/0032-5910(67)80017-2).
- He, S. Y., J. Q. Gan, D. Pinson, A. B. Yu, and Z. Y. Zhou. 2019. "Radial Segregation of Binary-Sized Ellipsoids in a Rotating Drum." *Powder Technology* 357: 322–30. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.08.075>.
- He, S. Y., J. Q. Gan, D. Pinson, and Z. Y. Zhou. 2019. "Particle Shape-Induced Radial Segregation of Binary Mixtures in a Rotating Drum." *Powder Technology* 341: 157–66. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.06.005>.
- Hertz, H. 1881. "H. Hertz, Über Die Berührung Fester Elastischer Körper, Journal Für Die Reine Und Angewandte Mathematik 92, 156-171 (1881)." *Journal Für Die Reine Und Angewandte Mathematik* 171: 156–71.
- Hlosta, Jakub, Lucie Jezerská, Jiří Rozbroj, David Žurovec, Jan Nečas, and Jiří Zegzulka. 2020. "DEM Investigation of the Influence of Particulate Properties and Operating Conditions on the Mixing Process in Rotary Drums: Part 2-Process Validation and Experimental Study." *Processes* 8 (2). <https://doi.org/10.3390/pr8020184>.
- Hogg, R. 2009. "Mixing and Segregation in Powders: Evaluation, Mechanisms and Processes." *KONA Powder and Particle Journal* 27 (27): 3–17. <https://doi.org/10.14356/kona.2009005>.
- Hutchings, Ian M. 2016. "Leonardo Da Vinci's Studies of Friction." *Wear* 360–361: 51–66. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2016.04.019>.
- Iveson, S. M., and J. D. Luster. 1998. "Growth Regime Map for Liquid-Bound Granules." *AIChE Journal* 44 (7): 1510–18. <https://doi.org/10.1002/aic.690440705>.
- Iveson, Simon M., James D. Litster, Karen Hapgood, and Bryan J. Ennis. 2001. "Nucleation, Growth and Breakage Phenomena in Agitated Wet Granulation Processes: A Review." *Powder Technology* 117 (1–2): 3–39. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(01\)00313-8](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(01)00313-8).
- Jain, Nitin, Julio M. Ottino, and Richard M. Lueptow. 2005. "Regimes of Segregation and

- Mixing in Combined Size and Density Granular Systems: An Experimental Study.” *Granular Matter* 7 (2–3): 69–81. <https://doi.org/10.1007/s10035-005-0198-x>.
- Johnson, K. L., Kendall, K. and Roberts, A. D. 1971. “Surface Energy and the Contact of Elastic Solids.” *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 324 (1558): 301–13. <https://doi.org/10.1098/rspa.1971.0141>.
- Kasper, Jens H., Vanessa Magnanimo, Sjoerd D.M. de Jong, Arjan Beek, and Ahmed Jarray. 2021. “Effect of Viscosity on the Avalanche Dynamics and Flow Transition of Wet Granular Matter.” *Particuology* 59 (December): 64–75. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2020.12.001>.
- Khan, Zeina S., and Stephen W. Morris. 2005. “Subdiffusive Axial Transport of Granular Materials in a Long Drum Mixer.” *Physical Review Letters* 94 (4): 1–4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.048002>.
- Kosaku, Yoshihiro, Yuki Tsunazawa, and Chiharu Tokoro. 2023. “A Coarse Grain Model with Parameter Scaling of Adhesion Forces from Liquid Bridge Forces and JKR Theory in the Discrete Element Method.” *Chemical Engineering Science* 268 (March). <https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.118428>.
- Kulju, Timo, Marko Paavola, Horst Spittka, Riitta L. Keiski, Esko Juuso, Kauko Leiviskä, and Esa Muurinen. 2016. “Modeling Continuous High-Shear Wet Granulation with DEM-PB.” *Chemical Engineering Science* 142: 190–200. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.11.032>.
- Kumar, Rahul, Ben Freireich, and Carl Wassgren. 2015. “DEM-Compartment-Population Balance Model for Particle Coating in a Horizontal Rotating Drum.” *Chemical Engineering Science* 125: 144–57. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.06.046>.
- Kuo, H. P., R. C. Hsu, and Y. C. Hsiao. 2005. “Investigation of Axial Segregation in a Rotating Drum.” *Powder Technology* 153 (3): 196–203. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.03.018>.
- Lacey, P. M.C. 1943. “The Mixing of Solid Particles.” *Chemical Engineering Research and Design* 75 (1 SUPPL.): S49–55. [https://doi.org/10.1016/S0263-8762\(97\)80004-4](https://doi.org/10.1016/S0263-8762(97)80004-4).
- Levenspiel, Octave. 1999. *Chemical Reaction Engineering*. *Chemical Engineering Science*. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(80\)80138-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(80)80138-2).
- Lian, G., Thornton, C., & Adams, M. J. 1993. “Lian,1993,A Theoretical Study of the.Pdf.” *Journal of Colloid and Interface Science*.
- Lian, Guoping, Colin Thornton, and Michael J. Adams. 1998. “Discrete Particle Simulation of Agglomerate Impact Coalescence.” *Chemical Engineering Science* 53 (19): 3381–91. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(98\)00152-3](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00152-3).
- Liao, Chun Chung. 2019. “Effect of Dynamic Properties on Density-Driven Granular Segregation in a Rotating Drum.” *Powder Technology* 345: 151–58.

- <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.12.093>.
- Liao, Chun Chung, Hung Wen Lan, and Shu San Hsiau. 2016. "Density-Induced Granular Segregation in a Slurry Rotating Drum." *International Journal of Multiphase Flow* 84: 1–8. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2016.04.015>.
- Lima, Rondinelli M., Rodolfo J. Brandão, Gisele M. de Souza, Jeniffer C. Silveira, Fernanda Potenza, Claudio R. Duarte, and Marcos A.S. Barrozo. 2022. "Analysis of Particle Dynamics in a Rotating Dish." *Powder Technology* 409 (July). <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117827>.
- Litster, J. D., and A. G. Waters. 1990. "Kinetics of Iron Ore Sinter Feed Granulation." *Powder Technology* 62 (2): 125–34. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(90\)80075-A](https://doi.org/10.1016/0032-5910(90)80075-A).
- Liu, Yu, Marcial Gonzalez, and Carl Wassgren. 2019. "Modeling Granular Material Segregation Using a Combined Finite Element Method and Advection–Diffusion–Segregation Equation Model." *Powder Technology* 346 (I): 38–48. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.01.086>.
- Lommen, Stef, Dingena Schott, and Gabriel Lodewijks. 2014. "DEM Speedup: Stiffness Effects on Behavior of Bulk Material." *Particuology* 12 (1): 107–12. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2013.03.006>.
- Ma, Huaqing, and Yongzhi Zhao. 2017. "Modelling of the Flow of Ellipsoidal Particles in a Horizontal Rotating Drum Based on DEM Simulation." *Chemical Engineering Science* 172: 636–51. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.07.017>.
- Machado, M. V.C., S. M. Nascimento, C. R. Duarte, and M. A.S. Barrozo. 2017. "Boundary Conditions Effects on the Particle Dynamic Flow in a Rotary Drum with a Single Flight." *Powder Technology* 311: 341–49. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.01.076>.
- Makishima, Akio, and John D. Mackenzie. 1975. "Calculation of Bulk Modulus, Shear Modulus and Poisson's Ratio of Glass." *Journal of Non-Crystalline Solids* 17 (2): 147–57. [https://doi.org/10.1016/0022-3093\(75\)90047-2](https://doi.org/10.1016/0022-3093(75)90047-2).
- Malone, Kevin Francis, and Bao Hua Xu. 2008. "Determination of Contact Parameters for Discrete Element Method Simulations of Granular Systems." *Particuology* 6 (6): 521–28. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2008.07.012>.
- Marigo, M., D. L. Cairns, M. Davies, A. Ingram, and E. H. Stitt. 2012. "A Numerical Comparison of Mixing Efficiencies of Solids in a Cylindrical Vessel Subject to a Range of Motions." *Powder Technology* 217: 540–47. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2011.11.016>.
- Marigo, Michele, and Edmund Hugh Stitt. 2015. "Discrete Element Method (DEM) for Industrial Applications: Comments on Calibration and Validation for the Modelling of Cylindrical Pellets." *KONA Powder and Particle Journal* 32 (32): 236–52. <https://doi.org/10.14356/kona.2015016>.

