ALICE JORDAM CASERTA

**DESENVOLVIMENTO DE RELAÇÕES NÃO-
LINEARES PARA MECANISMOS DE CONTATO POR
MEIO DE ESTUDO ANALÍTICO E NUMÉRICO**

**Tese apresentada à Escola de
Engenharia de São Carlos da
Universidade de São Paulo, como
parte dos requisitos para obtenção do
título de Doutor em Ciências.**

**Área de Concentração: Dinâmica de
Máquinas e Sistemas.**

Orientador: Hélio Aparecido Navarro

ESTE EXEMPLAR TRATA-SE DA
VERSÃO CORRIGIDA.
A VERSÃO ORIGINAL ENCONTRA-
SE DISPONÍVEL JUNTO AO
DEPARTAMENTO DE
ENGENHARIA MECANICA DA
EESC-USP.

São Carlos

2015

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTA TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

J82d Jordam Caserta, Alice
DESENVOLVIMENTO DE RELAÇÕES NÃO-LINEARES PARA
MECANISMOS DE CONTATO POR MEIO DE ESTUDO ANALÍTICO E
NUMÉRICO / Alice Jordam Caserta; orientador Hédio
Aparecido Navarro. São Carlos, 2015.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Dinâmica
de Máquinas e Sistemas -- Escola de Engenharia de São
Carlos da Universidade de São Paulo, 2015.

1. Escoamento gás-sólido e granular. 2. modelo
contínuo. 3. modelo discreto. 4. forças de contato. 5.
modelo esfera suave. 6. MFIIX. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Licenciada **ALICE JORDAM CASERTA**.

Título da tese: "Desenvolvimento de relações não-lineares para mecanismos de contato por meio de estudo analítico e numérico".

Data da defesa: 31/08/2015

Comissão Julgadora:

Resultado:

Prof. Dr. **Helio Aparecido Navarro**
(Orientador)
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Aprovada

Prof. Dr. **Luben Cabezas Gómez**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

APROVADO

Prof. Dr. **Vicente Luiz Scalon**
(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho" – UNESP - Bauru)

Aprovado

Prof. Dr. **Arlindo Neto Montagnoli**
(Universidade Federal de São Carlos/UFSCar)

Aprovada

Prof. Associado **Leandro Franco de Souza**
(Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação/ICMC)

Aprovado

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica:
Prof. Associado **Gherhardt Ribatski**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Associado **Paulo César Lima Segantine**

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus, pela vida, por me propiciar viver tamanha experiência, me confortar e dar forças nas horas difíceis e pela realização deste trabalho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Hélio Aparecido Navarro, que de forma crucial me auxiliou em todos os aspectos deste trabalho. Compartilhando seus valiosos conhecimentos, tendo paciência e prontidão para me auxiliar.

A todos os integrantes de minha família, pelo apoio, amor, carinho e incentivo.

A minha querida amiga Andreza, por sempre estar disponível e me ajudar durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos demais amigos que contribuíram de forma direta ou indireta para a realização desta pesquisa.

Aos Professores do Departamento de Engenharia Mecânica da USP – EESC, que colaboraram com o desenvolvimento do doutorado.

Aos funcionários da EESC, pela prontidão e ajuda.

Ao Laboratório de Dinâmica e aos seus funcionários pelas instalações e facilidades oferecidas.

Agradeço também à CAPES pelo apoio financeiro concedido em forma de bolsa de estudo.

E por fim, agradeço a todos que contribuíram, de certa forma, para o desenvolvimento deste trabalho.

“Sem crise não há desafios; sem desafios, a vida é uma rotina, uma lenta agonia.

Sem crise não há mérito.

É na crise que se aflora o melhor de cada um”.

Albert Einstein

RESUMO

Jordam Caserta, A. **Desenvolvimento de relações não-lineares para mecanismos de contato por meio de estudo analítico e numérico.** 172 p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

Fenômenos multifásicos são frequentemente observados na natureza, tais como nas gotas de chuva ou neve no ar, nos vulcões e tempestades de areia, e em diversas outras situações. Na solução desses problemas que envolvem escoamentos gás-sólidos e granulares são frequentemente utilizadas duas abordagens: a contínua (formulação Euleriana-Euleriana) e a discreta (formulação Euleriana-Lagrangiana). Na abordagem discreta pode-se utilizar dois modelos para descrever o contato entre as partículas: o modelo de esfera rígida e o modelo de esfera suave. Neste trabalho é realizado um estudo detalhado dos modelos de contato, com foco na modelagem de esfera suave, que é baseada em um sistema dinâmico mola-massa-amortecedor. Por meio desse estudo, com a finalidade de aprimorar o modelo de contato não-linear, são propostas duas relações para o mecanismo de contato de partículas. Essas relações são fundamentadas em um modelo dinâmico, com não-linearidades nas partes conservativas e dissipativas, não apresentando descontinuidades entre as acelerações do início e do fim do contato. A metodologia de desenvolvimento da presente pesquisa está dividida em três partes: pesquisa bibliográfica dos modelos de contato; estudo analítico e numérico desses modelos e testes de problemas com a realização de experimentos numéricos, utilizando o código computacional MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchange). As novas aproximações propostas neste trabalho são analisadas e aplicadas em três diferentes problemas: de dinâmica, escoamento gás-sólido e escoamento granular. Os resultados obtidos utilizando as relações são comparados com dados disponíveis na literatura, mostrando-se adequados para os casos investigados neste trabalho.

Palavras-chave: Escoamento gás-sólido e granular, modelo contínuo, modelo discreto, forças de contato, modelo esfera suave, MFIX.

ABSTRACT

Jordam Caserta, A. **Development of nonlinear relations to contact mechanisms by analytical and numerical study.** 172 p. Thesis (Doctorate) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

Multiphase flow are frequently observed in nature, such as rain drops in air or snowfalls, volcanoes and sandstorms, and several other situations. For solving these problems which involve gas-solid and granular flows are often used two models: the continuous model (Eulerian-Eulerian formulation) and the discrete model (Eulerian-Lagrangian formulation). There are two main contact models used in DEM, the hard-sphere model and the soft-sphere model. In this work is carried out a detailed study of contact models, focusing on soft-sphere model, based on a dynamic system modeled as nonlinear mass-spring-damper. In order to improve the nonlinear contact model, in this study it is proposed two new approximate relations for determining the damping coefficient and duration of contact for a specific nonlinear soft-sphere contact model where the contact force is continuous at the start and end of the contact. The methodology of the development of this work is divided into three parts: literature research of the contact models; analytical and numerical study of these models and test problems with numerical experiments, using the open source code MFIx (Multiphase Flow with Interphase eXchange). The proposed relations are analyzed and applied in three different problems: dynamic problem, gas-solid flow and granular flow. All results are compared with literature data showing good agreement for these cases studied in the present work.

Keywords: Gas-solid and granular flows, continuous model, discrete model, contact forces, soft sphere model, MFIx.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Procedimento geral para formulação do modelo contínuo apresentado por Enwald, Peirano e Almstedt (1996).....	43
Figura 2: Volume de controle fixo contendo duas fases com interface móvel.....	44
Figura 3: Regime plástico e viscoso para escoamentos granulares.....	48
Figura 4: Esquema de colisão entre duas partículas no modelo esfera suave.....	55
Figura 5: Sistema massa-mola-amortecedor nas direções normal e tangencial.....	57
Figura 6: Sobreposição adimensional (modelo LSD).....	66
Figura 7: Velocidade adimensional (modelo LSD).....	67
Figura 8: Aceleração adimensional (modelo LSD).....	68
Figura 9: Sobreposição adimensional (modelo HSD-A).....	74
Figura 10: Velocidade adimensional (modelo HSD-A).....	74
Figura 11: Aceleração adimensional (modelo HSD-A).....	75
Figura 12: Sobreposição adimensional (modelo HSD-B).....	80
Figura 13: Velocidade adimensional (modelo HSD-B).....	80
Figura 14: Aceleração adimensional (modelo HSD-B).....	81
Figura 15: Esquema de funcionamento das simulações.....	94
Figura 16: Esquema de uma partícula em queda livre.....	97
Figura 17: Cinemática da esfera para modelo HSD-A com $e_n=0,9$	98
Figura 18: Cinemática da esfera para modelo HSD-B com $e_n=0,9$	98
Figura 19: Cinemática da esfera para modelo HSD-A com $e_n=0,7$	99
Figura 20: Cinemática da esfera para modelo HSD-B com $e_n=0,7$	100
Figura 21: Geometria do leito fluidizado.....	101
Figura 22: Perfis temporais da distribuição do sólido para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 0,25$ s; (c) $t = 0,5$ s; (d) $t = 5,0$ s; (e) $t = 15,0$ s; (f) $t = 25$ s.....	104
Figura 23: Porosidade média no tempo em duas alturas do leito: (a) 16,4 mm, (b) 31,2 mm	

.....	105
Figura 24: Velocidade vertical média no tempo para o sólido em três alturas do leito: (a) 15 mm, (b) 25 mm, (c) 35 mm.....	106
Figura 25: Geometria do <i>hopper</i>	108
Figura 26: Estado inicial e final da fase sólida para partículas com diâmetro de 0,1 cm e $\varphi'=0,25$	111
Figura 27: Taxa de descarga para partículas com diâmetro de 0,1 cm e $\varphi'=0,25$	111
Figura 28: Taxa de descarga para partículas com diâmetro de 0,05 cm e $\varphi'=0,25$	112
Figura 29: Estado inicial e final da fase sólida para partículas com diâmetro de 0,05 cm e $\varphi'=0,001$	113
Figura 30: Taxa de descarga para partículas com diâmetro de 0,05 cm e $\varphi'=0,001$	114
Figura 31: Estado inicial e final da fase sólida para o caso polidisperso.....	115
Figura 32: Taxa de descarga para o caso polidisperso.....	116
Figura 33: Taxa de descarga com e sem a fase do gás.....	118
Figura 34: Taxa de descarga utilizando o modelo proposto por Wen e Yu versus Syamlal et al. para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface.....	119
Figura 35: Imagens da simulação para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 1,0$ s; (c) $t = 2,5$ s; (d) $t = 3,5$ s para partículas com diâmetro de I – 0,1 cm e II – 0,05 cm.....	122
Figura 36: Taxa de descarga para partículas com 0,05 cm de diâmetro.....	123
Figura 37: Taxa de descarga para partículas com 0,1 cm de diâmetro.....	123
Figura 38: Geometria do <i>hopper</i> tridimensional proposto por Li et al. (2004).....	125
Figura 39: Imagens da simulação para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t=0,5$ s; (b) $t = 2,0$ s; para três orifícios de saída I – 40 mm, II- 55 mm, III – 70 mm.....	128
Figura 40: Descarga do <i>hopper</i> para três orifícios de saída: (a) 40 mm, (b) 55 mm, (c) 70 mm.	129
Figura 41: Geometria do <i>hopper</i> tridimensional proposto por Tao et al. (2010).....	130
Figura 42: Imagens da simulação para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 1,0$ s; (c) $t = 6,0$ s; (d) $t = 12$ s.....	132
Figura 43: Fração da taxa de descarga.....	133
Figura 44: Esquema do algoritmo de busca para partículas de diferentes raios.....	160

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Parâmetros adimensionais para o modelo LSD.....	69
Tabela 2: Parâmetros adimensionais para o modelo HSD-A.....	76
Tabela 3: Parâmetros adimensionais para o modelo HSD-B.....	82
Tabela 4: Comparação dos valores de v_B^* utilizando vários modelos.....	88
Tabela 5: Comparação dos valores de $t_{c,n}^*$	90
Tabela 6: Parâmetros de simulação utilizado no leito fluidizado.....	102
Tabela 7: Valores dos parâmetros utilizados nas simulações numéricas do <i>hopper</i>	109
Tabela 8: Parâmetros de simulação utilizado no <i>hopper</i> tridimensional proposto por Li et al. (2004).....	126
Tabela 9: Parâmetros de simulação utilizado no <i>hopper</i> tridimensional proposto por Tao et al. (2010).....	131

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

S-S – teoria hidrodinâmica de dois fluidos para o cálculo do tensor das tensões sólidas do regime plástico, proposta por Srivastava e Sundaresan (2003).

S-R-O – teoria hidrodinâmica para o cálculo do tensor das tensões sólidas do regime plástico, proposta por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993).

TCEG – Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares.

MFIX – Multiphase Flow with Interphase eXchange.

MED – Método dos Elementos Discretos.

NETL – National Energy Technology Laboratory.

EDP – Equações Diferenciais Parciais.

TVD – Total Variation Diminishing.

LSD – modelo linear para o cálculo das forças de contato.

HSD-A – modelo não-linear para o cálculo das forças de contato, proposto por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992), no qual a força de amortecimento é proporcional a raiz quarta da sobreposição das partículas.

HSD-B – modelo não-linear para o cálculo das forças de contato, proposto por Hunt e Grossley (1975), no qual a força de amortecimento sendo proporcional a raiz quadrada da sobreposição das partículas.

SIMBOLOGIA

Latinos

A_I	Área da interface, $[\text{m}^2]$.
C	Constante empírica da correlação de Bevreloo.
C_{alm}	Coeficiente de atrito entre as fases l e m .
C_{Ds}	Função de arrasto para uma partícula num meio infinito.
d_p	Diâmetro da partícula, $[\text{m}]$.
D_m	Diâmetro da partícula utilizando o MED, $[\text{m}]$.
$\overline{\overline{D}}$	Tensor taxa de deformação, $[\text{s}^{-1}]$.
e	Coeficiente de restituição para a colisão entre as partículas sólidas.
e_w	Coeficiente de restituição para a colisão entre partículas e parede.
$\vec{f}$	Força de interação entre as fases, $[\text{N}/\text{m}^3]$.
$\vec{F}^M$	Força da mola, $[\text{N}]$.
$\vec{F}^A$	Força do amortecedor, $[\text{N}]$.
$\vec{F}_{arrasto}$	Força de arrasto, $[\text{N}]$.
$\vec{F}_{contato}$	Força de contato devido às colisões, $[\text{N}]$.
$\vec{F}_T$	Soma de todas as forças que agem em uma partícula, $[\text{N}]$.
$\vec{g}$	Aceleração da gravidade, $[\text{m}/\text{s}^2]$.
g_0	Função de distribuição radial.
I	Momento de Inércia de massa, $[\text{kg m}^2]$.
$\overline{\overline{I}}$	Tensor unitário.

I_{2D}	Segundo invariante do tensor taxa de deformação.
J_{col}	Taxa de dissipação de energia granular através das colisões inelásticas.
J_{vis}	Taxa de dissipação de energia granular através do amortecimento viscoso.
k	Célula computacional.
k_n	Coeficiente de rigidez da mola na direção normal, $[N/m]$.
k_t	Coeficiente de rigidez da mola na direção tangencial, $[N/m]$.
L	Distância do centro da partícula até o ponto de contato, $[m]$.
M	Número total de fases sólidas.
m_{ef}	Massa efetiva, $[kg]$.
N_m	Número total de partículas esféricas.
$\vec{n}$	Vetor unitário normal.
P	Pressão, $[Pa]$.
$\vec{q}$	Fluxo difusivo de energia granular, $[J/m^2 s]$.
r	Raio das partículas esféricas.
Re_s	Número adimensional de Reynolds para fase sólida.
t	Tempo, $[s]$.
$\vec{t}$	Vetor unitário tangente.
T	Torque, $[N m]$.
tr	Traço da matriz.
$\vec{u}_I$	Velocidade da interface, $[m/s]$.
$\vec{u}_k$	Velocidade da fase k , $[m/s]$.
v	Volume da partícula, $[m^3]$.
$\vec{v}_g$	Velocidade média local da fase gasosa, $[m/s]$.
$\vec{v}_s$	Velocidade média local da fase sólida, $[m/s]$.

V_{rs}	Correlação para a velocidade terminal para a fase sólida, [m/s] .
$\vec{V}$	Velocidade da partícula, [m/s] .
$\vec{\omega}$	Velocidade angular da partícula, [rad/s] .
$\vec{X}$	Posição da partícula, [m] .

Gregos

β	Coefficiente de arrasto na interface.
δ	Ângulo de atrito entre parede e partícula.
δ_n	Sobreposição das partículas na direção normal, [m] .
Δt	Passo de tempo, [s] .
ϕ	Ângulo de atrito interno.
φ'	Coefficiente de especularidade.
Γ_{dest}	Taxa de produção de energia granular pelo deslizamento gás-partícula.
ϵ_g	Fração do vazio.
ϵ_s	Fração volumétrica da fase sólida.
ϵ_g^*	Fração de vazio para mínima fluidização.
ϵ_s^*	Fração de sólido para a máxima compactação.
ϵ_s^{min}	Fração de sólido mínima.
η	Coefficiente da função de restituição.
η_n	Coefficiente de amortecimento na direção normal, [N s/m] .
η_t	Coefficiente de amortecimento na direção tangencial, [N s/m] .
θ	Temperatura granular, [m ² /s ²] .
λ	Viscosidade volumétrica, [kg/m s] .
μ	Viscosidade dinâmica, [kg/m s] .

ρ	Densidade, $[\text{kg}/\text{m}^3]$.
$\bar{\sigma}$	Tensor das tensões, $[\text{Pa}]$.
$\bar{\tau}$	Tensor das tensões viscosas, $[\text{Pa}]$.

Sobrescritos

p	Regime plástico.
v	Regime viscoso.
(i)	Partícula i .
(j)	Partícula j .

Subscritos

g	Fase gasosa.
ij	Entre as partículas i e j .
k	Fase k .
lm	Entre as fases sólidas l e m .
n	Direção normal.
t	Direção tangencial.
s	Fase sólida.
sm	Fase sólida m .

SUMÁRIO

I. INTRODUÇÃO.....	25
1.1 Objetivos.....	27
1.2 Organização da tese.....	30
II. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	32
2.1 Modelo contínuo.....	32
2.2 Modelo Discreto.....	35
2.3 Propostas de novas correlações de contato no modelo discreto.....	38
III. CONTEXTUALIZAÇÃO TEÓRICA.....	42
3.1 Modelo Contínuo.....	42
3.1.1 Procedimento geral para a formulação das equações fundamentais utilizando uma formulação diferencial.....	43
3.1.2 Equações fundamentais médias.....	45
3.1.3 Leis de fechamento.....	46
3.1.3.1 Tensor das tensões.....	47
3.1.4 Forças de interação das fases.....	49
3.1.5 Condições iniciais e de contorno.....	51
3.2 Modelo Discreto.....	52
3.2.1 Equações para a fase gasosa.....	52
3.2.2 Equações para a fase sólida.....	53
3.2.2.1 Forças de contato do modelo esfera suave.....	54
3.2.2.2 Estimativa da força de interação entre as fases gasosa e sólida.....	58
IV. ESTUDO DAS FORÇAS DE CONTATO DO MODELO ESFERA SUAVE PARA MODELOS LINEARES E NÃO-LINEARES.....	60

4.1 Forças de contato no modelo linear.....	61
4.2 Forças de contato no modelo não-linear – modelo Hertiziano.....	70
4.2.1 Modelo não-linear Hertiziano A (HSD-A):.....	72
4.2.2 Modelo não-linear Hertiziano B (HSD-B):.....	78
4.2.2.1 Relações para o cálculo do coeficiente de amortecimento do modelo não-linear Hertiziano B (HSD-B).....	85
4.2.2.2 Relações para o cálculo do tempo de contato do modelo não-linear Hertiziano B (HSD-B).....	89
V. METODOLOGIA.....	92
VI. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	95
6.1 Partícula em queda livre.....	96
6.2 Leito fluidizado tridimensional.....	101
6.3 Estudos numéricos da descarga de <i>hopper</i> bidimensional.....	107
6.3.1 Resultados comparativos: S-S x S-R-O.....	109
6.3.1.1 Resultados para os casos monodispersos.....	110
6.3.1.2 Resultados para o caso polidisperso.....	114
6.3.1.3 Correlação de Beverloo.....	116
6.3.2 Influência do gás em escoamentos granulares.....	117
6.3.2.1 Correlação de Beverloo.....	119
6.3.3 Resultados comparativos: Modelo Discreto (LSD e HSD-B) x Modelo Contínuo (S-S e S-R-O).....	120
6.3.3.1 Correlação de Beverloo.....	124
6.4 Estudos comparativos da descarga de <i>hopper</i> tridimensional.....	124
6.4.1 Comparação com os casos propostos por Li et al. (2004).....	125
6.4.2 Comparação com os casos propostos por Tao et al. (2010).....	130
VII. CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	134
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	137

APÊNDICE A – APRODUNDAMENTO TEÓRICO.....	149
A1 Tensor das tensões para a fase sólida no regime plástico.....	149
A1.1 Modelo proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993).....	150
A1.2 Modelo proposto por Srivastava e Sundaresan (2003).....	151
A2 Tensor das tensões para a fase sólida no regime viscoso.....	152
A3 Modelo hidrodinâmico de dois fluidos para escoamentos polidispersos.....	156
A4 Condições de contorno para os casos de <i>hopper</i>	157
A5 Solução Numérica – Modelo Contínuo.....	158
A6 Solução Numérica – Modelo Discreto.....	159
 APÊNDICE B – MATLAB®.....	 161
B1 Modelo LSD.....	161
B2 Modelo HSD-A.....	163
B3 Modelo HSD-B.....	165
B4 Cálculo da função de aproximação para v_B^*	167
B5 Comparação dos valores de v_B^*	169
B6 Cálculo da função de aproximação para o tempo de contato e comparação dos valores	170

I. INTRODUÇÃO

Fenômenos multifásicos são frequentemente observados na natureza, tais como nas gotas de chuva ou neve no ar, nos vulcões e tempestades de areia, e em diversas outras situações. Esses fenômenos também podem ser encontrados em várias indústrias, tanto de produção de energia e processamento químico quanto de produtos farmacêuticos.

A revolução industrial, juntamente com o surgimento da energia nuclear impulsionaram a necessidade de uma compreensão de toda a ciência básica, incluindo os escoamentos de multifásicos, com o estudo do vapor e água.

A simulação computacional, através de técnicas matemáticas e computacionais, com o intuito de imitar um processo ou operação do mundo real, é utilizada para estudar o comportamento dos escoamentos. Pode-se dizer que as simulações devem abranger desde a análise dos fenômenos, o desenvolvimento de modelos matemáticos até a elaboração de códigos computacionais para a obtenção das soluções desejadas. É uma área em expansão, devido ao fato de se diminuir significativamente os trabalhos laboratoriais, em conjunto com o avanço tecnológico na área computacional, com o aumento da velocidade e capacidade de armazenamento dos computadores, e, tem uma vasta aplicação, como por exemplo, no desenvolvimento de produtos industriais, pesquisas científicas básicas e aplicadas, simulações e previsões temporais e espaciais de fenômenos, dentre outras.

Para a modelagem de escoamentos de duas fases são utilizadas frequentemente duas abordagens: a Euleriana-Euleriana e a Euleriana-Lagrangiana. Na formulação Euleriana-Euleriana, as duas fases são interpretadas como contínuas, permitindo a obtenção de um modelo denominado modelo de duas fases separadas ou modelo contínuo. Esse modelo é geralmente obtido utilizando o procedimento das médias de Euler e constitui uma das principais formulações das equações de campo macroscópicas para um sistema bifásico. O

modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, para cada fase. Como ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo, termos devido a essa interação, que especificam os transportes de massa, quantidade de movimento e energia através da interface. A teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG) é utilizada para descrever as partículas sólidas, incrementando a formulação Euleriana-Euleriana, através da modelagem das flutuações da velocidade das partículas na forma de equações complementares (algébricas ou diferenciais).

Já na formulação Euleriana-Lagrangiana aplica-se a segunda lei de Newton para cada partícula do escoamento, permitindo uma análise individual das partículas através das interações partícula-partícula e partícula-parede. Utiliza-se uma descrição do contínuo para a fase do gás e sua forma geralmente é idêntica ao representado na formulação Euleriana-Euleriana. Em contraste, a fase dispersa (particulada) é tratada como sendo composta de elementos discretos ou partículas, que podem ser representadas por uma função de distribuição de partícula única. Esse tipo de modelo é conhecido como o método dos elementos discretos (MED) ou modelo discreto.

O pressuposto básico do modelo discreto é que durante um pequeno intervalo de tempo, os contatos entre as partículas existirão somente entre os vizinhos imediatos dessa partícula. As ações a qualquer partícula em qualquer momento estão limitadas aos diversos vizinhos dessa partícula. Portanto o modelo de contato utilizado nas simulações são de extrema importância e devem ser estudados ao se utilizar o MED, pois se não puderem ter uma boa aproximação do contato real entre as partículas, muitas vezes os resultados das simulações não serão satisfatórios.

Os dois modelos mais utilizados para descrever o contato entre as partículas são: o modelo esfera rígida e o modelo esfera suave. A diferença básica entre esses dois modelos está no tempo de colisão entre as partículas. No modelo esfera rígida as colisões entre as partículas são binárias e instantâneas, já no modelo esfera suave, os contatos podem ser multi-partículas, as quais são sobrepostas por um determinado intervalo de tempo.

Um modelo linear para o cálculo das forças de contato é amplamente utilizado em simulações MED por ser um modelo simples e com solução analítica para os parâmetros de colisão. No método linear, é preciso especificar valores para a rigidez da mola e para o

coeficiente de amortecimento.

O modelo não-linear para o cálculo das forças de contato considera a não-linearidade das forças conservativas e dissipativas. A força elástica conservativa é calculada com base na teoria de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970) e o coeficiente de rigidez não-linear pode ser estimado de acordo com as propriedades do material como o módulo de Young e o coeficiente de Poisson.

Existem diversos códigos computacionais utilizados para simular escoamentos gás-sólidos, tanto gratuitamente, tais como o CFDlib, OpenFoam e MFIX, quanto comercialmente, como por exemplo o Fluent e Barracuda.

1.1 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo geral estudar e desenvolver relações que descrevem o contato. Baseado nas relações existentes na literatura, este trabalho objetiva propor, por meio de um estudo teórico e numérico, novas relações para um mecanismo contínuo de contato de partículas ou corpos rígidos, testando-as em problemas de dinâmica, escoamento gás-sólido e granulares.

Para o desenvolvimento da presente pesquisa são realizados os seguintes passos:

- Pesquisa bibliográfica e estudo analítico.

Primeiramente realiza-se uma revisão das bibliografias existentes que envolvem os modelos de contato. Por meio da pesquisa, descobre-se que para descrever os mecanismos de contato entre as partículas são frequentemente utilizados dois modelos: o modelo de esfera rígida e o modelo de esfera suave. Diante das diferenças entre esses modelos, opta-se pela utilização do modelo de esfera suave, assumindo contatos não-instantâneos. Esse modelo possibilita a análise de algumas interações entre partículas e entre partículas e parede que não podem ser obtidas no modelo esfera rígida.

O modelo esfera suave consiste de um sistema dinâmico mola-massa-amortecedor, no

qual é possível de se obter contatos multi-partículas, e, o passo de tempo é determinado de tal forma que permita a permanência de contato entre as partículas por alguns instantes.

No modelo esfera suave dois tipos de abordagem para solução do contato podem ser utilizadas: o modelo linear, no qual a lei de Hook é usada para descrever a força elástica linear, conhecido por LSD - linear spring-dashpot, e o não-linear, baseado nos trabalhos de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970), conhecido como HSD - Hertzian spring-dashpot.

O modelo linear é bastante utilizado pois possui solução analítica para os parâmetros de colisão, e, se o valor do coeficiente de restituição for conhecido é possível calcular o coeficiente de amortecimento através de uma expressão analítica. Neste trabalho é realizado um estudo detalhado do modelo linear, LSD, o qual utiliza-se do programa MatLab[®] para a solução analítica e a confecção de gráficos e tabelas.

No modelo não-linear a força conservativa é calculada com base na teoria de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970), e, o coeficiente de rigidez de mola não-linear é estimado de acordo com as propriedades do material, como módulo de Young e coeficiente de Poisson. Para o cálculo da força dissipativa, o modelo não-linear pode ser dividido em dois outros modelos: um proposto por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992), nesta pesquisa denominado de HSD-A e outro, proposto por Hunt e Grossley (1975), chamado de HSD-B.

O modelo HSD-A possui solução analítica, porém admite comportamento não-físico, havendo uma descontinuidade nas acelerações iniciais e finais do contato. Nesta pesquisa, o modelo HSD-A é estudado analiticamente e sua solução é realizada com o auxílio do programa MatLab[®].

Já no modelo HSD-B as acelerações no início e no fim do contato são iguais, se aproximando do contato real, porém esse modelo não possui solução analítica. Para melhor compreender esse modelo é realizado um estudo detalhado, comparando as principais relações existentes na literatura para a sua solução. Baseando-se nessas relações e nos estudos realizados, neste trabalho são propostas relações para o cálculo do coeficiente de amortecimento e do tempo de contato, expressões aproximadas que relacionam o coeficiente de restituição com o coeficiente de amortecimento e com o tempo de contato. Com a utilização do programa MatLab[®] são realizadas: a solução do modelo HSD-B, elaboração de gráficos e tabelas, e, implementação de rotina para o cálculo das funções de aproximação do coeficiente

de amortecimento e do tempo de contato.

- Estudo numérico.

Após o desenvolvimento do estudo teórico e analítico, com a finalidade de verificar a adequabilidade das relações propostas, são realizados experimentos numéricos, utilizando o código computacional MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchange).

As relações propostas são aplicadas e analisadas em problemas de:

- ✓ Dinâmica: é analisada a cinemática de uma esfera em queda livre. Este é um problema trivial utilizado para o estudo de colisão;
- ✓ Escoamento gás-sólido – são discutidos os resultados obtidos da simulação de um leito fluidizado;
- ✓ Escoamentos granulares – é realizado um estudo da taxa de descarga de *hoppers*.
 - No estudo de *hopper* bidimensional são utilizadas duas teorias contínuas para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime plástico, uma proposta por Srivastava e Sundaresan (2003), o modelo S-S, e, outra proposta Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), o modelo S-R-O. Para essas teorias são analisados os casos monodispersos e polidispersos. É estudado também a influência do gás em escoamentos granulares. É realizado um estudo comparativo entre os modelos contínuos: S-S, S-R-O e os modelos discretos: LSD e HSD-B. Em todos os casos há uma comparação dos resultados obtidos com a correlação de Beverloo proposta por Beverloo, Leniger e Van de Velde (1961),
 - No estudo de *hopper* tridimensional são realizados dois estudos comparativos da taxa de descarga. A primeira análise é feita entre os modelos HSD-A, HSD-B, experimental e numérico propostos por Li et al. (2004). E, a segunda comparação é entre os modelos HSD-A, HSD-B, experimental e numérico propostos por Tao et al. (2010).

Logo, pode-se dizer que o objetivo específico e originalidade deste trabalho é de aprimorar o modelo de contato não-linear HSD-B, encontrando uma melhor maneira para o cálculo do coeficiente de amortecimento e tempo de contato em função do coeficiente de restituição. Essas relações propostas são fundamentadas em modelo dinâmico e contínuo para

o contato. Vale ressaltar que como o modelo proposto não está implementado no MFIX, é necessário fazer algumas alterações e acrescentar as relações propostas no código.

1.2 Organização da tese

Este trabalho está dividido em sete capítulos e dois apêndices. No capítulo I, há uma breve descrição dos escoamentos gás-sólidos e dos principais métodos de modelagem e solução das simulações envolvendo esse tipo de escoamento. Neste capítulo também são apresentados os objetivos da presente pesquisa.

