



Universidade Federal
do Rio de Janeiro

Escola Politécnica

ANÁLISE NUMÉRICA DO MODELO MECANICISTA DA MOAGEM

Renan Cardoso Calmon

Projeto de Graduação apresentado ao curso de Engenharia de Materiais da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro

Orientadores: Rodrigo Magalhães de Carvalho
Victor Alfonso Rodriguez

Rio de Janeiro
SETEMBRO de 2018

ANÁLISE NUMÉRICA DO MODELO MECANICISTA DA MOAGEM

Renan Cardoso Calmon

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO CURSO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS DA ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE ENGENHEIRO DE MATERIAIS.

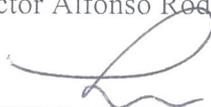
Examinado por:



Prof. Rodrigo Magalhães de Carvalho, D. Sc.



Victor Alfonso Rodriguez, M. Sc.



Prof. Luís Marcelo Marques Tavares, Ph.D.



Emerson Reikdal da Cunha, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

SETEMBRO DE 2018

Calmon, Renan Cardoso

Análise Numérica do Modelo Mecanicista da Moagem /
Renan Cardoso Calmon. – Rio de Janeiro: UFRJ / Escola
Politécnica, 2018.

XI, 50 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Rodrigo Magalhães de Carvalho, Victor
Alfonso Rodriguez

Projeto de Graduação – UFRJ / Escola Politécnica / Curso
de Engenharia de Materiais, 2018.

Referências Bibliográficas: p. 48 – 50.

1. Moagem. 2. Modelo Mecanicista. 3. Balanço
Populacional. I. Magalhães de Carvalho, Rodrigo. II. Alfonso
Rodriguez, Victor. III. Universidade Federal do Rio de Janeiro,
Escola Politécnica, Curso de Engenharia de Materiais. IV.
Título.

*Dedico este trabalho aos meu avôs
Alberto e Gelbe, pois sem os quais
não teria chegado até aqui.*

Agradecimentos

Agradeço à minha família: Simone, Roberto, Rinaldo, Alberto, Lia, Gelbe, Miriam, Alberto Jr, Adriana Assunção, Amanda, Fernando, Licinia, Augusto, Mônica, Betinho, Eduardo, Ryan, Matheus, Miguel, Jade, Maria Clara, Gabriel, Rafael e Daphne por terem me apoiado, me ensinado o que é certo e o que é errado, me guiado e me amado por toda minha vida.

Aos meus amigos do colégio: Caio Lessa, Carlos Eduardo, Júlio César, Márcio Faccin, Lucas Caique, Brian Rocha e Fellippe Goes por todas nossas conversas e por todos os bons momentos que tivemos.

Ao pessoal do Laboratório de Engenharia de Superfícies: Felipe Alencastro, Jennifer Paola, José Roberto e, em especial, à professora Renata Simão por toda a orientação e pelo tempo que passamos juntos.

Aos meus amigos da METALMAT: Caio Natarelli, Daniel Castro, Lucas Ribeiro, Luís Alberto, Rafael Garcia, Paulo César Brasileiro, Tayná Germano, Bruno Dias, Vinícius Gonçalves, Danilo Naiff, Darley Nogueira, Bruno Penna, Nathan Riany, Leandro Pereira, Fernanda de Mesquita, Gabriel Cerqueira, Felipe de Luca, Adriano Merlo, Antonio Ponciano, Felipe Conde, Rodrigo Vitorino, Erick Guimarães, Túlio Campos, Caroline Pessanha, Ana Carolina Brandão, Luiz Gustavo Lima e Vitória Mattos, Vitor Alves Pessoa e Isabela Teles, Gabriel Cardoso e Maísa Siqueira, Carlos Henrique Marques e Isabela Horta, Vitor Andrade e Ana Carolina Santos por me acompanharem ao longo do curso, pelas inúmeras horas de estudo juntos, pelas festas que fomos e pelo que aprendi com todos ao longo das matérias e dos anos.

À Fernanda Folly Ferreira, que esteve comigo desde o início da faculdade e com o tempo acabou se tornando minha melhor amiga. Graças a você toda esta jornada foi mais suave e mais alegre. Agradeço por me apoiar até nos piores momentos e por me fazer feliz todos os dias. Agradeço por você, com esse seu jeito meigo, ter me tornado uma pessoa melhor.

Aos meus orientadores Rodrigo Magalhães de Carvalho e Victor Rodriguez pela oportunidade de apresentar este projeto, pela paciência e por me guiarem ao longo desta parte final da minha graduação. Agradeço, também, a todos do LTM: Pedro, Rangler, Thiago, Hayla, Flávio e Luanna pelo apoio e ajuda para conclusão deste projeto.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro de Materiais.

ANÁLISE NUMÉRICA DO MODELO MECANICISTA DA MOAGEM

Renan Cardoso Calmon

SETEMBRO / 2018

Orientadores: Rodrigo Magalhães de Carvalho

Victor Alfonso Rodriguez

Curso: Engenharia de Materiais

A modelagem de processos é de enorme importância para o entendimento de vários fenômenos e é utilizada nas mais diversas indústrias, em especial a indústria mineral. Os modelos mecanicistas buscam descrever o fenômeno de quebra utilizando uma abordagem energética. Desta forma eles foram capazes de separar os efeitos do meio de cominuição das características intrínsecas de quebra do material. Dentre estes, destaca-se o modelo UFRJ, no qual utiliza-se o conceito de distribuição de energias de fratura e a mecânica do dano contínuo para modelar a resistência das partículas.

No presente trabalho foi desenvolvida uma rotina computacional em linguagem MATLAB capaz de simular o modelo UFRJ aplicado à moagem em batelada. Os resultados obtidos foram comparados com resultados da literatura a fim de validar a rotina. Posteriormente, analisou-se o efeito de diversas variáveis sobre o resultado final e, por fim, propõem-se um indicador para a escolha do passo de tempo mais adequado para integração das equações do modelo UFRJ em termos de tempo de simulação e erro numérico.

Palavras-chave: Moagem, Modelo Mecanicista, Balanço populacional.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for degree of Engineer.

NUMERICAL ANALYSIS OF THE MECHANISTIC BALL MILL MODEL

Renan Cardoso Calmon

SEPTEMBER / 2018

Advisors: Rodrigo Magalhães de Carvalho

Victor Alfonso Rodriguez

Course: Materials Engineering

Process modeling is of enormous importance for the understanding of several phenomena and is used in the most diverse industries, especially the mineral industry. The mechanistic models seek to describe the phenomenon of breakage using an energetic approach. In this way they were able to separate the effects of the comminution environment from the intrinsic breakage characteristics of the material. Among these, we highlight the UFRJ model, which uses the concept of fracture energy distribution and the continuous damage mechanics to model the resistance of the particles.

In the present work a computational routine was developed in MATLAB language capable of simulating the UFRJ model applied to batch grinding. The results were compared with the ones from the literature in order to validate the routine. Subsequently, the effect of several variables on the final result was analyzed and, finally, an indicator is proposed to choose the most appropriate time step for integrating the equations of the UFRJ model in terms of simulation time and numeric error .

Keywords: Grinding, Mechanistic Model, Populational Balance Model.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xi
1. Introdução	1
2. Objetivo	3
3. Revisão Bibliográfica	4
3.1. Definições e Conceitos Básicos sobre moagem	4
3.2. Modelo de Bond	6
3.3. Modelo do Balanço Populacional	6
3.4. Modelos Mecanicistas	13
3.5. Modelo Mecanicista UFRJ	15
3.5.1. Modelo de Captura	16
3.5.2. Modelo de Colisões Efetivas	18
3.5.3. Mecânica do Dano	18
3.5.4. Mecanismos de Quebra	22
3.5.5. Desenvolvimento do Modelo	24
3.6. Métodos Numéricos	28
3.6.1. Método de Euler	29
3.6.2. Método do ponto médio	29
3.6.3. Métodos de quarta ordem	30
4. Metodologia	31
4.1. Escolha do passo de tempo	32
4.2. Estudos de caso	33
5. Resultados e discussões	36
6. Conclusão	47
Referências Bibliográficas	48

Lista de Figuras

Figura 1. Resumo dos eventos de quebra dentro de um moinho de bolas, adaptado de TAVARES e CARVALHO (2009).	4
Figura 2. Resumo do modelo do balanço populacional microscópico.	8
Figura 3. Proporção de partículas remanescentes ao longo do tempo na moagem descontínua de calcário (TAVARES e CARVALHO, 2009).	12
Figura 4. Taxas de quebra que não são de primeira ordem (CARVALHO, 2009).	12
Figura 5. Esquema resumindo o modelo mecanicista UFRJ (CARVALHO, 2009).	16
Figura 6. Representação de r_e e r_g (BARRIOS <i>et al.</i> , 2011).	17
Figura 7. Enfraquecimento de uma partícula quando submetida a impactos repetidos (CARVALHO, 2009).	19
Figura 8. Plano de trabalho desenvolvido.	31
Figura 9. Distribuições granulométricas utilizadas nos estudos de caso.	33
Figura 10. Espectro de energias de impacto de cada moinho.	34
Figura 11. Comparação dos passantes acumulados obtidos pelo código desenvolvido por CARVALHO e TAVARES (2013) e pelo código desenvolvido no presente trabalho. As condições simuladas foram: moinho de 30 cm, alimentação A e Δt de 1 segundo.	37
Figura 12. Comparação dos retidos obtidos pelo código desenvolvido por CARVALHO e TAVARES (2013) e pelo código desenvolvido no presente trabalho. As condições simuladas foram: moinho de 30 cm, alimentação A e Δt de 1 segundo.	38
Figura 13. Comparação dos resultados obtidos pelos códigos.	38
Figura 14. Erro experimental da moagem (adaptado de FRANCIOLI, 2015).	39
Figura 15. Efeito do Δt sobre o passante após 8 minutos de moagem para dois materiais para o moinho de 30 cm e alimentação A.	40
Figura 16. Efeito do Δt sobre o passante após 8 minutos de moagem para dois materiais para o moinho de 60 cm e alimentação C.	41

Figura 17. Tempos de simulação em função do Δt para o moinho de 30 cm e alimentação A.	42
Figura 18. Tempos de simulação em função do Δt para o moinho de 60 cm e alimentação C.	42
Figura 19. Variação da mediana da energia de fratura com o tempo para duas classes de tamanho.	43
Figura 20. Valores de I (equação 61) em função do tempo de moagem.	44
Figura 21. Razão entre a massa capturada e a massa dentro do moinho.	45
Figura 22. Comparação entre o passo de tempo ótimo (0,2 s) e o menor passo de tempo utilizado (0,0001 s) para o granulito utilizando-se a alimentação C. . . .	46

Lista de Tabelas

Tabela 1. Matriz de colisões em um moinho de bolas.	27
Tabela 2. Classes de colisão e tipo de colisão associado.	27
Tabela 3. Resumo das condições simuladas. Cada letra indica uma granulometria diferente da Figura 9.	34
Tabela 4. Parâmetros dos materiais utilizados (adaptado de CARVALHO e TAVARES, 2013).	35
Tabela 5. Comparação entre os tempos de execução das funções mais utilizadas em ambos os códigos. As condições simuladas foram: moinho de 30 cm de diâmetro, alimentação A, material granulito e Δt de 1 segundo.	37
Tabela 6. Valores de Δt ótimos calculados a partir do índice proposto.	46

1. Introdução

Cominuir uma partícula significa diminuir seu tamanho. Operações de cominuição estão presentes em indústrias de grande importância como a indústria mineral, química e cerâmica. Os principais equipamentos utilizados nas operações de cominuição são os britadores e moinhos, sendo o último estágio comumente representado pela moagem. Existem diferentes tipos de moinhos, os de bolas são um dos mais importantes devido à sua alta capacidade, sua simplicidade mecânica e por serem de fácil controle, porém estes apresentam uma baixa eficiência do ponto de vista energético.

Diversos autores vêm propondo modelos ao longo do tempo a fim de prever o comportamento destes equipamentos. Da primeira geração de modelos destaca-se o modelo proposto por BOND (1957). Este é um modelo empírico baseado nas relações entre energia aplicada e redução de tamanho que, apesar das previsões apresentarem boa concordância com os dados experimentais, não incorpora uma série de efeitos importantes de segunda ordem (i.e, eficiência de separação do classificador, tamanho de bolas, perfil dos revestimentos, entre outros). Buscando superar as limitações dos modelos anteriores, alguns autores, como HERBST e FUERSTENAU (1980) por exemplo, utilizaram o modelo do balanço populacional (MBP). Este modelo busca descrever o moinho de bolas como sendo um processo similar a um reator de mistura perfeita, onde as partículas alimentadas são os reagentes e o material cominuído é o produto. Para isto utilizam-se equações que levam em consideração as propriedades médias da população de partículas, como a taxa de quebra e a distribuição de quebra do material. O MBP tem sido aplicado com grande sucesso no projeto e controle de processos de cominuição. Apesar disso, ele tem se mostrado incapaz de desacoplar os efeitos relacionados ao equipamento, das propriedades intrínsecas de quebra do material processado, além de mostrar dificuldades em descrever as taxas de quebra de ordem não linear e explicitar as contribuições de características construtivas e operacionais de equipamentos na cominuição.

Diante destas limitações do MBP, diversos pesquisadores buscaram o seu aprimoramento, a fim de separar as características intrínsecas do material do ambiente de moagem. Dentre os mais diversos trabalhos, destaca-se o de CHO (1987) que foi o primeiro a utilizar uma abordagem energética para descrever as funções quebra e seleção. Posteriormente, MISHRA (1991) e MISHRA e RAJAMANI (1992) utilizaram o método dos elementos discretos (DEM) para calcular o espectro de energias dentro de um moinho.

Além disso, foram propostos modelos mecanicistas com resultados notáveis (CAPECE *et al.*, 2015; HERBST, 2004; KING e BOURGEOIS, 1993; POWELL *et al.*, 2008). Dentro deste seleto grupo encontra-se o modelo mecanicista UFRJ (CARVALHO e TAVARES, 2013; TAVARES e CARVALHO, 2009), objeto de aplicação do presente trabalho. Neste modelo, os autores utilizam um modelo mecanicista baseado no MBP para descrever os eventos de quebra acoplado com simulações via DEM para obtenção do espectro de energias no interior do moinho. Além disso, incorpora a fratura de partículas por impactos repetidos usando mecânica do dano contínuo (TAVARES e KING, 2002). Com esta abordagem, tem-se apresentado excelentes resultados, tais como descrever as taxas de moagem não lineares, a sua sensibilidade às mudanças no perfil dos lifters, a predição dos efeitos da sinergia entre as propriedades do material e as variáveis na moagem sem os métodos tradicionais de escalonamento. No entanto, o alto recurso computacional demandado na sua aplicação limita seu uso e gera uma desvantagem comparando com os modelos tradicionais já mencionados.

O presente trabalho busca utilizar os conceitos de otimização e vetorização de código a fim de desenvolver uma rotina computacional em linguagem MATLAB que seja capaz de obter os mesmos resultados que foram obtidos por CARVALHO e TAVARES (2013) em menos tempo. Além disso, buscou-se formular um índice que fosse capaz de estimar o maior valor de passo de tempo que pode ser utilizado para resolver as equações do modelo UFRJ sem que o erro numérico seja significativo.

2. Objetivo

O presente trabalho tem por objetivos desenvolver uma rotina computacional em linguagem MATLAB para simulações da moagem usando o modelo mecanicista de forma otimizada, com menor custo computacional em relação àquela utilizada em CARVALHO e TAVARES (2013), bem como formular um indicador para a escolha do passo de tempo mais adequado em termos de tempo de simulação e erro numérico.

3. Revisão Bibliográfica

3.1. Definições e Conceitos Básicos sobre moagem

De acordo com AUSTIN e CONCHA (1994) um moinho é como um reator que está transformando partículas grandes em partículas menores. Neste caso, o reagente é a alimentação do moinho, que possui não apenas um único tamanho de partícula, mas na verdade apresenta uma distribuição de tamanhos.

Dentro de um moinho as partículas estão sujeitas a receber esforços compressivos e de cisalhamento, que podem gerar três possíveis mecanismos de quebra: atrição, clivagem e fratura desintegrativa.

Na abordagem mecanicista, segundo KING (2001), quando a energia aplicada a uma partícula faz com que esta perca mais de 10% de sua massa original, diz-se que a partícula sofreu uma quebra volumétrica. Caso a partícula perca menos de 10% de sua massa, diz-se que esta sofreu uma perda de massa por abrasão. Caso a partícula sofra um impacto sem quebra, diz-se que esta sofreu um dano e que sua energia de fratura foi reduzida. A Figura 1 apresenta, de acordo com a visão mecanicista de TAVARES e CARVALHO (2009), o que pode acontecer com uma partícula dentro de um moinho de bolas.

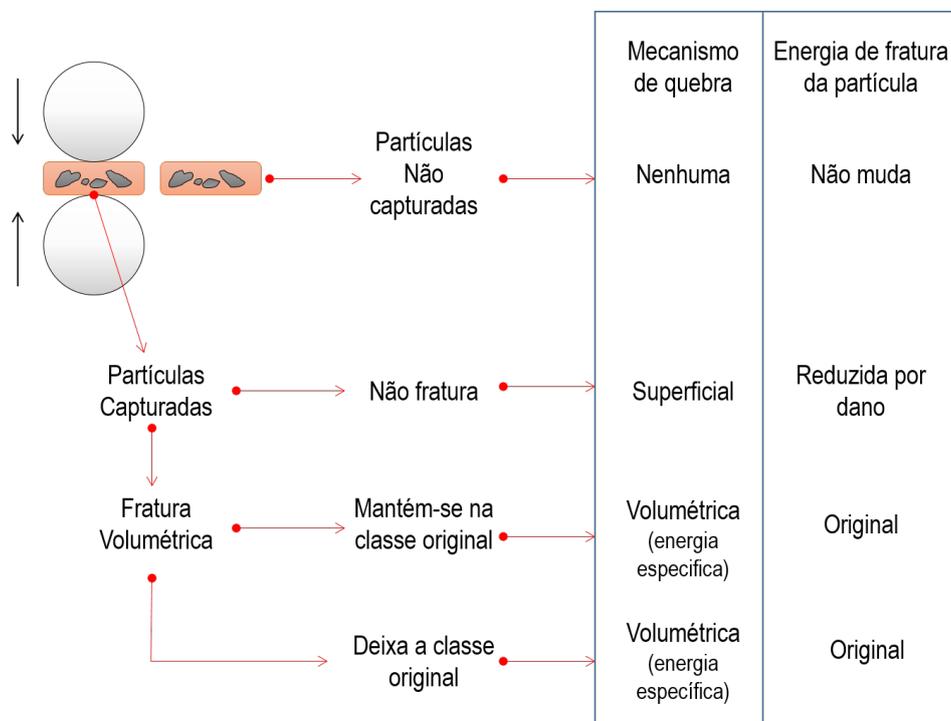


Figura 1: Resumo dos eventos de quebra dentro de um moinho de bolas, adaptado de TAVARES e CARVALHO (2009).