- Morais, J. N.S., C. R. Duarte, M. A.S. Barrozo, and D. A. Santos. 2020. "A Low-COST Technique for the Analysis of Radial and Axial Segregation in a Conical Spouted Bed." *Powder Technology* 376: 410–23. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.08.056>.
- Mosby, Jostein, Sunil R. de Silva, and Gisle G. Enstad. 1996. "Segregation of Particulate Materials – Mechanisms and Testers." *KONA Powder and Particle Journal* 14 (May): 31–43. <https://doi.org/10.14356/kona.1996008>.
- Nase, Steven T., Watson L. Vargas, Adetola A. Abatan, and J. J. McCarthy. 2001. "Discrete Characterization Tools for Cohesive Granular Material." *Powder Technology* 116 (2–3): 214–23. [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(00\)00398-3](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(00)00398-3).
- Obraniak, Andrzej, and Tadeusz Gluba. 2017. "The Effect of Disaccharide Concentration in a Liquid Binder on the Mechanisms and Kinetics of Disc Granulation." *Chemical and Process Engineering - Inzynieria Chemiczna i Procesowa* 38 (2): 295–306. <https://doi.org/10.1515/cpe-2017-0023>.
- Obraniak, Andrzej, and Katarzyna Lawinska. 2018. "Spectrophotometric Analysis of Disintegration Mechanisms (Abrasion and Crushing) of Agglomerates during the Disc Granulation of Dolomite." *Granular Matter* 20 (1): 1–10. <https://doi.org/10.1007/s10035-017-0777-7>.
- Pereira, G. G., M. D. Sinnott, P. W. Cleary, Kurt Liffman, Guy Metcalfe, and Ilija D. Šutalo. 2011. "Insights from Simulations into Mechanisms for Density Segregation of Granular Mixtures in Rotating Cylinders." *Granular Matter* 13 (1): 53–74. <https://doi.org/10.1007/s10035-010-0223-6>.
- Peters, B., F. Hoffmann, D. Senk, and A. Babich. 2016. "Experimental and Numerical Investigation into Iron Ore Reduction in Packed Beds." *Chemical Engineering Science* 140: 189–200. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.09.017>.
- Pietsch, Wolfgang, Egon Hoffman, and Hans Rumpf. 1969. "Tensile Strength of Moist Agglomerates." *Industrial and Engineering Chemistry Product Research and Development* 8 (1): 58–62. <https://doi.org/10.1021/i360029a009>.
- Potyondy, David O., and P. A. Cundall. 2004. "A Bonded-Particle Model for Rock." *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 41 (8 SPEC.ISS.): 1329–64. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2004.09.011>.
- Poux, M., P. Fayolle, J. Bertrand, D. Bridoux, and J. Bousquet. 1991. "Powder Mixing: Some Practical Rules Applied to Agitated Systems." *Powder Technology* 68 (3): 213–34. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(91\)80047-M](https://doi.org/10.1016/0032-5910(91)80047-M).
- Rabinovich, Yakov I., Madhavan S. Esayanur, and Brij M. Moudgil. 2005. "Capillary Forces between Two Spheres with a Fixed Volume Liquid Bridge: Theory and Experiment." *Langmuir* 21 (24): 10992–97. <https://doi.org/10.1021/la0517639>.
- Rackl, Michael, and Kevin J. Hanley. 2017. "A Methodical Calibration Procedure for Discrete Element Models." *Powder Technology* 307: 73–83.

<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.11.048>.

- Remy, Brenda. 2010. "Granular Flow, Segregation and Agglomeration in Bladed Mixers," no. October.
- Remy, Brenda, Johannes G Khinast, and Benjamin J Glasser. 2011. "Polydisperse Granular Flows in a Bladed Mixer: Experiments and Simulations of Cohesionless Spheres." *Chemical Engineering Science* 66 (9): 1811–24. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.12.022>.
- Roessler, Thomas, Christian Richter, André Katterfeld, and Frank Will. 2019. "Development of a Standard Calibration Procedure for the DEM Parameters of Cohesionless Bulk Materials – Part I: Solving the Problem of Ambiguous Parameter Combinations." *Powder Technology* 343: 803–12. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.11.034>.
- Rong, Wenjie, Yuqing Feng, Phil Schwarz, Tarabordin Yurata, Peter Witt, Baokuan Li, Tao Song, and Junwu Zhou. 2020. "Sensitivity Analysis of Particle Contact Parameters for DEM Simulation in a Rotating Drum Using Response Surface Methodology." *Powder Technology* 362: 604–14. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.12.004>.
- Santos, D. A., C. R. Duarte, and M. A.S. Barrozo. 2016. "Segregation Phenomenon in a Rotary Drum: Experimental Study and CFD Simulation." *Powder Technology* 294: 1–10. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.02.015>.
- Santos, D. A., I. J. Petri, C. R. Duarte, and M. A.S. Barrozo. 2013. "Experimental and CFD Study of the Hydrodynamic Behavior in a Rotating Drum." *Powder Technology* 250: 52–62. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.10.003>.
- Shi, Xianju, Chengzhi Li, Qiang Wang, Guangqiang Li, Wei Zhang, and Zhengliang Xue. 2022. "Numerical Study of the Dynamic Behaviour of Iron Ore Particles during Wet Granulation Process Using Discrete Element Method." *Powder Technology* 401: 117296. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2022.117296>.
- Silva, Sunil R. de, Are Dyrøy, and Gisle G. Enstad. 2000. "Segregation Mechanisms and Their Quantification Using Segregation Testers," 11–29. https://doi.org/10.1007/978-94-015-9498-1_2.
- Soulié, F., F. Cherblanc, M. S. El Youssoufi, and C. Saix. 2006. "Influence of Liquid Bridges on the Mechanical Behaviour of Polydisperse Granular Materials." *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 30 (3): 213–28. <https://doi.org/10.1002/nag.476>.
- Taberlet, Nicolas, Michael Newey, Patrick Richard, and Wolfgang Losert. 2006. "On Axial Segregation in a Tumbler: Anexperimental and Numerical Study." *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 07013 (7). <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2006/07/P07013>.
- Trung Vo, Thanh, Saeid Nezamabadi, Patrick Mutabaruka, Jean Yves Delenne, Edouard Izard, Roland Pellenq, and Farhang Radjai. 2019. "Agglomeration of Wet Particles in

