UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

ESCOLA POLITÉCNICA

ANA FRANCISCA DE PAIVA AFFONSO MORENO

Modelagem e simulação de escoamento granular em silos de armazenamento de granalhas de
máquinas de *shot peening*

São Paulo

2020

ANA FRANCISCA DE PAIVA AFFONSO MORENO

**Modelagem e simulação de escoamento granular em silos de armazenamento de
granalhas de máquinas de *shot peening***

Versão Corrigida

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre
em Ciências.

Área de concentração: Engenharia de Controle e Automação
Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Flavius Portella Ribas Martins

São Paulo
2020

ANA FRANCISCA DE PAIVA AFFONSO MORENO

Modelagem e simulação de escoamento granular em silos de armazenamento de
granalhas de máquinas de *shot peening*

Dissertação apresentada ao programa de pós-graduação do
Departamento de Engenharia Mecânica da Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do
título de Mestre em Ciências.

Aprovado em ____/____/____

Banca Examinadora

Prof. Dr.: _____ Instituição: _____

Julgamento _____ Assinatura: _____

Prof. Dr.: _____ Instituição: _____

Julgamento _____ Assinatura: _____

Prof. Dr.: _____ Instituição: _____

Julgamento _____ Assinatura: _____

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Professor Flavius Martins, um dos melhores professores e seres humanos que tive a sorte de ter em meu caminho, por sua paciência e dedicação, que tornaram possível esse trabalho.

DEDICATÓRIA

Ao meu pai, Luiz Carlos (in memoriam) e
à minha mãe, Vera (in memoriam).

Aos meus filhos, Alice e João.

Índice

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO.....	1
1. Introdução.....	14
2. Objetivos.....	19
3. Revisão Bibliográfica.....	20
4. Fundamentos teóricos.....	25
4.1. Escoamentos Granulares.....	25
4.2. Modelos empírico-analítico.....	27
4.2.1. O modelo de Jansen.....	27
4.2.2. Forças hertzianas de contato.....	34
4.2.3. A lei de Coulomb para a força cisalhante granular.....	37
4.2.4. Fluxos de massa e de funil.....	42
4.2.5. Correlação de Beverloo e suas variantes.....	44
4.3. Simulação numérica.....	52
5. Materiais e métodos.....	62
5.1. O modelo empírico-analítico.....	62
5.2. O modelo computacional.....	63
5.3. Definição da matriz de experimentos numéricos.....	66
6. Resultados.....	68
7. Conclusões.....	79
8. Referências.....	81

Anexo A: O círculo de Mohr.....	90
Anexo B: Código LAMMPS utilizado nas simulações.....	96
Anexo C: Código Matlab para pós-processamento.....	102

Índice de figuras

Figura 1: Camada compressiva gerada no processo de peen forming/shot peening.....	14
Figura 2: Aplicação de jato de granalhas a uma tira Almen.....	15
Figura 3: Shot peening de pressão direta.....	17
Figura 4: Shot peening com aspiração das granalhas por indução.....	17
Figura 5: Variação da pressão granular e da pressão hidrostática com a altura da coluna.	27
Figura 6: Montagem experimental para a determinação do coeficiente de atrito.....	29
Figura 7: Variação do coeficiente de atrito com o aumento da pressão.....	30
Figura 8: Deformação de esferas em contato.....	34
Figura 9: Deslocamentos durante deformação.....	35
Figura 10: Determinação experimental das forças granulares cisalhantes.....	38
Figura 11: Círculo de Mohr para o estado de tensões.....	40
Figura 12: Círculo de Mohr para as taxas de deformação.....	40
Figura 13: Critério de escoamento de Mohr.....	41
Figura 14: Tipos de fluxo de saída.....	42
Figura 15: Determinação do tipo de fluxo.....	43
Figura 16: Forma da reta obtida a partir dos dados experimentais.....	45
Figura 17: Sistema de coordenadas cilíndricas e componentes do vetor velocidade.....	49
Figura 18: Caixa de simulação e regiões.....	64
Figura 19: Principais etapas do processo de simulação.....	65
Figura 20: Variação da energia mecânica do sistema no experimento 001.....	70
Figura 21: Imagens geradas de cada reservatório simulado.....	71
Figura 22: Erro relativo encontrado com a adoção do fator de Rose e Tanaka e com o fator de Brown e Richards para paredes inclinadas.....	73
Figura 23: Pós processamento dos resultados com o software Ovito (experimento 001).	74
Figura 24: Deformação de uma camada de partículas (experimento 001).....	75
Figura 25: Perfil de velocidades no eixo central do reservatório (experimento 001).....	76
Figura 26: Perfil de velocidades da região próxima ao orifício de saída.....	77
Figura 27: Campo de velocidades experimental.....	78

Lista de símbolos

β	compressibilidade isotérmica
δ	deslocamento total
$\dot{\gamma}_{r\theta}$	taxa de deformação cisalhante
ε	fração de vazios
$\dot{\varepsilon}_r$	taxa de deformação compressiva na direção r
$\dot{\varepsilon}_\theta$	taxa de deformação compressiva na direção θ
$\rho(q, p, t)$	densidade de probabilidade
ρ_B	densidade do material granular
ρ_f	densidade do fluido
σ	tensão normal
σ'	tensão normal total
σ_0	tensão viscosa
τ	tensão de cisalhamento
τ_P	constante de amortecimento do barostato
ν	coeficiente de Poisson
ϕ	ângulo de atrito
ϕ_R	ângulo de repouso do material
ϕ_w	ângulo de atrito da parede
Ω	número de microestados
$\mathcal{W}(r_i, \hat{t}_i)$	função de volume
μ	coeficiente de atrito
μ_f	viscosidade do fluido
ψ	ângulo entre a tensão principal e a direção θ

$2s$	deslocamento relativo entre os centros de duas partículas
A	área da seção do silo
a	raio da área de contato
b	coeficiente de atrito granular estático
c	coeficiente de coesão,
d	diâmetro das partículas
D_0	diâmetro de saída
d_a^i	raio vetor entre a partícula i e o ponto de contato a
D_{cil}	diâmetro do cilindro
E	energia do <i>ensemble</i>
E^*	módulo de elasticidade equivalente,
$f_{a,n}^i$	componente normal da força de contato f_a^i
$f_{a,\tau}^i$	componente tangencial da força de contato f_a^i
$f(q)$	resultante das forças agindo em uma partícula na coordenada q
f_a^i	força de contato no ponto a , agindo sobre a partícula i
F_n	força normal de contato
G	módulo de cisalhamento dos grãos
g	aceleração da gravidade
h	altura da coluna de grãos
H	Hamiltoniano
K	relação entre as forças de atrito e normais
k	constante de forma
k_n	constante elástica normal do material
k_t	constante elástica transversal do material
l	perímetro de seção do silo
N	número de partículas do <i>ensemble</i>

P	pressão do <i>ensemble</i>
p	quantidade de movimento generalizado
p_0	pressão máxima de contato
p_{atm}	pressão atmosférica
p_i	pressão na superfície do sólido granular
p_s	pressão horizontal,
q	coordenada generalizada
R	raio de curvatura equivalente
$\Re$	número de Reynolds granular
r_i	posição do centro de massa de cada partícula i
S	entropia granular
$\hat{t}_i$	orientação da partícula i
T	temperatura do <i>ensemble</i>
$T_{t,max}$	tensão tangencial, exercida pelos grãos de milho nas paredes do silo
U	velocidade superficial
$u_r, u_\theta, \text{ e } u_\phi$	componentes da velocidade
V	volume do <i>ensemble</i>
W	fluxo mássico granular
X	compactividade

Resumo

Neste trabalho foi utilizada a abordagem da dinâmica molecular para se estudar o fluxo de granalhas que ocorre no interior do reservatório de uma máquina de *shot peening* com sucção por indução. Com o auxílio do software LAMMPS, foram feitas oito simulações, variando o diâmetro das granalhas, o diâmetro da seção de saída do reservatório e o ângulo de inclinação das paredes da sua seção cônica. As forças entre as partículas foram modeladas de acordo com a teoria de Hertz-Mindlin e Coulomb. Utilizando-se o *ensemble* microcanônico granular, foram calculadas as coordenadas das partículas, que aliadas a considerações sobre as condições de contorno estabelecidas, eram utilizadas para estimar o fluxo de saída para cada conjunto de parâmetros. O cálculo foi realizado por um algoritmo implementado em Matlab, e seus resultados foram confrontados com aqueles obtidos através da aplicação da correlação de Beverloo. Para se estimar os efeitos da inclinação das paredes, dois coeficientes foram avaliados, o de Rose e Tanaka e o de Brown e Richards. Enquanto o erro máximo obtido através da aplicação do coeficiente de Rose e Tanaka foi igual a 13,07%, frente a 8,17% encontrados através da aplicação do coeficiente de Brown e Richards, os erros médios de ambas foram equivalentes (6,75% e 6,68%, respectivamente).

Palavras Chave: Escoamento multifásico, escoamento granular, dinâmica molecular, simulação.

Abstract

In this work the molecular dynamics approach was used to study the flow of particles occurring inside the reservoir of a shot peening machine with suction by induction. With the aid of LAMMPS software, eight simulations were performed, varying the diameter of the shot, the diameter of the reservoir outlet section and the angle of inclination of the walls of its conical section. The forces between particles were modeled according to the theory of Hertz-Mindlin and Coulomb. Using the granular microcanonic ensemble, the particle coordinates were calculated, that combined with considerations about the boundary conditions established, were used to estimate the outflow for each set of parameters. The calculation was performed by an algorithm implemented in Matlab, and its results were compared with those obtained by applying the Beverloo correlation. To estimate the effects of wall angle, two coefficients were evaluated, Rose and Tanaka, and Brown and Richards. While the maximum error encountered with the application of the Rose and Tanaka coefficient was 13.07%, compared to 8.17% found by applying the Brown and Richards coefficient, the average errors of both approaches were equivalent (6.75 % and 6.68%, respectively).

Keywords: Multiphase flow, granular flow, molecular dynamics, simulation.

1. Introdução

Peen forming é um processo de conformação a frio de superfícies metálicas através do repetido impacto de granalhas a alta velocidade. Granalhas são partículas, geralmente de aço, encontradas em formatos esféricos (*shot*), angulares (*grit*) e arame cortado (*cut wire*). As granalhas esféricas têm dimensões padronizadas pela norma SAE J444, que vão de 0.125mm (*S70*) a 4.75 mm (*S1320*) e níveis de dureza entre 40 e 60 HRC.

Aceleradas por turbinas centrífugas ou ar comprimido, as partículas podem atingir até 80 m/s (TUPY, 2019), e ao serem impactadas contra uma superfície, geram deformações plásticas. Tensões residuais surgem devido à tendência do material a se recuperar elasticamente ao redor dessas deformações (Fig. 1), dando origem a uma fina camada compressiva residual.

Figura 1: Camada compressiva gerada no processo de peen forming/shot peening.

Fonte: Moreno (2019).

Pelo fato de o material abaixo desta camada no regime elástico, a expansão de área superficial produz uma curvatura esférica na peça. Para controlar o processo, avaliando quanto tempo a peça deve ser exposta ao jateamento para se obter as tensões

residuais desejadas, é utilizada uma tira de metal, chamada tira Almen. Após o jateamento, a tira apresenta uma curvatura, e a altura do arco dessa curvatura é o parâmetro utilizado para quantificar a intensidade do jato de granalhas (Fig. 2).

Figura 2: Aplicação de jato de granalhas a uma tira Almen.

Fonte: Adaptado de Totten e M.Howes (2002).

As tensões residuais resultantes aumentam a resistência à fadiga do material, bem como a resistência à corrosão. Isso faz com que a aplicação de jato de granalhas seja também usada com o único fim de alterar as propriedades mecânicas do material. Esse processo, muito utilizado nas indústrias automotiva e aeronáutica, é denominado *shot peening*.

No processo de *peen forming*, não só as propriedades mecânicas do material são modificadas, mas também sua geometria. Trata-se de um processo ideal para a conformação de painéis com raios de curvatura relativamente grandes, sem mudanças abruptas no contorno da superfície curva. Pode ser aplicado a qualquer metal ou liga, sendo mais utilizado na conformação de painéis e asas de aviões.

O escoamento das granalhas ao longo de equipamentos de *shot peening* baseados em bocal Venturi apresenta três regimes com comportamentos bastante característicos. No interior da câmara de armazenamento o grau de compactação de granalhas é extremamente elevado, e a velocidade média do particulado é relativamente baixa. Nessa região vigora um clássico escoamento granular, em que as forças de contato entre as partículas sólidas desempenham um papel preponderante. Ao longo da tubulação, entre a seção de saída da câmara e a seção de entrada do bocal, a fração volumétrica sólido/ar é relativamente baixa e as velocidades médias de ambas as fases sólida e gasosa são bastante elevadas; o escoamento deixa de ser tipicamente granular, adquirindo as características de um escoamento bifásico sólido/gás. No interior do bocal Venturi, os efeitos da compressibilidade da fase gasosa e as variações da geometria do bocal dão origem a fenômenos de propagação de ondas e ao surgimento de padrões modais de distribuição de frações volumétricas (MASHIBA, 2019).

Num equipamento pneumático de *shot peening* as granalhas acumuladas dentro da câmara têm sua vazão regulada por uma válvula dosadora. Nos equipamentos com pressão direta, a linha de ar comprimido pressuriza tanto a câmara quanto a linha de transporte pneumático (vide Fig 3). Já nos equipamentos de indução, a câmara é mantida sob pressão atmosférica e a linha de ar comprimido é conectada imediatamente após a válvula reguladora de vazão mássica (vide Fig. 4). As granalhas expelidas pelo bocal, após atingirem a peça alvo do processo, são recolhidas por uma linha de sucção e levadas para um filtro separador, que elimina os estilhaços e devolve as granalhas íntegras à câmara de armazenamento.

Figura 3: Shot peening de pressão direta.

Fonte: Plaster, H. (1981)

Figura 4: Shot peening com aspiração das granalhas por indução.

Fonte Plaster, H., (1981).

A análise do escoamento das granalhas deve ser feita separadamente para cada parte do trajeto até o impacto contra a peça a ser conformada: dentro do silo, ao longo da linha de ar comprimido e ao longo do jato livre. Na literatura encontram-se muitos trabalhos que tratam de escoamentos sólido-gás ao longo de tubulações, e da formação de jatos de partículas sólidas (LEITE, 2016; MASHIBA, 2019). O correto entendimento dessa classe de escoamentos é essencial para o projeto de sistemas de controle de equipamentos de *shot peening*, bem como para o planejamento automático de processos de *peen forming*.

Nesta dissertação, no entanto, focalizaremos apenas o escoamento granular que vigora no interior da câmara de armazenamento de granalhas de equipamentos de *shot peening*. Essa classe de escoamentos, com elevadíssima fração volumétrica sólido/gás, apresenta desafios significativos à modelagem numérica, conforme será mostrado ao longo dos próximos capítulos.

2. Objetivos

O objetivo principal desta dissertação consistiu em demonstrar que é possível prever a vazão mássica de granalhas na saída da câmara de armazenamento de abrasivo de um equipamento pneumático de *shot peening*, mediante a utilização de um modelo numérico baseado na técnica de dinâmica molecular. É importante destacar que a vazão mássica é uma variável essencial não apenas ao controle do equipamento de shot peening como também à implementação de métodos de planejamento de processos automáticos de *peen forming*.

