



Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional

SIMULAÇÃO DE MATERIAIS GRANULARES APLICADA A TRANSPORTADORES DE CORREIA

ABRAÃO MARQUES TAVARES

Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

BELO HORIZONTE

JULHO DE 2018

ABRAÃO MARQUES TAVARES

SIMULAÇÃO DE MATERIAIS GRANULARES APLICADA A
TRANSPORTADORES DE CORREIA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de Pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E
COMPUTACIONAL

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS

BELO HORIZONTE

JULHO DE 2018



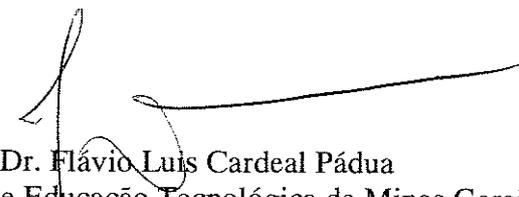
SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

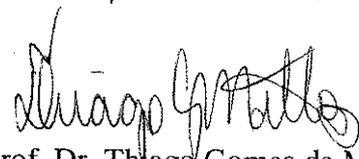
“SIMULAÇÃO DE MATERIAIS GRANULARES APLICADA A EQUIPAMENTOS INDUSTRIAIS”

Dissertação de Mestrado apresentada por **Abraão Marques Tavares**, em 24 de fevereiro de 2017, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

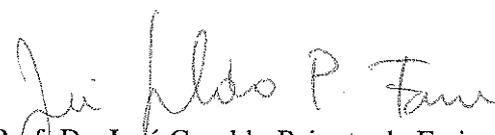

Prof. Dr. Albens Atman Picardi Faria (Orientador)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Caio Franca Meselim Magalhães
Universidade Federal de Itajubá


Prof. Dr. Flávio Luis Cardeal Pádua
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Thiago Gomes de Mattos
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida a impressão,


Prof. Dr. José Geraldo Peixoto de Faria
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional

T231s Tavares, Abraão Marques
Simulação de materiais granulares aplicada a transportadores de
correia. / Abraão Marques Tavares. -- Belo Horizonte, 2018.
viii, 45 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação
Tecnológica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional, 2017.

Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria

Bibliografia

1. Materiais Granulares. 2. Dinâmica Molecular. 3. Correias
Transportadoras. I. Faria, Allbens Atman Picardi. II. Centro Federal
de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título

CDD 519.6

Agradecimentos

Ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG e todos os seus integrantes, professores e funcionários, por terem me escolhido como aluno e por todo o apoio neste percurso.

Ao colega Gustavo Martins, pela grande prestatividade nos momentos de dúvida.

A Koch do Brasil, na figura do Srs. Ernani Neiva e Luiz Medeiros, pela apoio e incentivo.

A Jenike & Johanson e Koch do Brasil pelas imagens utilizadas nesta dissertação e a Rocky DEM Inc. pelo software Rocky[®].

E, em especial, ao meu orientador Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria, por todos os ensinamentos, paciência, compreensão, disponibilidade e profissionalismo.

Resumo

Nesta dissertação, tratamos do desenvolvimento de simulações para o estudo do comportamento de materiais granulares em situações típicas da indústria. Estudamos o transporte via transportadores de correia, uma importante etapa nos processos da indústria de mineração e manuseio de matérias primas. Desse modo, nos focamos em um fenômeno de aumento de velocidade de grãos no ponto de descarga de transportadores, que em nosso conhecimento é inédito na literatura. Para tal, desenvolvemos um sistema de simulação que utiliza a técnica da Dinâmica Molecular e realizamos uma série de simulações com o intuito de investigar fatores que influenciam o supracitado fenômeno, tais como altura da camada de material, inclinação da correia e distribuição granulométrica. A partir dos resultados de nosso sistema e de outro previamente utilizado, formulamos hipóteses sobre os mecanismos físico subjacentes ao comportamento observado.

Abstract

In this master thesis we address the development of simulations to investigate the behavior of granular materials in typical situations of the industry. We study the transport by belt conveyor, an important phase of the processes of mining industry and handling of raw materials. On this subject, we focus on the phenomenon of the increase of horizontal velocity of particles on a conveyor discharge point, which is unheard-of in literature. For that purpose, we have developed a simulation system that uses the Molecular Dynamics technique and make a number of simulations with the aim of investigating the factors of influence on aforementioned phenomenon, such as material layer height, belt angle and grain size distribution. From the results of our system and another previously used, we formulate hypotheses about the physical mechanism underlying the observed behavior.

Lista de Figuras

Figura 1 – Ângulo de repouso:	4
Figura 2 – Avalanche em uma pilha	4
Figura 3 – Cadeias de força em uma pilha	5
Figura 4 – Esquema básico de um transportador de correia	7
Figura 5 – Exemplos de transportadores de correia	7
Figura 6 – Experimento de transporte de grãos por uma abertura	8
Figura 7 – Simulação de um chute de descarga	9
Figura 8 – Ponto de início da trajetória do material	10
Figura 9 – Trajetória experimental de material	11
Figura 10 – Efeito de aumento de V_x observado em simulações 3D	12
Figura 11 – Fotografia que sugere a ocorrência do fenômeno na realidade.	13
Figura 12 – Diagrama geral do transportador simulado e volume de controle	14
Figura 13 – Gráfico de V_x média ao longo do tempo.	16
Figura 14 – Diagrama esquemático do modelo das forças	19
Figura 15 – Construção da lista de vizinhos	23
Figura 16 – Distância de interpenetração em objetos	24
Figura 17 – Representação visual do método de predição-correção	26
Figura 18 – Esquema do transportador de correia simulado	27
Figura 19 – Consideração da velocidade da correia	28
Figura 20 – Tela de pós processamento de uma simulação	31
Figura 21 – Visualização de um frame de uma simulação	32
Figura 22 – Visualização de V_x no sistema base	33
Figura 23 – V_x máximo, mínimo e médio para os grãos dentro das regiões de interesse	35
Figura 24 – Análise das regiões de interesse no sistema polidisperso	36
Figura 25 – Transportador inclinado a $+5^\circ$	37
Figura 26 – Transportador inclinado a -5°	37
Figura 27 – Resultados para a correia inclinada.	38
Figura 28 – Influência da altura da camada de material	39
Figura 29 – Alívio da pressão de confinamento	40
Figura 30 – Conservação do momento angular	41

Sumário

1 – Introdução	1
1.1 Organização da dissertação	2
2 – Materiais Granulares	3
2.1 Ângulo de repouso e avalanches	3
2.2 Cadeias de força	4
3 – Transportadores de correia	6
3.1 Ponto de descarga	8
4 – Fenômeno do aumento de velocidade horizontal	12
4.1 Investigação inicial	13
4.2 Resultados da análise	15
5 – Dinâmica Molecular	18
5.1 Visão geral	18
5.2 Modelo de forças	18
5.3 As equações de movimento	19
5.4 Algoritmo	21
5.5 Construção da lista de vizinhos	22
5.6 Detecção de contatos	23
5.7 Cálculo de forças	25
5.8 Corretor	25
5.9 Condições de contorno e vida das partículas	25
6 – Simulando transportadores	27
6.1 Coleta e tratamento de dados	30
7 – Análise e Discussão dos Resultados	32
7.1 Visualização de velocidades	32
7.2 Análise das regiões de interesse	33
7.3 Influência de parâmetros	34
7.4 Hipóteses para a ocorrência do fenômeno	38
7.4.1 Alívio na pressão de confinamento	40
7.4.2 Conservação de momento angular	41
8 – Conclusão e perspectivas	42

Referências 44

1 Introdução

Os materiais granulares ocupam um lugar de destaque em nossa sociedade com uma quase onipresença nas ciências e indústrias humanas. O solo que recobre todo o planeta, os grãos na agricultura, polímeros granulados na indústria de plásticos e partículas de gelo nos anéis de Saturno [1] são exemplos que exemplificam a presença deste tipo de material nos mais variados campos do conhecimento humano.

Apesar de toda esta importância, mecanismos básicos subjacentes a vários fenômenos comuns destes materiais ainda são desconhecidos [1]. Uma forma de estudo de materiais granulares muito utilizada e que ganhou força com a evolução da computação nas últimas décadas é a simulação numérica. A simulação de materiais granulares, assim como em outras áreas, diminui drasticamente o custo de desenvolvimento de equipamentos e experimentações, permite obter resultados e realizar medições de propriedades dos sistemas e de partículas individuais que seriam impossíveis de serem obtidas em sistemas reais, seja devido ao custo elevado, ao longo tempo requerido ou simplesmente à falta de tecnologia para tal.

Também presente em praticamente todas as indústrias que manipulam matérias primas [2] está um equipamento responsável pelo transporte eficiente de materiais granulares, o transportador de correia. Com tamanhos que variam de alguns poucos metros a dezenas de quilômetros de comprimento e capacidade de até dezenas de milhares de toneladas por hora os transportadores de correia são a forma mais eficiente de transporte contínuo em minas, quando comparado com as alternativa de transporte por caminhão, devido ao seu baixo custo por tonelada transportada [3]. Por sua ampla utilização, funcionamento contínuo 24 horas por dia e 7 dias por semana e grandes extensões, o estudo dos fenômenos que envolvem este tipo de equipamento são extremamente relevantes tanto do ponto de vista operacional quanto econômico.

Este trabalho explora um método de simulação numérica de materiais granulares, conhecido como dinâmica molecular [4], focando-se no uso deste método para a simulação de transportadores de correia. Esta mesma técnica é utilizada em softwares comerciais dedicados à simulações 3D de materiais granulares mundialmente utilizados, tais como Newton[®] [5] e Rocky[®] [6]

Teremos como foco desta dissertação a construção de um sistema de simulação 2D de transportadores para a análise do fenômeno de aumento espontâneo na componente horizontal de partículas na saída de transportadores de correia, equipamento muito comum no transporte de materiais granulares. Este efeito é inédito na literatura e foi observado

pelo autor durante simulações em um software comercial 3D e resultados de estudos iniciais a respeito do fenômeno são descritos no trabalho [7]. O efeito observado inicialmente foi reproduzido em nossas simulações utilizando o nosso código de dinâmica molecular customizado, baseado em um código previamente desenvolvido por Atman et al [8] e [9].

1.1 Organização da dissertação

Este trabalho se organiza da seguinte forma: No capítulo 2 são apresentadas a definição, importância e particularidades no comportamento dos materiais granulares. Em seguida, faremos uma introdução dos conceitos e trabalhos relacionados a transportadores de correia no capítulo 3, focando no ponto de descarga (seção 3.1), que será assunto de investigação nesta dissertação. Neste ponto do transportador ocorre o fenômeno do aumento de velocidade horizontal dos grãos, que é contextualizado no capítulo 4.

Com estes assuntos devidamente apresentados, passaremos para o método de simulação, conhecido como Dinâmica Molecular, no capítulo 5 e sua aplicação na simulação de um transportador no capítulo 6. Discutiremos nossos resultados e hipóteses no capítulo 7. Terminaremos com nossas conclusões e propostas para o futuro no capítulo 8.

2 Materiais Granulares

Como aponta Jaeger e Nagel em [10], a definição de material granular é simples: um grande aglomerado de partículas discretas e macroscópicas. Se não há coesão entre os grãos, as forças entre eles são puramente repulsivas e a forma geral do material é determinada pelos limites externos e pela gravidade. Se os grãos são secos, qualquer fluido intersticial, tal como o ar, pode ser frequentemente ignorado na determinação de muitas, senão todas, as propriedades estáticas e dinâmicas (de fluxo) do sistema. Apesar desta aparente simplicidade, materiais granulares exibem comportamentos e propriedades bastante particulares e ainda não completamente compreendidos, com autores sugerindo que poderíamos considerá-los como um outro estado da matéria [10].

Sua importância industrial é indiscutível, uma vez que estão nessa categoria de materiais todos os grãos da indústria agrícola, matérias primas extraídas e manipuladas pela mineração, pós produzidos e manipulados na indústria farmacêutica e os solos na geologia, dentre outros [1] [11]. A tecnologia envolvida no tratamento destes materiais envolve diversos tipos de processos tais como extração, separação, moagem e peneiramento, sendo que o processamento destes materiais envolve em torno de 10% de toda a energia produzida no planeta [1].

A seguir serão explicados alguns dos fenômenos típicos de sistemas granulares mais importantes e conhecidos até o momento.

2.1 Ângulo de repouso e avalanches

Uma das características mais importantes dos materiais granulares é sua capacidade de apresentar comportamentos dos estados sólido, líquido e gasoso de forma totalmente independente da temperatura [10]. O fenômeno da avalanche sobre um pilha é um exemplo claro desta propriedade. Quando uma pilha de granulados é formado, ela se estabiliza de forma natural em um certo ângulo θ_r , chamado ângulo de repouso (ver Figura 1). Todas as pilhas formadas por um mesmo material se estabilizarão neste mesmo ângulo. Sabe-se que este ângulo de repouso está diretamente ligado ao atrito entre partículas, inclusive com a relação conhecida mostrada na equação 1.

$$\mu_s \approx \tan \theta_r \tag{1}$$

onde μ_s é o coeficiente de atrito estático.

A medida que novos grãos são depositados sobre a pilha, o conjunto de grãos permanece perfeitamente estável, tal qual um sólido, até que o ângulo da pilha atinja um limite θ_{max} . Quando este limite é atingido, ocorre uma avalanche e os grãos mais superficiais fluem pilha abaixo tal qual um fluido, enquanto grãos mais profundos permanecem parados e não participam do movimento.

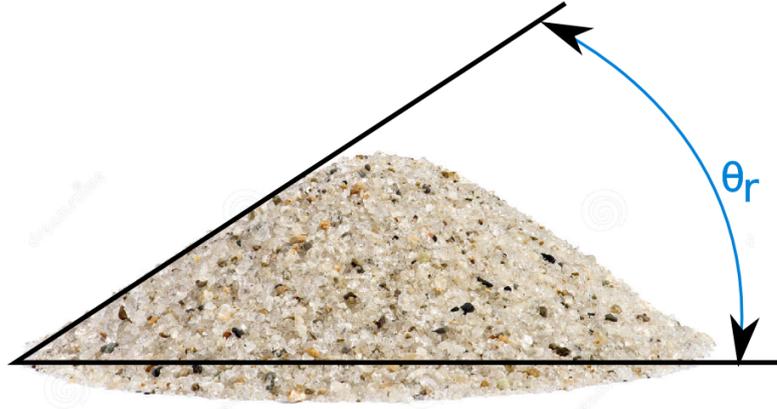


Figura 1 – Ângulo de repouso: Todo material granular possui um ângulo típico θ_r , chamado ângulo de repouso, no qual sua pilha se estabilizará. Imagem editada a partir da original em [12]

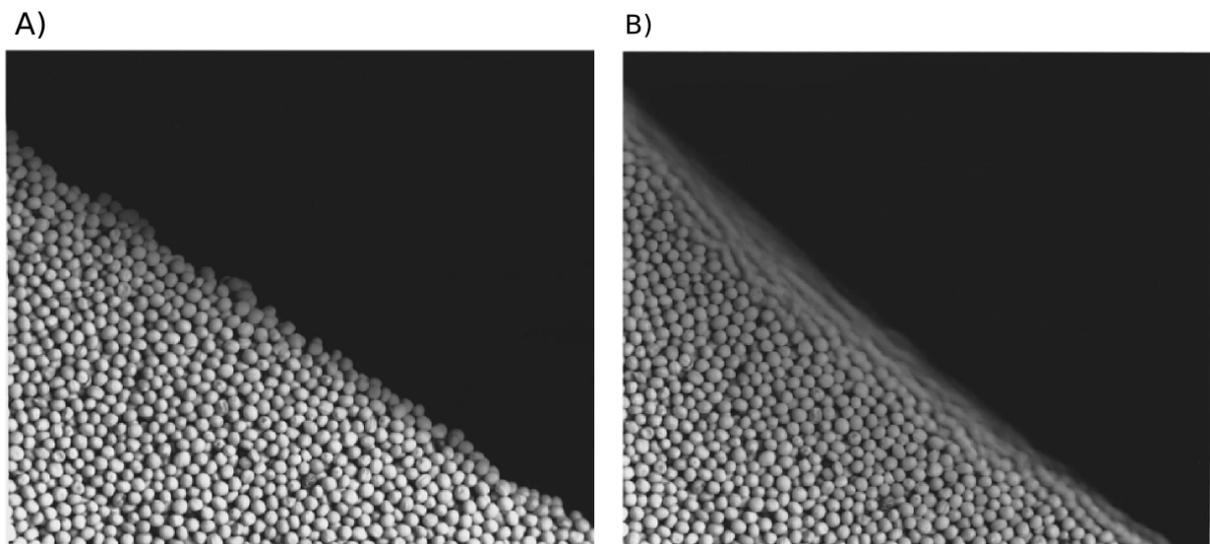


Figura 2 – Avalanche em uma pilha. A) A pilha de grãos de mostarda permanece estática quando em um ângulo menor ou igual ao ângulo de repouso. B) A mesma pilha ao ter seu ângulo aumentado acima do limite θ_{max} cria uma avalanche na qual grãos de camadas superiores fluem rapidamente como um líquido enquanto grãos mais profundos não participam do movimento. Fotos extraídas de [10].