- Dense Granular Flows.” *European Physical Journal E* 42 (9). <https://doi.org/10.1140/epje/i2019-11892-9>.
- Tsuji, Y., T. Tanaka, and T. Ishida. 1992. “Lagrangian Numerical Simulation of Plug Flow of Cohesionless Particles in a Horizontal Pipe.” *Powder Technology* 71 (3): 239–50. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(92\)88030-L](https://doi.org/10.1016/0032-5910(92)88030-L).
- Tsunazawa, Yuki, Daiki Fujihashi, Sho Fukui, Mikio Sakai, and Chiharu Tokoro. 2016. “Contact Force Model Including the Liquid-Bridge Force for Wet-Particle Simulation Using the Discrete Element Method.” *Advanced Powder Technology* 27 (2): 652–60. <https://doi.org/10.1016/j.appt.2016.02.021>.
- Umer, Muhammad, and Muhammad Shafiq Siraj. 2018. “DEM Studies of Polydisperse Wet Granular Flows.” *Powder Technology* 328: 309–17. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.01.021>.
- Vo, Thanh-Trung, Trung-Kien Nguyen, and Cuong T. Nguyen. 2022. “Gravity-Driven Wet Granular Free-Surface Flows down an Inclined Plane: Effects of the Inclination Angle.” *Vietnam Journal of Mechanics*, no. June. <https://doi.org/10.15625/0866-7136/16696>.
- Wang, Yuelei, Jin Xu, Siyuan He, Sida Liu, and Zongyan Zhou. 2023. “Numerical Simulation of Particle Mixing and Granulation Performance in Rotating Drums during the Iron Ore Sintering Process.” *Powder Technology* 429 (August): 118890. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.118890>.
- Ward, Thomas, and William Hourigan. 2012. “Granular Segregation in a Tilted-Rotating Drum.” *Powder Technology* 215–216: 227–34. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2011.10.003>.
- Wen, Yuanyun, Malin Liu, Bing Liu, and Youlin Shao. 2015. “Comparative Study on the Characterization Method of Particle Mixing Index Using DEM Method.” *Procedia Engineering* 102: 1630–42. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2015.01.299>.
- Xu, Yong, Chunhui Xu, Zhe Zhou, Jing Du, and Daping Hu. 2010. “2D DEM Simulation of Particle Mixing in Rotating Drum: A Parametric Study.” *Particuology* 8 (2): 141–49. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2009.10.003>.
- Yamamoto, Michinori, Shingo Ishihara, and Junya Kano. 2016. “Evaluation of Particle Density Effect for Mixing Behavior in a Rotating Drum Mixer by DEM Simulation.” *Advanced Powder Technology* 27 (3): 864–70. <https://doi.org/10.1016/j.appt.2015.12.013>.
- Zhang, T. F., J. Q. Gan, D. Pinson, and Z. Y. Zhou. 2018. “Size-Induced Segregation of Granular Materials during Filling a Conical Hopper.” *Powder Technology* 340: 331–43. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.09.031>.
- Zhao, Chuang, Qingqing Gao, Yuchao Chen, and Chengbo Li. 2021. “Application of Parametric Function in Construction of Particle Shape and Discrete Element Simulation.” *Powder Technology* 387: 481–93. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2021.04.054>.

- Zhou, Y. C., B. H. Xu, A. B. Yu, and P. Zulli. 2001. "Numerical Investigation of the Angle of Repose of Monosized Spheres." *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics* 64 (2): 8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.021301>.
- Zhu, H. P., and A. B. Yu. 2006. "A Theoretical Analysis of the Force Models in Discrete Element Method." *Powder Technology* 161 (2): 122–29. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.09.006>.
- Zhu, H. P., Z. Y. Zhou, R. Y. Yang, and A. B. Yu. 2007. "Discrete Particle Simulation of Particulate Systems: Theoretical Developments." *Chemical Engineering Science* 62 (13): 3378–96. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.12.089>.
- Zuo, Zhijian, Jiajie Wang, Xintao Chen, Shuguang Gong, and Haishan Lu. 2022. "Numerical Study of Forced Axial Segregation of Binary Density Granular System in a Split Rotary Drum." *Advanced Powder Technology* 33 (11): 103831. <https://doi.org/10.1016/j.appt.2022.103831>.

APÊNDICE A

Código para tratamento das imagens obtidas experimentalmente:

```
clear all

frame_samples = [5:5:60];

for frame_index = frame_samples

disp(frame_index);

in_file = '... /p_Ensaio_'+string(frame_index)+'.png';
out_file = '... /t_Ensaio_'+string(frame_index)+'.png';

%Read image
%Frame contains 3 matrixes with the RGB data
[frame, map, transparency] = imread(char(in_file));
%RGB to grayscale
frame_grayscale = rgb2gray(frame);

%Simulation only
frame_grayscale = frame(:,:,3);

%Select only the bed granular (o resto é transparente na imagem)
leito = uint8(transparency > 40);
fundo_removido = uint8(transparency <= 40);

%Filter to smooth image, removing small defects such as shadows
h = fspecial('disk',10);
frame_filtered = imfilter(frame_grayscale, h);

%Identify each type of image regarding the chosen criterium
saturated_frame = imbinarize(frame_filtered, 0.21); %0.15 Simulation %0.21
Experimental

%Image to RGB
saturated_rgb_frame = frame;
saturated_rgb_frame(:,:,1) = (uint8(~saturated_frame)-fundo_removido)*255;
saturated_rgb_frame(:,:,2) = uint8(saturated_frame)*0;
saturated_rgb_frame(:,:,3) = uint8(saturated_frame)*255;

%subplot(3,1,1)
figure(1)
imshowpair(frame_grayscale,frame_filtered,'montage')

%subplot(3,1,2)
figure(2)
imshowpair(frame_grayscale,saturated_frame,'montage')

%subplot(3,1,3)
```

```
figure(3)
imshowpair(frame,saturated_rgb_frame,'montage')

%input('continue ...')

imwrite(saturated_rgb_frame, char(out_file),'bitdepth', 8, 'Alpha',
transparency);

end
```

Código para cálculo do índice de entropia de mistura superficial:

```
clear all

number_of_cells_x = 8;
number_of_cells_y = 6;
sample_list_experiment = [0 5 10 15 20 25 30 35 40 45 50 55 60]; %seconds
sample_list_simulated = [1:1:600];

base_experiment_file_name_list = [
    'Validation50\size_segregation\GP5\D28IN50GP5_10rpm\10_1/t_Ensaio_';
    ...
    'Validation50\size_segregation\GP5\D28IN50GP5_10rpm\10_2/t_Ensaio_';
    ...
    'Validation50\size_segregation\GP5\D28IN50GP5_10rpm\10_3/t_Ensaio_';
    ...
    ];

base_simulation_file_name = 'H:\Meu
Drive\Doutorado\volumetrico\IN50\D28GP5IN5010rpm_5e8_035B050\imagens/simula
tion_';

segregation_index_sim = zeros(1,length(sample_list_simulated));
segregation_index_exp = zeros(1,length(sample_list_experiment));
segregation_index_exp_mean = zeros(1,length(sample_list_experiment));

i = 2;
for sample = sample_list_simulated_2(2:end)
    %Reading image samples
    file_name_sim =
char(base_simulation_file_name_2+string(sample)+'.png');
    [frame_sim, map, transparency] = imread(file_name_sim);

    %Rotating frames to aling granular bed
    if(i == 2)
        frame_sim = imrotate(frame_sim,31);
    else
        frame_sim = imrotate(frame_sim,35);
    end

    %Calculating Lacey's segregation index
    segregation_index_sim(i) = entropy_segregation(frame_sim,
number_of_cells_x, number_of_cells_y, 0);

    i = i + 1;
    %input('continue ...')
end

for j = [1:length(base_experiment_file_name_list(:,1))
base_experiment_file_name = base_experiment_file_name_list(j,:);
i = 2;
for sample = sample_list_experiment(2:end)
    %Reading image samples
```

```

        file_name_exp =
char(base_experiment_file_name+string(sample)+'.png');
        [frame_exp, map, transparency] = imread(file_name_exp);

        %Rotating frames to aling granular bed
        if(i == 2)
            frame_exp = imrotate(frame_exp,41);
        else
            frame_exp = imrotate(frame_exp,41);
        end

        %Calculating Lacey's segregation index
        segregation_index_exp(i) = entropy_segregation(frame_exp,
number_of_cells_x, number_of_cells_y, 0);

        i = i + 1;
        %input('continue ...')
    end
    segregation_index_exp_mean = segregation_index_exp_mean +
segregation_index_exp/length(base_experiment_file_name_list(:,1));
    segregation_index_exp_list(j,:) = segregation_index_exp
end

err =
2*(std(segregation_index_exp_list)/sqrt(size(segregation_index_exp_list,1))
);

%Plot Simulated vs Experimental
figure(104)
errorbar(sample_list_experiment,segregation_index_exp_mean, err,
'ks','linewidth',2)
hold on
plot(sample_list_simulated_2,smooth(segregation_index_sim, 0.1),'k--
','linewidth',2)
ylim([0 1]);
legend({'experimental','numérico'},'FontSize', 12);
xlabel('Tempo (s)','FontSize', 14);
ylabel('Entropia de Mistura','FontSize', 14);

function [segregation_index] = entropy_segregation(frame,
number_of_cells_x, number_of_cells_y, plot_cells)
    %Entropy_SEGREGATION Summary of this function goes here
    % Detailed explanation goes here

    %Detecting limits
    aux = frame(:, :, 1)+frame(:, :, 3);
    x_min = find(sum(aux),1);
    x_max = find(sum(aux),1,'last');
    y_min = find(sum(aux'),1);
    y_max = find(sum(aux'),1,'last');

    pixels_per_section_x = floor((x_max - x_min)/number_of_cells_x);
    pixels_per_section_y = floor((y_max - y_min)/number_of_cells_y);

    red = zeros(number_of_cells_x, number_of_cells_y);