Além do objetivo principal apontado acima, desenvolveu-se uma metodologia baseada no uso de equações empírico-analíticas, conceitos da Mecânica Estatística Granular e métodos da dinâmica molecular, adequada à síntese de modelos numéricos de sistemas granulares densos. Essa metodologia, utilizada na modelagem do escoamento de granalhas em uma câmara de armazenagem de um equipamento de *shot peening*, naturalmente poderá ser estendida a problemas similares, como, por exemplo, na modelagem do escoamento em silos de armazenagem de grãos alimentares.

O escoamento granular denso que ocorre dentro da câmara de armazenamento de máquinas de *shot peening* com aspiração das granalhas por sucção foi descrito através de modelos numéricos baseados em dinâmica molecular. Tais modelos foram implementados com o auxílio do software de dinâmica molecular LAMMPS, desenvolvido pelo *Sandia National Laboratories*.

Os resultados foram confrontados com um modelo empírico-analítico, proposto por Beverloo (1961). Os coeficientes do modelo analítico e do numérico foram ajustados, e os experimentos computacionais foram realizados.

Seguindo uma matriz de experimentos, três parâmetros (diâmetro das granalhas, diâmetro de saída e ângulo de inclinação das paredes) foram relacionados com a vazão das partículas na seção de saída da câmara. Por fim, foi apresentado um mapa operacional do processo de esvaziamento do silo, essencial ao controle do processo.

3. Revisão Bibliográfica

Um dos estudos pioneiros sobre materiais granulares em silos é realizado em 1785, por Coulomb, e estabelece uma relação linear entre as forças normais e as de cisalhamento no contato partícula-partícula. Janssen (1895 apud SPERL, 2006) prova que a pressão estática na saída de um silo independe da altura da coluna de grãos, e estabelece uma equação para a obtenção das pressões verticais, definindo o coeficiente k como sendo a razão entre as pressões verticais e as pressões tangenciais. No entanto, Janssen não estabelece um método que permita efetuar o cálculo desse coeficiente, tarefa que é realizada apenas no século seguinte, por Jenike et al. (1973), Ooi e Rotter (1991), Walker (1966), e Walters (1973).

Diversas falhas em silos projetados seguindo essa teoria, ocorridas durante o processo de carga ou descarga, mostraram que a pressão estática prevista por Janssen não corresponde à pressão dinâmica, que ocorre no silo quando o material se encontra fluindo. Nanninga (1956 apud OOI; ROTTER, 1991) atribui essas falhas a elevações de pressão que ocorrem com a mudança de um regime de tensões plásticas ativas para um de tensões passivas durante a descarga.

Walker (1966) analisou o campo de tensões durante o fluxo de massa, bem como as condições de travamento do fluxo. Jenike e Johanson (1969) propuseram que o fluxo deve ser analisado em três condições distintas: a estática, onde o material granular é compactado pela ação de seu próprio peso, e as pressões principais ocorrem na direção vertical; a dinâmica, onde em seções convergentes o material sofre uma contração lateral e consequente expansão vertical, e as pressões principais são consequentemente laterais, e a transitória, em que ocorrem as pressões descritas por Nanninga durante o ajuste ao regime de fluxo. Walters (1973) estende a análise de Walker para incluir as tensões transitórias.

Nedderman e Tüzün (1979) fizeram uma investigação detalhada da dinâmica do fluxo, utilizando a hipótese de que as condições que governam o escoamento são aquelas próximas ao orifício de saída. Verificaram, além disso, que após o início do fluxo, há uma fase de transição onde a densidade granular se ajusta da compactação

inicial para um valor compatível com o fluxo. Drescher (1992) confirmou experimentalmente a presença desse regime transitório.

Quando um material granular escoar em um silo, dois tipos distintos de escoamento podem ocorrer: o fluxo de massa e o fluxo de funil. No primeiro modo todas as partículas se encontram em movimento, enquanto no segundo áreas de estagnação ocorrem próximo às paredes. Drescher (1992) propôs um critério para determinação do tipo de fluxo, que tem como parâmetros o ângulo da seção convergente, o ângulo de atrito do material granular e o ângulo de atrito seco nas paredes.

O contato entre dois corpos elásticos foi investigado pioneiramente por Hertz (1896 apud JOHNSON et al., 1971), que demonstrou que a área e formato da zona de contato são determinados a partir da deformação elástica dos corpos em contato. Johnson et al. (1971) consideraram o efeito da adesão dentro da área de contato Hertziana, estabelecendo um balanço entre a energia elástica armazenada e a energia dissipada no contato entre as superfícies, e concluindo que a zona de contato entre os corpos é maior do que aquela prevista por Hertz.

O método dos elementos discretos (DEM) foi proposto por Cundall e Strack (1979), que apresentaram um modelo discreto para modelar o contato e o movimento de partículas, em escoamentos granulares. Nesse tipo de abordagem, o escoamento granular é tratado como um sistema constituído por partículas materiais distintas, que se movem sob a ação de forças externas e internas em um meio fluido limitado por uma superfície de contorno. É baseado em um esquema numérico explícito no qual as interações partícula-partícula, partícula-parede, e entre as partículas e o fluido que as envolve, bem como sua evolução temporal, são monitoradas individualmente.

Diversos autores utilizaram o DEM no estudo de escoamentos granulares em silos. Langston et al. (1995) utilizaram a abordagem de elementos discretos para simular o movimento e avaliar as tensões internas em escoamentos de funil. Potapov e Campbell (1996) realizaram simulações computacionais utilizando o DEM para estudar o escoamento granular em silos, com o objetivo de investigar a origem de instabilidades axissimétricas observadas experimentalmente, especialmente em sistemas monodispersos. Cleary e Sawley (2002) usaram o método dos elementos discretos para estudar o efeito da forma das partículas nos escoamentos granulares em silos. Goda e Ebert (2005) desenvolveram um programa computacional para simular o movimento e

analisar as tensões normais nas paredes durante as condições estáticas e durante o escoamento de materiais granulares em silos de seção quadrada.

Campbell e Brennen (1985) realizaram uma simulação computacional bidimensional para descrever o fluxo de materiais granulares utilizando um parâmetro, que denominaram *temperatura granular*, para medir a energia cinética do sistema de partículas. Nos quinze anos seguintes à sua criação, a modelagem pelo método dos elementos discretos ficou restrita a problemas com geometrias simplificadas, em escala reduzida (100 a 1000 partículas), e em duas dimensões. Pesquisas analisando o fluxo de grãos em pequenos silos começavam a ser realizadas, mas apenas com o intuito de compreender os fundamentos do escoamento de materiais granulares. Com o desenvolvimento da tecnologia computacional a complexidade desses modelos aumentou significativamente. A partir de meados dos anos 90 os modelos passaram a abranger de 10.000 a 100.000 partículas, sendo a maioria em duas dimensões ou já em três dimensões, porém com geometrias relativamente simples. Atualmente, o método tem sido aplicado em escala industrial, em três dimensões e em sistemas com geometrias complexas. Madrid e Pagnaloni (2019) utilizaram DEM, implementado via LIGGGHTS, uma versão do software LAMMPS distribuída por DCS Computing GmbH, para a simulação do escoamento granular de 300.000 partículas em um silo sob a influência de um sobrepeso. Após um curto período inicial, um escoamento sob o efeito de sobrepeso apresenta uma aceleração. Eles ressaltam que o efeito de um sobrepeso difere daquele causado pelo aumento na altura da coluna de material granular. Isso ocorre devido à maior dissipação de energia nas relações partícula-partícula e partícula-parede.

Autômatos celulares, técnica computacional desenvolvida por Von Neumann (1951), tem sido bastante utilizados em modelos de escoamentos granulares. O sistema celular automato é formado por um reticulado de células adjacentes, com um conjunto distinto de variáveis que determina o estado de cada célula do contorno a cada instante de tempo (condições de contorno), e uma regra que determina a evolução temporal de cada uma das variáveis no sistema, levando em consideração o estado de cada célula vizinha (CHOPARD, 2009). As células podem ter formato triangular, hexagonal, ou retangular, e podem ser ocupadas por uma ou mais partículas ou podem estar vazias, constituindo lacunas que podem vir a ser ocupadas por outras partículas em um estado

posterior. As células que contém as paredes do silo são fixas no espaço. O processo computacional se baseia em procurar células vazias, por todo o reticulado. A cada passo, uma partícula pode se mover por gravidade para uma célula adjacente que esteja vazia, ou pode permanecer em repouso. O preenchimento de uma célula causa o aparecimento de uma nova célula vazia, que será por sua vez preenchida com uma nova partícula num próximo passo. Assim, a migração de vazios corresponde ao transporte de material na direção oposta. A regra que descreve a mudança de estado nesse caso é probabilística, já que num meio particulado real as formas, dimensões, forças e pontos de contato são aleatórias (KOZICKI; TEJCHMAN, 2005). Kozicki e Techman (2004) utilizaram autômatos celulares para calcular a cinemática de escoamentos granulares em materiais não coesivos, conseguindo descrever de forma aceitável os dois tipos de fluxo comumente observados em silos, o de massa e o de funil. De acordo com esses autores, os autômatos celulares são muito adequados à modelagem de sistemas granulares, pois permitem lidar com um grande número de partículas utilizando um esquema de cálculo bastante simples, baseado em equações de diferenças e não em equações diferenciais; a grande restrição ao uso dessa técnica de modelagem consiste no fato de que a evolução do estado do sistema se baseia apenas em equações cinemáticas, ou seja, em nenhum momento as forças de contato entre as partículas são levadas em conta.

A dinâmica molecular é outra abordagem possível para o estudo do movimento de partículas em um meio granular. Desenvolvida inicialmente para a análise de moléculas, se utiliza da mecânica estatística como ferramenta para a análise de um número muito grande de partículas. Allen e Tildesley (1987) usaram modelos baseados em dinâmica molecular para simular partículas elásticas. Mehta e Edwards (1989) partiram dos princípios básicos da mecânica estatística, e desenvolveram o *ensemble* microcanônico granular, utilizando a compactividade como parâmetro análogo à temperatura, e o volume como análogo à energia total na formulação hamiltoniana, simulando o escoamento de partículas bidispersas. Ristow et al. (1992) utilizaram a dinâmica molecular para simular o escoamento granular bidimensional em silos de seção retangular. Ristow e Herrmann (1995) realizaram simulações em dinâmica molecular para estudar o formato da zona de estagnação em fluxos de funil.

Thomas e Durian (2016) estudaram experimentalmente a dinâmica de escoamentos granulares em silos, analisando a relação entre o diâmetro da saída e a

tendência à obstrução do fluxo, e propuseram uma medida para quantificar a intermitência. Tian et al. (2017) utilizaram unidades de processamento gráfico para implementar a computação paralela de um modelo de escoamento granular denso. Toson e Khinast (2017) aplicaram um modelo de dinâmica baseada em impulsos para descrever o movimento quasi-estático de partículas não circulares, obtendo resultados em concordância com o método dos elementos discretos e com a equação de Beverloo. Nicolas et al. (2018) propuseram um modelo para a ruptura do arco das obstruções, em que as vibrações tomam o lugar das flutuações térmicas na equação de Langevin. Fullard et al. (2018) realizaram uma série de experimentos, utilizando a técnica de PIV (*Particle Image Velocimetry*) em vídeos de alta velocidade das descargas, quantificando o campo de velocidades no estado de transição e no estado permanente. Xiao et al. (2019) propuseram um modelo contínuo para avaliar a segregação em escoamentos granulares bidispersos, integrando a advecção, a difusão e a segregação, e obtendo a distribuição da concentração de partículas na superfície e no reservatório. Os resultados obtidos estão de acordo com aqueles previstos pelo método dos elementos discretos.

4. Fundamentos teóricos

Neste capítulo são apresentadas as principais características inerentes ao escoamento granular, suas classificações, e algumas das abordagens empírico-analíticas propostas na literatura para o estudo e a simulação de escoamentos granulares densos.

4.1. Escoamentos Granulares

De acordo com Tejchman (2013), materiais granulares são formados por grandes conglomerados de grãos macroscópicos individuais (discretos), em contato e envoltos por um fluido (no caso das granalhas de *shot peening*, o fluido que envolve as esferas é o ar).

Escoamentos granulares são classificados em três distintos regimes (JAEGER et al., 1996). No regime denso quase-estático em que as deformações são muito lentas e as partículas interagem por contatos de fricção. O regime de escoamento rápido é caracterizado por baixas frações volumétricas sólido/gás e por um grande número de eventos de colisão entre partículas, fazendo com que o escoamento se aproxime de um regime gasoso dissipativo. No escoamento transicional moderado, a fração volumétrica é elevada, mas o material granular flui como um líquido, as tensões viscosas são relevantes e as partículas interagem através de colisões e contato por atrito (GDR MIDI, 2004). Nesses modos de fluxo, as forças de inércia passam a desempenhar um papel fundamental, fazendo com que o comportamento do material se aproxime mais ao de um fluido em movimento, produzindo frentes de avalanche que apresentam expressivas variações em sua forma em um dado intervalo de tempo. Durante tal fase do escoamento, as partículas podem perder seus contatos, ficando sujeitas a sucessivas colisões. Nesses eventos, as percussões normais e de atrito geram tensões internas (normais e de cisalhamento) e por decorrência dissipação de energia mecânica. No fluxo rápido, a perda de energia mecânica é elevada, pois as colisões são inerentemente inelásticas.

Os modelos teóricos de escoamento de materiais granulares em silos podem ser classificados em duas grandes categorias: eulerianos, quando abordam o material granular como um sistema contínuo que flui através de um volume de controle; e lagrangeanos, quando tratam o material granular como um conjunto de partículas discretas que são acompanhadas individualmente ao longo do tempo.

Os modelos eulerianos são mais utilizados para o estudo do regime de escoamento quase-estático (TEJCHMAN, 2013), governado, essencialmente pela ação das forças de contato. Para os demais regimes de escoamento – moderado e rápido – a abordagem lagrangeana é mais apropriada.

Via de regra, a implementação computacional dos modelos eulerianos baseia-se na técnica CFD (Computational Fluid Dynamics), ao passo que os modelos lagrangeanos podem ser implementados segundo diferentes técnicas computacionais, com destaque para o método dos elementos discretos (DEM, de discrete element method), a dinâmica molecular e a simulação conduzida por eventos.

Os modelos que consideram partículas independentes são mais aplicados ao escoamento granular transitório moderado, e ao escoamento granular rápido.

É importante destacar que, em um equipamento pneumático de *shot peening*, os três tipos de escoamento granular podem ocorrer em um dado instante em diferentes localizações. Próximo à seção de saída da câmara de armazenagem, o material granular flui em um regime de escoamento moderado; nas imediações da superfície superior de interface ar/sólido da câmara e junto às suas paredes, o material granular move-se lentamente, podendo até mesmo apresentar regiões de estagnação. Nas seções a jusante da saída da câmara, ao longo da linha de transporte pneumático, o escoamento granular, em geral, apresenta-se no regime rápido.

É importante destacar que, neste trabalho daremos maior atenção aos regimes de escoamento quase-estático e transicional moderado, uma vez que o escoamento rápido somente é observado nas seções a jusante da saída da câmara de armazenagem, o que foge ao escopo deste trabalho, conforme delimitado no Capítulo 2 (Objetivos).

4.2. Modelos empírico-analítico

Nesta seção apresentaremos alguns modelos empírico-analíticos de escoamentos granulares densos e transicionais moderados, bem como certas teorias que servem de suporte à sua formulação.

4.2.1. O modelo de Jansen

Janssen (1895 apud SPERL, 2006) realizou numerosos experimentos, a fim de analisar a relação entre a pressão na saída de um silo de seção quadrada, e o nível dos grãos de milho armazenados em seu interior. Os experimentos mostraram uma pressão muito inferior à esperada, caso o material se comportasse como um fluido. Esse efeito é ilustrado pela Figura 5.