Devido à sua importância na indústria mineral, diversos modelos foram desenvolvidos ao longo do tempo para modelar os mais diversos tipos de moinhos. Esses modelos podem ser classificados de acordo com uma das três gerações de modelos.

Dos modelos da 1ª geração destaca-se o modelo de Bond (BOND, 1957). Este é um modelo empírico, que buscava calcular a energia necessária para cominuir um determinado material.

A 2ª geração de modelos tem como destaque o modelo do balanço populacional (MBP). Este modelo busca descrever o moinho como sendo um processo cinético como uma reação química de primeira ordem, considerando o moinho como um reator de mistura perfeita e as partículas alimentadas são os reagentes e o material cominuído é o produto.

Os modelos da 3ª geração têm como objetivo superar as limitações do MBP convencional, dentre as quais destacam-se a incapacidade do MBP de prever o desempenho de equipamentos novos e a hipótese de que as taxas de quebra são de primeira ordem. Dentre os diversos trabalhos com este objetivo pode-se citar o trabalho de CHO (1987) que buscou descrever as funções quebra e seleção utilizadas no MBP convencional em função da energia aplicada sobre as partículas. Esta abordagem era limitada, uma vez que o espectro de energias de impacto dentro de um moinho não podia ser medido com facilidade. No entanto, MISHRA (1991) conseguiu realizar o cálculo dos espectros de energia de impacto para um moinho de bolas com o uso do método dos elementos discretos (DEM).

O DEM é um método numérico utilizado para calcular o movimento e as colisões das partículas. Sua principal vantagem é fornecer, através do espectro de energias de impacto, o histórico e magnitude das colisões que ocorrem no ambiente de moagem durante um intervalo de tempo. O DEM busca resolver as equações de movimento de Newton junto com um modelo de contato para encontrar as forças entre as partículas. No caso do moinho de bolas, o DEM pode ser utilizado para na previsão do comportamento da carga de acordo com os parâmetros operacionais e de projeto como grau de enchimento, velocidade de rotação, tipos de barra elevadora etc. WEERASEKARA *et al.* (2013) descrevem diversas contribuições do DEM para a ciência da cominuição.

Outro objetivo de alguns modelos da 3ª geração era desacoplar os efeitos do meio de moagem das propriedades mecânicas das partículas. KING e BOURGEOIS (1993) foram os primeiros a desenvolver um modelo conceitual a fim de desacoplar estes efeitos. TAVARES e CARVALHO (2009) levaram em consideração todos estes fatores e, além disso, o fato de que a energia de fratura das partículas dentro do moinho varia com o tempo, como demonstrado por TAVARES e KING (1998) para desenvolver o modelo mecanicista

UFRJ (TAVARES e CARVALHO, 2010). Este modelo vem sendo reconhecido pela sua riqueza de detalhes e devido à simplicidade da sua formulação.

3.2. Modelo de Bond

BOND (1957) desenvolveu um modelo que hoje é conhecido como a 3ª lei da cominuição. Este modelo correlaciona um ensaio de moagem realizado sob condições controladas, com o desempenho de um circuito de moagem com moinhos de bolas e de barras em escala industrial de sua época.

A 3ª lei da cominuição possui a seguinte forma:

$$E = 10Wi \left[\frac{1}{\sqrt{P_{80}}} - \frac{1}{\sqrt{F_{80}}} \right] \quad (1)$$

onde P_{80} e F_{80} são os tamanhos de 80% passante do produto e da alimentação, respectivamente. O parâmetro Wi chamado de Índice de Bond ou *Work Index* é determinado experimentalmente e representa a energia necessária (kWh/t) para reduzir desde um tamanho muito grosso até um P_{80} igual a 100 μm . De posse do valor do Wi para um dado material, o consumo energético de um moinho industrial pode ser estimado pelo método de Bond.

O modelo de Bond apresenta discrepâncias em torno de 20% do consumo energético real (HERBST e FUERSTENAU, 1973) o que justifica sua utilização ainda hoje, mesmo já existindo ferramentais de modelagem mais modernos. Entretanto, este é um modelo empírico, assim, não pode ser usado como uma guia para um ajuste preciso ou otimização de um dado sistema, com isto, foram desenvolvidos modelos que melhor descrevem os mecanismos envolvidos nos processos de cominuição.

3.3. Modelo do Balanço Populacional

O MBP é um modelo do tipo caixa preta que vem sendo utilizado, com sucesso, na indústria mineral há 50 anos (CARVALHO, 2007).

A ideia básica por trás deste modelo é de que conforme as partículas se movem pelo sistema, suas coordenadas internas e externas mudam.

A coordenada externa é determinada pela posição (x;y;z) da partícula e as coordenadas internas podem ser: tamanho de partícula; composição química; composição mineralógica; formato da partícula etc. Conforme a partícula se move pelo sistema, sua posição muda e, conseqüentemente, suas coordenadas externas mudam e

conforme as partículas vão sendo alteradas pelo processamento, suas coordenadas internas mudam.

A derivação do MBP microscópico, inicialmente desenvolvida por HULBURT e KATZ (1964), será apresentada a seguir. Sejam $(x;y;z)$ as coordenadas externas de uma partícula e $\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}, \dots, \zeta^{(J)}$ suas coordenadas internas. Além disso, sejam:

$\psi(x) \rightarrow$ Função de distribuição de partículas em número

$p(x) \rightarrow$ Função de distribuição de partículas em massa

$\psi'(x) \rightarrow$ Número de partículas com propriedade x

$n(x, y, z, t) \rightarrow$ Número total de partículas por unidade de volume no tempo t

Tem-se que: $\psi(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}, \dots, \zeta^{(J)}, x, y, z, t) d\zeta^{(1)} d\zeta^{(2)} \dots d\zeta^{(J)}$ é a fração em número de partículas na posição $(x;y;z)$ no tempo t . Assim, o número total de partículas em uma região arbitrária $R(t)$ é dado por:

$$\int_x \int_y \int_z \int_{\zeta^{(1)}} \dots \int_{\zeta^{(J)}} n(x, y, z, t) \psi(\zeta^{(1)}, \dots, \zeta^{(J)}, x, y, z, t) dx dy dz d\zeta^{(1)} \dots d\zeta^{(J)} = \int_{R(t)} \psi' dV dR \quad (2)$$

Agora faz-se um balanço na região $R(t)$, que equivale a uma região física $(x;y;z)$ e uma região J do espaço das variáveis internas. Assume-se que outras partículas não podem entrar ou deixar a região $R(t)$. Assim, a única forma através da qual o número de partículas pode mudar é se ocorrer nascimento ou morte de partículas. Logo, para a região $R(t)$, tem-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{R(t)} \psi' dV dR = \int_{R(t)} B dV dR - \int_{R(t)} D dV dR = \int_{R(t)} (B - D) dV dR \quad (3)$$

onde:

$$B(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}, \dots, \zeta^{(J)}, x, y, z, t) d\zeta^{(1)} d\zeta^{(2)} \dots d\zeta^{(J)} \quad (4)$$

é o número de partículas, por unidade de volume, criado com propriedades contidas nos intervalos $\zeta^{(1)}$ até $\zeta^{(1)} + d\zeta^{(1)}$, $\zeta^{(2)}$ até $\zeta^{(2)} + d\zeta^{(2)}$, ..., $\zeta^{(J)}$ até $\zeta^{(J)} + d\zeta^{(J)}$ e

$$D(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}, \dots, \zeta^{(J)}, x, y, z, t) d\zeta^{(1)} d\zeta^{(2)} \dots d\zeta^{(J)} \quad (5)$$

é o número de partículas, por unidade de volume, destruído com propriedades contidas

nos intervalos $\zeta^{(1)}$ até $\zeta^{(1)} + d\zeta^{(1)}$, $\zeta^{(2)}$ até $\zeta^{(2)} + d\zeta^{(2)}$, ..., $\zeta^{(J)}$ até $\zeta^{(J)} + d\zeta^{(J)}$.

O que a equação 3 diz é, basicamente, que o acúmulo de partículas na região $R(t)$ é igual ao número de partículas que nascem menos o número de partículas que morrem, nesta região. Para resolver esta equação, utiliza-se a regra de Leibnitz e, com isso, obtém-se:

$$\int_{R(t)} \left[\begin{aligned} & \frac{\partial \psi'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dx}{dt} \psi' \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{dy}{dt} \psi' \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{dz}{dt} \psi' \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial \zeta^{(1)}} \left(\frac{d\zeta^{(1)}}{dt} \psi' \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial \zeta^{(J)}} \left(\frac{d\zeta^{(J)}}{dt} \psi' \right) \end{aligned} \right] dx dy dz d\zeta^{(1)} d\zeta^{(2)} \dots d\zeta^{(J)} = \int_{R(t)} (B - D) dV dR \quad (6)$$

Definindo:

$$\frac{dx}{dt} = v_x; \quad \frac{dy}{dt} = v_y; \quad \frac{dz}{dt} = v_z; \quad \frac{d\zeta^{(j)}}{dt} = v_j;$$

tem-se que:

$$\int_{R(t)} \left[\begin{aligned} & \frac{\partial \psi'}{\partial t} + \frac{\partial(v_x \psi')}{\partial x} + \frac{\partial(v_y \psi')}{\partial y} + \frac{\partial(v_z \psi')}{\partial z} \\ & + \sum_{j=1}^J \frac{\partial(v_j \psi')}{\partial \zeta^{(j)}} - (B - D) \end{aligned} \right] dV dR = 0 \quad (7)$$

Com isso, o balanço populacional microscópico é dado por:

$$\frac{\partial \psi'}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V} \psi) + \sum_{j=1}^J \frac{\partial(v_j \psi')}{\partial \zeta^{(j)}} + D - B = 0 \quad (8)$$



Figura 2: Resumo do modelo do balanço populacional microscópico.

A Figura 2 resume, em palavras, a equação 8. Dificilmente a distribuição em número é conhecida para qualquer posição (x;y;z) do processo e, por isso, é conveniente

integrar a equação 8 para um volume geométrico V , o que resulta em:

$$\frac{1}{V(t)} \int_{V(t)} \left[\frac{\partial \psi'}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V} \psi) + \sum_{j=1}^J \frac{\partial(\nu_j \psi')}{\partial \zeta^{(j)}} + D - B \right] dV = 0 \quad (9)$$

A função densidade média em número é dada por:

$$\bar{\psi} = \frac{1}{V} \int \psi' dV$$

com isso, tem-se que:

$$\frac{1}{V} \int \frac{\partial \psi'}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int \psi' dV \right] = \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}$$

Analogamente:

$$\bar{D} = \frac{1}{V} \int D dV \quad \bar{B} = \frac{1}{V} \int B dV$$

Supondo que as velocidades nas propriedades ν_j não variam com as coordenadas espaciais (x;y;z), então, aplicando o teorema da divergência, chega-se em:

$$\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} (V \bar{\psi}) + \sum_{j=1}^J \frac{\partial(\nu_j \bar{\psi})}{\partial \zeta^{(j)}} + \bar{D} - \bar{B} = \frac{1}{V} (Q_i \psi'_i - Q_o \psi'_o) \quad (10)$$

onde Q_i e Q_o são os fluxos de entrada e saída do volume de controle. A equação 10 representa o balanço populacional macroscópico.

Para aplicar a equação 10 ao moinho de bolas, devem ser feitas as seguintes considerações:

- A variação no tamanho das partículas ocorre predominantemente de forma catastrófica, como resultado dos impactos dos corpos moedores contra as partículas, causando sua fratura (termo $\bar{D} - \bar{B}$);
- O efeito da variação contínua do tamanho de partícula pode ser desprezado (termo $\sum_{j=1}^J \frac{\partial(\nu_j \bar{\psi})}{\partial \zeta^{(j)}}$);
- ζ_1 refere-se ao tamanho das partículas.

Além disso, deve-se transformar a distribuição em número para distribuição em

massa, através da seguinte relação:

$$p_i(d_p) = \frac{d_{pi}^3 \psi_i(d_p)}{\sum_i d_{pi}^3 \psi_i(d_p)}$$

Com isso a equação 10 toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial[Mw(x, t)]}{\partial t} = W^{in}(t)w^{in}(t) - W^{out}(t)w^{out}(t) - s(x, t)Mw(x, t) + \int_x^{xm} b(x, x')s(x', t)Mw(x', t)dx' \quad (11)$$

onde M é a massa de sólidos no interior do moinho (denominada *hold-up*), $w^{in}(t)$ é o vetor contendo a distribuição granulométrica do material na alimentação; $w^{out}(t)$ o vetor contendo a distribuição granulométrica na descarga do equipamento; $W^{in}(t)$ e $W^{out}(t)$ são as taxas de alimentação e descarga, respectivamente.

A função s é a função seleção e representa a taxa específica de quebra para partículas de tamanho x . A função $b(x, x')$ é chamada de função quebra ou distribuição de quebra e representa a fração do produto da quebra primária proveniente de partículas do intervalo de tamanho x' que se distribuem no intervalo de tamanho x .

Como, na prática, o tamanho de partícula é medido com peneiras (em intervalos discretos), convém descrever o tamanho de partícula em classes de tamanhos. Sendo assim o balanço populacional discretizado para um processo em batelada se torna:

$$\frac{dw_i}{dt} = -s_i w_i + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} s_j w_j \quad (12)$$

Com isso, a população de fragmentos é discretizada em N classes de tamanho. A classe de tamanho 1 representa as partículas mais grossas, enquanto que a classe N representa as partículas mais finas.

Para o caso da primeira classe de tamanhos, a equação 12 toma a seguinte forma:

$$\frac{dw_1}{dt} = -s_1 w_1(t) \quad (13)$$

onde s_1 é a taxa de quebra da classe de tamanho 1. Resolvendo a equação 13, tem-se:

$$\log \left[\frac{w_1(t)}{w_1(0)} \right] = -\frac{s_1}{2.3} t \quad (14)$$

onde a razão $w_1(t)/w_1(0)$ representa a fração remanescente de partículas na classe 1 no

moinho após um tempo t de moagem. A Figura 3 apresenta a proporção remanescente de partículas no interior um moinho de bolas de laboratório o longo do tempo. Neste caso, pode-se observar que a hipótese de cinética de primeira ordem foi adequada e a taxa de quebra das partículas (s_1) é dada pelo coeficiente angular da reta da equação 14.

AUSTIN *et al.* (1984) propuseram uma solução analítica da equação 12. Esta solução apresenta a seguinte forma:

$$p_i(t) = \sum_{j=1}^i d_{ij} p_j(0) \quad (15)$$

onde:

$$d_{ij}(t) = \begin{cases} 0 & i < j \\ \exp(-s_i t) & i = j \\ \sum_{k=j}^{i-1} c_{ik} c_{jk} [\exp(-s_i t) - \exp(-s_k t)] & i > j \end{cases}$$

e

$$c_{ij}(t) = \begin{cases} -\sum_{k=1}^{j-1} c_{ik} c_{jk} & i < j \\ 1 & i = j \\ \frac{1}{s_i - s_j} \sum_{k=j}^{i-1} s_k b_{ik} c_{kj} & i > j \end{cases}$$

Entretanto, a hipótese de quebra de primeira ordem nem sempre é válida (principalmente quando se trata de partículas mais grossas), como mostrado por TAVARES e CARVALHO (2009). Há casos em que durante o processo de moagem, a taxa de quebra pode desacelerar ou acelerar dependendo das condições operacionais e do tipo de material processado. Este efeito é demonstrado na Figura 4, que mostra os efeitos de ordem maior que um nas taxas de quebra resultantes de um ensaio em escala de laboratório de moagem em batelada de um calcário para três mono-tamanhos diferentes.

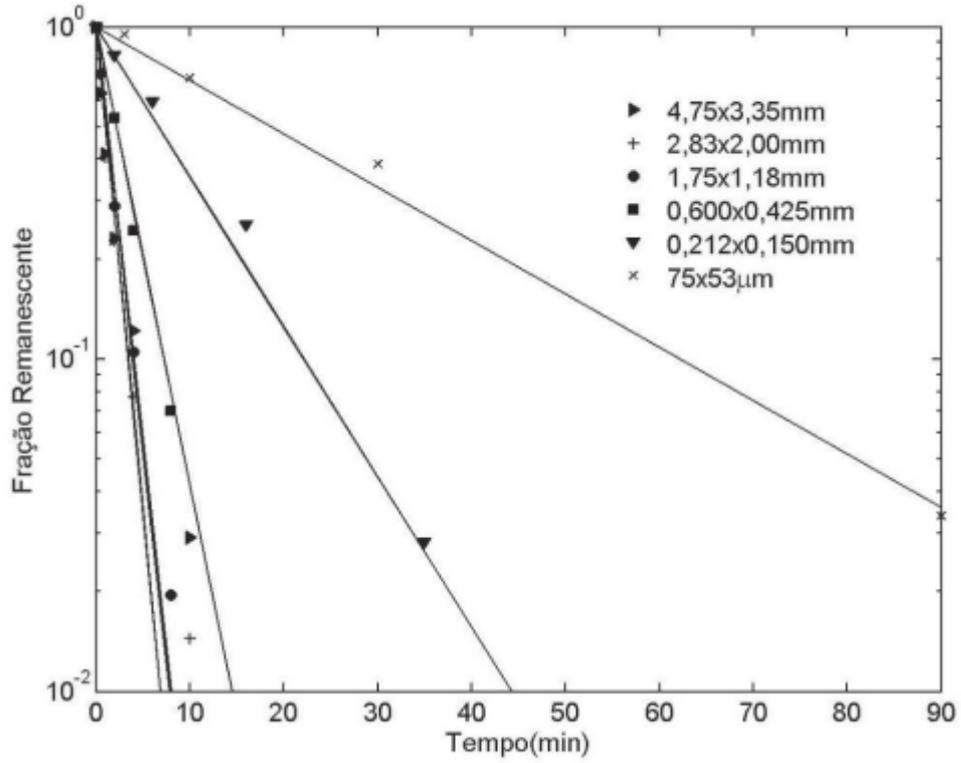


Figura 3: Proporção de partículas remanescentes ao longo do tempo na moagem descontínua de calcário (TAVARES e CARVALHO, 2009).