```

```

blue = zeros(number_of_cells_x, number_of_cells_y);
sub_plot_index = 1;
for l = 1:number_of_cells_y
    for k = 1:number_of_cells_x

        x_range = (x_min + pixels_per_section_x*(k-1)):(x_min +
pixels_per_section_x*k);
        y_range = (y_min + pixels_per_section_y*(l-1)):(y_min +
pixels_per_section_y*l);

        red(k,l) = sum(sum(frame(y_range,x_range,1)));
        blue(k,l) = sum(sum(frame(y_range,x_range,3)));

        if(plot_cells)
            figure(plot_cells)
            subplot(number_of_cells_y,number_of_cells_x,sub_plot_index)
            imshow(frame(y_range,x_range,:));
            sub_plot_index = sub_plot_index+1;
        end
    end
end

concentration_red = red./(blue + red);
concentration_blue = blue./(blue + red);
concentration_red(isnan(concentration_red)) = 0;
concentration_blue(isnan(concentration_blue)) = 0;

sum(sum(red))/(sum(sum(red +blue)));

mixture_entropy = (concentration_red.*log(concentration_red) +
concentration_blue.*log(concentration_blue));
mixture_entropy(isnan(mixture_entropy)) = 0;

S0r = sum(sum(red))/(sum(sum(red +blue)));
S0b = sum(sum(blue))/(sum(sum(red+blue)));

S0 = (S0r*log(S0r) + S0b*log(S0b));

segregation_index = (sum(sum(mixture_entropy.*(red +
blue))))/(sum(sum(red + blue)))/ S0;
end

```

APÊNDICE B

Código para determinar o Índice de Entropia de mistura em todo o leito de partículas:

```
clear all

dish_radius = 0.14; %meters
dish_height = 0.20; %meters

simulation_time = 60; %seconds
sample_period = 0.1; %seconds

inclination_angle_deg = -50;

base_file_name_list = { ...
    '...\dados/granular_'; ...
    '...\dados/granular_'; ...
    '...\dados/granular_';}

file_extension = '.csv';
file_number = [0,600; ...
               0,600; ...
               0,600];

division_list = [10];

mean_particles_per_occupied_cell =
zeros(max(file_number(:,2)),length(division_list));
segregation_index =
zeros(max(file_number(:,2)),length(base_file_name_list));
file_index = 0;

for file_index = [1:length(base_file_name_list)]
    base_file_name = base_file_name_list(file_index);

    for divisions = division_list

        x_cell_divisions = divisions;
        y_cell_divisions = divisions;
        z_cell_divisions = divisions;

        number_of_cells = x_cell_divisions * y_cell_divisions * z_cell_divisions;

        for sample = [file_number(file_index,1):file_number(file_index,2)]

            filename = base_file_name + string(sample) + file_extension
            [id, x, y, z, type, radius] =
            get_particles_id_x_y_z_type_and_radius(filename);

            [type_1_cell_distribution ,type_2_cell_distribution] =
            get_particle_cell_distribution_per_type(dish_radius, dish_height,...
```

```

x_cell_divisions, y_cell_divisions, z_cell_divisions,...

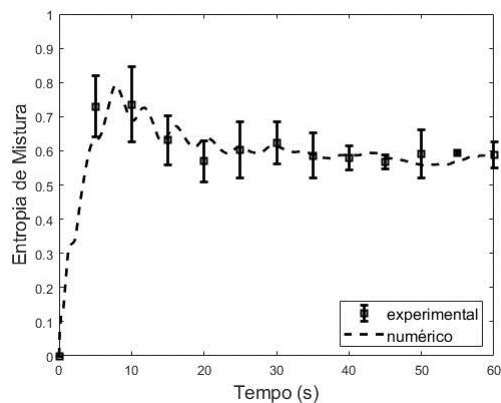
type, x, y, z);

%Mixture Entropy Method
number_of_particles_in_cell = (type_1_cell_distribution +
type_2_cell_distribution);
total_number_of_particles = sum(sum(sum(type_1_cell_distribution +
type_2_cell_distribution)));
concentration_type_1 = type_1_cell_distribution ./
(type_1_cell_distribution + type_2_cell_distribution);
concentration_type_2 = type_2_cell_distribution ./
(type_1_cell_distribution + type_2_cell_distribution);
concentration_type_1(isnan(concentration_type_1)) = 0;
concentration_type_2(isnan(concentration_type_2)) = 0;
mixture_entropy =
number_of_particles_in_cell.*(concentration_type_1.*log(concentration_type_
1) + concentration_type_2.*log(concentration_type_2));
mixture_entropy(isnan(mixture_entropy)) = 0;
%S0 = ((0.5*log(0.5) + 0.5*log(0.5)).* number_of_particles_in_cell);
S0 = ((0.15*log(0.15) + 0.85*log(0.85)).* number_of_particles_in_cell);
segregation_index(sample,file_index) = (sum(sum(sum( mixture_entropy)
)))/(sum(sum(sum(S0))));

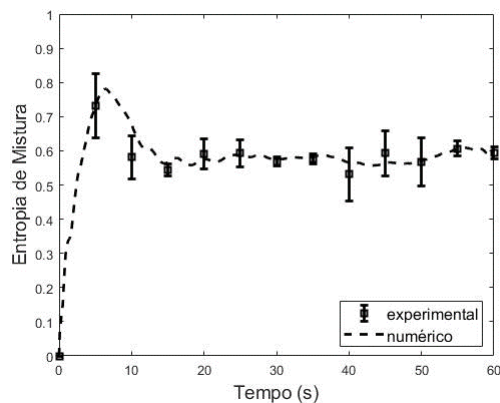
end
end
end

```

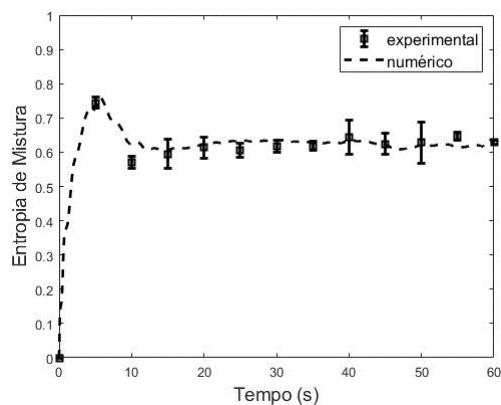
APÊNDICE C



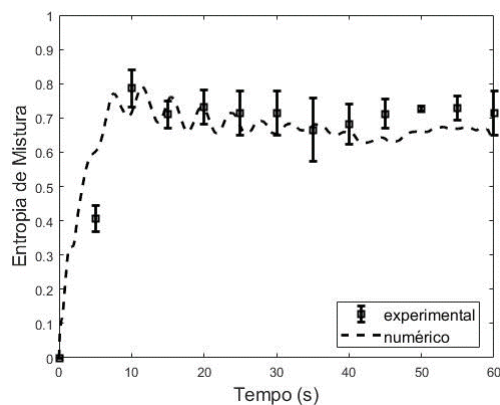
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 40^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 10rpm



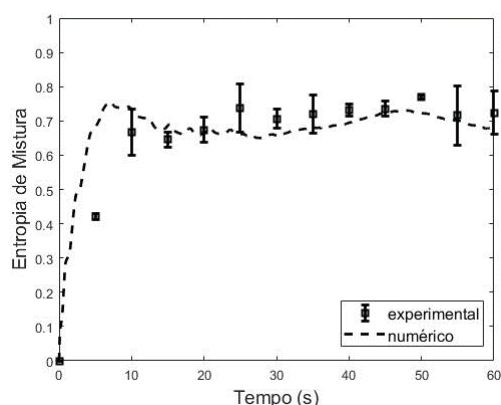
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 40^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 15rpm