Figura 5: Variação da pressão granular e da pressão hidrostática com a altura da coluna.

Fonte: Nielsen, 1998.

Janssen concluiu que isso se deve às forças de atrito entre o milho e a parede interna do silo. Esse atrito se torna tão grande, com o aumento da profundidade, que, a partir de uma certa cota, a pressão hidrostática devida à coluna de grãos não afeta mais a dinâmica do escoamento. Para que isso ocorra, é necessário que a resultante da força de atrito entre os grãos e entre esses e as paredes do silo, à altura da cota considerada, seja igual ao peso das camadas de grãos acima.

A tensão tangencial, exercida pelos grãos de milho nas paredes do silo ($T_{t,max}$) pode então ser calculada a partir da Eq. 1.

$$T_{t,max} \mu l dh = \rho_B A dh \quad (1)$$

onde:

μ : coeficiente de atrito

l : perímetro de seção do silo

h : altura da coluna de grãos

ρ_B : densidade do material granular

A : área da seção do silo

No caso de seções circulares, a área e o perímetro são função do raio da seção transversal, dados respectivamente por πr^2 e $2\pi r$. Assim, a tensão é dada pela Eq. 2.

$$T_{t,max} = \frac{\rho_B A dh}{\mu l dh} = \frac{\rho_B \pi r^2}{\mu 2 \pi r} = \frac{\rho_B r}{2 \mu} = \frac{\rho_B D}{4 \mu} \quad (2)$$

Podemos notar que a tensão tangencial, exercida nas paredes do silo, é de fato independente da altura da coluna de grãos, conforme observado por Janssen.

Com o objetivo de determinar a variação do coeficiente de atrito μ com a altura, Janssen conduziu uma nova série de experimentos. Num reservatório plano, uma placa de madeira foi colocada diretamente sobre os grãos. Com a adição de pesos sobre

a placa, foi possível variar a pressão aplicada aos grãos, e uma mola foi usada para determinar a força que deveria ser aplicada para arrastar a placa sobre os grãos (Fig.6).

Figura 6: Montagem experimental para a determinação do coeficiente de atrito.

Fonte: Moreno (2019).

A pressão foi gradualmente elevada, e a partir dos dados experimentais obtidos (Fig. 7), Janssen concluiu que o coeficiente de atrito não era influenciado de forma significativa pela pressão e, portanto, poderia ser considerado constante para diferentes profundidades.

Figura 7: Variação do coeficiente de atrito com o aumento da pressão.

Fonte: Moreno, 2019.

Sendo A a área do perfil, p a pressão vertical nos grãos, h a profundidade, p_s a pressão horizontal, e l a circunferência da seção do silo, o balanço das forças numa fatia elementar do cilindro é dada pela Eq. 3.

$$A(p+dp-p) = \rho_B A dh - \mu p_s l dh \quad (3)$$

onde dp é dado pela Equação 4 e dh é dado pela Equação 5;

$$dp = \rho_B dh - \mu p_s \frac{l}{A} dh = dh \left(\rho_B - \mu p_s \frac{l}{A} \right) \quad (4)$$

$$dh = \frac{dp}{\rho_B - \mu p_s \frac{l}{A}} \quad (5)$$

O coeficiente K é definido como a relação entre as forças de atrito e normais (Eq. 6).

$$K = \frac{\mu p_s}{p} \quad (6)$$

Substituindo a Eq. 6 na Eq. 5, obtém-se a Eq. 7.

$$dh = \frac{dp}{\rho_B \left(1 - \frac{k p l}{A \rho_B} \right)} \quad (7)$$

Para fins de integração, define-se o fator B através da Equação 8.

$$B = \frac{Kl}{A \rho_B} \quad (8)$$

A Equação 7 pode então ser reescrita (Eq. 9).

$$\rho_B dh = \frac{dp}{1 - Bp} \quad (9)$$

Para a integração da Eq. 9 por substituição, é útil definir-se a função u (Eq. 10), e sua derivada du (Eq. 11).

$$u = 1 - Bp \quad (10)$$

$$du = -Bdp \quad (11)$$

Assim, pode-se isolar dp (Eq. 12).

$$dp = -du / B \quad (12)$$

A equação 9 pode ser escrita em função das novas variáveis u e du (Eq. 13).

$$\rho_B dh = \frac{-du}{Bu} \quad (13)$$

Integrando-se 13, obtém-se a Equação 14.

$$\rho_B (h - h_0) = -\frac{\ln u}{B} + C_1 \quad (14)$$

Faz-se, então, o retorno às variáveis de origem (Eqs. 15 e 16).

$$\rho_B (h - h_0) = -\frac{\ln(1 - Bp)}{B} + C_1 = -\frac{\ln\left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p\right)}{\frac{Kl}{A\rho_B}} + C_1 \quad (15)$$

$$(h - h_0) = -\frac{A}{Kl} \ln\left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p\right) + C_1 \quad (16)$$

No modelo de Janssen, a pressão na superfície do sólido granular é atmosférica. Cabe ressaltar que esse nem sempre é o caso da câmara da máquina de *shot peening*, que pode se encontrar pressurizada ($p_i > p_{atm}$) ou não ($p_i = p_{atm}$). Para o nível superior das partículas, a profundidade h é zero, e a pressão é igual a p_i .

$$h = 0 \Rightarrow p = p_i \quad (17)$$

Aplicando-se a condição de contorno apresentada na Eq. 17, a constante de integração pode então ser calculada como:

$$C_1 = \frac{A}{Kl} \ln\left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p_i\right) \quad (18)$$

A constante de integração obtida na Equação 18 é então aplicada à Equação 16. O resultado é apresentado e desenvolvido nas Eqs. 19 a 21.

$$h = -\frac{A}{Kl} \ln \left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p \right) + \frac{A}{Kl} \ln \left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p_i \right) \quad (19)$$

$$h = -\frac{A}{Kl} \ln \left(\frac{1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p}{\left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p_i \right)} \right) \quad (20)$$

$$\left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p_i \right) e^{-\frac{klh}{A}} = \left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p \right) \quad (21)$$

Isolando-se a pressão, obtém-se a Eq. 22.

$$p = \frac{A\rho_B}{Kl} \left[1 - \left(1 - \frac{Kl}{A\rho_B} p_i \right) e^{-\frac{klh}{A}} \right] \quad (22)$$

Lembrando que $c = \pi D$ e $A = \pi D^2/4$, resulta que $A/l = D/4$. Assim, a pressão vertical pode ser expressa como (Eq. 23):

$$p = \frac{D\rho_B}{4K} + \left(p_i - \frac{D\rho_B}{4K} \right) e^{-\frac{4Kh}{D}} \quad (23)$$

A única grandeza desconhecida é a constante K , determinada experimentalmente por Janssen. No caso da impossibilidade de determinação experimental, o valor de 0,8 é aplicável para a maioria dos sólidos granulares (JENIKE, 1967).

O modelo de Janssen, apesar de representar um imenso avanço no campo dos escoamentos granulares, baseia-se em diversas simplificações. Além disso, esse modelo só é válido para reservatórios com paredes verticais. Na seção onde há redução da área

da seção transversal, outros modelos devem ser aplicados. Ainda assim, é de grande importância para o estudo de materiais granulares, destacando a independência da pressão em relação à altura da coluna de material.

4.2.2. Forças hertzianas de contato

Quando dois sólidos entram em contato, isso pode ocorrer ao longo de uma superfície (sólidos conformes) ou em um único ponto ou linha (sólidos não conformes). O contato entre esferas é do tipo não conforme, como mostrado na Figura 8, ocorrendo inicialmente num único ponto O.

Figura 8: Deformação de esferas em contato.

Fonte: Moreno, 2019.

Conforme a força de contato aumenta, as esferas sofrem deformações elásticas ao redor desse ponto inicial, conforme ilustra a Figura 8 e o contato passa a ocorrer em uma área finita de raio a , pequena em comparação com as dimensões dos sólidos (Johnson, 1985). O deslocamento total δ é a soma dos deslocamentos δ_1 e δ_2 de cada partícula (Fig. 9)

Figura 9: Deslocamentos durante deformação.

Fonte: Adaptado de Johnson (1985).

A teoria de Hertz assume algumas hipóteses relativas à área de contato (FISCHER-CRIPPS, 2006). Os deslocamentos e tensões devem satisfazer as equações diferenciais de equilíbrio para corpos elásticos. As tensões são nulas longe da área de contato, e não há força de atrito. No caso do contato entre esferas, a área de contato é circular, de raio a . A distribuição de pressão também é circular, seguindo a forma dada pela equação 24.

$$p = p_0 \left(1 - \frac{r^2}{a^2} \right)^{1/2} \quad (24)$$

As forças de contato são dadas pela integral da distribuição de pressão sobre a área de contato (Eq. 25).

$$F = \int_0^A p(r) dA = \int_0^a p(r) 2\pi r dr = \frac{2}{3} p_0 \pi a^2 \quad (25)$$

Assim, a pressão máxima p_0 é dada pela Eq. 26.

$$p_0 = 3 \frac{F}{2\pi a^2} \quad (26)$$

E a distribuição da pressão é expressa como (Eq. 27):

$$p = \frac{3F}{2\pi a^2} \left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right)^{1/2} \quad (27)$$

Para duas esferas em contato, o módulo de elasticidade equivalente, E^* , é dado pela Equação 28.

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \quad (28)$$

No caso de duas esferas idênticas, o módulo de elasticidade equivalente é dado pela Equação 29.

$$E^* = \frac{E}{2(1-\nu_1^2)} \quad (29)$$

De forma análoga, a curvatura relativa é dada pela Equação 30.

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \quad (30)$$

Landau e Lifshitz (1986) mostram que a força de contato normal pode ser escrita em função da constante elástica normal do material k_n , da curvatura relativa R , e do deslocamento normal δ (Eq. 31).

$$F_n = \frac{2}{3} k_n R^{1/2} \delta^{3/2} \quad (31)$$

A constante elástica de contato normal (k_n), é uma função do módulo de cisalhamento dos grãos G e do coeficiente de Poisson ν (Eq. 32).

$$k_n = \frac{4G}{1-\nu} \quad (32)$$

O raio a da área de contato também é função do deslocamento normal δ e do raio de curvatura relativa R (Eq. 33).

$$a = \sqrt{\delta R} \quad (33)$$

A força tangencial foi calculada por Mindlin (1949 apud ZHANG; MAKSE, 2005) para grãos sob forças oblíquas como função constante elástica transversal do material k_t , da curvatura relativa, do deslocamento normal, e de uma variável s definida de tal forma que o deslocamento tangencial relativo entre os centros de duas partículas é $2s$ (Eq. 34).

$$\Delta F_t = k_t (R \delta)^{1/2} \Delta s \quad (34)$$

De forma análoga à constante elástica normal (Eq. 32), a constante elástica tangencial também é uma função do módulo de cisalhamento dos grãos G e do coeficiente de Poisson ν (Eq. 35).

$$k_t = \frac{8G}{2-\nu} \quad (35)$$

Conforme o deslocamento tangencial aumenta, a força elástica aumenta até atingir o limite estabelecido pelas leis de atrito de Coulomb, que será descrito no próximo item.

4.2.3. A lei de Coulomb para a força cisalhante granular

Apesar da natureza discreta dos materiais granulados, seu comportamento mecânico pode ser aproximadamente descrito pelos princípios da mecânica dos meios contínuos (em particular em se tratando de um regime de fluxo denso quase estático). De fato, o primeiro modelo de um escoamento granular, proposto por Coulomb em

1773, é fundamentado na teoria do continuum, e estabelece os conceitos de atrito e coesão, fundamentais para o comportamento dos materiais granulares. No entanto, esse modelo só pode ser corretamente compreendido em associação com a representação de Mohr do estado de tensão. Chen et al. (2008) enfatizam que o modelo de Coulomb para escoamento granular é implicitamente utilizado em diversas abordagens empírico-analíticas desse tipo de escoamento disponíveis na literatura.

De acordo com Nash e Potter (2011), se se considera um plano abstrato que passe através do meio granular, as forças que agem ao longo desse plano são chamadas forças de cisalhamento. Wu et al. (2008) descrevem como essas forças podem ser determinadas através do experimento ilustrado na Figura 10. O material granular, que se encontra entre duas placas dentadas, é sujeito à compressão devido à aplicação da força normal F_n . A placa inferior é fixa, enquanto a placa superior pode se mover ao longo da seção $I-I$, com a aplicação da força cisalhante F_t . Um sensor mede o deslocamento horizontal da placa superior.

Figura 10: Determinação experimental das forças granulares cisalhantes

Fonte: Wu et al. (2008).

Coulomb admite uma relação linear entre as forças normal e cisalhante. Assim, o critério de Coulomb prevê que o escoamento vai ocorrer quando um determinado estado limite de tensões é atingido, que satisfaça a Eq. 36:

$$F_t = b F_n + c \quad (36)$$

em que F_n é a força normal, F_t é a força transversal (de cisalhamento) e c é o coeficiente de coesão, e b é o coeficiente de atrito granular estático, dado pela Eq. 37.

$$b = \tan \phi \quad (37)$$

onde ϕ é o ângulo de atrito interno.

A tensão de cisalhamento pode ser expressa como função da força de cisalhamento F_t , determinada experimentalmente, e da área A (Eq. 38).

$$\tau = \frac{F_t}{A} = \tan \phi + c = \sigma' \tan \phi \quad (38)$$

onde σ' , a tensão normal total, ou seja, aquela causada pela coesão interna, é uma função da tensão normal σ , e da tensão viscosa σ_0 , definidas nas Equações 39 a 41.

$$\sigma' = \sigma_0 + \sigma \quad (39)$$

$$\sigma = \frac{F_n}{A} \quad (40)$$

$$\sigma_0 = \frac{c}{\tan \phi} \quad (41)$$

O tensor das tensões, num estado bidimensional, é dado por três componentes – as tensões normais σ_r e σ_θ , e a tensão de cisalhamento $\tau_{r\theta}$ (Eq. 42).

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_r & \tau_{r\theta} & 0 \\ \tau_{r\theta} & \sigma_\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_r & \tau_{r\theta} \\ \tau_{r\theta} & \sigma_\theta \end{bmatrix} \quad (42)$$

As tensões principais e taxas de deformação principais podem ser representados utilizando-se círculos de Mohr (POLDERMAN et al., 1987). Nas figuras 11 e 12, são apresentados os círculos de Mohr para estados de tensão coaxiais.

Figura 11: Círculo de Mohr para o estado de tensões.

Fonte: Moreno (2019).

Figura 12: Círculo de Mohr para as taxas de deformação

Fonte: Moreno (2019).

Por simetria de triângulos, podemos notar as relações apresentadas na Equação 43:

$$\frac{\dot{\gamma}_{r\theta}}{\dot{\epsilon}_r - \dot{\epsilon}_\theta} = \frac{2\tau_{r\theta}}{\sigma_r - \sigma_\theta} = \tan 2\psi \quad (43)$$

onde $\dot{\gamma}_{r\theta}$ é a taxa de deformação cisalhante, $\dot{\epsilon}_r$ e $\dot{\epsilon}_\theta$ são as taxas de deformação compressiva, e ψ é o ângulo entre a tensão principal e a direção θ .

A linha de escoamento (yield locus) é o conjunto dos valores de tensão para os quais ocorre escoamento. O ângulo formado entre c e a linha de escoamento é o ângulo de atrito ϕ . Na figura, a linha pontilhada representa um meio granular coesivo, enquanto a linha cheia representa um meio granular não coesivo.

O critério generalizado de Mohr-Coulomb pode ser representado graficamente como uma curva no espaço de Mohr que envolve todos os círculos de Mohr que representam estados de tensão onde o fluxo de material é iminente, como ilustrado na Figura 13 a seguir.