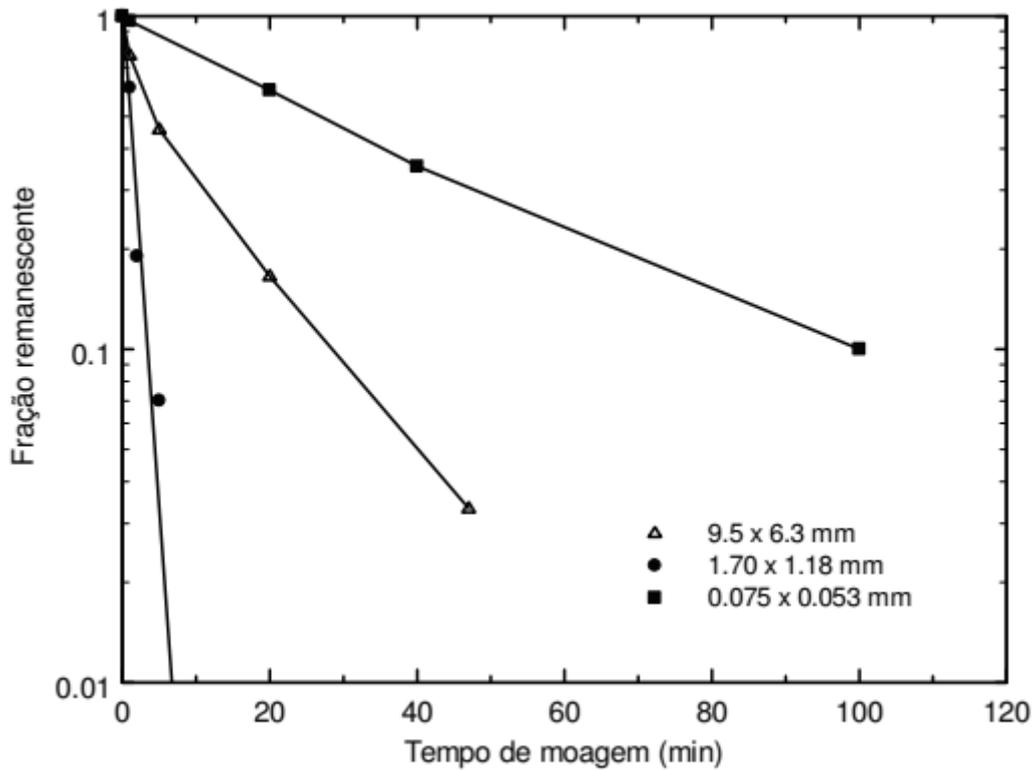


Figura 4: Taxas de quebra que não são de primeira ordem (CARVALHO, 2009).

Apesar do MBP tradicional ser amplamente utilizado, ele apresenta algumas limitações. Ele se baseia na consideração de que taxas de quebra são de primeira ordem (TAVARES e CARVALHO, 2009) e utiliza a função seleção para obter informações sobre o ambiente de moagem. O problema desta abordagem é que caso alguma variável operacional, como velocidade de rotação do moinho e grau de enchimento, seja modificada, é necessário realizar novamente todos os ensaios experimentais a fim de determinar a nova função seleção. Isto explica porque o MBP não consegue prever equipamentos ou condições operacionais novas. Por fim, ele considera que o material é homogêneo, não lidando bem com materiais com múltiplos componentes, apesar de algumas aplicações já terem sido propostas (BUENO *et al.*, 2013).

Dadas essas limitações no MBP, surgiu a necessidade do desenvolvimento de modelos mecanicistas que fossem capazes de descrever detalhadamente os micromecanismos de moagem.

3.4. Modelos Mecanicistas

Diversos pesquisadores buscaram aprimorar o MBP. Dentre eles pode-se citar o trabalho de CHO (1987) que realizou um dos primeiros estudos sobre a fragmentação de partículas em leitos, quando estas são impactadas por uma esfera de aço como ocorre no interior do moinho de bolas. No MBP clássico, as funções quebra e seleção fornecem uma descrição média de todos os eventos que ocorrem no interior dos moinhos. A partir desta hipótese, Cho propôs a caracterização destas funções como uma ponderação em função da magnitude e da frequência das energias de impacto no interior de um moinho de bolas.

Neste estudo, Cho presumiu que cada nível de energia de impacto possui uma função de distribuição de quebra equivalente. A função quebra efetiva do moinho de bolas seria a soma de todas as funções quebra obtidas para cada nível energético, o que resulta em:

$$B_M(p) = \sum_e f(e') B_d(e', p) \quad (16)$$

onde B_M é a função quebra para o moinho de bolas na forma acumulada, $f(e')$ é a fração do e' -ésimo nível energético no espectro de energias de impacto e $B_d(e', p)$ é a função quebra obtida via ensaios de impacto em leitos de partículas. A limitação desta abordagem deve-se ao fato de que o espectro de energias de impacto em um moinho não pode ser facilmente medido.

Buscando desacoplar os efeitos do meio de moagem das propriedades mecânicas

do material, KING e BOURGEOIS (1993) apresentaram um novo modelo conceitual para o moinho de bolas, no qual a função distribuição de quebra é representada por:

$$b_p(x', x) = M \int_0^{\infty} w(x, x', eE)P(E)dE \quad (17)$$

onde $P(E)$ é a função densidade de probabilidade das energias de impacto no moinho; $w(x, x', eE)$ é a massa de partículas menores que o tamanho x que são criadas a partir da quebra de partículas de tamanho x' quando submetidas a um impacto de energia E . O parâmetro e , que pode ser estimado a partir de um modelo de fratura de partículas individuais, indica a proporção da energia de impacto absorvida pelas partículas em um leito.

Durante a década de 90 ocorreu a difusão da aplicação do método dos elementos discretos (DEM) na moagem. O DEM modela o movimento das partículas e corpos moedores no interior do moinho. MISHRA e RAJAMANI (1992) foram os pioneiros em aplicar esta técnica ao moinho de bolas.

Com o passar dos anos, diversos modelos foram propostos. KING (2001) propôs um modelo capaz de considerar a distribuição de energias (específicas) de fratura. A função quebra proposta por ele foi:

$$B(x, x') = \int_0^{\infty} \int_0^1 B(x, x', eE)P(eE, x')p(e)p(E)dedE \quad (18)$$

onde $P(E, x')$ é a probabilidade de quebra de uma partícula de tamanho x' quando recebe uma quantidade de energia E , $B(x, x', E)$ é a função quebra que resulta de um único evento de impacto de energia E , $p(E)$ é a distribuição de densidades para as energias de impacto no moinho, e é a fração da energia naquele impacto que é capturada por uma única partícula e $p(e)$ descreve como e é distribuído sobre a população de partículas.

POWELL (2006) propôs o *Unified Comminution Model* (UCM), que tinha por objetivo desacoplar os efeitos do meio de moagem das propriedades do material. O UCM busca utilizar a mesma estrutura do MBP e, em uma aplicação simples, pode chegar a ter 20 classes de tamanho de partícula, dois tipos de minerais, 4 modos de quebra primária e 20 classes de energia por modo.

Por fim, HERBST (2004) propôs o um modelo conhecido como *High Fidelity Simulation* (HFS). Este modelo buscava reunir resultados obtidos por simulações via DEM e informações obtidas por técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) para descrever o transporte de material ao longo dos moinhos. Esta abordagem não possui

aplicação industrial visto que possui um custo computacional muito elevado (CARVALHO e TAVARES, 2013).

3.5. Modelo Mecanicista UFRJ

TAVARES e CARVALHO (2009) propuseram um modelo mecanicista que recentemente foi batizado como modelo UFRJ (CARVALHO, 2013). Este modelo, que é o principal objeto de estudo deste trabalho, utiliza informações sobre as propriedades de um material a fim de descrever os mecanismos de quebra presentes em um dado processo de cominuição. Com isto, este modelo pode ser utilizado na modelagem de diferentes equipamentos, uma vez que é capaz de desacoplar os efeitos do material do ambiente de moagem. A Figura 5 apresenta um resumo do modelo.

O modelo utilizado no presente trabalho é baseado nas hipóteses utilizada por (CARVALHO e TAVARES, 2013). Nos últimos anos, avanços surgiram buscando validar ou melhorar a descrição de mecanicismos atuantes na moagem de bolas, conforme visto em RODRIGUEZ (2016). As novas hipóteses e interpretações do modelo serão discutidas mais adiante. As hipóteses consideradas no presente trabalho foram:

- (i) O ambiente mecânico de colisão é determinado, exclusivamente, pelo movimento dos corpos moedores e a energia utilizada na quebra do minério é dada pela energia dissipada na colisão;
- (ii) A quebra das partículas é devida apenas à componente normal das colisões;
- (iii) Bolas e minério no interior do moinho são considerados perfeitamente misturados;
- (iv) Todas as colisões capturam alguma partícula de minério e supõe-se que, quando capturadas, as partículas encontram-se dispostas em mono camadas;
- (v) A resistência à fratura de partículas recém-criadas não depende da forma com que estas foram geradas.

O ambiente de moagem é caracterizado pelo espectro de energias de impacto, que informará como a energia dissipada no ambiente de moagem é aplicada às partículas que se deseja cominuir. Para obter este espectro é necessário que se faça simulações via DEM.

Para a simulação de moinhos de bolas, as simulações via DEM são realizadas sem a presença de partículas de minério. Esta é uma abordagem muito importante, visto que desta forma é possível salvar um recurso computacional enorme, uma vez que o principal objetivo é simular equipamentos em escala industrial.

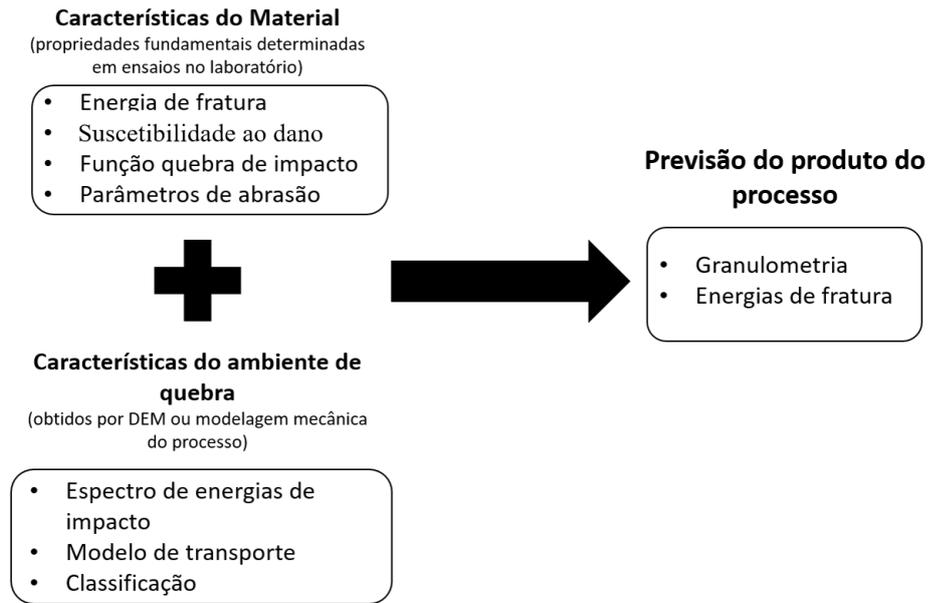


Figura 5: Esquema resumindo o modelo mecanicista UFRJ (CARVALHO, 2009).

3.5.1. Modelo de Captura

Obtido o espectro de energias, deve-se entender como é repartida essa energia na população de partículas. O modelo de captura utilizado será brevemente descrito a seguir. Uma versão mais detalhada do modelo pode ser encontrada em BARRIOS *et al.* (2011).

Sem a presença de minério nas simulações em DEM é necessário o desenvolvimento de um modelo que seja capaz de descrever a quantidade de partículas envolvidas em cada colisão em função da energia de impacto, do diâmetro dos corpos moedores e do material.

A massa de material, de uma classe de tamanho i , capturada em um leito monocamada pode ser estimada como sendo o número de partículas capturadas em uma colisão ($N_{cap,i}$) vezes a massa média das partículas desta classe ($\bar{m}_{p,i}$):

$$m_i = \bar{m}_{p,i} N_{cap,i} \quad (19)$$

A massa média das partículas da classe i pode ser estimada da seguinte forma:

$$\bar{m}_{p,i} = \rho \beta d_i^3 \quad (20)$$

onde ρ é a densidade do material e β é o fator de forma.

Os tipos de colisão levadas em consideração aqui são as colisões bola-bola e bola-revestimento. Supondo que as partículas possuem formato esférico e que estão arranjadas

de acordo com um empacotamento hexagonal denso, o número de partículas capturadas pode ser estimado de acordo com a seguinte equação:

$$N_{cap,i} = \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \left(\frac{2r_c}{d_i} \right) \quad r_c \geq d_i/2 \quad (21)$$

$$= 1 \quad r_c < d_i/2$$

onde r_c é o raio do leito de partículas, também chamado de raio de captura e d_i é o tamanho médio das partículas da classe i capturadas na colisão. O raio de captura pode ser escrito da seguinte forma:

$$r_c = r_e + r_g \quad (22)$$

onde r_e é o raio da zona elasticamente deformada devido à colisão e r_g é o raio de contato devido à geometria. A Figura 6 ilustra cada um destes raios.

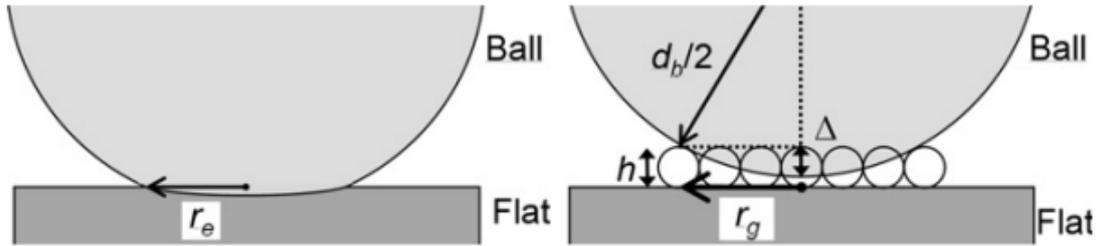


Figura 6: Representação de r_e e r_g (BARRIOS *et al.*, 2011).

Com isso, tem-se que:

$$r_e = \left(\frac{15E}{8K_e} \right)^{1/5} K_g^{2/5} \quad (23)$$

onde E é a energia da colisão, K_e e K_g são constantes que dependem do material e do tipo de colisão. Além disso, tem-se que:

$$r_g = \sqrt{(K_g)^2 - \left[K_g - h \left(\frac{\Delta}{h} \right) \right]^2} \quad (24)$$

onde Δ é a máxima deformação do leito durante o impacto e h é a altura inicial do leito, que pode ser considerada igual a d_i . A deformação máxima do leito pode ser calculada da seguinte forma:

$$\frac{\Delta}{h} = a_c \left[1 - \exp \left(-b_c \left(\frac{E}{E_{50b,i}} \right)^c \right) \right] \quad (25)$$

onde $a_c = 0.3621$, $b_c = 0.1517$ e $c = 0.40125$ são constantes e $E_{50b,i}$ é a mediana da energia de fratura das partículas da classe i que foram capturadas.

Por simplicidade, o modelo assume que cada partícula capturada recebe a mesma fração da energia de colisão. Com isso, a função que dá a repartição da energia entre as partículas capturadas é dada por:

$$p(e) = \delta \left(e - \frac{1}{N_{cap}} \right) \quad (26)$$

onde δ é a função delta de Dirac.

3.5.2. Modelo de Colisões Efetivas

Uma das hipóteses iniciais do modelo UFRJ para moinhos era de que todas as colisões capturavam partículas de minério. RODRIGUEZ *et al.* (2018) mostraram que esta hipótese não era válida e, com isso, propuseram e validaram um modelo de colisões efetivas (aquelas nas quais alguma partícula de minério é envolvida).

O modelo proposto estima a fração de colisões que não envolvem partículas de minério e, por isso, devem ser excluídas do espectro de energias. Sendo A_b a área superficial total das bolas, A_M a área superficial total das partículas de minério os autores propuseram que o número de colisões bola-bola e bola-revestimento que devem ser excluídas do espectro de energia é uma função da razão A_b/A_M dada por:

$$f \left(\frac{A_b}{A_M} \right) = \begin{cases} 0 & \frac{A_b}{A_M} < K_1 \\ 1 - \left[\frac{K_2 - \frac{A_b}{A_M}}{K_2 - K_1} \right]^{K_3} & K_1 < \frac{A_b}{A_M} < K_2 \\ 1 & \frac{A_b}{A_M} > K_2 \end{cases}$$

sendo $K_1 = 0.07$, $K_2 = 3$ e $K_3 = 5.5$ para as colisões bola-bola e $K_1 = 0.08$, $K_2 = 4$ e $K_3 = 1.6$ para as colisões bola-revestimento.

3.5.3. Mecânica do Dano

Além de um modelo de captura de partículas, o modelo UFRJ também faz uso de um modelo de enfraquecimento de materiais particulados por impactos repetidos desenvolvido por TAVARES (1997), a partir da teoria da mecânica do dano contínuo.