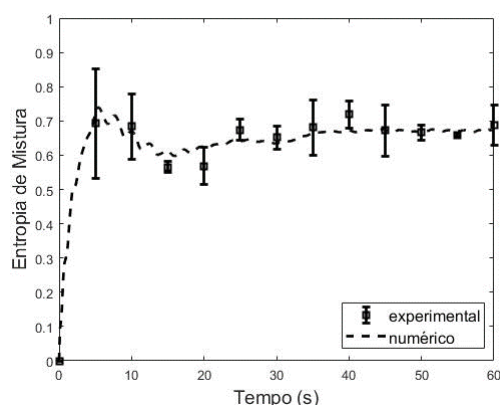
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 40^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 20rpm



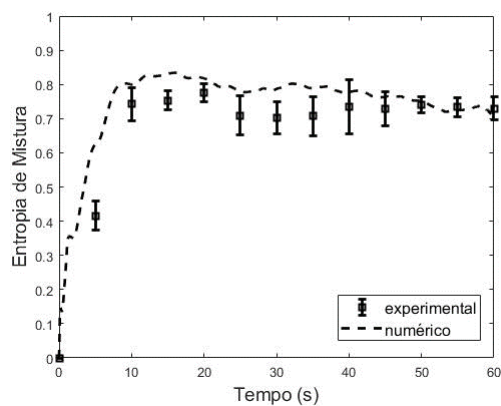
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 40^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 10rpm



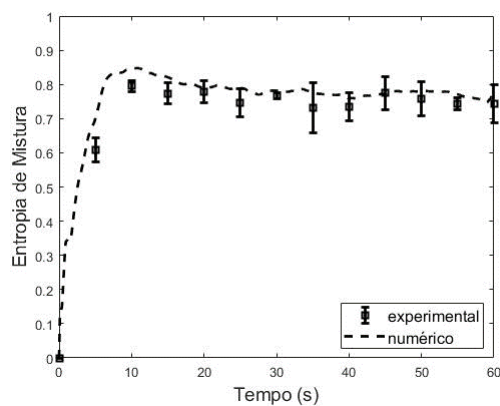
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 40^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 15rpm



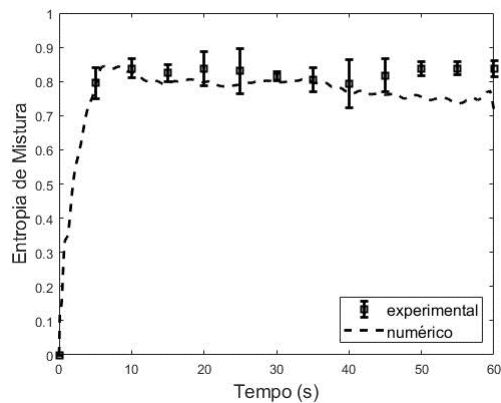
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 40^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 20rpm



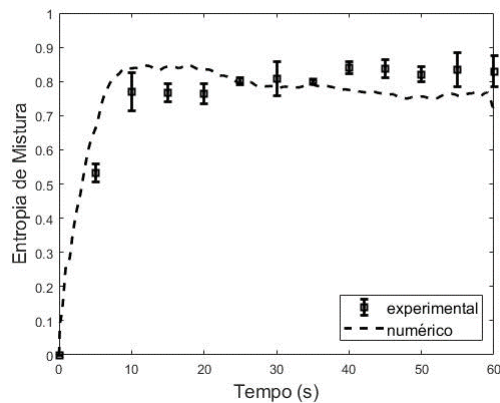
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 10rpm



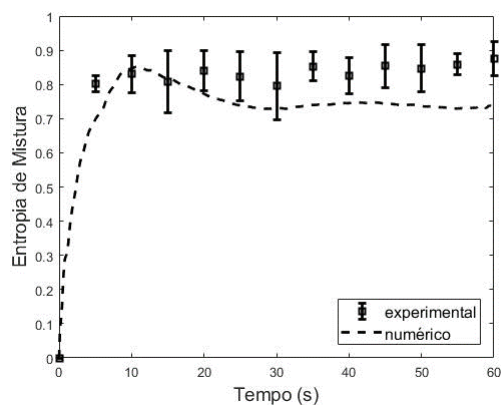
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 15rpm



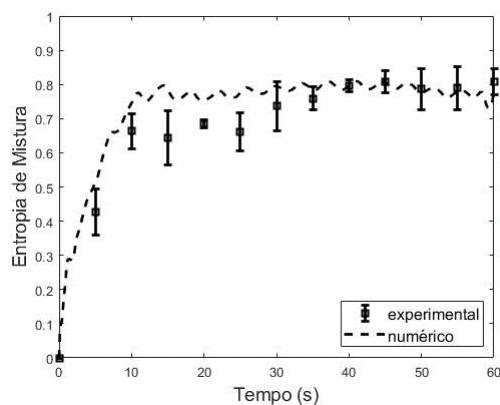
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 20rpm



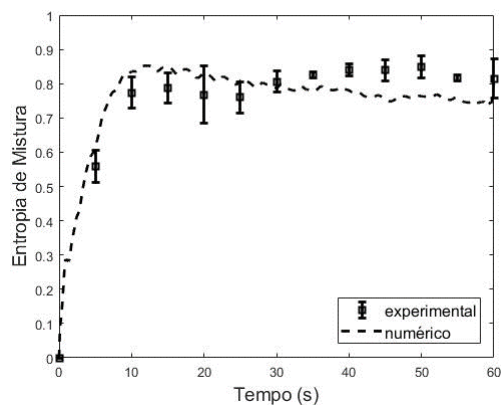
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 15rpm



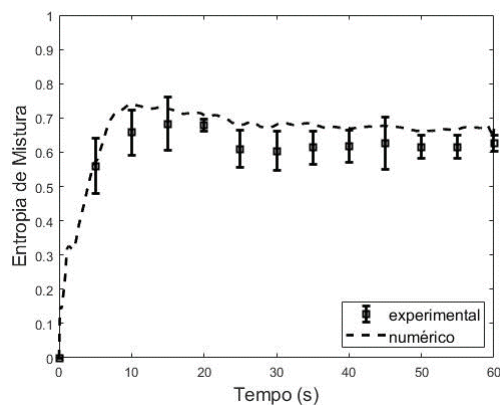
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 20rpm



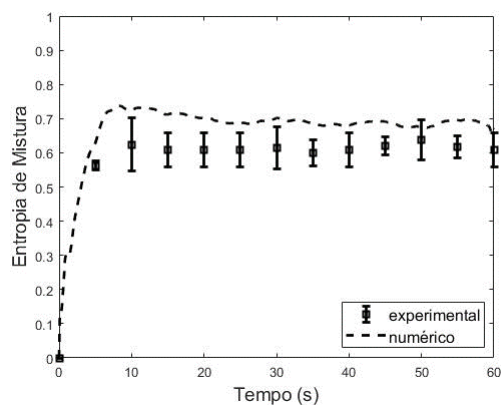
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 7,5% e VR = 10rpm



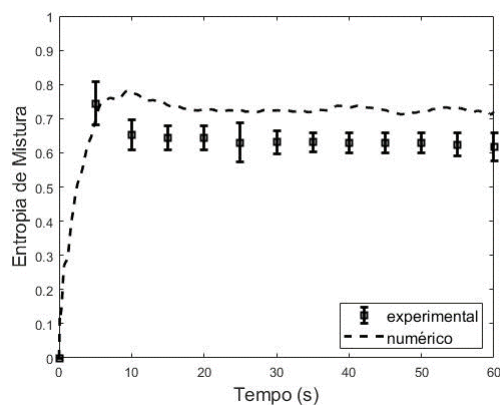
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 50^\circ$,
GP = 7,5% e VR = 15rpm



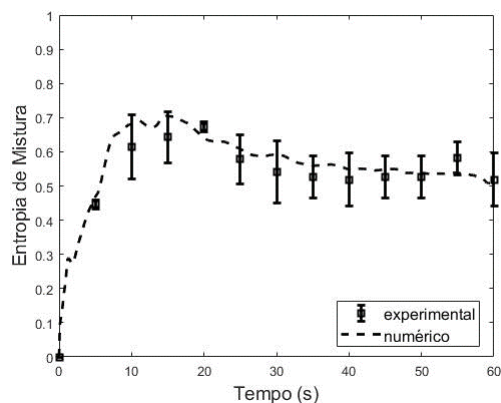
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 10rpm