No capítulo II é apresentada uma revisão bibliográfica sobre os modelos matemáticos utilizados nas simulações computacionais envolvendo escoamentos gás-sólido e granulares. Este capítulo está dividido em três partes: a primeira parte trata do modelo contínuo, a segunda, a respeito do modelo discreto e a terceira, sobre as principais relações disponíveis na literatura para descrever o contato no modelo discreto.

No capítulo III estão descritos os dois principais métodos de solução utilizados nesse trabalho: o modelo contínuo e o modelo discreto. O modelo contínuo baseia-se na formulação Euleriana-Euleriana e as duas fases são interpretadas como contínuas. Já o modelo discreto baseia-se na formulação Euleriana-Lagrangiana, onde aplica-se a segunda lei de Newton para cada partícula do escoamento, permitindo uma análise individual das partículas através das interações partícula-partícula e partícula-parede. Utiliza-se uma descrição do contínuo para a fase do gás e sua forma geralmente é idêntica ao representado na formulação Euleriana-Euleriana.

O modelo de força de contato utilizado nas simulações de escoamentos gás-sólidos e granulares, desempenha um papel de extrema importância no estudo do comportamento das partículas, pois se não for possível caracterizar o contato real entre as partículas, os resultados das simulações não serão razoáveis e satisfatórios, sendo assim, no capítulo IV é realizado um

estudo do modelo de esfera suave e de abordagens para a solução do contato. São estudados basicamente dois modelos: o modelo linear e o não-linear. A abordagem do modelo não-linear é dividida em duas partes: HSD – A e HSD – B. Para o modelo HSD-B, são propostas relações para o cálculo do coeficiente de amortecimento e para o cálculo do tempo de contato.

No capítulo V estão descritos a metodologia utilizada neste trabalho e as principais informações sobre o código MFIX.

No capítulo VI são apresentados os resultados obtidos das simulações computacionais e comparados com dados experimentais ou numéricos disponíveis na literatura. Esse capítulo está dividido em quatro itens: no primeiro item, é analisado um problema trivial utilizado para o estudo de colisão, no segundo item, são discutidos os resultados obtidos da simulação de um leito fluidizado e no terceiro e quarto itens, são estudados os comportamentos dos materiais granulares na taxa de descarga em *hoppers*.

No capítulo VII estão descritas as conclusões, considerações finais e recomendações para trabalhos futuros.

Já no Apêndice A, estão disponíveis os seguintes tópicos: tensor das tensões para a fase sólida no regime plástico: modelo proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) e modelo proposto por Srivastava e Sundaresan (2003) (item A1), tensor das tensões para a fase sólida no regime viscoso (item A2), modelo contínuo para escoamentos polidispersos (item A3), condições de contorno para os casos do *hopper* (item A4), solução numérica: modelo contínuo (item A5) e solução numérica: modelo discreto (item A6).

E por fim, no Apêndice B, são apresentadas as rotinas desenvolvidas no programa MatLab® para calcular os parâmetros dos modelos de contato descritos no capítulo IV.

II. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica sobre os modelos matemáticos utilizados na presente pesquisa está descrita neste capítulo. A primeira seção trata dos assuntos relacionados ao modelo contínuo (modelagem Euleriano-Euleriano), a segunda, a respeito do modelo discreto (modelagem Euleriano-Lagrangiano), e, para o modelo discreto são apresentadas as principais relações disponíveis na literatura para descrever o contato de partículas.

2.1 Modelo contínuo

Uma importante área dentro da mecânica dos fluidos computacional é a simulação de escoamentos gás-sólido, devido a sua aplicabilidade industrial. No estudo de escoamentos bifásicos frequentemente descreve-se os modelos hidrodinâmicos de duas fases ou modelos contínuos, os quais tratam o fluido e o sólido como duas fases separadas contínuas, onde todas as partículas são consideradas idênticas, caracterizadas por um diâmetro efetivo e com propriedades de materiais idênticas.

Neste contexto, Cowin (1974) descreve uma teoria do contínuo para materiais granulares incompressíveis, onde estuda o fluxo dos materiais granulares com baixa tensão. A motivação para desenvolver a teoria origina-se dos muitos trabalhos experimentais que mostram a relação entre a fração do vazio, aplicação da tensão e o movimento do material

granular. Seguindo essa mesma linha, Drew (1983), empregando médias estatísticas, analisa as características do escoamento bifásico, descrevendo todo o modelo hidrodinâmico baseado na teoria do contínuo, ou seja, na ideia de que cada material, tanto o gás quanto o sólido, ocupam a mesma região no espaço, originando assim, um “novo” material, que por sua vez, consiste na interação da fase gás com a sólida.

Já Kuipers et al. (1993) propõem um modelo hidrodinâmico de duas fases para analisar os perfis de bolhas em um leito fluidizado com jato central. Os resultados obtidos são comparados com outros experimentais e os autores concluem que o modelo é adequado para estudos de comportamento de bolhas.

Mostrando a sua vasta aplicabilidade, Yalamanchili, Gudhe e Rajagopal (1994) estudam o fluxo de material granular sob o efeito da gravidade em um canal vertical, usando um modelo contínuo para descrever a reação do material granular. As equações fundamentais que descrevem o modelo são resolvidas numericamente e comparadas com dados disponíveis na literatura, obtendo boa concordância.

Pensando em aprimorar o modelo contínuo, Sun e Battaglia (2006) desenvolvem uma formulação hidrodinâmica baseada no método de Euler e na incorporação de partículas com rotação usando a teoria cinética dos escoamentos granulares. Simulações sem e com as partículas com rotação são realizadas para estudar a dinâmica de bolhas em um leito fluidizado borbulhante. Os resultados são comparados com dados experimentais e pode-se verificar que o modelo proposto, utilizando as partículas com rotação, capta melhor a dinâmica de bolhas, ou seja, aproxima-se mais dos resultados experimentais. Com o mesmo intuito, Makkawi, Wright e Ocone (2006) utilizam a tomografia por capacitância elétrica para analisar as características hidrodinâmicas, tais como, distribuição dos sólidos e formas de bolhas, em um leito fluidizado borbulhante, e, comparam com os resultados obtidos utilizando o código computacional MFIX. O estudo mostra que o código MFIX fornece melhores resultados ao se implementar as forças de colisão-atrito e de coesão, tornando-o mais eficaz na previsão das características hidrodinâmicas.

Pensando em testar dois modelos contínuos, Benyahia (2008) realiza um estudo comparativo entre os modelos: S-S, proposto por Srivastava e Sundaresan (2003) e o S-R-O, proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993). A primeira comparação realizada é utilizando como exemplo a descarga de partículas de um *hopper* bidimensional. Os resultados são comparados com uma correlação empírica para a taxa de descarga proposta por Beverloo,

Leniger e Van de Velde (1961), mostrando-se adequados. O segundo exemplo envolve uma comparação mais detalhada das variáveis de fluxo, utilizando o método dos elementos discretos para validar os outros dois modelos. Ambas as teorias mostram tendências semelhantes às do MED, no entanto, o modelo S-S apresenta uma maior concordância, e, por este motivo, pode-se concluir que tal técnica é apropriada para resolver problemas de escoamentos granulares.

Yu et al. (2015) analisam a teoria do contínuo através de dados experimentais, utilizando escoamento granular, a fim de aprimorar a combinação existente entre os regimes viscoso e plástico.

Já Upadhyay e Park (2015) testam o modelo de dois fluidos acoplado com a teoria dos escoamentos granulares, em um leito fluidizado circulante bidimensional para compreender a influência de vários parâmetros presentes nas simulações de escoamentos gás-sólido, tais como, coeficiente de especularidade e coeficiente de restituição. Nessa mesma linha, Shah et al. (2015) estudam no modelo contínuo, os efeitos das leis de fechamento para escoamentos viscosos, a influência do coeficiente de arrasto e do coeficiente de especularidade em escoamentos em tubos verticais, comparando os resultados com dados experimentais. Ainda pensando na influência dos parâmetros físicos nas simulações, mas com foco nas colisões, Zhao, Lu e Zhong (2015) analisam o coeficiente de atrito e os coeficientes de restituição normal e tangencial em um leito fluidizado borbulhante. A teoria hidrodinâmica é utilizada em conjunto com a teoria cinética dos escoamentos granulares e as condições de contorno foram inseridas com a finalidade de estudar esses três parâmetros colisionais.

Enfatizando o estudo na análise da correlação de arrasto, Shah et al. (2015) utilizam o modelo contínuo para prever o comportamento de um leito fluidizado circulante. Os autores testam duas correlações de arrasto e estudam o comportamento do leito para o caso polidisperso. Já Kallio, Peltola e Niemi (2015) utilizam o modelo hidrodinâmico para o estudo da correlação de arrasto em um leito fluidizado circulante tridimensional. Os resultados mostram que a correlação de arrasto proposta captura o comportamento do escoamento mesmo utilizando uma malha não muito refinada.

E por fim, Farzaneh et al. (2015) simulam um leito fluidizado borbulhante contendo combustível, para comparar três teorias hidrodinâmicas para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida para o regime de escoamento plástico, os modelos propostos por: Srivastava e

Sundaresan (2003), Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) e Jop, Forterre e Pouliquen (2005). As simulações mostram que os modelos propostos por Srivastava e Sundaresan (2003) e Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) subestimam as tensões de atrito, no entanto, o uso do modelo sugerido por Jop, Forterre e Pouliquen (2005) resultam em uma melhor predição dos movimentos das partículas de combustível no leito. A capacidade do último modelo é também demonstrada por análise estatística dos resultados experimentais e numéricos.

2.2 Modelo Discreto

Contrariamente à abordagem do modelo contínuo, onde considera a fase sólida como um contínuo, o modelo discreto permite uma visão microscópica do comportamento de um material granular, pois pode-se rastrear os parâmetros dinâmicos das partículas, tais como, a posição individual de cada material, a sua velocidade, aceleração e as forças que agem inter-partículas.

Cundall e Strack (1979) descrevem as principais características do método de elementos discretos e validam o modelo em mecanismos geotécnicos. Após a validação, pode-se concluir que o modelo discreto é um instrumento a ser utilizado na investigação do comportamento de escoamentos granulares. Já Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) utilizam o método dos elementos discretos para descrever o transporte pneumático. Os comportamentos observados nas simulações são bem realísticos e em concordância com vários artigos disponíveis na literatura.

Confirmando a aplicação do método dos elementos discretos em leitos fluidizados, Tsuji, Kawaguchi e Tanaka (1993) realizam um estudo em leitos fluidizados bidimensionais. As imagens obtidas das simulações são bem realistas, captando a formação de bolhas e sendo semelhantes aos casos experimentais.

Mishra e Rajamani (1994) utilizam o método de elementos discretos para estudar o comportamento das esferas caindo de um moinho. Os resultados das simulações numéricas são comparados com os dados experimentais obtendo uma boa concordância. Já Kawaguchi, Tanaka e Tsuj (1998) realizam um estudo comparativo em leitos fluidizados aplicando o

modelo em duas e três dimensões. Os resultados para ambos os casos, são comparados, concluindo que quando as partículas estão fluidizadas há uma concordância entre ambos modelos. Ainda em leitos fluidizados, Rhodes et al. (2001) utilizam o MED para analisar o comportamento de misturas. Os resultados das simulações indicam que a taxa da mistura de sólidos aumenta com o aumento da velocidade do gás.

Verificando a eficiência do modelo discreto, Cleary e Sawley (2002) utilizam o método para estudar as vazões mássicas de diferentes geometrias de *hopper* com variadas formas de partículas. Os resultados obtidos indicam que a forma das partículas é um fator importante ao se realizar simulações no MED, pois ao alterá-la vários outros fatores são modificados. A possibilidade de alteração na geometria das partículas, não sendo mais somente circulares, traz uma nova perspectiva da utilização do MED na indústria, pois aproxima a modelagem do MED à realidade, contribuindo fortemente para o processo de otimização e projeto de equipamentos.

Confirmando a acuracidade do MED, Li et al. (2004) comparam tanto experimentalmente quanto através de simulação, o comportamento das partículas na descarga de *hopper* 3D. Em geral, boa concordância entre os resultados experimentais e numéricos é encontrada, os autores constataam pequenas diferenças causadas pelas dificuldades práticas em combinar exatamente os parâmetros de partículas utilizadas nas simulações com os dados reais. No entanto, se concluiu que o MED pode ser considerado uma ferramenta adequada para analisar as interações entre partículas de forma irregular e demonstra um grande potencial na análise de estrutura de *hoppers*, podendo ser até mesmo utilizado na elaboração de projetos para diferentes geometrias de *hoppers*.

Ampliando a aplicação do método, Weber (2004) utiliza o modelo discreto para estudar e analisar leitos fluidizados com partículas coesivas. No trabalho de Ketterhagen et al. (2007) foi investigado a segregação de materiais. Fazendo uma compilação dos principais trabalhos encontrados na literatura, Zhu et al. (2007) revisam os principais artigos baseados na simulação discreta de partículas.

Com a finalidade de analisar os parâmetros que interferem na taxa de descarga de um *hopper*, Anand et al. (2008) utilizam o método dos elementos discretos para realizar estudos sobre os efeitos da variação do tamanho da partícula, da largura do *hopper*, do tamanho de seu orifício de saída e de sua altura, e, comparam com resultados experimentais disponíveis na

literatura, havendo boa concordância para todos os parâmetros investigados. Estes resultados evidenciam que o MED pode ser usados para prever o comportamento da descarga de materiais granulares de *hoppers*. Seguindo essa mesma linha, Ketterhagen et al. (2009) avaliam os efeitos do atrito e do ângulo do *hopper* em sua descarga e comparam com dados disponíveis na literatura, apresentando excelentes concordâncias. O nível de concordância mostrado neste trabalho indicam que o MED pode não apenas reproduzir as estimativas atuais de desempenho de *hoppers*, como também fornece informações adicionais para o fluxo, tal como, a estrutura granular interna que dificilmente é obtida.

Pensando na aplicabilidade do MED na agricultura, Tao et al. (2010) utilizam o método dos elementos discretos para simular a descarga de milho. Já Balevičius et al. (2011), utilizam o método dos elementos discretos para comparar e observar a descarga de materiais em diversos tipos de *hoppers*. Os resultados obtidos estão em concordância com os encontrados na literatura.

Verificando o método discreto, Garg et al. (2012) realizam uma série de testes envolvendo os diferentes aspectos do código MFIX, explorando aspectos físicos específicos em escoamentos gás-sólidos, para tanto utilizam problemas canônicos simples. Os autores também descrevem um detalhado equacionamento do método.

Testando a eficiência e a precisão do modelo discreto, Alobaid et al. (2014) investigam diferentes parâmetros importantes sob várias condições e diâmetros de partícula. Os resultados sugerem que a utilização de maiores valores para os coeficientes de rigidez de mola melhora a precisão da simulação, no entanto, o tempo computacional aumenta exponencialmente. Ainda estudando a influência dos parâmetros nas simulações MED, Paulick, Morgeneyer e Kwade (2015) revisam os principais trabalhos disponíveis na literatura e descobrem que o coeficiente de rigidez de mola, especialmente em escoamentos densos, deve ser escolhido cuidadosamente, mesmo que aumente o tempo computacional, pois tal parâmetro influencia diretamente os resultados das simulações.

Mostrando a variedade de aplicações do MED, Tiwari et al. (2014) estudam a dinâmica do impacto de um projétil incidindo normalmente sob um composto de partícula granulares pequenas. Os resultados indicam que o nível de profundidade de penetração é consistente com as observações experimentais para impactos com baixas velocidades.

Já Zhang et al. (2015) utilizam o modelo discreto para estudar o comportamento de um escoamento com turbulência em um duto quadrado. Os resultados demonstram que o

comportamento das partículas pode ser afetado pelas colisões. Portanto, é essencial utilizar um método eficaz para tratar as colisões de partículas.

Jalali e Hyppänen (2015) comparam o modelo contínuo com o modelo discreto, através do comportamento de uma mistura binária. Os resultados obtidos revelam que as simulações MED são mais precisas que as hidrodinâmicas, podendo captar, por exemplo, como a temperatura granular é distribuída entre as partículas de diferentes tamanhos durante os contatos. Tais dados, podem então ser utilizados para apresentar fatores de correção em simulações hidrodinâmicas.

2.3 Propostas de novas correlações de contato no modelo discreto

O modelo de contato no MED desempenha um papel crítico na simulação do comportamento das partículas, pois se não puder caracterizar o contato real entre as partículas, os resultados das simulações não serão satisfatórios. Sendo assim, é importante estudar o modelo de contato entre as partículas e seus respectivos parâmetros, tais como a rigidez, amortecimento, entre outros.

Há basicamente dois modelos de contato utilizados no MED, o modelo esfera rígida, proposto primeiramente por Allen e Tildesley (1989) e o modelo esfera suave, proposto por Cundall e Strack (1979).

No modelo esfera rígida, as colisões são entre duas partículas e instantâneas, e, o passo de tempo é baseado no tempo de colisão mínimo entre qualquer par de partículas. Já na modelagem esfera suave, uma mola é empregada para modelar a parte elástica e um amortecedor é adotado para descrever o mecanismo de dissipação de energia cinética. No contato entre as partículas, há uma pequena sobreposição e as forças de contato são calculadas com base no histórico de deformação.

Diversos autores utilizam a modelo esfera rígida. Hoomans et al. (1996) usam esse modelo para analisar o comportamento das partículas na formação de bolhas e durante o processo de segregação em leitos fluidizados. Já Goldschmidt, Beetstra e Kuipers (2004)

realizam uma comparação entre o modelo esfera rígida, o modelo contínuo e testes experimentais, utilizando um leito fluidizado. Os resultados indicam que o modelo esfera rígida se aproxima dos dados experimentais para o caso estudado. Ainda focando na utilização do modelo, Lu et al. (2005) investigam o comportamento das partículas em um leito fluidizado. Os autores concluem que o modelo esfera rígida pode fornecer informações detalhadas das partículas, no entanto, requer um elevado tempo computacional. De acordo com Müller e Pöschel (2012) há algumas limitações na utilização do modelo esfera rígida, dependendo do material e dos parâmetros do sistema. Wang et al. (2015) utilizam o modelo para investigar o comportamento de um leito fluidizado borbulhante sob o efeito de diversos valores para a gravidade. Os resultados indicam que o comportamento das bolhas são significativamente alterados pelas mudanças da gravidade.

A modelagem esfera suave é mais comumente utilizada nas simulações MED devido a sua simplicidade e eficácia. Esse modelo possibilita a análise de algumas interações entre partículas e entre partículas e parede que não podem ser obtidas no modelo esfera rígida.

Utilizando o modelo esfera suave, Haff e Werner (1986) analisam o comportamento de vários grãos dentro de um recipiente sob efeito de vibração. Já Benyahia e Janine (2010) estudam duas configurações disponíveis na literatura, cuja finalidade é diminuir o tempo computacional das simulações utilizando o método discreto em conjunto com o modelo esfera suave. Gopalakrishnan e Tafti (2013) desenvolvem um algoritmo de solução para a simulação MED utilizando o MFIX, o método foi testado mostrando-se eficiente.

No modelo esfera suave há praticamente dois tipos de abordagem para solução do contato: a linear e a não-linear. O modelo linear é bastante utilizado pois possui solução analítica para os parâmetros de colisão. Pensando nisso, Foerster et al. (1994) realizam um experimento para medir as propriedades das colisões entre duas pequenas esferas ou entre uma esfera pequena e uma superfície e comparam com o modelo. Já Shäfer, Dippel e Wolf (1996) estudam as propriedades presentes no impacto de partículas e comparam com dados experimentais. Os resultados mostram que o modelo linear não tem parâmetros livres, tendo em vista que o coeficiente de rigidez de mola e de amortecimento podem ser ajustados pelo coeficiente de restituição e o tempo de contato, ou seja, as relações para o coeficiente de rigidez de mola e de amortecimento podem ser escritas como uma função do coeficiente de restituição e do tempo de contato.

Seguindo essa mesma linha, Stevens e Hrenya (2005) discutem um critério de escolha

dos parâmetros de entrada, tais como, coeficiente de rigidez e amortecimento, baseados no tempo de contato. Além disso, os autores comparam algumas relações propostas com dados experimentais, descobrindo que tanto o coeficiente de restituição quanto o tempo de contato diminuem com o aumento da velocidade de impacto. Para o modelo linear, se o valor do coeficiente de restituição for conhecido é possível calcular o coeficiente de amortecimento através de uma expressão analítica.

No modelo não-linear a força conservativa é calculada com base na teoria de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970), e, o coeficiente de rigidez de mola não-linear é estimado de acordo com as propriedades do material, como módulo de Young e coeficiente de Poisson. O modelo não-linear pode ser dividido em dois outros modelos: um proposto por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) e outro por Hunt e Grossley (1975). A diferença básica entre esses dois modelos não-lineares está no cálculo da força de amortecimento não-conservativa.

No primeiro modelo, a força de amortecimento é proporcional a raiz quarta da sobreposição das partículas. Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) utilizam essa relação na simulação de partículas coesivas em um duto horizontal.

Ao considerar a força de amortecimento sendo proporcional a raiz quadrada da sobreposição das partículas, está definindo-se o segundo modelo. Hunt e Grossley (1975) o propõem para colisão de esferas viscoelásticas. Pode-se dizer que esse modelo é contínuo para as forças de contato, pois não apresenta descontinuidade no início e fim do contato entre as partículas.

O modelo proposto por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) possui solução analítica, conforme verificado por Antypov e Elliott (2011), no entanto Zhang e Whiten (1996) analisam a precisão desse modelo e encontram alguns problemas. Em resumo, eles descobrem que o modelo admite comportamento não-físico. Tal comportamento pode ser observado, também no trabalho de Navarro e Souza Braun (2013), os autores relatam que tanto no modelo linear quanto no não-linear proposto por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) há uma descontinuidade nas acelerações iniciais e finais do contato, já no modelo proposto por Hunt e Grossley (1975), pode-se dizer que o modelo é contínuo para o contato, pois a aceleração começa e termina no mesmo valor, se aproximando do contato real.

Pensando em aprimorar o modelo proposto por Hunt e Grossley (1975), Flores et al. (2011) propõem uma nova abordagem para o cálculo da força de contato, resultando em uma

expressão matemática que é válida para uma faixa de valores do coeficiente de restituição.

Já Alves et al. (2015) apresentam um estudo comparativo sobre os modelos de força de contato mais relevantes existentes, baseados no modelo proposto por Hunt e Grossley (1975). Os autores examinam as características fundamentais e o desempenho de cada modelo porque foi dada ênfase especial para abordagens dissipativas, todas baseadas no amortecimento interno. Os resultados indicam que a previsão do comportamento dinâmico do contato entre as partículas depende fortemente da seleção do modelo de força de contato.

Pensando na importância do modelo de contato, este trabalho objetiva aprimorar o modelo de contato não-linear proposto por Hunt e Grossley (1975), encontrando uma melhor relação para o cálculo do coeficiente de amortecimento e do tempo de contato, expressões aproximadas, que escrevem o coeficiente de amortecimento e o tempo de contato em função do coeficiente de restituição. Essas relações, além de oferecerem uma abordagem simples de se implementar no código MFIX, também contribuem para a diminuição do tempo computacional das simulações.

III. CONTEXTUALIZAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo são detalhados dois modelos matemáticos que descrevem o comportamento dos escoamentos gás-sólidos: o modelo contínuo, baseado na modelagem Euleriano-Euleriano e o modelo discreto, baseado na modelagem Euleriano-Lagrangiano.

No modelo contínuo, as duas fases são interpretadas como contínuas, permitindo uma visão macroscópica do comportamento do escoamento, sendo mais indicado em simulações que envolvem uma grande quantidade de sólido. Já a abordagem do modelo discreto permite uma análise individual das partículas através das interações partícula-partícula e partícula-parede. Essa abordagem é geralmente restrita ao número de partículas, devido às limitações computacionais, no entanto, ao se utilizar o modelo discreto obtém-se resultados mais realísticos.

As modelagens matemáticas utilizadas nas simulações são descritas em duas seções: na primeira é exposto o modelo contínuo e na segunda é detalhado o modelo discreto.

3.1 Modelo Contínuo

A formulação do modelo hidrodinâmico está disponível nos trabalhos de Gidaspow (1994) e Enwald, Peirano e Almstedt (1996). Convém ressaltar que o modelo hidrodinâmico, descrito neste trabalho, assume a não existência de transferência de massa e energia entre as

fases, ou seja, considera-se as fases não reagentes e trata-se de um modelo isotérmico para ambas as fases, gás e sólida, e está apresentado, como modelo hidrodinâmico A no trabalho de Gidaspow (1994). A Figura 1 ilustra o esquema da formulação do modelo contínuo descrito por Enwald, Peirano e Almstedt (1996).

Figura 1: Procedimento geral para formulação do modelo contínuo apresentado por Enwald, Peirano e Almstedt (1996).

3.11 Procedimento geral para a formulação das equações fundamentais utilizando uma formulação diferencial

A modelagem matemática consiste em um sistema de equações diferenciais parciais formulada utilizando o modelo de duas fases separadas, proposto por Enwald, Peirano e Almstedt (1996). Inicia-se com os balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia, considerando um volume de controle fixo que contém a fase k , k_1 para a fase do gás

e k_2 para a fase sólida, separadas por uma interface de área $A_I(t)$ que se move a uma velocidade $\vec{u}_I$ que pode ser diferente da velocidade das fases $\vec{u}_k$, observar Figura 2.

Figura 2: Volume de controle fixo contendo duas fases com interface móvel.

Após formular os balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia, aplica-se o Teorema de Leibniz e o Teorema de Gauss, assim, os balanços integrais dão origem a dois tipos de equações locais: as equações locais instantâneas para cada fase e as equações de salto locais instantâneas, que representam a interação entre as duas fases. As equações locais instantâneas e as equações de salto instantâneas, são de extrema importância pois constituem a base fundamental para todos os modelos bifásicos, tal procedimento pode ser encontrado com maiores detalhes em Enwald, Peirano e Almstedt (1996).

Posteriormente, com a finalidade de eliminar os efeitos de flutuações instantâneas locais do escoamento multifásico aplica-se o procedimento de médias de Euler nas equações locais, possibilitando a obtenção de valores médios dos movimentos e propriedades do escoamento.

Basicamente, o procedimento para obtenção das equações médias é dividido em duas

etapas. Primeiro multiplica-se as equações locais por uma função indicador de fase, e, em seguida, as médias de produtos são transformadas em produtos de médias, aplicando a decomposição de Reynolds e médias ponderadas de variáveis dependentes. Após isso, variáveis relacionadas aos termos de interação na interface aparecerão nas equações. Um maior detalhadamente deste procedimento é apresentado no trabalho de Enwald, Peirano e Almstedt (1996).

Aplicando-se o procedimento das médias de Euler nas equações locais, obtém-se as equações médias de conservação da massa e de quantidade de movimento para a fase gasosa e sólida, respectivamente.

3.1.2 Equações fundamentais médias

- Equação de Conservação da Massa para a Fase Gasosa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (1)$$

- Equação de Conservação da Massa para a Fase Sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_s \rho_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2)$$

Nas equações de conservação de massa, equações (1) e (2), o primeiro termo da esquerda representa a variação temporal de acúmulo de massa por unidade de volume e o segundo termo representa a variação de fluxo de massa convectivo, onde ϵ_g é a fração de vazio para a fase gás e ϵ_s é a fração de sólido, ρ_g e ρ_s retratam a densidade das duas fases, e, $\vec{v}_g$ e $\vec{v}_s$ são as velocidades médias locais das fases.

- Equação de Quantidade de Movimento para a Fase Gasosa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma}_g + \epsilon_g \rho_g \vec{g} - \vec{f} \quad (3)$$

- Equação de Quantidade de Movimento para a Fase Sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_s \rho_s \vec{v}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_s \vec{\sigma}_s) + \epsilon_s \rho_s \vec{g} + \vec{f} \quad (4)$$

Nas equações de quantidade de movimento, equações (3) e (4), o primeiro termo da esquerda representa a taxa líquida de aumento da quantidade de movimento, o segundo termo da esquerda retrata a transferência de quantidade de movimento por convecção e os termos que envolvem os tensores das tensões, do lado direito das equações, reproduzem as forças de superfície normal e de cisalhamento, onde, $\vec{\sigma}_g$ e $\vec{\sigma}_s$ são os tensores das tensões das duas fases, $\vec{f}$ é a força de interação entre as duas fases por unidade de volume e $\vec{g}$ é o vetor aceleração do campo gravitacional.

Para modelar os novos termos que aparecem nas equações (3) e (4), necessita-se de modelos adicionais denominados leis de fechamento, descrito no item 3.1.3 deste capítulo. Para completar o modelo de duas fases são estabelecidas as condições iniciais e de contorno, descritas no item 3.1.5.

3.1.3 Leis de fechamento

Para se obter o sistema fechado geral das equações diferenciais parciais que modelam um escoamento gás-sólido é necessário especificar as leis de fechamento, que são classificadas em três tipos: constitutivas, de transferência e topológicas.

Leis Constitutivas: especificam como as propriedades físicas das fases se relacionam, mas não descrevem parâmetros de transporte entre as fases na interface. Modelam propriedades tais como: tensor das tensões, viscosidade dinâmica, viscosidade volumétrica e pressão para ambas as fases.

Leis de Transferência: são equações empíricas que descrevem as diferentes interações entre as fases que ocorrem na interface. Modelam as propriedades que ocorrem na interface entre as fases.

Leis Topológicas: descrevem a distribuição espacial de uma variável específica do escoamento analisado.

Neste trabalho serão apresentadas somente as leis constitutivas, utilizadas para modelar as propriedades do escoamento, descritas no item 3.1.3.1.

3.1.3.1 Tensor das tensões

O tensor das tensões da fase k , $\bar{\bar{\sigma}}_k$, é determinado por:

$$\bar{\bar{\sigma}}_k = -p_k \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_k \quad (5)$$

onde, p_k representa a pressão, $\bar{\bar{I}}$ é o tensor unitário e $\bar{\bar{\tau}}_k$ é o tensor das tensões viscosas e refere-se ao movimento.

O tensor das tensões viscosas para a fase do gás é modelado assumindo a relação tensão/deformação para um fluido Newtoniano, dado por:

$$\bar{\bar{\tau}}_g = 2\epsilon_g \mu_g \bar{\bar{D}}_g + \epsilon_g \lambda_g \text{tr}(\bar{\bar{D}}_g) \bar{\bar{I}} \quad (6)$$

onde, μ_g e λ_g são as viscosidades dinâmica e volumétrica da fase gasosa, respectivamente, e, $\bar{\bar{D}}_g$ representa o tensor taxa de deformação e é descrito como:

$$\bar{\bar{D}}_g = \frac{1}{2} \left[\vec{\nabla} \vec{v}_g + (\vec{\nabla} \vec{v}_g)^T \right] \quad (7)$$

Considerando a hipótese de Stokes:

$$\lambda_g = -\frac{2}{3} \mu_g \quad (8)$$

Substituindo as equações (7) e (8) na equação (6), o tensor das tensões viscosas da fase gasosa é expresso por:

$$\bar{\bar{\tau}}_g = \epsilon_g \mu_g \left[\vec{\nabla} \vec{v}_g + (\vec{\nabla} \vec{v}_g)^T - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_g \bar{\bar{I}} \right] \quad (9)$$

Logo, substituindo a equação (9) na equação (5), o tensor das tensões para a fase do gás é dado por:

$$\bar{\sigma}_g = -p_g \bar{I} + \epsilon_g \mu_g \left[\vec{\nabla} \vec{v}_g + (\vec{\nabla} \vec{v}_g)^T - \frac{2}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_g \bar{I} \right] \quad (10)$$

A modelagem do tensor das tensões para a fase sólida é mais complexa, pois se assumir a mesma hipótese de fluido Newtoniano para o particulado obtém-se uma aproximação muito grosseira, logo, para contornar esse problema, o tensor das tensões desta fase deve ser modelado utilizando teorias propostas na literatura que descrevem escoamentos granulares.