Este modelo diz que a resistência dos materiais vai se tornando cada vez menor à medida que as partículas são submetidas a repetidos ciclos de aplicação de energia, ou seja, a resistência de uma partícula vai diminuindo conforme ela vai sendo submetida à vários

impactos. Caso a energia recebida por uma partícula durante uma colisão seja menor que a energia necessária para sua quebra, esta energia é utilizada na propagação de trincas internas já existentes e, com isso, a partícula se torna menos resistente, como ilustrado na Figura 7.

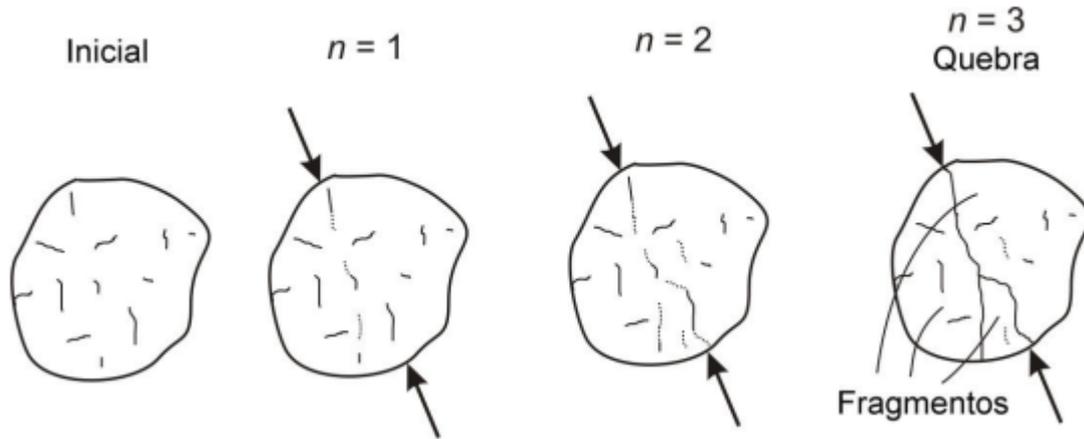


Figura 7: Enfraquecimento de uma partícula quando submetida a impactos repetidos (CARVALHO, 2009).

De acordo com TAVARES e KING (2002), essencialmente existem dois motivos pelos quais uma partícula pode não quebrar com o primeiro impacto:

- (i) A resistência da partícula depende da sua orientação. Desta forma, são necessários diversos impactos até que seja encontrada a direção favorável de um defeito pré-existente na partícula;
- (ii) Durante o ciclo de impactos, defeitos pré-existentes podem vir a crescer e, com isso, atingir tamanho ou concentração crítica.

Utilizando a teoria de contato de Hertz e a mecânica do dano, a força F que atua sobre uma partícula durante o impacto é dada por:

$$F = \frac{d^{1/2}}{3} \tilde{k} \vartheta^{3/2} \quad (27)$$

onde ϑ é a deformação e

$$\tilde{k} = k(1 - D) \quad (28)$$

\tilde{k} representa a rigidez da partícula que diminui conforme sofre deformações e k é a rigidez da partícula antes do impacto. D é chamado de “dano” e representa a redução percentual da rigidez.

TAVARES e KING (2002) sugerem que o dano está relacionado com a deformação através da relação:

$$D = \left(\frac{\vartheta}{\vartheta_c} \right)^\gamma \quad (29)$$

onde ϑ_c é a deformação na fratura e γ é a constante de acumulação de dano. Se γ for muito grande, o efeito do dano não será observado até que ϑ se aproxime de ϑ_c ; se γ for pequeno, D será significativa em deformações relativamente baixas.

Quando uma partícula sofre um impacto mas não fratura, o deslocamento da força durante a restituição não coincide com aquele durante a compressão. Quando há algum dano interno, parte do sólido é relaxada e a energia de deformação local é convertida em calor em adição àquela utilizada para quebrar as ligações entre as duas superfícies recém criadas. Essa perda de energia de deformação não pode ser recuperada na restituição. Com isso, a redução na rigidez de uma partícula, devido ao impacto, é dada por:

$$k_n = k_{n-1}(1 - D_n^*) \quad (30)$$

onde k_{n-1} e k_n são a rigidez da partícula antes e depois do n -ésimo impacto e D_n^* é a quantidade de dano que foi induzido na partícula após o n -ésimo impacto.

Com isso, a energia (específica) de deformação absorvida por uma partícula submetida a um impacto pode ser calculada via integração direta do perfil de deslocamento da força, dividindo o resultado da integração pela massa m_p da partícula

$$E_{k,n} = \frac{1}{m_p} \int_0^{\vartheta_n} F d\vartheta \quad (31)$$

Considerando que toda a energia que foi aplicada a uma partícula de forma esférica é convertida em energia de deformação, sem perda para a superfície plana sob a partícula, então:

$$E_{k,n} = \frac{1}{m_p} \int_0^{\vartheta_n} \frac{k\sqrt{d}}{3} \left[1 - \left(\frac{\vartheta}{\vartheta_c} \right) \right] \vartheta^{3/2} d\vartheta \quad (32)$$

Definindo

$$D_n^* = \left(\frac{\vartheta_n}{\vartheta_c} \right)^\gamma \quad (33)$$

onde ϑ_n é a máxima deformação alcançada durante o n -ésimo impacto e resolvendo a equação 32 utilizando as equações 30 e 33 tem-se que:

$$E_{k,n} = \frac{2}{15} \left(\frac{2\gamma + 5 - 5D_n^*}{2\gamma + 5} \right) \frac{d^{1/2} k_{n-1} \vartheta_n^{5/2}}{m_p} \quad (34)$$

onde $E_{k,n}$ é a energia cinética específica do impactor no n -ésimo impacto.

A energia (por unidade de massa da partícula) necessária para desintegrar completamente a partícula é chamada de energia específica de fratura pode ser obtida substituindo $D_n^* = 1$ e $\vartheta_n = \vartheta_c$ na equação 34, o que resulta em:

$$E_{n-1} = \frac{4\gamma}{15(2\gamma + 5)} \frac{d^{1/2} k_{n-1} \vartheta_c^{5/2}}{m_p} \quad (35)$$

Supondo que a equação 35 permanece válida após vários impactos, esta pode ser substituída na equação 30, levando à seguinte relação:

$$E_n = E_{n-1}(1 - D_n^*) \quad (36)$$

Rearrmando as equações 34 e 35 e substituindo-as na equação 33, obtém-se

$$D_n^* = \left[\frac{2\gamma}{(2\gamma - 5D_n^* + 5)} \frac{E_{k,n}}{E_{n-1}} \right] \frac{2\gamma}{5} \quad (37)$$

que é a quantidade de dano sofrida no n -ésimo ciclo. Deste modo, o único parâmetro do modelo a ser ajustado é o γ .

Por fim, para que o modelo possa ser aplicado é necessário que seja conhecida a distribuição inicial de energia de fratura do material a ser cominuído. Uma distribuição que é capaz de descrever adequadamente estas energias é a distribuição log-normal com truncamento superior, dada por:

$$F(E) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln E^* - \ln E_{50}}{\sqrt{2\sigma^2}} \right) \right] \quad (38)$$

com

$$E^* = \frac{E_{max} E}{E_{max} - E} \quad (39)$$

onde E_{50} é a mediana da energia específica de fratura, σ é o desvio padrão da distribuição e E_{max} é a energia de truncamento superior.

Com o intuito de reduzir o tempo computacional necessário para o cálculo do dano, CARVALHO (2013) propôs uma equação analítica para este. Esta equação possui a seguinte forma:

$$D(r) = \frac{\phi_d}{2} \operatorname{erfc} \left[-\frac{\log(r) - \mu_1}{\sigma_1 \sqrt{2}} \right] + \frac{1 - \phi_d}{2} \operatorname{erfc} \left[-\frac{\log(r) - \mu_2}{\sigma_2 \sqrt{2}} \right] \quad (40)$$

onde erfc é a função erro complementar; ϕ_d , μ_1 , μ_2 , σ_1 e σ_2 são parâmetros a serem ajustados e r é a razão entre a energia de impacto e a energia de fratura da partícula antes da colisão.

3.5.4. Mecanismos de Quebra

Uma vez descrito os modelos de captura e de enfraquecimento por dano será descrito a seguir os mecanismos de quebra.

Dentro de um moinho de bolas a maioria dos eventos de quebra ocorre devido ao impacto dos corpos moedores, normalmente esferas de aço, sobre as partículas enquanto que a quebra por abrasão é bem pequena.

A quebra abrasão engloba a quebra por atrição e por lascamento. Estas formas de quebra ocorrem na superfície da partícula sem afetar seu núcleo.

Inicialmente, o modelo UFRJ utilizava a hipótese de que a taxa de quebra era independente da energia aplicada, porém RODRIGUEZ (2016) propôs um novo modelo para a taxa de quebra por abrasão em função da energia. Neste modelo os mecanismos de atrição e lascamento foram separados. A quebra por lascamento foi modelada seguindo a metodologia proposta por CUNHA (2014), onde esta seria função da componente normal da energia dissipada na colisão:

O modelo proposto por RODRIGUEZ (2016) é dado por:

$$\kappa_l = 0,0011 \left(\frac{E_{imp}}{m_p E_{50}} \right)^{1.5} \quad (41)$$

sendo κ_l a proporção de material fino gerado por lascamento, E_{imp} a componente normal da energia de impacto (em J), m_p a massa da partícula, E_{50} a energia específica de fratura média (em J/kg).

O mecanismo de atrição foi modelado pela equação:

$$\kappa_a = A_T \left(\frac{E_T}{m_p E_{50}} \right)^\beta \quad (42)$$

sendo κ_a a proporção de material fino gerado por atrição, E_T a componente tangencial da energia dissipada (em J), A_T e β são parâmetros a serem ajustados.

A taxa de quebra por abrasão κ é dada pela soma da taxa de quebra por lascamento com a taxa de quebra por atrição.

A função quebra por abrasão foi modelada por KING (2001) da seguinte forma:

$$A_i = \left(\frac{d_i}{d_A} \right)^\lambda \quad (43)$$

onde d_A é o tamanho do maior fragmento gerado por abrasão e λ é a inclinação da reta da curva de distribuição de tamanhos dos produtos do ensaio de abrasão (em coordenadas logarítmicas).

A quebra por impacto pode ser descrita através da função distribuição de quebra ou apenas função quebra. Esta é uma matriz que descreve como os fragmentos gerados pela quebra de uma partícula se distribuem pelos tamanhos menores.

Uma partícula é considerada quebrada quando perde pelo menos 10% de sua massa original, mesmo que não saia da sua classe de tamanho. Testes de impacto individual mostram que a função quebra depende da quantidade de energia disponível para quebrar uma partícula. Quanto maior a energia aplicada, mais fino será o produto da quebra até se atingir um ponto máximo.

O parâmetro mais importante na descrição da função quebra é o t_{10} . Este parâmetro diz respeito à porcentagem de material gerado na quebra que é menor que um décimo do tamanho de partículas original. Esta ideia pode ser generalizada para definir o parâmetro t_n , que é a porcentagem de material passante na abertura de peneira equivalente ao tamanho original da partícula dividido pelo índice n . De posse do t_{10} pode-se obter todos os outros t_n e, com isso, pode-se obter a função quebra.

A relação entre t_{10} e a energia aplicada sobre as partículas é dada por:

$$t_{10} = A \left[1 - \exp \left(-b' \frac{E}{E_{50b}} \right) \right] \quad (44)$$

onde A e b' são características do material e E_{50b} é a mediana da distribuição de energias de fratura das partículas que quebram num dado ciclo de impactos.

Para obter os valores dos outros t_n s a partir do valor de t_{10} , utiliza-se um modelo baseado na função beta incompleta, dado por:

$$t_n(t_{10}) = \frac{100}{\int_0^1 x^{\alpha_n-1} (1-x)^{\beta_n-1} dx} \int_0^{t_{10}/100} x^{\alpha_n-1} (1-x)^{\beta_n-1} dx \quad (45)$$

onde α_n e β_n são parâmetros a serem ajustados.

3.5.5. Desenvolvimento do Modelo

Quando aplicado à moagem o modelo UFRJ assume a forma da equação 46. Neste caso, utiliza-se como base o MBP discretizado em classes de tamanho.

$$\frac{dw_{il}(t)}{dt} = \frac{1}{M} \sum_j \omega_j (-D_{jil}^b(t) - D_{jil}^s(t) + A_{jil}^b(t) + A_{jil}^s(t)) \quad (46)$$

onde:

- i é a classe de tamanho; partícula (por impacto);
- w_{il} é a fração mássica de material no interior do processo; • s representa a quebra superficial (por abrasão);
- l é a classe mineralógica; • ω_j é a frequência de eventos de aplicação de energia da classe j (colisões);
- D_{jil} é a taxa de desaparecimento; • M é a massa total de material no interior do moinho.
- A_{jil} é a taxa de aparecimento;
- b representa a quebra volumétrica da

As taxas de desaparecimento e aparecimento, por impacto, são dadas por:

$$D_{jil}^b(t) = w_{il}(t) \sum_k m_{kjil} p E_{kj} [1 - b_{iikl}] F_{kjil} \quad (47)$$

$$A_{jil}^b(t) = \sum_{z=1}^{i-1} w_{zl}(t) \sum_k m_{kjil} p E_{jk} b_{izkl} F_{kjzl} \quad (48)$$

onde pE_{kj} é a distribuição das energias de impacto E_k da classe de colisão j ; $m_{kjil}(E)$ é a massa de partículas na classe de tamanho i que são capturadas por uma colisão do tipo j que possui energia E_k ; b_{ijkl} representa a função quebra em sua forma distribuída, ou seja, é a fração mássica que uma partícula da classe mineralógica l de uma classe de tamanho j deixa na classe de tamanho i quando quebra devido a um impacto de energia E_k ; F_{kjil} é a distribuição de energias de fratura das partículas na classe de tamanho i e classe mineralógica l ou seja, é a proporção das partículas na classe il que quebram quando submetidas a uma energia de impacto E_k .

Com relação à quebra superficial pelo mecanismo de abrasão, tem-se:

$$D_{jil}^s(t) = w_{il}(t)\kappa_{il} \sum_k m_{kji}(E)pE_{kj}[1 - F_{kji}] \quad (49)$$

$$A_{jil}^s(t) = \sum_{z=1}^{i-1} w_{zl}(t)\kappa_{zl} \sum_k m_{kji}(E)pE_{kj}a_{il}[1 - F_{kji}] \quad (50)$$

onde a_{il} é a função quebra por abrasão e κ_{ij} é a taxa de quebra por abrasão.

Quando uma partícula quebra, esta gera partículas filhas que possuirão uma nova distribuição de energias de fratura, que está relacionada à distribuição de energias de fratura do material original do mesmo tamanho. Com isso, é necessário calcular a nova distribuição de energias de fratura do material em cada classe il , após cada ciclo de impactos.

Sendo $F(E, t = 0)$, $F(E, t)$ e $F^*(E, t)$ as distribuições de energia de fratura do material novo (alimentação), do material no interior do moinho no instante de tempo t e do material que sofreu dano, respectivamente, tem-se que a nova distribuição de energias de fratura $F(E, t + \Delta t)$ é dada por:

$$F_{il}(E, t + \Delta t) = \frac{G_{il}(t)F_{il}^*(E, t + \Delta t) + H_{il}(t)F(E, t = 0) + I_{il}(t)F_{il}(t)}{G_{il}(t) + I_{il}(t) + H_{il}(t)} \quad (51)$$

A distribuição de energias de fratura do material original pode ser descrita pela distribuição log-normal truncada superiormente, dada por:

$$F_{il} = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln E^* - \ln E_{50,il}}{\sqrt{2\sigma_{il}^2}} \right) \right] \quad (52)$$

onde:

$$E^* = \frac{E_{max,il}E}{E_{max,il} - E} \quad (53)$$

σ_{il} é a variância da distribuição, $E_{max,il}$ é o truncamento superior da distribuição e $E_{50,il}$ é a mediana das energias de fratura, dada por:

$$E_{50,il} = E_{\infty,l} \left[1 + \left(\frac{d_{0,l}}{d_i} \right)^{\phi_l} \right] \bar{m}_{p,il} \quad (54)$$

onde $E_{\infty,l}$, ϕ_l e $d_{0,l}$ são parâmetros do modelo, que devem ser ajustados de acordo com os dados experimentais; d_i é o tamanho representativo da classe i e $\bar{m}_{p,il}$ é a massa média

das partículas da classe il , dada por:

$$\bar{m}_{p,il} = \rho_l \beta d_i^3 \quad (55)$$

sendo ρ_l a densidade do material de classe mineralógica l e β o fator de forma volumétrico.

De forma análoga, a mediana das energias de fratura é dada por:

$$\sigma_{il} = \sigma_{\infty,l} \left[1 + \left(\frac{\sigma_{0,l}}{d_i} \right)^{\sigma_l^*} \right] \quad (56)$$

onde $\sigma_{\infty,l}$, $\sigma_{0,l}$ e σ_l^* também são parâmetros a serem ajustados.

A distribuição de energias de fratura $F_{il}^*(E, t)$ das partículas que sofreram impacto mas não quebraram é dada por:

$$F_{il}^*(E, t + \Delta t) = \frac{\int_0^{E_{il}^*} p_k(\epsilon) \int_0^1 \left[\frac{F_{il} \left(\frac{E}{1-D}, t \right) - F_{il}(e\epsilon, t)}{1 - F_{il}(e\epsilon, t)} \right] p_k(e) de d\epsilon}{\int_0^{E_{il}^*} p_k(\epsilon) d\epsilon} \quad (57)$$

D é o parâmetro de acúmulo de dano, dado por:

$$D = \left[\frac{2\gamma_l(1-D)e\epsilon}{(2\gamma_l - 5D + 5)} \right]^{\frac{2\gamma_l}{5}} \quad (58)$$

E_{il}^* é a máxima energia de fratura das partículas da classe il , que é igual a $E_{amx,il}$ em $t = 0$ e $F_{il}(E_{il}^*) = 1$ conforme a moagem progride. A equação 58 é uma versão modificada da equação 37.