2.2 Cadeias de força

Outra característica importante dos arranjos granulares é a existência de cadeias de força internas. Essas cadeias funcionam direcionando as tensões internas do conjunto através

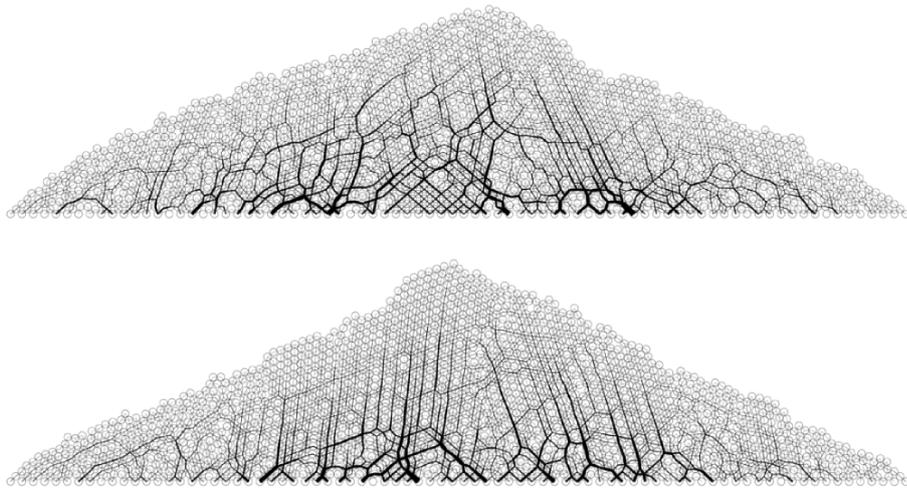


Figura 3 – Cadeias de força em uma pilha. A figura mostra como cadeias de força se propagam em uma pilha através das linhas que conectam os grão em contato. Linhas mais grossas representam uma maior força de contato, por isso temos a impressão que de as cadeias se propagam de baixo para cima, a partir dos grãos sob maior pressão. Configurações de cadeia diferentes se formam se os grãos estão arranjados de forma diferente. Imagens adaptadas de [14].

da rede de contatos entre as partículas.

Isso significa que uma pressão aplicada em um conjunto granular não terá propagação direcional como em um sólido, nem será igualmente distribuída como em um líquido, mas seguirá caminhos internos que mudam de acordo com a configuração de contatos daquele conjunto. O efeito Jansen, no qual o peso exercido no fundo de um silo é menor do que o peso total do material armazenado, tem sua origem nestas cadeias de forças que propagam o peso das camadas superiores de partículas diagonalmente até atingirem as paredes do silo e nunca seu fundo. Trabalhos como, [8], [9], [13] e [14], tratam mais profundamente de propriedades e fenômenos associados às cadeias de força.

3 Transportadores de correia

Transportadores de correia são equipamentos cruciais em diversas indústrias, principalmente nas que trabalham diretamente com a extração e manipulação de matérias primas. Composto basicamente por uma correia tracionada por largas polias (denominadas na indústria de *tambores*), sua aparente simplicidade esconde uma complexa interdisciplinaridade em seu projeto, que envolve disciplinas da engenharia mecânica, estrutural, civil, de controle, e eletro-eletrônica. Mais recentemente soma-se à estas disciplinas a simulação computacional, que atua como uma importante ferramenta de previsão de comportamentos, ainda na fase de projeto, que outrora só eram detectados com o equipamento construído.

A Figura 4 mostra o esquema básico de um típico transportador de correia e seus elementos. Vemos onde ocorre a alimentação de material (*feed chute*) cujo transporte será feito sobre a correia (*belt*) que se movimenta da esquerda para a direita, tracionada por atrito pelo tambor de acionamento (*drive pulley*), este mantido pelo sistema de esticamento vertical por gravidade (*vertical gravity take-up*). Já a Figura 5 mostra dois exemplos de transportadores reais, um pequeno, utilizado normalmente para transporte de caixas ou pequenos objetos dentro de uma a linha de produção *indoor* e em B, um transportador de longa distância com vários quilômetros de extensão. Transportadores deste tamanho são usualmente utilizados no transporte de minerais ou grandes quantidades de grãos.

Existe uma escassa literatura científica sobre o comportamento de materiais sobre transportadores de correia, talvez por se tratar de um equipamento construído por poucas empresas no mundo e não ser facilmente acessível para profissionais fora de algumas profissões específicas, como engenheiros que trabalham diretamente no seu projeto ou manutenção. Ao mesmo tempo, as tecnologias de projeto deste tipo de equipamento são segredos industriais das empresas especializadas. Uma importante fonte de referência para o projeto de transportadores é fornecida pela Conveyor Equipment Manufacturers Association [3] que publica um manual de boas práticas de projeto seguido por toda a indústria.

Especificamente sobre a região do equipamento estudada nesta dissertação, a saída de material do transportador, há uma grande dificuldade de se executar experimentos. Seja pela dificuldade de instalação de equipamentos de medição nesta região ou mesmo pela ausência de uma tecnologia adequada para medição dos parâmetros de interesse. Acreditamos que isso tende a mudar com a popularização dos simuladores de materiais granulares cada vez mais disponíveis para o público industrial e acadêmico.

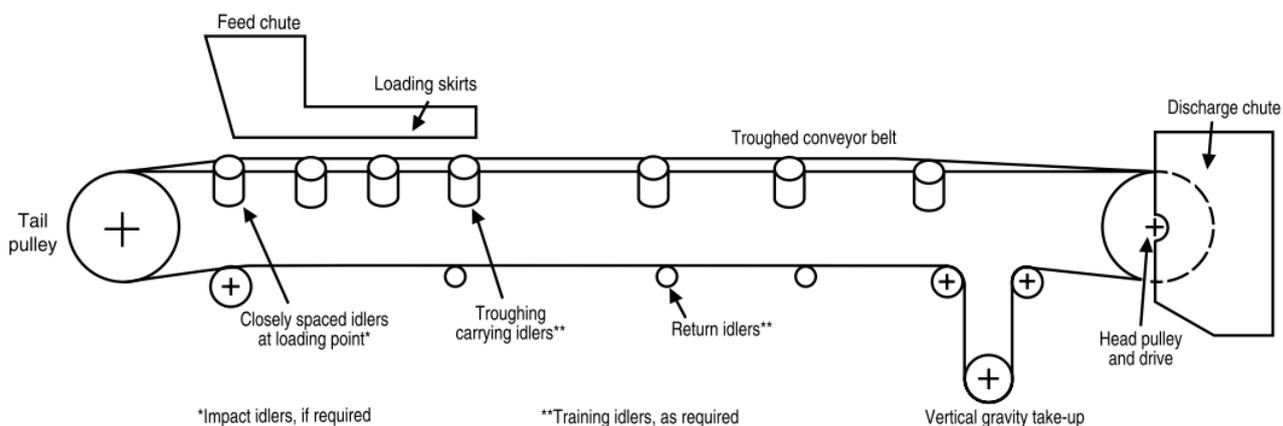


Figura 4 – Esquema básico de um transportador de correia: O material a ser transportado é recebido pelo chute de alimentação (*feed chute*) e impedido de se espalhar na queda pelas guias (*loading skirts*). A correia que transporta o material é sustentada pelos roletes (*idlers*) e seu movimento é dado pelo atrito com o tambor de acionamento (*drive pulley*). O material é lançado do transportador no tambor de cabeça (*head pulley*) e cai livremente dentro do chute de descarga (*discharge chute*). O sistema de esticamento, que neste caso é por gravidade (*vertical gravity take-up*) tem a função de garantir que a correia abrace o tambor de acionamento com força suficiente para que o movimento seja transmitido por atrito e sem escorregamentos. Figura retirada de [3].

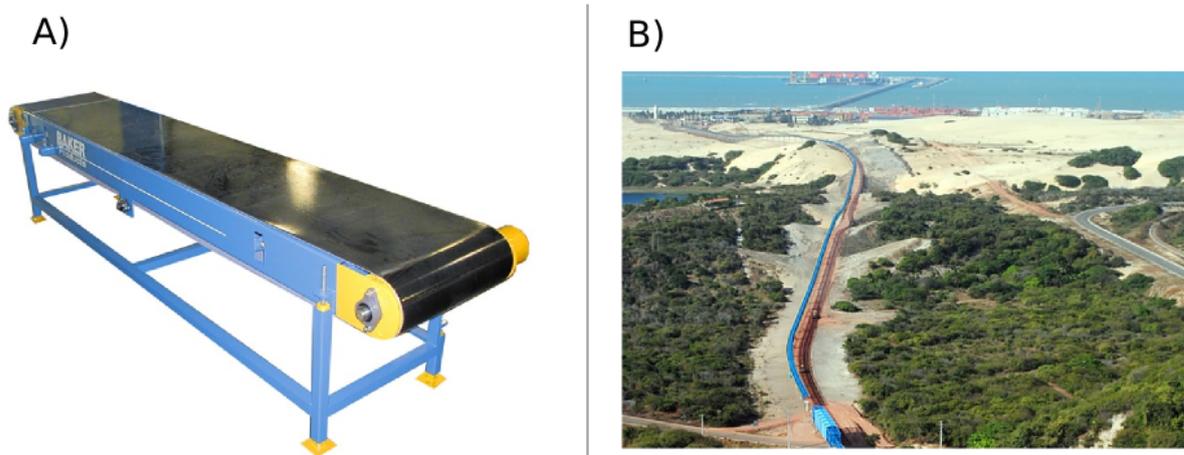


Figura 5 – Exemplos de transportadores de correia: em A, vemos um transportador pequeno, para transporte de caixas ou objetos em pequena quantidade em uma linha de produção; em B, temos um exemplo de transportador de longa distância, com vários quilômetros de extensão atravessando uma área de floresta desmatada até um porto, acompanhando o relevo do terreno. Imagem cedida por Koch do Brasil [15].

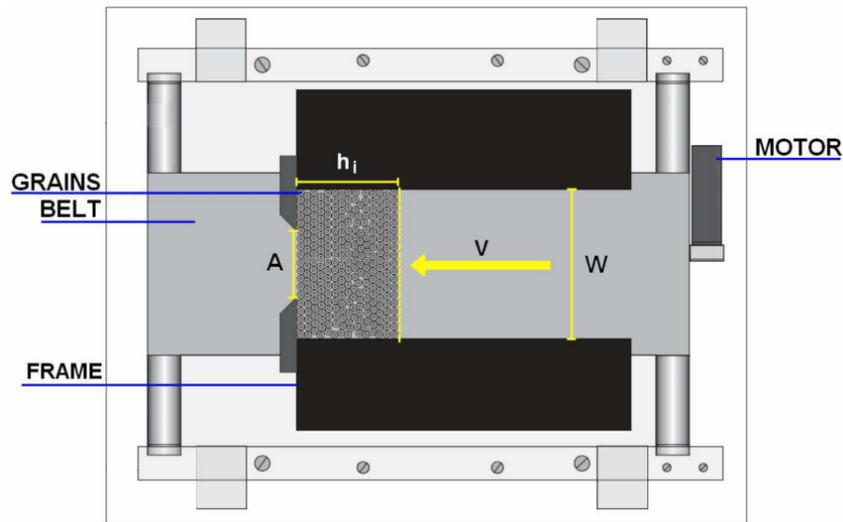


Figura 6 – Experimento de transporte de grãos por uma abertura, (vista superior do equipamento). Um grupo de pequenos discos repousa sobre a correia e são limitados na largura W por paredes laterais. O motor impele uma velocidade V à correia, que leva os grãos até a abertura A . Neste tipo de experimento, o objetivo é estudar o comportamento de um fluxo de grãos forçado pelo atrito da correia através de uma abertura. Imagem retirada de [16].

Algumas pesquisas relacionadas a fluxo de materiais em transportadores tem focado em camadas bidimensionais de material onde todos os grãos estão em contato direto com uma correia, forçando um fluxo de grãos sobre uma saída. Estes estudos raramente contemplam o comportamento de material sobre transportadores em escala industrial. Um exemplo deste tipo de estudo foi feito por Aguirre e Géminard [16] que estudaram o fator de empacotamento em um fluxo forçado de grãos através de uma abertura (Figura 6), uma interessante analogia para o movimento de grãos na saída de um silo. Os autores demonstram como o fator de empacotamento dos grãos muda pela presença da abertura.

A Figura 6 mostra um exemplo deste tipo de experimento/simulação. Nela temos uma vista superior de um pequeno transportador plano que empurra por atrito um grupo de grãos da direita para a esquerda até uma abertura de tamanho A .

3.1 Ponto de descarga

Quando o material granular chega ao fim do transportador, ele é ejetado por inércia e cai sobre uma pilha ou dentro de outro equipamento, usualmente um chute de descarga, que direciona o fluxo para as etapas seguintes do processo. O ponto onde isso ocorre é o ponto de descarga.

O estudo do comportamento do material nesse ponto é importante pois dele depende o projeto dos equipamentos seguintes na linha de produção/transporte. Normalmente este

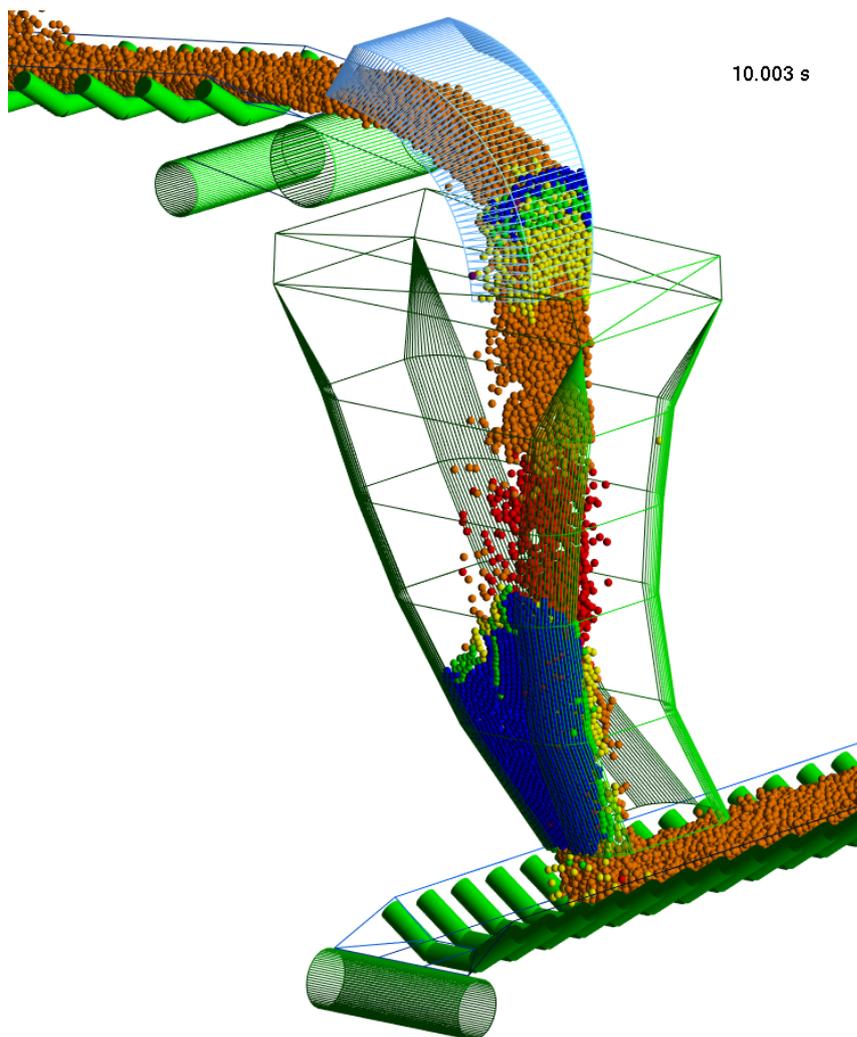


Figura 7 – Simulação 3D de um chute de descarga. Um exemplo do que ocorre em um ponto de descarga, o material sendo transportado chega ao fim de um transportador (canto superior esquerdo) e é lançado para dentro de um chute que recebe e conduz o fluxo de material de forma organizada para um outro transportador, no canto inferior direito. As partículas estão coloridas por sua velocidade absoluta, onde o azul representa menores velocidades e o vermelho s maiores. Imagem cortesia de Jenike & Johanson [17].

material lançado será recebido por um chute, nome que se dá ao equipamento responsável por controlar a queda dos grãos do material transportado, feito em aço ou material de alta resistência ao impacto e abrasão. As paredes do chute sofrem impacto direto das partículas e o dano causado pela abrasividade destas partículas é diretamente proporcional às suas velocidades. Algumas vezes é desejável manter a integridade das partículas transportadas, evitando quebras causadas por impactos acima da velocidade limite. Estes são dois exemplos da importância de se estudar e controlar adequadamente o comportamento do material no ponto de descarga.