Segundo Jenkins e Cowin (1979), os escoamentos granulares podem ser classificados em dois regimes, viscoso ou rápido, no qual a tensão é causada por colisões entre as partículas, e, plástico ou lento, no qual a tensão é causada devido ao atrito entre elas (observar Figura 3).

Figura 3: Regime plástico e viscoso para escoamentos granulares.

Para se calcular o tensor das tensões, Srivastava e Sundaresan (2003) assumem o tensor das tensões da fase sólida, $\bar{\sigma}_s$, como uma simples soma do tensor das tensões cinético, $\bar{\sigma}_s^v$, com o tensor das tensões de atrito, $\bar{\sigma}_s^p$, da seguinte maneira:

$$\bar{\sigma}_s = \bar{\sigma}_s^v + \bar{\sigma}_s^p \quad (11)$$

Tal formulação captura os dois limites extremos de um escoamento granular, o regime viscoso, onde a contribuição dominante se dá devido à cinética do escoamento e o regime

plástico, onde o atrito é dominante.

No trabalho de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), para o cálculo do tensor das tensões, são combinadas, a teoria cinética dos escoamentos granulares, descrita por Jenkins e Savage (1983), usada para escoamentos dispersos (rápidos), com a teoria do estado crítico de Schaeffer (1987) utilizada para escoamentos densos (lentos), por meio de uma chave no ponto crítico para a fração de sólido para máxima compactação, alternando a formulação do tensor das tensões da fase sólida da seguinte maneira:

$$\bar{\bar{\mathbf{O}}}_s = \begin{cases} -p_s^p \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \bar{\bar{\tau}}_s^p & \text{se } \epsilon_s^* \leq \epsilon_s \\ -p_s^v \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \bar{\bar{\tau}}_s^v & \text{se } \epsilon_s^* > \epsilon_s \end{cases} \quad (12)$$

onde, ϵ_s^* é a fração de sólido para a máxima compactação e os sobrescritos p e v indicam os regimes plástico e viscoso, respectivamente.

No APÊNDICE A – APRODUNDAMENTO TEÓRICO - A1 - Tensor das tensões para a fase sólida no regime plástico, encontra-se a descrição de dois modelos propostos para cálculo do tensor das tensões da fase sólida no regime plástico. O primeiro é o método proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (item A1.1) que tem sido tradicionalmente usado no código MFIX, já o segundo, é o proposto por Srivastava e Sundaresan (2003) (item A1.2), que se baseiam nos trabalhos descritos por Savage (1998) e Johnson e Jackson (1987) e, sugerem um novo modelo para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida no regime plástico.

3.1.4 Forças de interação das fases

Há diversas forças de interação entre as fases descritas na literatura, entretanto, neste trabalho, considera-se que a principal contribuição das forças de interação entre as fases é a força de arrasto, causada pela diferença de velocidade entre as fases.

A força de arrasto pode ser modelada através de dois procedimentos gerais: a partir de correlações para o coeficiente de arrasto sobre uma partícula numa suspensão de partículas,

C_{Ds} , ou, a partir da queda de pressão por unidade de comprimento em uma suspensão de partículas, $\Delta P/L$. Independentemente do procedimento adotado, a força de arrasto é definida em função da velocidade relativa entre as fases e do coeficiente de transferência de quantidade de movimento na interface, denominado coeficiente de arrasto na interface, β . Logo, a expressão para a força de arrasto entre as fases gás e sólida é dada por:

$$\vec{f} = \beta (\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (13)$$

onde o coeficiente de arrasto na interface β depende do procedimento adotado.

Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) propõem um modelo para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface baseado em medidas de velocidades terminais das partículas da seguinte forma:

$$\beta = \frac{3}{4} \frac{C_{Ds}}{V_{rs}^2} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \quad (14)$$

onde V_{rs} é a velocidade terminal da fase sólida, calculada conforme proposto por Garside e Al-Dibouni (1977):

$$V_{rs} = 0,5 \left[A - 0,06 Re_s + \sqrt{(0,06 Re_s^2) + 0,12 Re_s (2B - A) + A^2} \right] \quad (15)$$

onde:

$$A = \epsilon_g^{4,14} \quad (16)$$

$$B = \begin{cases} 0,8 \epsilon_g^{1,28} & \text{se } \epsilon_g \leq 0,85 \\ \epsilon_g^{2,65} & \text{se } \epsilon_g > 0,85 \end{cases} \quad (17)$$

o número de Reynolds para a fase sólida, Re_s é dado por:

$$Re_s = \frac{\epsilon_s \rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_s| d_p}{\mu_g} \quad (18)$$

e o coeficiente de arrasto, C_{Ds} , é baseado nos estudos de Dalla Valle (1948) e expresso por:

$$C_{Ds} = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{V_{rs}}{Re_s}} \right) \quad (19)$$

Já Wen e Yu (1966) apresentam a seguinte equação para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface:

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \rho_g \epsilon_g \epsilon_s \epsilon_g^{-2,65} \quad (20)$$

onde:

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0,15 Re_s^{0,687}) & \text{se } Re_s < 1000 \\ 0,44 & \text{se } Re_s \geq 1000 \end{cases} \quad (21)$$

com Re_s calculado por meio da equação (18).

Baseado nos trabalhos de Ergun (1952) e Wen e Yu (1966), Gidaspow (1994) deriva uma expressão para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface como:

$$\beta = \begin{cases} \frac{150 \epsilon_s (1 - \epsilon_s) \vec{v}_g + \frac{1,75 \rho_g \epsilon_s |\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p}}{\epsilon_g d_p^2} & \text{se } \epsilon_g < 0,8 \\ \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \rho_g \epsilon_g \epsilon_s \epsilon_g^{-2,65} & \text{se } \epsilon_g \geq 0,8 \end{cases} \quad (22)$$

onde C_{Ds} é calculado por meio da equação (21).

3.1.5 Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais e de contorno devem ser definidas de acordo com o problema proposto, através dos parâmetros ϵ_s , ϵ_g , P_g , v_s , v_g , dentre outros, no local desejado.

As condições de contorno podem ser do tipo: fluxo de entrada ou fluxo de saída, os quais a massa ou a pressão podem ser constantes. É possível também determinar as condições de contorno da parede como: impermeável (externa ou interna), permeável (interna ou externa) ou semipermeável (interna)

As condições iniciais e de contorno, para os casos simulados estão expostas com maiores detalhes nos resultados e/ou no APÊNDICE A – APRODUNDAMENTO TEÓRICO – A4 onde se define os parâmetros utilizados em cada caso investigado.

3.2 Modelo Discreto

Com a frequente evolução na velocidade dos computadores, juntamente com o método dos elementos discretos (MED) é possível realizar simulações cada vez mais precisas, inclusive, as que podem fornecer informações dinâmicas do escoamento, tais como, as trajetórias e as forças transientes agindo individualmente sobre as partículas, o que é extremamente difícil, senão impossível, de se obter através de ensaios experimentais.

A principal formulação utilizada neste capítulo consiste no método dos elementos discretos, que se baseia na formulação Euleriana-Lagrangiana. Nessa abordagem, cada partícula é modelada individualmente através da segunda lei de Newton e o fluido é considerado contínuo e é modelado através das equações de Navier-Stokes e está disponível no trabalho de Garg et. al. (2012).

3.2.1 Equações para a fase gasosa

Como citado anteriormente, no MED o gás é modelado como contínuo, logo sua formulação é idêntica à descrita no item 3.1 Modelo Contínuo. Cumpre salientar que o termo que representa as forças de interação entre a fase gasosa e a fase sólida, $\vec{f}$, da equação (3),

apresentado no modelo contínuo, é calculado de maneira diferente ao se utilizar o MED, e está descrito no item 3.2.2.2 que trata da Estimativa da força de interação entre as fases gasosa e sólida.

3.2.2 Equações para a fase sólida

No MED uma fase sólida m é representada por um número de partículas N_m , que no presente trabalho são tratadas como esféricas, sendo que cada partícula possui diâmetro D_m e densidade ρ_m . Cada fase sólida é diferenciada de acordo com o diâmetro e a densidade das partículas. Para um total de fases sólidas M , o número total de partículas é:

$$N = \sum_{m=1}^M N_m \quad (23)$$

Essas N partículas são representadas no tempo utilizando a formulação Lagrangiana da seguinte maneira:

$$\{ \vec{X}^{(i)}(t), \vec{V}^{(i)}(t), \vec{\omega}^{(i)}(t), D^{(i)} \text{ e } \rho^{(i)} \text{ com } i=1, \dots, N \} \quad (24)$$

sendo que $\vec{X}^{(i)}(t)$ denota a posição da partícula i no instante t , $\vec{V}^{(i)}(t)$ e $\vec{\omega}^{(i)}(t)$ são as velocidades linear e angular, respectivamente, $D^{(i)}$ é o diâmetro e $\rho^{(i)}$ a densidade da partícula i .

A posição e a velocidade linear, de cada partícula i , com massa $m^{(i)}$ no sistema são relacionadas de acordo com a segunda lei de Newton como:

$$\frac{d \vec{X}^{(i)}(t)}{dt} = \vec{V}^{(i)}(t) \quad (25)$$

$$m^{(i)} \frac{d \vec{V}^{(i)}(t)}{dt} = \vec{F}_T^{(i)} = m^{(i)} \vec{g} + \vec{F}_{contato}^{(i)} + \vec{F}_{arrasto}^{(i \in k, m)} \quad (26)$$

onde $\vec{g}$ é a aceleração da gravidade, $\vec{F}_{contato}^{(i)}$ são as forças de contato devido às colisões, $\vec{F}_{arrasto}^{(i \in k, m)}$ são as forças de arrasto (pressão + forças viscosas) sobre a partícula i pertencente à

fase sólida m , na célula computacional k ; $\vec{F}_T^{(i)}$ é a soma de todas as forças que atuam sobre a partícula i e a massa $m^{(i)}$ é dada por:

$$m^{(i)} = \rho^{(i)} \frac{\pi D^{(i)3}}{6} \quad (27)$$

O torque das forças externas é calculado como:

$$T^{(i)} = I^{(i)} \frac{d\vec{\omega}^{(i)}}{dt} \quad (28)$$

onde $I^{(i)}$ é o momento de inércia de massa, que para partícula esférica i de raio $r^{(i)}$ é:

$$I^{(i)} = \frac{2}{5} m^{(i)} r^{(i)2} \quad (29)$$

3.2.2.1 Forças de contato do modelo esfera suave

A vantagem do MED em relação ao modelo hidrodinâmico de dois fluidos para a fase sólida, está em seu tratamento explícito para as colisões partícula-partícula, para tal, há dois tipos de modelos: o modelo esfera rígida, proposto primeiramente por Allen e Tildesley (1989) e o modelo esfera suave, proposto por Cundall e Strack (1979).

No modelo esfera rígida, as colisões são entre duas partículas e instantâneas, e, o passo de tempo é baseado no tempo de colisão mínimo entre qualquer par de partículas. Essa abordagem é mais adequada para o caso de regime viscoso.

Já na modelagem esfera suave, baseada no sistema massa-mola-amortecedor, é possível de se obter contatos multi-partículas, e, o passo de tempo é determinado de tal forma que permita a permanência de contato entre as partículas por alguns instantes. Essa abordagem é indicada para regimes mais densos, pois possibilita a análise de algumas interações entre as partículas e entre partículas-parede, que não podem ser obtidas no modelo

da esfera rígida.

Embora a modelagem esfera rígida possa ser uma boa alternativa em alguns sistemas, a esfera suave é geralmente mais utilizada. Neste trabalho será utilizada a modelagem de esfera suave que está implementada no código MFIX-MED. Para o cálculo das forças colisionais utilizando o modelo esfera suave, considere o esquema mostrado na Figura 4, onde duas partículas i e j com diâmetros $D^{(i)}$ e $D^{(j)}$ e posição $\vec{X}^{(i)}$ e $\vec{X}^{(j)}$ estão em contato. A partícula i está se movendo com velocidade linear e angular igual a $\vec{V}^{(i)}$ e $\vec{w}^{(i)}$, respectivamente, assim como, a partícula j está se movendo com velocidade linear e angular igual a $\vec{V}^{(j)}$ e $\vec{w}^{(j)}$, respectivamente. A sobreposição das partículas na direção normal, δ_n , é dada por:

$$\delta_n = 0,5(D^{(i)} + D^{(j)}) - |\vec{X}^{(i)} - \vec{X}^{(j)}| \quad (30)$$

Figura 4: Esquema de colisão entre duas partículas no modelo esfera suave.

O vetor unitário normal ao longo da linha de contato da partícula i em direção à partícula j é:

$$\vec{n}_{ij} = \frac{\vec{X}^{(j)} - \vec{X}^{(i)}}{|\vec{X}^{(j)} - \vec{X}^{(i)}|} \quad (31)$$

A velocidade relativa entre as partículas i e j no ponto de contato é:

$$\vec{V}_{ij} = \vec{V}^{(i)} - \vec{V}^{(j)} + (L^{(i)} \vec{\omega}^{(i)} + L^{(j)} \vec{\omega}^{(j)}) \times \vec{n}_{ij} \quad (32)$$

onde $L^{(i)}$ e $L^{(j)}$ são as distâncias do centro das partículas i e j , respectivamente, até o ponto de contato e são dados por:

$$L^{(i)} = \frac{|\vec{X}^{(j)} - \vec{X}^{(i)}|^2 + r^{(i)2} - r^{(j)2}}{2|\vec{X}^{(j)} - \vec{X}^{(i)}|} \quad (33)$$

$$L^{(j)} = |\vec{X}^{(j)} - \vec{X}^{(i)}| - L^{(i)} \quad (34)$$

sendo $r^{(i)}$ e $r^{(j)}$ os raios das partículas i e j , respectivamente.

Assim, as componentes, normal $\vec{V}_{n,ij}$, e, tangencial $\vec{V}_{t,ij}$, da velocidade relativa são respectivamente:

$$\vec{V}_{n,ij} = (\vec{V}^{(i)} - \vec{V}^{(j)}) \cdot \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij} \quad (35)$$

$$\vec{V}_{t,ij} = \vec{V}_{ij} - \vec{V}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} \vec{n}_{ij} \quad (36)$$

E o vetor tangente ao plano de contato, $\vec{t}_{ij}$, é:

$$\vec{t}_{ij} = \frac{\vec{V}_{t,ij}}{|\vec{V}_{t,ij}|} \quad (37)$$

No modelo colisional de esfera suave, a sobreposição δ , entre duas partículas é representada como um sistema de molas e amortecedores, tanto na direção normal quanto na tangencial, conforme pode ser observado através da Figura 5.

A mola representa o recuo das partículas em colisão e o amortecedor simula a dissipação de energia cinética devido a colisões inelásticas. A rigidez da mola nas direções normal e tangencial são k_n e k_t , respectivamente, e, os coeficientes de amortecimento nas direções normal e tangencial são η_n e η_t , respectivamente. A rigidez da mola e o coeficiente de amortecimento são funções das fases sólidas que as partículas em colisão pertencem. Por

exemplo, se uma partícula i pertence a uma fase sólida m e uma partícula j pertence a uma fase sólida l , então os coeficientes de rigidez de mola são dados por $k_{n,ml}$ e $k_{t,ml}$, e, os coeficientes de amortecimento por $\eta_{n,ml}$ e $\eta_{t,ml}$, conforme pode ser observado no trabalho de Garg et al. (2012).

Figura 5: Sistema massa-mola-amortecedor nas direções normal e tangencial.

As componentes normais e tangenciais da força de contato no instante t , são decompostas em duas: força conservativa, oriunda da mola, $\vec{F}^M$, e, força dissipativa, oriunda do amortecedor, $\vec{F}^A$, da seguinte maneira:

$$\vec{F}_{n,ij}(t) = \vec{F}_{n,ij}^M(t) + \vec{F}_{n,ij}^A(t) \quad (38)$$

$$\vec{F}_{t,ij}(t) = \vec{F}_{t,ij}^M(t) + \vec{F}_{t,ij}^A(t) \quad (39)$$

3.2.2.2 Estimativa da força de interação entre as fases gasosa e sólida

Considere uma partícula i pertencente à fase sólida m , na célula computacional k e no instante t . A força de arrasto sobre esta partícula é representada por:

$$\vec{F}_{arrasto}^{(i \in k, m)} = -\vec{\nabla} P_g(\vec{X}^{(i)}) v_m + \frac{\beta_m^{(i \in k, m)} v_m}{\epsilon_{sm}} (\vec{v}_g(\vec{X}^{(i)}) - \vec{V}^{(i)}) \quad (40)$$

onde, $P_g(\vec{X}^{(i)})$ e $\vec{v}_g(\vec{X}^{(i)})$ são a pressão e o campo de velocidade do gás na posição da partícula i , respectivamente, v_m é o volume da partícula esférica, $v_m = \pi D_m^3/6$, e, $\beta_m^{(i \in k, m)}$ é o coeficiente de arrasto na interface da partícula i pertencente à célula computacional k .

Diferentes correlações podem ser deduzidas, a partir de estudos experimentais e numéricos, para modelagem do coeficiente de arrasto na interface, assim, Garg et al. (2012) propõem uma parametrização geral para $\beta_m^{(i \in k, m)}$ que agrupa os diferentes modelos e é escrita como:

$$\beta_m^{(i \in k, m)} = \beta(\rho_m, D_m, |\vec{V}^{(i)} - \vec{v}_g(\vec{X}^{(i)})|, \rho_g, \mu_g) \quad (41)$$

O termo que representa a força de interação entre as fases, $\vec{f}$, em $\vec{x}_k$, da equação de quantidade de movimento para a fase do gás, equação (3) do modelo contínuo, ao se utilizar o MED é calculado da seguinte maneira:

$$\vec{f}^k = \frac{1}{v_k} \sum_{i=1}^{N_m} \vec{F}_{arrasto}^{(i \in k, m)} K(\vec{X}_m^{(i)}, \vec{x}_k) \quad (42)$$

sendo, $K(\vec{X}_m^{(i)}, \vec{x}_k)$ um núcleo genérico que determina a influência das partículas na posição $\vec{X}_m^{(i)}$ sobre o nó computacional $\vec{x}_k$, e, v_k é o volume geométrico da célula computacional k .

Há dois métodos para se calcular a força de arrasto utilizando o MED. No primeiro método, para uma partícula pertencente a uma célula computacional k , o cálculo da velocidade média da fase gasosa não é realizado na posição da partícula, $\vec{v}_g(\vec{X}^{(i)})$, mas, para

tanto, é utilizado um valor central na célula, $\vec{v}_g$. Neste mesmo contexto, para a velocidade da partícula, ao invés de usar a velocidade $\vec{V}^{(i)}$ de cada partícula, é calculada a velocidade média do volume do sólido da fase m , $\vec{v}_{sm}$, e, armazenada no centro da célula. Com esta simplificação, o coeficiente de arrasto na interface de todas as partículas da fase sólida m pertencentes à célula computacional k é constante e tem a seguinte forma:

$$\beta_m^{(\forall i \in k)} = \beta_m^k = (\rho_m, D_m, |\vec{v}_{sm}(\vec{x}_k) - \vec{v}_g(\vec{x}_k)|, \rho_g, \mu_g) \quad (43)$$

Logo, a força de arrasto sobre a partícula i , pertencente à fase sólida m , na célula computacional k é:

$$\vec{F}_{arrasto}^{(i \in k, m)} = -\vec{\nabla} P_g(\vec{x}_k) v_m + \frac{\beta_m^k v_m}{\epsilon_{sm}} (\vec{v}_g(\vec{x}_k) - \vec{v}_{sm}(\vec{x}_k)) \quad (44)$$

Após realizada essa aproximação, a força de arrasto é constante para todas as partículas que residem numa mesma célula computacional e a força de interação entre as fases, $\vec{f}^k$, na célula k é dada por:

$$\vec{f}^k = -\epsilon_{sm} \vec{\nabla} P_g(\vec{x}_k) + \beta_m^k (\vec{v}_g(\vec{x}_k) - \vec{v}_{sm}(\vec{x}_k)) \quad (45)$$

No segundo método, para calcular a força de interação entre as fases, a velocidade média do gás é interpolada na posição da partícula e a força de arrasto de cada partícula é então estimada, usando a equação (42). No entanto, a fim de evitar as complexidades no algoritmo numérico resultante da interpolação no campo de pressão da fase gasosa, o termo relativo à pressão é avaliado no centro da célula, obtendo assim o campo da pressão igual para todas as partículas pertencentes a uma mesma célula computacional. Assim, a força de interação entre as fases na célula k é estimada como:

$$\vec{f}^k = -\epsilon_{sm} \vec{\nabla} P_g(\vec{x}_k) + \frac{1}{v_k} \sum_{i=1}^{N_m} \frac{\beta_m^{(i \in k)} v_m}{\epsilon_{sm}} (\vec{v}_g(\vec{X}_m^{(i)}) - \vec{V}_m^{(i)}) K(\vec{X}_m^{(i)}, \vec{x}_k) \quad (46)$$

Maiores detalhes sobre a interpolação podem ser encontrados nos trabalhos de Garg et al. (2012) e Garg et al. (2007).

Convém ressaltar que neste trabalho é utilizado o segundo método, para calcular a força de interação entre as fases, estando discriminado nos resultados.

IV. ESTUDO DAS FORÇAS DE CONTATO DO MODELO ESFERA SUAVE PARA MODELOS LINEARES E NÃO-LINEARES

O modelo de força de contato utilizado nas simulações de escoamentos granulares e gás-sólidos é muito importante no estudo do comportamento das partículas, pois se o modelo não conseguir descrever o contato real entre as partículas, os resultados das simulações não serão adequados.

No modelo esfera suave há praticamente dois tipos de abordagem para solução do contato: o modelo linear, no qual a lei de Hook é usada para descrever a força elástica, denominado LSD-linear spring-dashpot e o não-linear, baseado nos trabalhos de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970), denominado HSD – Hertzian spring-dashpot.

Para o modelo linear, se o valor do coeficiente de restituição for conhecido é possível calcular o coeficiente de amortecimento através de uma expressão analítica. No modelo não-linear a força conservativa é calculada com base na teoria de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970), e, o coeficiente de rigidez de mola não-linear é estimado de acordo com as propriedades do material, como módulo de Young e coeficiente de Poisson. O modelo não-linear pode ser dividido em dois outros modelos: um proposto por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992), neste trabalho chamado de HSD-A e outro, proposto por Hunt e Grossley (1975), mencionado por HSD-B. A diferença básica entre esses dois modelos não-lineares está no cálculo da força de amortecimento não-conservativa.

No modelo HSD-A, a força de amortecimento é proporcional a raiz quarta da sobreposição das partículas. Ao considerar a força de amortecimento sendo proporcional a raiz quadrada da sobreposição das partículas, está definindo-se o modelo HSD-B. O modelo HSD-A possui solução analítica, conforme verificado por Antypov e Elliott (2011), no entanto Zhang e Whiten (1996) descobriram que o modelo admite comportamento não-físico. Já o modelo HSD-B, conforme analisado por Navarro e Souza Braun (2013), é um modelo contínuo para as forças de contato, se aproximando do contato real.

O modelo linear está descrito no item 4.1. Considerando a abordagem do modelo não-linear, esta é dividida em dois: HSD – A, exposto em 4.2.1 e HSD – B, especificado em 4.2.2. No modelo HSD-B, são derivadas as relações para o cálculo: do coeficiente de amortecimento, item 4.2.2.1 e do tempo de contato, item 4.2.2.2.

4.1 Forças de contato no modelo linear

No modelo linear a sobreposição entre duas partículas pode ser representada por um sistema massa-mola-amortecedor (LSD – linear spring-dashpot), no qual a lei de Hook ($\vec{F}(\delta_n) = k \delta_n$) é usada para descrever a força elástica. Este modelo é amplamente utilizado devido à possibilidade da solução analítica para a sobreposição entre as partículas e as relações encontradas entre os coeficientes, normal de rigidez de mola k_n e amortecimento η_n .

A força de mola normal $\vec{F}_{n,ij}^M$, em um instante qualquer durante o contato das partículas, é calculada com base na sobreposição normal, δ_n , entre as partículas e é dada por:

$$\vec{F}_{n,ij}^M = -k_n \delta_n \vec{n}_{ij} \quad (47)$$

Similarmente, a força de mola tangencial $\vec{F}_{t,ij}^M$, em um instante qualquer durante o contato das partículas, é calculada como:

$$\vec{F}_{t,ij}^M = -k_t \delta_t \vec{\delta}_t \quad (48)$$

A força de amortecimento normal $\vec{F}_{n,ij}^A$, em um instante qualquer durante o contato das partículas, é calculada com base na componente normal da velocidade relativa e é dada por:

$$\vec{F}_{n,ij}^A = -\eta_n \vec{V}_{n,ij} \quad (49)$$

Analogamente, a força de amortecimento tangencial $\vec{F}_{t,ij}^A$, num instante qualquer durante o contato das partículas, é calculada como:

$$\vec{F}_{t,ij}^A = -\eta_t \vec{V}_{t,ij} \quad (50)$$

O coeficiente normal de rigidez de mola k_n e amortecimento η_n em um modelo LSD com condições iniciais de $\delta_n(0)=0$ e $\vec{V}_{n,ij}(0)=\vec{v}_0$ tem solução analítica. Para calculá-los determina-se inicialmente a sobreposição normal das partículas e posteriormente, o coeficiente de restituição normal e o tempo de colisão.

Para colisões entre as partículas i e j , segundo Silbert et al. (2001), o coeficiente normal de amortecimento η_n é relacionado com o coeficiente de restituição normal das partículas das fases sólidas e_n , por:

$$e_n = \exp\left(-\frac{\eta_n}{2m_{eff}} t_{c,n}\right) \quad (51)$$

onde m_{eff} é a massa efetiva e $t_{c,n}$ é o tempo de colisão entre as partículas i e j , dados por:

$$m_{eff} = \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)} \quad (52)$$

$$t_{c,n} = \pi \left(\frac{k_n}{m_{eff}} - \frac{\eta_n^2}{4m_{eff}^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (53)$$

A partir das equações (51) e (53) obtém-se os coeficientes de amortecimento normal η_n e de rigidez de mola k_n , como:

$$\eta_n = \frac{2\sqrt{m_{eff}k_n}|\ln(e_n)|}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(e_n)}} \quad (54)$$

$$k_n = \frac{m_{eff}}{t_{c,n}^2} (\ln^2 e_n + \pi^2) \quad (55)$$

Se, para uma simulação, os valores de e_n e $t_{c,n}$ forem conhecidos através de dados experimentais, pode-se então determinar os valores do coeficiente normal de rigidez de mola k_n e amortecimento η_n através das equações (54) e (55). No entanto, como geralmente conhece-se somente os valores de e_n , é necessário um procedimento para estimá-los. Para isso, considere a equação de um oscilador mecânico linear que descreve a colisão entre duas partículas, em função da sobreposição δ_n na direção normal:

$$m_{eff} \ddot{\delta}_n = -k_n \delta_n - \eta_n \dot{\delta}_n \quad (56)$$

ou

$$\ddot{\delta}_n + 2\psi \dot{\delta}_n + \Omega_0^2 \delta_n = 0 \quad (57)$$

onde, $\Omega_0 = \sqrt{k_n/m_{eff}}$ é a frequência do oscilador harmônico não-amortecido e $\psi = \sqrt{\eta_n/(2m_{eff})}$ é o coeficiente de amortecimento responsável pela dissipação de energia cinética.

A solução da equação diferencial do oscilador harmônico amortecido, equações (56) e (57), para o caso de sistemas subamortecidos, $\Omega > \psi$, com condições iniciais $\delta_n(0) = 0$ e $\dot{\delta}_n(0) = v_0$ é dada por:

$$\delta_n(t) = \left(\frac{v_0}{\Omega} \right) \exp(-\psi t) \sin(\Omega t) \quad (58)$$

$$\dot{\delta}_n(t) = \left(\frac{v_0}{\Omega} \right) \exp(-\psi t) [-\psi \sin(\Omega t) + \Omega \cos(\Omega t)] \quad (59)$$

onde, v_0 é a velocidade relativa inicial e $\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 - \psi^2}$ é a frequência do oscilador harmônico amortecido.

O tempo de contato pode ser determinado através da equação (58), com a condição de $\delta_n(t_{c,n}) = 0$, o que resulta na equação (53) ou:

$$t_{c,n} = \pi / \Omega \quad (60)$$

A velocidade relativa logo após o contato entre as partículas é $\dot{\delta}_n(t_{c,n}) = -v_0 \exp(-\psi t_{c,n})$. Assim, o coeficiente de restituição na direção normal é dado pela equação (51) ou por:

$$e_n = -\frac{\dot{\delta}_n(t_{c,n})}{\dot{\delta}_n(0)} = \exp(-\pi\psi/\Omega) \quad (61)$$

Aplicando a inversa na equação (61), se o valor de e_n é conhecido, torna-se possível calcular o valor de η_n , através da equação (54), ou o de ψ por meio da seguinte equação:

$$\psi = \frac{-\ln e_n}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}} \Omega_0 \quad (62)$$

O modelo LSD prevê que o coeficiente de restituição na direção normal e_n e o tempo de contato $t_{c,n}$ são independentes da velocidade relativa inicial v_0 , como pode ser observado nas equações (53) e (61).

A sobreposição máxima entre as partículas, δ_{max} , pode ser derivada a partir das equações (58) e (59) e da condição de $\dot{\delta}_n(t_{max}) = 0$, sendo expressa por:

$$\delta_{max} = \left(\frac{v_0}{\Omega_0} \right) \exp \left(-\frac{\arctg(\beta)}{\beta} \right) \quad (63)$$

onde, $\beta = -\Omega/\psi = \pi/\ln e_n$ para $e_n < 1$. O tempo de contato entre as partículas pode ser reescrito como:

$$t_{c,n} = \frac{\pi}{\Omega_0} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta^2} \right)} \quad (64)$$

A sobreposição média entre as partículas, $\bar{\delta}_n$, é calculada através da expressão:

$$\bar{\delta}_n = \frac{1}{t_{c,n}} \int_0^{t_{c,n}} \delta_n(t) dt = \frac{v_0}{\pi \Omega_0} \frac{-\beta}{\sqrt{1+\beta^2}} \left(\exp\left(\frac{\pi}{\beta}\right) + 1 \right) \quad (65)$$

Convém salientar que para colisões perfeitamente elásticas $e_n = 1$, e, consequentemente, $\psi = \eta_n = 0$, $\delta_{max} = v_0/\Omega_0$ e $t_{c,n} = \pi/\Omega_0$.