Os demais termos da equação 51 são dados por:

$$G_{jil} = \frac{\omega_j \Delta t}{M} w_{il} (1 - \kappa_{il}) \sum_k m_{kjil} p E_{kj} (1 - F_{kjil}) \quad (59)$$

é a fração de material na classe il que sofreu dano mas permaneceu na classe de tamanho original e

$$H_{jil} = \frac{\omega_j \Delta t}{M} \left(\sum_{z=1}^i w_{zl} \sum_k m_{kzjl} p E_{kj} b_{izkl} F_{kzjl} + A_{jil}^s \right) \quad (60)$$

é a fração de material que apareceu devido a quebra (por impacto e por abrasão) das

partículas maiores ou iguais ao tamanho da própria classe il .

$$I_{jil} = \frac{w_{il}}{M} \left(M - \omega_j \Delta t \sum_k m_{kjil} p E_{kj} \right) \quad (61)$$

é a fração de material da classe il que não foi capturada em cada intervalo de tempo Δt . O termo w_{il} atua como um ponderador do número de colisões ω_j , ou seja, ele determina qual fração das colisões que atua sobre cada classe de tamanho.

Por fim, são definidas as classes de impactos j . Para isto, utiliza-se uma matriz de colisões que relaciona cada tipo de choque possível entre os diferentes elementos de impacto do processo. Considera-se que uma colisão de um contato A-B é igual a uma colisão de um contato B-A. Um exemplo é apresentado na tabela 1, onde foi considerado dois tipos de tamanhos de bolas (d_{b1} e d_{b2}) e o revestimento do moinho.

Tabela 1: Matriz de colisões em um moinho de bolas.

	d_{b1}	d_{b2}	Revestimento
d_{b1}	Sim	-	-
d_{b2}	Sim	Sim	-
Revestimento	Sim	Sim	-

A tabela 2 apresenta os valores de k , dependendo do tipo de colisão.

Tabela 2: Classes de colisão e tipo de colisão associado.

Classe de colisão (j)	Tipo de colisão
1	$d_{b1} - d_{b1}$
2	$d_{b1} - d_{b2}$
3	d_{b1} - Revestimento
4	$d_{b2} - d_{b2}$
5	d_{b2} - Revestimento

3.6. Métodos Numéricos

A equação principal do modelo UFRJ (equação 46) é uma equação diferencial ordinária (EDO) de primeira ordem sem solução analítica, portanto, devem ser utilizados métodos numéricos para a sua resolução.

Uma EDO de primeira ordem possui a seguinte forma:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad (62)$$

$$y(a) = \alpha \quad (63)$$

De acordo com STEVEN (2012) os métodos numéricos para a integração de EDOs podem ser divididos em duas classes: métodos de passo único, ou de Runge-Kutta, e métodos de passos variados.

Os métodos de Runge-Kutta podem ser divididos em métodos de primeira, segunda ou quarta ordem, possuindo a seguinte forma geral:

$$y_{i+1} = y_i + \phi h \quad (64)$$

onde h é o tamanho do passo e ϕ é chamado de função incremento. A forma geral desta função é dada por:

$$\phi = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n \quad (65)$$

em que:

$$k_1 = f(t_i, y_i) \quad (66)$$

$$k_2 = f(t_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h) \quad (67)$$

$$k_3 = f(t_i + p_2 h, y_i + q_{21} k_1 h + q_{22} k_2 h) \quad (68)$$

$$\vdots \quad (69)$$

$$k_n = f(t_i + p_{n-1} h, y_i + q_{n-1,1} k_1 h + q_{n-1,2} k_2 h + \dots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} h) \quad (70)$$

em que os a 's, p 's e q 's são constantes e n indica a ordem do método. Uma vez escolhido o valor de n , os valores dos a 's, p 's e q 's podem ser obtidos igualando-se a equação 64 a uma expansão em série de Taylor de mesma ordem. O erro numérico associado aos métodos de Runge-Kutta de ordem n são proporcionais ao tamanho do passo elevado a n -ésima potência.

3.6.1. Método de Euler

O método de Runge-Kutta de primeira ordem é chamado de método de Euler. Neste caso, tem-se que:

$$y_{i+1} = y_i + f(t_i, y_i)h \quad (71)$$

3.6.2. Método do ponto médio

O método do ponto médio é um método de segunda ordem. Considerando $n = 2$ na equação 64 tem-se que:

$$y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h \quad (72)$$

em que:

$$k_1 = f(t_i, y_i) \quad (73)$$

$$k_2 = f(t_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h) \quad (74)$$

Os valores de a_1 , a_2 , p_1 e q_{11} podem ser obtidos igualando-se a equação 72 à um a série de Taylor de segunda ordem. Com isso, obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$a_1 + a_2 = 1 \quad (75)$$

$$a_2p_1 = 1/2 \quad (76)$$

$$a_2q_{11} = 1/2 \quad (77)$$

O sistema obtido possui três equações e 4 incógnitas, sendo, portanto, possível e indeterminado, ou seja, possui infinitas soluções. Para resolvê-lo, escolhe-se um valor para uma das variáveis e, então, calcula-se todas as outras a partir do valor escolhido. Escolhendo-se $a_2 = 1$ obtém-se $a_1 = 0$, $p_1 = q_{11} = 1/2$ e, com isso, tem-se o chamado método do ponto médio, dado por:

$$y_{i+1} = y_i + k_2h \quad (78)$$

em que:

$$k_1 = f(t_i, y_i) \quad (79)$$

$$k_2 = f(t_i + h/2, y_i + k_1 h/2) \quad (80)$$

3.6.3. Métodos de quarta ordem

Os métodos de quarta ordem assim como os de segunda podem assumir diversas formas, sendo a mais usual apresentada na equação 81:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (81)$$

em que:

$$k_1 = f(t_i, y_i) \quad (82)$$

$$k_2 = f(t_i + h/2, y_i + k_1 h/2) \quad (83)$$

$$k_3 = f(t_i + h/2, y_i + k_2 h/2) \quad (84)$$

$$k_4 = f(t_i + h, y_i + k_3 h) \quad (85)$$

4. Metodologia

A fim de observar os efeitos de cada variável sobre o resultado final, o seguinte plano de trabalho foi desenvolvido, apresentado na Figura 8:

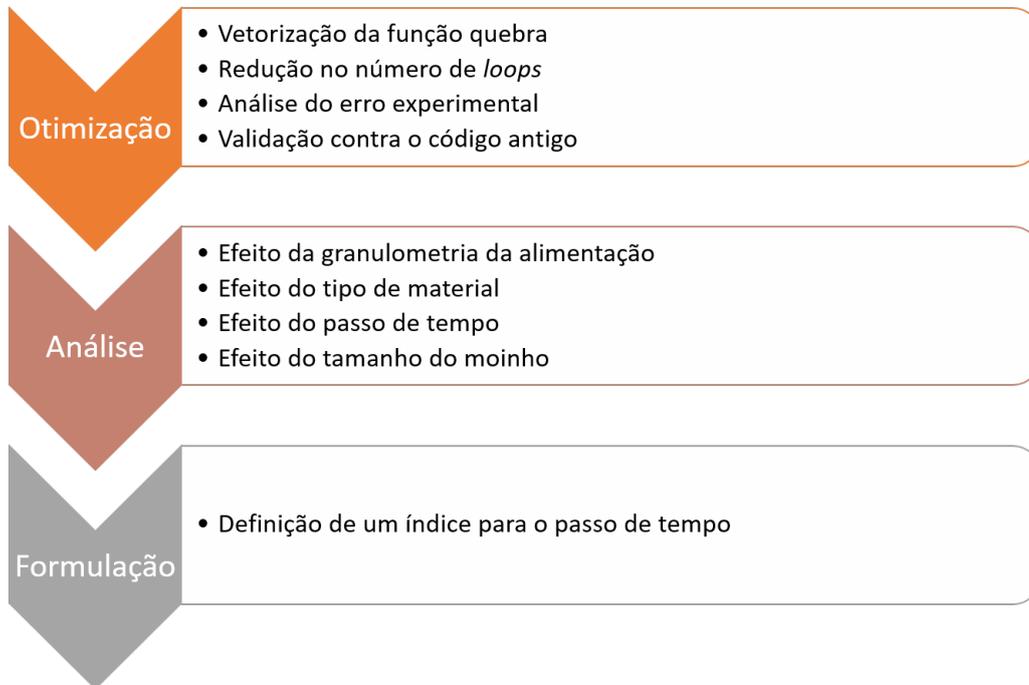


Figura 8: Plano de trabalho desenvolvido.

Otimizar um código permite produzir programas mais rápidos, o que possibilita o uso de processadores mais lentos, com menor custo e menor consumo de energia. Além disso, a otimização permite gerar programas mais curtos, o que reduz o consumo de memória do computador e também leva a uma redução no consumo de energia.

No MATLAB a otimização de um código pode ser realizada através da vetorização das operações matemáticas. Vetorizar significa utilizar expressões que atuam ao mesmo tempo sobre todos os elementos de um vetor ou matriz sem a necessidade de escrever um *loop* que atue sobre cada elemento. Como o MATLAB foi desenvolvido com o intuito de se trabalhar com cálculos matriciais, a vetorização de código, além de facilitar a leitura, permite que um código seja executado mais rapidamente pois são necessários menos acessos à memória do computador e não é necessário o armazenamento das matrizes durante os cálculos.

No presente trabalho vetorizou-se a função quebra utilizada por CARVALHO e TAVARES (2013) além de se utilizar o conceito de operação elemento-a-elemento do MATLAB com o objetivo de reduzir o tempo de execução do código. Além disso, utilizou-se a versão mais recente do MATLAB (R2018a). Esta versão implementa de

forma mais eficiente cálculos utilizados no código, como interpolações e multiplicação de matrizes. As simulações foram realizadas em um computador que possuía um processador Intel® Xeon® X3370 e 8GB de memória RAM.

Inicialmente foram realizadas simulações sob as mesmas condições utilizando o código desenvolvido por CARVALHO e TAVARES (2013) e o desenvolvido para o presente trabalho com o objetivo de validar este. Uma vez feita a validação, verificou-se como certas variáveis influenciavam o resultado final e o tempo de execução. Estas variáveis foram: granulometria da alimentação; resistência do material; tamanho do moinho e passo de tempo.

Foram resolvidas a equação geral do modelo UFRJ (equação 46), com o objetivo de calcular a nova distribuição granulométrica do material, e a equação 51, com o objetivo de calcular a distribuição de energias de fratura do material.

Para integrar a equação 46 foi utilizado o método de Euler, assim como feito por CARVALHO e TAVARES (2013) devido à sua facilidade de implementação.

4.1. Escolha do passo de tempo

O valor do passo de tempo não deve ser tão alto para que não haja erro numérico significativo, uma vez que o erro no método de Euler é diretamente proporcional ao tamanho do passo, mas também não deve ser tão baixo, o que faria com que o tempo de simulação aumentasse drasticamente.

Assim como é feito por CARVALHO e TAVARES (2013), calcula-se a massa de cada classe de tamanho que é capturada por uma dada colisão, a partir da equação 19. Multiplicando este valor pela frequência de cada colisão calcula-se a massa total capturada por segundo. Com isso, pode-se calcular o Δt que deve ser utilizado na equação 71 de tal forma a garantir que a massa capturada em cada intervalo de tempo não seja maior do que a massa de material dentro do moinho.

Desta maneira, o objetivo é encontrar o maior passo de tempo que não gere um erro maior que o erro experimental nas operações de moagem. Para isso foram feitas simulações utilizando Δt fixo de 10^{-4} , 10^{-3} , 10^{-2} , 10^{-1} , 1, 5, 10, 20 e 30 segundos.

4.2. Estudos de caso

As simulações realizadas como estudo de caso utilizaram os seguintes materiais: calcário; cobre; minério de nióbio; granulito e dois minérios de ferro diferentes. A Tabela 3 apresenta as condições utilizadas em cada simulação enquanto que a Tabela 4 apresenta as propriedades dos materiais utilizados. Em todos os casos, foram considerados corpos moedores de 25 mm de diâmetro e o tempo de moagem foi de 8 minutos. A distribuição granulométrica utilizada em cada um dos casos é apresentada na figura 9. Para alimentação A utilizou-se um *topsize* de 0,6 mm e 9 classes de tamanho; para a alimentação B utilizou-se um *topsize* de 9,5 mm e 9 classes de tamanho e para a alimentação C utilizou-se um *topsize* de 9,5 mm e 15 classes de tamanho. O espectro de energias de cada moinho é apresentado na Figura 10.

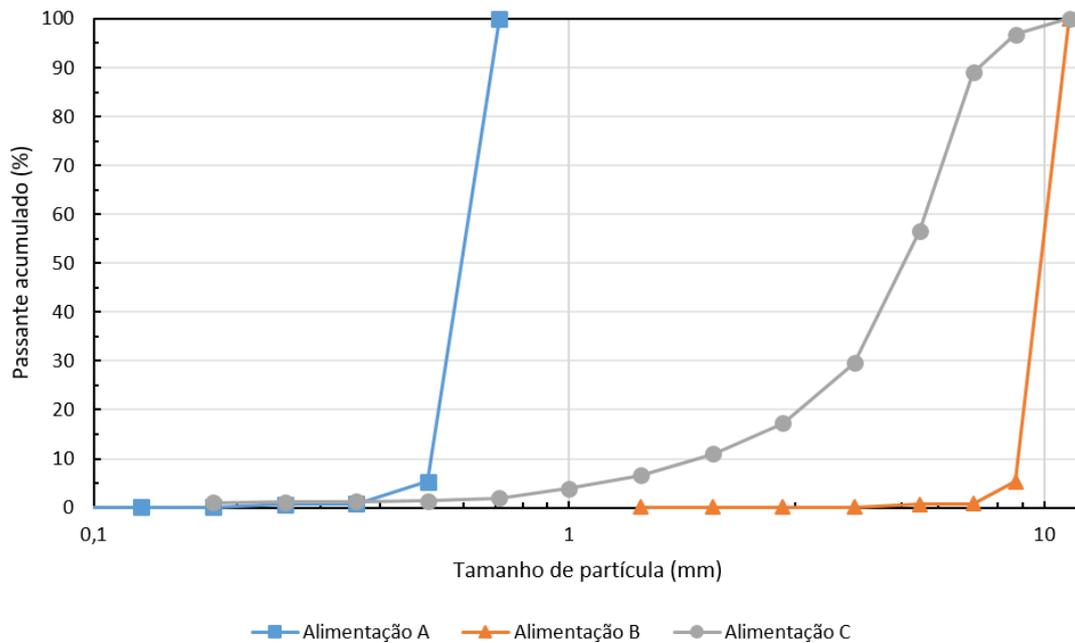


Figura 9: Distribuições granulométricas utilizadas nos estudos de caso.

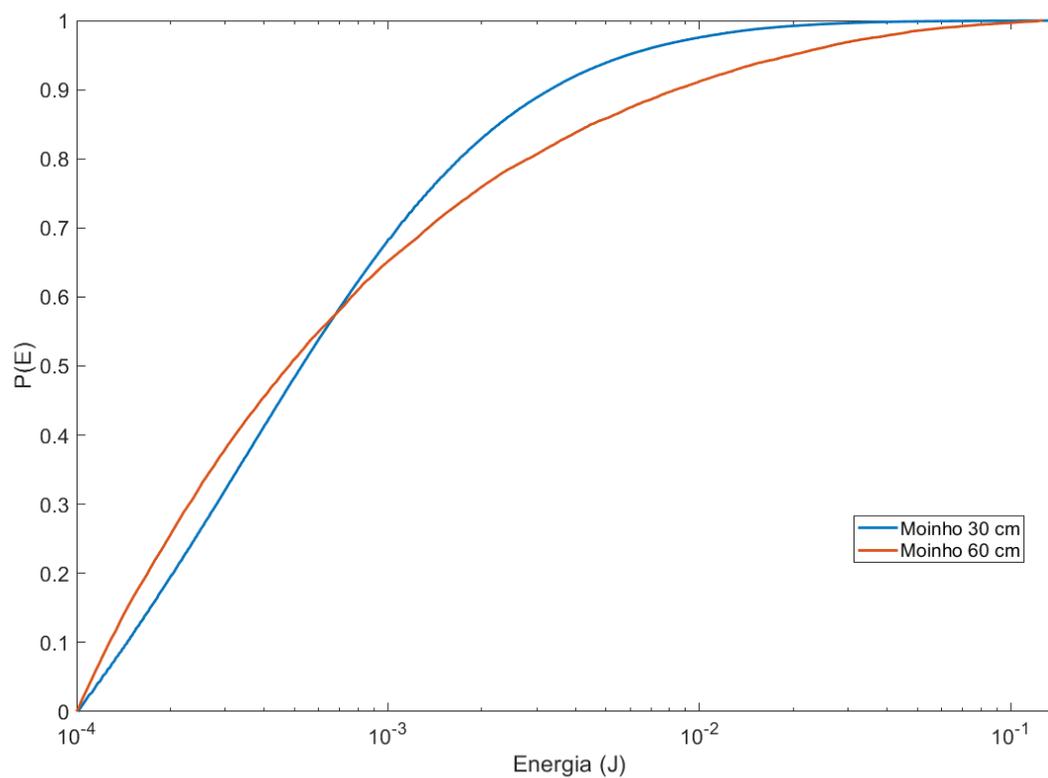


Figura 10: Espectro de energias de impacto de cada moinho.

Tabela 3: Resumo das condições simuladas. Cada letra indica uma granulometria diferente da Figura 9.