Fonte: Moreno (2019)

O círculo A representa um estado de tensão na iminência do movimento, enquanto o círculo B representa um estado estável, e o círculo C representa um estado

onde o fluxo já está ocorrendo. A linha D é conjunto dos estados limite, onde de acordo com o critério de Mohr-Coulomb, o escoamento é iminente. Detalhes sobre a teoria relativa aos círculos de Mohr podem ser encontrados no Apêndice A.

4.2.4. Fluxos de massa e de funil

Dois tipos de escoamento podem se formar, quando há estreitamento numa seção circular: o fluxo de massa e o fluxo de funil (Figura 14).

Figura 14: Tipos de fluxo de saída

Fonte: Ketterhagen et al., 2009.

No fluxo de funil, forma-se um canal onde o material particulado se move, enquanto o restante do material, junto às paredes, permanece parado. Isso ocorre quando a inclinação das paredes é menor do que um certo valor de limiar. No segundo modo de escoamento, não há regiões de estagnação, e todo o material se encontra em movimento. O fluxo de massa é o ideal para processos de *shot peening*, pois o surgimento de zonas

de estagnação é um fenômeno não-linear que aumenta a complexidade do modelo dinâmico, implicando, assim, na necessidade de se implementar técnicas de controle mais sofisticadas para o equipamento.

O ângulo de atrito da parede (ϕ_w), é calculado através da Eq. 44.

$$\operatorname{tg} \phi_w = \frac{\tau_w}{\sigma_w} \quad (44)$$

O ângulo de atrito interno é aquele formado entre o eixo das tensões normais e a tangente à circunferência de Mohr.

O tipo de fluxo pode ser determinado graficamente (Fig. 15), em função da inclinação das paredes (α), do ângulo de atrito da parede (ϕ_w), e do ângulo de atrito interno (ϕ).

Figura 15: Determinação do tipo de fluxo

4.2.5. Correlação de Beverloo e suas variantes

A correlação de Beverloo e suas diferentes versões são as fórmulas empíricas mais utilizadas na previsão do fluxo mássico granular através de aberturas e serão apresentadas a seguir. Ela tem sua origem numa das primeiras tentativas de obtenção do fluxo mássico granular W a partir de experimentos realizados com cilindros de fundo chato.

O primeiro passo dos pesquisadores desse método consistiu da aplicação de análise dimensional ao fenômeno. Foi assumido que W seria função do diâmetro do cilindro D_{cil} , diâmetro de saída D_0 , do diâmetro das partículas d , da gravidade g , do atrito e da densidade granular ρ_B .

Janssen (1895 apud SPERL, 2006) já havia anteriormente provado a independência de W em relação à altura da coluna de partículas, e experimentos iniciais indicaram que o fluxo granular não era função do diâmetro das partículas d , nem do diâmetro do cilindro D_{cil} . Assim, W deve ser uma função da forma $W=f(C, D_0, \rho_B, g)$, onde o coeficiente C é relacionado ao atrito. Logo, a equação do fluxo granular teria a forma da Equação 45:

$$W = C D_0^I \rho_B^{II} g^{III} \quad (45)$$

Os expoentes são obtidos a partir da análise dimensional, ou seja:

$$\left[\frac{kg}{s} \right] = [m]^I \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{II} \left[\frac{m}{s^2} \right]^{III} \quad (46)$$

Da Eq. 46, deduz-se que:

$$I = 5/2;$$

$$II = 1;$$

$$III = 1/2.$$

Assim, equação do fluxo granular seria dada pela Eq. 47.

$$W = C \rho_B g^{1/2} D_0^{5/2} \quad (47)$$

No entanto, Nedderman (2005) ressalta que tal equação não apresentava perfeita concordância com dados experimentais. Ao construir gráficos na forma $W \times D_0$, as curvas pareciam indicar que o coeficiente I se aproximava de 3. Ainda assim, Beverloo et al. (1961) mantiveram sua convicção de que o coeficiente deveria ser 5/2, como previsto pela análise dimensional. Plotando os dados experimentais na forma $W^{2/5} \times D_0$ eles obtiveram uma linha reta, como esperado, mas sua origem não se encontrava em $D_0=0$, apresentando um pequeno distanciamento z , como ilustrado na Figura 16.

Figura 16: Forma da reta obtida a partir dos dados experimentais

Fonte: Adaptado de Beverloo et al (1961).

Beverloo et al. (1961) mostraram que o valor do deslocamento z é relacionado ao diâmetro e formato das partículas. Assim, é obtida a equação até hoje mais utilizada para a predição do fluxo granular, conhecida como correlação de Beverloo (Eq. 48).

$$W = C \rho_B g^{1/2} (D_0 - kd)^{5/2} \quad (48)$$

onde C é uma constante relacionada ao atrito, variando entre 0,54 para materiais mais ásperos, e 0,64, para esferas de vidro particularmente lisas, e k é um fator que depende do formato das partículas, sendo igual a 1.5 no caso de esferas.

A equação obtida por Beverloo mostra que o diâmetro de saída apresenta uma região anelar vazia, similar ao modelo proposto por Brown e Richards (1970), que observaram um menor número de partículas na região periférica da seção de saída. Ainda que a origem física de tal fenômeno seja objeto de controvérsias, uma vez que a região anelar se mostra maior que o diâmetro das partículas, o conceito de anel vazio indica que o diâmetro efetivo de saída é menor que o diâmetro do orifício.

Observa-se que o fluxo mássico, contudo, não é função da compactação inicial das partículas. Uma vez iniciado o fluxo, a densidade granular se ajusta a um valor apropriado para o material escoando (NEDDERMAN, 2005). Assim, a densidade granular deve ser aquela de um conjunto não compactado. No caso de um conjunto de esferas, a fração volumétrica ocupada pelas partículas é de 0,54.

Para a utilização da correlação de Beverloo, devem ser respeitadas as seguintes condições: 1) diâmetro médio das partículas menor que 6 vezes o diâmetro da seção de saída; 2) a altura da coluna de material granular deve ser maior que 6 vezes o diâmetro da seção de saída; 3) o diâmetro das partículas deve se situar na faixa $400\mu m < d < D_0/6$.

Para a aplicação da equação de Beverloo em cilindros de seções convergentes, é utilizada a equação de Rose e Tanaka (1959), que relaciona o fluxo nas seções cônicas ao fluxo em seções cilíndricas. Os referidos autores concluíram que o fluxo em um cilindro de paredes cônica é função do fluxo W que ocorre num cilindro de paredes retas de mesmo diâmetro de saída, do ângulo das paredes α e do ângulo de repouso do material ϕ_R (Eq. 49). O ângulo de repouso é igual ao ângulo de atrito interno, quando o material não se encontra pressurizado.

$$W_{\alpha} = W (\tan \alpha \tan \phi_R)^{-0,35} \quad (49)$$

Brown e Richards (1970) sugerem a utilização de um fator de correção alternativo ao de Rose e Tanaka (1959) para a obtenção do fluxo mássico em silos com seção convergente. O fator referido acima foi posteriormente utilizado em modelos empírico-analíticos propostos por outros autores, como Barletta et al. (2003) e Mamtani (2011), dando origem a expressões de W da forma (Eq. 50):

$$W = W_0 \left(\frac{1 - \cos^{1,5} \frac{\alpha}{2}}{\sin^{2,5} \frac{\alpha}{2}} \right) \quad (50)$$

Para escoamentos granulares com injeção de ar comprimido, utiliza-se uma modificação para a equação de Beverloo, proposta por Crewdson et al. (1977). De acordo com esse estudo, no fluxo por gravidade o material é impulsionado pelo seu peso, mas na presença de um gradiente de pressão intersticial, haverá uma força adicional igual ao gradiente de pressão vertical dp/dz que, para um funil cônico estreito, será aproximadamente igual ao gradiente de pressão radial dp/dr . Assim, no fluxo de ar comprimido, a equação de Beverloo apresenta um fator que se soma à gravidade adquirindo a forma apresentada na Equação 51:

$$W = C \rho_g \left(g + \frac{1}{\rho_B} \left(\frac{dp}{dr} \right)_{r_0} \right)^{1/2} (D_0 - kd)^{5/2} (\tan \alpha \tan \phi_d)^{-0,35} \quad (51)$$

ou alternativamente, utilizando-se o fator proposto por Brown e Richards, a equação do fluxo granular toma a forma apresentada na Equação 52.

$$W = C \rho_g \left(g + \frac{1}{\rho_B} \left(\frac{dp}{dr} \right)_{r_0} \right)^{1/2} (D_0 - kd)^{5/2} \left(\frac{1 - \cos^{1,5} \frac{\alpha}{2}}{\sin^{2,5} \frac{\alpha}{2}} \right) \quad (52)$$

Ainda de acordo com Crewdson, o gradiente de pressão varia conforme a altura, mas as condições que devem ser consideradas são aquelas próximas do orifício de saída. A determinação do gradiente de pressão depende da velocidade superficial U . Para baixas velocidades, é possível utilizar a lei de Darcy (1856 apud NEUMAN, 1977) e a equação da continuidade em coordenadas esféricas, bem como a equação de Carman-Kozeni (Carman (1937 apud NEDDERMAN et al., 1982). Para velocidades mais elevadas, é necessário aplicar a equação de Ergun e Orning (1949).

O número de Reynolds de um escoamento granular é dado pela Equação 53:

$$\Re = \frac{\rho_f U d}{\mu_f (1 - \varepsilon)} \quad (53)$$

onde $\Re$ é o número de Reynolds granular, ρ_f a densidade do fluido, U a velocidade superficial, d o diâmetro das partículas, μ_f a viscosidade do fluido e ε a fração de vazios (*void fraction*).

Em escoamentos granulares com número de Reynolds inferior a 10 a lei de Darcy (Eq. 54) para o fluxo em meios porosos é válida.

$$U = k \frac{dp}{dx} \quad (54)$$

No fluxo de massa em seções cônicas o campo de tensões é radial. O sistema de coordenadas esféricas é ilustrado na figura 17.

Figura 17: Sistema de coordenadas cilíndricas e componentes do vetor velocidade

Fonte: Jenike (1961).

Um ponto é definido pelas coordenadas r , θ , e ϕ , e pelas velocidades u_r , u_θ , e u_ϕ . A equação da continuidade para coordenadas esféricas é dada pela Equação 55

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (\rho r^2 u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (\rho u_\theta \sin \theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (\rho u_\phi)}{\partial \phi} = 0 \quad (55)$$

onde ρ é a densidade.

No caso do escoamento no interior da sessão cônica de saída da câmara, pode-se considerar o escoamento como puramente radial. Considerando também o fluido como incompressível, a equação da continuidade se torna:

$$\frac{\partial (r^2 u_r)}{\partial r} = 0 \quad (56)$$

Para satisfazer a Equação 56, a velocidade radial deve ser inversamente proporcional a r^2 (Eq. 57).

$$u_r \propto \frac{1}{r^2} \quad (57)$$

Tomando-se C_2 como uma constante arbitrária, a Equação 57 se torna (Eq. 58):

$$u_r = \frac{C_2}{r^2} \quad (58)$$

Aplicando-se o resultado obtido na Equação 54 e fazendo-se a integração, obtém-se a Equação 59.

$$\Delta p = \int_{r_0}^{r_1} \frac{C_2}{r^2} dr = C_2 \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r_1} \right) \quad (59)$$

onde r_1 é o raio até a superfície do material, e r_0 é o raio até o arco de queda livre. Como r_1 é significativamente maior que r_0 , $r_1 \gg r_0$, é válida a Equação 60.

$$\Delta p \approx \frac{C_2}{r_0} \quad (60)$$

Pode-se então encontrar a constante C_2 (Eq. 61):

$$C_2 = \Delta p r_0 \quad (61)$$

Substituindo-se a constante C_2 , obtém-se a Equação 62.

$$\frac{dp}{dr} = \frac{r_0 \Delta p}{r^2} \quad (62)$$

Substituindo-se o gradiente de pressão encontrado, para $r=r_0$, na Equação 52 obtém-se a Equação 63.

$$W = C \rho_g \left(g + \frac{\Delta p}{\rho_B r_0} \right)^{1/2} (D_0 - kd)^{5/2} (\tan \alpha \tan \phi_d)^{-0,35} \quad (63)$$

onde r_0 é o raio até o arco de queda livre, que pode ser calculado através da geometria da seção de saída (Eq. 64).

$$r_0 = \frac{D_0}{2 \sin \alpha} = \frac{D_0}{2} \operatorname{cosec} \alpha \quad (64)$$

Com o aumento da velocidade, contudo, os efeitos inerciais e a densidade do fluido intersticial se tornam importantes. Nesse caso, a equação de Ergun (Eq. 65) é a mais utilizada para a determinação da taxa dp/dx .

$$\frac{dp}{dx} = \frac{150 \mu_f U (1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d^2} + \frac{1,75 \rho_f U^2 (1-\varepsilon)}{\varepsilon d} \quad (65)$$

Utilizando-se a definição do número de Reynolds apresentada na Eq. 53, a equação de Ergun também pode ser escrita na forma da Equação 66

$$\frac{dp}{dx} = U \frac{\mu_f (1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d^3} (150 + 1,75 \Re) \quad (66)$$

Utilizando-se as mesmas hipóteses do caso anterior, Nedderman (2005) mostra que para escoamentos com alto número de Reynolds, o gradiente de pressão próximo ao orifício é dado pela Equação 67:

$$\left(\frac{dp}{dr} \right)_0 = \frac{3 \Delta p}{r_0} \quad (67)$$

E a equação de Beverloo modificada, para altas velocidades intersticiais, se torna a Equação 68.

$$W = C \rho_g \left(g + \frac{1}{\rho_B} \frac{3 \Delta p}{r_0} \right)^{1/2} (D_0 - kd)^{5/2} (\tan \alpha \tan \phi_d)^{-0,35} \quad (68)$$

4.3. Simulação numérica

Nos próximos tópicos serão apresentadas algumas teorias e técnicas computacionais que foram utilizadas neste trabalho para construir um ambiente de simulação de sistemas granulares densos.

4.3.1. Mecânica estatística clássica

A mecânica estatística foi concebida por Boltzmann (1884 apud CAMPISI; KOBE, 2012), que introduziu o conceito de *ensemble* estatístico em equilíbrio. Gibbs (1902) posteriormente formalizou e estendeu a teoria.

Boltzmann propõe que são as propriedades microscópicas de um sistema que determinam as propriedades macroscópicas do mesmo. Assim, por exemplo, a velocidade das moléculas em um fluido estariam relacionadas com a sua temperatura.

Um determinado conjunto de propriedades macroscópicas constitui um estado termodinâmico. Cada estado é caracterizado pelas variáveis macroscópicas, como, por exemplo, temperatura (T), pressão (P), volume (V) e número de partículas (N). Porém, diferentes combinações microscópicas podem resultar nas mesmas condições macroscópicas, ou seja, um macroestado pode apresentar diferentes microestados. O conjunto de todos os microestados que compõe um macroestado é chamado *ensemble*. Se o espaço de fases é o conjunto de todas as combinações possíveis de condições microscópicas, o *ensemble* é a região do espaço de fases acessível ao sistema.

Cada ponto do *ensemble* tem uma probabilidade de ocorrência p . De acordo com a teoria ergódica, proposta por Boltzman, durante um longo intervalo de tempo o sistema passa por todos os microestados possíveis, e todos os microestados com o mesmo nível de energia são equiprováveis.