A partir da equação (57), a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, na direção normal δ_n^* pode ser escrita como:

$$\delta_n^{*'''} + 2v^* \delta_n^{*'} + \delta_n^* = 0 \quad (66)$$

onde os parâmetros adimensionais foram calculados pelas expressões:

$\delta_n^* = \frac{\delta_n}{v_0} \Omega_0$, $\delta_n^{*'} = \frac{\dot{\delta}_n}{v_0}$, $t^* = t \Omega_0$, a linha ' indica a derivada em relação à t^* e o parâmetro v^*

é o coeficiente de amortecimento adimensional dado por ($0 < e_n \leq 1$):

$$v^* = \frac{\psi}{\Omega_0} = -\frac{\ln e_n}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}} \quad (67)$$

onde $0 \leq v^* < 1$.

A solução da equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, equação (66), para o caso de sistemas subamortecidos, $0 \leq v^* < 1$, com condições iniciais de $\delta_n^*(0) = 0$ e $\delta_n^{*'}(0) = 1$ é dada por:

$$\delta_n^*(t^*) = \left(\frac{1}{\Omega^*} \right) \exp(-v^* t^*) \operatorname{sen}(\Omega^* t^*) \quad (68)$$

onde $\Omega^* = \sqrt{1 - v^{*2}}$ é a frequência adimensional do oscilador amortecido.

As equações adimensionais para a sobreposição máxima, tempo de contato e sobreposição média são respectivamente:

$$\delta_{max}^* = \exp\left(-\frac{\arctg(\beta^*)}{\beta^*}\right) \quad (69)$$

$$t_{c,n}^* = \pi \sqrt{1 + \frac{1}{\beta^{*2}}} \quad (70)$$

$$\bar{\delta}_n^* = \frac{1}{\pi} \frac{-\beta^*}{\sqrt{1 + \beta^{*2}}} \left(\exp\left(\frac{\pi}{\beta^*}\right) + 1 \right) \quad (71)$$

onde $\beta^* = -\Omega^* / v^* = \pi / \ln e_n = \beta$, para $0 < e_n \leq 1$.

Convém salientar que para colisões perfeitamente elásticas, $e_n = 1$ e $v^* = 0$, a sobreposição máxima e o tempo de contato adimensionais são, respectivamente, $\delta_{max}^* = 1$ e $t_{c,n}^* = \pi$.

A Figura 6 ilustra o gráfico para a sobreposição adimensional δ^* versus tempo adimensional t^* , para diversos valores do coeficiente de amortecimento adimensional v^* , $v^* = 0; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7$. Esta figura é obtida até o tempo de contato, e desenhada para o limite $t_{c,n}^* < 4,5$. Pode-se notar que conforme aumenta o coeficiente de amortecimento adimensional aumenta também o tempo de contato. Em simulações numéricas,

um longo tempo de contato permite um maior passo de integração temporal. É possível verificar também que para valores maiores de ν^* a sobreposição máxima vai diminuindo, ver Tabela 1.

Figura 6: Sobreposição adimensional (modelo LSD).

O gráfico da velocidade adimensional v^* versus o tempo adimensional t^* , para diversos valores do coeficiente de amortecimento ν^* pode ser observado na Figura 7. Analisando tal figura, constata-se que o tempo de contato é independente da velocidade de impacto, o que é oposto ao que acontece em colisões reais (ver Goldsmith (1960)). Tal análise pode ser verificada também, considerando que o coeficiente de restituição é calculado com base nos valores negativos da velocidade no tempo do contato, ou seja, $e_n = -\dot{\delta}_n(t_{c,n})$ (ver valores na Tabela 1). E, por fim, verifica-se que para menores valores do coeficiente de amortecimento, maior será o valor da velocidade absoluta.

Figura 7: Velocidade adimensional (modelo LSD).

Na Figura 8 está ilustrado o gráfico da aceleração adimensional a^* versus sobreposição adimensional δ^* , para diversos valores do coeficiente de amortecimento adimensional ν^* . Consta-se nesta figura que a força de contato é descontínua no início e no fim do contato entre as partículas ($a^*(0) \neq a^*(t_{c,n}^*) \neq 0$), isto é, a aceleração não começa e nem termina igual a zero, isso ocorre devido à força de amortecimento viscosa. Em colisões reais, a força de contato é contínua. Nota-se que a força de contato é coesiva ($a^* > 0$) no final do impacto. Para colisões reais, a força de contato é sempre repulsiva ($a^* < 0$).

Figura 8: Aceleração adimensional (modelo LSD).

Vale ressaltar, que para os cálculos dos parâmetros contidos na Tabela 1, é utilizado o programa MatLab®, ver APÊNDICE B – MATLAB® - B1. Primeiramente são dados os valores de ν^* para após calcular os valores de e_n por meio da inversa da equação (67). Em seguida, resolve-se a equação diferencial ordinária (66), com uma tolerância relativa de 10^{-8} e absoluta de 10^{-12} e encontra-se os parâmetros listados na Tabela 1.

Para o cálculo do coeficiente de amortecimento tangencial, η_t , é utilizada a seguinte relação, proposta por Silbert et al. (2001), $\eta_t = 0,5 \eta_n$. E, para o coeficiente de rigidez de mola tangencial, Schafer, Dippel e Wolf (1996) e Silbert et al. (2001), estipulam a relação $k_t = 2/7 k_n$.

Tabela 1: Parâmetros adimensionais para o modelo LSD.

v^*	e_n	t_{max}^*	δ_{max}^*	$\bar{\delta}_n^*$	$t_{c,n}^*$	$a^*(0)$	$a^*(t_{c,n}^*)$
0,0000	1,0000	1,5708	1,0000	0,6366	3,1416	0,0000	0,0000
0,0100	0,9691	1,5609	0,9845	0,6267	3,1417	-0,0200	0,0194
0,0200	0,9391	1,5511	0,9695	0,6171	3,1422	-0,0400	0,0376
0,0300	0,9100	1,5415	0,9548	0,6077	3,1430	-0,0600	0,0546
0,0400	0,8818	1,5320	0,9406	0,5985	3,1441	-0,0800	0,0705
0,0500	0,8545	1,5227	0,9267	0,5896	3,1455	-0,1000	0,0854
0,0600	0,8279	1,5135	0,9132	0,5808	3,1473	-0,1200	0,0993
0,0700	0,8022	1,5044	0,9000	0,5722	3,1493	-0,1400	0,1123
0,0800	0,7771	1,4955	0,8872	0,5639	3,1517	-0,1600	0,1243
0,0900	0,7528	1,4867	0,8748	0,5557	3,1544	-0,1800	0,1355
0,1000	0,7292	1,4780	0,8626	0,5477	3,1574	-0,2000	0,1458
0,1500	0,6209	1,4365	0,8062	0,5101	3,1775	-0,3000	0,1863
0,2000	0,5266	1,3977	0,7561	0,4761	3,2064	-0,4000	0,2106
0,2500	0,4443	1,3613	0,7115	0,4452	3,2446	-0,5000	0,2222
0,3000	0,3723	1,3272	0,6715	0,4167	3,2933	-0,6000	0,2234
0,3500	0,3092	1,2951	0,6355	0,3904	3,3537	-0,7000	0,2164
0,4000	0,2538	1,2649	0,6029	0,3658	3,4278	-0,8000	0,2031
0,4500	0,2053	1,2363	0,5733	0,3426	3,5179	-0,9000	0,1848
0,5000	0,1630	1,2092	0,5463	0,3206	3,6276	-1,0000	0,1630
0,5500	0,1263	1,1835	0,5216	0,2994	3,7616	-1,1000	0,1390
0,6000	0,0948	1,1591	0,4988	0,2788	3,9270	-1,2000	0,1137
0,7000	0,0460	1,1138	0,4586	0,2378	4,3991	-1,4000	0,0644
0,8000	0,0152	1,0725	0,4240	0,1939	5,2360	-1,6000	0,0450
0,9000	0,0015	1,0347	0,3941	0,1390	7,2073	-1,8000	0,0349

Considerando a lei de atrito de Coulomb entre as partículas, quando a seguinte relação é satisfeita:

$$|\vec{F}_{t,ij}| > \mu |\vec{F}_{n,ij}| \quad (72)$$

então, o deslizamento ocorre e a força de contato tangencial é calculada como:

$$\vec{F}_{t,ij} = \begin{cases} -\mu |\vec{F}_{n,ij}| \vec{t}_{ij} & \text{se } \vec{t}_{ij} \neq \vec{0} \\ -\mu |\vec{F}_{n,ij}| \frac{\vec{\delta}_t}{|\vec{\delta}_t|} & \text{se } \vec{t}_{ij} = \vec{0} \text{ e } \vec{\delta}_t \neq \vec{0} \\ 0 & \text{para os demais casos} \end{cases} \quad (73)$$

As equações (72) e (73) também são válidas para os modelos Hertiziano não-linear descritos a seguir.

4.2 Forças de contato no modelo não-linear – modelo Hertiziano

As colisões entre partícula-partícula e partícula-parede também podem ser descritas utilizando o modelo não-linear Hertiziano, ver trabalho de Hertz (1882), Timoshenko e Goodier (1970) e Goldsmith (1960). Nesse modelo, o coeficiente de rigidez de mola nas direções normais e tangenciais para contato entre as partículas i e j , é calculado a partir do módulo de Young e do coeficiente de Poisson:

$$k_{n,H_z} = \frac{4}{3} E_{eff} \sqrt{r_{eff}} \quad (74)$$

$$k_{t,H_z} = \frac{16}{3} G_{eff} \sqrt{r_{eff}} \quad (75)$$

com r_{eff} , representando o raio efetivo das partículas i e j :

$$\frac{1}{r_{eff}} = \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \quad (76)$$

E_{eff} e G_{eff} são, respectivamente, o módulo de Young efetivo e o módulo de cisalhamento efetivo, calculados por:

$$\frac{1}{E_{eff}} = (1 - \sigma_i^2) / E_{mi} + (1 - \sigma_j^2) / E_j \quad (77)$$

$$\frac{1}{G_{eff}} = (2 - \sigma_i)/G_i + (2 - \sigma_j)/G_j \quad (78)$$

onde, E_i e E_j são os módulos de Young e σ_i e σ_j são os coeficientes de Poisson, G_i e G_j são os módulos de cisalhamento, dados por:

$$G_i = \frac{E_i}{2(1 + \sigma_i)} \quad (79)$$

$$G_j = \frac{E_j}{2(1 + \sigma_j)} \quad (80)$$

No modelo não-linear Hertiziano do tipo massa-mola-amortecedor (Hertzian spring-dashpot – HSD), a colisão entre duas esferas elásticas é descrita pela integração da lei de Hook sobre a área de deformação, resultando na seguinte relação, conhecida como a lei de Hertz, para um maior detalhamento ver os trabalhos de Hertz (1882) e Timoshenko e Goodier (1970):

$$\vec{F}^M(t) = k_{n,H_z} \delta_n^{\frac{3}{2}} \vec{n}_{ij} \quad (81)$$

$$\vec{F}^M(t) = k_{t,H_z} \delta_t^{\frac{3}{2}} \vec{t}_{ij} \quad (82)$$

onde, k_{n,H_z} e k_{t,H_z} são calculados através das equações (74) e (75), respectivamente.

O coeficiente de restituição normal não aumenta com a velocidade de impacto, portanto uma expressão para a dissipação de energia cinética devido às colisões, deve, necessariamente ser não-linear. Para tanto, Hunt e Grossley (1975) derivam a seguinte expressão para força de amortecimento não-linear:

$$\vec{F}_n^A(t) = \eta_{n,H_z} \delta_n^p \vec{V}_n \quad (83)$$

$$\vec{F}_t^A(t) = \eta_{t,H_z} \delta_t^p \vec{V}_t \quad (84)$$

Como descrito anteriormente, o modelo não-linear pode ser dividido em dois: HSD – A e HSD – B. A diferença básica entre esses dois modelos não-lineares está no cálculo da força de amortecimento não-conservativa. No modelo HSD-A, a força de amortecimento é proporcional a raiz quarta da sobreposição das partículas, enquanto que no modelo HSD-B a força de amortecimento sendo proporcional a raiz quadrada da sobreposição das partículas.

4.2.1 Modelo não-linear Hertiziano A (HSD-A):

Considerando $p=1/4$ na equação (83), está definindo-se o modelo denominado, neste trabalho, por HSD-A, e, uma expressão para a força dissipativa é proposta por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) como:

$$\vec{F}^A(\delta_n) = \eta_{n,A} \delta_n^{\frac{1}{4}} \dot{\delta}_n \quad (85)$$

onde, $\eta_{n,A}$ é o coeficiente de amortecimento não-linear que para o modelo HSD-A é calculado seguindo o trabalho de Tsuji, Tanaka e Ishida (1992):

$$\eta_{n,A} = \alpha(e_n) \sqrt{m_{eff} k_{n,HZ}} \quad (86)$$

com o parâmetro $\alpha(e_n)$ escrito em função do coeficiente de restituição e_n . Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) apresentam um diagrama mostrando a relação de α e e_n , o qual determina o valor de α , sendo conhecido o valor de e_n .

A equação de deslocamento para a sobreposição normal é expressa pela equação do oscilador Hertiziano amortecido não-linear, através da equação (85), como:

$$m_{eff} \ddot{\delta}_n = -k_{n,HZ} \delta_n^{\frac{3}{2}} - \eta_{n,A} \delta_n^{\frac{1}{4}} \dot{\delta}_n \quad (87)$$

A partir da equação (87), a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional na direção normal, δ_n^* , pode ser escrita como:

$$\delta_n^{*'''} + 2\nu_A^* \delta_n^{*1/4} \delta_n^{*'} + \delta_n^{*3/2} = 0 \quad (88)$$

onde, os parâmetros adimensionais foram calculados pelas expressões:

$$\delta_n^* = \delta_n \left(\frac{k_{n,HZ}}{v_0^2 m_{eff}} \right)^{2/5}, \quad \delta_n^{*'} = \frac{\dot{\delta}_n}{v_0}, \quad t^* = t \left(\frac{k_{n,HZ} v_0^{1/2}}{m_{eff}} \right)^{2/5}, \quad v_0 \text{ é a velocidade de impacto, a linha ' indica a}$$

derivada em relação à t^* e o parâmetro ν_A^* é o coeficiente de amortecimento adimensional dado por:

$$v_A^* = \frac{\eta_{n,A}}{2\sqrt{(m_{eff} k_{n,HZ})}} = \frac{\alpha}{2} \quad (89)$$

A equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, equação (88), pode ser resolvida numericamente, com condições iniciais de $\delta_n^*(0)=0$ e $\delta_n^{*'}(0)=1$. Com a série temporal e utilizando algoritmos computacionais, a sobreposição máxima adimensional, o tempo de contato adimensional e a sobreposição média adimensional são, respectivamente, determinados por:

$$\delta_{max}^* = \max_i \{ \delta_{n,j}^*(t_i^*) \} \quad (90)$$

$$\delta_{n,j}^*(t_i^*) = 0, \quad t_{c,n}^* = t_i \quad (91)$$

$$\bar{\delta}_n^* = \frac{1}{t_{c,n}^*} \sum_0^{t_{c,n}^*} \delta_{n,j}^* \quad (92)$$

Analogamente às figuras 6, 7 e 8, as ilustrações 9, 10 e 11 apresentam os gráficos para o modelo HSD-A da sobreposição adimensional δ^* versus tempo adimensional t^* , da velocidade adimensional v^* versus tempo adimensional t^* e da aceleração adimensional a^* versus sobreposição adimensional δ^* , respectivamente, para diversos valores do coeficiente de amortecimento adimensional v_A^* , $v_A^* = 0; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7$. Em todos os casos, as figuras foram obtidas até o tempo de contato.

Observando as figuras 10, 11 e 9, pode-se notar um comportamento similar ao modelo LSD, figuras 6, 7 e 8. Na Figura 9, verifica-se que conforme aumenta o coeficiente de amortecimento adimensional aumenta também o tempo de contato. É possível notar também que para valores maiores de v_A^* a sobreposição máxima vai diminuindo (observar Tabela 2). No final do tempo de contato da Figura 10, é possível determinar o coeficiente de restituição, que é calculado com base nos valores negativos da velocidade no tempo do contato, ou seja, $e_n = -\dot{\delta}_n(t_{c,n})$ (ver valores na Tabela 2). Já na Figura 11, constata-se que a força de contato é também descontínua no início e no fim do contato entre as partículas ($a^*(0) \neq a^*(t_{c,n}^*) \neq 0$), isto é, a aceleração não começa e nem termina igual a zero. No entanto, ao se comparar a Figura 11 com a Figura 8, percebe-se que a descontinuidade gerada no modelo HSD-A é bem menor em relação ao modelo LSD, ver Tabela 1 e Tabela 2.

Figura 9: Sobreposição adimensional (modelo HSD-A).

Figura 10: Velocidade adimensional (modelo HSD-A).

Figura 11: Aceleração adimensional (modelo HSD-A).

A Tabela 2 exibe, para os diversos valores do coeficiente de amortecimento adimensional ν_A^* , os valores adimensionais dos seguintes parâmetros: coeficiente de restituição e_n , tempo no qual a sobreposição máxima ocorre t_{max}^* , sobreposição máxima δ_{max}^* , sobreposição média $\bar{\delta}_n^*$, tempo de contato $t_{c,n}^*$, aceleração inicial $a^*(0)$ e aceleração no tempo final do contato $a^*(t_{c,n}^*)$. Esses parâmetros são calculados numericamente por meio das equações (90), (91) e (92). Já o coeficiente de restituição e a aceleração são computados, utilizando, respectivamente, as seguintes expressões: $e_n = -\dot{\delta}_n^*(t_{c,n}^*)$ e $a^* = \nu_A^{*'}.$

Vale ressaltar, que para os cálculos dos parâmetros contidos na Tabela 2, é utilizado o programa MatLab®, ver APÊNDICE B – MATLAB® - B2. Primeiramente são dados os valores de ν_A^* para após resolver-se a equação diferencial ordinária não-linear (88), com uma tolerância relativa de 10^{-8} e absoluta de 10^{-12} e encontra-se os parâmetros listados na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros adimensionais para o modelo HSD-A.

v_A^*	e_n	t_{max}^*	δ_{max}^*	$\bar{\delta}_n^*$	$t_{c,n}^*$	$a^*(0)$	$a^*(t_{c,n}^*)$
0,0000	1,0000	1,6090	1,0934	0,6833	3,2181	0,0000	0,0000
0,0100	0,9723	1,6033	1,0812	0,6757	3,2272	-0,0009	0,0015
0,0200	0,9453	1,5976	1,0693	0,6682	3,2366	-0,0018	0,0034
0,0300	0,9191	1,5920	1,0577	0,6609	3,2463	-0,0027	0,0042
0,0400	0,8936	1,5864	1,0463	0,6537	3,2562	-0,0036	0,0050
0,0500	0,8688	1,5809	1,0352	0,6466	3,2664	-0,0045	0,0049
0,0600	0,8446	1,5754	1,0243	0,6396	3,2768	-0,0054	0,0061
0,0700	0,8211	1,5700	1,0137	0,6327	3,2875	-0,0063	0,0050
0,0800	0,7982	1,5647	1,0032	0,6260	3,2985	-0,0072	0,0032
0,0900	0,7759	1,5594	0,9930	0,6193	3,3098	-0,0080	0,0088
0,1000	0,7542	1,5542	0,9830	0,6128	3,3213	-0,0089	0,0089
0,1500	0,6536	1,5288	0,9358	0,5815	3,3836	-0,0134	0,0107
0,2000	0,5648	1,5046	0,8931	0,5524	3,4540	-0,0179	0,0100
0,2500	0,4864	1,4815	0,8542	0,5251	3,5338	-0,0224	0,0116
0,3000	0,4168	1,4595	0,8185	0,4993	3,6243	-0,0268	0,0122
0,3500	0,3550	1,4383	0,7858	0,4748	3,7273	-0,0313	0,0097
0,4000	0,3001	1,4181	0,7557	0,4514	3,8449	-0,0358	0,0096
0,4500	0,2513	1,3987	0,7279	0,4288	3,9801	-0,0402	0,0086
0,5000	0,2079	1,3801	0,7022	0,4069	4,1368	-0,0447	0,0076
0,5500	0,1695	1,3621	0,6782	0,3853	4,3200	-0,0492	0,0049
0,6000	0,1356	1,3449	0,6559	0,3639	4,5368	-0,0536	0,0057
0,7000	0,0803	1,3122	0,6156	0,3205	5,1163	-0,0626	0,0036
0,8000	0,0400	1,2818	0,5801	0,2737	6,0353	-0,0715	0,0017
0,9000	0,0141	1,2533	0,5487	0,2186	7,7508	-0,0805	0,0004

Baseando-se no trabalho de Antypov e Elliott (2011) e considerando a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, equação (88), desde que:

$$v(t) = \frac{d\delta_n^*}{dt} \quad \text{e} \quad \delta_n^{*''} = \frac{d\delta_n^*}{dt} \frac{dv}{d\delta_n^*} \quad (93)$$

a equação (88) pode ser reescrita como:

$$v \frac{dv}{d\delta_n^*} + 2 v_A^* \delta_n^{*1/4} v + \delta_n^{*3/2} = 0 \quad (94)$$

Substituindo δ_n^* por $x(t)$ tal como:

$$\delta_n^* = A \cdot x^n \quad \text{e} \quad d\delta_n^* = n \cdot A \cdot x^{n-1} dx \quad (95)$$

tem-se:

$$v \frac{dv A^{-1} x^{1-n}}{n dx} + 2 v_A^* A^{1/4} x^{n/4} v + A^{3/2} x^{3n/2} = 0 \quad (96)$$

Pensando em um valor para n de forma que as potências de x tornem-se iguais, ou seja, $1-n=n/4$, assim, n deverá ser igual a $4/5$, logo, substituindo $n=4/5$ na equação (96):

$$v \frac{dv A^{-1} x^{1/5}}{\frac{4}{5} dx} + 2 v_A^* A^{1/4} x^{1/5} v + A^{3/2} x^{6/5} = 0 \quad (97)$$

Dividindo a equação (97) por $(x)^{1/5}$:

$$v \frac{5 dv A^{-1}}{4 dx} + 2 v_A^* A^{1/4} v + A^{3/2} x = 0 \quad (98)$$

Considerando um valor para A , tal que seus expoentes se igualem, isto é, $5 A^{-1}/4 = A^{3/2}$, logo, $A = (5/4)^{2/5}$. Assim, substituindo o valor encontrado para A , na equação (98), obtém-se:

$$v \left(\frac{5}{4} \right)^{3/5} \frac{dv}{dx} + 2 v_A^* \left(\frac{5}{4} \right)^{1/10} v + \left(\frac{5}{4} \right)^{3/5} x = 0 \quad (99)$$

Dividindo a equação (99) por $\left(\frac{5}{4} \right)^{3/5}$:

$$v \frac{dv}{dx} + 2 v_A^* \frac{2}{\sqrt{5}} v + x = 0 \quad (100)$$

Voltando aos parâmetros substituídos pelas equações (93) e (95) tem-se:

$$\delta_n^{*''} + 2 v_A^* \frac{2}{\sqrt{5}} \delta_n^{*'} + \delta_n^* = 0 \quad (101)$$

Logo, se $v_A^* = \frac{\sqrt{5}}{2} v$, volta-se à equação (67) do modelo LSD. Assim uma expressão

para os valores de v_A^* , plotados no trabalho de Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) e apresentada por Antypov e Elliott (2011) pode ser reescrita para o cálculo do coeficiente de amortecimento com $e_n > 0$, como:

$$v_A^* = -\frac{\sqrt{5}}{2} \frac{\ln e_n}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}} \quad (102)$$

Com o coeficiente de restituição normal obtido numericamente, conforme pode ser visto na Tabela 2, e, utilizando a equação (102), pode-se calcular os valores do coeficiente de amortecimento v_A^* , observar Tabela 2.

Tanto o modelo LSD, equação (56), quanto o modelo HSD-A, equação (87), resultam no coeficiente de restituição independente da velocidade de impacto. Como comentado anteriormente, estudos experimentais desenvolvidos por Goldsmith (1960) e Kuwabara e Kono (1987) apontam que em colisões reais há uma discreta diminuição monótona de e_n com a velocidade de impacto.

A força tangencial de mola, no modelo HSD-A é calculada usando a equação (82). Para determinar a força tangencial de amortecimento é utilizada a equação (84) considerando $p=1/4$ e, para calcular os valores do coeficiente de amortecimento tangencial para o modelo HSD-A é considerada a relação com o coeficiente de restituição normal, proposta anteriormente pelas equações (89) e (102).

4.2.2 Modelo não-linear Hertiziano B (HSD-B):

Seguindo o trabalho de Hunt e Grossley (1975) e considerando $p=3/2$ na equação (83), define-se o modelo denominado, neste trabalho, por HSD-B e uma expressão para a força dissipativa pode ser dada por:

$$\vec{F}^A(\delta_n) = \eta_{n,B} \delta_n^{\frac{3}{2}} \dot{\delta}_n \quad (103)$$

onde, $\eta_{n,B}$ é o coeficiente de amortecimento não-linear para o modelo HSD-B.

A equação de deslocamento para a sobreposição normal é expressa pela equação do oscilador amortecido não-linear, através da equação (103), como:

$$m_{eff} \ddot{\delta}_n = -k_{n,Hz} \delta_n^{\frac{3}{2}} - \eta_{n,B} \delta_n^{\frac{3}{2}} \dot{\delta}_n \quad (104)$$

A partir da equação (104), e, utilizando os mesmos parâmetros adimensionais da equação (88), a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional na direção normal, δ_n^* , pode ser escrita como:

$$\delta_n^{*''} + 2v_B^* \delta_n^{*3/2} \delta_n^{*'} + \delta_n^{*3/2} = 0 \quad (105)$$

onde, da mesma forma que anteriormente, a linha ' indica a derivada em relação à t^* e o parâmetro v_B^* é o coeficiente de amortecimento adimensional dado por:

$$v_B^* = \frac{1}{2} \frac{\eta_{n,B} V_0}{k_{n,Hz}} \quad (106)$$

Pode-se observar, através da equação (106), que o valor coeficiente de restituição diminui com a velocidade de impacto e como comentado anteriormente, estudos experimentais desenvolvidos por Goldsmith (1960) e Kuwabara e Kono (1987) apontam que em colisões reais há uma discreta diminuição monótona de e_n com a velocidade de impacto.

A equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, equação (105), pode ser resolvida numericamente, com condições iniciais de $\delta_n^*(0)=0$ e $\delta_n^{*'}(0)=1$. Utilizando algoritmos computacionais, a sobreposição máxima adimensional, o tempo de contato adimensional e a sobreposição média adimensional são, respectivamente, determinados pelas equações (90), (91) e (92).

As figuras 12, 13 e 14 apresentam os gráficos para o modelo HSD-B da sobreposição adimensional δ^* versus tempo adimensional t^* , da velocidade adimensional v^* versus tempo adimensional t^* e da aceleração adimensional a^* versus sobreposição adimensional δ^* , respectivamente, para diversos valores do coeficiente de amortecimento adimensional v_B^* , $v_B^*=0;0,1;0,2;0,3;0,4;0,5;0,6;0,7$. Em todos os casos, as figuras foram obtidas até o tempo de contato.

Figura 12: Sobreposição adimensional (modelo HSD-B).

Figura 13: Velocidade adimensional (modelo HSD-B).

Figura 14: Aceleração adimensional (modelo HSD-B).

Convém ressaltar o comportamento observado na Figura 14, constata-se que a força de contato é contínua no início e no fim do contato entre as partículas, isto é, a aceleração começa e termina com o valor zero. Nota-se também que as forças de contato no final do contato são repulsivas ($a^* < 0$), o que ocorre em colisões reais.

A Tabela 3 exhibe, para os diversos valores do coeficiente de amortecimento adimensional v_B^* , os valores adimensionais dos seguintes parâmetros: coeficiente de restituição e_n , tempo no qual a sobreposição máxima ocorre t_{max}^* , sobreposição máxima δ_{max}^* , sobreposição média $\bar{\delta}_n^*$, tempo de contato $t_{c,n}^*$, aceleração inicial $a^*(0)$ e aceleração no tempo final do contato $a^*(t_{c,n}^*)$. Esses parâmetros são calculados numericamente por meio das equações (90), (91) e (92). Já o coeficiente de restituição e a aceleração são computados, utilizando, respectivamente, as seguintes expressões: $e_n = -\dot{\delta}_n^*(t_{c,n}^*)$ e $a^* = v_B^*$.

Tabela 3: Parâmetros adimensionais para o modelo HSD-B.

v_B^*	e_n	t_{max}^*	δ_{max}^*	$\bar{\delta}_n^*$	$t_{c,n}^*$	$a^*(0)$	$a^*(t_{c,n}^*)$
0,0000	1,0000	1,6090	1,0934	0,6833	3,2181	0,0000	0,0000
0,0100	0,9868	1,6039	1,0876	0,6797	3,2224	0,0000	0,0000
0,0200	0,9740	1,5989	1,0820	0,6762	3,2268	0,0000	0,0000
0,0300	0,9615	1,5941	1,0764	0,6727	3,2312	0,0000	0,0000
0,0400	0,9494	1,5893	1,0710	0,6693	3,2356	0,0000	0,0000
0,0500	0,9375	1,5846	1,0657	0,6659	3,2401	0,0000	0,0000
0,0600	0,9259	1,5799	1,0605	0,6627	3,2447	0,0000	0,0000
0,0700	0,9146	1,5754	1,0554	0,6594	3,2493	0,0000	0,0000
0,0800	0,9035	1,5709	1,0504	0,6563	3,2539	0,0000	0,0000
0,0900	0,8927	1,5666	1,0455	0,6531	3,2586	0,0000	0,0000
0,1000	0,8822	1,5622	1,0407	0,6501	3,2633	0,0000	0,0000
0,1500	0,8329	1,5417	1,0179	0,6355	3,2875	0,0000	0,0000
0,2000	0,7885	1,5228	0,9970	0,6220	3,3125	0,0000	0,0000
0,2500	0,7484	1,5052	0,9778	0,6094	3,3383	0,0000	0,0000
0,3000	0,7120	1,4887	0,9599	0,5977	3,3647	0,0000	0,0000
0,3500	0,6786	1,4733	0,9433	0,5867	3,3916	0,0000	0,0000
0,4000	0,6480	1,4588	0,9277	0,5763	3,4192	0,0000	0,0000
0,4500	0,6197	1,4451	0,9131	0,5665	3,4472	0,0000	0,0000
0,5000	0,5936	1,4322	0,8994	0,5573	3,4757	0,0000	0,0000
0,5500	0,5694	1,4199	0,8864	0,5485	3,5046	0,0000	0,0000
0,6000	0,5469	1,4083	0,8742	0,5401	3,5339	0,0000	0,0000
0,7000	0,5062	1,3865	0,8515	0,5245	3,5936	0,0000	0,0000
0,8000	0,4704	1,3665	0,8309	0,5102	3,6547	0,0000	0,0000
0,9000	0,4388	1,3482	0,8121	0,4970	3,7169	0,0000	0,0000

Os parâmetros contidos na Tabela 3, foram calculados utilizando o programa MatLab®, APÊNDICE B – MATLAB® - B3. Primeiramente são dados os valores de v_B^* para após resolver-se a equação diferencial ordinária não-linear (105), com uma tolerância relativa de 10^{-8} e absoluta de 10^{-12} e encontram-se os parâmetros listados na Tabela 3.