É de especial interesse da engenharia a trajetória do material após o ponto de descarga.

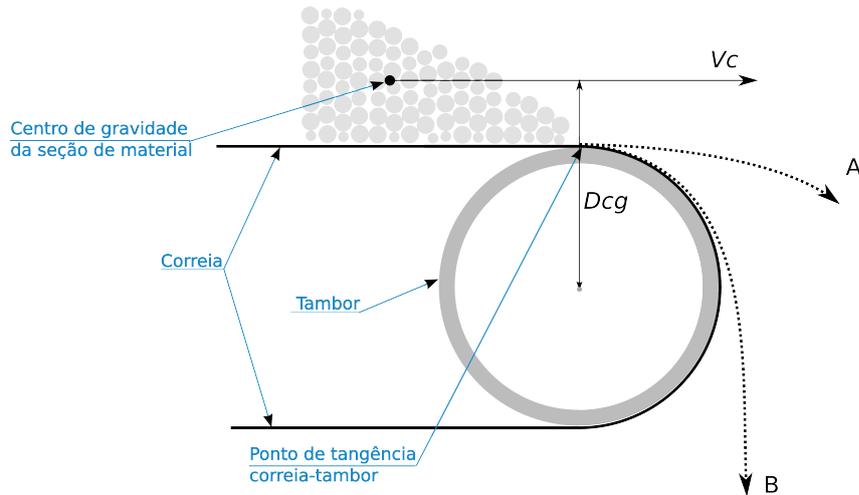


Figura 8 – Ponto de início da trajetória do material. A trajetória “A” ocorre quando a velocidade da correia V_c é suficientemente alta para lançar o material no ponto de tangência correia-tambor. Quando isso não ocorre o material “escorre” pela circunferência do tambor, como visto na trajetória B. D_{cg} é a distância do centro do tambor ao centro de gravidade da seção transversal de material transportado.

O ponto de impacto do material lançado é um dado importante para o planejamento de pilhas de estocagem ou projeto de equipamentos. Desenvolveu-se ao longo dos anos um conjunto de fórmulas e tabelas utilizadas por engenheiros e projetistas para a previsão destas trajetórias. Utiliza-se uma relação básica entre inércia (força centrífuga) e velocidade, para determinação do ponto onde o material perde o contato com a correia e inicia sua trajetória livre. Outras relações são utilizadas para os pontos seguintes do movimento [3].

A inequação 2 mostra a condição para a qual o material perde o contato com a correia exatamente no ponto de tangência correia-tambor (trajetória A na Figura 8),

$$\frac{V_c}{g \times D_{cg}} \geq 1.00 \quad (2)$$

caso a velocidade da correia seja muito baixa ou a altura de material muito elevada, a inércia não será suficiente para lançar o material transportado e ele escorrerá em torno do tambor (como exemplificado na trajetória B na Figura 8). O mesmo raciocínio de balanço de forças é aplicado para os casos de transportadores inclinados, nos quais o ponto de tangência não está exatamente acima do centro do tambor.

Hastie et al. [19] desenvolveram comparativos entre sete métodos de cálculo de trajetórias, além de estudos experimentais para validação destes métodos [18], inclusive utilizando simulações DEM (Discrete Element Method).

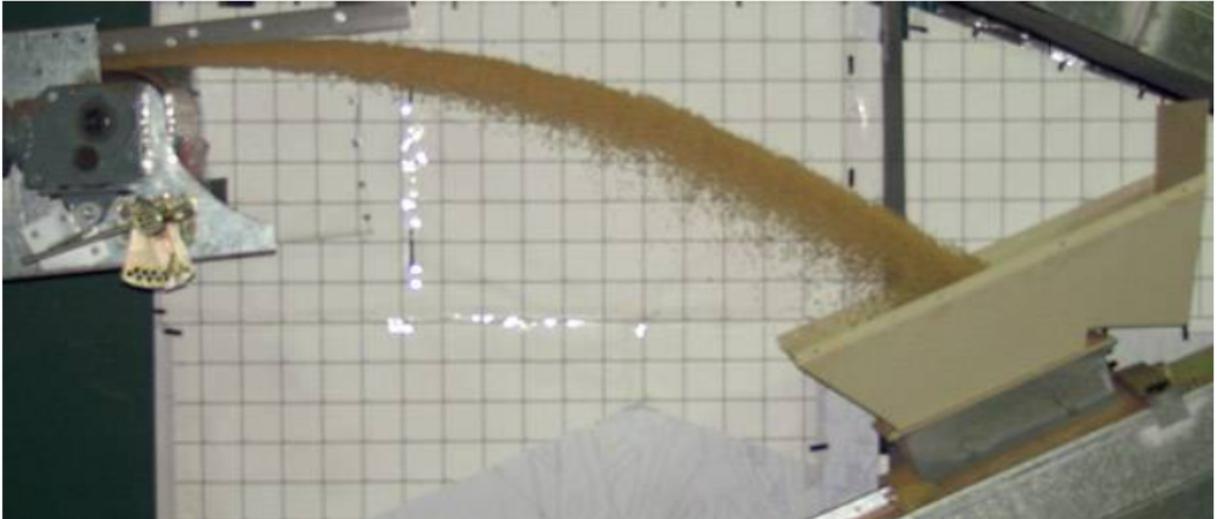


Figura 9 – Trajetória experimental de material em um estudo para desenvolvimento e validação de equações de trajetória de material, [18].

Esta dissertação tem como objetivo o estudo de um fenômeno que ocorre no ponto de descarga, onde foi percebido um aumento da velocidade horizontal das partículas. Entraremos em maiores detalhes na seção seguinte.

4 Fenômeno do aumento de velocidade horizontal

Como visto na Seção 3.1, o ponto de descarga de um transportador é onde o material inicia sua trajetória, perdendo o contato com a correia que até o momento lhe garantia o movimento. A partir deste ponto, somente a inércia de seu movimento e a gravidade são responsáveis por suas trajetória (desconsiderando a resistência do ar), tendo como consequência um caminho parabólico típico de um movimento balístico simples. Por isso, é de se esperar que ocorra um aumento da componente vertical V_y da velocidade das partículas, causada pela aceleração da gravidade, enquanto se espera que a componente horizontal V_x permaneça constante pois não há mais nenhuma força que justifique sua variação.

Entretanto, foi percebido pelos autores através de simulações DEM 3D (Discrete Element Method) que no ponto de descarga ocorre uma aceleração das partículas na direção horizontal, (aumento de V_x). Este efeito é claramente visto na Figura 10, na qual podemos ver duas vistas (A: isométrica e B: lateral) da mesma simulação. As partículas estão coloridas de acordo com sua componente horizontal da velocidade (V_x) e a escala de cores é ajustada para que inicie em 3,0 m/s (azul escuro), que é a velocidade do movimento da correia. É visível o aumento da velocidade a partir do ponto de descarga. Ainda, nota-se na vista lateral que partículas mais internas à curva permanecem na velocidade de 3,0 m/s enquanto as partículas mais externas apresentam o maior aumento de V_x .

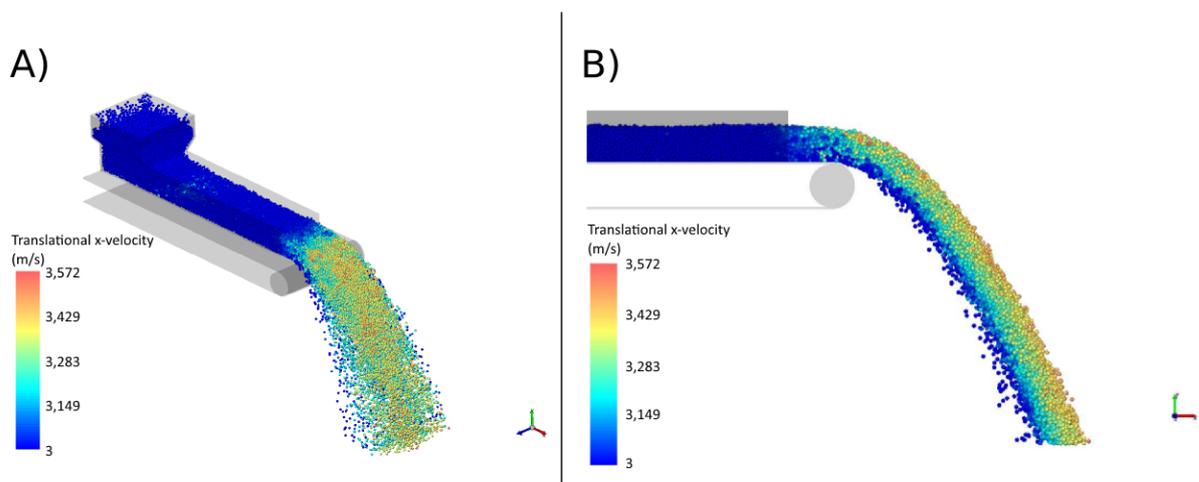


Figura 10 – Efeito de aumento de V_x observado em simulações 3D. Esta figura nos mostra o resultado de uma simulação 3D feita no software Rocky[®] em duas vistas, A: isométrica e B: lateral. Partículas são coloridas em função de V_x e a escala inicia (azul escuro) em 3,0 m/s que é a velocidade do movimento da correia.



Figura 11 – Fotografia que sugere a ocorrência do fenômeno na realidade. Partículas mais externas no fluxo de material aparecem com mais desfoque de movimento do que as partículas mais internas, que aparecem menos desfocadas e portanto estariam mais lentas.

4.1 Investigação inicial

Uma vez detectado o fenômeno descrito acima em diversas simulações diferentes, conduzimos a investigação inicial cujo objetivo era determinar quais parâmetros possuem maior influência na intensidade do fenômeno. Aqui, entendemos por “intensidade” o quanto a velocidade V_x das partículas se distancia da velocidade da correia. Este trabalho foi publicado no *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, apresentado no DINCON 2015 [7] e será descrito nos parágrafos seguintes.

Além das simulações computacionais realizadas, fotografias de fluxo de material real fornecem indícios da ocorrência do referido fenômeno na realidade. A Figura 11 mostra um fluxo de material da direita para a esquerda em um ponto de descarga, caindo dentro de um chute de descarga. Vê-se que um grupo de partículas em camadas superiores aparenta estar mais rápido do que as partículas em camadas inferiores. Isso é inferido pelo desfoque sofrido pelas partículas no momento da fotografia, efeito conhecido como *motion blur* ou desfoque de movimento, no qual a intensidade do desfoque é diretamente proporcional à velocidade relativa entre a câmera e o objeto fotografado.

Ainda na Figura 11 é interessante observar o material formando blocos durante a queda, indicando um comportamento típico de sólidos granulares, que será citado mais adiante na seção 7.

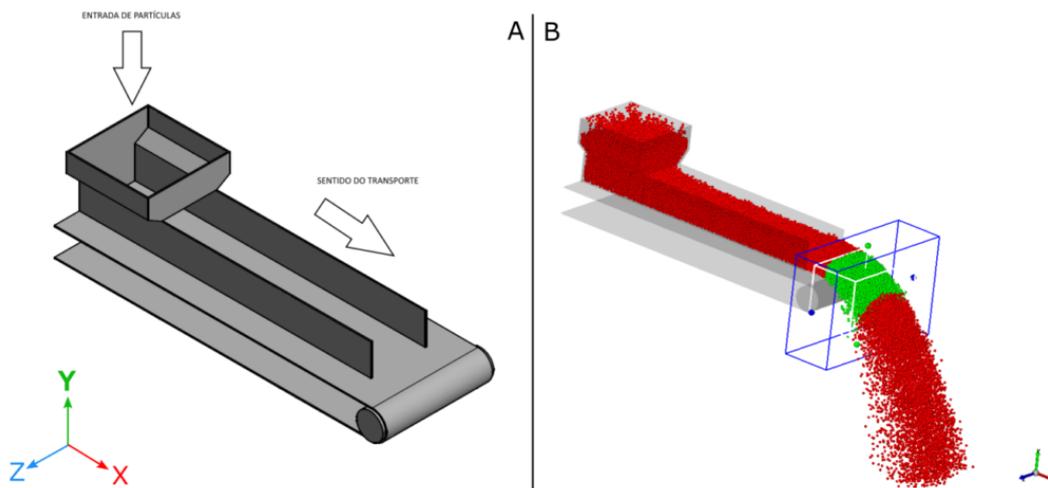


Figura 12 – Diagrama geral do transportador simulado (A) e volume de controle (B). Na etapa de análise, dados dos grãos presentes no volume de controle (coloridos de verde) foram utilizados para as análises estatísticas.)

Foi realizado um conjunto de simulações no software Rocky[®] de um transportador típico, com variações nos valores de parâmetros do material previamente escolhidos. A Figura 12 mostra em “A” um diagrama do sistema simulado e do sistema de coordenadas estabelecido. Em “B” vemos o volume de controle utilizado para a captura dos dados. Após as simulações, os dados das partículas presentes dentro do volume de controle ao longo do tempo foram extraídos e utilizados nas análises estatísticas.

O conjunto de simulações seguiu o planejamento fatorial 2^k [20, Capítulo 6]. Esta é uma técnica de planejamento e análise de experimentos na qual se testa a influência de k fatores no efeito estudado, com cada fator sendo testado com 2 níveis (valores) diferentes. Não apenas a influência dos fatores isolados é testada mas também o efeito combinado, tornando a técnica muito poderosa na análise de experimentos. Um ponto negativo da técnica é a quantidade de observações (simulações, em nosso caso) necessários para muitos fatores, pois requer $2 \times 2 \times 2 \cdots \times 2 = 2^k$ observações, daí o nome da técnica [20, Capítulo 6].

Escolhemos testar 3 fatores com os respectivos 2 níveis:

- **A) Vazão de material**, que se traduz em mais camadas de partículas sobre a correia. Foi testado com os níveis de 4000 ton/h e 8000 ton/h.
- **B) Atrito entre partículas**, parâmetro adimensional que foi testado com valores 0 e 1. O valor 0 significa que não há nenhum tipo de atrito entre as partículas.
- **C) Força de adesão entre partículas**, foi testado com os valores 0 e 1. Este parâmetro é adimensional e representa a fração do peso da partícula equivalente

Experimento	Parâmetros		
	A (Vazão)	B (Atrito)	C (Adesão)
(1)	4000	0	0
a	8000	0	0
b	4000	1	0
ab	8000	1	0
c	4000	0	1
ac	8000	0	1
bc	4000	1	1
abc	8000	1	1

Tabela 1 – Parâmetros dos experimentos numéricos. Cada experimento numérico realizado recebe o nome dos parâmetros (A, B ou C) em nível “alto”, o primeiro experimento tem o nome de (1) pois todos os parâmetros estão em seus níveis mais baixos.

a força de adesão. Por exemplo, um valor de 0,5 significa que a força de adesão exercida em uma partícula é igual á metade de seu peso, ao passo que um valor de 1 significa que a força de adesão exercida é igual ao peso da partícula.

Escolhidos os fatores e seus níveis, resumidos na tabela da Tabela 1, foram feitas as 8 simulações de 7 segundos cada uma, nas quais partículas esféricas com diâmetro único (material monodisperso) de 50 mm eram criadas a 1,5 m de altura da correia como indicado na entrada de material da Figura 12A, na taxa correspondente ao parâmetro “Vazão de material” e deixadas livres para serem transportadas pela correia e lançadas em queda livre, sem resistência do ar. O material tem densidade aparente¹ de 1600 kg/m³, um valor típico de materiais na indústria de mineração. A correia possuía uma velocidade constante de 3 m/s e a fim de isolar os efeitos dos fatores analisados não havia atrito entre as partículas e as guias laterais que limitam o fluxo de material lateralmente. O coeficiente de atrito estático e dinâmico entre as partículas e a correia foi definido como 0,3. Em cada um dos experimentos mostrados, foi medida a velocidade média das partículas no volume de controle mostrado na Figura 12B, para avaliarmos o impacto de cada um dos fatores escolhidos na componente horizontal da velocidade.

4.2 Resultados da análise

Os resultados desta investigação inicial nos ajudaram a estabelecer uma visão quantitativa do fenômeno e direcionar o desenvolvimento do trabalho que se seguiu.

¹ A densidade aparente é o tipo de medida mais utilizado para descrever o peso específico de materiais granulares na indústria. Ela considera a massa do material como apresentado, ou seja, considerando os espaços vazios entre os grãos/partículas de uma amostra.