Um sistema é dito *em equilíbrio* quando suas propriedades macroscópicas não mudam com o tempo (TUCKERMAN, 2010). O exemplo mais simples de sistema em equilíbrio termodinâmico é aquele isolado do meio. Não há troca de calor ou trabalho, de forma que a energia do sistema E se mantém constante. O volume V e o número de partículas N também se mantém constante. O conjunto de estados microscópicos que geram essas mesmas quantidades macroscópicas é chamado *ensemble* microcanônico (NVE). Outras possibilidades de *ensembles* em equilíbrio são o canônico (NVT), em que se mantém constantes o número de partículas N , o volume V e a temperatura T , e o *ensemble* grancanônico (μVT), onde são constantes o potencial químico μ , o volume V e a temperatura T .

Cada microestado é definido por um grande número de partículas e suas posições e velocidades. Tais partículas não devem ser vistas como pontos materiais, mas como pequenos corpos com formas e dimensões diversas, de modo que sua posição e orientação devem ser consideradas na análise. O movimento dessas partículas é descrito por uma função chamada de Hamiltoniano (H), que representa a energia total do sistema expressa como função das posições e respectivas quantidades de movimento das partículas.

Cada partícula é caracterizada por duas variáveis, q e p , que são respectivamente a coordenada generalizada e a quantidade de movimento generalizada de cada partícula i . As equações do movimento de Hamilton, chamadas de canônicas, são apresentadas nas Equações 69 e 70.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i} \quad (69)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i} \quad (70)$$

Assim, num sistema de N partículas em três dimensões, com coordenadas $q_1, q_2, \dots, q_{3N}$, e quantidades de movimento $p_1, p_2, \dots, p_{3N}$, o espaço de fases Γ é o espaço varrido por todas as combinações dessas variáveis. Um estado microscópico é

representado como um ponto nesse espaço, e a evolução desse sistema no tempo por uma curva (SCHWABL; BREWER, 2006).

A probabilidade de um determinado estado microscópico, ou seja, o ponto $(q, p) \equiv (q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N})$ ocorrer no instante t é dado pela densidade de probabilidade $\rho(q, p, t)$. A derivada parcial de ρ em relação ao tempo é dada pela equação de Liouville (Eq. 71).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_i \left(-\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (71)$$

O teorema de Liouville estabelece que quando o sistema evolui ao longo do tempo, obedecendo às equações de Hamilton, a função ρ não se altera.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (72)$$

A demonstração da Equação 72 pode ser encontrada em Halley (2007 e Landau e Lifshitz (1986). A consequência do teorema de Liouville é que a função ρ deve ser expressa como combinações das variáveis p e q , as integrais de movimento, também chamadas invariantes mecânicos, pois se mantêm constantes quando o subsistema se move como um subsistema fechado. Assim, o sistema muda seu estado microscópico continuamente, mas a distribuição de probabilidades permanece constante.

Considerando um sistema isolado de N partículas, ocupando um volume V , e evoluindo no tempo de acordo com as equações de Hamilton, a energia total $E=H(x)$ se mantém constante, formando uma hipersuperfície, em que todos os pontos correspondem ao mesmo conjunto de variáveis macroscópicas. A evolução desse sistema no tempo gera uma trajetória na hipersuperfície de energia constante.

Se a energia do sistema apresenta uma pequena variação de energia Δ , a energia do sistema oscila entre E e $E+\Delta$. Se o hamiltoniano do sistema é $H(p, q)$, é válida a Equação 73.

$$E \leq H(p, q) \leq E + \Delta \quad (73)$$

Se todos os pontos no espaço de fases dentro desse intervalo são equiprováveis, a função de distribuição microcanônica é dada pela Equação 74.

$$\rho_{MC} = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E)\Delta} & \text{se } E \leq H(p, q) \leq E + \Delta \\ 0 & \text{em outros casos} \end{cases} \quad (74)$$

onde $\Omega(E)$ é a função de normalização, que é dependente apenas da energia E , sendo independente de p e q .

Para se controlar a pressão, pode ser utilizado o barostato de Berendsen, onde o sistema é conectado a um reservatório mantido sob pressão constante (BERENDSEN et al., 1984). A variação de pressão no reservatório é dada pela Eq. 75.

$$\left(\frac{dP}{dt} \right)_r = \frac{P_r - P}{\tau_p} \quad (75)$$

onde τ_p é a constante de amortecimento do barostato, que é uma medida do controle exercido sobre a pressão (LESZCZYNSKI, 2012).

As velocidades são então reescaladas a cada passo, como mostra a Equação 76.

$$\dot{x} = v - \frac{\beta(P_r - P)}{3\tau_p} x \quad (76)$$

onde β é a compressibilidade isotérmica, e v a velocidade original.

4.3.2. Dinâmica molecular

A dinâmica molecular é um método de simulação computacional baseado na aplicação das leis da termodinâmica a sistemas microscópicos (TUCKERMAN, 2010) constituídos por moléculas em movimento sob a ação de forças externas e

internas, por hipótese conhecidas a priori a cada instante. Aplicando-se a segunda lei de Newton a cada uma das moléculas e admitindo-se conhecidas as suas condições cinemáticas iniciais, obtêm-se por integração numérica as equações que governam o movimento das moléculas ao longo do tempo; assim, determina-se a evolução temporal do estado cinemático do sistema como um todo (Haile et al. (1993)). É importante destacar que é necessário agregar ao processo de integração numérica das equações diferenciais métodos da mecânica estatística clássica, de modo a que os invariantes dinâmicos do sistema sejam satisfeitos ao longo do tempo.

A escolha do *ensemble* (*NVE*, *NVT* ou μVT) se baseia no comportamento do sistema a ser estudado, e nas variáveis macroscópicas que se mantêm constantes, como mostrado no item 4.3.1.

A inicialização do sistema se dá com a definição da posição e da velocidade de cada partícula. A construção do modelo consiste na especificação das forças que agem sobre as partículas. Essas forças podem ser originárias de diferentes potenciais de interação, como: gravitacional, elétrico, Van der Waals, Lennard-Jones, e elástico (Hooke). É importante salientar que esses potenciais simples podem também ser aplicados à simulação de sistemas de partículas que não correspondam a moléculas propriamente; é o caso, por exemplo, de sistemas fluidos e granulares. Griebel (2007), no entanto, ressalta que os potenciais referidos acima, em geral, não serão adequados à simulação de sistemas moleculares constituídos por moléculas grandes, como, por exemplo, os metais e polímeros; em tais situações faz-se necessário considerar as interações entre os átomos dessas moléculas, o que requer potenciais mais complexos, como por exemplo o potencial de Brenner (1990). No caso do escoamento de material granular em um silo vertical, as forças atuantes são as forças gravitacionais e as forças de contato entre as partículas, e entre as partículas e as paredes do silo, que foram modeladas de acordo com o modelo de Hertz apresentado anteriormente. No caso de reservatórios sob pressão, o arrasto devido à diferença de velocidade do fluido também deve ser levado em consideração.

A partir das características do sistema como temperatura, pressão, número de partículas e volume deve ser definido o *ensemble* a ser utilizado.

Estando definidas as forças que agem sobre o sistema de partículas, devem-se estabelecer as condições de contorno. Processos em regime permanente via de regra são

simulados mediante a aplicação de condições de contorno periódicas, que mantém invariável o número de partículas do sistema.

A integração é a maneira pela qual o sistema evolui no tempo, com o cálculo das novas posições e velocidades. Para integrar as equações diferenciais do movimento, realizando a evolução temporal do Hamiltoniano de cada partícula, existem diversas propostas na literatura. O algoritmo de Verlet (1967) é um dos mais utilizados devido à sua boa estabilidade numérica, reversibilidade temporal e preservação da forma simplética no espaço de estados. Considerando-se uma partícula no espaço de fases, que no instante t_0 é caracterizada pelo hamiltoniano $H(q_0, p_0)$. Se $\ddot{q} = f(q)/m$, a evolução temporal do hamiltoniano num intervalo de tempo Δt é dada pelas Eqs. 77 a 79.

$$p_{1/2} = p_0 + \frac{1}{2} \Delta t f(q_0) \quad (77)$$

$$q_1 = q_0 + \Delta t \frac{p_{1/2}}{m} \quad (78)$$

$$p_1 = p_{1/2} + \frac{1}{2} \Delta t f(q_1) \quad (79)$$

Essas equações são aplicadas até que a condição de parada (normalmente um certo número de passos) seja alcançada.

4.3.3. Mecânica estatística granular

Num escoamento granular lento, o movimento das partículas pode ser descrito como uma sucessão de estados estáticos, de travamento, onde todo o movimento das partículas é impedido devido ao confinamento das partículas vizinhas. A transição para um outro estado de travamento não é, portanto, controlada pela temperatura como transições de fase convencionais em sistemas em equilíbrio térmico, mas por restrições mecânicas impostas por todas as partículas no sistema.

Assim, os estados travados podem ser considerados como o conjunto de soluções de um problema de satisfação de restrições, teoria que Baule et al. (2018) denominam *Jamming Satisfaction Problem* (JSP), onde as restrições são fixadas pela estabilidade mecânica das configurações travadas de grãos. Utilizando a mesma nomenclatura apresentada por Baule et al., as restrições podem ser dadas pela Eq. 80.

$$\begin{aligned}
\Theta_{jam} = & \prod_{i,j=1}^N \theta(|r_i - r_j| - 2R) \\
& \times \prod_{i=1}^N \delta\left(\sum_{a \in \partial i} f_a^i\right) \\
& \times \prod_{i=1}^N \delta\left(\sum_{a \in \partial i} d_a^i \times f_a^i\right) \\
& \times \prod_{i=1}^N \prod_{a \in \partial i} \theta\left(\mu f_{a,n}^i - |f_{a,\tau}^i|\right) \\
& \times \prod_{i=1}^N \prod_{a \in \partial i} \theta\left(-d_a^i \cdot f_a^i\right) \\
& \times \prod_{\text{todos os contatos de } a} \delta\left(f_a^i + f_a^j\right)
\end{aligned} \tag{80}$$

As seis restrições apresentadas na Eq. (80) têm origem na indeformabilidade das partículas, no balanço de forças, no balanço de torques, no atrito de Coulomb, nas forças repulsivas e na terceira lei de Newton, e serão brevemente explicadas a seguir.

Considerando um sistema de N partículas esféricas, de raio R , o volume V pode ser caracterizado pela posição r_i do centro de massa de cada partícula. No caso de partículas de formatos diferentes, a orientação das partículas também deve ser considerada. A primeira restrição diz que os centros das esferas r_i e r_j devem ser localizados a uma distância no mínimo duas vezes maior que o raio das esferas (Eq. 81)

$$|r_i - r_j| \geq 2R \tag{81}$$

A segunda restrição diz respeito ao balanço de forças. Cada partícula i tem um conjunto ∂i de contatos. O contato a gera uma força f_a^i . A somatória das forças de todos os contatos em cada partícula i é igual a zero (Eq.82).

$$\sum_{a \in \partial i} f_a^i = 0 \quad (82)$$

A terceira restrição leva em conta os momentos exercidos por cada uma dessas forças f_a^i . Sendo d_a^i o raio-vetor entre a partícula i e o contato a , o balanço dos momentos em cada partícula i é dado pela equação (83).

$$\sum_{a \in \partial i} d_a^i \times f_a^i = 0 \quad (83)$$

A quarta restrição é referente ao atrito de Coulomb. No caso de partículas com atrito, a força de contato f_a^i pode ser expressa como a soma vetorial de suas componentes, normal $f_{a,n}^i$, e tangencial $f_{a,\tau}^i$ (Eq.84).

$$f_a^i = f_{a,n}^i + f_{a,\tau}^i \quad (84)$$

A lei do atrito de Coulomb é então dada pela equação (85).

$$f_{a,\tau}^i \leq \mu f_{a,n}^i \quad (85)$$

A quinta restrição estabelece que as forças entre as partículas são sempre repulsivas (Eq. 86).

$$d_a^i \cdot f_a^i < 0 \quad (86)$$

Por fim, a sexta restrição se refere à terceira lei de Newton, que estabelece que toda força de ação tem por contrapartida uma força de reação, de igual intensidade. Assim, para duas partículas, i e j , em contato no ponto a , as forças de contato obedecem à Equação 87.

$$f_a^i = -f_a^j \quad (87)$$

O conjunto de soluções que satisfazem simultaneamente as seis restrições constitui um *ensemble*. Baseando-se na teoria de Boltzmann, Edwards e Oakeshott (1989) propõem a aplicação da hipótese ergódica, estabelecendo assim que cada solução desse *ensemble* tem igual probabilidade de ocorrência. Em outras palavras, eles assumem que se um número de grãos N ocupa um volume V , cada uma das inúmeras configurações que podem se apresentar são igualmente prováveis.

Uma analogia com a teoria de Boltzmann pode então ser traçada. Os parâmetros macroscópicos que são utilizados para definir o estado de equilíbrio do *ensemble* microcanônico granular são o volume (que faz o papel da energia no *ensemble* microcanônico clássico), a compactividade (parâmetro análogo à temperatura), e o número de partículas.

A compactividade é definida pela Eq. 88, e pode ser entendida fisicamente como a capacidade de um sistema de ter seu volume reduzido. Sistemas que podem ser mais compactados têm um valor de X maior, de forma que X é igual a zero no máximo estado de compactação possível, e X tem um valor máximo para a menor compactação possível.

$$X = \frac{\partial V}{\partial S} \quad (88)$$

Conjuntos com um volume maior que aquele correspondente a X infinito são instáveis, e qualquer vibração levará a uma redução do volume, aumento da entropia e redução da energia potencial (EDWARDS; OAKSHOT, 1989).

Cada partícula é caracterizada por sua posição r_i e orientação $\hat{t}_i$. Se o volume depende das posições e orientações das partículas, deve haver uma função $\mathcal{W}(r_i, \hat{t}_i)$ que relacione o volume a essas variáveis microscópicas. A entropia granular pode ser definida como uma medida do número de microestados Ω para um dado volume V (Herrman et al., 2018), de acordo com as Equações 89 e 90.

$$S(V) = \lambda \log \Omega(V) \quad (89)$$

$$\Omega(V) = \int dq \delta(V - \mathcal{W}(r_i, \hat{t}_i)) \Theta_{jam} \quad (90)$$

onde o parâmetro λ garante a dimensão correta de S .

O termo $\int dq$ representa uma integral sobre todas as configurações do sistema (Eq. 91).

$$\int dq = \prod_{i=0}^N \int dr_i \oint d\hat{t}_i \quad (91)$$

O termo impõe a restrição ao subespaço onde a função de volume é igual a V (Eq.92).

$$\mathcal{W}(r_i, \hat{t}_i) = V \quad (92)$$

A função Θ_{jam} na Equação 90 garante que apenas microestados que correspondam às condições de travamento sejam incluídas no ensemble.

Baule et al. (2018) ressaltam que o teorema de Liouville não é aplicável a sistemas granulares, pois levaria a uma compressibilidade de espaço de fases não nula. Isso ocorre devido à ação das forças de atrito que dominam o sistema. Ainda assim, a ergodicidade proposta por Edwards tem se mostrado válida em inúmeros experimentos e simulações computacionais (EDWARDS et al., 2004).

5. Materiais e métodos

Para descrever o escoamento no interior da câmara, utilizamos um conjunto de modelos matemáticos analíticos e numéricos, abrangendo: Teoria de Hertz, modelo de atrito de Coulomb, dinâmica molecular granular, e a correlação de Beverloo.

A implementação computacional se deu através do software LAMMPS (Sandia National Laboratories), um código de dinâmica molecular clássica que modela um conjunto de partículas em um estado líquido, sólido ou gasoso. Pode modelar sistemas atômicos, poliméricos, biológicos, metálicos e granulares usando uma variedade de campos de força e condições de contorno, utilizando desde modelos de sistemas com apenas algumas partículas até modelos com bilhões de partículas.