Com a finalidade de encontrar uma relação para o coeficiente de amortecimento não-linear do modelo HSD-B são realizados os mesmos procedimentos, propostos por Antypov e Elliott (2011) e utilizados na equação do modelo não-linear – HSD-A, equação (88). Logo, considerando a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, equação (105), desde que:

$$v(t) = \frac{d\delta_n^*}{dt} \quad \text{e} \quad \delta_n^{*''} = \frac{d\delta_n^*}{dt} \frac{dv}{d\delta_n^*} \quad (107)$$

a equação (105) pode ser reescrita como:

$$v \frac{dv}{d\delta_n^*} + 2v_B^* \delta_n^{*3/2} v + \delta_n^{*3/2} = 0 \quad (108)$$

Substituindo δ_n^* por $x(t)$ tal como:

$$\delta_n^* = A \cdot x^n \quad \text{e} \quad d\delta_n^* = n \cdot A \cdot x^{n-1} dx \quad (109)$$

tem-se:

$$v \frac{dv A^{-1} x^{1-n}}{n dx} + 2v_B^* A^{3/2} x^{3n/2} v + A^{3/2} x^{3n/2} = 0 \quad (110)$$

Definindo um valor para n de forma que as potências de x tornem-se iguais, ou seja, $1-n=3n/2$, assim, n deverá ser igual a $2/5$ e substituindo $n=2/5$ na equação (110):

$$v \frac{dv A^{-1} x^{3/5}}{\frac{2}{5} dx} + 2v_B^* A^{3/2} x^{3/5} v + A^{3/2} x^{3/5} = 0 \quad (111)$$

Dividindo a equação (111) por $(x)^{3/5}$:

$$v \frac{5 dv A^{-1}}{2 dx} + 2v_B^* A^{3/2} v + A^{3/2} = 0 \quad (112)$$

Considerando um valor para A , tal que seus expoentes se igualem, isto é, $5A^{-1}/2 = A^{3/2}$, logo, $A = (5/2)^{2/5}$. Assim, substituindo o valor encontrado para A , na equação

(112), obtém-se:

$$v \left(\frac{5}{2} \right)^{3/5} \frac{dv}{dx} + 2 v_B^* \left(\frac{5}{2} \right)^{3/5} v + \left(\frac{5}{2} \right)^{3/5} = 0 \quad (113)$$

Dividindo a equação (113) por $\left(\frac{5}{2} \right)^{3/5}$:

$$v \frac{dv}{dx} + 2 v_B^* v + 1 = 0 \quad (114)$$

Voltando aos parâmetros substituídos pelas equações (107) e (109) tem-se:

$$\delta_n^{*''} + 2 v_B^* \delta_n^{*'} + 1 = 0 \quad (115)$$

Como não é possível relacionar a equação (115) com o modelo linear – LSD ou com o modelo não-linear HSD-A, optou-se por resolvê-la utilizando o programa Maple. Considerando a equação (115), com condições iniciais de $\delta_n^*(0)=0$ e $\delta_n^{*'}(t^*)=1$ obtém-se:

$$\delta_n^*(t^*) = -\frac{1}{4} \frac{\exp(-2 t^* v_B^*) (2 v_B^* + 1)}{v_B^*} - \frac{1}{2} \frac{t^*}{v_B^*} + \frac{1}{4} \frac{2 v_B^* + 1}{v_B^{*2}} \quad (116)$$

logo, como $e_n = -\delta_n^{*'}(t^*)$ tem-se:

$$e_n = -\frac{1}{2} \frac{\exp(-2 t^* v_B^*) (2 v_B^* + 1)}{v_B^*} + \frac{1}{2 v_B^*} \quad (117)$$

Observando a equação (117) percebe-se que não é possível encontrar a inversa para e_n , ou seja, não há como escrever v_B^* em função de e_n . Diante desse fato, é necessário encontrar relações que associem o valor de v_B^* em função de e_n .

A força tangencial de mola, no modelo HSD-B é calculada usando a equação (82). Para determinar a força tangencial de amortecimento é utilizada a equação (84) considerando $p=3/2$ e, para calcular os valores do coeficiente de amortecimento tangencial para o modelo HSD-B é considerada a relação com o coeficiente de restituição normal, proposta anteriormente pela equação (106) e a seguir pela equação (125).

4.2.2.1 *Relações para o cálculo do coeficiente de amortecimento do modelo não-linear Hertiziano B (HSD-B)*

O comportamento das partículas pode ser afetado pelas colisões, portanto, é essencial utilizar um método eficaz para tratar as colisões de partículas. Ou seja, o modelo de contato utilizado para descrever o contato entre as partículas é de extrema importância e afeta diretamente o resultado obtido nas simulações, conforme observado por Zhang et al. (2015) e Alves et al. (2015). Sendo assim, diversas relações para o cálculo do coeficiente de amortecimento estão disponíveis na literatura, e, nesta seção há um estudo comparativo das principais delas e a proposta de uma nova relação para o cálculo do coeficiente de amortecimento, uma expressão aproximada, relacionando o coeficiente de amortecimento com o coeficiente de restituição, uma abordagem simples de se implementar no código MFIX e em adição, contribui para a diminuição do tempo computacional.

Hunt e Grossley (1975) propõem a seguinte relação para o cálculo do coeficiente de amortecimento $\eta_{n,B}$:

$$\eta_{n,B} = \frac{3}{2} \frac{k_{n,HZ}(1-e_n)}{v_0} \quad (118)$$

Substituindo a equação (118) na equação (106), o coeficiente de amortecimento adimensional é dado por:

$$v_B^* = \frac{3}{4}(1-e_n) \quad (119)$$

Baseados na análise de Hunt e Grossley (1975), Lankarani e Nikravesch (1990) e Lankarani e Nikravesch (1994) estabelecem:

$$\eta_{n,B} = \frac{3}{2} \frac{k_{n,HZ}(1-e_n^2)}{v_0} \quad (120)$$

E, novamente, substituindo a equação (120) na equação (106), o coeficiente de amortecimento adimensional é calculado por:

$$v_B^* = \frac{3}{8}(1 - e_n^2) \quad (121)$$

Convém ressaltar que o modelo proposto por Hunt e Grossley (1975) e Lankarani e Nikravesh (1990) é válido somente para altos valores do coeficiente de restituição.

Flores et al. (2011) obtêm uma expressão para $\eta_{n,B}$:

$$\eta_{n,B} = \frac{8}{5} \frac{k_{n,HZ}(1 - e_n)}{e_n v_0} \quad (122)$$

E, para calcular v_B^* , basta substituir novamente a equação (122) na equação (106):

$$v_B^* = \frac{4}{5} \left(\frac{1 - e_n}{e_n} \right) \quad (123)$$

Hu et al. (2011) propõem uma expressão para o coeficiente de amortecimento adimensional obtido através de uma aproximação numérica, como $(e_n \in [0,05; 1,0])$:

$$v_B^* = \frac{1}{2} \ln e_n \frac{6,66264}{3,85238 + \ln e_n} \quad (124)$$

Baseando-se no trabalho de Hu et al. (2011) e observando a equação (117), percebe-se que para aprimorar a relação entre v_B^* e e_n , é necessário acrescentar mais um parâmetro, neste caso o parâmetro c , a fim de ajustar o valor de $\ln e_n$, tendo em vista que na equação (117) existem parâmetros exponenciais. Logo, uma melhor aproximação para o cálculo do coeficiente de amortecimento adimensional pode ser proposta, considerando, para esse caso, $e_n \in [0,3; 1,0]$:

$$v_B^* = \frac{1}{2} \ln e_n \frac{a}{b + c \ln e_n} \quad (125)$$

onde $a = 8,693764$ $b = 5,573076$ e $c = 1,966760$

Vale ressaltar, que para o cálculo dos parâmetros a , b e c é utilizado o programa MatLab®, ver APÊNDICE B – MATLAB® - B4. Primeiramente é calculado o valor de e_n em função de v_B^* e t^* , com v_B^* variando na faixa de $[0; 1,5]$ e utilizando um incremento 0,001. A tolerância usada para calcular e_n é de 10^{-16} .

A função utilizada para calcular a nova variável t^* no final do contato, é encontrada

utilizando o programa Maple, considerando a equação (116), com $\delta_n^*(t^*)=0$, multiplicando-a por $4 v_B^*$ e rearranjando-a, tem-se:

$$0 = \left(1 - \exp(-2 t^* v_B^*)\right) (2 v_B^* + 1) - 2 v_B^* t^* \quad (126)$$

Isolando t^* (no final do contato) na equação (126) e rearranjando-a, encontra-se:

$$t^* = \frac{1}{2 v_B^*} \left[1 - \exp(-2 t^* v_B^*) (2 v_B^* + 1) \right] + 1 \quad (127)$$

relacionando a equação (117) com a (127) tem-se que $e_n = t^* - 1$.

Para calcular os parâmetros a , b e c é utilizado o método de regressão não-linear, com um máximo de interação de 100 e tolerância para a soma dos quadrados de 10^{-16} . Como tentativa inicial, para o parâmetro a , são considerados valores próximos a 6,0, já para o parâmetro b , são considerados valores próximos a 4,0 e para c , próximos a 2,0.

A Tabela 4 exhibe uma comparação dos valores de v_B^* obtidos através das equações (119), (121), (123), (124) e (125) com os valores de e_n e v_B^* calculados numericamente e estabelecidos na Tabela 3. Pode-se perceber que para altos valores de e_n , ($e_n > 0,94$), todos os modelos (equações (119), (121), (123), (124) e (125)) se aproximam dos valores de v_B^* calculados numericamente (ver primeira coluna da Tabela 4).

O modelo proposto por Flores et al. (2011), equação (123), está bem estabelecido no intervalo de $0,64 < e_n \leq 1,0$. As aproximações propostas por Hu et al. (2011), equação (124), e, a aproximação proposta neste trabalho, equação (125), são as que mais se igualam aos valores v_B^* calculados numericamente, durante uma faixa de valores para e_n . Tal análise fica evidente ao se comparar o erro relativo de cada modelo. No entanto, ao se comparar os valores obtidos pelas equações (124) e (125), percebe-se que a aproximação proposta neste trabalho (equação (125)), melhor se equipara aos valores v_B^* calculados numericamente, sendo que, por exemplo, para o caso no qual $v_B^* = 0,01$, o valor obtido por Hu et al. (2011) (equação (124)) será de 0,0115, computando um erro relativo de 14,934%, e, o valor obtido para v_B^* calculado pela aproximação proposta neste trabalho (equação (125)) será de 0,0104, computando um erro relativo de 3,7970%, aproximadamente 4 vezes menor.

Tabela 4: Comparação dos valores de v_B^* utilizando vários modelos.

v_B^*	e_n	Equação (119)		Equação (121)		Equação (123)		Equação (124)		Equação (125)	
		v_B^*	Erro (%)	v_B^*	Erro (%)	v_B^*	Erro (%)	v_B^*	Erro (%)	v_B^*	Erro (%)
0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
0,0100	0,9868	0,0099	1,3141	0,0098	1,9633	0,0107	6,6685	0,0115	14,934	0,0104	3,7970
0,0200	0,9740	0,0195	2,5908	0,0192	3,8560	0,0213	6,6741	0,0229	14,579	0,0207	3,6040
0,0300	0,9615	0,0289	3,8319	0,0283	5,6816	0,0320	6,68	0,0343	14,233	0,0310	3,4181
0,0400	0,9494	0,0380	5,0389	0,0370	7,4436	0,0427	6,6955	0,0456	13,896	0,0413	3,2390
0,0500	0,9375	0,0469	6,2134	0,0454	9,1453	0,0534	6,7111	0,0568	13,567	0,0515	3,0664
0,0600	0,9259	0,0556	7,3566	0,0535	10,790	0,0640	6,7299	0,0679	13,246	0,0617	2,9001
0,0700	0,9146	0,0641	8,4699	0,0613	12,380	0,0747	6,7517	0,0791	12,933	0,0719	2,7399
0,0800	0,9035	0,0724	9,5546	0,0689	13,917	0,0854	6,7764	0,0901	12,628	0,0821	2,5855
0,0900	0,8927	0,0804	10,612	0,0761	15,406	0,0961	6,8039	0,1011	12,330	0,0922	2,4368
0,1000	0,8822	0,0884	11,642	0,0832	16,847	0,1068	6,8341	0,1120	12,039	0,1023	2,2937
0,1500	0,8329	0,1253	16,435	0,1149	23,418	0,1605	7,0229	0,1660	10,683	0,1525	1,6546
0,2000	0,7885	0,1586	20,702	0,1418	29,086	0,2145	7,2672	0,2189	9,4709	0,2023	1,1298
0,2500	0,7484	0,1887	24,530	0,1649	34,023	0,2689	7,5589	0,2710	8,3835	0,2518	0,7043
0,3000	0,7120	0,2160	27,988	0,1849	38,359	0,3237	7,8914	0,3222	7,4035	0,3011	0,3656
0,3500	0,6786	0,2411	31,127	0,2023	42,195	0,3789	8,2591	0,3728	6,5172	0,3504	0,1037
0,4000	0,6480	0,2640	33,994	0,2176	45,612	0,4346	8,6575	0,4229	5,7133	0,3996	0,0896
0,4500	0,6197	0,2852	36,623	0,2310	48,673	0,4909	9,0825	0,4724	4,9822	0,4490	0,2213
0,5000	0,5936	0,3048	39,044	0,2429	51,429	0,5477	9,5308	0,5216	4,3158	0,4985	0,2973
0,5500	0,5694	0,3230	41,281	0,2534	53,924	0,6050	9,9993	0,5704	3,7072	0,5482	0,3226
0,6000	0,5469	0,3399	43,357	0,2629	56,191	0,6629	10,486	0,6189	3,1505	0,5982	0,3015
0,7000	0,5062	0,3704	47,089	0,2789	60,154	0,7805	11,502	0,7152	2,1727	0,6991	0,1342
0,8000	0,4704	0,3972	50,354	0,2920	63,499	0,9005	12,565	0,8108	1,3486	0,8014	0,1801
0,9000	0,4388	0,4209	53,237	0,3028	66,358	1,0229	13,661	0,9059	0,6518	0,9056	0,6228

Ao se comparar as aproximações para cálculo de v_B^* propostas pelas equações (124) e (125), utilizando todo o intervalo válido para e_n , ou seja, $e_n \in [0,3;1,0]$ e $v_B^* \in [0;1,5]$, computa-se um erro relativo médio de 3,9020% utilizando a equação (124) e um erro relativo médio de 1,5434% ao usar a equação (125). Já o erro relativo máximo calculado aplicando a equação (124) será de 15,2622% para o caso no qual $e_n=0,9987$ e $v_B^*=0,003$, e, através da equação (125) computa-se um erro relativo máximo de 5,3325% para $e_n=0,3$ e $v_B^*=1,5$. Logo, fica evidente que para a faixa de valores $e_n \in [0,3;1,0]$ a melhor aproximação é a proposta neste trabalho por meio da equação (125).

4.2.2.2 *Relações para o cálculo do tempo de contato do modelo não-linear Hertiziano B (HSD-B)*

Os trabalhos de Lankarani e Nikraves (1994), Kruggel-Emden et al. (2007), Antypov e Elliott (2011) e Navarro e Souza Braun (2013) trazem um breve detalhamento sobre o cálculo do tempo de contato para o modelo não-linear. No entanto, com a finalidade de aprimorar o modelo não-linear HSD-B e propor uma relação específica para o cálculo do tempo de contato em função do coeficiente de restituição para esse modelo. Este trabalho, baseando-se no modelo linear (LSD) e seguindo o mesmo padrão utilizado para o cálculo da relação do coeficiente de amortecimento, o tempo de contato é dado através de uma função de aproximação.

Utilizando a equação (70) e a Tabela 3 é proposta uma nova relação para o cálculo do tempo de contato adimensional, $t_{c,n}^*$, uma expressão aproximada, relacionando o tempo de contato com o coeficiente de restituição.

$$t_{c,n}^* = a \pi \sqrt{\left(1 + \frac{b \ln^2 e_n}{\pi^2}\right)} \quad (128)$$

onde $a=1,041975$ e $b=3,126425$

Tabela 5: Comparação dos valores de $t_{c,n}^*$.

v_B^*	e_n	$t_{c,n}^*$ - Tabela 3	$t_{c,n}^*$ - equação (128)	Erro (%)
0,0000	1,0000	3,2181	3,2735	1,7215
0,0100	0,9868	3,2224	3,2735	1,5858
0,0200	0,9740	3,2268	3,2738	1,4565
0,0300	0,9615	3,2312	3,2742	1,3308
0,0400	0,9494	3,2356	3,2748	1,2115
0,0500	0,9375	3,2401	3,2756	1,0956
0,0600	0,9259	3,2447	3,2765	0,9801
0,0700	0,9146	3,2493	3,2776	0,8709
0,0800	0,9035	3,2539	3,2788	0,7652
0,0900	0,8927	3,2586	3,2801	0,6598
0,1000	0,8822	3,2633	3,2816	0,5608
0,1500	0,8329	3,2875	3,2908	0,1004
0,2000	0,7885	3,3125	3,3026	0,2989
0,2500	0,7484	3,3383	3,3167	0,64704
0,3000	0,7120	3,3647	3,3329	0,9451
0,3500	0,6786	3,3916	3,3506	1,209
0,4000	0,6480	3,4192	3,3697	1,4477
0,4500	0,6197	3,4472	3,3900	1,6593
0,5000	0,5936	3,4757	3,4115	1,8471
0,5500	0,5694	3,5046	3,4339	2,0173
0,6000	0,5469	3,5339	3,4572	2,1704
0,7000	0,5062	3,5936	3,5056	2,4488
0,8000	0,4704	3,6547	3,5561	2,6979
0,9000	0,4388	3,7169	3,6080	2,9299

Observando a Tabela 5 pode-se notar que a expressão proposta para o cálculo do tempo de contato do modelo HSD-B (equação (128)) é uma boa aproximação, tendo em vista os pequenos valores computados para o erro quando compara-se com os valores calculados

numericamente, sendo que o erro máximo ocorrido é de 2,9299%, este calculado para os valores de $e_n=0,4388$ e $v_B^*=0,9$.

Vale ressaltar, que para os cálculos dos parâmetros a e b é utilizado o programa MatLab®, ver APÊNDICE B – MATLAB® - B6, através do método de regressão não-linear, com um máximo de interação de 100 e tolerância para a soma dos quadrados de 10^{-16} . Para o parâmetro a , considerando que quando $e_n=1$ tem-se $t_{c,n}^*=3,2181$ (ver Tabela 3), pode-se concluir que $a=\frac{t_{c,n}^*}{\pi}$, assim, são adotados para a valores próximos a 1,024337, já para o parâmetro b , para as tentativas iniciais são considerados valores próximos a 3,0.

As relações propostas neste trabalho, por meio das equações (125) e (128) são a principal contribuição deste trabalho, pois além de apresentarem baixo erro ao se comparar com o seus valores calculados numericamente, podem ser aplicadas em problemas de dinâmica, escoamentos gás-sólido e granulares.

V. METODOLOGIA

Neste capítulo estão descritas a metodologia e as principais informações sobre o código utilizado nas simulações, o MFIX.

A metodologia de desenvolvimento da presente pesquisa está dividida em três partes: pesquisa bibliográfica dos modelos de contato, que pode ser encontrada no capítulo II, estudo analítico e numérico desses modelos, descritos no capítulo IV, e, testes de problemas com a realização de experimentos numéricos, utilizando o código computacional MFIX, constantes do capítulo VI da presente pesquisa.

Com base no estudo teórico e analítico realizado, define-se o objetivo e originalidade desta pesquisa, que é de aprimorar o modelo não-linear para cálculo das forças de contato, o modelo HSD-B, através da proposta de relações para mecanismo de contato entre partículas.

Foi selecionado como foco da proposta das relações para o contato o modelo HSD-B, pois nesse modelo além do valor do coeficiente de restituição diminuir com a velocidade de impacto, constata-se que a força de contato é contínua no início e no fim do contato entre as partículas e que as forças de contato no final do contato são repulsivas. Ou seja, o modelo HSD-B apresenta um comportamento físico para o contato, conforme pode ser observado no capítulo IV, item 4.2.2 modelo não-linear Hertziano B (HSD-B).

Utilizando o modelo discreto com uma abordagem dinâmica baseada em um sistema mola-massa-amortecedor, o modelo esfera suave, este trabalho propõe novas relações para o cálculo do coeficiente de amortecimento e tempo de contato em função do coeficiente de

restituição, equações 125 e 128, respectivamente. Essas relações são fundamentadas em sistema dinâmico e contínuo para o contato.

Como o modelo proposto não está implementado no MFIX, houve a necessidade de alterar o código e acrescentar as novas relações propostas. O código computacional MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges), é um código aberto, escrito na linguagem de programação Fortran e está em constante desenvolvimento pelo Departamento de Energia NETL (National Energy Technology Laboratory), ver Syamlal et al. (1993).

Na Figura 15 está um breve esquema sobre o funcionamento das simulações numéricas utilizando o MFIX. O usuário define no arquivo mfix.dat todos os parâmetros de entrada utilizados nas simulações, tais como, a geometria do problema proposto, densidade, diâmetro da partícula, as condições iniciais e de contorno, etc. Após, esse arquivo é executado no código MFIX com o auxílio dos arquivos .f (calc_force_des.f, cfassign.f, etc), que são vários arquivos escritos na linguagem de programação FORTRAN e que definem todo o equacionamento do código MFIX. Obtendo-se como resultado os arquivos de saída, .OUT, .LOG, .SPX, .RES e .vtp. Esses arquivos de saída contêm as informações das simulações, tais como, mensagens de erro, informações sobre convergência e número de iterações, etc. Os arquivos .RES e .vtp são necessários para o pós-processamento, que é realizado com a utilização do programa ParaView, para o caso dos arquivos .vtp, utilizando a abordagem discreta, e, o Post_Mfix, para o caso dos arquivos .RES. Os arquivos resultantes da utilização do Post_Mfix são processados com a utilização do programa SciDavis para a elaboração do gráfico desejado.

Como dito anteriormente, para adequar o código MFIX às equações propostas neste trabalho é necessário alterar alguns arquivos .f. Abaixo estão elencados os arquivos modificados para as simulações:

- calc_force_des.f: o arquivo foi alterado com a finalidade de acrescentar o modelo HSD-B no código MFIX, ou seja, incluir a equação (105).
- cfassign.f: nesse arquivo são inseridas as equações (125) e (128), adequando-as tanto na direção normal, quanto na tangencial.
- particles_in_cell.f: a alteração desse arquivo é realizada para que o código salve as velocidades nos arquivos de saída, para posterior elaboração dos gráficos.

Após realizar essas alterações no código tem-se definido e implementado o modelo

HSD-B. Convém ressaltar que todas as equações inseridas no código MFIX (equações (105), (125) e (128)) estão na sua forma dimensional, sendo assim, para o cálculo do coeficiente de amortecimento e tempo de contato dimensionais é necessário definir o valor da velocidade relativa inicial v_0 .

Figura 15: Esquema de funcionamento das simulações.

VI. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo tem como objetivo apresentar e discutir os resultados obtidos nas simulações numéricas. Na primeira seção, 6.1, é analisado um problema trivial utilizado para o estudo de colisão, comparando os resultados obtidos no modelo HSD-A (já implementado no MFIX) com os do modelo HSD-B, utilizando as funções de aproximação proposta nesse trabalho, equações (125) e (128).

Na seção 6.2, são discutidos os resultados obtidos da simulação de um leito fluidizado. São comparados os modelos HSD-A, HSD-B, LSD, um caso no qual o efeito da amortização não é considerado, ou seja, $\nu=0$ e os casos experimentais proposto por Müller et al. (2008) e Müller et al. (2009).

Na próxima seção, 6.3, é estudado o comportamento dos materiais granulares na taxa de descarga em *hopper* bidimensional. São apresentados primeiramente, os resultados comparativos de duas teorias contínuas para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime plástico, uma proposta por Srivastava e Sundaresan (2003), o modelo S-S, e, outra proposta Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), o modelo S-R-O. Após, são apresentados os resultados da análise da influência do gás e do coeficiente de arrasto na interface em escoamentos granulares em *hoppers*. E, por último, é apresentado uma análise comparativa dos modelos hidrodinâmicos de dois fluidos, S-S e S-R-O com o método dos elementos discretos, modelos LSD e HSD-B.

Na seção 6.4, a taxa de descarga de um *hopper* tridimensional é utilizada para um estudo comparativo entre os modelos HSD-A, HSD-B, dados experimentais e numéricos. No primeiro caso, os estudos experimentais e numéricos são propostos por Li et al. (2004) e no segundo caso, são propostos por Tao et al. (2010).

Todas as simulações numéricas foram realizadas no código computacional MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges), que é um código aberto, escrito na linguagem de programação Fortran e está em constante desenvolvimento pelo Departamento de Energia NETL (National Energy Technology Laboratory), ver Syamlal et al. (1993). Convém destacar, que para o caso do modelo HSD - B houve a necessidade de implementar e adaptar o código às novas equações, ver capítulo V, os demais modelos utilizados no presente trabalho já encontram-se implementados no código.

6.1 Partícula em queda livre

Nesta seção é analisado para o modelo HSD - A e o modelo HSD - B, o problema de uma esfera individual em queda livre de uma altura especificada. A partícula cai em queda livre sob a ação da gravidade, colide numa superfície plana e salta, conforme pode ser observado na Figura 16. Esse é um problema clássico e tem sido aplicado no estudo de parâmetros de colisões por vários autores, tais como, Chen, Drumm e Guiochon (2007), Flores et al. (2011), Garg et. al. (2012), Ye, Li e Zhu (2009) e Jankowski (2005).

De acordo com os trabalhos de Garg et. al. (2012) e Chen, Drumm e Guiochon (2007), nessa análise é utilizada uma esfera com diâmetro de 0,2 m em queda livre de uma altura inicial $h_0 = 0,5\text{ m}$ que colide com uma superfície fixa. Os parâmetros utilizados nessa simulação são: densidade $\rho = 2600\text{ kg/m}^3$, módulo de Young $E = 1,6916\text{ MPa}$, módulo de Young na parede $E_w = 5,0748\text{ MPa}$, coeficiente de Poisson tanto para a esfera quanto para a parede $\sigma = \sigma_w = 0$, com aceleração de gravidade $g = 9,81\text{ m/s}^2$ e dois diferentes valores para o coeficiente de restituição $e_n = 0,7$ e $e_n = 0,9$ para colisão com a superfície.

Convém ressaltar que para o modelo HSD-B a velocidade de impacto é necessária para a simulação, sendo assim, em conformidade com Garg et al. (2012), a velocidade de impacto pode ser calculada como $v_0 = -\sqrt{2g(h_0 - r_p)} = -2,801\text{ m/s}$, onde r_p é o raio da esfera.

Figura 16: Esquema de uma partícula em queda livre.

Apresenta-se a seguir os resultados obtidos da simulação de uma esfera em queda livre durante 1,6s, utilizando o modelo HSD-A e HSD-B com $e_n=0,9$. A Figura 17 mostra a posição do centro da esfera, y , e a velocidade da esfera, v , versus o tempo utilizando o modelo HSD-A com $e_n=0,9$. O contato é simulado e a esfera rebate depois do impacto com a parede. Observa-se a energia perdida devido a dissipação da força de contato. A duração do contato ocorre para valores da posição do centro da esfera $y < 0,1$ m onde as forças repulsivas atuam. Durante o tempo total de simulação, $t=1,6$ s, a esfera colide três vezes com a parede.

Ao observar a Figura 18 nota-se que não há diferenças significativas entre os modelos HSD-A e HSD-B, tendo em vista o mesmo comportamento obtido. Na Figura 18 o contato é simulado usando modelo HSD-B com $e_n=0,9$ e pode-se notar a energia perdida devido a dissipação da força de contato e que durante o tempo total de simulação, a esfera colide três vezes com a parede, o mesmo ocorrido para o modelo HSD-A.

Figura 17: Cinemática da esfera para modelo HSD-A com $e_n=0,9$:
centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera (linha pontilhada) .

Figura 18: Cinemática da esfera para modelo HSD-B com $e_n=0,9$:
centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera (linha pontilhada) .

As Figura 19 e Figura 20 apresentam os resultados obtidos da simulação de uma esfera em queda livre durante 1,6 s, utilizando os modelos HSD-A e HSD-B, respectivamente, com $e_n=0,7$. A Figura 19 exibe parâmetros cinemáticos da esfera, posição do centro y e velocidade v versus tempo, utilizando o modelo HSD-A com $e_n=0,7$. Da mesma forma que o caso anterior, quando a esfera colide com a parede, o contato ocorre e a esfera rebate. Como o coeficiente de restituição normal é menor do que a unidade, a esfera salta menos após cada contato. A duração de contato em cada salto da esfera é menor e diminui até zero, quando a esfera permanece no solo. Na Figura 19, observam-se sete colisões da esfera com a parede.

Já na Figura 20, nota-se uma diferença entre os modelos HSD-A e HSD-B, neste caso ao se utilizar o modelo HSD-B pode-se observar que a energia perdida na partícula é menor, resultando em cinco colisões da esfera com a parede, durante o tempo total de simulação.

Figura 19: Cinemática da esfera para modelo HSD-A com $e_n=0,7$:
centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera (linha pontilhada) .

Figura 20: Cinemática da esfera para modelo HSD-B com $e_n=0,7$:
centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera (linha pontilhada) .

Através dos resultados obtidos percebe-se que o modelo HSD-B diferencia-se do modelo HSD-A para menores valores do coeficiente de restituição. No entanto, ao se utilizar maiores valores do coeficiente de restituição não há diferenças significativas entre os modelos. Pode-se dizer que a diferença entre os modelos está relacionada à conservação de energia nas partículas, no modelo HSD-B a energia perdida é menor. Vale salientar, que no caso da simulação de uma partícula em queda livre não foi possível comparar o tempo computacional gasto entre os modelos HSD-B e HSD-A, devido ao fato das simulações terem sido realizadas em computadores com configurações diferentes.

6.2 Leito fluidizado tridimensional

Nesta seção, são analisados os resultados comparativos entre os modelos HSD-A, HSD-B, LSD, um caso sem dissipação e os experimentais propostos por Müller et al. (2008) e Müller et al. (2009). As simulações foram realizadas em um leito fluidizado (material Perspex), com dimensões de 44mm x 10mm x 120mm (largura x espessura x altura), similar ao experimental proposto nos trabalhos de Müller et al. (2008) e Müller et al. (2009). A Figura 21 exibe a geometria do leito fluidizado tridimensional utilizado nas simulações.

Figura 21: Geometria do leito fluidizado.

Seguindo o trabalho de Müller et al. (2009), nas simulações foram utilizadas 9240

partículas com 1,2 mm de diâmetro, equivalente à semente de papoula. O leito é fluidizado durante 25 s com uma velocidade superficial de 0,9 m/s. Os parâmetros utilizados nas simulações estão descritos na Tabela 6.

Tabela 6: Parâmetros de simulação utilizado no leito fluidizado.

<i>Leito:</i>	
Dimensões (C x L x A)	44mm x 10mm x 120mm
Módulo de Elasticidade	3 GPa
Coeficiente de Poisson	0,35
Altura do leito estático	~36 mm
Número de células nas direções x, y e z	$15 \times 40 \times 3$
<i>Partículas:</i>	
Número	9240
Densidade	1000 kg/m^3
Diâmetro	1,2 mm
Módulo de Elasticidade	$1,2 \times 10^5 \text{ Pa}$
Coeficiente de Poisson	0,33
Coeficiente de restituição partícula-partícula	0,98
Coeficiente de restituição partícula-parede	0,98
Coeficiente de fricção partícula-partícula	0,10
Coeficiente de fricção partícula-parede	0,10
<i>Fluido:</i>	
Temperatura do ar	298,15 K
Viscosidade	$1,8 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$
Densidade	$1,2 \text{ kg/m}^3$

Convém ressaltar que para o modelo LSD os valores de $K_n=7,33 \text{ N/m}$ para as colisões partícula-partícula e $K_{nw}=19,34 \text{ N/m}$ para as colisões partícula-parede, utilizados nas simulações, são baseados no trabalho de Navarro e Souza Braun (2013) e para o cálculo da

força de interação entre as fases é utilizada a equação (46). Como para o modelo HSD-B a velocidade de impacto é necessária para a simulação, sendo assim, em conformidade com os dados obtidos das simulações utilizando o modelo HSD-A, a velocidade de impacto utilizado foi de $v_0 = 0,1 \text{ m/s}$.