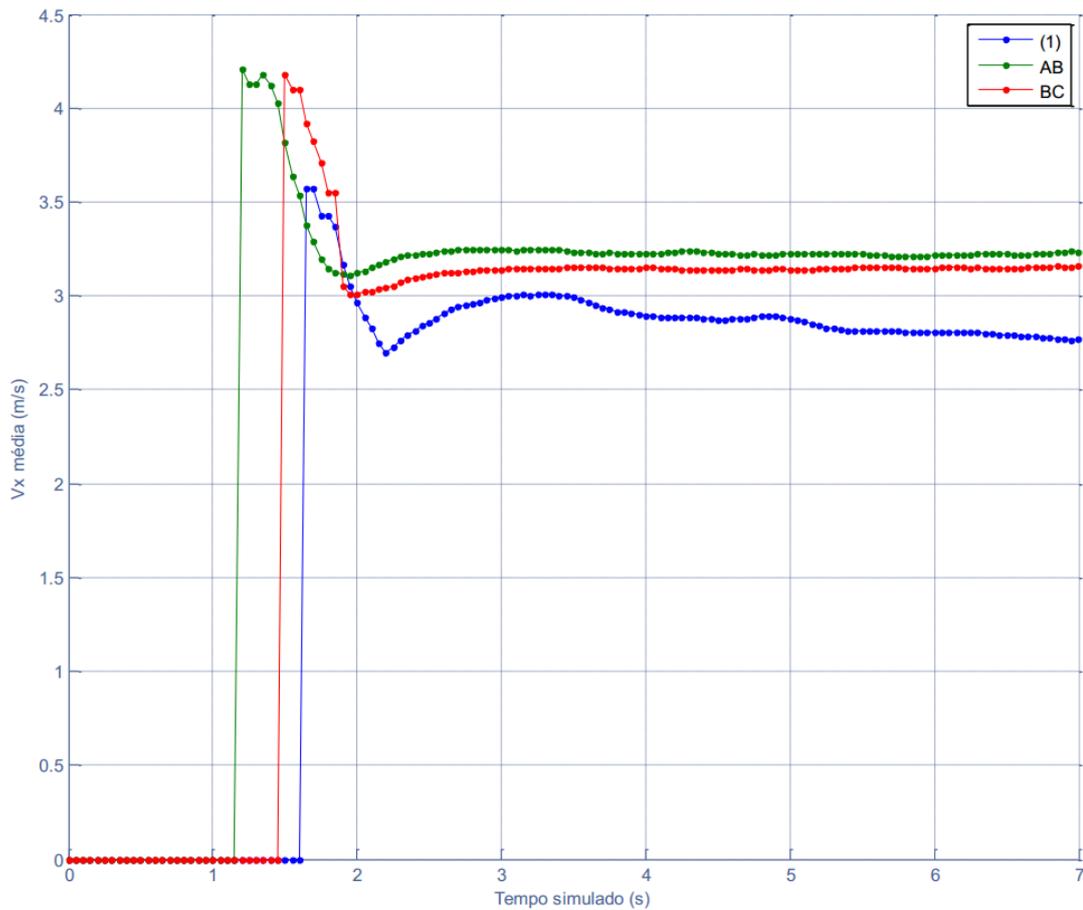


Figura 13 – Gráfico de V_x média ao longo do tempo, dentro do volume de controle. Fica claro como os experimentos AB e BC resultam no aumento de V_x média ao passo que o experimento (1) resultou na diminuição da V_x média.

Para cada uma das 8 simulações, foi extraída a V_x média das partículas no volume de controle descrito na Figura 12B, para cada instante t da simulação. A fim de filtrar eventuais ruídos nos resultados, tomou-se a média da velocidade medida durante 10 instantes (ou 10 *frames* da simulação, cada frame contempla o intervalo de 0,05 s), escolhidos após o tempo de 5 segundos. Estes valores são vistos na Tabela 2.

O tempo de 5 s como instante inicial para a coleta dos dados foi escolhido a posteriori pois percebeu-se através dos gráficos que a partir deste tempo o sistema entra em regime estacionário até o fim da simulação. No gráfico da Figura 13 percebemos que a V_x média das partículas já em $t = 2s$ é maior que a velocidade da correia (3,0 m/s) nos experimentos ab e bc, ao passo que no experimento (1) a V_x média é menor que 3,0m/s.

A análise 2^k contempla uma estimativa numérica dos efeitos dos fatores estudados bem como das interações entre fatores. De forma superficial, o efeito de um dado fator é calculado como a média dos valores da V_x média nos experimentos nos quais este fator tem nível alto menos a média dos valores da V_x média nos experimentos nos quais este fator tem nível baixo. Embora este fator tenha a mesma unidade da grandeza medida

Experimento	Resultados	
	V _x (m/s)	Efeito do fator
(1)	2,7810	
a	3,2724	0,2717
b	3,1509	0,1611
ab	3,2257	-1,8105
c	2,7919	-0,0052
ac	3,2522	-0,0113
bc	3,1524	-0,0005
abc	3,2128	0,0042

Tabela 2 – Tabela de parâmetros e resultados da análise 2^k , a combinação dos fatores A e B tem a maior influência na intensidade do aumento de V_x (experimento "ab")

(m/s, em nosso caso) ele deve ser interpretado como a "variação da variável de resposta produzida por uma mudança no nível do fator" [20, página 183]. Uma descrição mais detalhada do cálculo destes efeitos pode ser encontrada na referência [20, Capítulos 5 e 6]. A Figura 2 nos mostra os resultados numéricos das análises, mostrando a V_x média calculada e a influência de cada fator ou combinação. Podemos ver que é a combinação dos fatores A (Vazão de material) e B (atrito entre partículas), no experimento "ab" que exerce maior influência sobre a intensidade do fenômeno.

Estes resultados expandiram nossa visão do fenômeno, demonstrando que o efeito inverso de diminuição da velocidade média também pode ocorrer. O fato disso ter ocorrido em uma situação sem atrito e com baixo volume de material ajuda a formulação de hipóteses para o mecanismo por trás do fenômeno, que será discutido mais adiante.

5 Dinâmica Molecular

5.1 Visão geral

Com a evolução dos computadores nas últimas décadas, o uso de simulações numéricas tem se expandido continuamente nas ciências e engenharias, de modo que o estudo de materiais granulares não é uma exceção. Nesta área existem algumas técnicas de simulação tais como Monte Carlo, dinâmica de contatos e dinâmica molecular sendo esta última mais adequada à situações de menor movimento relativo entre grãos e que será utilizada neste trabalho.

Como descrito no capítulo 2, materiais granulares densos consistem em um grande número de grãos próximos o suficiente para que interajam uns com os outros. Interações de longo alcance, como forças eletrostáticas, podem existir em alguns casos. Entretanto, tais forças são inexistentes ou irrelevantes no contexto do manuseio industrial de materiais que abordamos aqui, de modo que a interação grão-grão e grão-objetos se dará apenas por contato mecânico. Assim, a dinâmica do material granular é governada pelas equações de movimento de Newton aplicadas no centro de massa de cada grão, os movimentos envolvidos são o resultado da interação entre partículas e entre partículas e demais objetos do sistema, somadas à aceleração da gravidade.

O processo de simulação consiste em resolver estas equações de movimento sobre um tempo discretizado em passos de tempo Δt , utilizando um dos algoritmos existentes como o método de Euler, Runge-Kutta, Verlet ou Velocity-Verlet [4]. A escolha adequada deste Δt é muito importante pois impacta diretamente na qualidade dos resultados das simulações e no tempo de processamento.

5.2 Modelo de forças

Antes de passarmos às equações, vamos estabelecer o modelo de forças e interação entre grãos que usaremos aqui. Nosso sistema é bidimensional, por isso os grãos do material são sempre representados por discos sem profundidade. Como ilustrado na Figura 14, as forças resultantes da interação entre dois grãos são a força normal \vec{n}_{ij} , cuja direção coincide com a reta que passa pelos centros dos grãos, e a força tangencial \vec{t}_{ij} cuja direção é perpendicular à reta que passa pelos centros dos grãos. Ambas as forças tem sua origem no ponto de contato entre os grãos.

Os grãos são considerados indeformáveis, ou seja, o ponto de contato sempre ocorre à

um *raio* de distância do centro do grão. Entretanto, enquanto existe contato entre grãos existe uma interpenetração entre os grãos (que dá origem às forças de contato, ver Figura 14). Os grãos são modelados com constantes elásticas nas direções normal k_n e tangencial k_t e uma constante de amortecimento normal g_n , ilustradas na Figura 14 pelas molas e amortecedor de mesmo nome.

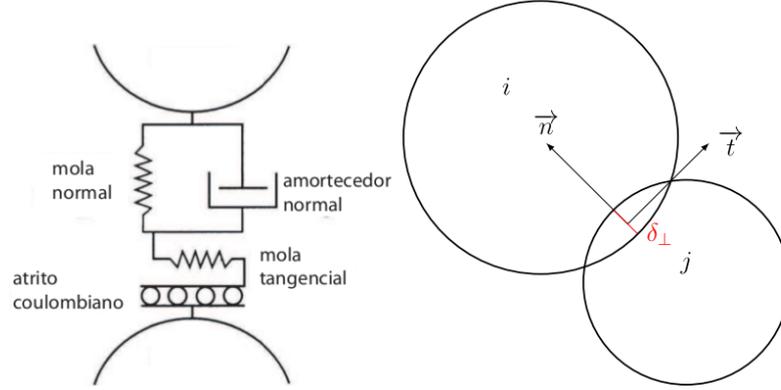


Figura 14 – Diagrama esquemático do modelo das forças de interação entre os grãos e da base em que elas são calculadas. Aqui as molas representam a força elástica e os amortecedores representam as forças viscosas. Figura retirada de [21]

Uma vez estabelecido o modelo de forças utilizado no sistema, entendemos como os contatos serão tratados e as forças resultantes das interações entre corpos serão calculadas. Passaremos então para as equações que governam o movimento dos grãos do sistema.

5.3 As equações de movimento

Em um sistema de N grãos, as equações de movimento de Newton podem ser escritas na forma:

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} F_{ij}(x), i = 1, \dots, N \quad (3)$$

$$m_i \frac{d^2 y_i}{dt^2} = m_i g + \sum_{j \neq i} F_{ij}(y), i = 1, \dots, N \quad (4)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \tau_{ij}, i = 1, \dots, N \quad (5)$$

Onde x_i e y_i são as coordenadas cartesianas do centro de massa de cada grão i e ω_i a velocidade angular do grão. A massa e o momento de inércia em relação ao centro do grão são representados respectivamente por m_i e I_i . $F_{ij}(x)$, $F_{ij}(y)$ e τ_{ij} são respectivamente as

componentes da força e o torque resultantes da interação entre grãos i e j . A aceleração da gravidade g é assumida como constante para a escala dos sistemas aqui estudados.

Assume-se todos os grãos com densidade uniforme, portanto para simulações com grãos esféricos (no caso de 3 dimensões) ou circulares (2 dimensões, como é nosso caso) os centros de massa são sempre coincidentes com seu centro geométrico.

Para se resolver um sistema de equações diferenciais como este apresentado, há uma variedade de métodos conhecidos como métodos de diferença finita. Estes métodos tem como filosofia discretizar as equações no tempo e buscar por valores aproximados das variáveis dinâmicas. Os valores das posições x_i e y_i , velocidades v_{ix} e v_{iy} e ω_i no tempo $t + \Delta t$ são calculados como o resultado das iterações no intervalo de tempo anterior t através da expansão de Taylor em torno de t até a ordem desejada:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \Delta t v(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 a(t) + \frac{1}{6} \Delta t^3 b(t) + \dots \quad (6)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \Delta t a(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 a'(t) + \dots \quad (7)$$

$$a(t + \Delta t) = a(t) + \Delta t a'(t) + \dots \quad (8)$$

$$b(t + \Delta t) = b(t) + \dots \quad (9)$$

Onde r , v e a representam respectivamente a posição, velocidade e a aceleração das partículas. A variável b denota as derivadas de terceira ordem de r , apenas para fins de demonstração matemática e não será utilizada nos cálculos.

Desta forma, a partir da configuração inicial do sistema no instante t_0 é possível obter a configuração do sistema para todos os instantes posteriores, e o conjunto destas configurações é a evolução do sistema ao longo do tempo.

Neste ponto, torna-se necessário encontrar o passo de tempo Δt adequado à simulação. Um passo de tempo muito grande pode levar a interpenetrações excessivas e reações com forças irreais, ou mesmo em não detecção total de um contato, gerando casos onde uma partícula atravessa totalmente uma parede. Por outro lado, quanto menor o passo de tempo maior o custo computacional e mais lento é o cálculo da simulação. Para encontrarmos um valor adequado tomamos como referência os fenômenos envolvidos em nossa simulação, como ela é baseada na interação de contato entre partículas, precisamos

de um passo de tempo que consiga representar bem os instantes de contato. Baseado no modelo de forças utilizado (Figura 14), o tempo de um contato equivale ao tempo de oscilação de uma mola, que é dado por $\sqrt{m/k}$, onde k é a constante elástica do material e m é a massa do grão. Em simulações com grãos polidispersos, isto é, com tamanhos diferentes, escolhe-se a maior massa para o cálculo deste tempo de contato. O passo de tempo final é este tempo de contato dividido por algum fator, que no nosso caso utilizamos 50 pois este demonstrou resultar em uma boa combinação de precisão e velocidade de cálculo.

Uma questão que surge neste ponto é o erro associado aos cálculos, desvios nas estimativas das grandezas em qualquer instante são propagados para os instantes seguintes e somados com os próximos erros. Isso pode levar a um efeito cascata onde o desvio da trajetória calculada em relação à real só tende a aumentar neste tipo de sistema. O erro associado às estimativas das posições, velocidades e acelerações em um dado instante é maior quanto maior for o tamanho do passo de tempo Δt e menor a quantidade de termos que se considera na expansão de Taylor. Uma solução que minimiza os erros sem elevar significativamente o custo computacional é a técnica de *Predição-Correção* conhecida como Velocity-Verlet [4] que será explicada mais adiante na seção 5.8.

5.4 Algoritmo

Definidas como serão consideradas as forças em nosso sistema e as equações que governam o movimento dos grãos, descreveremos aqui o algoritmo que implementa o método da Dinâmica Molecular. Em nosso sistema temos dois tipos de atores, grãos e objetos, chamamos de objetos as geometrias com as quais os grãos interagem, tais como paredes e a correia do transportador. As etapas descritas a seguir são executadas em cada iteração do sistema, até que se atinja o critério de parada que varia de acordo com o objetivo da simulação, podendo ser quando o sistema atinge um equilíbrio de forças, quando um número total de partículas atinge um limite, passos de tempo realizados, dentre outros. Neste trabalho o critério de parada utilizado é o tempo simulado total¹, normalmente definido em alguns segundos, determinado por experiências prévias como sendo um tempo no qual o sistema simulado atingiria o regime estacionário sem grandes mudanças dali em diante.

De um modo geral um passo de Dinâmica Molecular que é executado tendo como entrada o sistema no instante t e como saída a configuração do sistema no instante $t + \Delta t$ é composto pelas seguintes etapas:

¹ Chamamos de *tempo simulado* o tempo decorrido dentro da simulação. Por exemplo: Se realizarmos uma simulação de um evento que tem duração de 10 segundos, mas que nosso computador gastou 30 minutos para calcular, o tempo simulado é de 10 segundos. Neste caso o tempo real seria 30 minutos e o tempo de CPU seria ainda um outro valor.

1. Executar a entrada de novas partículas no sistema, se aplicável.
2. Construir uma lista de vizinhos de cada partícula.
3. Predizer as posições, velocidades e acelerações de cada partícula.
4. Procurar os possíveis contatos formados pelas posições preditas.
5. Calcular as forças e os potenciais de interação entre grãos.
6. Corrigir os valores de aceleração e velocidade de cada partícula.
7. Verificar as condições de contorno e os limites de vida² de cada grão, excluindo os necessários.

As etapas 1 e 7 são particularmente necessárias em sistemas onde se deseja simular um fluxo contínuo de partículas em uma região do espaço ou mesmo o efeito da inserção de novas partículas ao longo do tempo. Este é o caso de nosso principal objeto de estudo, o transportador de correia, onde estas condições e efeitos são relevantes.

Passemos para uma explicação mais detalhada dos passos acima descritos.

5.5 Construção da lista de vizinhos

No cálculo de forças de contato se faz necessário determinar quais pares de partículas apresentam contato direto. A forma mais simples, porém mais custosa de se fazer isso é testar a existência de contato entre todas as partículas do sistema, realizando então N^2 operações de cálculo e comparação de distâncias a cada passo de tempo.

Entretanto sabemos que dentro de um passo de tempo, as posições das partículas não devem variar mais do que uma fração de seu raio, o que faz com a lista das n partículas mais próximas de uma dada partícula qualquer não mude significativamente. Valendo-se disso, esta lista de vizinhos pode ser atualizada com menor frequência, economizando processamento desnecessário. A verificação de contatos posterior é feita então somente entre os grãos pertencentes a esta lista (Figura 15).