Δt (s)	Calcário	Cobre	Nióbio	Minério de Ferro 1	Minério de Ferro 2	Granulito	
0,0001	A	A	-	A	-	A	
0,001	A	A	-	A	-	A	
0,01	AB	AB	-	AB	-	AB	
0,1	AB	AB	-	AB	-	AB	
1	A	A	A	A	A	A	Moinho 30 cm
5	A	A	-	A	-	A	
10	A	A	-	A	-	A	
20	A	A	-	A	-	A	
30	A	A	-	-	-	A	
0,0005	-	C	-	-	-	C	
0,001	A	AC	-	-	-	AC	
0,01	-	AC	-	AC	-	AC	
0,1	-	AC	-	-	-	AC	Moinho 60 cm
1	-	C	-	-	-	C	
5	-	C	-	-	-	C	
10	-	C	-	-	-	C	

Tabela 4: Parâmetros dos materiais utilizados (adaptado de CARVALHO e TAVARES, 2013).

	Calcário	Cobre	Nióbio	Minério de Ferro 1	Minério de Ferro 2	Granulito
E_{∞} (J/kg)	7	60	150	44,92	16,8	130,68
d_0 (mm)	100	400	0,79	4,3	20,1	1,14
ϕ (-)	0,8	0,45	1,3	1,28	0,84	1,99
$\alpha_{1.2}/\beta_{1.2}$	0,19/7,78	0,51/11,95	0,08/8,76	0,98/5,99	1,78/22,03	0,43/10,26
$\alpha_{1.5}/\beta_{1.5}$	0,56/7,51	1,07/13,87	0,56/7,48	1,01/5,01	2,45/20,67	0,92/10,74
α_2/β_2	0,78/5,55	1,01/8,09	1,31/7,57	1,36/3,80	1,53/8,26	1,31/9,15
α_4/β_4	1,12/3,01	1,08/3,03	1,21/3,03	1,22/2,167	1,50/3,64	1,18/2,97
α_{25}/β_{25}	1,17/0,54	1,01/0,53	0,98/0,50	0,95/0,67	0,82/0,42	0,93/0,49
α_{50}/β_{50}	1,43/0,40	1,03/0,36	0,98/0,31	0,89/0,48	0,76/0,24	0,92/0,40
α_{75}/β_{75}	1,92/0,42	1,03/0,30	0,95/0,22	0,92/0,41	0,70/0,16	0,90/0,31
γ (-)	5,4	5	5	3	4,99	5,4
ρ (g/cm ³)	2,71	2,93	2,98	4,35	2,8	2,79
A (%)	53,25	67,71	63,4	60,4	44,2	47,52
b^* (-)	0,03	0,03	0,03	0,05	14,15	0,027
ta (%)	1,6	6,7	5	1,6	0,2	6,7
d_A (mm)	0,21	0,25	0,21	0,21	0,3	0,25
λ (-)	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31
β (-)	0,6	0,62	0,62	0,62	0,62	0,64
σ_{∞} (-)	0,39	0,4	0,3	0,46	0,4	0,90
σ_0 (mm)	10,47	1	1	1	1	0,17
σ^* (-)	0,08	0	0	0	0	1,65

Para avaliar o efeito do passo de tempo no resultado final, foram realizadas simulações onde o Δt era atualizado a cada iteração, de modo que o balanço de massa não fosse violado, bem como foram realizadas simulações em que o Δt era mantido fixo em todas as iterações. Foram utilizadas três alimentações diferentes a fim de se analisar os efeitos da distribuição de tamanhos no resultado final, pois os mecanismos de quebra envolvidos variam com o tamanho das partículas. Enquanto partículas mais grossas podem sofrer quebra, dano ou abrasão, tem-se que partículas finas apenas sofrem quebra. Conseqüentemente, não é necessário realizar os cálculos de dano para as alimentações mais finas e, portanto, as simulações onde foram utilizadas estas alimentações possuem um menor tempo de execução.

A métrica utilizada para comparar os estudos de caso com os casos base foi a diferença absoluta entre os valores de percentual passante na primeira classe de tamanho, após 8 minutos de moagem.

5. Resultados e discussões

A fim de validar o código desenvolvido, foram comparados os resultados obtidos com os de CARVALHO e TAVARES (2013) para as mesmas condições de simulação. Os resultados obtidos para simulações onde foi utilizada a alimentação A, moinho de 30 cm de diâmetro e Δt de 1 segundo podem ser observados nas figuras 11 e 12. Resultados similares foram obtidos para as outras condições, onde variou-se a alimentação, o tamanho do moinho e o passo de tempo. Uma primeira análise que pôde ser realizada foi a comparação dos resultados de simulação da moagem em batelada utilizando o passo de tempo fixo em 1 segundo a fim de avaliar o tempo de execução do código em comparação com uma versão anterior (2013). Neste caso, observou-se reduções do tempo de execução para os seis casos considerados, com ganhos de 35 a 41%. Estes ganhos são devidos à vetorização da função quebra bem como à redução considerável no número de *loops* implementada no código desenvolvido. Outro fator que pode explicar a redução observada é o fato de que a versão utilizada do MATLAB implementa de forma mais rápida e eficiente o cálculo das interpolações do que àquela versão utilizada por CARVALHO (2013). A tabela 5 apresenta os tempos de execução das três funções mais utilizadas em cada um dos códigos. As condições de simulação comparadas neste caso foi: moinho de 30 cm de diâmetro, alimentação A, Δt de 1 segundo e o material utilizado foi o granulito. A função *interp1* é uma função interna ao MATLAB responsável por realizar interpolações, enquanto que a função *interpola* é uma função que foi desenvolvida por CARVALHO e TAVARES (2013) com o objetivo de realizar interpolações de forma mais simples, porém mais rápida. Pode-se observar que a implementação de um menor número de *loops* fez com que duas das três funções fossem utilizadas menos vezes e a vetorização da função quebra fez com que esta se tornasse mais eficiente.

Além disso, é interessante destacar que já era esperada a diferença entre os tempos de execução para os diferentes materiais, conforme resultados apresentados na Figura 13, tendo em vista as diferentes distribuições de energias de fratura. Materiais mais resistentes tendem a sofrer mais dano, o que faz com que seja necessário realizar um ciclo de cálculos custoso e, conseqüentemente, faz com que o tempo de execução do código seja maior. Para o minério de ferro 1 os resultados apresentados nas figuras 11 e 12 são idênticos. Para os outros materiais, a diferença observada pode ser devida a mudança implementada na função quebra ou à diferença na discretização das energias de impacto dentro do moinho. Pode-se observar na figura 12 que os modelos apresentam uma diferença muito pequena

para partículas finas enquanto que para partículas mais grossas esta diferença é um pouco maior.

Tabela 5: Comparação entre os tempos de execução das funções mais utilizadas em ambos os códigos. As condições simuladas foram: moinho de 30 cm de diâmetro, alimentação A, material granulito e Δt de 1 segundo.

Função	Tempo de execução (s) (código 2013)	Tempo de execução (s) (código 2018)	Número de chamadas (código 2013)	Número de chamadas (código 2018)
interp1	35,188	28,217	196801	173234
quebra	17,901	15,922	216000	216000
interpola	15,210	9,356	1045920	738720

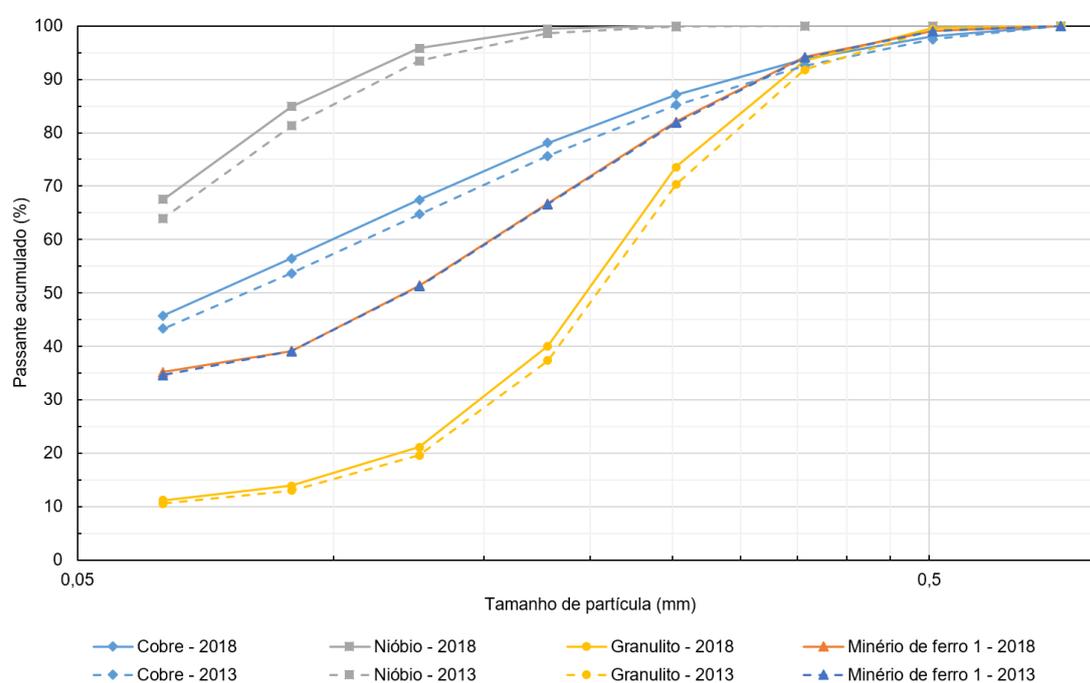


Figura 11: Comparação dos passantes acumulados obtidos pelo código desenvolvido por CARVALHO e TAVARES (2013) e pelo código desenvolvido no presente trabalho. As condições simuladas foram: moinho de 30 cm, alimentação A e Δt de 1 segundo.

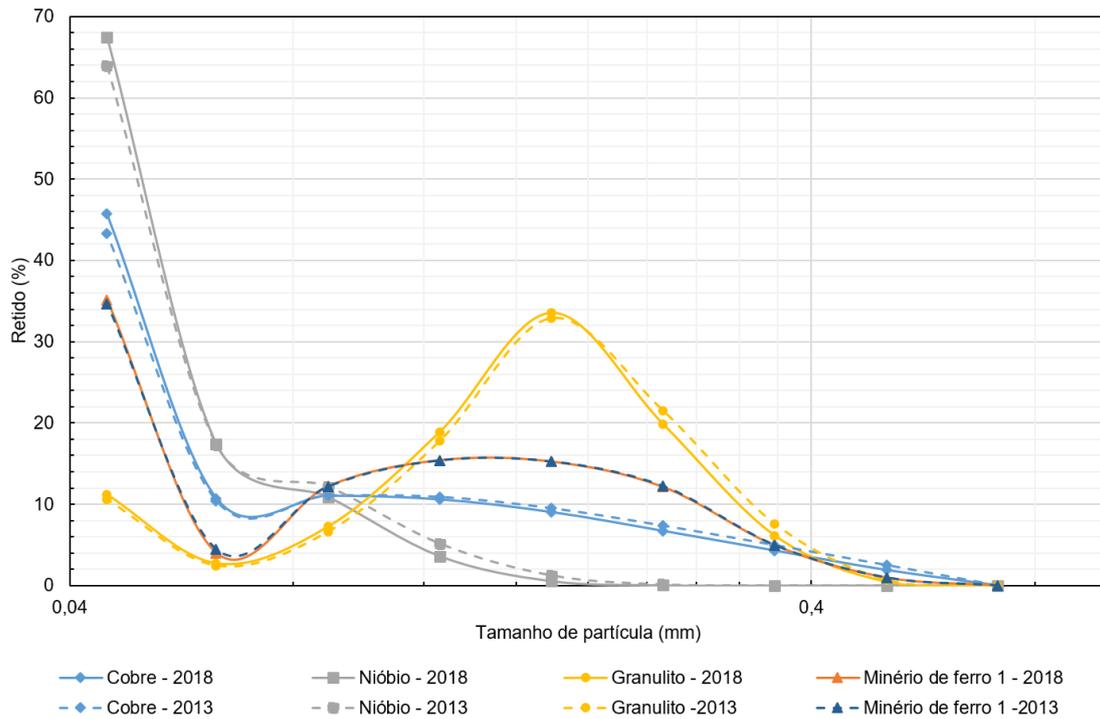


Figura 12: Comparação dos retidos obtidos pelo código desenvolvido por CARVALHO e TAVARES (2013) e pelo código desenvolvido no presente trabalho. As condições simuladas foram: moinho de 30 cm, alimentação A e Δt de 1 segundo.

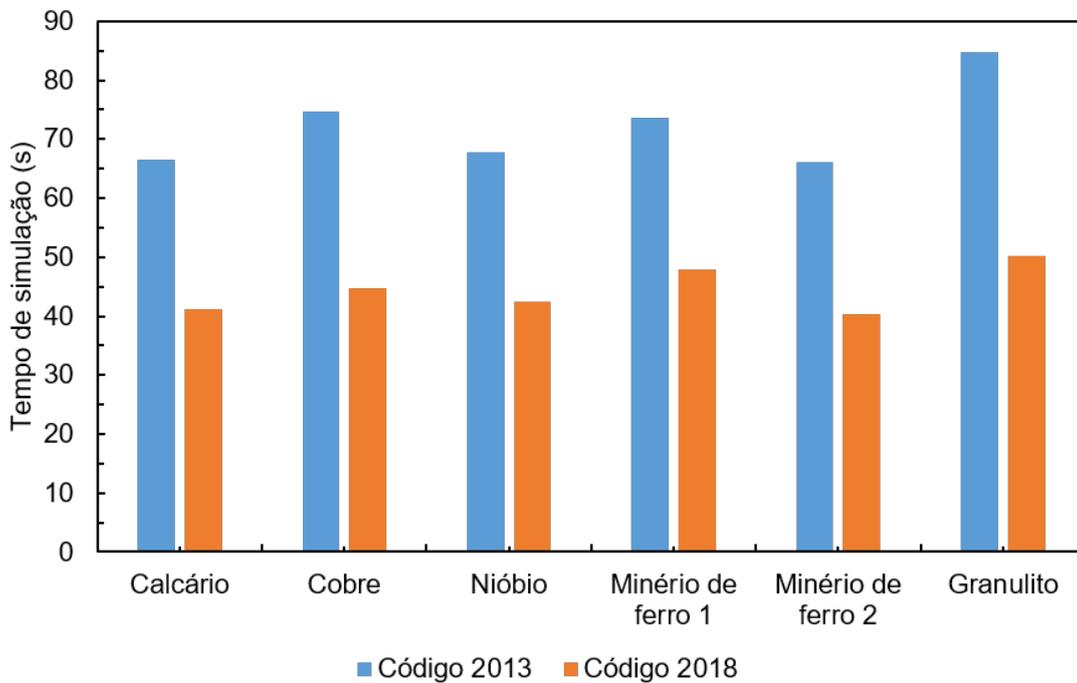


Figura 13: Comparação dos resultados obtidos pelos códigos.

FRANCIOLI (2015) analisou o erro experimental intrínseco à moagem. Para isto, o autor realizou diversas moagens em um moinho de 30 cm de diâmetro, com bolas de

15 a 40 mm de diâmetro, grau de enchimento entre 20 e 40 %, preenchimento de vazios entre 80 e 120% e velocidade de rotação entre 67 e 85% da velocidade crítica. O material utilizado por ele foi o granulito. A partir dos resultados obtidos, o autor pode analisar erro experimental da moagem. Os resultados obtidos por FRANCIOLI (2015) foram maiores do que as diferenças observadas na Figura 11, onde as condições simuladas foram similares àquelas utilizadas pelo autor. A partir deste resultado, pode-se concluir que o código desenvolvido gerava os mesmos resultados do que aquele utilizado em 2013, podendo ser considerado validado.

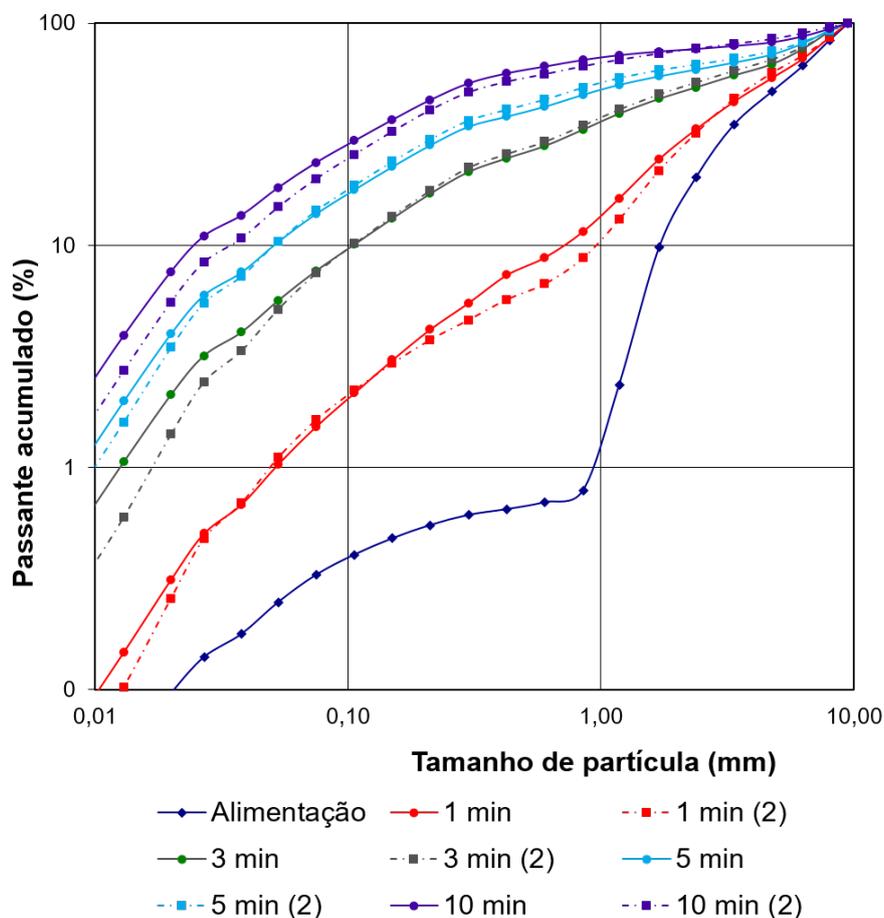
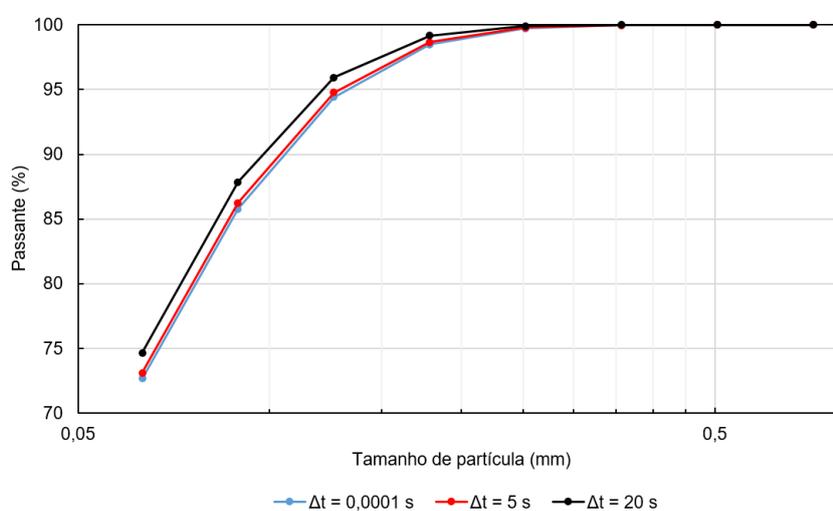


Figura 14: Erro experimental da moagem (adaptado de FRANCIOLI, 2015).