A Figura 22 exibe as imagens da simulação no leito tridimensional nos seguintes instantes: $t = 0,1 \text{ s}; t = 0,25 \text{ s}; t = 0,5 \text{ s}; t = 5,0 \text{ s}; t = 15 \text{ s}$ e $t = 25 \text{ s}$ para o modelo HSD-B. A Figura 22 (a) apresenta a condição inicial da simulação. A Figura 22 (b) mostra o instante depois no qual a primeira bolha atingiu a superfície, na Figura 22 (c) exibe o instante no qual a segunda bolha formada no leito atinge a superfície. A Figura 22 (d) ilustra a dinâmica do leito no instante inicial considerado para os cálculos dos valores da porosidade e velocidade vertical do sólido. A Figura 22 (e) apresenta a dinâmica do leito no instante intermediário e a Figura 22 (f) no instante final da simulação. Pode-se observar nessas figuras que o modelo HSD-B captura a formação de bolhas, nesse caso, relativamente grandes, o que é esperado devido ao tamanho pequeno do leito.

Na Figura 23 são exibidos os resultados comparativos entre os modelos HSD-A, HSD-B, LSD, um caso no qual $v = 0$ e os experimentos propostos por Müller et al. (2009), sendo comparados através dos perfis da porosidade média no tempo em duas alturas do leito: 16,4 mm (Figura 23 (a)) e 31,2 mm (Figura 23 (b)). É possível observar na Figura 23 (a) que há uma concordância entre os dados obtidos experimentalmente e todos os modelos, inclusive o modelo HSD-B. Já na Figura 23 (b) os valores de porosidade próximas as paredes são superestimados utilizando as simulações MED nos diferentes modelos. Cabe salientar que Li et al. (2012) também simularam esse problema obtendo desvios semelhantes. Pode-se notar também, através da Figura 23 que todos os modelos simulados se comportam de maneira semelhante.

O mesmo comportamento pode ser observado na Figura 24, em todos os casos fica claro que os modelos HSD-A, HSD-B, LSD e o caso sem amortecimento apresentam resultados parecidos. A Figura 24 mostra os perfis das velocidades verticais médias no tempo para o sólido em três diferentes alturas do leito: 15 mm (Figura 24 (a)), 25 mm (Figura 24 (b)) e 35 mm (Figura 24 (c)). Percebe-se que os perfis resultantes de todos os modelos são parabólicos. Observando a Figura 24 nota-se que os modelos diferem em relação aos dados experimentais perto das paredes do leito e na Figura 24 (c) há essa diferença na parte central do leito também. Li et al. (2012) simularam esse problema obtendo desvios semelhantes.

Figura 22: Perfis temporais da distribuição do sólido para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 0,25$ s; (c) $t = 0,5$ s; (d) $t = 5,0$ s; (e) $t = 15,0$ s; (f) $t = 25$ s.

Figura 23: Porosidade média no tempo em duas alturas do leito:

(a) 16,4 mm (b) 31,2 mm

(a)

(b)

(c)

Figura 24: Velocidade vertical média no tempo para o sólido em três alturas do leito:
(a) 15 mm, (b) 25 mm, (c) 35 mm

Através dos resultados obtidos percebe-se que o modelo HSD-B não se diferencia significativamente do modelo HSD-A devido ao alto valor do coeficiente de restituição utilizado. No entanto, cumpre salientar que o tempo computacional gasto é menor ao se utilizar o modelo HSD-B, no caso da simulação do leito fluidizado tridimensional o modelo HSD-B é aproximadamente 13,6 vezes mais rápido do que o modelo HSD-A. Enquanto o modelo HSD-B demorou em média 21,7 horas para a simulação terminar o modelo HSD-A despendeu aproximadamente 296 horas. Isso é um indicativo de que o modelo HSD-B tende a ser fisicamente mais coerente, tendo em vista o menor tempo computacional gasto. Convém destacar, que o computador utilizado para executar o código do programa, em ambos os modelos, tem as seguintes características: dois processadores: Intel Xeon 5675 3,06GHz, Memória Ram: 24GB; Sistema Operacional: Red Hat Enterprise Linux 6 e HD: 2000GB SATA. Destaca-se também que os autores Garg et al. (2012) variaram o valor do coeficiente de rigidez de mola, para o mesmo caso simulado e relataram que esse coeficiente não tem influência significativa nos resultados das simulações.

6.3 Estudos numéricos da descarga de *hopper* bidimensional

Hoppers são dispositivos importantes amplamente utilizados em indústrias alimentares, farmacêuticas, na agricultura, mineração e nas indústrias químicas, durante o processamento, armazenamento e escoamento de materiais granulares. A geometria do *hopper* utilizado nesta seção, consiste numa caixa retangular bidimensional, com 8 cm de largura e 100 cm de altura, onde foram acrescidos 5 cm na parte inferior a fim de possibilitar uma melhor análise do comportamento do material granular, conforme pode ser observado na Figura 25. A parte superior e inferior, acrescentando os 5 cm, encontram-se abertas e o diâmetro de saída do *hopper* é de 1,4 cm. É nesta geometria que são realizadas todas as simulações da presente seção.

Figura 25: Geometria do hopper.

Para os estudos, é analisado o escoamento de um material granular de um *hopper* durante 3,5 s. A malha utilizada para a simulação foi de 1 mm, horizontalmente, e, 2 mm, verticalmente.

A Tabela 7 exibe os valores dos parâmetros utilizados nas simulações. Para o caso monodisperso com as partículas de diâmetro de 0,05 cm o valor do coeficiente de especularidade foi diminuído de 0,25 para 0,001 pois a simulação estava demandando excessivo tempo de processamento, devido aos elevados valores da temperatura granular na parede, o que ocasionava um alto custo computacional, e, segundo Benyahia, Syamlal e O'Brien (2007), valores muito pequenos do coeficiente de especularidade são necessários para prevenir a produção de energia granular na parede, o que desestabiliza o sistema. Já para o caso polidisperso, além do coeficiente de especularidade, foram alterados também o coeficiente de restituição da fase sólida e o coeficiente de restituição da parede, ambos de 0,91 para 0,999, pois segundo Benyahia, Syamlal e O'Brien (2007), quanto maiores forem o coeficiente de restituição e o coeficiente de restituição da parede, menor será a temperatura granular próxima à parede.

Para o cálculo da taxa de descarga para os modelos contínuos foram utilizados os

seguintes parâmetros: área do orifício de saída do *hopper*, velocidade do sólido e densidade do sólido. Já, ao se comparar o modelo discreto com o modelo contínuo, para se obter a taxa de descarga utilizou-se a variação do total de massa de sólido existente no *hopper* em relação ao tempo.

Tabela 7: Valores dos parâmetros utilizados nas simulações numéricas do hopper.

Parâmetros	Valores
ρ_g - densidade do gás	$1,3 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$
μ_g - viscosidade do gás	$1,8 \times 10^{-4} \text{ g/cm.s}$
ρ_s - densidade do sólido	$2,9 \text{ g/cm}^3$
Φ - ângulo de atrito interno	$28,5^\circ$
δ - ângulo de atrito entre parede e partícula	$12,3^\circ$
ϵ_s^* - fração de sólido para a máxima compactação	0,65
ϵ_s^{min} - fração de sólido mínima	0,5
Φ' - coeficiente de especularidade	$0,25(\text{monodisperso})$ $0,001(d_p = 0,05 \text{ cm e polidisperso})$
e - coeficiente de restituição da fase sólida	$0,91(\text{monodisperso})$ $0,999(\text{polidisperso})$
e_w - o coeficiente de restituição da parede	$0,91(\text{monodisperso})$ $0,999(\text{polidisperso})$
C_{alm} - coeficiente de atrito entre as fases sólidas	0,1
t - tempo real simulado	3,5 s

6.3.1 Resultados comparativos: S-S x S-R-O

Nesta seção serão exibidos os resultados comparativos de duas teorias hidrodinâmicas de dois fluidos para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime plástico, uma proposta por Srivastava e Sundaresan (2003), o modelo S-S, e, outra proposta Syamlal,

Rogers e O'Brien (1993), o modelo S-R-O, maiores detalhes sobre essas teorias estão descritos em APÊNDICE A – APRODUNDAMENTO TEÓRICO - A1. Para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime viscoso, será utilizado a teoria cinética dos escoamentos granulares, apresentado em APÊNDICE A – APRODUNDAMENTO TEÓRICO - A2.

Os modelos foram testados tanto para o caso monodisperso, sendo realizados dois testes, um utilizando partículas com diâmetro de 0,1 cm e outro utilizando partículas com diâmetro de 0,05 cm, quanto para o caso polidisperso, no qual as partículas menores ficaram abaixo das partículas maiores, ou seja, as partículas com diâmetro de 0,05 cm estavam localizadas do fundo até a metade do *hopper* e as partículas com diâmetro de 0,1 cm da metade até o topo do *hopper*.

6.3.1.1 Resultados para os casos monodispersos

Neste item serão apresentados os resultados para os casos monodispersos, com diâmetros de partícula de 0,1 cm e 0,05 cm, sem a presença de gás, ou seja, será analisado o escoamento do material granular proveniente de um *hopper* no vácuo. Estes resultados podem ser encontrados em Jordam Caserta, Souza Braun e Navarro (2012).

A Figura 26 mostra o estado inicial, Figura 26 (a), e, final, Figura 26 (b) e Figura 26 (c), das partículas com diâmetro de 0,1 cm, representadas pela cor amarela. Apesar de não haver diferença significativa entre o modelo S-S e o S-R-O, através da Figura 27 pode-se notar que o modelo S-S apresentou maiores valores da taxa de descarga do que quando se utiliza o modelo S-R-O. Isso já era esperado devido à fundamental diferença entre os dois modelos: enquanto o modelo S-S inicia-se com a fração de sólido mínima, ϵ_s^{min} , gerando menores valores das tensões normais e de cisalhamento, o modelo S-R-O começa com a fração de sólido para a máxima compactação, ϵ_s^* .

Figura 26: Estado inicial e final da fase sólida para partículas com diâmetro de 0,1 cm e $\varphi' = 0,25$.

Figura 27: Taxa de descarga para partículas com diâmetro de 0,1 cm e $\varphi' = 0,25$.

Tal comportamento pode ser observado também quando se utiliza partículas com o diâmetro de 0,05 cm, ver Figura 28. Convém ressaltar, que para aproximadamente o instante $t=1$ s, a quase descontinuidade na taxa de descarga é ocasionada por uma oscilação momentânea e não física, pois após esse instante a taxa de descarga é contínua e o pode-se dizer que o processo se estabiliza.

Figura 28: Taxa de descarga para partículas com diâmetro de 0,05 cm e $\varphi' = 0,25$.

Quando o valor do coeficiente de especularidade é alterado de 0,25 para 0,001 ao utilizar partículas com diâmetro de 0,05 cm, o tempo computacional diminui em aproximadamente 3,5 vezes, no entanto, o modelo S-R-O torna-se transiente, ao contrário do que ocorre com o modelo S-S que não é tão sensível à mudança, conforme pode ser notado através da Figura 29 e da Figura 30.

Na Figura 29 as partículas com diâmetro de 0,05 cm estão representadas pela cor vermelha, e ao observá-la percebe-se que quando se utiliza o modelo S-R-O obtém-se no estado final menor quantidade de sólidos do que ao usar o modelo S-S. Tal situação ocorre devido ao extenso regime transiente quando se utiliza o modelo S-R-O. Além disso, ao observar a Figura 30, pode-se notar que o modelo S-R-O ainda é transiente, sendo que a taxa de descarga está diminuindo com o passar do tempo. Já o modelo S-S não é tão sensível à mudança do coeficiente de especularidade, de fato, tal mudança não afeta a estabilidade da taxa de descarga, que após um tempo fica constante.

Figura 29: Estado inicial e final da fase sólida para partículas com diâmetro de 0,05 cm e $\phi' = 0,001$.

Figura 30: Taxa de descarga para partículas com diâmetro de 0,05 cm e $\phi' = 0,001$.

6.3.1.2 Resultados para o caso polidisperso

Nesta seção são apresentados os resultados para o caso polidisperso sem a presença de gás, no qual as partículas menores estão abaixo das partículas maiores, ou seja, as partículas com diâmetro de 0,05 cm, representadas pela cor vermelha, estão localizadas do fundo até a metade do *hopper* e as partículas com diâmetro de 0,1 cm, representadas pela cor amarela, da metade até o topo do *hopper*, conforme pode ser observado na Figura 31. Convém ressaltar que estes resultados podem ser encontrados em Jordam Caserta, Souza Braun e Navarro (2012).

Ao analisar a Figura 31, percebe-se que quando se utiliza o modelo S-S obtém-se, no estado final, menores quantidade de sólidos do que ao usar o modelo S-R-O, ficando evidente o fato de não se ter mais partículas vermelhas quando utiliza o modelo S-S, tal situação ocorre

Figura 32: Taxa de descarga para o caso polidisperso.

6.3.1.3 Correlação de Beverloo

Os resultados obtidos das simulações para todos os casos, foram comparados com uma correlação conhecida como Correlação de Beverloo, proposta por Beverloo, Leniger e Van de Velde (1961). Tal correlação é utilizada para prever a taxa de descarga de *hoppers*, e segundo Srivastava e Sundaresan (2003), pode ser simplificada como:

$$W = C \rho_i g^{1/2} D_o^{3/2} H \quad (129)$$

onde W é a taxa de descarga, C é uma constante empírica pertencente ao intervalo $0,55 < C < 0,65$, $\rho_i = \rho_s \epsilon_s$ é a densidade da fase sólida, g é a aceleração da gravidade, D_o é o orifício de saída do *hopper* e H é a espessura do *hopper*, que no caso deste estudo é utilizado o valor de 1 cm.

Para o cálculo do valor da constante empírica C , são utilizados os valores de W , ρ_i ,

g , D_o e H que são valores conhecidos, utilizados ou obtidos nas simulações.

Para o caso monodisperso com partículas de diâmetro 0,1 cm, os valores da constante empírica C , são de 1,05 para o caso S-S e, 0,77 para o modelo S-R-O. Já para as partículas de diâmetro 0,05 com o coeficiente de especularidade de 0,25, $C=0,94$ e $C=0,72$, para os modelos S-S e S-R-O, respectivamente. E por fim, para as partículas de diâmetro 0,05 cm com o coeficiente de especularidade de 0,001, para o modelo S-S, $C=0,99$ e para o S-R-O, $C=1,66$. Em todos os casos, os valores calculados para C estão acima do intervalo proposto na correlação de Beverloo, tal fato é consequência das altas taxas de descarga obtidas em ambos os modelos.

Para o caso polidisperso não é necessário o cálculo do valor da constante C , pois é evidente que seu valor estará acima do intervalo proposto na correlação de Beverloo (BEVERLOO, LENIGER E VAN DE VELDE, 1961), devido às elevadas taxas de descarga computadas usando tanto o modelo S-S quanto o S-R-O.

6.3.2 Influência do gás em escoamentos granulares

Nesta seção são apresentados os resultados da análise da influência do gás em escoamentos granulares em *hoppers*. Para tanto, é utilizado o modelo hidrodinâmico de dois fluidos, sendo que para o cálculo do tensor das tensões do regime plástico, é usado o modelo S-S, proposto por Srivastava e Sundaresan (2003), e, para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime viscoso, é utilizado a teoria cinética dos escoamentos granulares. Os testes foram realizados para o caso monodisperso com partículas de diâmetro 0,1 cm. Estes resultados podem ser encontrados em Jordam Caserta e Navarro (2013).

A Figura 33 exibe a taxa de descarga de um *hopper* na presença de gás e no vácuo, observando essa figura pode-se notar que a taxa de descarga é maior na presença de gás. Isso já era esperado devido ao fato de que com a presença do ar há um aumento na mobilidade das partículas. Essa simulação é realizada utilizando modelo para o cálculo do coeficiente de

arrasto proposto por Wen e Yu (1966).

Figura 33: Taxa de descarga com e sem a fase do gás.

A fim de analisar a influência do cálculo do coeficiente de arrasto na interface na taxa de descarga, duas teorias foram testadas, uma proposta por Wen e Yu (1966) e outra disponível em Syamlal et al. (1993), ambas na presença de gás. Esse resultado também podem ser encontrado em Jordam Caserta e Navarro (2013). A Figura 34 indica claramente que não há diferença significativa entre os modelos, sendo que a estabilidade da taxa de descarga é praticamente a mesma em ambos os modelos. Logo, neste caso, pode-se dizer que a taxa de descarga praticamente não é influenciada pelo cálculo do coeficiente de arrasto na interface.

Figura 34: Taxa de descarga utilizando o modelo proposto por Wen e Yu versus Syamlal et al. para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface.

6.3.2.1 Correlação de Beverloo

Os resultados obtidos das simulações para a presença do gás e no vácuo foram comparados com a Correlação de Beverloo, proposta por Beverloo, Leniger e Van de Velde (1961). Para a presença de ar, utilizando a correlação de arrasto na interface proposta por Wen e Yu (1966), o valor da constante empírica C , é de 1,93, quando utiliza-se a correlação de arrasto na interface proposta por Syamlal et al. (1993), $C=1,91$. Já para o caso da taxa de descarga sem a presença de gás, o valor da constante empírica C é de 1,22. Em todos os casos os valores da constante empírica C é maior do que o intervalo proposto em Srivastava e Sundaresan (2003), como consequência das altas taxas da descarga.

6.3.3 Resultados comparativos: Modelo Discreto (LSD e HSD-B) x Modelo Contínuo (S-S e S-R-O)

Nesta seção são exibidos os resultados comparativos dos modelos LSD, HSD-B com duas teorias hidrodinâmicas de dois fluidos para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime plástico, uma proposta por Srivastava e Sundaresan (2003), o modelo S-S, e, outra proposta Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), o modelo S-R-O.

Os modelos são testados para o caso monodisperso, sendo realizados dois testes, um utilizando partículas com diâmetro de 0,1 cm e outro utilizando partículas com diâmetro de 0,05 cm. Em ambos os casos, a análise da taxa de descarga do *hopper* é realizada na presença de gás, utilizando a relação proposta por Wen e Yu (1966) para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface.

Os parâmetros utilizados nas simulações dos modelos contínuos encontram-se na Tabela 7. Já para os modelo LSD é usado, em ambos os casos, o coeficiente de rigidez da mola na direção normal, $K_n = 2 \times 10^5 N/m$, e o coeficiente de restituição na direção normal, $e_n = 0,94$. Para o modelo HSD-B, em ambos os casos, com partículas com diâmetro de 0,05 cm e 0,1 cm, são utilizadas 32.085 partículas nas simulações, para o cálculo da força de interação entre as fases é utilizada a equação (46) e baseando-se no modelo LSD é utilizado $v_0 = 200 m/s$.

A Figura 35 apresenta as imagens da simulação para o modelo HSD-B para partículas com diâmetro 0,1 cm representadas pela cor amarela (Figura 35 - I) e com diâmetro 0,05 cm exibidas com a cor vermelha (Figura 35 - II), em três instantes: $t=0,1$ s (Figura 35 (a) – I e II), $t=1,0$ s (Figura 35 (b) – I e II) e $t=3,5$ s (Figura 35 (c) – I e II). Ao observar a Figura 35 nota-se que para o caso com partículas com diâmetro de 0,1 cm a taxa de descarga se mantém constante durante todo o tempo da simulação. Já para o caso com partículas com diâmetro de

0,05 cm, ao final da simulação praticamente esgotam-se as partículas existentes dentro do *hopper*, diminuindo a taxa de descarga, tal fato explica o comportamento exibido na Figura 36.

A Figura 36 mostra a taxa de descarga para partículas de 0,05 cm para os modelos LSD, HSD-B, S-S e S-R-O. Pode-se notar que o valor da taxa de descarga para os modelos S-S e S-R-O estão bem próximos, diferenciando-se dos modelos LSD e HSD-B. A descontinuidade na taxa de descarga presente nos modelos LSD e HSD-B é devido à diminuição do número de partículas dentro do *hopper* durante a simulação, conforme observado anteriormente.

Para a taxa de descarga com partículas com 0,1 cm de diâmetro claramente ocorre a mesma situação, conforme pode ser observado na Figura 37. Os modelos contínuos, S-S e S-R-O apresentam uma taxa de descarga semelhante, enquanto os modelos LSD e HSD-B, apresentam uma taxa de descarga menor, em média 80 g/s. Nesse caso, a taxa de descarga permanece contínua durante todo o intervalo simulado.

Vale ressaltar, que em todos os casos a taxa de descarga foi calculada usando a variação da massa em relação ao tempo, diferentemente dos casos anteriores, onde usava-se os valores da densidade, velocidade e do diâmetro de saída do *hopper*. Em relação aos modelos LSD e HSD-B pode-se perceber que em todos os casos simulados houve um comportamento semelhante, não se diferenciando significativamente.

No caso da simulação do *hopper* bidimensional não foi possível comparar o tempo computacional gasto entre os modelos discretos, devido ao fato das simulações terem sido realizadas em computadores com configurações diferentes.

Figura 35: Imagens da simulação para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 1,0$ s; (c) $t = 2,5$ s; (d) $t = 3,5$ s para partículas com diâmetro de I – 0,1 cm e II – 0,05 cm.

Figura 36: Taxa de descarga para partículas com 0,05 cm de diâmetro.

Figura 37: Taxa de descarga para partículas com 0,1 cm de diâmetro.

6.3.3.1 *Correlação de Beverloo*

Os resultados obtidos das simulações comparativas dos modelos discretos LSD, HSD-B com as duas teorias contínuas para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime plástico, foram comparados com a Correlação de Beverloo (BEVERLOO, LENIGER E VAN DE VELDE, 1961).

Como os valores computados para a taxa de descarga são os mesmos para os modelos LSD, S-S e S-R-O, somente para o caso HSD-B houve uma pequena diferença, tanto para as partículas de diâmetro 0,05 cm, quanto as partículas de diâmetro 0,1 cm. Os valores da constante empírica C , são calculadas para os modelos S-S, S-R-O, LSD e HSD-B, sem diferenciar o diâmetro da partícula. Logo, para o modelo S-S, o valor da constante empírica C é de 1,72, para o modelo S-R-O é de 1,86, para o LSD é de 1,06 e para o modelo HSD-B é de 0,93. Em todos os casos, até mesmo utilizando o método dos elementos discretos, os valores da constante empírica C são maiores do que o intervalo proposto em Srivastava e Sundaresan (2003), como consequência das altas taxas da descarga.

6.4 Estudos comparativos da descarga de *hopper* tridimensional

Nesta seção são realizados dois estudos comparativos da taxa de descarga de um *hopper* tridimensional. A primeira análise é entre os modelos HSD-A, HSD-B, experimental e numérico propostos por Li et al. (2004). E, a segunda comparação é entre os modelos HSD-A, HSD-B, experimental e numérico propostos por Tao et al. (2010).

6.4.1 Comparação com os casos propostos por Li et al. (2004)

Neste item são analisados os resultados comparativos entre os modelos HSD-A, HSD-B, e os casos experimentais e numéricos propostos por Li et al. (2004). As simulações foram realizadas em um *hopper* tridimensional, similar ao experimental proposto no trabalho de Li et al. (2004), com dimensões de 100 mm x 26 mm x 660 mm (largura x espessura x altura) e com três diferentes tamanhos do orifício de saída: 40 mm, 55 mm e 70 mm. A Figura 38 exibe a geometria do *hopper* tridimensional utilizado nas simulações.

Figura 38: Geometria do *hopper* tridimensional proposto por Li et al. (2004).

Seguindo o trabalho de Li et al. (2004), nas simulações foram utilizadas 200 partículas com 14,74 mm de diâmetro, equivalente às esferas de chocolate utilizadas nos experimentos. A descarga do *hopper* é estudada durante 2 s. Os parâmetros utilizados nas simulações estão descritos na Tabela 8. Para o cálculo da força de interação entre as fases é utilizada a equação (46).

Para o modelo HSD-B como a velocidade de impacto é necessária, referenciando-se nos resultados obtidos do modelo HSD-A são utilizados os valores de: $v_0 = 12,5 \text{ m/s}$ para o caso no qual a abertura de saída do *hopper* é de 40 mm, $v_0 = 36,6 \text{ m/s}$ para a abertura de saída do *hopper* de 55 mm e $v_0 = 16,5 \text{ m/s}$ para a abertura de saída do *hopper* de 70 mm.

Tabela 8: Parâmetros de simulação utilizado no hopper tridimensional proposto por Li et al. (2004).

Dimensões do <i>hopper</i> (C x L x A)	100 mm x 26 mm x 660 mm
Tamanho do orifício de saída	40 mm, 55 mm e 70 mm
Posição do orifício de saída em relação ao centro do <i>hopper</i>	-20 mm até 20 mm, -20 mm até 35 mm, -20 mm até 50 mm
Número de partículas	200
Densidade	1460 kg/m ³
Diâmetro	14,74 mm
Módulo de Elasticidade	10 ⁹ Pa
Coeficiente de Poisson	0,3
Coeficiente de restituição	0,75
Coeficiente de atrito	0,25

A Figura 39 apresenta as imagens das simulações nos instantes de 0,5 s e 2,0 s para os três orifícios de saída, 40 mm (Figura 39 I – (a) e I – (b)), 55 mm (Figura 39 II – (a) e II – (b))

e 70 mm (Figura 39 III – (a) e III – (b)) para o modelo HSD-B. Ao analisar a Figura 39, percebe-se que para o caso com abertura de saída do *hopper* de 70 mm no final da simulação já não há praticamente partículas dentro do *hopper* e para os casos de 40 mm e 55 mm no final da simulação sobram várias partículas dentro do *hopper*, sugerindo que houve um empacotamento durante a descarga das partículas.

A Figura 40 exhibe os resultados da fração da taxa de descarga do *hopper* para os três diferentes orifícios de saída, 40 mm (Figura 40 (a)), 55 mm (Figura 40 (b)) e 70 mm (Figura 40 (c)). Observando a Figura 40 nota-se que ela complementa a Figura 39, ou seja, pode-se perceber que há um empacotamento das esferas em todos os modelos numéricos quando a abertura do *hopper* é 40 mm, devido ao pequeno espaço de saída do *hopper*. Li et al. (2004) relataram que o mesmo problema ocorreu ao se realizar os experimentos, houve o bloqueio na saída das partículas em dois dos três casos experimentais realizados.

Quando a abertura do *hopper* é de 50 mm (Figura 40(b)) há também um empacotamento das partículas para os modelos HSD-A e HSD-B, porém para o caso numérico e experimental proposto por Li et al. (2004) esse problema não ocorre.

No caso de abertura de saída do *hopper* ser de 70 mm (Figura 40 (c)) não há empacotamento em nenhum caso e pode-se observar as semelhanças entre os quatro casos apresentados, tanto os modelos HSD-A, HSD-B, o numérico e experimental proposto por Li et al. (2004) se estabilizam em aproximadamente 0,8 s tendo o mesmo comportamento.

Através dos resultados obtidos percebe-se que o modelo HSD-B não se diferencia significativamente do modelo HSD-A. No entanto, cumpre salientar que em todos os casos simulados, ou seja, para os três diferentes orifícios de saída, 40 mm, 55 mm e 70 mm, o tempo computacional gasto foi menor ao se utilizar o modelo HSD-B. No caso da simulação do orifício de saída de 40 mm, o modelo HSD-B foi aproximadamente 1,47 vezes mais rápido do que o modelo HSD-A, já para o caso de 55 mm, o tempo computacional gasto para o modelo HSD-B foi em média 1,31 vezes menor do que o tempo computacional gasto para o modelo HSD-A, e, para o caso de 70 mm, o modelo HSD-B foi em média 1,27 vezes mais rápido do que o modelo HSD-A. Como já comentado, isso é um indicativo de que o modelo HSD-B tende a ser fisicamente mais coerente, tendo em vista o menor tempo computacional gasto. Convém destacar, que o computador utilizado para executar o código do programa, em ambos os modelos, tem as mesmas características citadas na seção 6.2.

Figura 39: Imagens da simulação para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t=0,5$ s; (b) $t = 2,0$ s; para três orifícios de saída I – 40 mm, II- 55 mm, III – 70 mm.

Figura 40: Descarga do hopper para três orifícios de saída: (a) 40 mm, (b) 55 mm, (c) 70 mm.

6.4.2 Comparação com os casos propostos por Tao et al. (2010)

Neste item são analisados os resultados comparativos entre os modelos HSD-A, HSD-B, e os casos experimentais e numéricos propostos por Tao et al. (2010). As simulações foram realizadas em um *hopper* tridimensional, com dimensões de 310 mm x 310 mm x 730 mm (largura x espessura x altura), com um orifício de saída localizado no centro do *hopper* com dimensões de 45 mm x 45 mm, similar ao experimental proposto no trabalho de Tao et al. (2010). A Figura 41 exibe a geometria do *hopper* tridimensional utilizado nas simulações.

Figura 41: Geometria do hopper tridimensional proposto por Tao et al. (2010).

Seguindo o trabalho de Tao et al. (2010), nas simulações foram utilizadas partículas com 10 mm de diâmetro, preenchendo o *hopper* até 500 mm, fazendo uma equivalência às partículas de milho utilizadas nos experimentos. A descarga do *hopper* é analisada durante 12

s. Os parâmetros utilizados nas simulações estão descritos na Tabela 9. Para o cálculo da força de interação entre as fases é utilizada a equação (46).

Para o modelo HSD-B como a velocidade de impacto é necessária, referenciando-se nos resultados obtidos do modelo HSD-A, é utilizado o valor de $v_0 = 30 \text{ m/s}$.

Tabela 9: Parâmetros de simulação utilizado no hopper tridimensional proposto por Tao et al. (2010).

Dimensões do <i>hopper</i> (C x L x A)	310 mm x 310 mm x 730 mm
Tamanho do orifício de saída	45 mm x 45 mm
Densidade	1280 kg/m ³
Diâmetro	10 mm
Módulo de Elasticidade	10 ⁹ Pa
Coeficiente de Poisson - partícula	0,4
Coeficiente de Poisson - parede	0,33
Coeficiente de restituição	0,59
Coeficiente de fricção - partícula	0,12
Coeficiente de fricção - parede	0,25

A Figura 42 exibe as imagens das simulações nos instantes de 0,1 s (Figura 42 - (a)); 1,0 s (Figura 42 - (b)); 6,0 s (Figura 42 - (c)) e para o instante final de 12 s (Figura 42 - (d)) para o modelo HSD-B. Ao observar a Figura 42, pode-se notar que não há empacotamento durante a simulação e a ao final há ainda várias partículas dentro do *hopper*.

Já a Figura 43 exibe os resultados da fração da taxa de descarga do *hopper* para os diferentes modelos. Observando-a é possível notar que há um comportamento semelhante em todos os casos analisados.