Com a escolha correta do raio de vizinhança as mudanças nesta lista podem ser ignoradas durante alguns passos de tempo sem perda de qualidade da simulação (neste trabalho foi utilizado um raio de vizinhança de $2 * \text{raio da maior partícula}$). Um intervalo muito grande para atualização da lista de vizinhos leva ao erro de não detectarmos novos contatos

² *Limites e tempo de vida de um grão:* São as condições de espaço ou de tempo que determinam a existência de um grão dentro da simulação. Fora destes limites o grão deixa de ser considerado nos cálculos e não exerce mais nenhuma influência no sistema

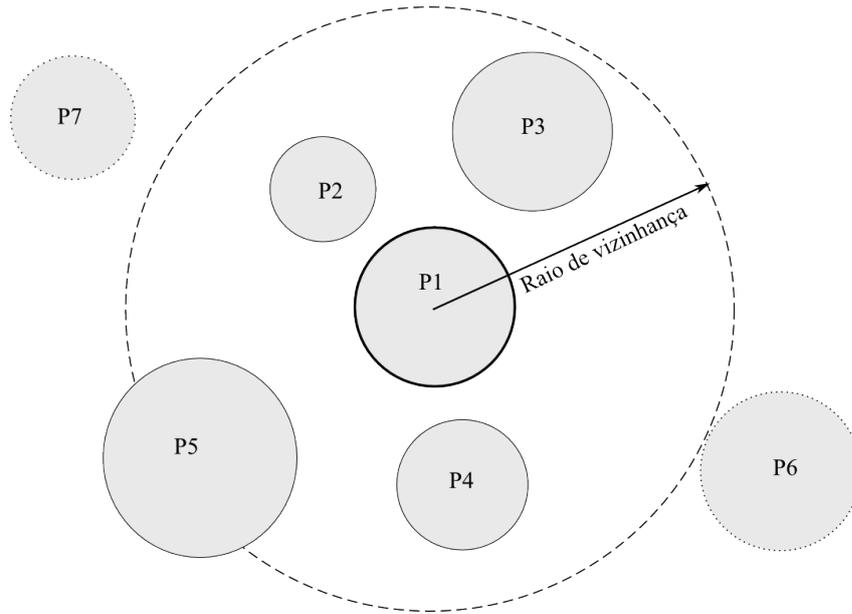


Figura 15 – Método de construção da lista de vizinhos. Nesta figura vemos a construção da lista de potenciais contatos (chamados *vizinhos*) da partícula $P1$, é feita uma verificação da distância de contato entre $P1$ e todas as partículas do sistema, as estiverem total ou parcialmente dentro do raio de vizinhança (partículas $P2$ a $P5$) entram na lista. As demais partículas cuja distância de contato (menor distância entre suas superfícies) for maior do que o raio de vizinhança (partículas $P6$ e $P7$) não entram na lista e serão ignoradas na rotina seguinte de detecção de contatos.

existentes. Em nossas simulações um intervalo de 100 iterações para atualização da lista de vizinhos se mostrou adequado.

Como forma de melhoria desta rotina é possível que tais parâmetros sejam implementados como valores dinâmicos, recalculados em função da velocidade média e tamanho das partículas em um dado momento da simulação, isso poderia influenciar significativamente nos custos computacionais totais das simulações diminuindo o raio de vizinhança e consequentemente o tamanho da lista de vizinhos ou aumentando o intervalo de atualização da lista. Uma outra técnica que divide o espaço em células e faz a busca de vizinhos apenas em células próximas à partícula foi proposta por [4] e sua implementação e desempenho testados em trabalhos recentes [21].

5.6 Detecção de contatos

A rotina de detecção de contatos fará a verificação de quais vizinhos estão em contato com cada partícula, sendo que estes vizinhos são as partículas e objetos detectados na rotina anterior de procura de vizinhos. A detecção de contatos é basicamente o cálculo da interpenetração entre dois grãos ou entre grãos e objetos. Em simulações que utilizam grãos com geometrias variadas, como polígonos ou composições de retas e curvas, este

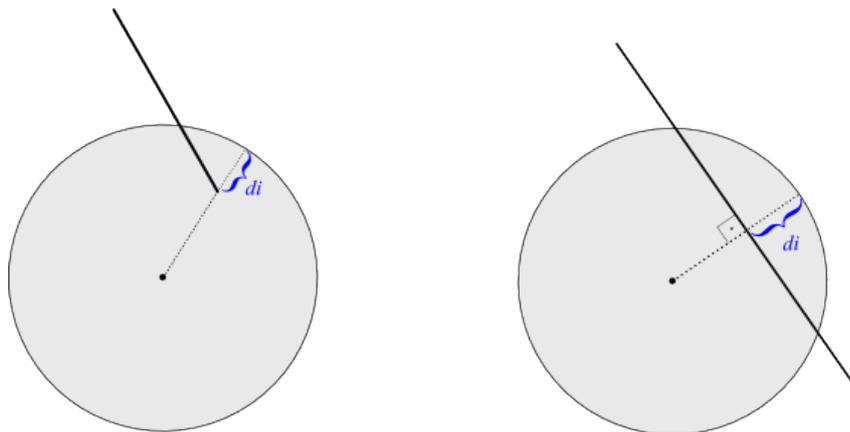


Figura 16 – Distância de interpenetração d_i para objetos. A Figura ilustra como é determinada a distância de interpenetração do caso do contato entre um grão e um objeto (composto por linhas) nos dois casos de interseção linha-círculo. À esquerda, quando uma extremidade da linha está dentro do grão e à direita quando não há nenhuma das extremidades da linha dentro do grão.

cálculo de interpenetração pode se tornar complexo e custoso, este é um dos motivos pelo qual a grande maioria dos softwares comerciais utilizam apenas partículas esféricas. O uso de partículas esféricas ou circulares (para simulações 3D e 2D, respectivamente) simplifica muito a detecção de contatos pois ela se torna uma simples comparação entre a distância dos centros dos grãos e a soma de seus raios, como mostrado na equação 10:

$$\text{distância de contato (i,j)} = [\text{distância entre os centros de } P_i \text{ e } P_j] - [R_i + R_j] \quad (10)$$

Enquanto a distância de contato for positiva, não existe interpenetração entre os grãos, quando essa distância se torna negativa a interpenetração existe e o módulo deste valor se torna a *distância de interpenetração* que será usada na rotina de cálculo de forças.

Para evitar duplicidade de cálculos o programa não mantém uma lista de contatos associada a cada grão, mas mantém uma lista global que contém cada par em contato e o valor da distância de interpenetração. Esta lista é inteiramente refeita em cada passo de tempo da Dinâmica Molecular.

No caso da detecção de contatos entre grãos e outros objetos, o cálculo requerido é mais sofisticado pois se trata da interseção entre um círculo e um segmento de reta, para tal podem ser utilizados diversos métodos algébricos já estabelecidos. Existem dois casos de intersecção círculo-linha para os quais precisamos estabelecer o tratamento adequado e determinar uma forma de encontrar a distância de interpenetração d_i equivalente neste tipo de contato, a Figura 16 ilustra ambos os casos e como d_i é calculada em cada um deles.

5.7 Cálculo de forças

Detectados os contatos e determinadas suas respectivas distâncias de interpenetração na rotina anterior, podemos calcular as forças geradas pela interações entre partículas. Também calcularemos as forças oriundas de quaisquer potenciais agindo sobre as partículas. No caso de nossas simulações os potenciais considerados são o gravitacional e o elástico, cujo valor só é diferente de zero quando há contato.

Para cada um dos contatos presente na lista a força de reação em cada uma das partículas ou objetos é calculada e guardada. Aqui entra em cena o modelo de forças descrito anteriormente na seção 5.2, o cálculo é feito de acordo com as molas e amortecedores considerados no contato.

5.8 Corretor

Para cada partícula do sistema as velocidades e acelerações são corrigidas utilizando-se as forças recém calculadas na rotina *Cálculo de forças*. Esta técnica de correção dentro de um mesmo passo de tempo utiliza o algoritmo Velocity-Verlet [4]. Neste método a posição, velocidade e aceleração atuais são usados para uma previsão de posição e velocidade no próximo passo de tempo (Figura 17a). Essa velocidade predita é temporária e será corrigida até o final do cálculo. A partir da nova posição, calcula-se as forças agindo no grão e com essas forças calcula-se a aceleração (Figura 17b). Com a posição e aceleração calculada, corrige-se a velocidade para seu valor definitivo (Figura 17c). Uma vez calculados os três parâmetros está completo com cálculo deste passo de tempo (Figura 17d).

5.9 Condições de contorno e vida das partículas

Em qualquer simulação é necessário que sejam definidos limites temporais e espaciais. Limites espaciais estão usualmente associados ao tamanho da região de interesse e escala dos efeitos medidos, ao passo que os limites temporais estão relacionados à evolução do sistema e frequência dos eventos relevantes.

Em nossas simulações os limites espaciais são definidos de forma a englobar, no mínimo, todo o equipamento que se queira simular. A maioria destes limites pode ser definido de forma automática, estabelecendo-se alguma distância padrão do *bounding-box* dos objetos simulados pois normalmente se deseja estudar o comportamento das partículas dentro dos equipamentos. Por sua vez, os limites temporais são definidos pelo usuário pois dependem da evolução esperada do sistema e de interesses variados do usuário.

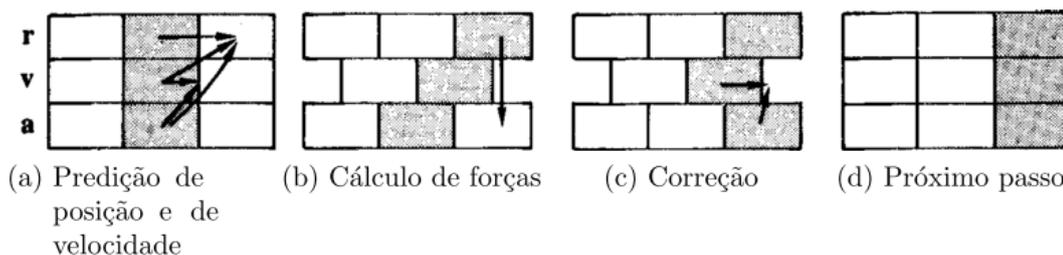


Figura 17 – Representação visual do método de predição-correção executado em cada passo da dinâmica molecular, pelo algoritmo Velocity-Verlet. Em (a) temos o estado inicial composto pelos valores de posição, velocidade e aceleração da partícula no instante t . Em (b), a previsão de posição e velocidade da partícula, note que a posição aqui já é a definitiva e seu valor será usado em $t + \Delta t$, enquanto a velocidade é apenas um valor intermediário. Em (c) a aceleração é calculada conhecendo-se as forças já determinadas pelo cálculo de forças através das posições. Em (d) a correção de velocidade baseada na média das acelerações do passo atual e futuro, encerrando o cálculo do estado do passo $t + \Delta t$. Figura retirada de [21].

A vida da partícula pode ser associada ao tempo, à sua posição espacial ou a quaisquer outras variáveis como por exemplo a energia total, temperatura e quantidade de colisões. Em nosso caso, uma partícula é excluída da simulação somente se sair dos limites espaciais definidos, e nunca é reinserida no sistema.

A verificação de inserção dentro dos limites do sistema deve ser feita para cada partícula, mas não precisa ser feita em todos os passos de tempo da simulação, pois algumas partículas fora dos limites não influenciarão em nossos resultados. Entretanto, enquanto um grão existir, ele será incluído no processamento da rotina de procura de vizinhos utilizando recursos computacionais desnecessariamente. Para evitar este efeito o intervalo de verificação de vida das partículas coincide com o de procura de vizinhos.

6 Simulando transportadores

A dinâmica molecular nos possibilita a simulação de sistemas granulares de uma forma geral, e em nosso trabalho a utilizaremos para estudar o comportamento de grãos sobre um transportador de correia típico. Neste capítulo, será explicada a construção da simulação de transportador de correia utilizada em nossa pesquisa. Todo o sistema foi implementado em linguagem Python (versão 3.5) usando o paradigma de orientação a objetos.

Como ilustrado na figura 18, nosso modelo bidimensional de transportador consiste em 3 componentes básicos: um *chute de entrada*, uma *correia transportadora* e uma *entrada de grãos*. Cada componente é representado por uma ou mais linhas com propriedades específicas.

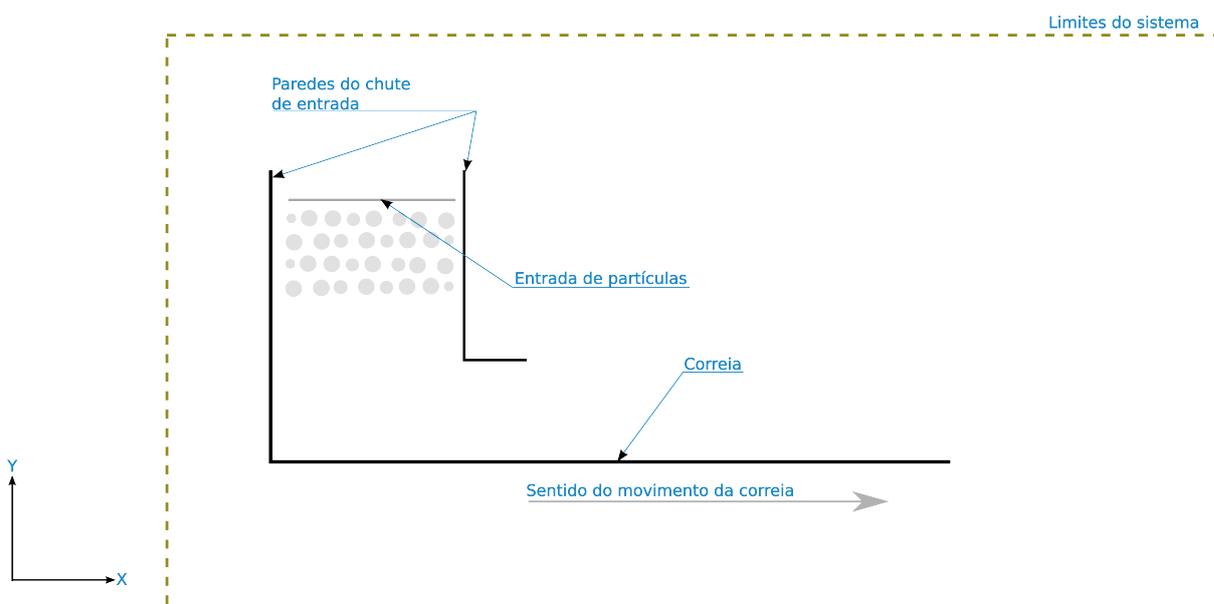


Figura 18 – Esquema do transportador de correia simulado. Grãos entram na simulação pela Entrada de partículas, caem sobre a correia, que as carrega continuamente da esquerda para a direita. A linha tracejada mais externa representa os limites espaciais da simulação, quando uma partícula sai desse limite ela é excluída da simulação. A gravidade age no sentido de $-Y$.

O *chute de entrada* é o componente mais simples, sendo composto apenas de duas paredes sem propriedades especiais além das atribuídas aos materiais (coeficientes de rigidez, atrito e amortecimento). Sua função é acomodar o fluxo de grãos vindo da entrada, forçando uma mistura e acomodação no início da correia. Isso é necessário para que as camadas de material transportadas sobre a correia tenham uma configuração mais natural e não carreguem a influência da velocidade inicial com que são criadas.

A *entrada de partículas* consiste em uma linha sobre a qual nascem os novos grãos a

serem incluídas na simulação. Essa linha não é considerada como um objeto físico e por isso não sofre colisão com os grãos. A partir de uma vazão de material estabelecida no início do processo, o algoritmo distribui os grãos a serem inseridas ao longo da simulação em “lotes” que caibam no comprimento da *entrada* evitando o contato inicial entre grãos. Todos os grãos de um lote surgem simultaneamente ao longo da linha com uma velocidade inicial cujo módulo é determinado como função da vazão ou outro interesse do usuário e direção sempre perpendicular à linha da *entrada*.

A *correia* possui a particularidade de ser um objeto com movimento contínuo, mas suas extremidades são fixas no espaço. Ela transmite movimento para o material transportado mas sua geometria nunca translada ou rotaciona. Da mesma forma, a linha da correia não se move ao longo da simulação, porém ela possui a propriedade *velocidade*. Esta velocidade é transmitida aos grãos no momento do cálculo de forças, que usa esta propriedade no cálculo da velocidade relativa dos contatos partícula-correia. Este método garante de forma bastante simples que os grãos sempre enxerguem o movimento da correia, não sendo necessário implementar uma real mudança de coordenadas da geometria durante a simulação.

Optamos por não incluir em nosso modelo a curva da correia sobre o tambor por motivo de simplificação. Para isso assumimos que em nossos estudos a velocidade da correia é sempre suficientemente grande para que a trajetória da partícula a partir do ponto de tangência correia-tambor apresente um raio maior que o raio do tambor, de modo que os grãos sempre perderão totalmente o contato com a correia a partir do referido ponto. A Figura 19 ilustra esta situação.