É uma ferramenta poderosa de simulação, que conta com inúmeros recursos, e que pode ser estendida mediante a introdução de novos potenciais de forças, tipos de átomos, e condições de contorno. No entanto, deve ser aqui destacada a ausência de interface gráfica, o que torna a interação do usuário com o software muito mais complexa. O *script* deve ser gerado através de um editor de texto, e o acesso ao programa se faz via *prompt* de comando.

O computador utilizado neste trabalho possuía as seguintes características: processador Intel® Core™ i7-7500U, 2.9GHz, com 16 GB de memória RAM instalada, e sistema operacional Windows 10 Pro de 64 bits.

5.1. O modelo empírico-analítico

Como mencionado anteriormente, a correlação de Beverloo et al. (1961) é a equação mais utilizada para a previsão de fluxos granulares em silos, devido à sua simplicidade, e devido ao bom ajuste encontrado com os dados experimentais (SALEH et al. (2018). Assim, utilizando-se o fator proposto por Rose e Tanaka (1959) e alternativamente o fator proposto por Brown e Richards (1970) para seções de saída cônicas, a correlação de Beverloo foi utilizada para estimar o fluxo mássico para cada

conjunto de parâmetros. Os resultados obtidos foram organizados em tabelas, e o número de partículas que passam pela seção de saída a cada segundo foi estimado.

5.2. O modelo computacional

O escoamento tridimensional que ocorre dentro de uma câmara de armazenamento de uma máquina de *shot peening* com aspiração das granalhas por sucção foi simulado utilizando-se o software LAMMPS, conforme já se afirmou anteriormente. O primeiro passo na construção do modelo foi a definição das variáveis geométricas do reservatório e das partículas. Os limites da caixa de simulação são dados por x_{lo} , x_{hi} , y_{lo} , y_{hi} , z_{lo} e z_{hi} . O eixo central da seção cilíndrica é dado por x_c , y_c , e seu raio por $rad_{cone\ hi}$. A seção cilíndrica tem início em z_{hi} , e se estende até o início da seção cônica, em $z_{cone\ hi}$. A seção cônica tem o raio superior igual ao da seção cilíndrica ($rad_{cone\ hi}$), e raio inferior $rad_{cone\ lo}$. O modelo prevê a bidispersão das partículas, com raios variando entre r_{lo} e r_{hi} .

A densidade média do aço é 7860 kg/m^3 , módulo de Young é 200 GPa , o coeficiente de Poisson é $0,28$. Foram então definidas as variáveis relativas ao material das esferas e ao contato granular, de acordo com a teoria de Hertz-Mindlin (MINDLIN, 1949): a constante elástica normal k_n , a constante elástica k_t as constantes de amortecimento viscoelástico de contato normal γ_n e de contato transversal, γ_t .

O tipo das partículas foi definido como esférico, e antes que se inicie a construção do reservatório, é necessário estabelecer a caixa de simulação, que tem por objetivo definir o domínio da simulação, e o tipo de fronteira em cada uma das direções. Nas três dimensões da caixa de simulação definida, as fronteiras foram tratadas como periódicas, de forma que quando as partículas atravessam uma face da caixa de simulação, imediatamente retornam pela face oposta. Em seguida, definiram-se os elementos característicos da geometria do reservatório bem como a topologia de suas conexões. Os elementos considerados foram os seguintes: *entrada*, *cilíndrico* e *cônico*. O elemento cilíndrico é conectado ao elemento cônico, enquanto o elemento entrada apenas define uma região dentro do elemento cilíndrico, conforme mostrado na Figura 18.

Figura 18: Caixa de simulação e regiões.

Fonte: Moreno (2019).

Uma vez definido o reservatório e suas fronteiras, na região *entrada* é criado um conjunto de partículas não sobrepostas, localizadas em locais aleatórios da região *entrada*, com fração de volume inicial 0,2. As partículas são criadas com velocidade inicial nula, e são aceleradas pela força da gravidade em direção à região cônica. Caso o número mínimo de partículas necessário para a simulação não possa ser inserido de uma só vez, a inserção de mais partículas só ocorrerá quando a última partícula inserida na etapa anterior tiver deixado a região de entrada. Assim, é necessário que esse volume de entrada seja menor que o volume total do cilindro, ou isso limitaria a altura inicial da coluna de grãos à altura da seção cônica.

No caso do escoamento examinado, os potenciais de forças são o gravitacional, o de atrito e o elástico, sendo este último obtido através das forças hertzianas de contato. No LAMMPS, a integração é feita através do método de Verlet. O *ensemble* estatístico utilizado foi o microcanônico, ou NVE, seguindo a teoria de Edwards et al. (2004).

Na Fig.19 apresenta-se o diagrama de blocos que descreve as principais etapas do processo de simulação do escoamento granular, utilizando o método da dinâmica molecular granular.

Figura 19: Principais etapas do processo de simulação.

Fonte: Moreno (2019).

Durante a fase inicial de carregamento das partículas no reservatório, a extremidade inferior da seção cônica se encontra fechada, de forma que as partículas se

acumulam no reservatório. Isso é necessário para que se atinja o número mínimo de partículas a serem inseridas. O número de passos que se deve aguardar para que ocorra a inserção variou de 500.000 a 800.000. O sistema aguarda 200.000 passos para que as partículas se depositem no fundo do reservatório. Então todas as regiões e conexões devem ser apagadas e as regiões cilíndrica e cônica devem ser recriadas e reconectadas com suas extremidades abertas, para que se dê a saída das partículas pela extremidade inferior do reservatório. Notou-se que a energia do sistema se estabiliza após aproximadamente 500.000 passos. Finalmente, mais 200,000 passos são realizados, e as posições de cada uma das partículas são registradas a cada 1.000 passos, de forma a minimizar o arquivo resultante, gerando um arquivo *dump.txt* contendo 200 conjuntos de posições para as partículas. Podem também ser obtidas, para cada partícula, as componentes da velocidade e as componentes da resultante das forças agentes.

5.3. Definição da matriz de experimentos numéricos

Os parâmetros relevantes que determinam a vazão mássica na seção de saída da câmara de armazenamento são o diâmetro das granalhas d , o diâmetro da abertura inferior da câmara D_0 , e o ângulo *alfa* de inclinação da seção convergente. Na Tab. 2 indicam-se os dois valores extremos desses parâmetros que foram considerados nos experimentos.

Tabela 1: Valores dos parâmetros considerados nos experimentos.

Parâmetro	Valores mínimo e máximo
D_0	20 mm e 25 mm
Alfa	18° e 24°
d	2,80 mm e 3,30 mm

Fonte: Moreno, 2019.

Conforme indicado na Tabela 5.2, implementou-se um projeto de experimentos fatorial completo com 3 parâmetros e dois estados, totalizando, portanto, $2^3=8$

experimentos. Os experimentos seguem a numeração binária, como mostra a matriz de experimentos (Tab. 3).

Tabela 2: Matriz de experimentos

Simulação	D_0	Alpha	d
000	-	-	-
001	-	-	+
010	-	+	-
011	-	+	+
100	+	-	-
101	+	-	+
110	+	+	-
111	+	+	+

Fonte: Moreno, 2019.

O primeiro algarismo da identificação da simulação corresponde ao diâmetro de saída, o segundo ao ângulo da seção convergente e o último ao diâmetro das partículas. O algarismo 0 corresponde ao valor mínimo do parâmetro, e o algarismo 1 corresponde ao valor máximo, como é possível identificar na tabela.

Todas as simulações realizadas se referem à máquina de *shot peening* com aspiração das granalhas por sucção, onde o ar pressurizado é inserido no sistema após a saída das granalhas do reservatório, que se encontra à pressão atmosférica. A simulação da máquina de pressurização direta, em que o ar é injetado no reservatório, requer a adição do barostato de Berendsen no código LAMMPS, para que seja feita a estabilização da pressão. Com isso, todas as posições e velocidades são reescaladas a cada passo da simulação, o que requer uma memória de trabalho maior do que a disponível no microcomputador utilizado nas simulações desta dissertação. O uso de *clusters* e processamento paralelo se faz necessário, mas não se encontra dentro do escopo desse trabalho.

6. Resultados

Foram feitas oito simulações, de acordo com a matriz de experimentos previamente definida. O tempo médio requerido por simulação foi de aproximadamente 10 horas. A verificação do modelo numérico foi feita mediante a comparação entre os resultados das simulações e os resultados da aplicação das fórmulas de Beverloo. Para tanto, foi necessário tomar uma série de providências para que as simulações não violassem as hipóteses desse modelo empírico-analítico. Para garantir a validade da hipótese de Jansen, deve-se respeitar a altura mínima de seis vezes o diâmetro de saída, que por sua vez deve ser no mínimo seis vezes maior que o diâmetro das partículas. Partículas com diâmetros pequenos levam a um elevado número de elementos e passos menores. Os arquivos gerados, contendo as coordenadas de cada partícula acabam se tornando grandes demais, as simulações passam a demorar várias horas, até mesmo dias, utilizando-se a máquina descrita no capítulo 5. O pós-processamento desses dados também é muitas vezes impossível de ser feito em tais máquinas, sendo necessário o uso de computação paralela, que como mencionado anteriormente, não se encontra dentro do escopo deste trabalho.

A matriz de experimentos foi simulada e o número de partículas em cada experimento variou de acordo com o tamanho das granalhas e com o diâmetro de saída, para que fosse garantida a condição de validade da hipótese de Janssen. Como mencionado anteriormente, para que a pressão na seção de saída seja independente da altura (condição essa usada no desenvolvimento da correlação de Beverloo), a altura ocupada pelas partículas deve ser de, no mínimo, seis vezes o diâmetro de saída. O diâmetro de saída, por sua vez, deve ser pelo menos seis vezes o diâmetro das partículas, para que não ocorra obstrução. O número mínimo de partículas de cada experimento é dado na tabela 3.

Tabela 3 Número mínimo de partículas a serem simuladas.

Experimento	Número de partículas
000	51974
001	30347
010	91303
011	53312
100	94088
101	54938
110	168441
111	98353

Fonte: Moreno (2019).

Os experimentos críticos são aqueles que combinam diâmetros de saída maiores com maiores ângulos de inclinação da parede. Devido ao alto número de partículas a serem avaliadas nessas condições, o custo computacional é grande, sendo necessário muito mais tempo para cada simulação, e maior capacidade de memória RAM para processar os grandes arquivos gerados.

A figura 20 ilustra a variação da energia do sistema na simulação 001. Inicialmente as partículas são inseridas no sistema com velocidade nula e, por efeito da gravidade, se acumulam no interior do reservatório, e a energia decai. Após a abertura da saída do reservatório, que nessa simulação ocorre no passo 700.000, ocorre o aumento da energia, até sua estabilização, próxima do passo 1.000.000 (Fig. 20). Os dados das simulações somente podem ser levados em consideração para o estudo das propriedades do sistema após essa estabilização da energia.

Figura 20: Variação da energia mecânica do sistema no experimento 001.

Fonte: Moreno, 2019.

Imagens do escoamento a cada 1000 passos, bem como vídeos de cada simulação, foram gerados através do próprio LAMMPS. A Figura 21 mostra exemplos de imagens relativas a cada uma das simulações.

Figura 21: Imagens geradas de cada reservatório simulado.

Fonte: Moreno(2019).

Os resultados numéricos gerados pela simulação do LAMMPS foram analisados utilizando-se o Matlab. O número de partículas que atravessam a face inferior do volume de controle, reingressando no sistema através da face superior, foi contabilizado para cada um dos instantes analisados, e o fluxo médio de partículas por segundo foi então estimado. O resultado obtido para cada simulação foi confrontado com aquele previsto pela correlação de Beverloo, para cada conjunto de parâmetros, e os erros foram avaliados. Os resultados obtidos, são apresentados na tabela 4, em termos de partículas por segundo.

Tabela 4: Vazão de partículas.

Experimento	Brown e Richards	Rose e Tanaka	Dinâmica Molecular
000	4646	4280	4278
001	2373	2185	2280
010	4069	3853	3805
011	2078	1967	2239
100	8514	8594	7819
101	4709	4535	4325
110	7542	7737	7126
111	3822	4083	3611

Fonte: Moreno, 2019.

O desvio entre o resultado obtido pela simulação e aquele obtido através da correlação de Beverloo (1961), utilizando-se o coeficiente proposto por Rose e Tanaka (1956) apresenta um desvio máximo de 13%. Ao se aplicar o coeficiente proposto por Brown e Richards, o desvio máximo cai para 8% (Fig. 22). Os erros médios de ambas abordagens foram equivalentes (6,75% e 6,68%, respectivamente), mostrando que o modelo de dinâmica molecular utilizado é adequado para simular o fluxo granular no reservatório de granelhas de uma máquina de *shot peening* com sucção das partículas por indução.

Figura 22: Erro relativo encontrado com a adoção do fator de Rose e Tanaka e com o fator de Brown e Richards para paredes inclinadas.

Fonte: Moreno, 2019.

Os resultados gerados através do LAMMPS também foram pós processados com a aplicação do software OVITO, que é uma ferramenta *open-source* de visualização tridimensional e análise científica, utilizada para processar dados obtidos a partir de simulações de dinâmica molecular. Para melhor visualização das características do fluxo, foi criado um corte paralelo ao eixo y , passando pelo centro do reservatório, como mostra a Figura 23.

Figura 23: Pós processamento dos resultados com o software Ovito (experimento 001).

Fonte: Moreno, 2019.

Com a seleção das partículas contidas em uma pequena seção do reservatório, o movimento dessas partículas foi observado ao longo do tempo, como mostra a Figura 24. A linha superior mostra a vista em corte da caixa de simulação, enquanto a linha inferior mostra a vista de sua face esquerda.

Figura 24: Deformação de uma camada de partículas (experimento 001).

Fonte: Moreno, 2019.

No instante inicial, as duas vistas são aproximadamente iguais. No entanto, devido à diferença de velocidade entre as partículas próximas ao eixo central e aquelas próximas à parede, a camada de partículas selecionadas começa a se distorcer. Ainda assim, não são observadas zonas de estagnação, como esperado para o interior da câmara de armazenamento das granalhas em máquinas de *shot peening*.

O perfil de velocidades é apresentado na Figura 25. A maior parte das partículas apresenta velocidade na direção contrária ao sentido positivo do eixo z . Algumas partículas, no entanto, ao se chocarem com aquelas que apresentam velocidade próxima de zero, apresentam por alguns instantes velocidades no sentido positivo do eixo z . Estas partículas são aquelas de cor avermelhada. As partículas de cor amarela são aquelas com velocidade próxima de zero, enquanto as partículas azuis são aquelas que apresentam maior velocidade, no sentido contrário ao do eixo z .

Figura 25: Perfil de velocidades no eixo central do reservatório (experimento 001).

Fonte: Moreno, 2019.

Como a velocidade das partículas em queda livre é muito maior que a das partículas da área cônica, para facilitar a visualização do perfil de velocidades na região próxima ao orifício de saída, essa região foi analisada separadamente (Fig. 26)

Figura 26: Perfil de velocidades da região próxima ao orifício de saída.

Fonte: Moreno, 2019.

Os resultados obtidos estão qualitativamente em acordo com aqueles obtidos experimentalmente por Choi et. al (2005), que utilizaram um aparato experimental para estudar o escoamento de esferas de vidro em silos aproximadamente bidimensionais. Imagens das partículas foram capturadas, e um algoritmo foi aplicado para obter o campo de velocidades, apresentado na Figura 27.

Figura 27: Campo de velocidades experimental.

Fonte: Choi et al. (2005).