Através dos resultados obtidos percebe-se que o modelo HSD-B não se diferencia significativamente do modelo HSD-A, no entanto, destaca-se que o tempo computacional gasto é menor ao se utilizar o modelo HSD-B. Nesse caso, o modelo HSD-B foi aproximadamente 5,1 vezes mais rápido do que o modelo HSD-A. Enquanto o modelo HSD-B demorou em média 244 horas para a simulação terminar o modelo HSD-A despendeu aproximadamente 1.243 horas. O computador utilizado para executar o código do programa, em ambos os modelos, tem as mesmas características citadas na seção 6.2.

Figura 42: Imagens da simulação para o modelo HSD-B nos instantes: (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 1,0$ s; (c) $t = 6,0$ s; (d) $t = 12$ s

Figura 43: Fração da taxa de descarga

VII. CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho é estudado e desenvolvido relações que descrevem o contato. Baseando-se nas relações existentes na literatura, este trabalho propõe, por meio de um estudo teórico e numérico, novas relações para o mecanismo de contato de partículas. Essas relações têm a finalidade de aprimorar o modelo de contato não-linear HSD-B, encontrando uma melhor maneira para o cálculo do coeficiente de amortecimento e tempo de contato em função do coeficiente de restituição. Essas relações são testadas em problemas de dinâmica, escoamento gás-sólido e granulares.

Com a finalidade de verificar a adequabilidade das relações propostas, são realizados experimentos numéricos, utilizando o código computacional MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchange). Vale ressaltar novamente, que o modelo proposto não está implementado no MFIX, então é necessário fazer algumas alterações e acrescentar as relações propostas no código.

As relações propostas são analisadas nos problemas de dinâmica, escoamento gás-sólido e escoamento granulares, e através dos estudos realizados pode-se concluir:

- ✓ Problemas de dinâmica: é analisada a cinemática de uma esfera em queda livre, este é um problema trivial utilizado para o estudo de colisão. Através dos resultados obtidos percebe-se que o modelo HSD-B diferencia-se do modelo HSD-A para valores menores do coeficiente de restituição. No entanto, ao se utilizar valores maiores do coeficiente de restituição não há diferenças significativas entre os modelos.
- ✓ Escoamento gás-sólido - são analisados os resultados comparativos entre os modelos HSD-A, HSD-B, LSD, um caso sem dissipação e os experimentais propostos por

Müller et al. (2008) e Müller et al. (2009). Através dos estudos realizados nota-se que o modelo HSD-B não se diferencia significativamente do modelo HSD-A devido ao alto valor do coeficiente de restituição utilizado.

- ✓ Escoamentos granulares – são realizados estudos da taxa de descarga de *hoppers* bidimensional e tridimensional:
 - ✗ no estudo sobre a taxa de descarga de *hoppers* bidimensional é realizada uma análise sobre duas teorias contínuas para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida do regime plástico, uma proposta por Srivastava e Sundaresan (2003), o modelo S-S, e, outra proposta Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), o modelo S-R-O.
 - os resultados sobre a comparação dos dois modelos mostram que menores valores da taxa de descarga são computadas usando o modelo S-R-O do que quando se utiliza o modelo S-S. Tal fato já era esperado devido à fundamental diferença entre esses dois modelos;
 - para o caso polidisperso pode ser observado que os dois modelos, no final da simulação, ainda estão no regime transiente;
 - o modelo S-R-O é extremamente sensível à mudança do coeficiente de especularidade, o que levou o sistema ao regime transiente, propiciando a conclusão de que o modelo S-S, proposto por Srivastava e Sundaresan (2003), é o mais apropriado para a análise da descarga de materiais granulares de *hopper*;
 - a taxa de descarga é maior na presença de gás, isso já era esperado devido ao fato de que com a presença do ar há um aumento na mobilidade das partículas;
 - os modelos hidrodinâmicos de dois fluidos, S-S e S-R-O apresentam uma taxa de descarga semelhante, enquanto os modelos discreto LSD e HSD-B, apresentam uma taxa de descarga menor;
 - em todos os casos, a comparação dos dados obtidos através da simulação com a correlação empírica conhecida como correlação de Beverloo (BEVERLOO, LENIGER E VAN DE VELDE, 1961), apresenta valores maiores dos quais foram indicados no intervalo. O motivo dos valores serem maiores do que os indicados na correlação de Beverloo

(BEVERLOO, LENIGER E VAN DE VELDE, 1961), é consequência das altas taxas de descarga computadas em todos os casos.

- ✕ no estudo de *hopper* tridimensional são realizados dois estudos comparativos da taxa de descarga. A primeira análise é entre os modelos HSD-A, HSD-B, experimental e numérico propostos por Li et al. (2004). E, a segunda comparação é entre os modelos HSD-A, HSD-B, experimental e numérico propostos por Tao et al. (2010). Através das análises realizadas percebe-se que o modelo HSD-B não se diferencia significativamente do modelo HSD-A.
- ✓ Em todos os casos simulados o tempo computacional gasto utilizando-se o modelo HSD-B é bem menor do que quando utiliza-se o modelo HSD-A, isso é um indicativo de que o modelo HSD-B pode ser mais coerente fisicamente.
- ✓ As relações não-lineares propostas neste trabalho são adequadas para as simulações, além de resultarem em boas aproximações, considerando o baixo erro computado em relação aos calculados numericamente.

Através da experiência adquirida ao longo da realização deste trabalho, surgiram alguns assuntos que embora não tenham sido abordados, podem trazer avaliações importantes. Para tanto, fica sugerido como trabalhos futuros, os seguintes tópicos:

- ◆ Estudo da influência do formato das partículas nos modelos de contato;
- ◆ Análise e estudo das relações propostas neste trabalho em problemas polidispersos;
- ◆ Estudo das variações das forças dissipativas através do parâmetro P ;
- ◆ Análise de sistemas com um grande número de partículas durante um longo tempo de simulação;
- ◆ Aplicação das relações propostas na presente pesquisa em outros problemas de dinâmica, gás-sólido e granulares;
- ◆ Comparação dos modelos hidrodinâmicos, S-S e S-R-O, com os dados obtidos neste trabalho com base nos trabalhos de Li et al. (2004) e Tao et al. (2010).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGRAWAL, K.; LOEZOS, P.N.; SYAMLAL, M.; SUNDARESAN, S., "The role of meso-scale structures in rapid gas–solid flows", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 445, p. 151-185, 2001.

ALLEN, M.P.; TILDESLEY, D.J., "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press, 1989.

ALOBALID, F.; BARAKI, N.; EPPLÉ, B., "Investigation into improving the efficiency and accuracy of CFD/DEM simulations", *Particuology*, v. 16, p. 41–53, 2014.

ALVES, J.; PEIXINHO, N.; SILVA, M.T.; FLORES, P.; LANKARANI, H.M., "A comparative study of the viscoelastic constitutive models for frictionless contact interfaces in solids", *Mechanism and Machine Theory*, v. 85, p. 172-188, 2015.

ANAND, A.; CURTIS, J.S.; WASSGREN, C.R.; HANCOCK, B.C.; KETTERHAGEN, W.R., "Predicting discharge dynamics from a rectangular hopper using the discrete element method (DEM)", *Chemical Engineering Science*, v. 63, p. 5821-5830, 2008.

ANTYPOV, D.; ELLIOTT, J.A., "On an analytical solution for the damped Hertzian spring", *Europhysics Letters*, v. 94, 50004, 2011.

BALEVIČIUS, R.; KAČIANAUSKAS, R.; MRÓZ, Z.; SIELAMOWICZ, I., "Analysis and DEM simulation of granular material flow patterns in hopper models of different shapes", *Advanced Powder Technology*, v. 22, p. 226-235, 2011.

BENYAHIA, S., "Validation study of two continuum granular frictional flow theories", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 47, p. 8926-8932, 2008.

BENYAHIA, S.; JANINE, E.G., "Estimation of Numerical Errors Related to Some Basic Assumptions in Discrete Particle Methods", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 49, p. 10588–10605, 2010.

BENYAHIA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J., "Study of the Ability of Multiphase Continuum Models to Predict Core-Annulus Flow", *A.I.Ch.E Journal*, v. 53, p. 2549–2568, 2007.

BEVERLOO, W.A.; LENIGER, H.A.; VAN DE VELDE, J., "The flow of granular solids through orifices", *Chemical Engineering Science*, v. 15, p. 260-269, 1961.

CHEN, F.; DRUMM, E.C.; GUIOCHON, G., "Prediction/verification of particle motion in one dimension with the discrete-element method", *International Journal of Geomechanics*, v. 7, p. 344–352, 2007.

CLEARY, P.W.; SAWLEY, M.L., "DEM modeling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge", *Applied Mathematical Modeling*, v. 26, p. 89-111, 2002.

COWIN, S.C., "A theory for the flow of granular materials", *Powder Technology*, v. 9, p. 61-69, 1974.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O.D.L., "A discrete numerical model for granular assemblies", *Geotechnique*, v. 29, p. 47–65, 1979.

DREW, D.A., "Mathematical modeling of two-phase flow", *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 15, p. 261-291, 1983.

DU, W.; BAO, X.; XU, J.; WEI, W., "Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spouted bed: Assessment of drag coefficient correlations", *Chemical Engineering Science*, v. 61, p. 1401-1420, 2006.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A., "Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization", *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, p. 21-66, 1996.

ERGUN, S., "Fluid flow through packed columns", *Chemical Engineering Progress*, v. 48, p. 89-94, 1952.

FARZANEH, M.; ALMSTEDT, ALF-ERIK; JOHNSON, F.; PALLARÈS, D.; SASIC, S., "The crucial role of frictional stress models for simulation of bubbling fluidized beds", *Powder Technology*, v. 270, p. 68-82, 2015.

FLORES, P.; MACHADO, M.; SILVA, M.T.; MARTINS, J.M., "On the continuous contact force models for soft materials in multibody dynamics", *Multibody System Dynamics*, v. 25, p. 357-375, 2011.

FOERSTER, S.F.; LOUGE, M.Y.; CHANG, H.; ALLIA, K., "Measurements of the collision properties of small spheres", *Physics of Fluids*, v. 6, p. 1108-1115, 1994.

GARG, R.; GALVIN, J.; LI, T.; PANNALA, S., "Documentation of open-source MFX-DEM software for gas-solids flows", 2012. Disponível em <https://mfix.netl.doe.gov/documentation/dem_doc_2012-1.pdf>

GARG, R.; NARAYANAN, C.; LAKEHAL, D.; SUBRAMANIAM, S., "Accurate numerical estimation of interphase momentum transfer in Lagrangian-Eulerian simulations of dispersed two-phase flows", *International Journal of Multiphase Flow*, v. 33, p. 1337-1364, 2007.

GARSIDE, J.; AL-DIBOUNI, M. R., "Velocity-voidage relationships for fluidization and sedimentation in Solid-Liquid Systems", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 16, p. 206-

GIDASPOW, D., " Multiphase Flow and Fluidization", Academic Press,1994.

GOLDSCHMIDT, M.J.V.; BEETSTRA, R. E KUIPERS, J.A.M., "Hydrodynamic modeling of dense gas-fluidized beds: comparison and validation of 3D discrete particle and continuum models", *Powder Technology*, v. 142, p. 23 – 47, 2004.

GOLDSMITH, W. , " Impact". London: Edward Arnold Publishers Ltd.,1960.

GOPALAKRISHNAN, P.; TAFTI, D., "Development of parallel DEM for the open source code MFIX", *Powder Technology*, v. 235, p. 33–41, 2013.

HAFF, P. K. E WERNER, B. T., "Computer Simulation of the Mechanical Sorting of Grains", *Powder Technology*, v. 48, p. 239-245, 1986.

HERTZ, H., "Über die Berührung fester elastischer Körper", *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, v. 92, p. 156-171, 1882.

HOOMANS, B.P.B.; KUIPERS, J.A.M.; BRIELS, W.J.; VAN SWAAI, W.P.M., "Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidisedbed: a hard-sphere approach", *Chemical Engineering Science*, v. 51, p. 99-118, 1996.

HU, G.; HU, Z.; JIAN, B.; LIU, L.; WAN, H., "On the Determination of the Damping Coefficient of Non-linear Spring-dashpot System to Model Hertz Contact for Simulation by Discrete Element Method", *Journal of computers*, v. 6, p. 984-988, 2011.

HUNT, K.H.; CROSSLEY, F.R.E., "Coefficient of restitution interpreted as damping in vibroimpact", *ASME Journal of Applied Mechanics*, v. 7, p. 440-445, 1975.

JALALI, P.; HYPPÄNEN, T., "Momentum transport between two granular phases of

spherical particles with large size ratio: Two-fluid model versus discrete element method", *Powder Technology*, v. 273, p. 13–18, 2015.

JANKOWSKI, R., "Non-linear viscoelastic modelling of earthquake-induced structural pounding", *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, v. 34, p. 595–611, 2005.

JENIKE, A.W., "Theory of flow of particulate solids in converging and diverging channels based on a conical yield function", *Powder Technology*, v. 50, p. 229-236, 1987.

JENKINS, J.; SAVAGE, S.B., "A theory for rapid flow of identical smooth, nearly elastic spherical particles", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 130, p.187–202, 1983.

JENKINS, J.T.; COWIN, S.C., Theories for flowing granular materials, *Mech. Applied to Transport of Bulk Materials, Ap. Mech. Div. of ASME*, v. 31, p. 79-89. 1979.

JOHNSON, P. C.; JACKSON, R., "Frictional-Collisional Constitutive Relations for Granular Materials with Application to Plane Shearing", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 176, p. 67-93, 1987.

JOP, P.; FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O., "Crucial role of side walls for granular surface flows: consequences for the rheology", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 541, p. 167-192, 2005.

JORDAM CASERTA, A.; NAVARRO, H. A.; "The influence of the presence of air in granular flow from a hopper", in 22nd International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2013), Ribeirão Preto, SP, Brazil, 2013.

JORDAM CASERTA, A.; SOUZA BRAUN, M. P. S.; NAVARRO, H. A., "The comparative study of two frictional theories for monodisperse and polydisperse granular flow from a hopper", in International Mechanical Engineering Congress & Exposition, Houston, IMECE2012-85761, Proceedings of the ASME 2012.

KALLIO, S.; PELTOLA, J.; NIEMI, T., "Analysis of the time-averaged gas-solid drag force

based on data from transient 3D CFD simulations of fluidized beds", *Powder Technology*, v. 274, p. 227–238, 2015.

KAWAGUCHI T., TANAKA T.; TSUJI Y., "Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two- and three-dimensional models)", *Powder Technology*, v. 96, p. 129-138., 1998.

KETTERHAGEN, W.R.; CURTIS, J.S.; WASSGREN, C.R.; HANCOCK, B.C., "Predicting the flow mode from hoppers using the discrete element method", *Powder Technology*, v. 195, p. 1-10, 2009.

KETTERHAGENA, W.R.; CURTISB, J.S.; WASSGREN, C.R.; KONG, A.; NARAYAN, P.J.; HANCOCKD, B.C., "Granular segregation in discharging cylindrical hoppers: A discrete element and experimental study", *Chemical Engineering Science*, v. 62, p.6423 – 6439, 2007.

KRUGGEL-EMDEN, H.; SIMSEK, E.; RICKELT, S.; WIRTZ, S.; SCHERER, V., "Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method", *Powder Technology*, v. 171, p. 157–173, 2007.

KUIPERS, J.; VAN DUIN, K.; VAN BECKUM, F.; VAN SWAAIJ, W., "Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed", *Computers & Chemical Engineering*, v. 17, p. 839-858, 1993.

KUWABARA, G.; KONO, K., "Restitution coefficient in a collision between two spheres", *Japanese Journal of Applied Physics.*, v. 26, p. 1230-1233, 1987.

ANKARANI, H.M.; NIKRAVESH, P.E., "Continuous contact force models for impact analysis in multibody systems", *Nonlinear Dynamics*, v. 5, p. 193-207, 1994.

ANKARANI, H.M.; NIKRAVESH, P.E., "A contact force model with hysteresis damping for impact analysis of multibody systems", *Journal of Mechanical Design*, v. 112, p. 369-375,

1990.

LEBOWITZ, J.L., "Exact Solution of Generalized Percus-Yevick Equation for a Mixture of Hard Spheres", *Phys. Rev.*, A133, p. 895–899, 1964.

LI, J.; LANGSTON, P. A.; WEBB, C.; DYAKOWSKI, T., "Flow of sphero-disc particles in rectangular hoppers-a DEM and experimental comparison in 3D", *Chemical Engineering Science*, v. 59, p. 5917-5929, 2004.

LI, T.; GARG, R.; GALVIN, J.; PANNALA, S., "Open-source MFIx–DEM software for gas–solids flows: part II validation studies", *Powder Technology*, v. 220, p. 138–150, 2012.

LU, H.; WANG, S.; ZHAO, Y.; YANG, L.; GIDASPOW, D.; DING, J., "Prediction of particle motion in a two-dimensional bubbling fluidized bed using discrete hard-sphere model", *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 3217 – 3231, 2005.

LUN, C.K.; SAVAGE, S.B.; JEFFREY, D. J., "Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 140, p. 223–256, 1984.

MAKKAWI, Y.T.; WRIGHT, P.C.; OCONE, R., "The effect of friction and inter-particle cohesive forces on the hydrodynamics of gas–solid flow: A comparative analysis of theoretical predictions and experiments", *Powder Technology*, v. 163, p. 69-79, 2006.

MISHRA, B.K.; RAJAMANI, RAJ K., "Simulation of charge motion in ball mills. Part 1: experimental verifications", *International Journal of Mineral Processing*, v. 40, p. 171-186, 1994.

MÜLLER, C.R.; HOLLAND, D.J.; SEDERMAN, A.J.; SCOTT, S.A.; DENNIS, J.S.; GLADDEN, L.F., "Granular temperature: comparison of magnetic resonance measurements with discrete element model simulations", *Powder Technology*, v. 184, p. 241–253, 2008.

MÜLLER, C.R.; SCOTT, S.A.; HOLLAND, D.J.; CLARKE, B.C.; SEDERMAN, A.J.; DENNIS, J.S.; GLADDEN, L.F., "Validation of a discrete element model using magnetic resonance measurements", *Particuology*, v. 7, p. 297–306, 2009.

MÜLLER, P.; PÖSCHEL, T., "Oblique impact of frictionless spheres: on the limitations of hardsphere models for granular dynamics", *Granular Matter*, v. 14, p. 115–120, 2012.

NAVARRO, H.E.; SOUZA BRAUN, M.P., "Determination of the normal spring stiffness coefficient in the linear spring–dashpot contact model of discrete element method", *Powder Technology*, v. 246, p. 707–722, 2013.

PATANKAR, S.V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, New York, 1980.

PAULICK, M.; MORGENEYER, M.; KWADE, A., "Review on the influence of elastic particle properties on DEM simulation results", *Powder Technology*, v. 283, p. 66–76, 2015.

PEIRANO, E.; LECKNER, B., "Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion", *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 24, p. 259-296, 1998.

RHODES, M. J.; WANGA, X.S; NGUYEN, M.; STEWART, P.; LIFFMAN, K., "Study of mixing in gas-fluidized beds using a DEM mode", *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 2859-2866, 2001.

SAVAGE, S.B., "Analysis of slow high-concentration flows of granular materials", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 377, p. 1-26, 1998.

SCHAEFFER, D.G., "Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow", *Journal of Differential Equations*, v.66, p.19–50, 1987.

SHÄFER, J.; DIPPEL, S.; WOLF, D., "Force schemes in simulations of granular materials", *Journal of Physique I*, v. 6, p. 5–20, 1996.

SHAH, M.T.; UTIKAR, R.P.; PAREEK, V.K.; TADE M.O.; EVANS, G.M., "Effect of closure models on Eulerian–Eulerian gas–solid flow predictions in riser", *Powder Technology*, v. 269, p. 247–258, 2015.

SHAN, S.; MYÖHÄNEN, K.; KALLIO, S.; RITVANEN, J.; HYPPÄNEN, T., "CFD modeling of gas–solids flow in a large scale circulating fluidized bed furnace", *Powder Technology*, v. 274, p. 239–249, 2015.

SILBERT, L.; ERTAS, D.; GREST, G.; HALSEY, T.; LEVINE, D.; PLIMPTON, S., "Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology", *Physical Review E*, v. 64, 051302, 2001.

SRIVASTAVA, A.; SUNDARESAN, S., "Analysis of a frictional–kinetic model for gas–particle flow", *Powder Technology*, v. 129, p. 72-85, 2003.

STEVENS, A.B.; HRENYA, C.M., "Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts", *Powder Technology*, v. 154, p. 99 – 109, 2005.

SUN, JIN.; BATTAGLIA, F., "Hydrodynamic modeling of particle rotation for segregation in bubbling gas-fluidized beds", *Chemical Engineering Science*, v. 61, p. 1470-1479, 2006.

SWEBY, P.K., "High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservative laws", *SIAM J. Num. Anal.*, v. 21, p. 995-1011, 1984.

SYAMLAL, J., The particle-particle drag term in a multiparticle model of fluidization, Springfield, VA, 1987.

SYAMLAL, M., "MFIx Documentation: Numerical Technique", Tech. Rep. DOE/MC313465824, National Energy Technology Laboratory, US Department of Energy, 1998.

Disponível

em

https://mfix.netl.doe.gov/download/mfix/mfix_legacy_manual/numerics.pdf

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T.J., "MFX Documentation: Theory Guide", Tech. Rep.DOE/METC-94/1004, National Energy Technology Laboratory, US Department of Energy, 1993. Disponível em https://mfix.netl.doe.gov/download/mfix/mfix_legacy_manual/Theory.pdf

TAO, H.; JIN, B.; ZHONG, W.; WANG, X.; REN, B.; ZHANG, Y.; XIAO, R., "Discrete element method modeling of non-spherical granular flow in rectangular hopper", *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 49, p. 151-158, 2010.

TIMOSHENKO, S. P.; GOODIER, J. N., "Theory of Elasticity", McGraw-Hill, New York, 1970.

TIWARI, M.; MOHAN, T.R.K.; SEN, S., "Drag-force regimes in granular impact", *Physical Review*, v. 90, 062202, 2014.

TSUJI, Y.; KAWAGUCHI, T.; TANAKA, T. "Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed ", *Powder Technology*, v. 77, p. 79-87, 1993.

TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T., "Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe", *Powder Technology*, v. 71, p. 239- 250, 1992.

TUZUN, U.; HOULSBY, G.T.; NEDDERMAN, R.M.; SAVAGE, S.B., "The flow of granular materials-II, velocity distributions in slow flow", *Chemical Engineering Science*, v. 37, p.1691-1789, 1982.

UPADHYAY, M.; PARK, J-H, "CFD simulation via conventional two-fluid model of a circulating fluidized bed riser: influence of models and model parameters on hydrodynamic behavior", *Powder Technology*, v. 272, p. 260–268, 2015.

VALLE, J. D., *Micromeritics*, London, Pitman, 1948.

WANG, T.; HE, Y.; KIM, D.R., "Granular temperature and rotational characteristic analysis of a gas–solid bubbling fluidized bed under different gravities using discrete hard sphere model", *Powder Technology*, v. 271, p. 35–48, 2015.

WEBER, M.V., "Simulation of cohesive particle flows in granular and gas-solid systems", *PhD These*, University of Colorado, Boulder, Colorado, USA, 2004.

WEN, C.Y.; YU, Y.H., "Mechanics of fluidization", *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, v. 62, p. 100-111, 1966.

YALAMANCHILI, R.C.; GUDHE, R.; RAJAGOPAL, K.R., "Flow of granular materials in a vertical channel under the action of gravity", *Powder Technology*, v. 81, p. 65-73, 1994.

YE, K.; LI, L.; ZHU, H., "A note on the Hertz contact model with nonlinear damping for pounding simulation", *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, v. 38, p. 1135–1142, 2009.

YU, Y.; JIA, S.; ZHU, G.; TAN, W.; CHEN, X., "Numerical study of frictional model for dense granular flow", *Powder Technology*, v. 272, p. 211–223, 2015.

ZHANG, D.; WHITEN, W.J., "The calculation of contact forces between particles using spring and damping models", *Powder Technology*, v. 88, p. 59-64, 1996.

ZHANG, H.; TRIAS, F.X.; GOROBETS, A.; OLIVA, A.; YANG, D.; TAN, Y.; SHENG, Y., "Effect of collisions on the particle behavior in a turbulent square duct flow", *Powder Technology*, v. 269, p. 320–336, 2015.

ZHAO, Y.; LU, B.; ZHONG, Y., "Influence of collisional parameters for rough particles on simulation of a gas-fluidized bed using a two-fluid model", *International Journal of Multiphase Flow*, v. 71, p. 1–13, 2015.

ZHU, H.P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y.; YU, A.B., "Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments", *Chemical Engineering Science*, v. 62, p. 3378 – 3396, 2007.

APÊNDICE A – APRODUNDAMENTO TEÓRICO

Neste apêndice, está disponível uma descrição dos seguintes itens constantes do aprofundamento teórico:

- tensor das tensões para a fase sólida no regime plástico: modelo proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) e modelo proposto por Srivastava e Sundaresan (2003) (item A1).
- tensor das tensões para a fase sólida no regime viscoso (item A2).
- modelo contínuo para escoamentos polidispersos (item A3).
- condições de contorno para os casos do *hopper* (item A4).
- solução numérica: modelo contínuo (item A5).
- solução numérica: modelo discreto (item A6).

A1 Tensor das tensões para a fase sólida no regime plástico

Os tensores das tensões no regime plástico originam-se do atrito entre as partículas e para descrevê-los, Tuzun et al. (1982), utilizam a teoria da mecânica dos solos, a qual idealiza os materiais de tal forma que seus comportamentos possam ser assumidos como independentes da taxa de tensão, maiores detalhes sobre a teoria da mecânica dos solos podem

ser encontrados em Tuzun et al. (1982).

A seguir, encontra-se a descrição de dois modelos propostos para cálculo do tensor das tensões da fase sólida no regime plástico. O primeiro é o método proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) que tem sido tradicionalmente usado no código MFIX, já o segundo, é o proposto por Srivastava e Sundaresan (2003), que se baseiam nos trabalhos descritos por Savage (1998) e Johnson e Jackson (1987) e, sugerem um novo modelo para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida no regime plástico.

41.1 Modelo proposto por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993)

O termo da pressão do sólido para o regime de escoamento plástico, que permite certa quantidade de compressibilidade na fase sólida, similarmente às funções usadas nas teorias de escoamentos plásticos de Jenike (1987), pode ser definido como:

$$p_s^p = \epsilon_s p^* \quad (130)$$

onde p^* é representado pela seguinte lei empírica:

$$p^* = A(\epsilon_s - \epsilon_s^*)^{10} \quad (131)$$

com valor típico da constante $A = 10^{25}$.

Baseado nos estudos de Schaeffer (1987), a seguinte equação que relacionada a pressão do sólido com o tensor das tensões pode ser obtida:

$$\bar{\tau}_s^p = 2\mu_s^p \bar{D}_s \quad (132)$$

onde,

$$\mu_s^p = \frac{p^* \sin \varphi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (133)$$

φ é o ângulo de atrito interno da partícula e I_{2D} é o segundo invariante do tensor taxa de deformação dado por:

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[(D_{s11} - D_{s22})^2 + (D_{s22} - D_{s33})^2 + (D_{s33} - D_{s11})^2 \right] + D_{s12}^2 + D_{s23}^2 + D_{s31}^2 \quad (134)$$

41.2 Modelo proposto por Srivastava e Sundaresan (2003)

O modelo de atrito descrito neste item, baseia-se nos trabalhos de Johnson e Jackson (1987) e Savage (1998) para modificar a teoria já existente.

Neste modelo é proposto que as tensões de atrito começam a influenciar um fluxo granular com uma fração de sólido mínima, ϵ_s^{min} , que é inferior à fração de sólido para a máxima compactação, ϵ_s^* . O estado crítico só se aplica quando o conjunto granular é incompressível, ou seja, acima da máxima compactação. Já quando $\epsilon_s < \epsilon_s^{min}$ o regime adotado é o viscoso, e, o tensor das tensões dos sólidos para o regime viscoso é calculado através da teoria cinética dos escoamentos granulares, conforme descrito no item A2.

A teoria também considera as flutuações na taxa de deformação, que tem a vantagem adicional de evitar uma singularidade para o caso onde a taxa de deformação torna-se zero.

A pressão do sólido deste modelo, é descrita como:

$$p_s^p = p^* \left(1 - \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_s}{n \sqrt{2} \sin \phi \sqrt{\bar{\mathbb{S}}_s : \bar{\mathbb{S}}_s + \theta / d_p^2}} \right)^{n-1} \quad (135)$$

com θ representando a temperatura granular, d_p o diâmetro da partícula, e:

$$\bar{\mathbb{S}}_s = \frac{1}{2} \left[\vec{\nabla} \vec{v}_s + (\vec{\nabla} \vec{v}_s)^T \right] - \frac{1}{3} \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_s \bar{\mathbb{I}} \quad (136)$$

$$p^* = \begin{cases} A(\epsilon_s - \epsilon_s^*)^{10} & \text{se } \epsilon_s > \epsilon_s^* \\ F \frac{(\epsilon_s - \epsilon_s^{\min})^r}{(\epsilon_s^* - \epsilon_s)^s} & \text{se } \epsilon_s^* \geq \epsilon_s > \epsilon_s^{\min} \\ 0 & \text{se } \epsilon_s \leq \epsilon_s^{\min} \end{cases} \quad (137)$$

com os valores de $F = 0,5 \times 10^{-1} Pa$, $r=2$, $s=5$ e,

$$n = \begin{cases} \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \varphi & \text{se } \vec{V} \cdot \vec{v}_s \geq 0 \\ 1,03 & \text{se } \vec{V} \cdot \vec{v}_s < 0 \end{cases} \quad (138)$$

A equação que relacionada a pressão do sólido com o tensor das tensões é dada por:

$$\bar{\tau}_s^p = 2\mu_s^p \bar{S}_s \quad (139)$$

onde,

$$\mu_s^p = \frac{\sin \varphi}{\sqrt{2}} \frac{p_s^p}{\sqrt{\bar{S}_s : \bar{S}_s} + \theta/d_p^2} \left\{ n - (n-1) \left(\frac{p_s^p}{p^*} \right)^{\frac{1}{n-1}} \right\} \quad (140)$$

A2 Tensor das tensões para a fase sólida no regime viscoso

Para o regime viscoso, o tensor das tensões neste regime é baseado em uma forma modificada da teoria cinética de partículas esféricas, inelásticas e suaves, desenvolvida por Lun, Savage e Jeffrey (1984) e a pressão da fase sólida em escoamentos viscosos é expressa por:

$$p_s^v = K_1 \epsilon_s^2 \theta \quad (141)$$

com:

$$K_1 = 2(1+e)\rho_s g_0 \quad (142)$$

onde, e é o coeficiente de restituição para colisão da fase sólida e g_0 é a função de distribuição radial no contato das partículas, definida como:

$$g_0 = \frac{1}{(1-\epsilon_s)} + 1,5 \frac{\epsilon_s}{(1-\epsilon_s)^2} + 0,5 \frac{\epsilon_s^2}{(1-\epsilon_s)^3} \quad (143)$$

A função de distribuição radial g_0 , de acordo com Peirano e Leckner (1998), é introduzida para considerar o incremento da probabilidade das colisões quando o gás torna-se denso, ou seja, num escoamento com gás rarefeito, g_0 é igual à unidade, porém tende ao infinito quando as moléculas estão bem próximas, de maneira que o movimento seja quase impossível.