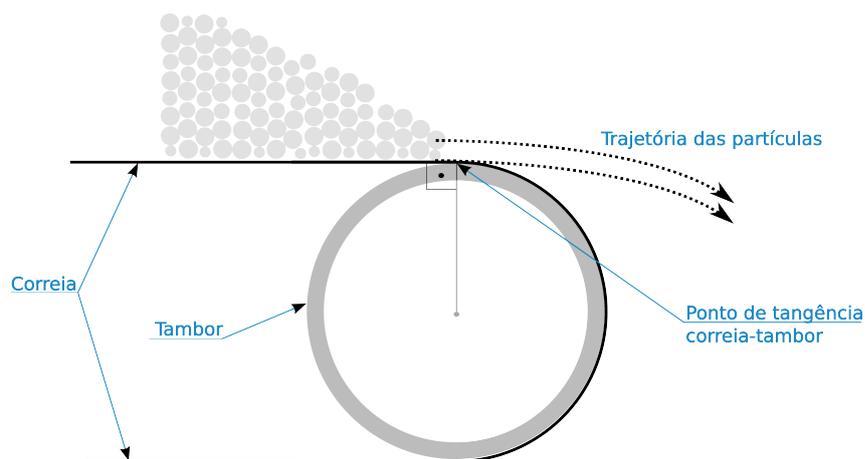


Figura 19 – Consideração da velocidade da correia: Assumimos que a velocidade da correia em nossas simulações sempre satisfaz a inequação 2, tornando possível não utilizar um modelo com a curvatura do tambor.

Outro ponto particular de simulações para fins industriais é que os parâmetros utilizados pela indústria para descrever os materiais nem sempre são os mesmos utilizados na aca-

demia [1]. Como exemplo disso, temos a determinação da quantidade de grãos. Enquanto em simulações acadêmicas muitas vezes queremos saber ou mesmo controlar o número de grãos no sistema, sendo este um parâmetro de entrada, em simulações da indústria o parâmetro de entrada é o volume ou massa total de material, tornando a quantidade de grãos um dado que deve ser calculado pelo programa.

O esperado é que o software determine quantidade total de grãos bem como sua frequência de entrada na simulação em função dos seguintes parâmetros básicos:

1. Distribuição dos tamanhos dos grãos (ou distribuição granulométrica)
2. Densidade aparente do material (dada em toneladas/m³ ou kg/m³)
3. Fração de vazio. Unidade adimensional que determina o quanto de um volume total de material é composto de espaços vazios.
4. Fluxo de material, dado em toneladas/hora ou outra unidade relacionada.
5. Tempo total de simulação.

Os itens 1 a 3 são dados obtidos em testes laboratoriais com o material real que se deseja simular, muitas vezes estes dados já estão tabelados para materiais comuns. O item 4 está relacionado com as condições de operação do equipamento que se deseja testar na simulação e o item 5 é escolhido pelo usuário e está associado ao tempo que se julga necessário simular até que os efeitos ou propriedades de interesse (como por exemplo entupimentos, estabilização de volume, forças de impacto) do sistema estudado se manifestem.

Note que o tempo total de simulação é relevante para a criação dos grãos pois o software calcula, como parte da rotina de inicialização de uma simulação, a distribuição de grãos ao longo de todo o tempo simulado. Isso é feito desta forma para que um sorteio com função de probabilidade não seja executado concomitantemente durante o processamento, o que aumentaria o já alto custo computacional da simulação.

A correspondência entre a densidade aparente do material dada pelo usuário e a massa final que será efetivamente atribuída aos grãos, calculada pelo programa, é dada pelas equações 11 e 12:

$$\rho_p = \frac{\rho_{am}}{1 - f_v}, \quad (11)$$

$$m_{p(i)} = \rho_p \times Volume_{eq(i)}. \quad (12)$$

A equação 11 descreve a relação entre a densidade dos grãos ρ_p de um dado material, sua densidade aparente ρ_{am} e seu fator de vazio f_v . Enquanto a massa de um grão i é dada pela equação 12, onde $Volume_{eq(i)}$ é o volume de uma esfera de mesmo diâmetro do grão i .

6.1 Coleta e tratamento de dados

Com o alto custo computacional da dinâmica molecular, uma típica simulação de alguns segundos de tempo simulado pode levar semanas de processamento ininterrupto para ser calculada. Por isso é necessário que o progresso da simulação seja salvo constantemente para salvaguardar o trabalho em caso de interrupção não esperada do processo, ou mesmo para que não seja necessário reexecutar toda a simulação quando se queira uma nova análise ou capturar um novo conjunto de dados. Além disso, com o objetivo de reduzir ao máximo o custo computacional, é comum em softwares de simulação que a etapa de processamento seja separada da etapa de visualização e análise de resultados, conhecida como *pós-processamento*.

Por outro lado, é comum termos simulações com o passo de tempo da ordem de 10E-7s, o que geraria 10^7 arquivos salvos para cada segundo de tempo simulado se quiséssemos guardar em disco todos os passos do processo. Ainda, cada arquivo salvo deve conter o estado de todas os grãos do sistema possibilitando a retomada do processo a partir daquele ponto, gerando arquivos da ordem de dezenas ou centenas de *megabytes* cada um. Esses fatores tornam inviáveis que a simulação seja salva integralmente na grande maioria dos casos.

Por isso o intervalo de gravação deve ser determinado pelo usuário em função da frequência dos fenômenos que se queira observar, do tipo de pós processamento planejado (geração de imagens, vídeos, estatísticas) e do espaço disponível para armazenamento dos dados. Para nossas simulações utilizamos uma frequência de gravação de 50 vezes por segundo simulado (um arquivo salvo a cada 1/50 segundos de tempo simulado). Este valor nos permite alcançar uma boa resolução de dados nas curvas de análise e gerar vídeos em “câmera lenta”, em torno da metade da velocidade real, sem a necessidade de interpolação de frames.

Embora tenhamos acesso a informações de todo o sistema simulado, nosso interesse de pesquisa se foca em apenas uma região específica do fluxo de material. Por isso o pós processamento de nosso sistema conta com a capacidade de selecionar regiões do espaço das quais desejamos extrair informações. A Figura 20 mostra uma tela do pós processamento onde podemos ver em um transportador ainda sem grãos, três regiões nomeadas de

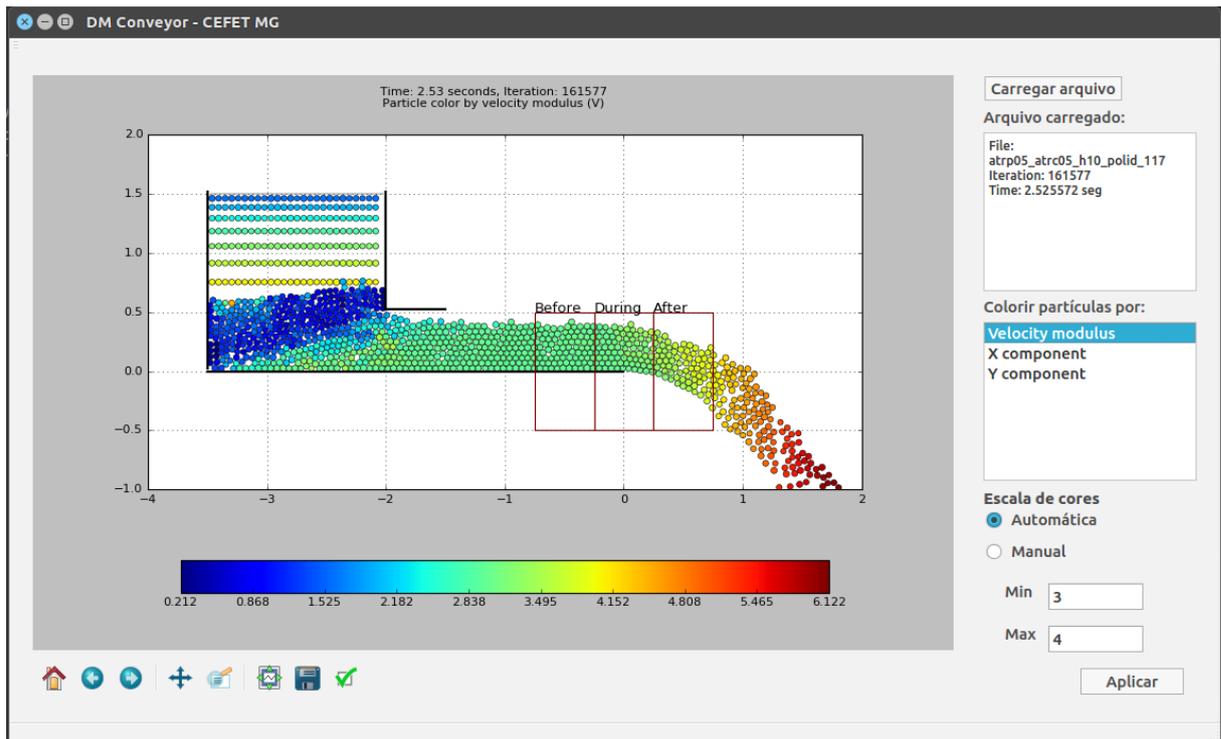


Figura 20 – Tela de pós processamento de uma simulação. Observa-se três regiões de interesse retangulares que servirão para extração de estatísticas dos grupos de grãos presentes dentro delas. A região *Durante* engloba os grãos na região onde o fenômeno de aumento de velocidade ocorre. A região *Antes* nos dará os grãos ainda em seu fluxo normal de transporte pela correia e a região *Depois* engloba grãos que já passaram completamente pelo fenômeno do aumento de velocidade.

Antes, *Durante* e *Depois*, de acordo com sua posição em relação ao ponto de ocorrência do fenômeno estudado.

7 Análise e Discussão dos Resultados

Foi realizada uma série de simulações de transportadores nos moldes apresentados, com variações de parâmetros do material transportado ou do transportador. Neste capítulo, apresentaremos resultados obtidos com nosso código de simulação, a visualização do efeito de aumento de velocidade dos grãos e estudos quantitativos no efeito de parâmetros do sistema na intensidade do efeito. Ao final, apresentaremos as hipóteses para o mecanismo físico por trás da ocorrência do fenômeno.

7.1 Visualização de velocidades

O primeiro passo após uma simulação, ou mesmo durante, é a simples visualização do sistema simulado. No nosso caso, o efeito estudado não se encontra em um instante de tempo específico, ele é o resultado da evolução da velocidade dos grãos ao longo do tempo ou, sob outra perspectiva, ao longo de suas trajetórias no transporte. A Figura 21 mostra um frame de uma das simulações realizadas onde os grãos são coloridos por sua velocidade absoluta V .

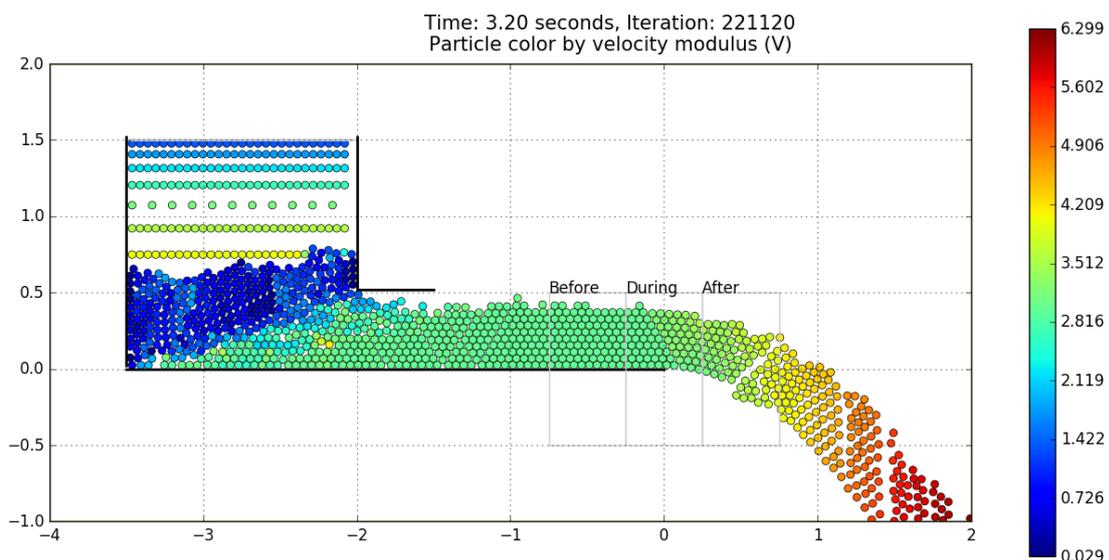


Figura 21 – Visualização de um frame de uma simulação. Instante $t= 3,2$ s da simulação do sistema base, nesta visualização a cor do grão é função de sua velocidade V . O comportamento visto aqui, tanto das trajetórias como evolução de velocidades, é o esperado para este tipo de sistema. Grãos conduzidos pela correia se movem a 3 m/s e aceleram após o fim da correia devido à ação da gravidade.

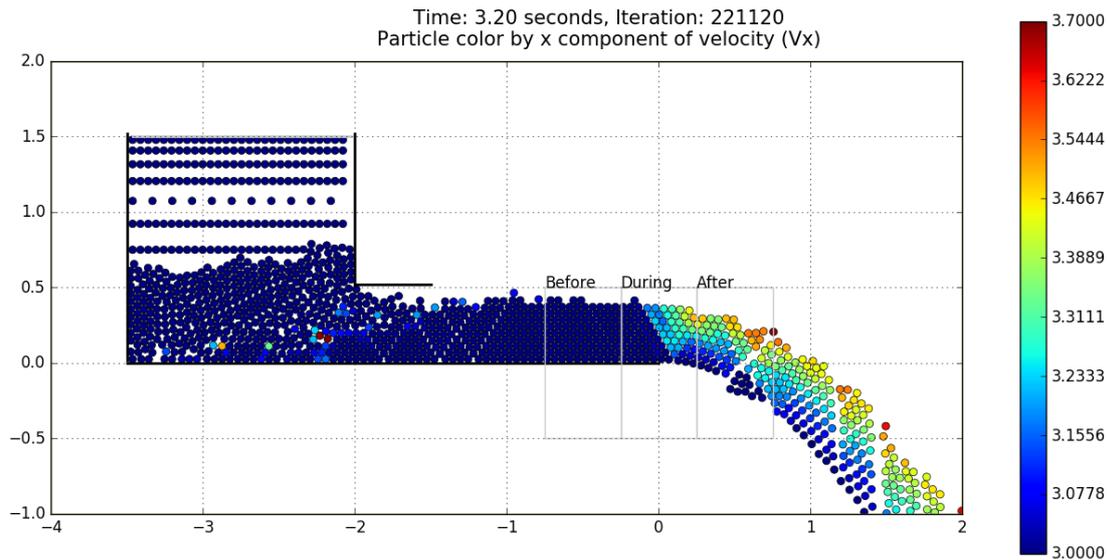


Figura 22 – Visualização de V_x no sistema base. Aqui, vemos o mesmo sistema da figura 21, porém desta vez a cor dos grãos é função de V_x , torna-se nítido o aumento da velocidade horizontal dos grãos na região do fim da correia. A velocidade V_x de alguns grãos chega a 3,7 m/s. Grãos com V_x abaixo do mínimo da escala recebem a mesma cor do mínimo, azul escuro.

Quando o mesmo sistema é visualizado com a cor dos grãos em função de V_x , o efeito se torna plenamente perceptível. A velocidade horizontal dos grãos sofre um nítido acréscimo na região do fim da correia, com alguns grãos chegando a 3,7 m/s de velocidade horizontal, 23,3% acima da velocidade da correia que é de 3,0 m/s. Com isso conseguimos reproduzir as observações iniciais feitas nas simulações 3D no software Rocky[®], demonstradas na Figura 10. A escala de cores é construída de forma que todos os grãos com V_x menor ou igual a 3,0 m/s recebem a mesma cor azul escuro.

Já nessas primeiras visualizações do fluxo, é possível perceber que na queda livre ocorre o surgimento de pequenos espaçamentos entre grupos de grãos, criando o mesmo efeito visto na fotografia de um sistema real da Figura 11, mais um item de validação do resultado.

7.2 Análise das regiões de interesse

Na figura 23, vemos uma análise de dados das regiões de interesse no nosso sistema base, que utiliza grãos monodispersos. Cada *frame* da simulação é um ponto da curva, onde a V_x dos grãos em cada região foi extraída e plotada no gráfico correspondente. É importante notar que os gráficos não iniciam em $t = 0$, uma vez que os primeiros grãos levam algum tempo para irem da entrada até a região de interesse e $t = 0$ é o instante no qual os primeiros grãos surgem na simulação.