7. Conclusões

Neste trabalho foi utilizada a abordagem da dinâmica molecular para se estudar o fluxo de granalhas que ocorre no interior do reservatório de uma máquina de *shot peening* com reservatório de sucção por indução.

Com o auxílio do software LAMMPS, foram feitas oito simulações, de acordo com a matriz de experimentos proposta, variando-se os parâmetros d , D_0 e α , ou seja, o diâmetro das granalhas, o diâmetro da seção de saída do reservatório e o ângulo de inclinação das paredes da sua seção cônica.

As forças entre as partículas foram modeladas de acordo com a teoria de Hertz-Mindlin (MINDLIN, 1949) e Coulomb. Utilizando-se o *ensemble* microcanônico granular proposto por Edwards (1992), foi estimada a trajetória percorrida por partícula. Após a estabilização da energia do sistema, as coordenadas das partículas aliadas a considerações sobre as condições de contorno estabelecidas, eram utilizadas para estimar o fluxo de saída para cada conjunto de parâmetros definido na matriz de experimentos.

Os resultados desse cálculo, realizado por um algoritmo implementado em Matlab, foram confrontados com aqueles obtidos através da aplicação da correlação de Beverloo. Para se estimar os efeitos da inclinação das paredes, dois coeficientes foram avaliados, o de Rose e Tanaka (1956) e o de Brown e Richards (1970). Enquanto o erro máximo obtido através da aplicação do coeficiente de Rose e Tanaka foi igual a 13,07%, frente a 8,17% encontrados através da aplicação do coeficiente de Brown e Richards (1970), os erros médios de ambas foram equivalentes (6,75% e 6,68%, respectivamente).

É importante lembrar que um dos objetivos essenciais desta dissertação consistia no desenvolvimento de um modelo numérico que permitisse estimar a vazão mássica de equipamentos de shot peening para diferentes condições operacionais. Vê-se, portanto, que esse objetivo foi alcançado e que o escoamento granular que ocorre dentro do reservatório de uma máquina de shot peening pode ser adequadamente

simulado através da dinâmica molecular, com a aplicação do *ensemble* granular proposto por Edwards (1992).

Para finalizar, é essencial destacar que a técnica da dinâmica molecular requer o uso intensivo de recursos computacionais de grande capacidade de processamento, algo que não esteve disponível para a realização deste trabalho. Dessa forma, dadas as limitações dos equipamentos utilizados, não foi possível investigar o comportamento dos reservatórios de pressão direta, mas apenas os de sucção por indução. Recomenda-se, portanto, que esse estudo seja um tema de futuros trabalhos. Recomenda-se também uma investigação experimental do sistema, com o uso de sensores e análise de imagens do escoamento.

8. Referências

1. BARLETTA, D.; DONSI, G.; FERRARI, G.; POLETTO, M. On the role and the origin of the gas pressure gradient in the discharge of fine solids from hoppers. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 23–24, p. 5269–5278, 2003.
2. BAULE, A.; MORONE, F.; HERRMANN, H. J.; MAKSE, H. A. Edwards statistical mechanics for jammed granular matter. **Reviews of Modern Physics**, v. 90, n. 1, 2018.
3. BERENDSEN, H. J. C.; POSTMA, J. P. M.; VAN GUNSTEREN, W. F.; DINOLA, A.; HAAK, J. R. Molecular dynamics with coupling to an external bath. **The Journal of Chemical Physics**, v. 81, n. 8, p. 3684–3690, 1984.
4. BEVERLOO, W. A.; LENIGER, H. A.; VAN DE VELDE, J. The flow of granular solids through orifices. **Chemical engineering science**, v. 15, n. 3–4, p. 260–269, 1961
5. BOLTZMANN, L. Ableitung des Stefan'schen Gesetzes, betreffend die Abhängigkeit der Wärmestrahlung von der Temperatur aus der electromagnetischen Lichttheorie. **Annalen der Physik**, v. 258, n. 6, p. 291–294, 1884.
6. BRENNER, D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. **Physical review B**, v. 42, n. 15, p. 9458, 1990.
7. BROWN, R. L.; RICHARDS, J. C. **Principles of powder mechanics**. Pergamon press, 1970.
8. CAMPBELL, C. S.; BRENNEN, C. E. Chute flows of granular material: Some computer simulations. **Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME**, 1985.

9. CAMPISI, M.; KOBE, D. H. Derivation of the Boltzmann principle. , v. 608, n. 2010, 2012.
10. CARMAN, P. C. Fluid flow through granular beds. **Trans. Inst. Chem. Eng.**, v. 15, p. 150–166, 1937.
11. CHEN, J.-F.; OOI, J. Y.; TENG, J.-G. **Structures and Granular Solids: From Scientific Princ. to Eng. Appl. - An Int. Conf. in Celebration of the 60th Birthday of Prof. J. Michael Rotter - Proc. Int. Conf. on Structures and Granular Solids: Preface**. London: Taylor & Francis, 2008.
12. CHOI, J.; KUDROLLI, A.; BAZANT, M. Z. Velocity profile of granular flows inside silos and hoppers. **Journal of Physics Condensed Matter**, v. 17, n. 24, p. S2533–S2548, 2005.
13. CHOPARD, B. **Cellular Automata Modeling of Physical Systems**. Cambridge University Press, 2009.
14. CLEARY, P. W.; SAWLEY, M. L. DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge. **Applied Mathematical Modelling**, v. 26, n. 2, p. 89–111, 2002.
15. CREWDSON, B. J.; ORMOND, A. L.; NEDDERMAN, R. M. Air-impeded discharge of fine particles from a hopper. **Powder Technology**, v. 16, n. 2, p. 197–207, 1977.
16. CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979.
17. DARCY, H. Les fontaines publiques de la ville de Dijon, Dalmont. **Paris: Dalmont**, 1856.

18. DRESCHER, A. On the criteria for mass flow in hoppers. **Powder Technology**, v. 73, n. 3, p. 251–260, 1992.
19. EDWARDS, SAM F.; BRUJIĆ, J.; MAKSE, H. A. A. A basis for the statistical mechanics of granular systems. **Unifying Concepts in Granular Media and Glasses**, p. 9–23, 2004.
20. EDWARDS, S. F.; OAKESHOTT, R. B. S. Theory of powders. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 157, n. 3, p. 1080–1090, 1989.
21. ERGUN, S.; ORNING, A. A. Fluid Flow through Randomly Packed Columns and Fluidized Beds. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 41, n. 6, p. 1179–1184, 1949.
22. FISCHER-CRIPPS, A. C. **Mechanical Engineering Series: Introduction to Contact Mechanics**. 2006.
23. FULLARD, L. A.; DAVIES, C. E.; NEATHER, A. C.; et al. Testing steady and transient velocity scalings in a silo. **Advanced Powder Technology**, v. 29, n. 2, p. 310–318, 2018.
24. GDR MIDI. On dense granular flows. **European Physical Journal E**, v. 14, n. 4, p. 341–365, 2004.
25. GIBBS, J. W. Elementary principles in statistical mechanics. **New York: Charles Scribner's Sons**, 1902.
26. GODA, T. J.; EBERT, F. Three-dimensional discrete element simulations in hoppers and silos. **Powder Technology**, v. 158, n. 1–3, p. 58–68, 2005.
27. GRIEBEL, M. **Numerical Simulation in Molecular Dynamics**. 2007.

28. HAILE, J. M.; JOHNSTON, I.; MALLINCKRODT, A. J.; MCKAY, S. Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. **Computers in Physics**, v. 7, n. 6, p. 625, 1993.

29. HALLEY, J. W. **Statistical Mechanics**. 2007.

30. JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 68, n. 4, p. 1259–1273, 1996.

31. JANSSEN, H. A. Versuche uber getreidedruck in silozellen. **Z. Ver. Dtsch. Ing.**, v. 39, n. 35, p. 1045–1049, 1895.

32. JENIKE, A. W. Quantitative design of mass-flow bins. **Powder Technology**, v. 1, n. 4, p. 237–244, 1967.

33. JENIKE, A. W.; JOHANSON, J. R. On the Theory of Bin Loads. **Journal of Engineering for Industry**, v. 91, n. 2, p. 339, 1969.

34. JENIKE, A. W.; JOHANSON, J. R.; CARSON, J. W. Bin Loads—Part 2: Concepts. **Journal of Engineering for Industry**, v. 95, n. 1, p. 1, 1973.

35. JOHNSON, K. L. Contact Mechanics, 452 pp. **Cambridge University, New York**, 1985.

36. JOHNSON, K. L.; KENDALL, K.; ROBERTS, A. D. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 324, n. 1558, p. 301–313, 1971.

37. KOZICKI, J. A. N.; TEJCHMAN, J. Simulations of Flow Patterns in Silos With a Cellular Automaton : Part 2. , , n. 1, p. 103–114, 2004.

38. KOZICKI, J.; TEJCHMAN, J. Application of a cellular automaton to simulations of granular flow in silos. **Granular Matter**, v. 7, n. 1, p. 45–54, 2005.
39. LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. Course of Theoretical Physics, vol. 7, Theory of Elasticity, Landau and Lifshitz. , 1986.
40. LANGSTON, P. A.; TÜZÜN, U.; HEYES, D. M. Discrete element simulation of granular flow in 2D and 3D hoppers: dependence of discharge rate and wall stress on particle interactions. **Chemical Engineering Science**, v. 50, n. 6, p. 967–987, 1995.
41. LEITE, R. A. DE B. **Planejamento de processos de peen forming baseado em modelos analíticos do jato de granalhas e do campo de tensões residuais induzidas na peça**. Universidade de São Paulo, 2016.
42. LESZCZYNSKI, J. Handbook of Computational Chemistry. , p. 1430, 2012.
43. MADRID, M. A.; PUGNALONI, L. A. Velocity profiles in forced silo discharges. **Granular Matter**, v. 21, n. 3, 2019.
44. MAMTANI, K. Effect of Particle Shape on Hopper Discharge Rate. , 2011.
45. MASHIBA, R. **Estudo do comportamento do fluxo granular em linhas de pressão para Shot Peening**. Universidade de São Paulo, 2019.
46. MEHTA, A.; EDWARDS, S. F. Statistical mechanics of powder mixtures. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 157, n. 3, p. 1091–1100, 1989.
47. MINDLIN, R. D. Compliance of elastic bodies in contact. **J. Appl. Mech., ASME**, v. 16, p. 259–268, 1949.

48. MINDLIN, RAYMOND D. A mathematical theory of photo-viscoelasticity. **Journal of Applied Physics**, v. 20, n. 2, p. 206–216, 1949.
49. NANNINGA, N. Gibt die tribische Berechtigungsart der Drtlcke auf die Wände und den Boden von Silobauten sichere Ergebnisse? **Der Ingenieur**, v. 68, 1956.
50. NASH, W.; POTTER, M. C. **Schaum's Outlines: Strength of Materials 5th Edition**. New York: McGraw-Hill, 2011.
51. NEDDERMAN, R. M. **Statics and kinematics of granular materials**. Cambridge University Press, 2005.
52. NEDDERMAN, R. M.; TÜZÜN, U. A kinematic model for the flow of granular materials. **Powder Technology**, v. 22, n. 2, p. 243–253, 1979.
53. NEDDERMAN, R. M.; TÜZÜN, U.; SAVAGE, S. B.; HOULSBY, G. T. The flow of granular materials-I. Discharge rates from hoppers. **Chemical Engineering Science**, v. 37, n. 11, p. 1597–1609, 1982.
54. NEUMAN, S. P. Theoretical derivation of Darcy's law. **Acta Mechanica**, v. 25, n. 3–4, p. 153–170, 1977.
55. VON NEUMANN, J. The general and logical theory of automata. **1951**, p. 1–41, 1951.
56. NICOLAS, A.; GARCIMARTÍN, Á.; ZURIGUEL, I. Trap Model for Clogging and Unclogging in Granular Hopper Flows. **Physical Review Letters**, v. 120, n. 19, p. 198002, 2018.
57. NIELSEN, J. Pressures from flowing granular solids in silos. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 356, n. 1747, p. 2667–2684, 1998.

58. OOI, J. Y.; ROTTER, J. M. Elastic predictions of pressures in conical silo hoppers. **Engineering Structures**, v. 13, n. 1, p. 2–12, 1991. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/014102969190002T>>. Acesso em: 19/4/2018.

59. POLDERMAN, H. G.; BOOM, J.; DE HILSTER, E.; SCOTT, A. M. Solids flow velocity profiles in mass flow hoppers. **Chemical Engineering Science**, v. 42, n. 4, p. 737–744, 1987.

60. POPOV, V. L. **Erratum To: Rigorous Treatment of Contact Problems – Hertzian Contact**. 2010.

61. POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S. Computer simulation of hopper flow. **Physics of Fluids**, v. 8, n. 11, p. 2884–2894, 1996.

62. RISTOW, G. H.; HERRMANN, H. J. Forces on the walls and stagnation zones in a hopper filled with granular material. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 213, n. 4, p. 474–481, 1995.

63. RISTOW, G.; RISTOW, G.; PHYSIQUE, J. DE. Simulating granular flow with molecular dynamics, 1992.

64. ROSE, H. E.; TANAKA, T. Rate of discharge of granular materials from bins and hoppers. **The Engineer**, v. 208, p. 465–469, 1959.

65. SALEH, K.; GOLSHAN, S.; ZARGHAMI, R. A review on gravity flow of free-flowing granular solids in silos – Basics and practical aspects. **Chemical Engineering Science**, v. 192, p. 1011–1035, 2018.

66. SCHWABL, F.; BREWER, W. D. **Statistical Mechanics**. Springer Berlin Heidelberg, 2006.

67. SPERL, M. Experiments on corn pressure in silo cells - Translation and comment of Janssen's paper from 1895. **Granular Matter**, v. 8, n. 2, p. 59–65, 2006.
68. TEJCHMAN, J. **Confined granular flow in silos: Experimental and numerical investigations**. 1st ed ed. New York: Springer, 2013a.
69. THOMAS, C. C.; DURIAN, D. J. Intermittency and velocity fluctuations in hopper flows prone to clogging. **Physical Review E**, v. 94, n. 2, p. 1–11, 2016.
70. TIAN, Y.; ZHANG, S.; LIN, P.; et al. Implementing discrete element method for large-scale simulation of particles on multiple GPUs. **Computers and Chemical Engineering**, v. 104, p. 231–240, 2017.
71. TOSON, P.; KHINAST, J. G. Impulse-based dynamics for studying quasi-static granular flows: Application to hopper emptying of non-spherical particles. **Powder Technology**, v. 313, p. 353–360, 2017.
72. TUCKERMAN, M. **Statistical mechanics: theory and molecular simulation**. Oxford university press, 2010.
73. TUPY, G. Granalhas tupy. , , n. 47.
74. VERLET, L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. **Physical Review**, v. 159, n. 1, p. 98–103, 1967.
75. WALKER, D. M. An approximate theory for pressures and arching in hoppers. **Chemical Engineering Science**, v. 21, n. 11, p. 975–997, 1966.
76. WALTERS, J. K. A theoretical analysis of stresses in axially-symmetric hoppers and bunkers. **Chemical Engineering Science**, v. 28, n. 3, p. 779–789, 1973.

77. WU, A.; SUN, Y.; LIU, X. **Granular dynamic theory and its applications**. Beijing : Berlin ; New York: Metallurgical Industry Press ; Springer, 2008.
78. XIAO, H.; FAN, Y.; JACOB, K. V.; et al. Continuum modeling of granular segregation during hopper discharge. **Chemical Engineering Science**, v. 193, p. 188–204, 2019.
79. ZHANG, H. P.; MAKSE, H. A. **Jamming transition in emulsions and granular materials**. 2005.