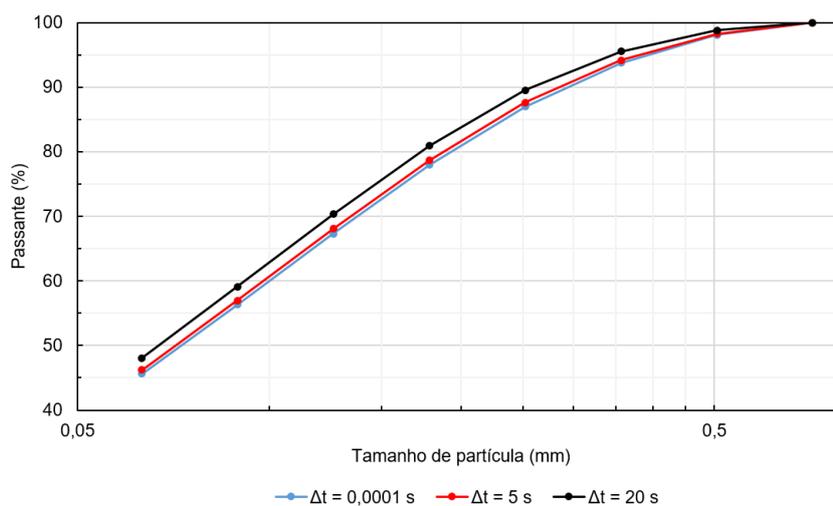
A fim de avaliar o efeito do passo de tempo foram feitas simulações utilizando Δt fixo. A influência do passo de tempo fixo sobre a fração de material passante após 8 minutos de moagem é apresentada nas figuras 15 e 16. A diferença que pode ser observada entre os resultados é devida, principalmente, ao fato de que o erro numérico associado ao método de Euler é diretamente proporcional ao tamanho do passo de tempo. Quanto maior o passo de tempo utilizado maior é o erro numérico associado e menos acurada é a

simulação.

Considerando as simulações com o menor Δt como base, uma vez que o erro numérico associado a estas é o menor, pode-se concluir, a partir das figuras 15 e 16, que o erro numérico referente às simulações onde fora utilizado um valor de Δt intermediário não foi tão elevado apesar do balanço de massa estar sendo violado nestes casos. Observa-se, novamente, que o erro calculado por FRANCIOLI (2015) mostrou ser maior do que as diferenças observadas nas figuras 15 e 16 entre o menor Δt e um Δt intermediário. A partir deste fato é possível concluir que pode-se utilizar um Δt na ordem de 1 segundo, uma vez que este passo de tempo leva a um tempo total de simulação não muito elevado sem incorrer em erros numéricos muito grandes.

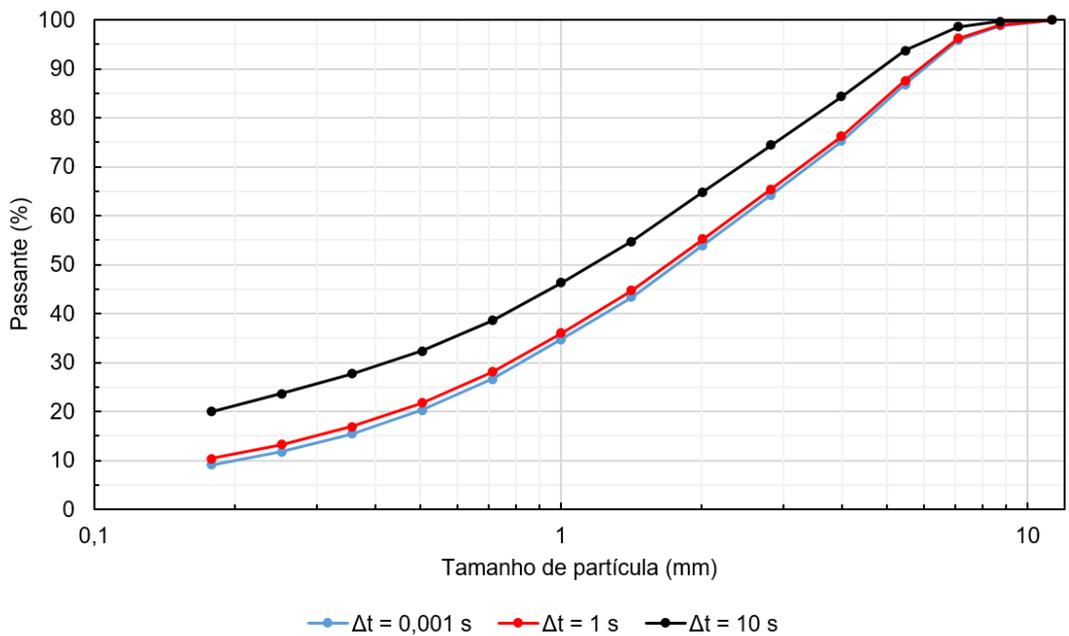


(a) Calcário

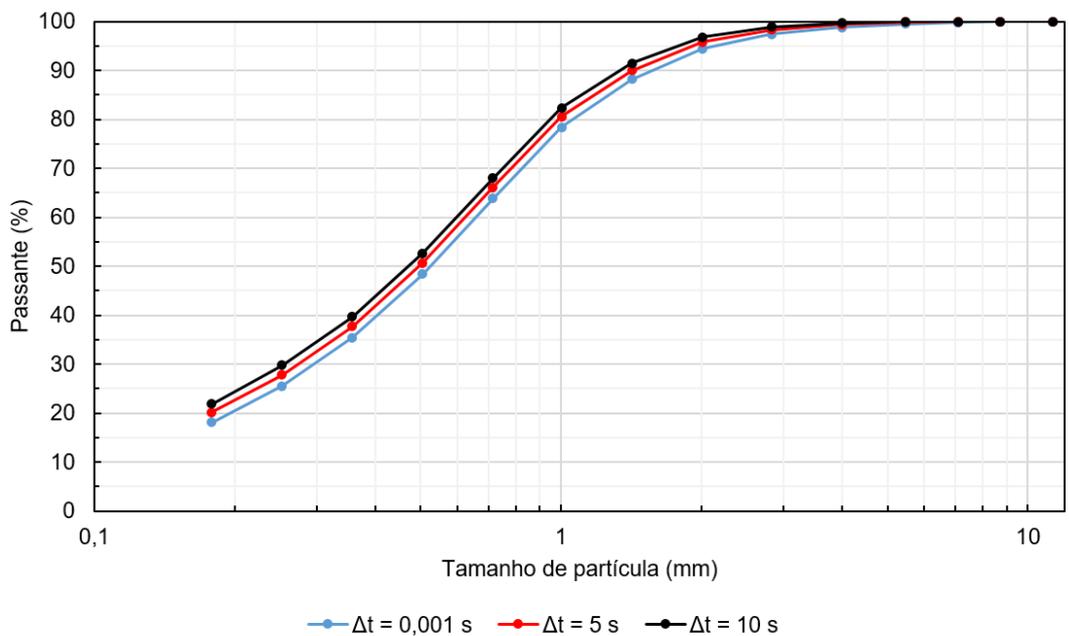


(b) Cobre

Figura 15: Efeito do Δt sobre o passante após 8 minutos de moagem para dois materiais para o moinho de 30 cm e alimentação A.



(a) Cobre



(b) Granulito

Figura 16: Efeito do Δt sobre o passante após 8 minutos de moagem para dois materiais para o moinho de 60 cm e alimentação C.

Além disso, pode-se observar que para alimentações mais finas pode-se utilizar valores maiores de Δt , uma vez que a diferença entre a massa capturada calculada pelos modelos de captura e a massa efetiva no interior do moinho não é tão grande. Para alimentações mais grossas essa diferença é maior, o que torna estes casos mais sensíveis aos erros numéricos gerados pelo uso de passos de tempo maiores.

Em uma outra análise foi avaliada a influência do Δt sobre o tempo total de

simulação. Os resultados podem ser observados nas figuras 17 e 18. Como era esperado, pode-se observar que quanto menor o tamanho do passo utilizado, mais ciclos de cálculo são necessários para simular um mesmo tempo de moagem e, conseqüentemente, maior será o tempo de simulação. Pode-se observar uma relação linear entre o tempo de simulação e o passo de tempo quando se utiliza uma escala log-log, o que significa que o tempo de simulação tem uma relação de potência com o Δt .

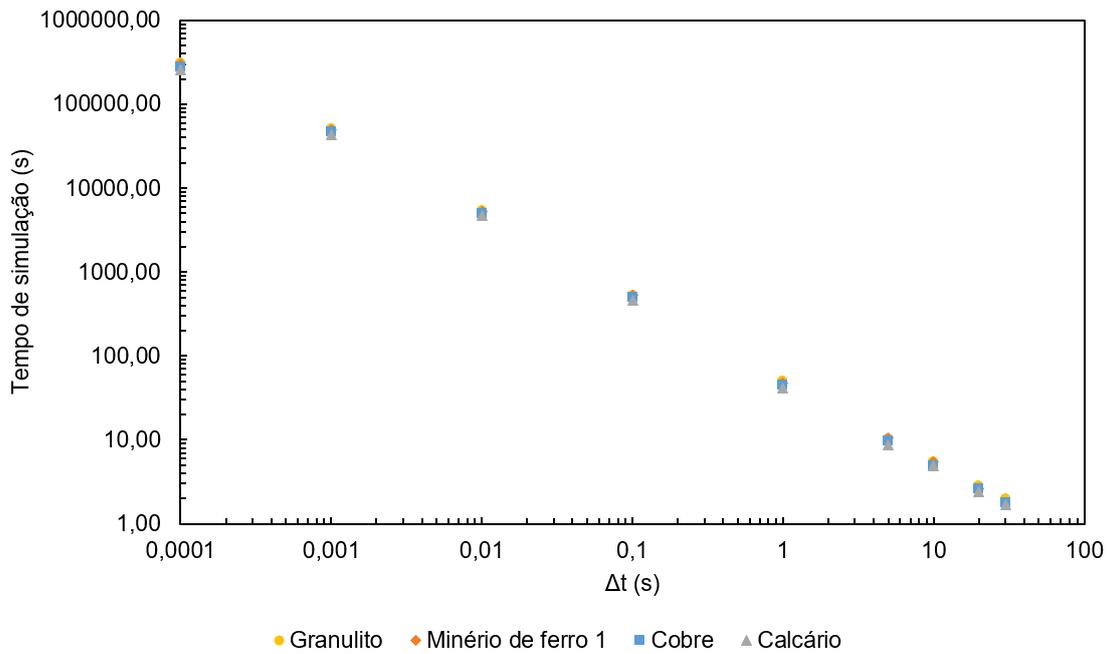


Figura 17: Tempos de simulação em função do Δt para o moinho de 30 cm e alimentação A.

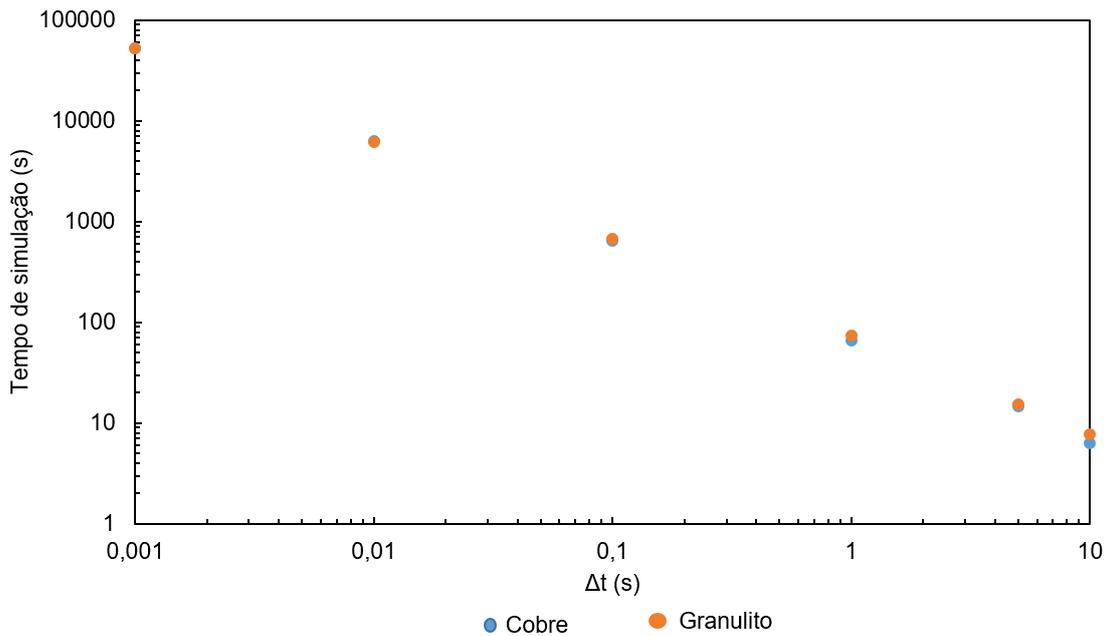


Figura 18: Tempos de simulação em função do Δt para o moinho de 60 cm e alimentação C.

A título de verificação, analisou-se a variação da mediana da energia de fratura com o passar do tempo de moagem. Esperava-se que esta aumentasse com o tempo, uma vez que só permanecem na classe de tamanho original aquelas partículas que são mais resistentes. Foram analisadas duas classes de tamanho: uma mais grossa (7 mm) e uma intermediária (2 mm) para dois minérios diferentes. Verifica-se, realmente, que conforme a moagem progride a massa de material nestas duas classes diminui, enquanto que a mediana da energia de fratura de ambas as classes aumenta, confirmando que só sobrevivem as partículas mais resistentes. Este efeito pode ser observado na figura 19.

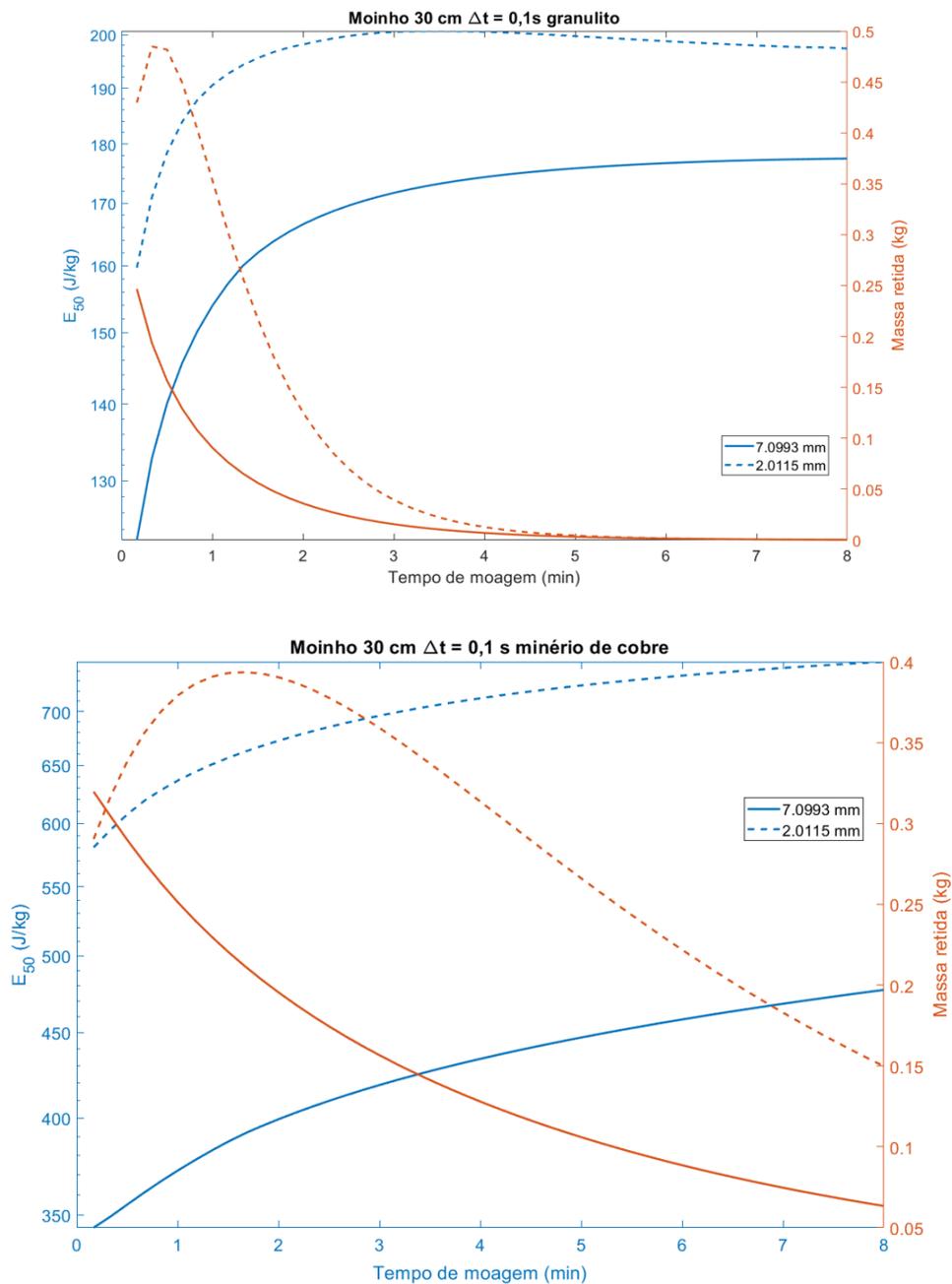


Figura 19: Variação da mediana da energia de fratura com o tempo para duas classes de tamanho.