Vemos que antes da região do fim da correia os grãos apresentam em sua maioria $V_x =$

3,0 m/s com poucas variações ao longo do tempo. Durante a transição do fim da correia, região onde ocorre o fenômeno, percebe-se claramente um aumento tanto na V_x média quanto na máxima (grãos mais altas no fluxo de material). Após o fim da correia, região onde o fenômeno já ocorreu e os grãos tendem a manter sua V_x constante, vemos que os valores máximos flutuam em torno de 3,6 m/s. É ainda interessante notar que nesta região, os valores mínimos de V_x ficam abaixo de 3,0 m/s.

7.3 Influência de parâmetros

Uma vez detectado o efeito do aumento espontâneo na velocidade horizontal dos grãos através do nosso código, exploramos a influência de parâmetros do sistema na ocorrência e intensidade deste efeito. Testamos a distribuição de tamanhos dos grãos, a altura de material na correia e a inclinação da correia. De forma geral, o mesmo gradiente de velocidade pode ser observado em todos os casos, ao passo que as análises quantitativas revelam as diferenças de comportamento do sistema em cada caso, ampliando ou diminuindo este gradiente.

Distribuição de tamanho dos grãos: Em nosso sistema base testamos um material monodisperso, em que todas os grãos tem o mesmo tamanho. Aqui utilizamos material polidisperso, com grãos de diâmetro entre 23 mm e 27 mm escolhidos em uma distribuição uniforme. Todos os demais parâmetros são iguais ao sistema base.

A figura 24 apresenta as análises das regiões de interesse para o sistema polidisperso. A polidispersão do material aumentou muito a dispersão dos valores de V_x na região *antes* do fim da correia, embora a média tenha permanecido em 3,0 m/s. Também provocou aumento da variabilidade na V_x média e mínima da região *durante* e aumento da média na região *após* o fim da correia.

Inclinação da correia: Transportadores são frequentemente projetados para operarem com uma leve inclinação cujo limite depende das propriedades do material transportado [3], esta inclinação não pode ser demasiadamente elevada a ponto de provocar o rolamento do material. Testamos dois valores para a inclinação do transportador ($+5^\circ$ e -5° , ver figuras 25 e 26) e comparamos os resultados com a correia na posição horizontal (0°). Novamente, esta é a única diferença para o sistema base e o material transportado é monodisperso.

A figura 27 mostra a comparação entre as três inclinações descritas. Nela vemos a média dos valores ao longo do tempo, tomados a partir de $t = 3,0$ s para que fosse considerado somente o sistema em regime estacionário e não levado em conta as oscilações dos primeiros grãos a entrarem nas regiões de interesse.

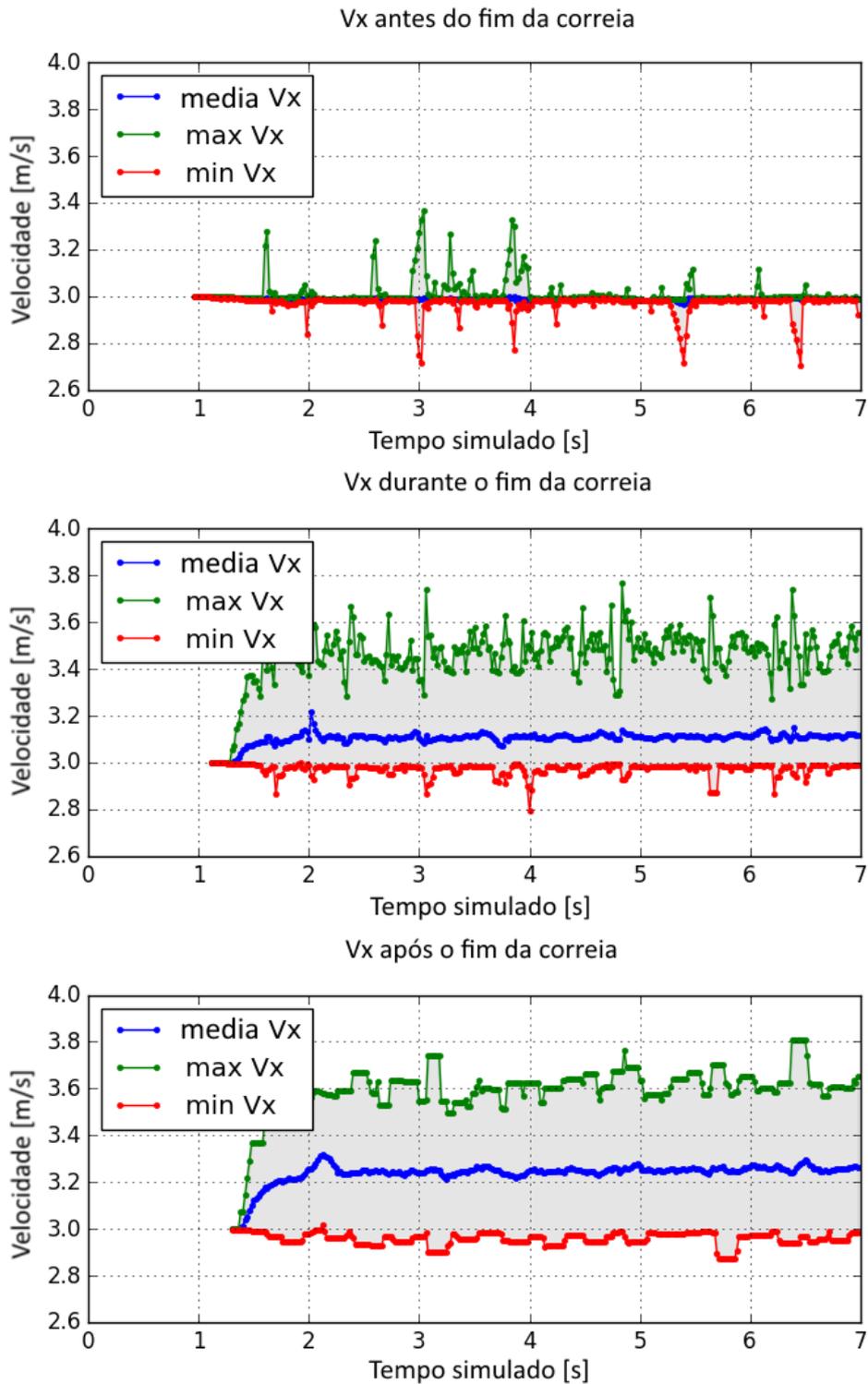


Figura 23 – V_x máximo, mínimo e médio para todos os grãos dentro das regiões de interesse. É claro o aumento de V_x máximo e médio durante e após o fim da correia. O comportamento oposto pode ser observado para o V_x mínimo, cujos valores ficam mais frequentemente abaixo de 3,0 m/s durante o fim da correia e sempre abaixo de 3,0 m/s após.

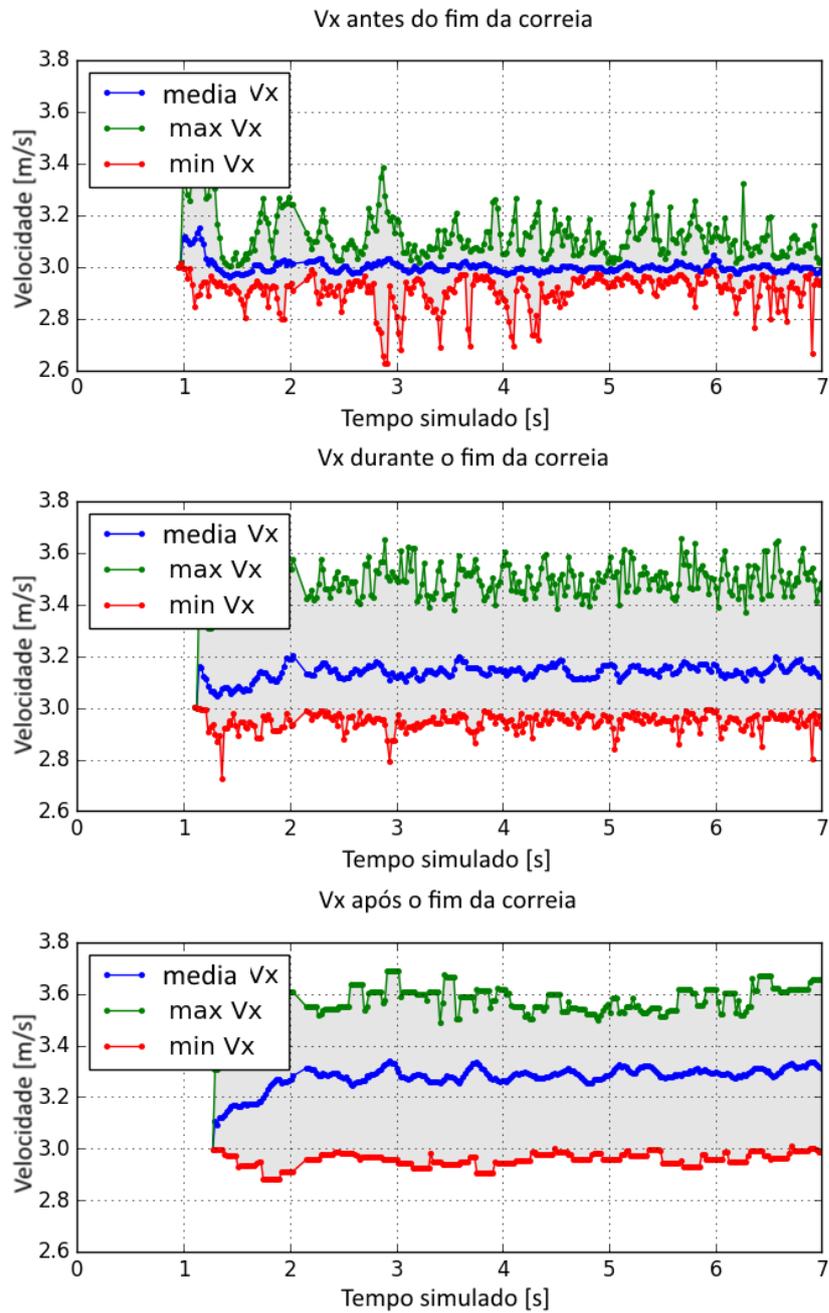


Figura 24 – Análise das regiões de interesse no sistema polidisperse. Aqui observamos uma variabilidade muito mais alta nos valores de V_x máximo e mínimo na região antes do fim da correia e uma elevação nos valores de V_x médio acompanhada de diminuição e aumento da variabilidade de V_x mínima nas regiões durante e após o fim da correia.

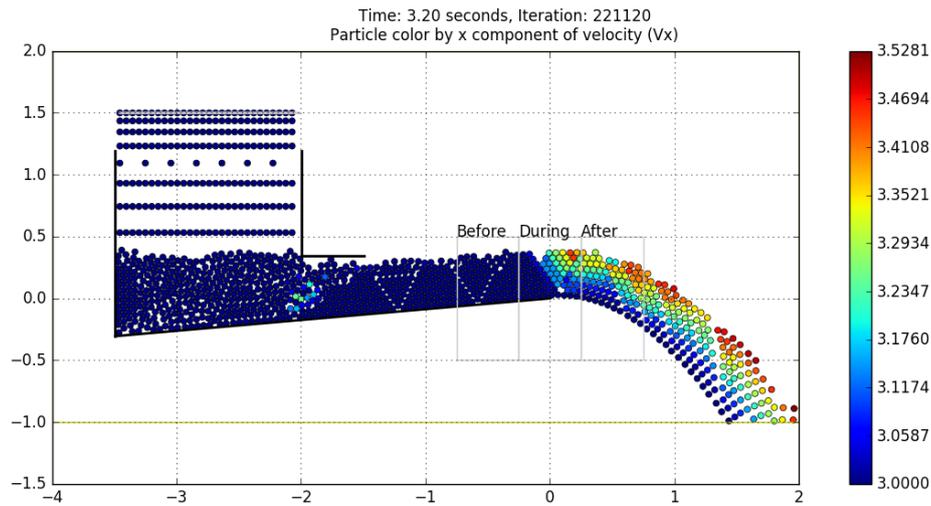


Figura 25 – Transportador inclinado a $+5^\circ$, grãos coloridas em função de V_x .

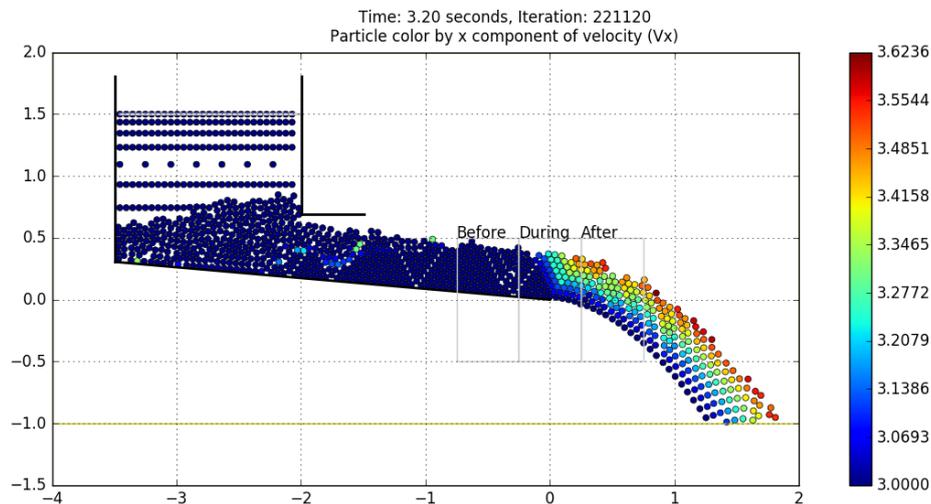


Figura 26 – Transportador inclinado a -5° , grãos coloridas em função de V_x .

Como V_x é a componente da velocidade na direção x no sistema de coordenadas global, é de se esperar que esta componente seja menor quando o transportador estiver inclinado, um grão viajando sobre uma correia inclinada de 5° na velocidade de $3,0\text{m/s}$ terá uma V_x de $3 \times \cos(5^\circ) = 2,9885$. Esta redução geral nos valores aferidos de V_x é verificada nos resultados.

Os efeitos foram variados saindo da faixa de valores esperada pela decomposição vetorial comentada no parágrafo anterior. Enquanto a inclinação positiva diminuiu a V_x máxima e aumentou sua variabilidade, teve o efeito inverso na V_x mínima, a aumentou e diminuiu a variabilidade. A inclinação positiva também diminuiu V_x média. Enquanto isso, a inclinação negativa praticamente não influenciou significativamente nem na V_x máxima nem na média, mas diminuiu a V_x mínima.

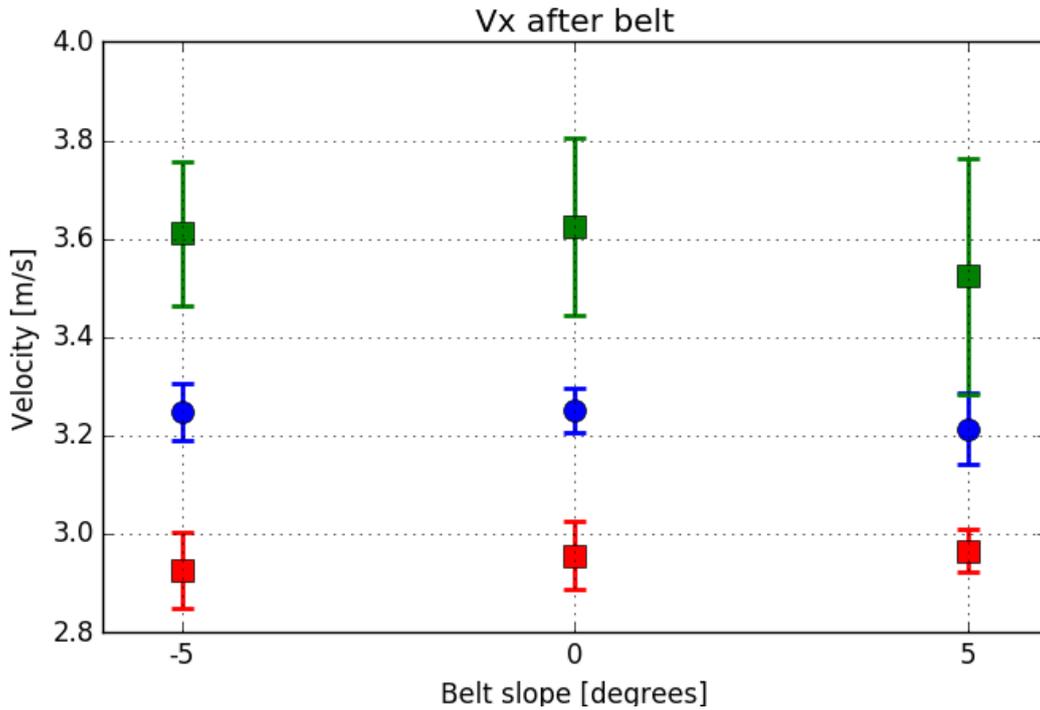


Figura 27 – Resultados para a correia inclinada. Aqui vemos a média dos valores de V_x máxima (quadrados superiores), V_x média (círculos) e V_x mínima (quadrados inferiores). Os ângulos são medidos em sentido horário e 0° representa o estado base da correia, totalmente horizontal. Enquanto a inclinação positiva teve maior influência diminuindo os valores máximos e aumentando sua variabilidade, teve o efeito inverso na V_x mínima, a aumentou e diminuiu a variabilidade.