O coeficiente de restituição e , segundo Du et al. (2006), é a medida da elasticidade da colisão entre duas partículas e refere-se a quantidade de energia cinética das partículas antes e após a colisão. Em geral, experimentos mostraram que o coeficiente de restituição não é constante, no entanto, uma colisão perfeitamente elástica possui coeficiente de restituição igual a 1, e uma colisão completamente plástica ou inelástica possui coeficiente de restituição igual a 0.

O tensor das tensões viscosas da fase sólida para um escoamento viscoso é expresso por:

$$\bar{\bar{\tau}}_s^v = 2\mu_s^v \bar{\bar{D}}_s + \lambda_s^v tr(\bar{\bar{D}}_s) \bar{\bar{I}} \quad (144)$$

onde, μ_s^v e λ_s^v são as viscosidades dinâmica e volumétrica da fase sólida no regime viscoso, respectivamente, as quais não são propriedades físicas reais, mas podem ser deduzidas e expressas por:

$$\lambda_s^v = K_2 \epsilon_s \sqrt{\theta} \quad (145)$$

$$\mu_s^v = K_3 \epsilon_s \sqrt{\theta} \quad (146)$$

a constante K_2 é dada por:

$$K_2 = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_p \rho_s (1+e) \epsilon_s g_0 - \frac{2}{3} K_3 \quad (147)$$

e a constante K_3 pode ser escrita como:

$$K_3 = \frac{d_p \rho_s \sqrt{\pi}}{6(3-e)} \left[1 + \frac{2}{5} (1+e)(3e-1) \epsilon_s g_0 \right] + \frac{8 d_p \rho_s \epsilon_s}{10 \sqrt{\pi}} g_0 (1+e) \quad (148)$$

A temperatura granular, θ , que apareceu primeiramente na equação (135), é proporcional à energia cinética do particulado e é definida como a média da flutuação da velocidade das partículas $\vec{C}$:

$$\theta = \frac{1}{3} \vec{C}^2 \quad (149)$$

Nos trabalhos de Srivastava e Sundaresan (2003) e Agrawal et al. (2001), a equação que representa o balanço da energia pseudo-térmica (temperatura granular) das flutuações das velocidades das partículas, é dada por:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_s \rho_s \theta) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_s \rho_s \vec{v}_s \theta) \right] = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \bar{\bar{\sigma}}_s^v : \vec{\nabla} \vec{v}_s + \Gamma_{desl} - J_{col} - J_{vis} \quad (150)$$

onde a taxa de produção de energia granular devido ao deslizamento gás-partícula, Γ_{desl} , a taxa de dissipação de energia granular através das colisões inelásticas, J_{col} , e a taxa de dissipação de energia granular através do amortecimento viscoso, J_{vis} , são expressas, respectivamente por:

$$\Gamma_{desl} = \frac{81 \epsilon_s \mu_g^2 (\vec{v}_g - \vec{v}_s)^2}{g_0 d_p^3 \rho_s \sqrt{\pi \theta}} \quad (151)$$

$$J_{col} = \frac{48}{\sqrt{\pi}} \eta (1-\eta) \frac{\rho_s \epsilon_s^2}{d_p} g_0 \theta^{\frac{3}{2}} \quad (152)$$

$$J_{vis} = 3\beta\theta \quad (153)$$

sendo que β representa o coeficiente de arrasto na interface, que está definido no item 3.1.4 e η tem seu valor expresso por:

$$\eta = \frac{(1+e)}{2} \quad (154)$$

O fluxo difusivo $\vec{q}$ de energia granular é calculado por:

$$\vec{q} = -\frac{\lambda^*}{g_0} \left\{ \left(1 + \frac{12}{5} \eta \epsilon_s g_0 \right) \left[1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \epsilon_s g_0 \right] + \frac{64}{25\pi} (41 - 33\eta) (\eta \epsilon_s g_0)^2 \right\} \vec{\nabla} \theta \quad (155)$$

onde:

$$\lambda^* = \frac{\lambda}{1 + \frac{6\beta\lambda}{5(\rho_s \epsilon_s)^2 g_0 \theta}} \quad (156)$$

e,

$$\lambda = \frac{75 \rho_s d_p \sqrt{\pi \theta}}{48 \eta (41 - 33\eta)} \quad (157)$$

Outra abordagem para o cálculo da temperatura granular θ , é utilizar uma expressão algébrica obtida da equação da conservação da energia de Lun, Savage e Jeffrey (1984), assumindo que a energia granular é dissipada localmente, desprezando contribuições de difusão e de convecção e retendo somente os termos de dissipação e geração. A equação da energia granular algébrica é dada por:

$$\theta = \left\{ \frac{-(K_1 \epsilon_s + \rho_s) \text{tr}(\bar{\bar{D}}_s) + \sqrt{(K_1 \epsilon_s \rho_s)^2 \text{tr}^2(\bar{\bar{D}}_s) + 4k_4 \epsilon_s [2K_3 \text{tr}(\bar{\bar{D}}_s^2) + K_2 \text{tr}^2(\bar{\bar{D}}_s)]}}{2\epsilon K_4} \right\} \quad (158)$$

onde K_1 , K_2 e K_3 foram definidos nas equações (142), (147) e (148), respectivamente e, K_4 é definido como:

$$K_4 = \frac{12(1-e^2)\rho_s g_0}{d_p \sqrt{\pi}} \quad (159)$$

Assim o tensor das tensões do regime viscoso da fase sólida é expresso por:

$$\bar{\bar{\sigma}}_s^v = -K_1 \epsilon_s^2 \theta \bar{\bar{I}} + 2K_3 \epsilon_s \sqrt{\theta} \bar{\bar{D}}_s + K_2 \epsilon_s \sqrt{\theta} \text{tr}(\bar{\bar{D}}_s) \bar{\bar{I}} \quad (160)$$

A3 Modelo hidrodinâmico de dois fluidos para escoamentos polidispersos

Quando o escoamento envolve mais de uma fase sólida, M fases sólidas, o escoamento é polidisperso, e, a equação de conservação da massa para a fase sólida, equação (2), é resolvida para cada fase sólida, $m=1, 2, \dots, M$, da seguinte maneira:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_{sm} \rho_{sm}) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{v}_{sm}) = 0 \quad (161)$$

onde o subscrito sm indica a fase sólida m .

Vale lembrar que a equação da conservação da massa para a fase do gás está descrita na equação (1), tanto para escoamento polidispersos como monodispersos.

Já a equação de quantidade de movimento para a fase do gás para escoamentos polidispersos, é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma}_g + \epsilon_g \rho_g \vec{g} - \sum_{m=1}^M [\beta (\vec{v}_g - \vec{v}_{sm})] \quad (162)$$

E a equação de quantidade de movimento para a fase sólida para escoamentos polidispersos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{v}_{sm}) + \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{v}_{sm} \vec{v}_{sm}) = \vec{\nabla} \cdot (\epsilon_{sm} \vec{\sigma}_{sm}) + \epsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{g} + \beta (\vec{v}_g - \vec{v}_{sm}) - \vec{f}_{lm} \quad (163)$$

onde $\vec{f}_{lm}$ representa a força de interação entre as fases sólidas, l e m , $l \neq m$ e é calculada como:

$$\vec{f}_{lm} = \sum_{l=1, l \neq m}^M [\beta_{lm} (\vec{v}_{sl} - \vec{v}_{sm})] \quad (164)$$

onde o coeficiente de arrasto entre as fases sólidas l e m , é calculado através de uma simplificação da teoria cinética, proposta por Syamlal (1987) como:

$$\beta_{lm} = \frac{3(1 + e_{lm})(\pi/2 + C_{alm}\pi^2/8)\epsilon_{sl}\rho_{sl}\epsilon_{sm}\rho_{sm}(d_{pl} + d_{pm})^2 g_{0lm}|\vec{v}_{sl} - \vec{v}_{sm}|}{2\pi(\rho_{sl}d_{pl}^3 + \rho_{sm}d_{pm}^3)} \quad (165)$$

sendo, e_{lm} e C_{alm} , os coeficientes de restituição e atrito entre as fases sólidas, respectivamente, os subscritos l e m indicam a fase sólida, e, g_{0lm} é a função de distribuição radial no contato das partículas das fases sólidas, que segundo Lebowitz (1964) pode ser definido como:

$$g_{0lm} = \frac{1}{\epsilon_g} + \frac{3d_{pl}d_{pm}}{\epsilon_g^2(d_{pl} + d_{pm})} \sum_{\gamma=1}^M \frac{\epsilon_{s\gamma}}{d_{p\gamma}} \quad (166)$$

Para o cálculo do tensor das tensões das M fases sólidas e demais valores, é utilizada a mesma formulação proposta para escoamentos monodispersos, ou seja, para uma fase sólida, sendo resolvida para cada fase sólida, $m=1, 2, \dots, M$.

A4 Condições de contorno para os casos de *hopper*

Para os casos de simulação envolvendo *hoppers*, as condições de contorno das paredes do *hopper* para a fase gasosa foram adotadas como de não aderência. Sob o ponto de vista macroscópico, esta condição implica no deslizamento livre da fase gasosa na parede, ou seja, o gradiente da velocidade, para esta fase, na parede é zero. Já para a fase sólida, foram utilizadas as condições de contorno propostas por Johnson e Jackson (1987), que podem ser escritas como:

$$\vec{n}_{parede} \cdot (\vec{\bar{\sigma}}_s^p + \vec{\bar{\sigma}}_s^v) \cdot \frac{(\vec{v}_{s,parede})}{|\vec{v}_{s,parede}|} + (\vec{n}_{parede} \cdot \vec{\bar{\sigma}}_s^p \cdot \vec{n}_{parede}) \tan \delta + \frac{\pi\sqrt{3}}{6\epsilon_s^*} \varphi \rho_s \epsilon_s g_0 \sqrt{\theta} \vec{v}_{s,parede} = 0 \quad (167)$$

e,

$$\vec{n}_{parede} \cdot \vec{q} = \frac{\pi\sqrt{3}}{6\epsilon_s^*} \varphi \rho_s \epsilon_s g_0 \sqrt{\theta} (\vec{v}_{s,parede})^2 - \frac{\pi\sqrt{3}}{4\epsilon_s^*} (1 - e_w^2) \rho_s \epsilon_s g_0 \theta^{\frac{3}{2}} \quad (168)$$

onde $\vec{n}_{parede}$ é o vetor unitário normal à superfície da parede, $\vec{v}_{s,parede}$ é a velocidade do sólido na parede, δ é o ângulo de atrito entre parede e partícula, ϕ' é o coeficiente de especularidade e e_w é o coeficiente de restituição da parede.

A5 Solução Numérica – Modelo Contínuo

Fenômenos relacionados aos escoamentos de fluidos são descritos matematicamente através de equações diferenciais parciais (EDP). A solução por métodos numéricos de um problema é uma aproximação da solução dessas equações. A justificativa teórica desses métodos envolvem teoremas de análise funcional que reduzem o problema para solução de equações algébricas. Pode-se descrever simplificadaamente o método da seguinte forma: as equações diferenciais parciais são resolvidas primeiramente através da discretização da equação, trazendo para dentro de um subespaço dimensional finito, neste caso, utiliza-se o método dos volumes finitos. Ao fazer isto, é necessário a solução de sistemas não-lineares de equações, que representam outra importante interface entre os métodos numéricos e a análise matemática. Para a solução desse sistema utiliza-se o método iterativo, que começa com uma estimativa inicial e posteriormente com sucessivas aproximações converge para a resposta do problema, não estipulando um número específico de passos a serem calculados. Um critério de convergência é especificado para decidir o quanto a solução está suficientemente precisa.

Para a solução numérica utilizando o MFIX, como citado anteriormente, a discretização espacial das equações é feita através do método dos volumes finitos utilizando uma malha deslocada, que, segundo Patankar (1980), tem a vantagem de controlar oscilações no campo de pressão. O domínio é dividido numa quantidade de volumes de controle não sobrepostos de forma que exista um volume cercado cada nó da malha, e, é nesta configuração do domínio que é feita a integração das equações diferenciais parciais (EDP's), ou seja, das leis de conservação da massa e da quantidade de movimento, que modelam o escoamento.

Além disso, para se obter soluções bem resolvidas, livres de oscilações e

convergentes, é utilizado o esquema de discretização proposto por Sweby (1984), o Superbee, que é um esquema TVD - “Total Variation Diminishing”, ou seja, é um esquema que satisfaz as restrições TVD.

As discretizações considerando todas as equações do modelo de dois fluidos podem ser vistas em Syamlal (1998).

A6 Solução Numérica – Modelo Discreto

A simulação computacional do MED, utilizando o código fonte MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges) é realizada usando, basicamente, os mesmos procedimentos do modelo hidrodinâmico de dois fluidos. Dentre as diferenças existentes, convém destacar dois conceitos: o algoritmo de busca e a forma de interpolação para o cálculo da força de interação entre as fases.

O conceito do algoritmo de busca é utilizado no MED para a identificação da vizinhança para contato de todas as partículas. Para isso, é usado o método conhecido como “Cell-linked list” (lista das células acopladas) que define a busca da seguinte maneira: considere a partícula em negrito da Figura 44, denominada de partícula de interesse, as partículas das demais nove células adjacentes, considerando a célula a qual a partícula de interesse pertence, são consideradas como potenciais vizinhos. Então cada potencial vizinho será testado e, os que resultarem a partícula de interesse como potencial vizinho, acontecerá o contato entre elas.

Já a interpolação para o cálculo da força de interação entre as fases, equação (46), como citado anteriormente no item 3.2.2.2, a velocidade média do gás é interpolada, utilizando funções polinomiais de segunda ordem de Lagrange, na posição da partícula e a força de arrasto de cada partícula é então estimada. No entanto, a fim de evitar as complexidades no algoritmo numérico resultante da interpolação no campo de pressão da fase gasosa, o termo relativo à pressão é avaliado no centro da célula, obtendo assim o campo da pressão igual para todas as partículas pertencentes a uma mesma célula computacional.

Maiores detalhes sobre a simulação computacional podem ser vistos em Garg et. al.

Figura 44: Esquema do algoritmo de busca para partículas de diferentes raios.

APÊNDICE B – MATLAB®

Neste apêndice, estão disponíveis as rotinas utilizadas no programa MatLab® para calcular os parâmetros constantes das tabelas (Tabela 1, Tabela 2, Tabela 3, Tabela 4 e Tabela 5) do capítulo IV.

B1 Modelo LSD

Neste item está a descrição da rotina utilizada para os cálculos dos parâmetros contidos na Tabela 1. Para computar tais valores, é utilizado o programa MatLab®.

```
function ComputeLinear;
close all;
clear all;
clc;
clear('sqr');
sqr = @(x) x*x;

eta_n_star_v = [0.0 0.01 0.02 0.03 0.04 0.05 ...
                0.06 0.07 0.08 0.09 0.1 0.15 ...
                0.2 0.25 0.3 0.35 0.4 0.45 0.5 0.55 0.6 0.7 0.8 0.9];

for j=1:length(eta_n_star_v),

disp('xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx');

eta_n_star = eta_n_star_v (j)

if (eta_n_star~=1)e_n = exp(-(eta_n_star*pi)/sqrt(1-(sqr(eta_n_star))))
else      e_n = 0    % eta_n_star = 1.0
end
```

```
#####solucao para o caso linear da EDO adimensional numerica

tspan=[0.0:1.0e-5:4.5];
tinit=1;
ic=[0.0,1.0];

options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',[1e-12 1e-12]);

[t,y]=ode45(@SystemLinear,tspan,ic,options,eta_n_star);

#### fim da solucao

deltamax_star=0.0;
deltamedio_star=0.0;
i=1;imax=1;
if (real(y(i,1))>=0) fim = 0; else fim = 1; end

while(~fim)
    deltamedio_star=deltamedio_star+real(y(i,1));
    if (real(y(i,1))>deltamax_star)
        deltamax_star = real(y(i,1));
        imax = i;
    end
    i = i + 1;
    if (i>length(y)) fim = 1; end;
    if (~fim)
        if (real(y(i,1))<0) fim = 1; end
    end
end

% comprimento do vetor (tempo total de simulacao)
length_y=length(y);

% calculo do delta_medio
% o tempo de contato refere-se ao indice i-i
%i;
ic=i-1;
deltamedio_star=deltamedio_star/(ic)

% tcontato: tempo de contato referente ao indice i-1
tc_star=t(ic)

delta_tc=y(ic,1)

v_tc=y(ic,2)

tmax_star=t(imax)
deltamax_star

% SOLUCOES ANALITICAS PARA tcontato, delta_max, delta_medio

if (eta_n_star==0.0)

deltamax_ana_star = 1.0
```

```

deltamedio_ana_star=2/pi

tc_ana_star = pi

else

beta_star= pi/log(exp(-(eta_n_star*pi)/sqrt(1-(sqr(eta_n_star)))));

deltamax_ana_star = exp(-atan(beta_star)/beta_star)

deltamedio_ana_star=-(beta_star/sqrt((1+sqr(beta_star))))*(1+exp(-
pi/beta_star))*exp(pi/beta_star)/pi

tc_ana_star = pi*sqrt((1+1/sqr(beta_star)))

end

%ACELERACAO: SOMENTE ate o tempo de contato
acc_t_v = [];
t_v = [];
p_v = [];

for i=2:ic
    acc_t=(y(i,2)-y(i-1,2))/(t(i)-t(i-1));
    acc_t_v = [acc_t_v acc_t];
    t_v = [t_v t(i-1)];
    p_v = [p_v y(i-1,1)];
end

acc_t_init=acc_t_v(1)
acc_t_tc=acc_t_v(ic-1)

function dydt = SystemLinear(t,y,eta_n_star);

dydt = zeros(2,1);

dydt(1)=y(2);
dydt(2)=-2.0*eta_n_star*y(2)-y(1);

% fim funcao Linear

```

B2 Modelo HSD-A

Esta seção descreve a rotina utilizada para os cálculos dos parâmetros contidos na Tabela 2. Para computar tais valores, é utilizado o programa MatLab®.

```

close all;
clear all;
clear('sqr');

```

```

sqr = @(x) x*x;

eta_n_hz_star_v = [0.0 0.01 0.02 0.03 0.04 0.05 ...
                   0.06 0.07 0.08 0.09 0.1 0.15 ...
                   0.2 0.25 0.3 0.35 0.4 0.45 0.5 0.55 0.6 0.7 0.8 0.9];
for j=1:length(eta_n_hz_star_v),

disp('xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx');

eta_n_hz_star = eta_n_hz_star_v(j)

% EDO nao-linear do Hertziano#####

tspan=[0.0:1.0e-5:8.0];

tinit=1;

ic=[0.0 1.0];

options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',[1e-12 1e-12]);

[t,y]=ode45(@SystemHertzian1_4,tspan,ic,options,eta_n_hz_star);

##### fim da solucao

deltamax_hz_star=0.0;
deltamedio_hz_star=0.0;
i=1;imax=1;
if (real(y(i,1))>=0) fim = 0; else fim = 1; end

while(~fim)
    deltamedio_hz_star=deltamedio_hz_star+real(y(i,1));
    if (real(y(i,1))>deltamax_hz_star)
        deltamax_hz_star = real(y(i,1));
        imax = i;
    end
    i = i + 1;
    if (i>length(y)) fim = 1; end;
    if (~fim)
        if (real(y(i,1))<0) fim = 1; end
    end
end

ic=i-1;
deltamedio_hz_star=deltamedio_hz_star/(ic)

tc_hz_star=t(ic)

delta_tc_hz=y(ic,1)

v_tc_hz=y(ic,2)

tmax_hz_star=t(imax)
deltamax_hz_star

acc_t_v = [];

```

```

t_v = [];
p_v = [];

for i=2:ic

    acc_t=(y(i,2)-y(i-1,2))/(t(i)-t(i-1));
    acc_t_v = [acc_t_v acc_t];
    t_v = [t_v t(i-1)];
    p_v = [p_v y(i-1,1)];

end

acc_t_init=acc_t_v(1)
acc_t_tc=acc_t_v(ic-1)

end

SystemHertzian1_4
function dydt = SystemHertzian1_4(t,y,eta_n_hz_star);

dydt = zeros(2,1);    % a column vector

dydt(1)=y(2);
dydt(2)=-2*eta_n_hz_star*power(y(1),0.25)*y(2)-power(y(1),1.5);

% fim funcao Hertizian

```

B3 Modelo HSD-B

Neste tópico está a descrição da rotina utilizada para os cálculos dos parâmetros contidos na Tabela 3. Para computar tais valores, é utilizado o programa MatLab®.

```

close all;
clear all;
clear('sqr');
sqr = @(x) x*x;

eta_n_hz_star_v = [0.0 0.01 0.02 0.03 0.04 0.05 ...
                  0.06 0.07 0.08 0.09 0.1 0.15 ...
                  0.2 0.25 0.3 0.35 0.4 0.45 0.5 0.55 0.6 0.7 0.8 0.9];

for j=1:length(eta_n_hz_star_v),

disp('xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx');

eta_n_hz_star = eta_n_hz_star_v(j)

% EDO nao-linear do Hertiziano#####

tspan=[0.0:1.0e-5:4.0];

```

```

tinit=1;

ic=[0.0 1.0];

options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',[1e-12 1e-12]);

[t,y]=ode45(@SystemHertzian3_2,tspan,ic,options,eta_n_hz_star);

##### fim da solucao

deltamax_hz_star=0.0;
deltamedio_hz_star=0.0;
i=1;imax=1;
if (real(y(i,1))>=0) fim = 0; else fim = 1; end

while(~fim)
    deltamedio_hz_star=deltamedio_hz_star+real(y(i,1));
    if (real(y(i,1))>deltamax_hz_star)
        deltamax_hz_star = real(y(i,1));
        imax = i;
    end
    i = i + 1;
    if (i>length(y)) fim = 1; end;
    if (~fim)
        if (real(y(i,1))<0) fim = 1; end
    end
end

ic=i-1;
deltamedio_hz_star=deltamedio_hz_star/(ic)

tc_hz_star=t(ic)

delta_tc_hz=y(ic,1)

v_tc_hz=y(ic,2)
%v_tc1_hz=y(ic+1,2)
%v_tc2_hz=y(ic+2,2)

tmax_hz_star=t(imax)
deltamax_hz_star

acc_t_v = [];
t_v = [];
p_v = [];

for i=2:ic
    acc_t=(y(i,2)-y(i-1,2))/(t(i)-t(i-1));
    acc_t_v = [acc_t_v acc_t];
    t_v = [t_v t(i-1)];
    p_v = [p_v y(i-1,1)];
end

acc_t_init=acc_t_v(1)
acc_t_tc=acc_t_v(ic-1)

```

```

end

function dydt = SystemHertzian3_2(t,y,eta_n_hz_star);

dydt = zeros(2,1);    % a column vector

dydt(1)=y(2);
dydt(2)=-2*eta_n_hz_star*power(y(1),1.5)*y(2)-power(y(1),1.5);

```

B4 Cálculo da função de aproximação para v_B^*

Neste item está a rotina utilizada no programa MatLab® para calcular a função de aproximação proposta para o cálculo do coeficiente de amortecimento do modelo HSD-B.

```

function ComputeHertzian;
close all;
clear all;
clear('sqr');
format long e
sqr = @(x) x*x;

en_anavector = []; nuBvector = [];
nuBinicial=0.0; nuBincr = 0.001; nuBfinal = 1.5;
for nuB = nuBinicial:nuBincr:nuBfinal,

timeanalytical= @(tt,nuB) (1.0-exp(-2.0*tt*nuB))*(2.0*nuB+1.0) -
2.0*tt*nuB;

if (nuB==0.0) en_ana = 1.0;
else
    options=optimset('TolX',1e-16);
    tnusoln=fzero(timeanalytical,[1.0 2.0],[],nuB);
    if ((tnusoln <= 1.0)|| (tnusoln >= 2.0)) tnuson
    end
    en_ana = tnusoln-1.0;
end
en_anavector = [en_anavector, en_ana];
nuBvector = [nuBvector, nuB];

end

% ### Nonlinear Fit

modelfun= @(b,x) (- (1.0/2.0)*log(x)*b(1) ./ (b(2)+ b(3)*log(x)));

beta0 = [6.0; 4.0; 2.0];
opts = statset('nlinfit');

```

```

opts.TolX = 1e-16;
opts.Fun = 1e-16;
[beta,R,MSE] = nlinfit(en_ancestor,nuBvector,modelfun,beta0,opts);

beta

erravgf1 = 0.0;
errmaxf1 = 0.0;
enerrmaxf1 = 1.0;
nuBvectorf1 = 0.0;

erravgf2 = 0.0;
errmaxf2 = 0.0;
enerrmaxf2 = 1.0;
nuBvectorf2 = 0.0;

for ii =1:1:length(nuBvector),

    % ### f1
    Yf1 = (-(1.0/2.0)*log(en_ancestor(ii))*beta(1)/(beta(2)+
(beta(3)*log(en_ancestor(ii)))));
    errf1 = Yf1-nuBvector(ii);

    if (nuBvector(ii)== 0)
        errperf1 = 0;
    else
        errperf1 = 100*(Yf1-nuBvector(ii))/nuBvector(ii);
    end
    erravgf1 = erravgf1+abs(errperf1);
    if (abs(errperf1)> errmaxf1)
        errmaxf1 = abs(errperf1);
        enerrmaxf1 =en_ancestor(ii);
        nuBvectorf1 =nuBvector(ii);
    end

    % ### f2 (Hu et al. 2011)
    Yf2 = (-(1.0/2.0)*log(en_ancestor(ii))*6.66264/
(3.85238+log(en_ancestor(ii)))));
    errf2 = Yf2-nuBvector(ii);

    if (nuBvector(ii)== 0)
        errperf2 = 0;
    else
        errperf2 = 100*(Yf2-nuBvector(ii))/nuBvector(ii);
    end
    erravgf2 = erravgf2+abs(errperf2);
    if (abs(errperf2)> errmaxf2)
        errmaxf2 = abs(errperf2);
        enerrmaxf2 =en_ancestor(ii);
        nuBvectorf2 =nuBvector(ii);
    end

end
erravgf1 = erravgf1/length(nuBvector)
errmaxf1
enerrmaxf1

```



```

nuBvectorf1
erravgf2 = erravgf2/length(nuBvector)
errmaxf2
enerrmaxf2
nuBvectorf2

```

B5 Comparação dos valores de v_B^*

Nesta seção está descrita a rotina implementada no programa MatLab® para calcular os valores constantes da Tabela 4, que exhibe uma comparação dos valores de v_B^* obtidos através dos artigos disponíveis na literatura com a relação proposta nesta pesquisa.

```

function ComputeHertizian;
close all;
clear all;
clear('sqr');
format long e
sqr = @(x) x*x;

eta_hz_v = [0.0 0.01 0.02 0.03 0.04 0.05 ...
            0.06 0.07 0.08 0.09 0.1 0.15 ...
            0.2 0.25 0.3 0.35 0.4 0.45 0.5 0.55 0.6 0.7 0.8 0.9];

for j=1:length(eta_hz_v),

disp('xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx');

nuB = eta_hz_v(j)

timeanalytical=@(tt,nuB) (1.0-exp(-2.0*tt*nuB))*(2.0*nuB+1.0)-2.0*tt*nuB;

if (nuB==0.0) en = 1.0;
else
    options=optimset('TolX',1.0e-16);
    tnusoln=fzero(timeanalytical,[0.1 8.0],[],nuB);
    if ((tnusoln <= 0.2)||(tnusoln >= 7.9)) tnuson
    end
    en = tnusoln-1.0
end

nuBHunt = 3.0*(1.0-en)/4.0

nuBLankarani = 3.0*(1.0-en*en)/8.0

nuBFlores = 8.0*((1.0-en)/en)/10.0

nuBHu = - log(en)*(6.66264)/(3.85238+log(en))/2.0

nuBprop = - log(en)*(8.693763792301278)/

```

```

(5.573076001373758+(1.966759759986741*log(en)))/2.0

%cálculo do erro relativo

if (nuB == 0)
    err_Hunt=0
    err_Lankarani=0
    err_Flores=0
    err_Hu=0
    err_prop=0
else
err_Hunt= 100*abs((nuB-nuBHunt)/nuB)

err_Lankarani = 100*abs((nuB-nuBLankarani)/nuB)

err_Flores = 100*abs((nuB-nuBFlores)/nuB)

err_Hu = 100.0*abs((nuB-nuBHu)/nuB)

err_prop = 100.0*abs((nuB-nuBnosso2)/nuB)

end

end

```

B6 Cálculo da função de aproximação para o tempo de contato e comparação dos valores

Nesta seção está descrita a rotina implementada no programa MatLab® para calcular a função de aproximação proposta para o cálculo do tempo de contato do modelo HSD-B e os valores constantes da Tabela 5, que exhibe a comparação entre o tempo de contato calculado numericamente e a expressão proposta nesta pesquisa.

```

function ComputeHertzian;
close all;
clear all;
clear('sqr');
format long e
sqr = @(x) x*x;

en_vector = []; nuBvector = []; tcvector = [];
nuBinicial=0.0; nuBincr = 0.01; nuBfinal = 0.9;

for nuB = nuBinicial:nuBincr:nuBfinal,

```

```

nuB

tspan=[0.0:1e-5:5.0]; % real values for simulating
tinit=1;
ic=[0.0,1.0];
[t,y]=ode45(@SystemHertzian3_2,tspan,ic,[],nuB);

i=1;
if (real(y(i,1))>=0) fim = 0; else fim = 1; end
while(~fim)
    i = i + 1;
    if (i>length(y)) fim = 1; end;
    if (~fim)
        if (real(y(i,1))<0) fim = 1; end
    end
end

% ### contact period:
ic=i-1;
tc_hz_star=t(ic);
tcvector = [tcvector, tc_hz_star];

% ### normal restitution coefficient
en_num=-real(y(ic,2));
en_vector = [en_vector, en_num];
nuBvector = [nuBvector, nuB];

end %

% ### Nonlinear Fit

modelfun = @(b,x) (b(1).*pi.*sqrt(1+(b(2).*log(x).*log(x))./(pi.*pi))));

beta0 = [1.0243371292337;3.0];
opts = statset('nlinfit');
opts.TolX = 1e-16;
opts.Fun = 1e-16;
[beta,R,MSE]= nlinfit(en_vector,tcvector,modelfun,beta0,opts);

beta

% ### END - Nonlinear Fit

erravg = 0.0;
errmax = 0.0;
enerrmax = 1.0;

for ii =1:1:length(tcvector)

    nuB=nuBvector(ii)
    en=en_vector(ii)
    tc=tcvector(ii)
    Yf1 = pi*beta(1)*sqrt(1+
((beta(2)*log(en_vector(ii))*log(en_vector(ii)))/(pi*pi))

    errf1 = Yf1-tcvector(ii);

    if (tcvector(ii)== 0) errper = 0;
    else
        errper = 100*(abs(Yf1-

```

```

tcvector(ii))/tcvector(ii)
    end
    erravg = erravg+abs(errper);
    if (abs(errper)> errmax)
        errmax = abs(errper);
        enerrmax =en_vector(ii);
    end
end
end

function dydt = SystemHertzian3_2(t,y,eta_n_hz_star);

dydt = zeros(2,1);

dydt(1)=y(2);
dydt(2)=-2*eta_n_hz_star*power(y(1),1.5)*y(2)-power(y(1),1.5);

```