Por fim, a partir das simulações realizadas, foi possível verificar que, de todas as equações do modelo, a equação responsável por calcular a fração de material que não foi capturada por nenhuma colisão em um intervalo de tempo Δt (equação 61) era a mais sensível aos erros numéricos causados devido à utilização um passo de tempo muito grande. Ao se utilizar um Δt muito alto, a equação 61 produzia valores negativos, o que não é possível fisicamente, uma vez que ela representa a fração de material que não foi capturada, ou seja, deveria ser um número entre 0 e 1. Estes valores negativos eram então carregados para o balanço de energias de fratura e, com isso, os erros numéricos se propagavam a cada iteração.

Inicialmente observou-se que o valor da da fração de material que não era capturada em um intervalo de tempo (equação 61) era sempre negativo para valores de Δt elevados e era sempre positivo para valores de Δt baixos. Este efeito pode ser observado na figura 20.

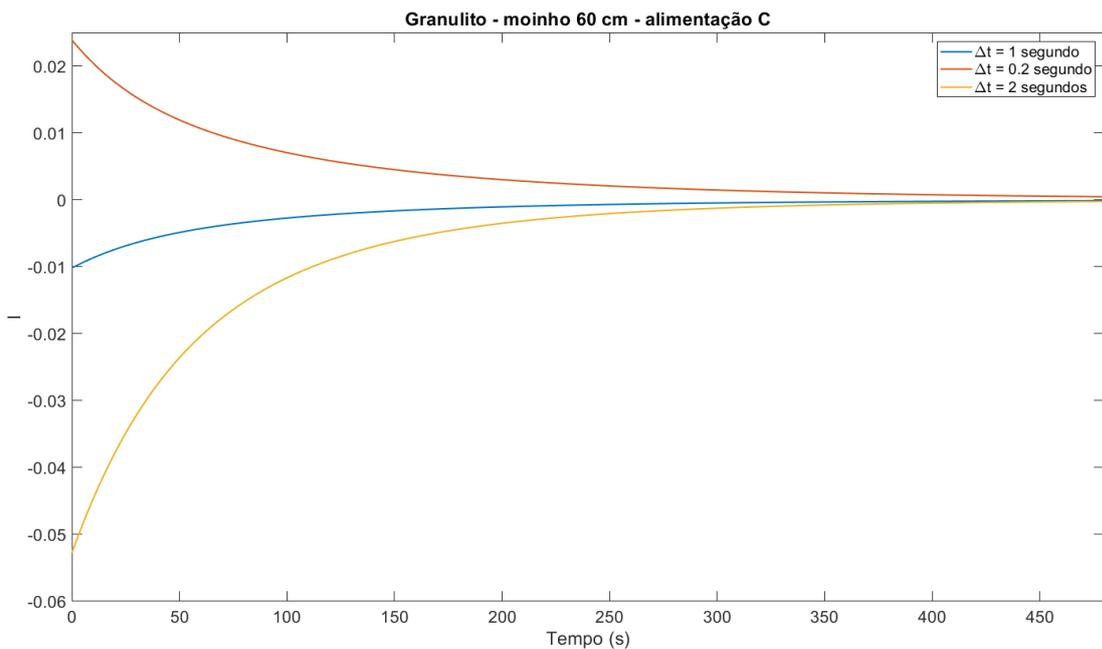


Figura 20: Valores de I (equação 61) em função do tempo de moagem.

Em seguida foi avaliado o erro do modelo de captura. Verificou-se que este sempre superestimava a quantidade de material dentro do moinho. A figura 21 mostra o quanto o modelo de captura erra após os 8 minutos de moagem. Nota-se que para tamanhos maiores o modelo superestima a massa dentro do moinho em mais de 10000 vezes.

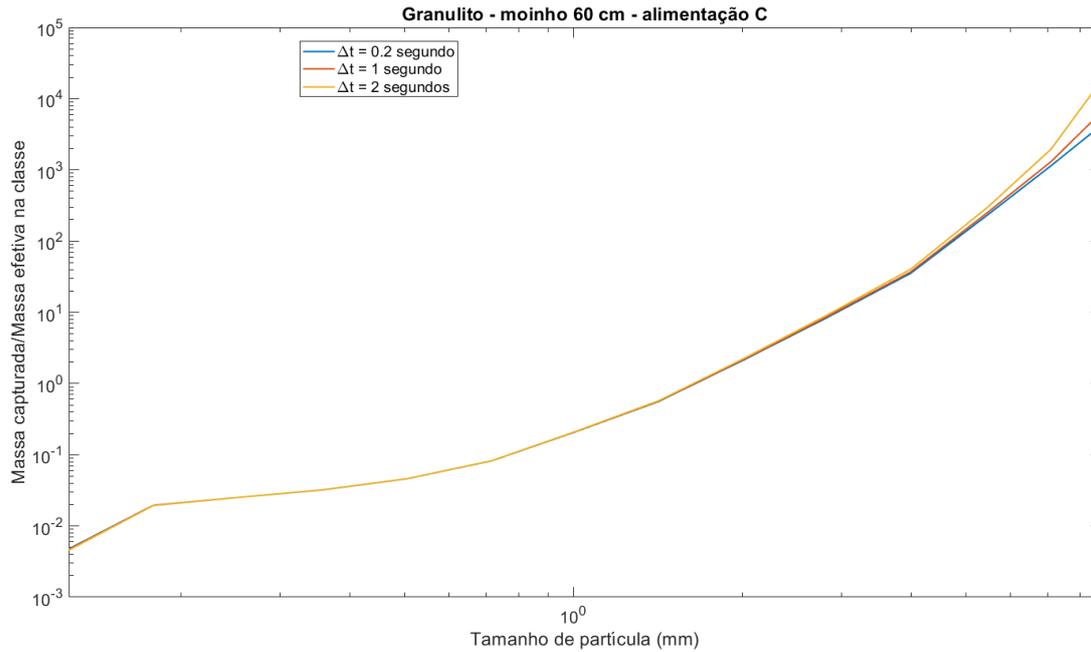


Figura 21: Razão entre a massa capturada e a massa dentro do moinho.

A partir destas observações, decidiu-se propor um índice que fosse capaz de dizer qual seria o maior Δt que poderia ser utilizado sem que fossem o valor da massa capturada fosse tão superestimada e sem que fossem obtidos valores negativos para a equação 61. O índice proposto tem a seguinte forma:

$$\Delta t_{jl} = \frac{M}{\omega_j m_{Kj2l}} \quad (86)$$

onde M é a massa total no interior do moinho, j é a classe de colisão, l é a classe mineralógica e K representa o índice da maior energia de impacto disponível no interior do moinho e o índice 2 é referente a segunda classe de tamanho. Calculou-se então qual seria o valor ótimo de Δt para algumas simulações realizadas, a partir do índice proposto. Os resultados obtidos estão apresentados na tabela 6. A Figura 22 apresenta a comparação entre o resultado das simulações nas quais foram utilizados valores de passo de tempo de 0,0001 s e 0,2 s.

Observou-se que em todas as simulações onde o Δt utilizado foi menor do que o apresentado na tabela 6 que os resultados obtidos estavam dentro do erro calculado por FRANCIOLI (2015) quando comparados com os casos base. Entretanto, os tempos de execução nestes casos foi muito menor do que os dos casos base. Quando utilizou-se passos de tempo muito maiores do que o valor ótimo, observou-se error superiores ao erro experimental e em alguns casos o erro numérico era tão elevado que foram obtidos valores

negativos para as frações retidas em algumas classes de tamanho.

Tabela 6: Valores de Δt ótimos calculados a partir do índice proposto.

Material	Diâmetro do moinho (cm)	Alimentação	Δt ótimo (s)
Cobre	30	A	4,4260
Granulito	30	A	4,4964
Calcário	30	A	4,9353
Nióbio	30	A	4,3434
Ferro 1	30	A	2,9793
Granulito	60	C	0,2028
Cobre	60	C	0,2099

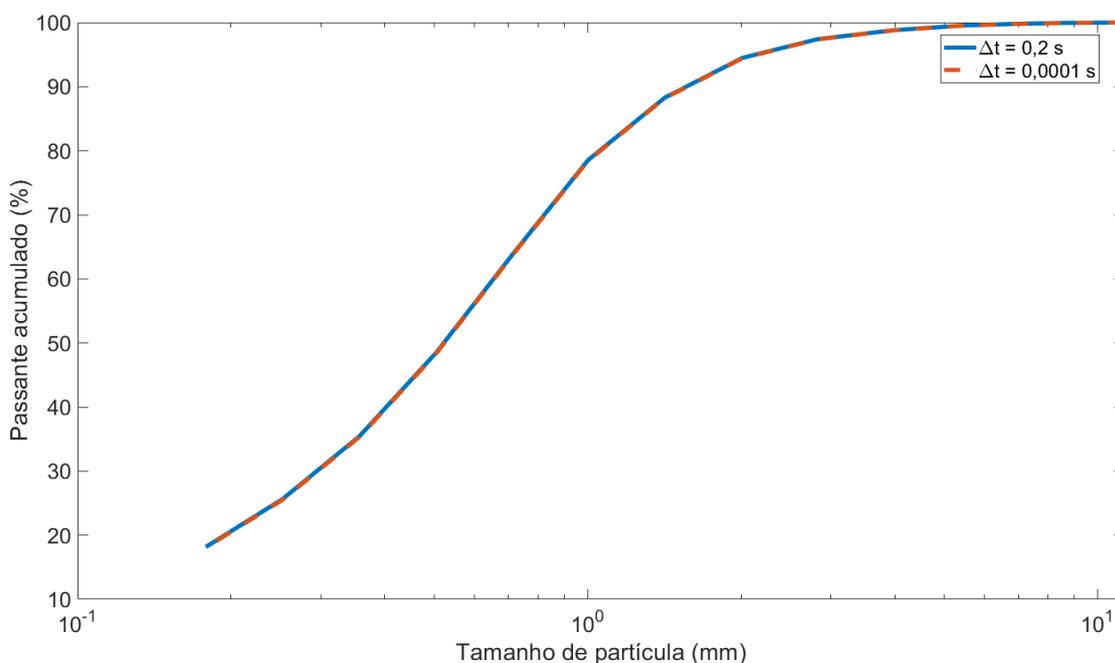


Figura 22: Comparação entre o passo de tempo ótimo (0,2 s) e o menor passo de tempo utilizado (0,0001 s) para o granulito utilizando-se a alimentação C.

Portanto, o índice proposto pode ser utilizado como uma estimativa para o cálculo do tempo de execução de uma dada simulação. Conhecendo o tempo necessário para realizar um ciclo de cálculo e de posse do valor do Δt ótimo pode-se saber de antemão o tempo necessário para realizar uma simulação.

6. Conclusão

A partir dos resultados apresentados, pode-se chegar às seguintes conclusões:

- O código desenvolvido apresentou os mesmos resultados daquele utilizado por CARVALHO e TAVARES (2013) sendo, então, validado;
- O termo I do balanço de energias de fratura (equação 61) foi o termo mais sensível ao tamanho do passo de tempo, chegando a apresentar valores negativos para valores de Δt muito altos. A partir dele foi proposto um índice para poder estimar o maior valor de Δt que seria possível utilizar em uma dada simulação;
- A partir do índice proposto, é possível calcular o tempo de execução para qualquer simulação, bastando conhecer a massa de minério no interior do moinho, a frequência de colisões dentro deste e a massa capturada da maior classe de tamanho, o que torna este índice bastante valioso na área de simulação;
- Apesar da vetorização feita na função quebra e da redução do número de *loops*, as interpolações ainda são as maiores responsáveis pelo elevado tempo de execução do código.

Referências Bibliográficas

- AUSTIN, L. G., CONCHA, F., 1994, *Diseño y simulación de circuitos de molienda y clasificación*. Madrid, Espanha, CYTED. Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo. Subprograma de Tecnología Mineral. Red de Fragmentación XIII-A.
- AUSTIN, L. G., KLIMPEL, R. R., LUCKIE, P. T., 1984, *Process engineering of size reduction: ball milling*. American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers.
- BARRIOS, G. K., CARVALHO, R. M., TAVARES, L. M., 2011, “Modeling breakage of monodispersed particles in unconfined beds”, *Minerals Engineering*, v. 24, n. 3, pp. 308–318.
- BOND, F. C., 1957, “Comminution exposure constant by the third theory”, *Mining Engineering (December 1957)*, v. 1372.
- BUENO, M., KOJOVIC, T., POWELL, M., et al., 2013, “Multi-component AG/SAG mill model”, *Minerals Engineering*, v. 43, pp. 12–21.
- CAPECE, M., DAVÉ, R., BILGILI, E., 2015, “On the origin of non-linear breakage kinetics in dry milling”, *Powder Technology*, v. 272, pp. 189–203.
- CARVALHO, R. M., 2007, “Modelagem, Simulação e Controle da Moagem a Seco em Moinho de Bolas”, *Projeto de final de curso, Escola de Química, UFRJ*.
- CARVALHO, R. M., 2009, *Desenvolvimento de modelo matemático generalizado da cominuição*. Tese de Mestrado, UFRJ/COPPE/PEMM.
- CARVALHO, R. M., 2013, *Mechanistic modelling of semi-autogenous grinding*. Tese de Doutorado, UFRJ/COPPE/PEMM.
- CARVALHO, R. M., TAVARES, L. M., 2013, “Predicting the effect of operating and design variables on breakage rates using the mechanistic ball mill model”, *Minerals Engineering*, v. 43-44, pp. 91–101. ISSN: 08926875. doi: 10.1016/j.mineng.2012.09.008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.mineng.2012.09.008>>.
- CHO, K., 1987, *Breakage mechanisms in size reduction*. Tese de Doutorado, Department of Metallurgical Engineering, University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA.

- CUNHA, E. R. D., 2014, *Modelagem mecanicista de britadores de impacto de eixo vertical*. Tese de Doutorado, UFRJ/COPPE/PEMM.
- FRANCIOLI, D. M., 2015, “Effect of Operacional Variables on Ball Milling”, *Projeto de final de curso, Escola Politécnica, UFRJ*.
- HERBST, J., FUERSTENAU, D., 1973, “Mathematical simulation of dry ball milling using specific power information”, *Trans. AIME*, v. 254, pp. 343.
- HERBST, J., FUERSTENAU, D., 1980, “Scale-up procedure for continuous grinding mill design using population balance models”, *International Journal of Mineral Processing*, v. 7, n. 1, pp. 1–31.
- HERBST, J. A., 2004, “A microscale look at tumbling mill scale-up using high fidelity simulation”, *International Journal of Mineral Processing*, v. 74, pp. S299–S306.
- HULBURT, H. M., KATZ, S., 1964, “Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 8, pp. 555–574.
- KING, R. P., 2001, *Modeling and simulation of mineral processing systems*. Oxford, Inglaterra, Elsevier.
- KING, R. P., BOURGEOIS, F., 1993, “Measurement of fracture energy during single-particle fracture”, *Minerals Engineering*, v. 6, n. 4, pp. 353–367.
- MISHRA, B. K., 1991, *Study of media mechanics in tumbling mills by the discrete element method*. Tese de Doutorado, Department of Metallurgical Engineering, University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA.
- MISHRA, B., RAJAMANI, R. K., 1992, “The discrete element method for the simulation of ball mills”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 16, n. 11, pp. 598–604.
- POWELL, M., 2006, “The unified comminution model—a conceptually new model”, *Proceedings of the XXII IMPC, Se*, pp. 3–8.
- POWELL, M., GOVENDER, I., MCBRIDE, A., 2008, “Applying DEM outputs to the unified comminution model”, *Minerals Engineering*, v. 21, n. 11, pp. 744–750.
- RODRIGUEZ, V. A., CARVALHO, R. M., TAVARES, L. M., 2018, “Insights into advanced ball mill modelling through discrete element simulations”, *Minerals Engineering*, v. 127, pp. 48–60.

- RODRIGUEZ, V. A., 2016, *Modelo mecanicista UFRJ aplicado à cominuição em moinhos de bolas descontínuos*. Tese de Mestrado, UFRJ.
- STEVEN, C. C., 2012, *Applied Numerical Methods With Matlab: For Engineers And Scientists*. Tata McGraw Hill Education Private Limited.
- TAVARES, L., CARVALHO, R. M., 2010, “A mechanistic model of batch grinding in ball mills”. In: *XXV International Mineral Processing Congress*, v. 1, pp. 1287–1297. AUSIMM Brisbane, 7.
- TAVARES, L., KING, R., 1998, “Single-particle fracture under impact loading”, *International Journal of Mineral Processing*, v. 54, n. 1, pp. 1–28.
- TAVARES, L. M., 1997, *Microscale investigation of particle breakage applied to the study of thermal and mechanical predamage*. Tese de Doutorado, Department of Metallurgical Engineering, University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA.
- TAVARES, L. M., CARVALHO, R. M., 2009, “Modeling breakage rates of coarse particles in ball mills”, *Minerals Engineering*, v. 22, n. 7, pp. 650–659.
- TAVARES, L. M., KING, R., 2002, “Modeling of particle fracture by repeated impacts using continuum damage mechanics”, *Powder Technology*, v. 123, n. 2, pp. 138–146.
- WEERASEKARA, N., POWELL, M., CLEARY, P., et al., 2013, “The contribution of DEM to the science of comminution”, *Powder technology*, v. 248, pp. 3–24.