Anexo A: O círculo de Mohr

A transformação do estado plano de tensões, num elemento infinitesimal que sofreu uma rotação de um ângulo θ em relação ao eixo z . Para determinar a tensão normal $\sigma_{x'}$ e a tensão de cisalhamento $\tau_{x'y'}$ que atuam na face perpendicular ao eixo x' , consideramos um elemento prismático com faces respectivamente perpendiculares aos eixos x , y e x' . A Figura A1 mostra a geometria do elemento prismático, enquanto a Figura A1b aponta as forças que agem nas superfícies do sólido.

Figura A1. Transformação do estado plano de tensões

Fonte: Beer et al. (2011).

onde:

ΔA – área do plano inclinado

θ – ângulo formado entre o eixo x e o eixo x'

σ_x – Tensão normal na direção x

σ_y – Tensão normal na direção y

$\sigma_{x'}$ – Tensão normal na direção x'

τ_{xy} – Tensão cisalhante no eixo xy

$\tau_{x'y'}$ – Tensão cisalhante no eixo $x'y'$

As eqs. A1 e A2 mostram o equilíbrio de forças nas direções x' e y' .

$$\Sigma F_{x'} = 0 \rightarrow \sigma_{x'} \Delta A - \sigma_x (\Delta A \cos \theta) \cos \theta - \tau_{xy} (\Delta A \cos \theta) \sin \theta - \sigma_y (\Delta A \sin \theta) \sin \theta - \tau_{xy} (\Delta A \sin \theta) \cos \theta = 0 \quad (A1)$$

$$\Sigma F_{y'} = 0 \rightarrow \tau_{x'y'} \Delta A + \sigma_x (\Delta A \cos \theta) \sin \theta - \tau_{xy} (\Delta A \cos \theta) \cos \theta - \sigma_y (\Delta A \sin \theta) \cos \theta + \tau_{xy} (\Delta A \sin \theta) \sin \theta = 0 \quad (A2)$$

Isolando $\sigma_{x'}$ e $\tau_{x'y'}$, obtemos as equações A3 e A4.

$$\sigma_{x'} = \sigma_x \cos^2 \theta + 2\tau_{xy} \cos \theta \sin \theta + \sigma_y \sin^2 \theta \quad (A3)$$

$$\tau_{x'y'} = \tau_{xy} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) - (\sigma_x - \sigma_y) \sin \theta \cos \theta \quad (A4)$$

Tendo em vista as identidades trigonométricas apresentadas nas Equações A5 a A7,

$$\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta \quad (A5)$$

$$\cos 2\theta = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta \quad (A6)$$

$$\cos^2 \theta = \frac{1 + \cos 2\theta}{2} \quad (A7)$$

$$\sin^2 \theta = \frac{1 - \cos 2\theta}{2} \quad (A7)$$

A Equação A3 pode ser escrita como:

$$\sigma_{x'} = \sigma_x \frac{1 + \cos 2\theta}{2} + \tau_{xy} \sin 2\theta + \sigma_y \frac{1 - \cos 2\theta}{2} \quad (A8)$$

$$\sigma_{x'} = \sigma_x \frac{1 + \cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{2} + \tau_{xy} \sin 2\theta - \sigma_y \frac{-1 + \cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{2} \quad (A9)$$

$$\sigma_{x'} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} + \tau_{xy} \sin 2\theta + \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{2} \quad (A10)$$

$$\sigma_{x'} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} + \tau_{xy} \sin 2\theta + \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos 2\theta \quad (A11)$$

Desenvolvendo a equação A4:

$$\tau_{x'y'} = \tau_{xy} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) - (\sigma_x - \sigma_y) \sin \theta \cos \theta \quad (A12)$$

$$\tau_{x'y'} = \tau_{xy} \left(\frac{1 + \cos 2\theta}{2} - \frac{1 - \cos 2\theta}{2} \right) - \frac{(\sigma_x - \sigma_y) \sin 2\theta}{2} \quad (A13)$$

$$\tau_{x'y'} = \tau_{xy} \cos 2\theta - \frac{(\sigma_x - \sigma_y)}{2} \sin 2\theta \quad (A14)$$

Como o ângulo formado entre y' e x é igual a $\theta + 90^\circ$, a equação A11 se torna:

$$\sigma_{y'} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} + \tau_{xy} \sin(2\theta + 180) + \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos(2\theta + 180) \quad (A15)$$

A partir das igualdades apresentadas nas Equações A16 e A17, a Equação A15 pode ser reescrita como apresentado na Equação 18

$$\cos(2\theta + 180) = -\cos 2\theta \quad (\text{A16})$$

$$\text{sen}(2\theta + 180) = -\text{sen}2\theta \quad (\text{A17})$$

$$\sigma_{y'} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} - \tau_{xy} \text{sen}2\theta - \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos 2\theta \quad (\text{A18})$$

Assim, somando as equações A16 e A18 é possível notar a igualdade apresentada na Equação A19.

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{x'} &= \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} + \cancel{\tau_{xy} \text{sen}2\theta} + \cancel{\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos 2\theta} \\ \sigma_{y'} &= \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} - \cancel{\tau_{xy} \text{sen}2\theta} - \cancel{\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos 2\theta} \end{aligned} \right\} \sigma_{x'} + \sigma_{y'} = \sigma_x + \sigma_y \quad (\text{A19})$$

Pode ser matematicamente provado que é válida a Equação A20.

$$\begin{aligned} &\tau_{xy}^2 [1 - \cos^2 2\theta] + 2\tau_{xy} \frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \cos^2 2\theta + \\ &+ \frac{(\sigma_x - \sigma_y)^2}{4} (\cos^2 2\theta)^2 = \left(\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2} \right)^2 + \tau_{xy}^2 \end{aligned} \quad (\text{A20})$$

Assim, elevando-se a Equação A11 e a Eq. A18 ao quadrado, e somando, obtém-se:

$$\left(\frac{\sigma_x - \sigma_y}{2}\right)^2 + \tau_{xy}^2 = \left(\sigma_{x'} - \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2}\right)^2 + \tau_{x'y'}^2 \quad (\text{A21})$$

Definindo a tensão normal média σ_m e o raio R (eqs. A22 e A23)

$$\sigma_{med} = \frac{(\sigma_x + \sigma_y)}{2} \quad (\text{A22})$$

$$R = \sqrt{\left(\frac{(\sigma_x - \sigma_y)}{2}\right)^2 + \tau_{xy}^2} \quad (\text{A23})$$

Podemos então reescrever a Equação A21.

$$(\sigma_{x'} - \sigma_{med})^2 + \tau_{x'y'}^2 = R^2 \quad (\text{A24})$$

A Equação A25 representa uma circunferência de raio R e centro localizado em (a, b).

$$R^2 = (x - a)^2 + (y - b)^2 \quad (\text{A25})$$

Podemos então notar que a Equação A24 representa a circunferência ilustrada na Figura A2.

Figura A2. Círculo de Mohr para o estado plano de tensão

Fonte: Beer et al. (2011).

Anexo B: Código LAMMPS utilizado nas simulações

```
#experimento 0000 deltap 0 D 0,020 alpha 20 d 0,00330, 34.500 part
```

```
package omp 4
```

```
variable name string funnel_pour
```

```
units si
```

```
variable PI equal 3.141592653589
```

```
variable seed equal 14314
```

```
#####
```

```
# Parâmetros Geométricos
```

```
#####
```

```
variable xlo equal 0.0
```

```
variable xhi equal 0.20
```

```
variable ylo equal 0.0
```

```
variable yhi equal 0.20
```

```
variable zlo equal -0.10
```

```
variable zhi equal 0.50
```

```
variable xc equal 0.1
```

```
variable yc equal 0.1
```

```
variable zconehi equal 0.27
```

```
variable zconelo equal 0.0
```

```
variable radconelo equal 0.01
```

```
variable radconehi equal 0.1
```

```
#####
```


Tamanho da Partículas

#####

variable rlo equal 0.0014

variable rhi equal 0.0014

variable dlo equal $2.0 * \{rlo\}$

variable dhi equal $2.0 * \{rhi\}$

variable skin equal $\{rhi\}$

#####

Parâmetros do contato granular

#####

variable coeffRes equal 0.47

variable coeffFric equal 0.5

variable density equal 8050

variable EYoung equal $200 * 10^6$

variable Poisson equal 0.28

variable GShear equal $\{EYoung\} / (2 * (1 + \{Poisson\}))$

variable gravity equal 9.8

variable reff equal $0.5 * (\{rhi\} + \{rlo\})$

variable meff equal $\{density\} * 4.0 / 3.0 * \{PI\} * \{reff\}^3$

variable min_mass equal $\{density\} * 4.0 / 3.0 * \{PI\} * \{rlo\} * \{rlo\} * \{rlo\}$

variable max_mass equal $\{density\} * 4.0 / 3.0 * \{PI\} * \{rhi\} * \{rhi\} * \{rhi\}$

variable kn equal $4.0 * \{GShear\} / (3 * (1 - \{Poisson\}))$

variable kt equal $4.0 * \{GShear\} / (2 - \{Poisson\})$

```

variable      a equal  $(-2.0 * \log(\{\text{coeffRes}\}) / \{\text{PI}\})^2$ 
variable      gamma_n equal  $\sqrt{\$a * 2 * \{\text{kn}\} / \{\text{min\_mass}\} / (1 + 0.25 * \$a)}$ 
variable      gamma_t equal  $\{\text{gamma\_n}\} * 0.5$ 

variable      tcol equal  $\{\text{PI}\} / \sqrt{2 * \{\text{kn}\} / \{\text{min\_mass}\} - \{\text{gamma\_n}\} / 4.0}$ 

variable      dtideal equal  $\{\text{tcol}\} * 0.5$ 
timestep       $\{\text{dtideal}\}$ 

#####Parâmetros da Simulação#####

variable      dumpfreq equal 1000
variable      logfreq equal 200

newton        off
atom_style     sphere

boundary       p p p

#Definindo o tamanho da caixa de simulação
region         boxreg block  $\{\text{xlo}\} \{\text{xhi}\} \{\text{ylo}\} \{\text{yhi}\} \{\text{zlo}\} \{\text{zhi}\}$ 
create_box 1 boxreg

#Determina o modelo de contato entre as partículas e seus parâmetros
pair_style     gran/hertz/history/omp &
                $\{\text{kn}\} \{\text{kt}\} \{\text{gamma\_n}\} \{\text{gamma\_t}\} \{\text{coeffFric}\} 1$ 
pair_coeff     * *

neighbor        $\{\text{skin}\}$  bin
thermo          $\{\text{logfreq}\}$ 

comm_style     brick
comm_modify    mode multi group all vel yes

```

```
##### Abastecimento #####
#Cria a região onde serão inseridas as partículas durante o abastecimento inicial
region      entrada cylinder z ${xc} ${radconehi} 0.1 0.40 0.45 side in units box &
            open 1

#Cria a região cilíndrica superior do reservatório
region      cilindrica cylinder z ${xc} ${yc} ${radconehi} &
            ${zconehi} ${zhi} side in units box &
            open 1 open 2

#Cria a parte convergente do reservatório
region      conica cone z ${xc} ${yc} ${radconelo} ${radconehi} &
            ${zconelo} ${zconehi} side in units box &
            open 2

#Une as seções do reservatório
region      transicao union 2 cilindrica conica

#Estabelece a direção da gravidade
fix         grav all gravity ${gravity} vector 0 0 -1

#Determina o ensemble estatístico utilizado
fix         1 all nve/sphere

#Determina o modelo de contato entre as partículas e as paredes, e suas propriedades,
para cada região
fix         cilindrica all wall/gran/region hertz/history &
            ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region cilindrica

fix         entrada all wall/gran/region hertz/history &
            ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region entrada
```

```
fix      transicao all wall/gran/region hertz/history &
        ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region transicao
```

```
fix      conica all wall/gran/region hertz/history &
        ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region conica
```

#Insere as partículas na região definida

```
fix      ins all pour 34500 1 42424 region entrada &
        diam range ${dlo} ${dhi} dens ${density} ${density}
```

```
thermo_style custom step atoms ke
```

```
thermo_modify flush yes lost warn
```

```
run      500000
```

#####Tempo de espera, sem inserção de novas partículas

```
unfix    ins
```

```
unfix    entrada
```

```
run      200000
```

Esvaziamento

#As regiões devem ser apagadas e redefinidas, para que possa ocorrer a abertura da saída do reservatório. A região de entrada não é mais necessária, e não será redefinida.

```
unfix    conica
```

```
unfix    transicao
```

```
region   conica delete
```

```
region   transicao delete
```

```
region   entrada delete
```

```
region      conica cone z ${xc} ${yc} ${radconelo} ${radconehi} &
            ${zconelo} ${zconehi} side in units box open 1 open 2
```

```
region      transicao union 2 cilindrica conica
```

#Reestabelece o modelo de contato entre as partículas e as paredes de cada região

```
fix      conica all wall/gran/region hertz/history &
            ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region conica
```

```
fix      transicao all wall/gran/region hertz/history &
            ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region transicao
```

```
run      500000
```

#Após a estabilização da energia do sistema, os resultados obtidos são salvos como arquivo de texto, imagens e vídeo.

```
dump      1 all atom 1000 dump0000.txt
```

```
dump      2 all image 1000 serie2.*.jpg type type &
            axes yes 0.8 0.02 view 60 -30 zoom 1.0 adiam 0.0033 &
            box no 0.0 axes no 0.0 0.0
```

```
dump      3 all movie 500 movieserie.mpg type type &
            zoom 1.6 adiam 0.0033
```

```
dump_modify 2 pad 6
```

```
run      200000
```

Anexo C: Código Matlab para pós processamento

```

T = 1; % Initialize Time index
x = zeros(201,34500);
y = zeros(201,34500);
z = zeros(201,34500);
n = zeros(201);

clc();
strArqEnt = sprintf('dump0000.txt');
fid = fopen(strArqEnt,'r');

for k=1:201
    sprintf('T=%d\n',T);
    for j=1:9
        InputText=textscan(fid,'%s',1,'delimiter','\n'); % Read strings delimited by a carriage
    return
        Intro=InputText{1};
        disp(Intro);
    end
    for i=1:34500
        [a,count]= fscanf(fid,'%d %d %f %f %f\n',[1,5]);
        s=sprintf('T=%d ind(%d,1)=%d x(%d,1) = %f y(%d,1) = %f z(%d,1) = %f\n',T,i,a(1,1),i,a(1,3),i,a(1,4),i,a(1,5));
        ind = a(1);
        X = a(3);
        Y = a(4);
        Z = a(5);
        x(k,ind) = X;
        y(k,ind) = Y;
    end
end

```

```

z(k,ind) = Z;
s=sprintf('T=%d  x(%d,%d) = %f  y(%d,%d) = %f  z(%d,%d) = %f\n',T,k,ind,x(k,ind),k,ind,y(k,ind),k,ind,z(k,ind));
disp(s);
end
if (k>1)
n(k-1)=0;
for i=1:34500
    if ((z(k-1,i)<0.25) & (z(k-1,i)>0) & z(k,i)<1 & z(k,i)> 0.75)
        n(k-1) = n(k-1)+1;
    end
end
disp(n(k-1));
end

s=sprintf('\n');
T=T+1;
end
dt = 8.8826192912073e-07*1000;
strArqSai= sprintf('C:\\Matriz\\fluxo0000.txt');
fs= fopen(strArqSai,'w');
for i=1:200
    vazao(i)=n(i)/dt;
    fprintf(fs,'t=%f vazao=%f\n',dt*i,vazao(i));
end
fclose(fs);
fclose(fid);

```