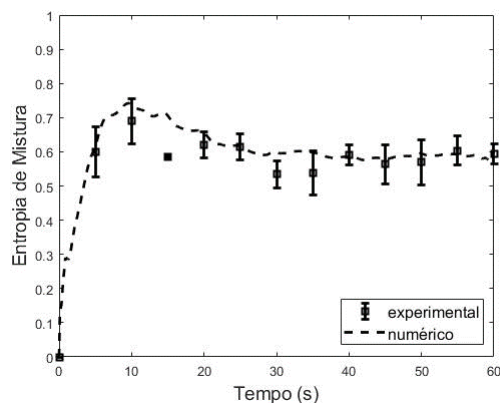
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 15rpm



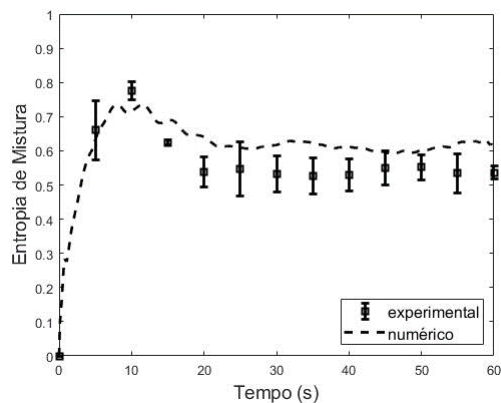
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 2,5% e VR = 20rpm



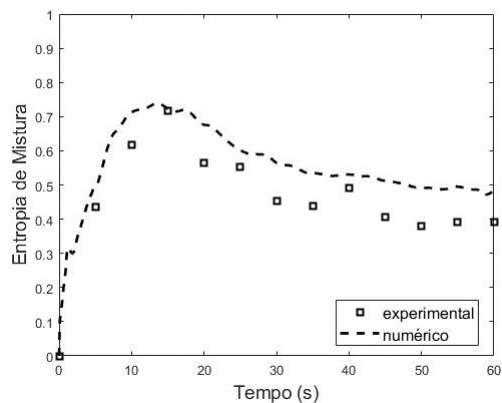
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 15rpm



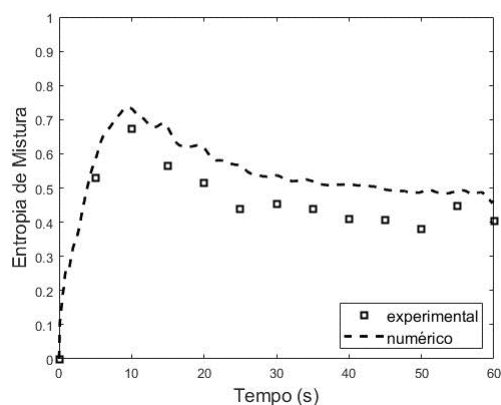
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 15rpm



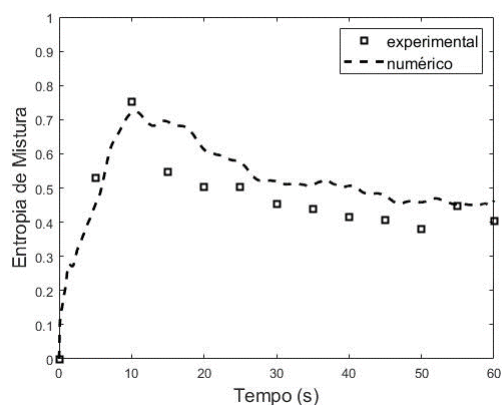
Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 5,0 % e VR = 20rpm



Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 7,5% e VR = 10rpm

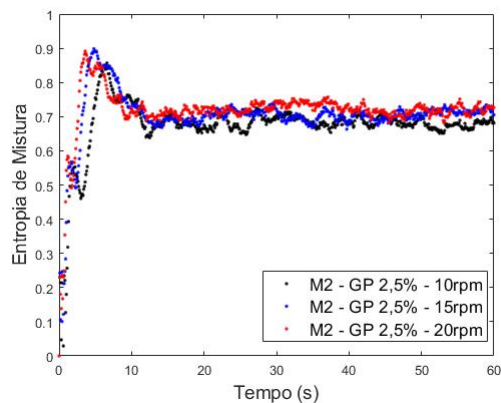


Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 7,5% e VR = 15rpm

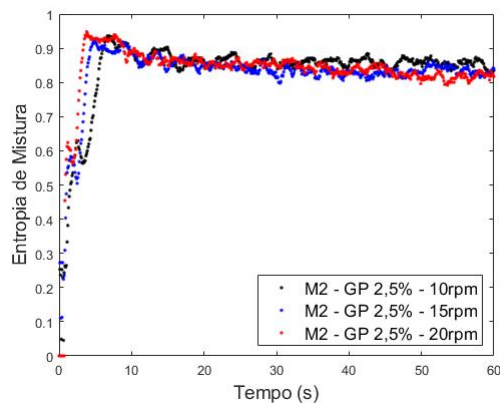


Índice de Entropia de Mistura para $AI = 60^\circ$,
GP = 7,5% e VR = 20rpm

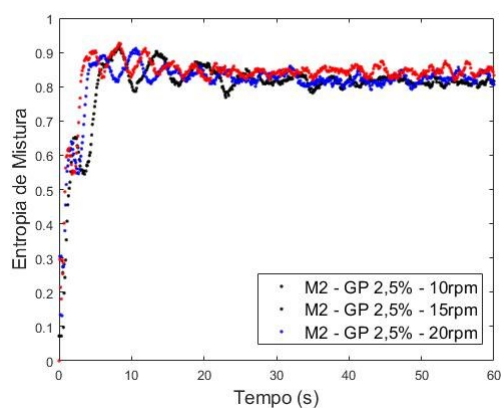
APÊNDICE D



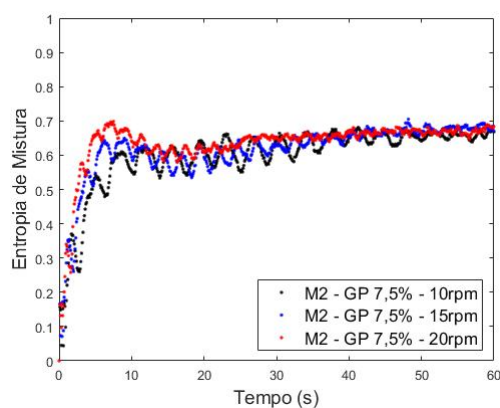
Índices de Entropia de Mistura de todo leite para $AI = 40^\circ$, $GP = 2,5\%$



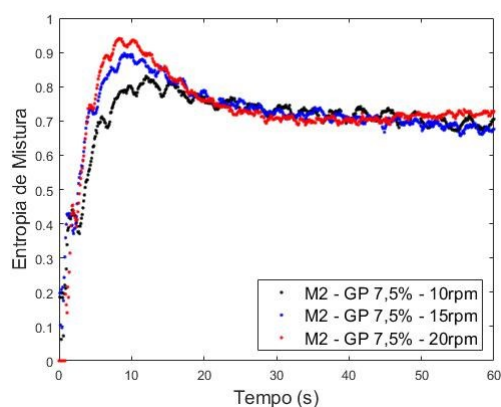
Índices de Entropia de Mistura de todo leite para $AI = 50^\circ$, $GP = 2,5\%$



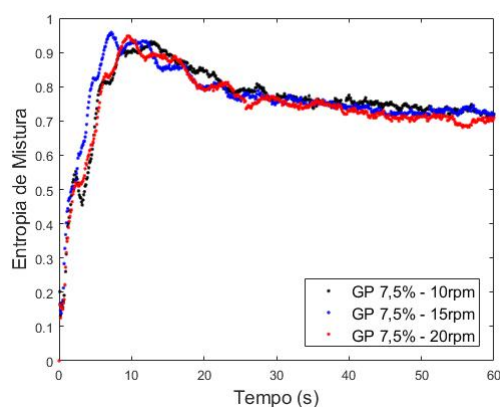
Índices de Entropia de Mistura de todo leite para $AI = 60^\circ$, $GP = 2,5\%$