Altura da camada de material: Como pode ser inferido pela observação do gradiente de velocidades mostrados nos resultados anteriores, a altura da camada de material tem influência direta no aumento de V_x . Quanto mais alta a camada e material na qual se encontra um grão, maior é o aumento de V_x . Aqui o teste consiste em acompanhar a trajetória de quatro grãos que se encontram em camadas diferentes de material durante o transporte e analisar o comportamento de V_x ao longo desta trajetória.

O resultado pode ser visto na figura 28, que mostra no gráfico A as coordenadas (x,y) dos grãos ao longo do seu tempo de vida na simulação, enquanto o gráfico B mostra V_x em função da coordenada x . Como o previsto, quanto mais alta a posição do grão nas camadas de material, maior é o aumento de V_x . Vemos ainda que não apenas o efeito é maior como também é iniciado mais cedo.

7.4 Hipóteses para a ocorrência do fenômeno

Duas hipóteses foram inicialmente consideradas para o mecanismo gerador do fenômeno estudado, ambas relacionadas com a característica de sólido assumida pelo material gra-

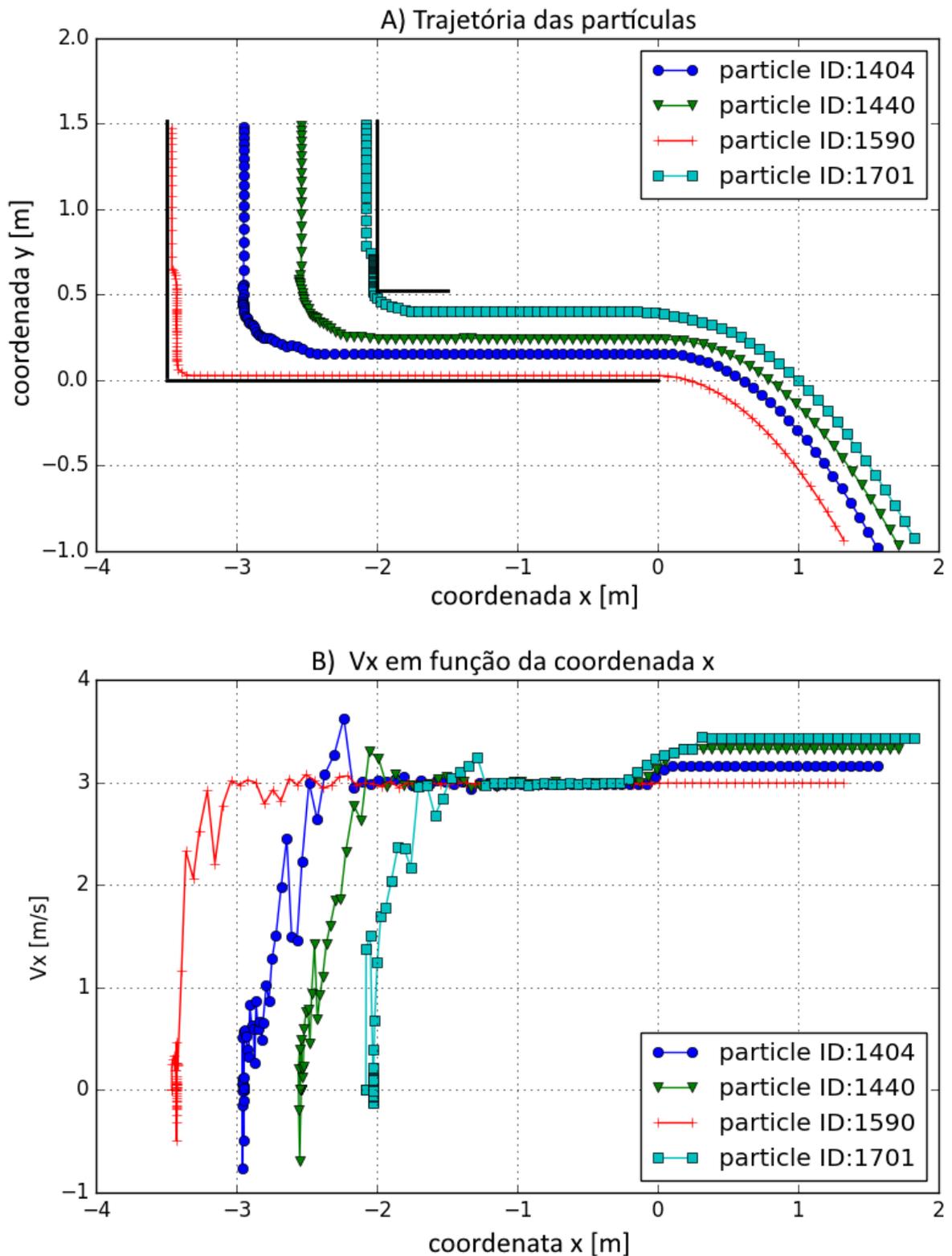


Figura 28 – Influência da altura da camada de material. Em A temos a trajetória dos grãos ao longo de todo o período de simulação. Os grãos foram escolhidas para representarem diferentes alturas na camadas de material. Em B vemos as V_x dos grãos em função de sua posição x , fica claro a relação entre altura da camada de material e a intensidade do fenômeno. $x = 0$ é o ponto do fim da correia.

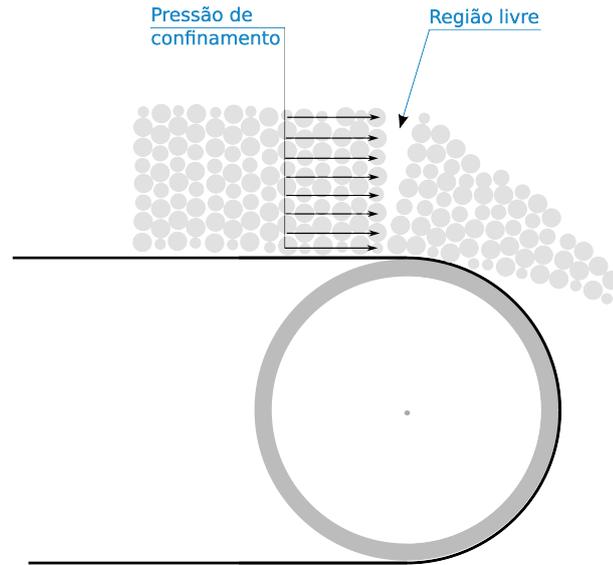


Figura 29 – Alívio da pressão de confinamento. Partículas na região de transição são impulsionadas devido a uma assimetria de forças criada pelo desmoronamento dos grãos imediatamente à frente.

nular durante o transporte, e com a transição de fase aparente do material granular no ponto de descarga. Evidentemente, ambas podem estar corretas e a atuação conjunta dos seus mecanismos seja responsável pela criação do fenômeno.

7.4.1 Alívio na pressão de confinamento

Quando o material está sendo transportado pela correia, após a estabilização e auto-organização sofridos na região do chute de entrada, os grãos encontram um arranjo que é praticamente invariável ao longo do tempo de transporte até o ponto de descarga. Em outras palavras o material assume um comportamento de tipo-sólido, no qual o arranjo não muda mas cada grão está constantemente submetida a forças dos demais grãos e objetos com os quais ele mantém contato. Este conjunto de forças, constantemente agindo sobre cada grão dentro de um arranjo, é denominado *pressão de confinamento*.

Agora vamos pensar no que acontece com um dado grão p no ponto de descarga. A ideia é que quando ocorre o desmoronamento de um grupo de grãos à frente de p , os demais grãos atrás de p ainda mantém o contato e conseqüentemente exercem uma força de repulsão. Esta assimetria de forças no momento da transição causada pela liberação de um dos lados do conjunto de grãos é o que chamamos de alívio da pressão de confinamento e empurraria os grãos na direção x .

Grãos mais elevados teriam maior ganho de V_x pois durante o desmoronamento eles ficam mais livres do que os grãos mais profundos, que ainda permanecem dentro de um aglomerado de grãos próximos.

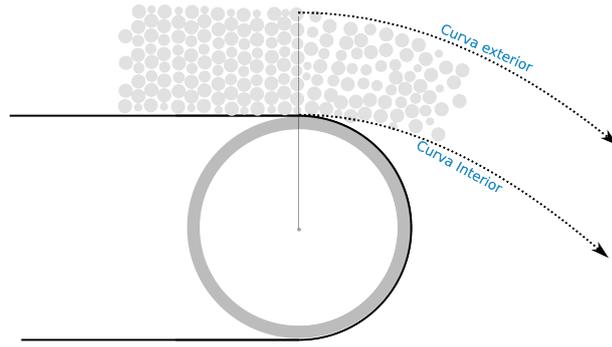


Figura 30 – Conservação do momento angular. O aumento de V_x seria causado pela manutenção do momento angular do conjunto de grãos se comportando como sólido ainda no início da curvatura da trajetória balística.

7.4.2 Conservação de momento angular

Assim como na explanação da hipótese anterior, considere o material sendo transportado na correia como um sólido formado pelo agrupamento dos grãos e mantido coeso pela gravidade e atrito entre elas. No ponto de transição, este sólido que descrevia uma trajetória retilínea inicia uma curva, que se tornará instantes depois na trajetória balística do material.

Neste instante de transição, onde as características de sólido ainda existem e a curva foi iniciada, para a conservação do momento angular quanto mais externa à curva (distante do centro) estiver um grão mais sua velocidade aumentará. A figura 30 ajuda a ilustrar este conceito e a equação 13 nos dá a relação entre o momento angular \vec{L} de um grão, sua massa m , velocidade linear \vec{v} e a distância a um ponto de referência \vec{r} , que no caso é o centro da curva descrita pelo material.

$$\vec{L} = \vec{r} \times m \vec{v} \quad (13)$$

Esta hipótese é reforçada pelos resultados mostrando que a altura de material e o atrito entre grãos são fatores que mais influenciam na intensidade do fenômeno. A maior altura de material faz com que os grãos superiores tenham um maior raio de giro e o atrito faz com que o arranjo de grãos se torne mais tipo-sólido e mais difícil de se desfazer.

8 Conclusão e perspectivas

Durante todo o trabalho, tivemos a oportunidade de investigar o interessante fenômeno da velocidade horizontal de partículas no ponto de saída de transportadores de correia. Tal fenômeno foi percebido inicialmente em simulações 3D com software comercial e seu comportamento básico foi investigado com a técnica estatística de projeto e análise de experimentos 2^k .

A partir daí, com o intuito de aprofundar a investigação acerca do referido fenômeno, foi desenvolvido um código de simulação DEM 2D (*Discrete Element Method*) em Python, a partir dos primeiros princípios. Baseado em um código existente que calculava somente interações entre grãos e utilizava grandezas adimensionais, foi introduzida a interação grão-objeto, superfícies com movimento e a adição e exclusão de grãos do sistema para o estudo do fluxo contínuo de grãos. Também foi introduzido o uso de valores fisicamente reais. Tal código apresentou resultados compatíveis com as simulações realizadas anteriormente, nos quais também se observou a ocorrência do fenômeno do aumento de velocidades bem como outras características esperadas de materiais granulares neste tipo de sistema.

Na segunda fase do estudo do fenômeno de aumento de velocidades, foram testados parâmetros como distribuição de tamanho de grãos, inclinação da correia e altura da camada de material. Percebemos que a intensidade do fenômeno em um dado grão é diretamente relacionada à altura deste grão no fluxo de material. Ainda, ficou claro que o ponto do fluxo onde o fenômeno acontece também está relacionado com a altura de material, ocorrendo mais cedo para camadas mais elevadas, o que tem por consequência a criação de um ângulo no gradiente de velocidades.

Vimos que em nossos testes a inclinação da correia exerceu influência praticamente desprezível, enquanto o uso de grãos polidispersos aumenta a variabilidade dos valores de V_x nas regiões antes e durante a transição e aumenta a V_x após o ponto de saída.

Para explicar a ocorrência do fenômeno estudado, apresentamos as hipóteses do alívio da pressão de confinamento na região de transição e da conservação do momento angular de um sistema tipo-sólido.

Para o futuro, podem ser sugeridos os seguintes caminhos:

- O código pode evoluir bastante, incorporando a terceira dimensão espacial, melhorando a interface gráfica e outros modelos de interação, potenciais e propriedades.

O uso de partículas não esféricas também seria interessante.

- O fenômeno estudado ainda pode ser muito explorado, até atingirmos uma teoria sólida sobre seu funcionamento. O estudo das energias envolvidas e testes de outros parâmetros são itens que acrescentarão no entendimento dos mecanismos responsáveis pelo fenômeno.
- Ainda do ponto de vista do código, o uso de rotinas de cálculo em C/C++ ou mesmo paralelizadas trariam um grande ganho na velocidade de processamento simulação.
- Um experimento em laboratório está sendo pensado para tentarmos detectar o comportamento do material estudado em um sistema real.

Referências

- 1 DURAN, J. **Sands, Powders, and Grains**. New York, NY: Springer New York, 2000. v. 49. 6221 p. (Partially Ordered Systems, 0). ISBN 978-1-4612-6790-4. Citado 3 vezes nas páginas 1, 3 e 29.
- 2 REICKS, A.; Myers, T., M. **Bulk Material Handling by Conveyor Belt 7**. [S.l.: s.n.], 2004. 166 p. ISBN 9780873352604. Citado na página 1.
- 3 ASSOCIATION, C. E. M. **Belt Conveyors for Bulk Materials**. [S.l.]: Conveyor Equipment Manufacturers Association, 2006. 69–73 p. ISSN 0032082X. ISBN 0873352483. Citado 5 vezes nas páginas 1, 6, 7, 10 e 34.
- 4 ALLEN, M.; TILDESLEY, D. **Computer simulation of liquids**. New York: Oxford University Press, 1987. ISBN 0198553757. Citado 5 vezes nas páginas 1, 18, 21, 23 e 25.
- 5 AC-TEK. **AC-Tek - Newton discrete Element Modeling Software**. <http://www.demsoftware.net/>. Citado na página 1.
- 6 ESSS. **Rocky DEM**. <http://www.rocky-dem.com>. Citado na página 1.
- 7 TAVARES, A. M.; FARIA, A. A. Estudo do aumento espontâneo na velocidade de partículas em transportadores de correia. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 4, p. 1–7. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 13.
- 8 ATMAN, A. P. F. et al. Sensitivity of the stress response function to packing preparation. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 17, n. 24, p. S2391–S2403, 2005. ISSN 0953-8984. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 5.
- 9 ATMAN, A. P. F.; CLAUDIN, P.; COMBE, G. Departure from elasticity in granular layers: Investigation of a crossover overload force. **Computer Physics Communications**, Elsevier B.V., v. 180, n. 4, p. 612–615, 2009. ISSN 00104655. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 5.
- 10 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, oct 1996. ISSN 0034-6861. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 4.
- 11 JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. Physics of the Granular State. **Science**, v. 255, n. 5051, p. 1523–1531, mar 1992. ISSN 0036-8075. Citado na página 3.
- 12 JOHANNESK. **Pile of sand quartz mix with rock**. <https://www.dreamstime.com/stock-image-pile-sand-quartz-mix-rock-image21254151>. Citado na página 4.
- 13 MUTHUSWAMY, M.; TORDESILLAS, A. How do interparticle contact friction, packing density and degree of polydispersity affect force propagation in particulate assemblies? **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2006, n. 09, p. P09003–P09003, sep 2006. ISSN 1742-5468. Citado na página 5.

- 14 MERELIM, C. F. M. **Simulação de materiais granulares**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2008. Citado na página 5.
- 15 TECNOMETAL, G. **Grupo Tecnometal**. <http://www.tecnometal.com.br>. Citado na página 7.
- 16 AGUIRRE, M. A.; De Schant, R.; GÉMINARD, J. C. Granular flow through an aperture: Influence of the packing fraction. **Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, v. 90, n. 1, p. 1–7, 2014. ISSN 15502376. Citado na página 8.
- 17 JENIKE; JOHANSON. **Jenike and Johanson**. <http://jenike.com>. Citado na página 9.
- 18 HASTIE, D.; GRIMA, A.; WYPYCH, P. Modelling and design of complete conveyor transfers. **2nd Annual Conveyors in Mining 2008**, p. 20, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 11.
- 19 HASTIE, D. B.; WYPYCH, P. W. Conveyor Trajectory Discharge Angles. p. 8–17, 2007. Citado na página 10.
- 20 MONTGOMERY, D. **Design and Analysis of Experiments**. [S.l.]: Wiley, 2008. ISBN 978-0471316497. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 17.
- 21 MARTINS, G. H. B. **Simulação de materiais granulares**. Dissertação (Mestrado) — Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 19, 23 e 26.