Índices de Entropia de Mistura de todo leite para $AI = 40^\circ$, $GP = 7,5\%$

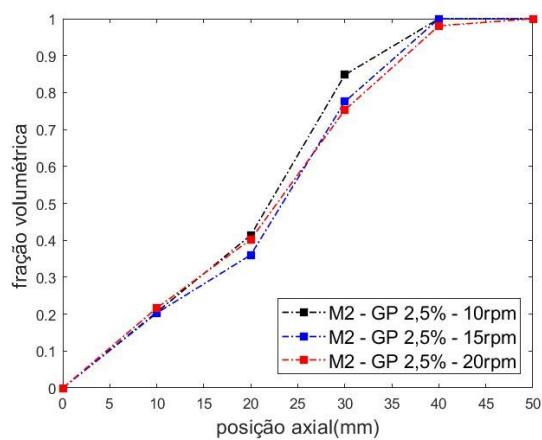


Índices de Entropia de Mistura de todo leite para $AI = 50^\circ$, $GP = 7,5\%$

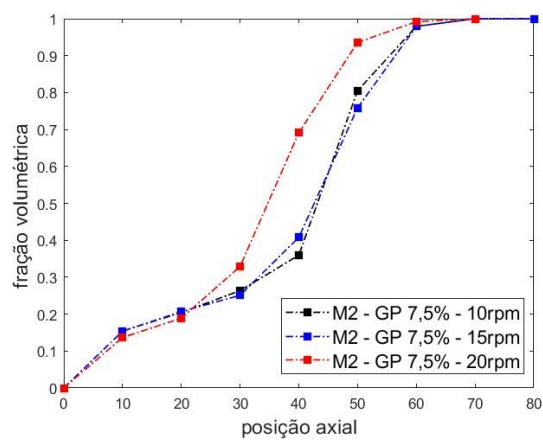


Índices de Entropia de Mistura de todo leite para $AI = 60^\circ$, $GP = 7,5\%$

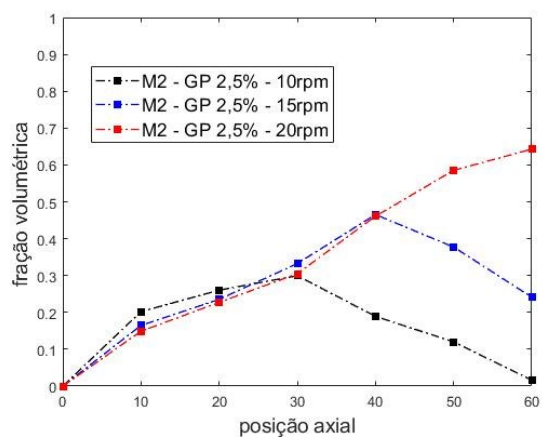
APÊNDICE E



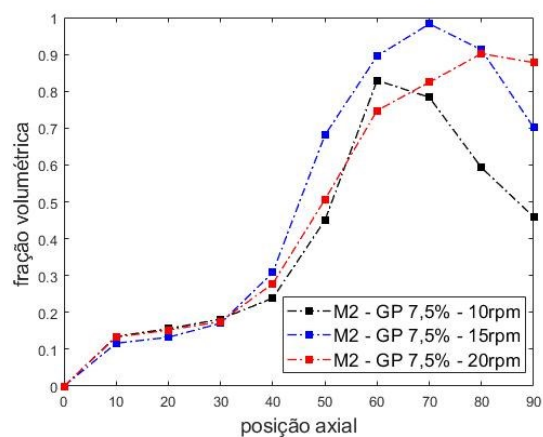
Perfis de fração volumétrica axial para
 $AI = 40^\circ$, $GP = 2,5\%$



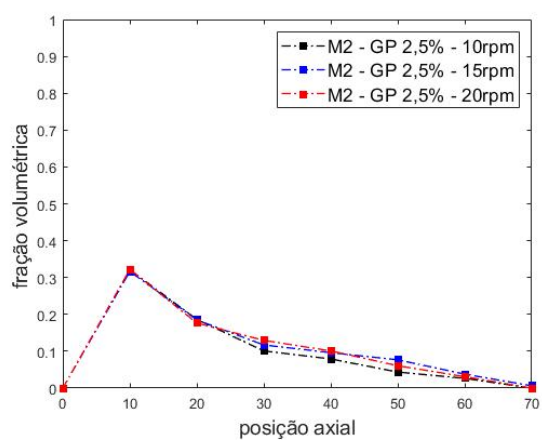
Perfis de fração volumétrica axial para
 $AI = 40^\circ$, $GP = 7,5\%$



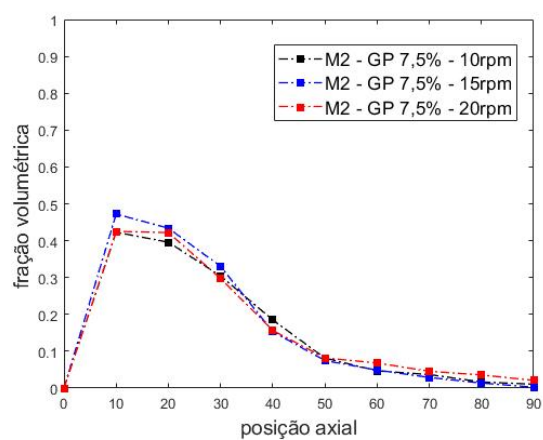
Perfis de fração volumétrica axial para
 $AI = 50^\circ$, $GP = 2,5\%$



Perfis de fração volumétrica axial para
 $AI = 50^\circ$, $GP = 7,5\%$



Perfis de fração volumétrica axial para
 $AI = 60^\circ$, $GP = 2,5\%$



Perfis de fração volumétrica axial para
 $AI = 60^\circ$, $GP = 7,5\%$

APÊNDICE F

Planejamento 3^k para avaliar a influência das condições operacionais na segregação por tamanho de material.

AI (°)	GP (%)	VR (rpm)	$t_{S\infty}$ (s)	S_{∞} (-)
40	2,5	10	17	0,68
40	2,5	15	17	0,70
40	2,5	20	12	0,72
40	5,0	10	22	0,60
40	5,0	15	18	0,65
40	5,0	20	17	0,66
40	7,5	10	19	0,62
40	7,5	15	19	0,73
40	7,5	20	17	0,68
50	2,5	10	18	0,84
50	2,5	15	12	0,86
50	2,5	20	10	0,88
50	5,0	10	23	0,76
50	5,0	15	19	0,78
50	5,0	20	18	0,76
50	7,5	10	40	0,73
50	7,5	15	36	0,71
50	7,5	20	34	0,71
60	2,5	10	34	0,82
60	2,5	15	24	0,86
60	2,5	20	14	0,88
60	5,0	10	29	0,77
60	5,0	15	25	0,77
60	5,0	20	19	0,80
60	7,5	10	36	0,74
60	7,5	15	36	0,73
60	7,5	20	34	0,71

Planejamento 3^k para avaliar a influência das condições operacionais na segregação por densidade de material.

AI (°)	GP (%)	VR (rpm)	$t_{S\infty}$ (s)	S_{∞} (-)
40	2,5	10	11	0,84
40	2,5	15	8	0,81
40	2,5	20	8	0,82
40	5,0	10	28	0,76
40	5,0	15	21	0,75
40	5,0	20	20	0,70
40	7,5	10	25	0,68
40	7,5	15	23	0,67
40	7,5	20	23	0,66
45	2,5	10	20	0,85
45	2,5	15	19	0,85
45	2,5	20	11	0,85
45	5,0	10	21	0,79
45	5,0	15	14	0,77
45	5,0	20	13	0,69
45	7,5	10	21	0,70
45	7,5	15	19	0,67
45	7,5	20	19	0,68
50	2,5	10	9	0,88
50	2,5	15	7	0,89
50	2,5	20	7	0,88
50	5,0	10	16	0,80
50	5,0	15	14	0,81
50	5,0	20	15	0,80
50	7,5	10	16	0,74
50	7,5	15	15	0,75
50	7,5	20	15	0,75

Planejamento composto central para análise do efeito combinado de diferenças de tamanho e densidade na segregação

d_1 (m)	d_2 (m)	ρ_1 (kg/m ³)	ρ_2 (kg/m ³)	$t_{S\infty}$ (s)	S_{∞} (-)
0,00100	0,00100	2000	2000	8	0,98
0,00100	0,00100	2000	4000	26	0,69
0,00100	0,00100	4000	2000	26	0,69
0,00100	0,00100	4000	4000	8	0,98
0,00100	0,00200	2000	2000	17	0,62
0,00100	0,00200	2000	4000	23	0,68
0,00100	0,00200	4000	2000	37	0,58
0,00100	0,00200	4000	4000	17	0,61
0,00200	0,00100	2000	2000	17	0,62
0,00200	0,00100	2000	4000	37	0,58
0,00200	0,00100	4000	2000	23	0,68
0,00200	0,00100	4000	4000	17	0,61
0,00200	0,00200	2000	2000	8	0,99
0,00200	0,00200	2000	4000	31	0,70
0,00200	0,00200	4000	2000	31	0,70
0,00200	0,00200	4000	4000	8	0,99
0,00075	0,00150	3000	3000	23	0,62
0,00225	0,00150	3000	3000	30	0,66
0,00150	0,00075	3000	3000	23	0,62
0,00150	0,00225	3000	3000	30	0,66
0,00150	0,00150	1500	3000	29	0,71
0,00150	0,00150	4500	3000	39	0,74
0,00150	0,00150	3000	1500	29	0,69
0,00150	0,00150	3000	4500	39	0,74
0,00150	0,00150	3000	3000	8	0,99
0,00150	0,00150	3000	3000	8	0,99

Planejamento composto central utilizado na análise de sensibilidade dos parâmetros numéricos DEM para o escoamento coesivo no disco rotatório

$\mu_{Spp} (-)$	$\mu_{Rpp} (-)$	DEC ($\cdot 10^5 \text{ J/m}^3$)	Ângulo de partida ($^\circ$)
0,250	0,020	3,000	81,8
0,250	0,020	7,000	101,1
0,250	0,060	3,000	86,1
0,250	0,060	7,000	97,0
0,750	0,020	3,000	81,3
0,750	0,020	7,000	106,7
0,750	0,060	3,000	89,3
0,750	0,060	7,000	121,2
0,080	0,040	5,000	94,1
0,920	0,040	5,000	109,8
0,500	0,006	5,000	93,6
0,500	0,074	5,000	111,9
0,500	0,040	1,640	78,9
0,500	0,040	8,360	109,5
0,500	0,040	5,000	101,9
0,500	0,040	5,000	101,9

APÊNDICE G

```
clear all
load('DIN50_30rpm_wet_periodic.mat','x','y','z');

x(x == 0) = NaN;
y(y == 0) = NaN;
z(z == 0) = NaN;

out_id = [];
% Identifying the last sample before leave
number_of_ids = length(x(:,1));
for id = [1:number_of_ids]
    try
        particle_outside_dish = isnan(x(id,:));
        particle_inside_dish_samples = find(~particle_outside_dish);

        % Checking if particle leaved before end of simulation
        last_sample = length(x(id,:));
        if (max(particle_inside_dish_samples) < last_sample)
            out_id = [out_id id];
        end
    end
end

% Leaving particles positions
x_out = x(out_id,:);
y_out = y(out_id,:);
z_out = z(out_id,:);

% Residence time
trace_interval = 2:12;
T = [];
number_of_leaving_particles = length(out_id);
for i = [1:number_of_leaving_particles]
    particle_outside_dish = isnan(x_out(i,:));
    particle_is_new = particle_outside_dish(1);
    particle_is_trace = (sum(particle_outside_dish(trace_interval)) &&
particle_is_new);

    if(particle_is_trace)
        particle_inside_dish = ~particle_outside_dish;
        T = [T sum(particle_inside_dish)];
    end
end

mean_residence_time = mean(T)
std_dev_residence_time = std(T)

% Number of particles leaving per sample
number_of_samples = length(x_out(1,:));
number_of_leaving_particles_per_sample = zeros(1,number_of_samples);
for i = [1:number_of_leaving_particles]
    leaving_sample = max(find(~isnan(x_out(i,:))));
```

```

        number_of_leaving_particles_per_sample(leaving_sample) =
number_of_leaving_particles_per_sample(leaving_sample) + 1;
        particle_leaving_sample(i) = leaving_sample;
end

% Obtaining clusters
sample_checked = [];
clusters = {};
cluster_sample = [];
checked_particle_id = [];

for i = [1:number_of_leaving_particles]
    disp(['particle id: ', num2str(i), ' of
',num2str(number_of_leaving_particles)])

    if(find(sample_checked == particle_leaving_sample(i)))
        continue;
    end
    sample_checked = [sample_checked particle_leaving_sample(i)];

    position_of_particles_leaving_in_the_same_sample =
[x_out(find(particle_leaving_sample ==
particle_leaving_sample(i)),particle_leaving_sample(i)) ...

y_out(find(particle_leaving_sample ==
particle_leaving_sample(i)),particle_leaving_sample(i)) ...

z_out(find(particle_leaving_sample ==
particle_leaving_sample(i)),particle_leaving_sample(i))];

    id_of_particles_leaving_in_the_same_sample =
out_id(find(particle_leaving_sample == particle_leaving_sample(i)));

    for j = [1:length(id_of_particles_leaving_in_the_same_sample)]

        if(find(checked_particle_id ==
id_of_particles_leaving_in_the_same_sample(j)))
            continue;
        end
        checked_particle_id = [checked_particle_id
id_of_particles_leaving_in_the_same_sample(j)];

        cluster =
rangesearch(position_of_particles_leaving_in_the_same_sample,
position_of_particles_leaving_in_the_same_sample(j,:), 0.0022);
        cluster{1} = unique(cluster{1});

        if(length(cluster{1}) > 1)
            k = 1;
            while(k <= length(cluster{1}))
                cluster_particle_index = cluster{1}(k);
                k = k + 1;
            end
        end
    end
end

```

```

                if(find(checked_particle_id ==
id_of_particles_leaving_in_the_same_sample(cluster_particle_index)))
                    continue;
                end
                checked_particle_id = [checked_particle_id
id_of_particles_leaving_in_the_same_sample(cluster_particle_index)];

                expand_cluster =
rangesearch(position_of_particles_leaving_in_the_same_sample,
position_of_particles_leaving_in_the_same_sample(cluster_particle_index,:),
0.0022);
                cluster{1} = unique([cluster{1} expand_cluster{1}]);
                k = 1;
            end

            cluster_sample = [cluster_sample sample_checked(end)];
            clusters{end+1} =
id_of_particles_leaving_in_the_same_sample(cluster{1});
            %clusters{end}
            %input('OK ...')
        end
    end
end

% Mean particles per cluster
particles_per_cluster = [];
for k = [1:length(clusters)]
    particles_per_cluster(k) = length(clusters{k});
end
mean_particles_per_cluster = mean(particles_per_cluster);
std_dev_particles_per_cluster = std(particles_per_cluster);
number_of_clustered_particles = sum(particles_per_cluster);
cluster_vs_free_particle_ratio =
number_of_clustered_particles/length(out_id);

%bar(particles_per_cluster)

%Plot cluster particles
last_sample = 0;
for k = [1:length(clusters)]

    if (cluster_sample(k) ~= last_sample)
        hold off
        input('OK')
    end
    last_sample = cluster_sample(k)

    for i = clusters{k}
        %plot3(x(i,:),y(i,:),z(i,:))
        plot(x(i,:),y(i,:))
        xlim([-0.2 0.2])
        ylim([-0.2 0.2])
        hold on

        lastX = find(~isnan(x(i,:)),1,'last');

```

```
        lastY = find(~isnan(y(i,:)),1,'last');
        lastZ = find(~isnan(z(i,:)),1,'last');
        plot3(x(i,lastX),y(i,lastY),z(i,lastZ),'k.','linewidth',2)
        %plot(x(i,lastX),y(i,lastY),'k.','linewidth',2)
    end

    %input('OK')
end
```

APÊNDICE H

Disco rotatório operando com solução de maltodextrina como líquido intersticial:

