



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

SIMULAÇÃO DE MATERIAIS GRANULARES: UMA ABORDAGEM TRIDIMENSIONAL

DENISE LEMOS CARDOSO

Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria
CEFET-MG

BELO HORIZONTE
FEVEREIRO DE 2023

DENISE LEMOS CARDOSO

**SIMULAÇÃO DE MATERIAIS GRANULARES:
UMA ABORDAGEM TRIDIMENSIONAL**

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 a 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
CEFET-MG

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
BELO HORIZONTE
FEVEREIRO DE 2023

C268s Cardoso, Denise Lemos
Simulação de materiais granulares: uma abordagem tridimensional / Denise Lemos Cardoso. – 2023.
62 f.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Materiais granulares – Simulação – Teses. 2. Blender (Programa de computador) – Teses. 3. Estrutura molecular – Teses. 4. Métodos de elementos discretos – Teses. I. Faria, Allbens Atman Picardi. II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título.

CDD 004.0151



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO CURSO DE MESTRADO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

“SIMULAÇÃO DE MATERIAIS GRANULARES: UMA ABORDAGEM TRIDIMENSIONAL”

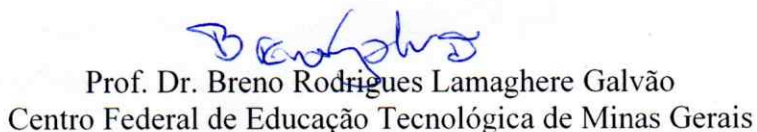
Dissertação de Mestrado apresentada por **Denise Lemos Cardoso**, em 10 de fevereiro de 2023, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:



Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

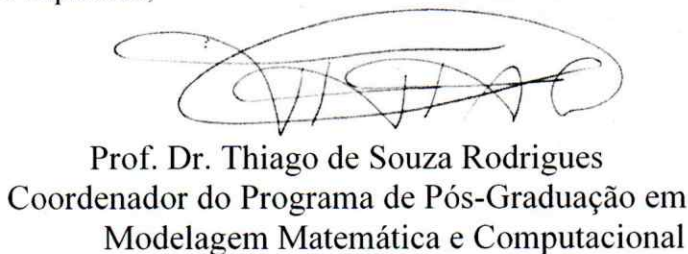


Prof. Dr. Felipe Galvão Rafael Magalhães
Universidade Federal de Minas Gerais



Prof. Dr. Breno Rodrigues Lamaghère Galvão
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida a impressão,



Prof. Dr. Thiago de Souza Rodrigues
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional

Agradecimentos

Antes de tudo, à minha mãe, por sempre me apoiar. Ao Gui por todo o suporte. À Alexandra, por acreditar em um ambiente científico sem barreiras. Aos meus irmãos e amigos, por toda ajuda e incentivo.

Ao CEFET, lugar que passei grande parte da minha vida e que me fez crescer como pessoa e desenvolver profissionalmente.

Aos professores e servidores de todo CEFET, que se dedicam em transmitir o conhecimento aos alunos da melhor forma possível.

Ao meu orientador, Professor Allbens, que me orientou e auxiliou no desenvolvimento deste.

E a todos que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação, o meu muito obrigada.

Resumo

A partir do aumento de capacidade de processamento computacional e desenvolvimento de programas de modelagem e renderização tridimensional, aliados aos conceitos físicos e matemáticos relacionados a materiais granulares, melhorias em ferramentas de simulação estão alavancando conhecimento nesta área. Neste trabalho é executado um processo de simulação tridimensional de materiais granulares utilizando o programa Blender™ com um código adicional de cálculos para interação entre grãos (chamado *Molecular Script Addon*) e consequente análise de resultados. Foi desenvolvido um código em Python agregado ao programa para a montagem inicial dos experimentos, visualização da simulação e extração dos resultados, baseado no Método dos Elementos Discretos. Na simulação executada, inicialmente 2000 grãos são depositados em um funil, em seguida os grãos fluem através da abertura inferior e por fim, são depositados em uma superfície plana. Foi testada a sensibilidade dos resultados em relação à variação dos seguintes parâmetros: ângulo de inclinação das paredes do funil, atrito entre os grãos e posição de acomodação inicial dos grãos no funil (para verificar a repetibilidade das amostras). Para avaliação dos resultados foram medidas características físicas e estruturais, tais como, o tempo de escoamento total em função do ângulo de inclinação das paredes do funil e atrito entre grãos, o ângulo de repouso da pilha formada, a forma da pilha em vista superior e o mapa de velocidade do fluxo de grãos em função do tempo. Como resultado, foi possível verificar a funcionalidade e a repetibilidade das simulações utilizando o Blender™. O resultado dos experimentos apresentaram uma correlação direta entre o tempo total de fluxo dos grãos, o coeficiente de atrito e o ângulo de inclinação das paredes do funil.

Palavras-chave: Simulação de Materiais Granulares. Blender. Molecular Script. Método dos Elementos Discretos.

Abstract

Based on the increased computational processing capacity and the development of three-dimensional modeling and rendering programs, coupled with physical and mathematical concepts related to granular materials, advancements in simulation tools are driving progress in this field. This study aims to validate and compare the three-dimensional simulation process of granular materials using the open-source software Blender™, along with an additional calculation code for grain interaction known as the *Molecular Script Addon*,[†] and subsequent result analysis. A Python code was developed and integrated into the software to facilitate initial experiment setup, simulation visualization, and result extraction, all based on the Discrete Elements Method. In the simulation performed, initially 2000 grains are deposited in a hopper, then the grains flow through the lower opening and finally, they are deposited on a flat surface. The sensitivity of the results was tested in relation to the variation of the following parameters: angle of inclination of the hopper walls, friction between the grains and initial position of accommodation of the grains in the hopper (to verify the repeatability of the samples). To evaluate the results, some physical and structural characteristics were measured, such as the total flow time as a function of the angle of inclination of the hopper and friction between grains, angle of repose of the pile formed, shape of the pile in top view and velocity map of the grain flow as a function of time. As a result, it was possible to verify the functionality and repeatability of the simulations using Blender™. The results of the experiments showed a correlation between the total flow time of the grains, the coefficient of friction and the angle of inclination of the hopper.

Keywords: Granular Materials Simulation. Blender™. Molecular Script. Discrete Element Method.

Lista de Figuras

Figura 1 – Alguns exemplos de materiais granulares encontrados na indústria, como cascalho, grãos de soja, balas e pílulas. (COMMONS, 2020)	14
Figura 2 – Imagens de 10 amostras de solo com diferentes granulometrias(HRYCIW; OHM; ZHOU, 2015).	15
Figura 3 – Representação de movimentação de um grão (Adaptado) (CAMPELLO, 2018).	16
Figura 4 – Representação do contatos mecânicos entre grãos bidimensionais, onde R é o raio do grão e h é a distância de sobreposição (AL-HASHEMI; AL-AMOUDI, 2018).	16
Figura 5 – Superfície de contato entre dois grãos por colisão com atrito (CAMPELLO, 2018)	17
Figura 6 – Simulação tridimensional em que se deseja medir o ângulo de repouso estático (AL-HASHEMI; AL-AMOUDI, 2018)	17
Figura 7 – Ângulo de repouso de uma pilha bidimensional e representação de formação de pilha de areia em forma de cone (DURAN, 2000)	18
Figura 8 – Interação entre dois discos sob compressão de superfícies. (a) $t = t_0$; (b) $t = t_1 = t_0 + \Delta t$; (c) $t = t_2 = t_0 + 2\Delta t$	20
Figura 9 – Contornos de deformação e distribuição de pressão em 0,12, 0,19, 0,25 e 0,40 s no teste de quebra de barragem (SUN; ZHANG; LIEW, 2020)	21
Figura 10 – Esquema para o método baseado em partículas SPH (LIU et al., 2018).	22
Figura 11 – Representação bidimensional de vizinhança para cálculo de lista de Verlet (DOMÍNGUEZ et al., 2010)	23
Figura 12 – Visualização do Blender™ 2.95	24
Figura 13 – Funil para simulação no Blender™.	25
Figura 14 – Modelo esférico do grão no Blender™.	26
Figura 15 – Plano de base no Blender™.	26
Figura 16 – Elemento gerador de partículas. Todos os grãos do experimentos são gerados em disposição de grade no interior de um paralelepípedo.	27
Figura 17 – Representação das simulações. a) Preparação do experimento. I) Gerador de grãos. II) Funil. III) Superfície de apoio. b) Tempo inicial do experimento. IV) Grãos no interior do funil. c) tempo final do experimento. V) Grãos apoiados na superfície plana.	28
Figura 18 – Método de construção dos experimentos.	29
Figura 19 – Variação do ângulo de inclinação do funil.	29

Figura 20 – Configuração inicial do gerador em função do <i>Seed</i> (parâmetro de repetibilidade do experimento). Vista frontal (<i>a, c, e, g e i</i>) e superior (<i>b, d, f, h e j</i>) das cinco replicações. - Nessas variações apenas a posição inicial de cada grão é alterada.	30
Figura 21 – Método utilizado para medir ângulo da pilha.	32
Figura 22 – Parametrização em nós no Blender™ para alterar cor da superfície dos grãos em função da velocidade.	33
Figura 23 – Variação da cor do grão obtida em função da velocidade.	33
Figura 24 – Testes de interação entre grãos	34
Figura 25 – Testes de interação entre grão e plano. (a) Contato entre grão e superfície. (b) Representação de forças de contato.	35
Figura 26 – Captura de tela do Blender™ representando visualização de esquema testes à esquerda e código de preparo à direita.	35
Figura 27 – Testes de gerador e fluxo em funil	36
Figura 28 – Testes variação da cor em função da velocidade	37
Figura 29 – Variação da cor em função da velocidade parametrizada	37
Figura 30 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do atrito entre grãos, referentes ao grupo 1	39
Figura 31 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos, referentes ao grupo 2	40
Figura 32 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos, referentes ao grupo 3	41
Figura 33 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos, referentes ao grupo 4	42
Figura 34 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos, referentes ao grupo 5	43
Figura 35 – Gráfico de vazão média dos grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos	44
Figura 36 – Mapa de velocidades para subdivisões de tempo. a) t_0 , momento antes de iniciar o fluxo. b) t_1 , momento após iniciar o fluxo e antes dos grãos tocarem a superfície. c) t_2 , momento do fluxo em que os grãos entram em contato com a superfície. d) t_3 , momento de redução de vazão. e) t_4 , momento final do fluxo. f) t_f , repouso dos grãos na superfície após o fluxo.	45
Figura 37 – Pilhas em vista frontal referentes aos experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c para <i>Seed</i> = 0	46
Figura 38 – Pilhas em vista frontal referentes aos experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c para <i>Seed</i> = 0	47
Figura 39 – Pilhas em vista superior referentes aos experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c para <i>Seed</i> = 0	48

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Parâmetros principais do experimento.	32
Tabela 2 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 1	39
Tabela 3 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 2	40
Tabela 4 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 3	41
Tabela 5 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 4	42
Tabela 6 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 5	43
Tabela 7 – Tabela de tempo total médio de queda e vazão média para cada parâmetro .	44
Tabela 8 – Valores de ângulos para experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c	47

Sumário

1 – Introdução	10
1.1 Objetivos	12
1.1.1 Objetivo Geral	12
1.1.2 Objetivos Específicos	12
1.2 Organização do trabalho	12
2 – Trabalhos Relacionados	13
3 – Fundamentação Teórica	14
3.1 Materiais granulares	14
3.2 Interação entre grãos	15
3.3 Ângulo de repouso	17
3.4 Métodos Numéricos	18
3.4.1 Método dos elementos discretos (DEM)	18
3.4.2 Hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH)	21
3.4.3 Método de integração Verlet	22
4 – Metodologia	24
4.1 Preparação de experimentos e Simulação: Materiais utilizados	24
4.2 Preparação de experimentos e Simulação: Método utilizado	29
4.2.1 Parametrização das propriedades dos elementos	29
4.2.2 Parametrização do gerador inicial de grãos	29
4.2.3 Desenvolvimento do código para a montagem inicial	31
4.2.4 Execução dos experimentos	31
4.2.5 Avaliação do ângulo	32
4.2.6 Avaliação da velocidade	32
5 – Resultados dos Testes	34
5.1 Testes de interação entre grãos	34
5.2 Testes de interação entre grão e elemento estático	34
5.3 Testes do código em Python	35
5.4 Testes de gerador e fluxo em funil	36
5.5 Variação da cor em função da velocidade	36
6 – Resultados dos Experimentos	38
6.1 Avaliação do fluxo de grãos	38
6.1.1 Grupo de experimentos 1 ($Seed = 0$)	39

6.1.2	Grupo de experimentos 2 (<i>Seed</i> = 0,1)	40
6.1.3	Grupo de experimentos 3 (<i>Seed</i> = 0,2)	41
6.1.4	Grupo de experimentos 4 (<i>Seed</i> = 0,3)	42
6.1.5	Grupo de experimentos 5 (<i>Seed</i> = 0,4)	43
6.1.6	Valores médios	44
6.2	Avaliação do mapa de velocidades durante o fluxo	45
6.3	Avaliação do ângulo de repouso da pilha formada	46
6.4	Avaliação da forma da pilha formada em vista superior	48
7	– Discussões	49
7.1	Tempo em função do atrito entre os grãos	49
7.2	Tempo em função do ângulo de inclinação funil	49
7.3	Análise do gráfico médio de tempo por ângulo e coeficiente de atrito	49
7.4	Avaliação do mapa de velocidades durante o fluxo	50
7.5	Avaliação do ângulo de repouso da pilha formada	51
7.6	Avaliação da forma da pilha formada em vista superior	52
7.7	Análise da Dispersão dos Grãos e Formação da Pilha	53
7.8	Limitações do Estudo	54
8	– Conclusão	55
8.1	Sugestão para trabalhos futuros	56
8.1.1	Método de simulação	56
8.1.2	Mapa de velocidades	56
8.1.3	Análise estrutural da pilha	56
	Referências	57
	Apêndices	60
	APÊNDICE A – Código Gerador	61

1 Introdução

Materiais granulares são observados em inúmeros fenômenos naturais e aplicações humanas. O conhecimento sobre a física desses materiais evoluiu significativamente nas últimas décadas, especialmente com o auxílio de métodos computacionais (CAMPELLO, 2018).

Os materiais granulares possuem várias escalas de comprimento. As leis físicas que governam o comportamento granular se aplicam a objetos cujas dimensões variam entre algumas centenas de microns, como fluxos particulados e montes de areia, até blocos de gelo à deriva nos mares polares (1000 km) ou anéis de Saturno feitos de partículas de gelo com cerca de 1 cm de largura distribuídas em uma faixa de aproximadamente 1 km de espessura (DURAN, 2000). Outros exemplos de sistemas granulares muito comuns são empilhamentos de minérios, cereais, componentes microeletrônicos, ou mesmo cápsulas e pílulas da indústrias farmacêutica e química (CAMPELLO, 2018).

Diferentemente de outros materiais, o estudo de materiais granulares revela particularidades que resultam em um comportamento altamente variável em diferentes circunstâncias. Assim, a previsão do comportamento desses materiais não é uma tarefa trivial. A necessidade de desenvolver uma teoria abrangente para os materiais granulares, permitindo uma previsão cada vez mais confiável de seu comportamento, é um desafio que requer atenção nos próximos anos. Esse objetivo, paralelo ao estudo de materiais sólidos e fluidos, exige uma colaboração interdisciplinar intensa e abrangente (POSCHER, 2005).

A simulação computacional emerge como um dos métodos de investigação teórica mais relevantes para materiais granulares. Graças a avanços tecnológicos significativos na computação, simulações que eram antes impossíveis agora se tornaram viáveis. Dado que ainda não existe uma teoria abrangente que garanta previsões precisas para o comportamento dos materiais granulares, as simulações numéricas desempenham um papel crucial na previsão e otimização de processos. Nesse contexto, elas podem complementar e até mesmo substituir em parte os gastos com experimentos (POSCHER, 2005).

Essencialmente, as abordagens existentes para modelagem de materiais granulares podem ser classificadas em duas categorias: abordagem a um nível macroscópico (*Finite Element Method* - FEM) e a abordagem discreta a nível microscópico (*Discrete Element Method* - DEM). Na abordagem macroscópica, o comportamento é descrito por equações de balanço de massa e momento, por exemplo, como usado no modelo de fluidos, aliados a relações constitutivas e com condições iniciais e de contorno. Essa abordagem é preferida na modelagem de processos e na pesquisa aplicada devido à sua conveniência computacional (ELTAWAHNI; YU, 2019).

Por outro lado, a abordagem discreta baseia-se na análise do movimento de partículas individuais usando o Método dos Elementos Discretos. Esse método considera um número finito de partículas discretas que interagem por meio de forças de contato, com cada partícula obedecendo às equações de movimento de Newton (ELTAWAHNI; YU, 2019). Além disso, a

parametrização vetorial é adotada para descrever a rotação dos grãos nessa abordagem, permitindo representar as rotações de maneira semelhante aos deslocamentos, ou seja, por meio de vetores (CAMPELLO, 2018).

Existem dois principais métodos de elementos discretos: a Dinâmica Molecular (DM) e a Dinâmica de Contatos (DC). A DM é o método mais conhecido e amplamente utilizado para simulações de materiais granulares. Sendo um método tradicional, foi introduzido por Cundall e Strack em 1979 para calcular o contato entre grãos. Descreve o comportamento granular por meio de discos ou esferas, baseando-se em um esquema numérico explícito para as interações entre entidades. A dinâmica molecular compreende dois estágios: cálculo das forças de contato e, posteriormente, cálculo do movimento das partículas por meio da integração numérica das equações de movimento (ZHU et al., 2008).

Nesse contexto, o conceito de dinâmica molecular será empregado para simular matematicamente sistemas granulares de maneira eficaz e ilustrativa. Para esse propósito, o programa de código aberto Blender™, desenvolvido por BLENDER-FOUNDATION (2002), será utilizado. O Blender™ nativamente possui ferramentas de simulação, como dinâmica de corpo rígido e simulação de fluidos. Além disso, permite a expansão por meio de complementos da comunidade de forma aberta e colaborativa. Neste trabalho, será empregado o complemento *Molecular Script Addon*, desenvolvido por Jean-Francois Gallant em 2013 (BLENDER-FOUNDATION, 2002).

Esta dissertação tem como foco a validação da simulação tridimensional de materiais granulares, utilizando o programa Blender™ em conjunto com o complemento *Molecular Script Addon*. O experimento consiste na passagem de grãos através de um funil, com avaliação da vazão granular, velocidade dos grãos, forma e ângulo de repouso formado no empilhamento dos grãos.

A abordagem deste estudo assemelha-se à tese de Magalhães de 2018, intitulada *A study on granular hopper flow via discrete element method computational simulations* (MAGALHAES, 2018). Essa tese investiga o fluxo de materiais granulares em um funil por meio de simulações computacionais utilizando o método de elementos discretos, e serviu como motivação para o desenvolvimento deste trabalho.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

Aplicar o processo de simulação tridimensional de materiais granulares utilizando o programa Blender™ com um código complementar de cálculos para interação entre partículas ou grãos (*Molecular Script Addon* desenvolvido por Gallant em 2013) e validar a viabilidade de utilização do Blender™ como ferramenta de simulação granular tridimensional.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Desenvolvimento de código em Python para montagem do experimento;
- Utilização do programa Blender™ para exibição do experimento;
- Utilização do código complementar *Molecular Script Addon* para cálculo da interação entre os grãos;
- Execução da simulação com variação no ângulo de inclinação da parede do funil e variação do atrito;
- Medição das seguintes características físicas e estruturais:
 - Mapa de velocidade em função do tempo;
 - Ângulo de pilha formada;
 - Tempo de escoamento total.

1.2 Organização do trabalho

Este trabalho está segmentado em 8 capítulos, [Introdução](#), [Trabalhos Relacionados](#), [Fundamentação Teórica](#), [Metodologia](#), [Resultados dos Testes](#), [Resultados dos Experimentos](#), [Discussões](#) e [Conclusões](#).

No capítulo de [Trabalhos Relacionados](#) será apresentado o estado da arte da simulação de materiais granulares, contemplando artigos publicados a respeito do tema. Em [Fundamentação Teórica](#) estão apresentados os referenciais a respeito da Dinâmica Molecular e simulação tridimensional.

Na [Metodologia](#) estão descritas as etapas dos experimentos e a metodologia de cálculos e simulação. Em [Resultados dos Testes](#) e [Resultados dos Experimentos](#), estão apresentados os resultados obtidos referente aos testes executados e aos resultados específicos dos experimentos. Em [Discussões](#) estão comentados os resultados obtidos.

Em [Conclusões](#) se encontram todas as informações que se podem obter como resultado deste trabalho. Por fim a [Sugestões de Trabalhos Futuros](#) são apresentadas, contemplando possibilidades e variações de estudos que complementam este.

2 Trabalhos Relacionados

Este capítulo apresenta uma revisão dos trabalhos e artigos relacionados ao tema de simulação de materiais granulares, com foco em abordagens metodológicas e aplicações específicas.

Alguns estudos se concentram na aplicação do Método dos Elementos Discretos (DEM). Kuang ([KUANG; ZHOU; YU, 2020](#)) revisa o desenvolvimento e aplicação do DEM aliado à Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD-DEM) para transporte pneumático, com foco em regimes de fluxo e interações partículas-tubo. Por outro lado, Li ([LI et al., 2020](#)) aplica uma abordagem com base em grãos (GB-FDEM) para avaliar processos de fraturamento em rochas graníticas, explorando a micro-heterogeneidade dessas estruturas.

Atman e Claudin ([ATMAN; CLAUDIN, 2005](#)) exploram a dispersão de tensões mecânicas em materiais granulares, utilizando simulações de dinâmica molecular para analisar o comportamento de camadas de grãos sob tensões pontuais. Esse estudo complementa a investigação de Magalhães ([MAGALHAES, 2018](#)), que foca no fluxo de grãos em funis cônicos pelo Método de Elementos Discretos, destacando as diferenças de velocidade ao longo do eixo do funil.

Outros trabalhos investigam o comportamento de materiais granulares em diferentes contextos. Fazekas ([FAZEKAS; KERTÉSZ; WOLF, 2005](#)) analisa pilhas granulares bidimensionais formadas por partículas magnetizadas, observando a relação entre o ângulo de repouso e a rugosidade da superfície. Em outro estudo, Hanel ([HÄNEL; LANTERMANN, 2005](#)) propõe um modelo de simulação tridimensional para o transporte e deposição de partículas em geometrias complexas, utilizando um método de Monte-Carlo.

Estudos recentes, como o de Fernengel ([FERNENGEL; HINRICHSSEN, 2021](#)), utilizam softwares como LIGGGHTS® e Blender™ para investigar o empacotamento de partículas esféricas, evidenciando a influência de parâmetros como a altura do recipiente e as propriedades dos materiais. Tavares ([TAVARES, 2018](#)), por sua vez, aplica simulações de dinâmica molecular para analisar o comportamento de grãos em transportadores de correia, destacando o impacto da altura das partículas na velocidade de saída.

Por fim, Weinhart ([WEINHART et al., 2020](#)) apresenta o MercuryDPM®, um código para simulações de partículas discretas que abrange desde interações de contato até forças de longo alcance, oferecendo uma ferramenta versátil para estudos de materiais granulares.

Ao revisar esses trabalhos, é possível observar uma convergência nas metodologias aplicadas, com ênfase na modelagem precisa e na validação dos resultados experimentais. Este estudo se apoia nessa base teórica, utilizando o Método dos Elementos Discretos em conjunto com técnicas de simulação tridimensional para aprofundar o entendimento sobre o comportamento de materiais granulares em situações controladas.

3 Fundamentação Teórica

Neste capítulo são apresentados os conceitos necessários para o desenvolvimento da simulação tridimensional de materiais granulares, experimentos e validações. São apresentados com mais detalhes os materiais granulares, os parâmetros importantes durante uma interação entre grãos, o Método de Elementos Discretos, a Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas e do ângulo de repouso.

3.1 Materiais granulares

Materiais granulares estão presentes na vida do ser humano diariamente. Muitos dos materiais que nos cercam são definidos como granulares. É possível encontrar exemplos significantes na indústria, tais como, em indústrias mineradoras, alimentícias e farmacêuticas (CAMPELLO, 2018). A Figura 1 apresenta alguns destes casos, respectivamente, minérios para construção civil, grãos naturais para comercialização, alimentos industrializados e produção de remédios pela indústria farmacêutica.

Figura 1 – Alguns exemplos de materiais granulares encontrados na indústria, como cascalho, grãos de soja, balas e pílulas. (COMMONS, 2020)

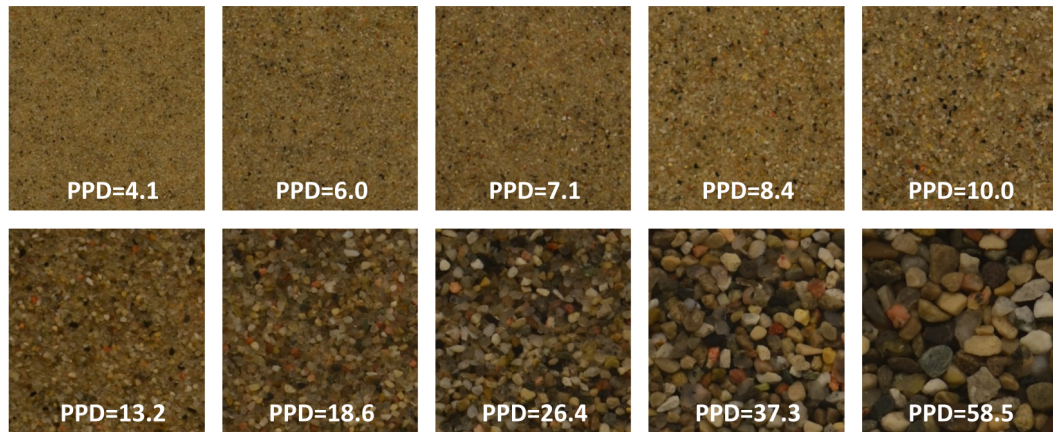


Um material granular é composto de sólidos discretos que estão em contato entre si na maior parte do tempo. Isso exclui especificamente objetos como sistemas fluidizados e suspensões, por exemplo. Um parâmetro conhecido como conteúdo sólido fracionário de um sistema granular é definido como a razão entre a densidade volumétrica do granular e a densidade intrínseca do constituinte sólido (DURAN, 2000).

Partículas menores que $100\mu\text{m}$ de diâmetro são consideradas pó. Em uma definição mais detalhada: pós granulares (de $10\mu\text{m}$ a $100\mu\text{m}$), pós superfinos (de $1\mu\text{m}$ a $10\mu\text{m}$) e pós hiperfinos (de $0,1\mu\text{m}$ a $1\mu\text{m}$). Um material granular é composto por grãos com tamanhos que variam de 100 a $3000\mu\text{m}$. Um sólido quebrado é um material granular no qual a maioria das partículas são maiores do que 3 mm. Os agregados usados para fazer concretos comuns se enquadram nessa categoria, assim como os deslizamentos de rocha (DURAN, 2000).

A Figura 2 apresenta um exemplo de material granular com diferentes granulometrias. Esta figura é referente a um estudo de granulometria ótica, a unidade de medida de tamanho de grão utilizada neste estudo é a PPD (pixels por diâmetro médio de partícula). Foi utilizado pelo autor um sistema de câmera e lente capaz em uma resolução de 36-37 pixels/mm. Os PPDs das areias mostradas na Figura 2 variam de 4,1 a 58,5 (HRYCIW; OHM; ZHOU, 2015).

Figura 2 – Imagens de 10 amostras de solo com diferentes granulometrias(HRYCIW; OHM; ZHOU, 2015).

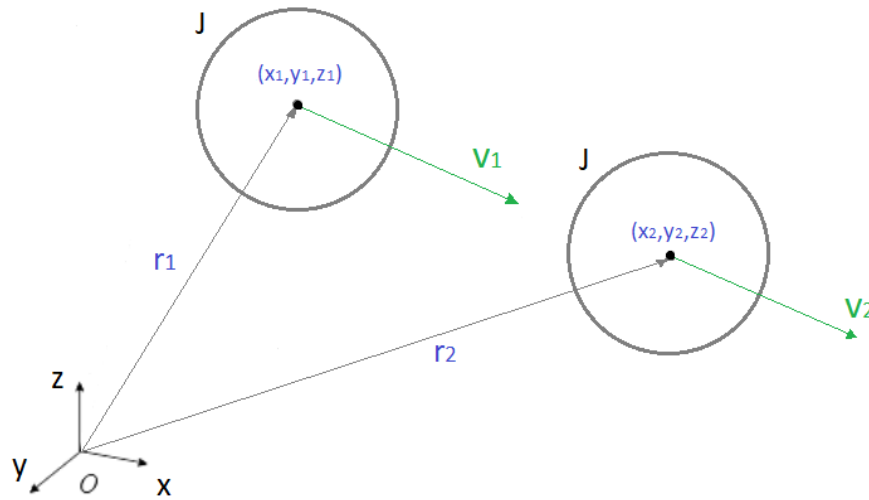


3.2 Interação entre grãos

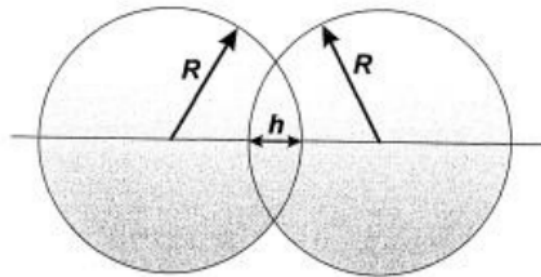
Pressupõe-se em modelos do tipo DEM que o comportamento mecânico de uma grande quantidade de unidades sólidas pode ser entendido a partir do movimento individual desses elementos. Nesse contexto, um elemento discreto é um grão. Presume-se que um grão tenha uma forma esférica, em que a matéria é homogeneamente distribuída. A forma e a dimensão de um grão, portanto, são consideradas constantes no tempo (CAMPELLO, 2018).

A influência de outros grãos e do meio no movimento de um grão é representada através de forças. Estas podem ser: forças dos campos externos, de arrasto, de campo próximo, de adesão, de contato e forças de atrito em colisões. Embora todas essas forças influenciem nos grãos ao mesmo tempo, as forças de repulsão nos contatos e as formas de atrito são as forças dominantes, se tratando de materiais granulares secos. O movimento de grãos pode ser descrito pelas equações de movimento, um conjunto de grãos, portanto, forma um sistema dinâmico não-linear (CAMPELLO, 2018). A Figura 3 representa um exemplo de movimentação de um único grão (J) da posição $r_1 (x_1, y_1, z_1)$ para a posição $r_2 (x_2, y_2, z_2)$.

Figura 3 – Representação de movimentação de um grão (Adaptado) (CAMPELLO, 2018).

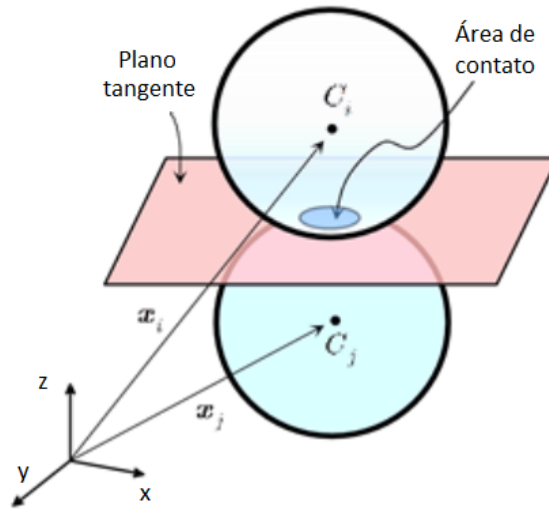


Quando dois grãos entram em contato, tomando como base a segunda lei de Newton, surge entre eles componentes de forças na direção do contato no sentido contrário. No entanto, os grãos, ao entrarem em contato, sofrem uma deformação elástica. Sendo assim as forças referentes aos contatos mecânicos entre grãos são descritas com um esquema baseado em sobreposição, como pode ser visualizado na Figura 4, uma representação do contatos mecânicos entre grãos bidimensionais, onde R é o raio do grão e h é a distância de sobreposição. Assim, eles são tomados como uma função da quantidade de sobreposição entre o par de contato (CAMPELLO, 2018; AL-HASHEMI; AL-AMOUDI, 2018).

Figura 4 – Representação do contatos mecânicos entre grãos bidimensionais, onde R é o raio do grão e h é a distância de sobreposição (AL-HASHEMI; AL-AMOUDI, 2018).

As forças devidas ao atrito são forças tangenciais que surgem dos contatos ou colisões entre os grãos. Eles têm origem na rugosidade das superfícies dos pares em contato, que podem oferecer resistência ao movimento relativo entre eles na direção tangencial. A Figura 5 mostra a superfície de contato entre dois grãos (C_1 e C_2) por colisão com atrito. Essa área de contato criada que permite o cálculo do atrito entre os grãos (CAMPELLO, 2018).

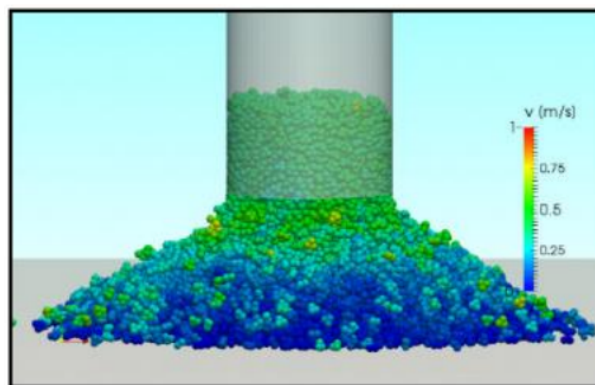
Figura 5 – Superfície de contato entre dois grãos por colisão com atrito (CAMPELLO, 2018)



3.3 Ângulo de repouso

A definição do ângulo de repouso está associada às características específicas dos grãos. Fisicamente, o ângulo de repouso pode ser definido como o ângulo que diferencia as transições entre as fases do material granular. Uma das definições mais usadas do ângulo de repouso é o declive mais acentuado do material não confinado, medido a partir do plano horizontal no qual o material pode ser empilhado sem desmoronamento. O ângulo de repouso está ligado diretamente ao tamanho, forma e coeficiente de atrito entre os grãos. A Figura 6 apresenta um exemplo de simulação tridimensional em que se deseja medir o ângulo de repouso estático (AL-HASHEMI; AL-AMOUDI, 2018).

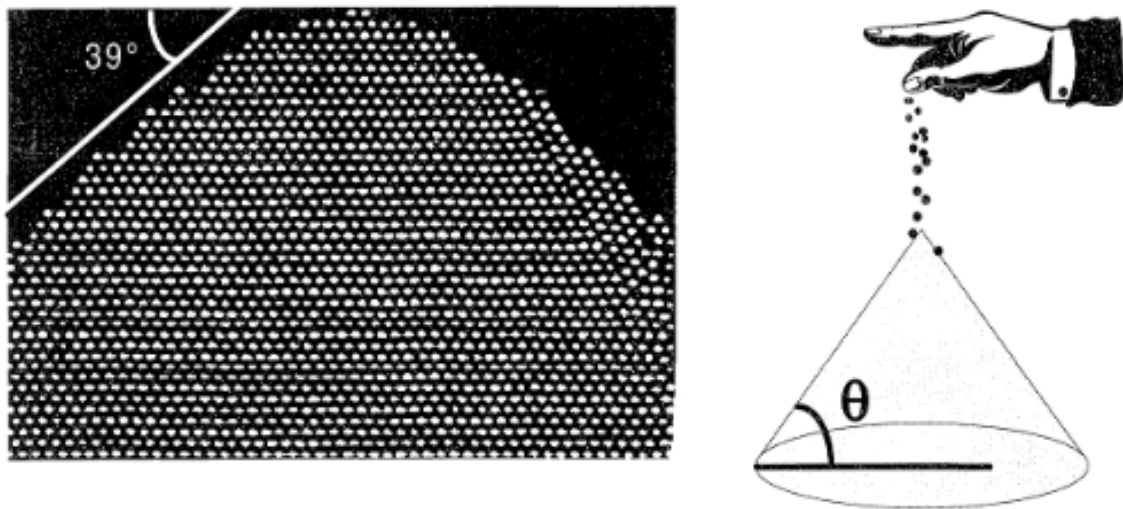
Figura 6 – Simulação tridimensional em que se deseja medir o ângulo de repouso estático (AL-HASHEMI; AL-AMOUDI, 2018)



Assim que a inclinação ultrapassa um determinado valor (ângulo de repouso máximo), o empilhamento desaba até que a inclinação volte a um ângulo específico. Esse ângulo é conhecido como ângulo de repouso mínimo. Charles de Coulomb foi a primeira pessoa a fazer observações quantitativas sobre o ângulo de repouso (COULOMB, 1773). Seu modelo se baseia na ideia de que duas camadas paralelas de um material granular seco não podem deslizar uma em relação à

outra, a menos que sua inclinação θ seja pelo menos igual a $\tan^{-1}(\mu)$, onde μ é o coeficiente característico das forças de atrito envolvidas (DURAN, 2000).

Figura 7 – Ângulo de repouso de uma pilha bidimensional e representação de formação de pilha de areia em forma de cone (DURAN, 2000)



Todos os outros parâmetros sendo os mesmos, o ângulo de repouso depende da forma da partícula; partículas esféricas não formarão pilhas se não houver forças para impedi-las de rolar (MATUTTIS; CHEN, 2014). Dessa forma, é esperado encontrar correlação entre o ângulo de repouso e o atrito entre grãos. Neste estudo será observado o quanto o atrito entre os grãos influencia o empilhamento. O ângulo de repouso será utilizado para comparação entre as pilhas de materiais granulares nas simulações realizadas no Blender™.

A rugosidade e o coeficiente de atrito da superfície plana podem influenciar o ângulo de repouso. Se o deslizamento entre os grãos e o solo for facilmente percebido, o deslizamento macroscópico desempenhará um papel na formação da pilha, caso contrário, a pilha é formada basicamente por avalanches na superfície (MATUTTIS; CHEN, 2014).

3.4 Métodos Numéricos

3.4.1 Método dos elementos discretos (DEM)

O Método dos Elementos Discretos é uma abordagem para modelar sistemas de grãos. Ele fornece uma maneira de simular sistemas de um número arbitrário de partículas, modelando cada partícula e suas interações com o ambiente, individualmente. Dependendo da densidade do sistema granular, duas abordagens diferentes são aplicáveis (KRUGGEL-EMDEN et al., 2007).

As abordagens existentes para modelagem de materiais granulares podem ser classificadas em duas categorias: contínua (nível macroscópico) e discreta (nível microscópico). Na abordagem

macroscópica, o comportamento é descrito por equações de balanço, por exemplo, massa e momento como usado no modelo de fluidos, aliadas à relações constitutivas e condições iniciais e de contorno. Devido à sua conveniência computacional, esse método é mais utilizado em pesquisas. O método dos elementos discretos considera um número finito de partículas interagindo por meio de forças de contato e sem contato (ELTAWAHNI; YU, 2019).

O DEM é um modelo numérico capaz de descrever o comportamento mecânico de sistemas granulares compostos de discos (2D) e esferas (3D). O método é baseado no uso de um esquema numérico explícito no qual a interação das partículas é monitorada contato por contato e o movimento das partículas modeladas partícula por partícula. Este método abrange uma coleção de modelos em que a maior parte utiliza uma formalização Lagrangiana. Cundall (1979) definiu como método que permite deslocamentos finitos e rotações de corpos discretos, e reconhece novos contatos entre corpos durante os cálculos (CUNDALL; STRACK, 1979).

O método dos elementos discretos é baseado na ideia de que o intervalo de tempo escolhido deve ser tão pequeno que, durante um intervalo de tempo, as perturbações não se propagam além da vizinhança imediata do grão. Então, em todos os momentos, as forças resultantes em qualquer disco são determinadas exclusivamente por sua interação com os grãos com os quais está em contato. Essa característica permite considerar a interação não linear de um grande número de discos sem requisitos excessivos de memória ou a necessidade de um procedimento iterativo (CUNDALL; STRACK, 1979).

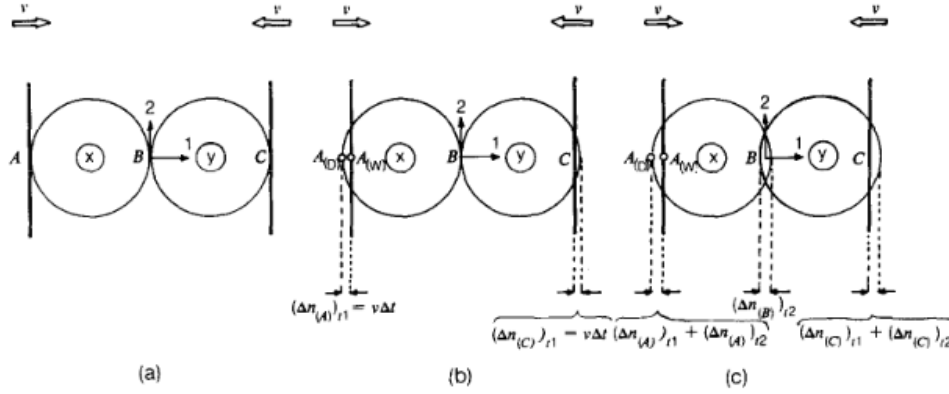
Os cálculos realizados alternam entre a aplicação da segunda lei de Newton (movimento de uma partícula resultante das forças que agem sobre ela) e a lei de Hooke utilizada para encontrar forças de contato no deslocamento. As deformações dos grãos individuais são pequenas em comparação com a deformação de um conjunto granular como um todo. Os grãos podem se sobrepor uns aos outros nos pontos de contato. Este comportamento de sobreposição simula a deformação dos grãos. A magnitude da sobreposição está diretamente relacionada à força de contato (CUNDALL; STRACK, 1979).

Para exemplificar o cálculo em que se baseia este método, Cundall utiliza um exemplo de interação entre dois discos sem massa, cada um em contato com uma superfície horizontal, representado Figura 8. Sendo dois discos em contato, inicialmente com $F = 0$ e $t = 0$ que sofrerem uma aproximação forçada por paredes. Os discos são movimentados um em direção ao outro por uma distância vdt . As sobreposições nos contatos A e C e são de magnitude $\Delta n = v\Delta t$ (CUNDALL; STRACK, 1979).

Os pontos A_D e A_W são pontos do disco e da parede, respectivamente. O contato A é definido como o ponto intermediário entre A_D e A_W . O deslocamento relativo é definido entre A_D e A_W em um intervalo de tempo. Os deslocamentos relativos são usados em para o cálculo das forças de contato. A lei de deslocamento de força incremental é utilizada da seguinte forma (CUNDALL; STRACK, 1979):

$$\Delta F_n = k_n(\Delta n)_{t1} = k_n v \Delta t \quad (1)$$

Figura 8 – Interação entre dois discos sob compressão de superfícies. (a) $t = t_0$; (b) $t = t_1 = t_0 + \Delta t$; (c) $t = t_2 = t_0 + 2\Delta t$



Na qual k , é a rigidez normal e ΔF é o incremento na força normal e Δn se refere à magnitude das sobreposições. Assim, as somas das forças F de x e y para os discos no tempo $t = t_1 = t_0 + \Delta t$ se torna positiva.

$$F_{(x)1} = k_n(\Delta n)_{t1}, F_{(y)1} = -k_n(\Delta n)_{t1} \quad (2)$$

Essas forças são usadas para encontrar novas acelerações usando a segunda lei de Newton. As acelerações encontradas são consideradas constantes ao longo do intervalo de tempo de t_1 .

Sendo que $\ddot{x}_{(x)1}$ e $\ddot{x}_{(y)1}$ representam as respectivas acelerações dos discos x e y na direção 1 e onde os subscritos (x) e (y) nas massas $m_{(x)}$ e $m_{(y)}$ referem-se aos discos x e y (CUNDALL; STRACK, 1979).

$$\ddot{x}_{(x)1} = \frac{F_{(x)1}}{m_{(x)}}, \ddot{y}_{(y)1} = \frac{F_{(y)1}}{m_{(y)}} \quad (3)$$

As acelerações encontradas são consideradas constantes ao longo do intervalo de um intervalo de tempo, possibilitando que a equação seja integrada para encontrar as velocidades.

Dessa forma, é possível dizer os que discos em contato forçado nas condições citadas apresentam uma força restauradora quando deformado. No caso de partículas esféricas homogêneas do mesmo material, a força de repulsão devido à deformação quando são pressionadas entre si é proporcional à área do disco de deformação, que por sua vez é função do comprimento da sobreposição. Esse é o comprimento da deformação medido na direção que conecta os centros das duas partículas (MAGALHAES, 2018). Para um grão esférico i , com raio R_i na posição r_i , em contato com a partícula j , de raio R_j na posição r_j , o comprimento de sobreposição é $\xi = [(R_i + R_j) - |\vec{r}_{xj} - \vec{r}_{xi}|]$, onde $\xi < 0$ significa que não há contato. A Lei de Hertz (HERTZ, 1882) para a força normal f_n é, então, escrita como:

$$f_n = ER_{ef}^{1/2} \xi^{3/2} \quad (4)$$

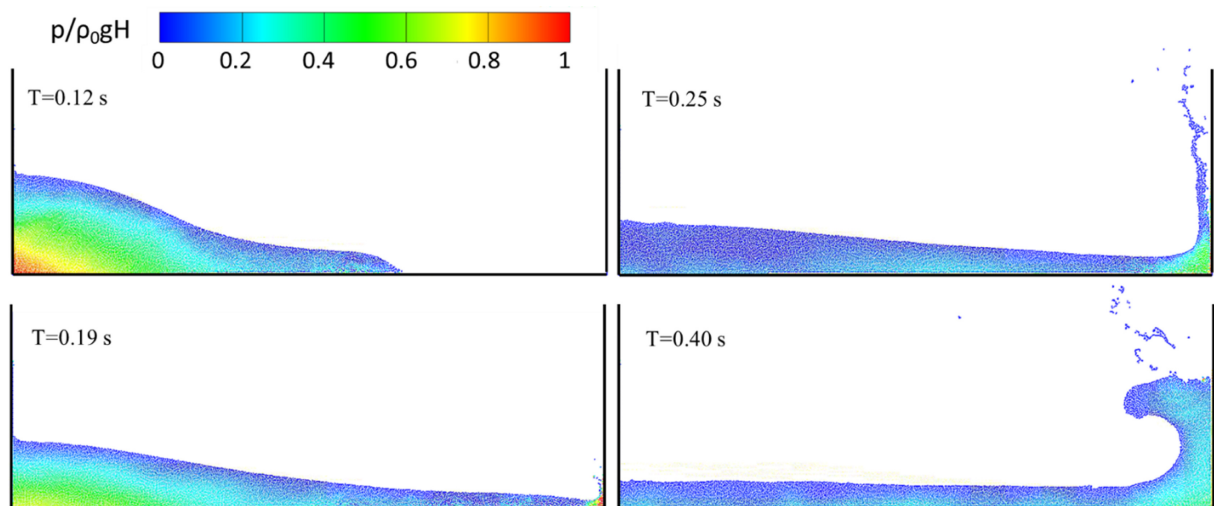
$R_{ef} = (R_i^{-1} + R_j^{-1})^{-1}$ é o raio efetivo e $E = (\frac{2}{3})[\frac{Y}{1-\nu^2}]$ é o coeficiente elástico do material, sendo Y o módulo de Young e ν o coeficiente de Poisson. Com isso, Hertz obteve o expoente 3/2 para esferas em três dimensões.

3.4.2 Hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH)

A Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas, é também conhecida como *Smoothed-particle hydrodynamics* ou SPH. A principal característica do método é o uso de técnicas estatísticas para recuperar expressões analíticas para as variáveis físicas de uma distribuição conhecida de elementos fluidos. As equações de movimento assumem a forma de equações newtonianas para partículas. Este método foi desenvolvido por R. A. Gingold, J. J. Monaghan e L. B. Lucy (GINGOLD; MONAGHAN, 1977).

SPH é um método de partículas sem malha com base na formulação Lagrangiana e tem sido amplamente aplicado em diferentes áreas da engenharia e da ciência. No método SPH, uma partícula representa um volume finito em escala contínua. Isso é bastante semelhante ao método clássico de dinâmica molecular (DM). Assim, é natural generalizar ou estender o SPH para escalas menores, ou acoplar o SPH com a dinâmica molecular para aplicações em escala múltipla. (LIU; LIU, 2010) A Figura 9 mostra um exemplo de aplicação deste método, contornos de deformação e distribuição de pressão em 0,12, 0,19, 0,25 e 0,40 s no teste de quebra de barragem são exemplificados (SUN; ZHANG; LIEW, 2020).

Figura 9 – Contornos de deformação e distribuição de pressão em 0,12, 0,19, 0,25 e 0,40 s no teste de quebra de barragem (SUN; ZHANG; LIEW, 2020)

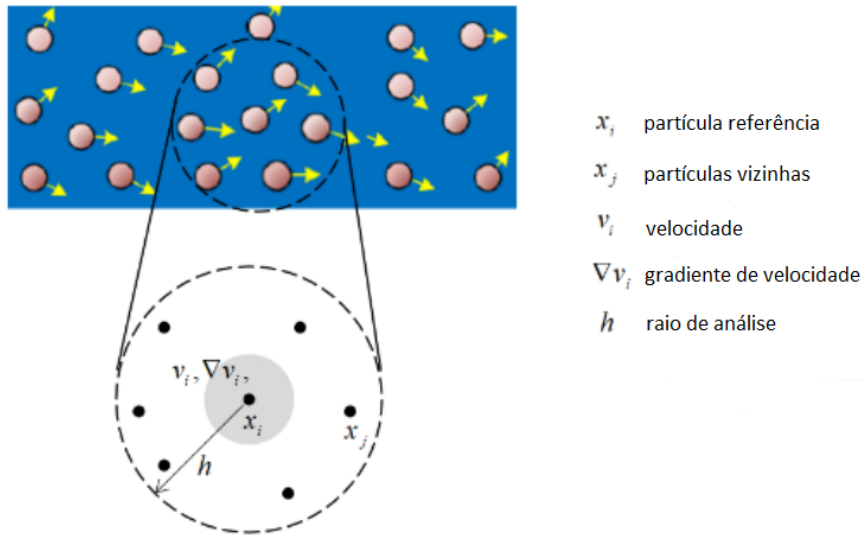


Neste método, é possível obter o histórico de tempo das partículas materiais. É um método de partículas sem grades ou malhas e que permite um tratamento direto de deformações, já que a conectividade entre as partículas é gerada como parte do cálculo e pode mudar com o

tempo (LIU; LIU, 2010). Neste projeto, a força de conexão de elo entre as partículas não será considerada, possibilitando que o sistema se comporte de maneira granular e não como fluido.

A Hidrodinâmica de partículas suavizadas é um método para obter soluções numéricas aproximadas das equações da dinâmica dos fluidos, substituindo o fluido por um conjunto de partículas (GINGOLD; MONAGHAN, 1977). O fluido é considerado composto de partículas móveis que sob influência das partículas vizinhas, como representado na Figura 10 (LIU et al., 2018). As equações de movimento e propriedades dessas partículas são determinadas a partir das equações contínuas da dinâmica dos fluidos por interpolação das partículas. O interpolante pode ser construído usando funções analíticas, e as derivadas espaciais das grandezas interpoladas podem então ser encontradas (MONAGHAN, 2012).

Figura 10 – Esquema para o método baseado em partículas SPH (LIU et al., 2018).



Para este trabalho, as forças de atração entre partículas será nula e as forças de repulsão por contato serão consideradas, evitando o comportamento de fluido e avaliando o comportamento granular.

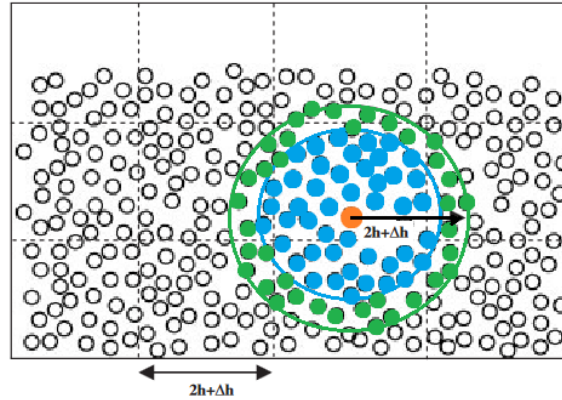
Em cada etapa de simulação do método SPH serão localizadas as posições das partículas vizinhas. Como este cálculo é feito a partir da posição de cada uma das partículas, requer um alto custo de processamento computacional. Para isso será utilizado um método de cálculo que viabiliza a simulação. Para este estudo, o método de Verlet será utilizado (VERLET, 1967).

3.4.3 Método de integração Verlet

O método de integração Verlet é utilizado para integrar as equações de movimento (VERLET, 1967). Por este motivo ele é frequentemente utilizado para auxiliar nos cálculos de dinâmica molecular e simulação de materiais granulares. Para registro das posições e velocidades

calculadas, é montada a lista Verlet, uma estrutura de dados que registra os parâmetros de velocidade e posição dos vizinhos próximos de cada partícula em função do tempo.

Figura 11 – Representação bidimensional de vizinhança para cálculo de lista de Verlet (DOMÍNGUEZ et al., 2010)



Na construção de listas de Verlet, o cálculo é feito a partir da vizinhança de uma partícula (Figura 11). Essa vizinhança possui um raio de $2h + \Delta h$, sendo $h = 2V_{max}Cdt$, onde V_{max} é a velocidade máxima de qualquer partícula do sistema, multiplicada por 2 (pois o caso extremo é quando duas partículas com a velocidade máxima estão se afastando) e C é o número de passos de tempo que a lista será mantida.

Em seguida, é feita a busca por potenciais vizinhos nas células adjacentes. Quando a distância entre uma partícula de interesse e outra é menor que o raio da vizinhança, essa partícula é adicionada à lista de vizinhos potenciais. A lista de vizinhos em potencial é carregada e mantida durante as etapas de tempo seguintes. Observe que as partículas se movem no tempo, de tal forma que, do conjunto inicial de candidatos, apenas uma porcentagem do total interage a cada intervalo de tempo, e as partículas que interagem podem mudar a cada intervalo de tempo (DOMÍNGUEZ et al., 2010).

4 Metodologia

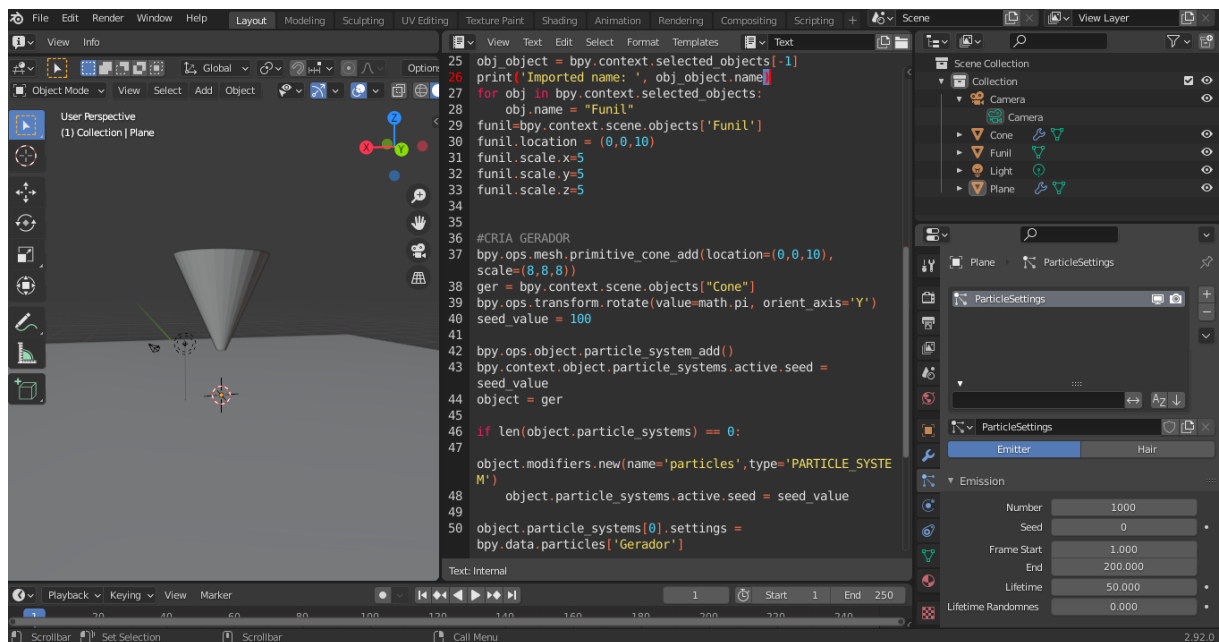
Neste trabalho foi feito o processo de simulação tridimensional de materiais granulares utilizando o programa Blender™ com um complemento de código de cálculos de interação entre grãos, o *Molecular Script Addon*. Este código utiliza do método SPH (Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas) com método de integração de Verlet do Blender™ para os cálculos da simulação.

4.1 Preparação de experimentos e Simulação: Materiais utilizados

- Programa utilizado para simulação: Blender™

Para a realização deste trabalho, foi utilizado o programa de código aberto Blender™ versão 2.95 (Figura 12). Por se tratar de um programa abrangente e de código aberto, e sua utilização ser multifuncional, o Blender™ foi escolhido para a execução dos experimentos deste trabalho, além de integrar códigos em Python com visualização e modelagens tridimensionais.

Figura 12 – Visualização do Blender™ 2.95



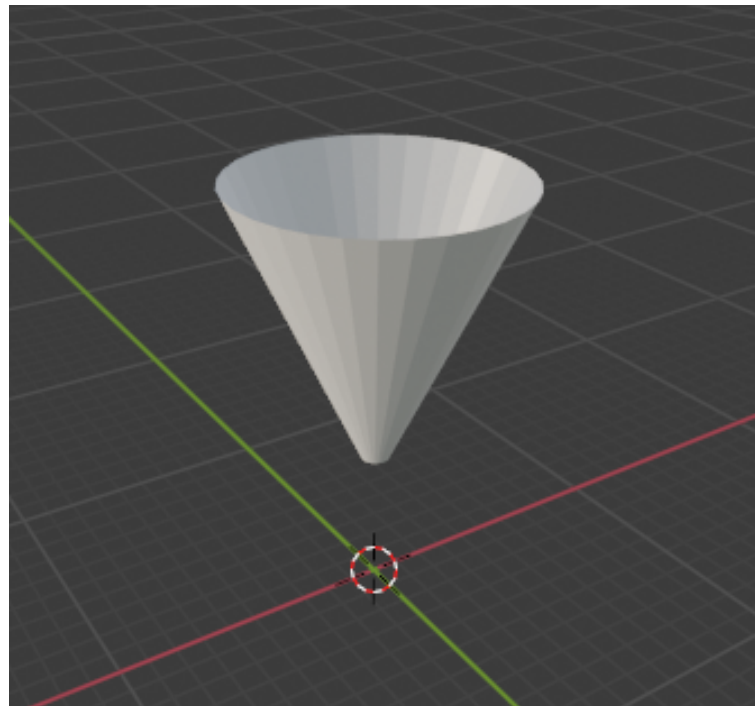
- *Molecular Script Addon*

O Blender™ permite a adição de códigos secundários que executam funções adicionais. No caso deste trabalho, será utilizado o código *Molecular Script Addon* para cálculos e validação. Este código foi desenvolvido por Jean-Francois Gallant em 2013 e pode ser baixado e instalado diretamente pelo Blender™. Por se tratar de um programa de código aberto, está em constante atualização e melhorias. Este código utiliza o método determinístico Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH) que calcula, a interação entre as partículas de forma paralela, fazendo com que colidam entre si e com outros objetos do meio (BLENDER-FOUNDATION, 2002).

- Funil

O funil (Figura 13) é o aparato onde os grãos serão direcionados para que seja analisada a velocidade de escoamento. Os grãos deverão passar por um diâmetro de saída estreito, como mostra a representação abaixo. Para o experimento, serão utilizados 3 funis com ângulos de inclinação da parede distintos (30° , 45° e 60°).

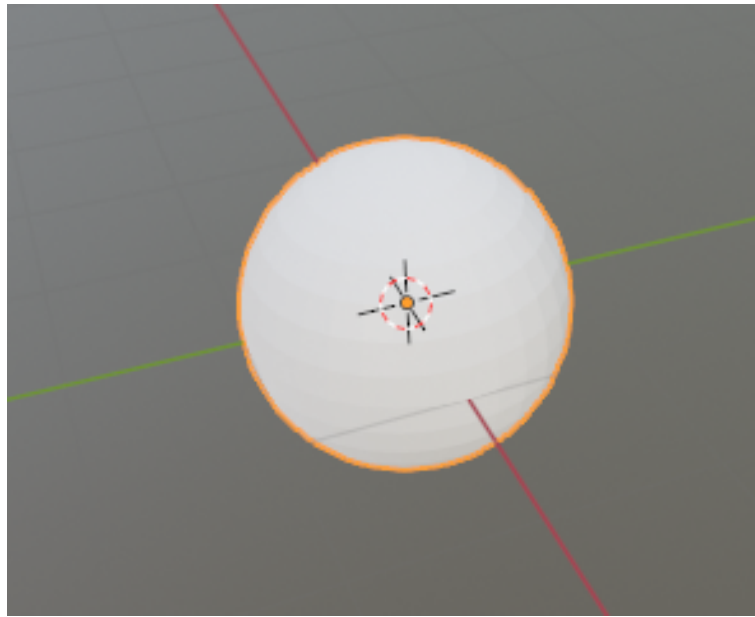
Figura 13 – Funil para simulação no Blender™.



- Grão

Os grãos a serem utilizados no experimento são baseados em uma esfera modelo. A esfera modelo do grão (Figura 14) foi configurada com coeficiente de atrito entre grãos de $0,2\mu$, $0,4\mu$, $0,6\mu$ e $0,8\mu$, raio de $0,1m$ e densidade de $2g/cm^3$. Para o Blender™, a forma de representação desta esfera é baseada em elementos finitos, mas o cálculo de interação entre elas é baseado em método de elementos discretos.

Figura 14 – Modelo esférico do grão no Blender™.



- Plano

Um substrato plano (Figura 15) é o aparato de apoio que suporta a pilha de grãos formada. As dimensões do plano são $10m \times 10m$, com coeficiente de atrito de 1 em relação ao material dos grãos.

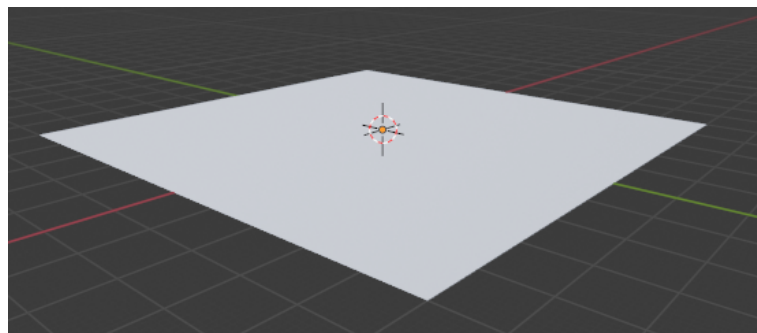
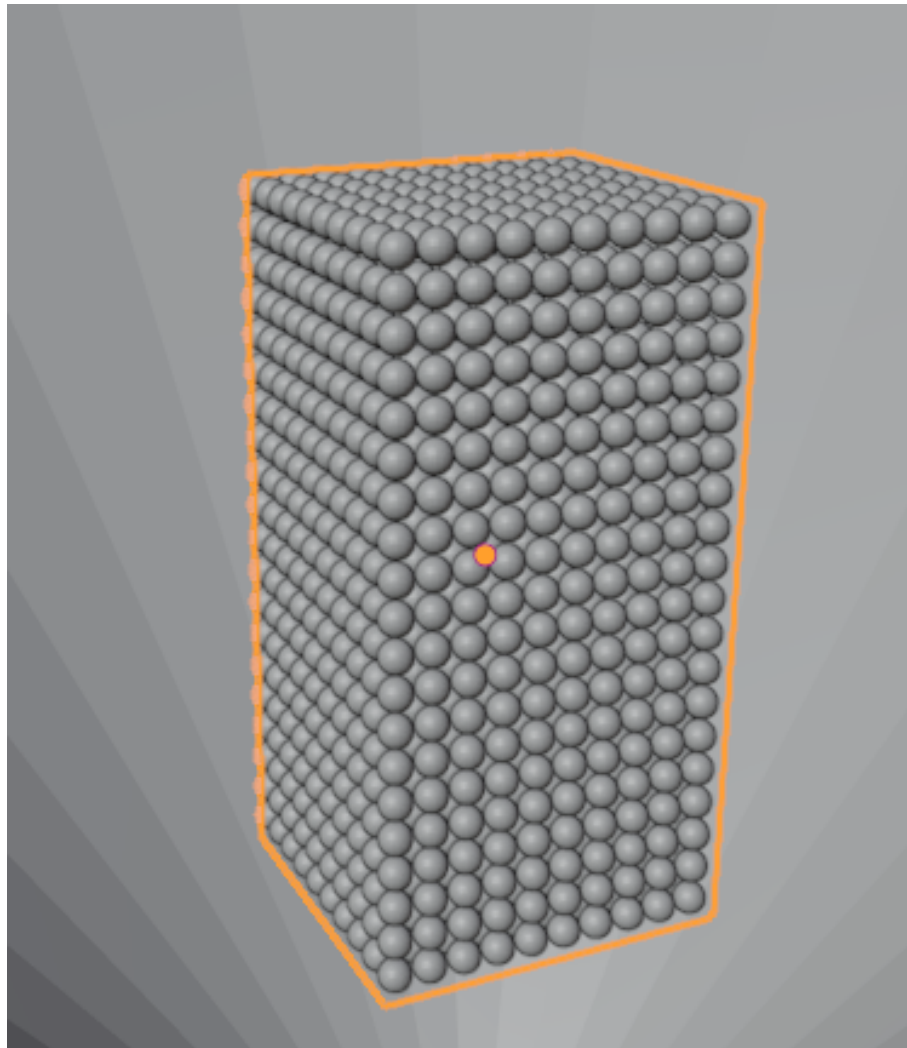


Figura 15 – Plano de base no Blender™.

- Gerador

Para utilizar as partículas como grãos no Blender™, é necessário gerá-las no interior de um sólido. Como gerador dessas partículas foi utilizado um elemento em formato de paralelepípedo, representado na [Figura 16](#). As partículas são geradas em disposição de grade e possuem as configurações e propriedades do grão modelo.

Figura 16 – Elemento gerador de partículas. Todos os grãos do experimentos são gerados em disposição de grade no interior de um paralelepípedo.



- Representação dos elementos de simulação

Na [Figura 17](#) é apresentado um modelo esquemático do sistema a ser simulado. Onde em 'a' ocorre a preparação do experimento. I representa o gerador de grãos na forma de paralelepípedo acima do funil (II) e da superfície de apoio (III). Em 'b' é representado o tempo inicial do experimento. Onde os grãos foram depositados no funil, que até então, com a abertura inferior fechada. IV representa os grãos no interior do funil.

Em seguida é feita a abertura do funil, seguido pelo fluxo dos grãos e deposição na superfície. Em 'c' é representado o tempo final do experimento, onde já ocorreu todo o fluxo dos grãos. V representa os grãos apoiados na superfície plana.

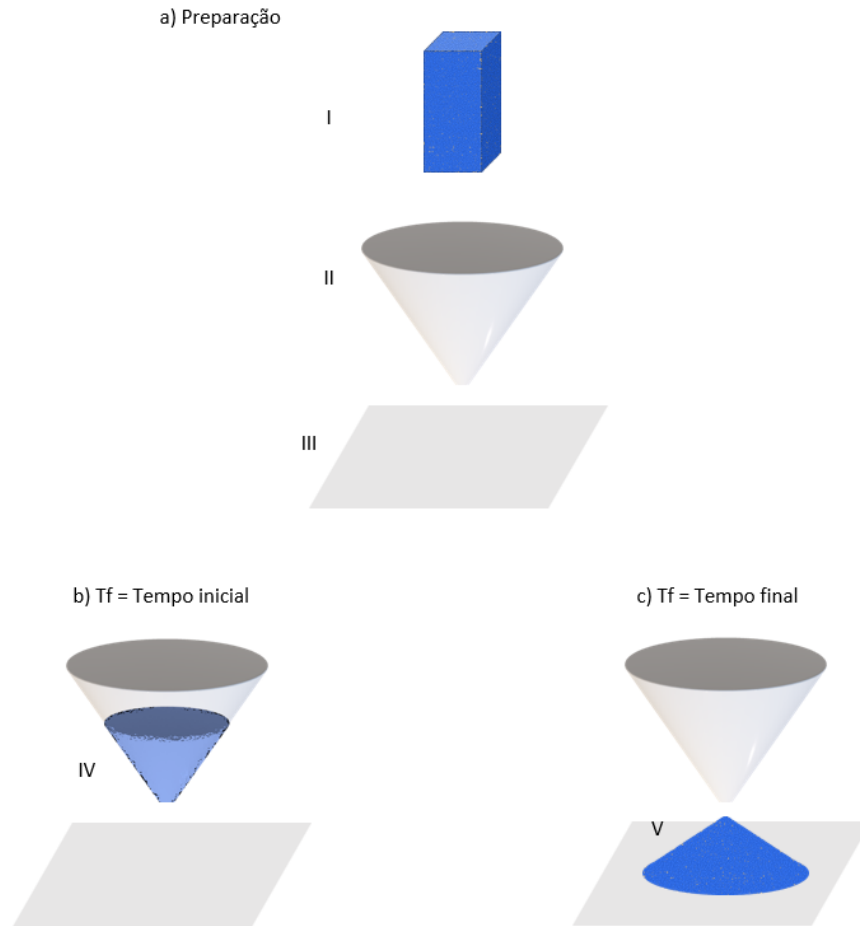


Figura 17 – Representação das simulações. a) Preparação do experimento. I) Gerador de grãos. II) Funil. III) Superfície de apoio. b) Tempo inicial do experimento. IV) Grãos no interior do funil. c) tempo final do experimento. V) Grãos apoiados na superfície plana.

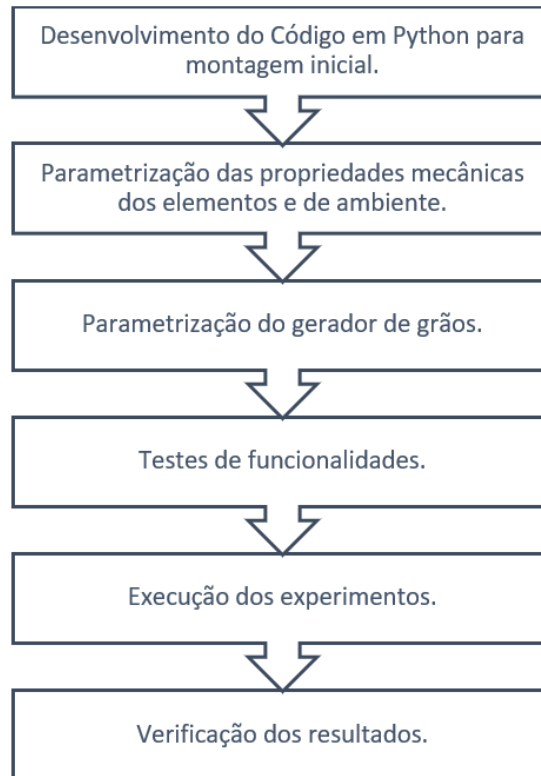
Para todos os experimentos, o gerador de grãos foi montado em formato de paralelepípedo com dimensões de 10 grãos no eixo x, 10 grãos no eixo y e 20 grãos no eixo z, totalizando 2000 grãos. Para verificar a repetibilidade deste experimento, foi realizado um ajuste no sistema de deposição inicial do gerador. Esse ajuste altera a posição em que os grãos se acomodam inicialmente no funil. Em um gerador de grãos a posição inicial influencia em toda cadeia de interação.

Em todos os 60 experimentos realizados o tempo de fluxo dos grãos, desde a saída do primeiro grão do funil, até a passagem por inteiro do último grão, foi registrado em forma de tabela e plotado como gráfico.

4.2 Preparação de experimentos e Simulação: Método utilizado

A realização do experimento consiste em 6 passos representados na [Figura 18](#) abaixo e descritos a seguir.

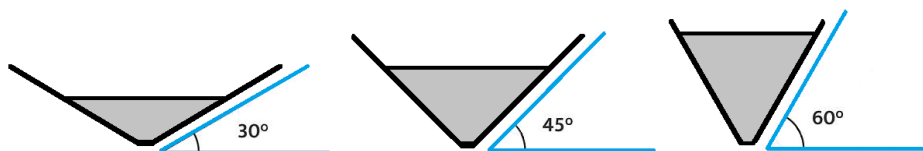
Figura 18 – Método de construção dos experimentos.



4.2.1 Parametrização das propriedades dos elementos

Foi avaliada a alteração do ângulo da parede do funil ([Figura 19](#)) em três valores distintos (30° , 45° e 60°). Assim como, a alteração do coeficiente de atrito do grão (0,2, 0,4, 0,6 e 0,8).

Figura 19 – Variação do ângulo de inclinação do funil.



4.2.2 Parametrização do gerador inicial de grãos

Os parâmetros iniciais do sistema são cruciais para o andamento da simulação. No Blender™, a parametrização é aplicada diretamente no gerador de grãos. Essa etapa é executada

após a adição da ferramenta que permite calcular a interação entre as elas, para que se comportem como grãos.

Nesta etapa é definida a quantidade de grãos a ser analisada e a forma de empacotamento inicial. Para estes experimentos será considerado o valor fixo de 2000 grãos. Sendo dispostos em uma configuração de grade de 10 grãos no eixo x, 10 no eixo y e 20 no eixo z.

Também foi configurado o ajuste de replicação dos experimentos em 5 valores, variável nomeada de *Seed*, que altera a variação da posição inicial do grão. Essa variação foi utilizada para acarretar em uma cadeia de interações distintas, para as mesmas variáveis do sistema. Consequentemente, configurações iniciais distintas dos grãos no funil. Ou seja, para cada experimento, foram feitas 5 replicações para verificar repetibilidade do experimento.

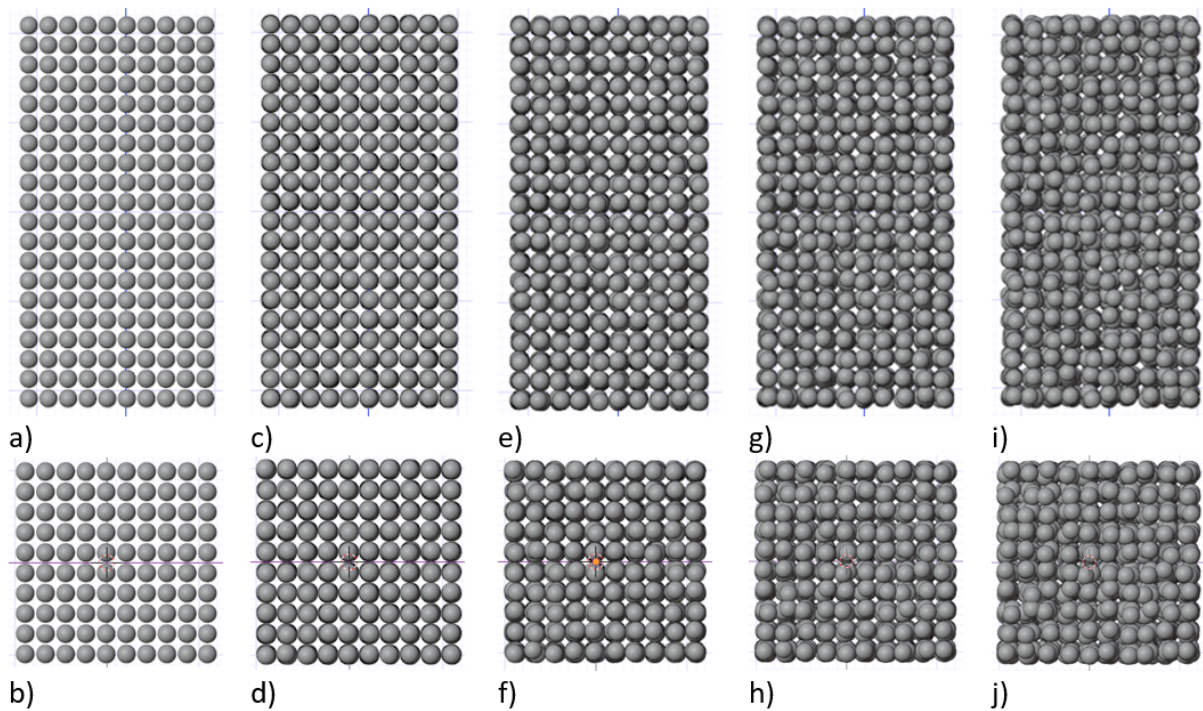


Figura 20 – Configuração inicial do gerador em função do *Seed* (parâmetro de repetibilidade do experimento). Vista frontal (a, c, e, g e i) e superior (b, d, f, h e j) das cinco replicações. - Nessas variações apenas a posição inicial de cada grão é alterada.

Os valores de *Seed* são: 0, 0,1, 0,2, 0,3 e 0,4. As vistas frontais e superiores respectivamente, da configuração inicial considerando este parâmetro são: 0 (Figura 20 a e b), 0,1 (Figura 20 c e d), 0,2 (Figura 20 e e f), 0,3 (Figura 20 g e h) e 0,4 (Figura 20 i e j). Nessas variações apenas a posição inicial do grão é alterada com o intuito apenas de repetir o experimento nas mesmas variáveis.

Um valor de *Seed* igual a 0 significa que todos os grãos não variam a posição inicial e permanecem na formação alinhada do paralelepípedo. Um valor de *Seed* igual 0,1 significa que a partir da posição inicial cada grão sofrerá uma alteração pseudoaleatória de 10%. *Seed* = 0,2 gera uma variação de 20% e assim por diante. Isso influencia nos cálculos de todos os passos

seguintes da simulação. Desse modo, a deposição dos grãos no funil para $Seed = 0$ é diferente da deposição dos grãos para $Seed = 0,1$, mesmo que todos os outros parâmetros sejam iguais.

4.2.3 Desenvolvimento do código para a montagem inicial

A primeira etapa do experimento é o desenvolvimento e execução do código em Python via software Blender™ para a montagem inicial do experimento (vide [Apêndice A](#)). Este código também permite a replicação do experimento para fins de repetibilidade e facilidade na execução de trabalhos futuros.

Na primeira parte do código desenvolvido, é feita a importação das bibliotecas. Em seguida, são definidas as variáveis dos experimentos. Foram pré-definidas 2000 esferas para o gerador de grãos, o valor de atrito, o $Seed$ e o ângulo do funil de acordo com o experimento.

Logo após, é a etapa de limpeza do sistema, para que ao executar o código mais de uma vez os objetos não se sobreponham. Em seguida foi criado e parametrizado o primeiro elemento do sistema, a superfície plana de apoio, determinando sua dimensão, escala e propriedades mecânicas.

O cone é o segundo elemento criado e posicionado para a construção de um tronco de cone. Em seguida é renomeado, rotacionado e as dimensões são fixadas de acordo com o experimento. A tampa e a base do tronco de cone são retiradas para que seja formado o funil. Então, as propriedades mecânicas são configuradas para que funcione como um corpo rígido.

Em seguida é criada uma esfera, para ser utilizada como modelo do grão. A esfera é posicionada fora da área de experimento.

Na segunda parte do código, é iniciada a criação da base utilizada para tampar a saída do funil até que o experimento seja iniciado. Essa base será deletada em $t = 0$, após todos os grãos entrarem em repouso no funil.

Após isso, é criado um paralelepípedo, que em seguida, é utilizado como gerador de grãos. Logo, são ajustadas as características do gerador de acordo com as configurações do experimento. É configurado o tempo de simulação e a forma de deposição por grade.

A velocidade inicial dos grãos é zerada. A variável de rolamento de grãos é desativada. É configurada também, as demais propriedades mecânicas do grão.

Na última etapa do código são configurados os parâmetros de renderização e os parâmetros específicos do código molecular, como: a escala dos grãos, o valor de atrito, o intervalo das iterações e a densidade do material.

4.2.4 Execução dos experimentos

Após todos os parâmetros iniciais serem configurados é feita a execução do experimento diretamente no Blender™. A execução e os passos são registrados nessa etapa. Os 12 experimentos as variáveis utilizadas estão apresentadas na [Tabela 1](#). Cada grupo foi replicado 5 vezes, sendo um total de 60 simulações.

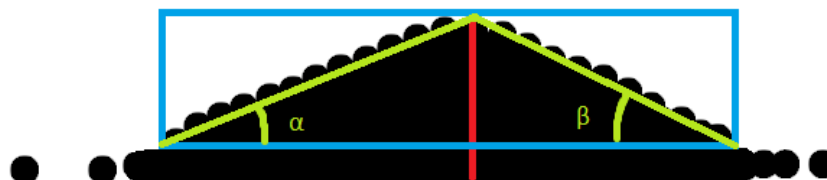
Tabela 1 – Parâmetros principais do experimento.

Experimento	Coef. de atrito	Ângulo do funil
1a	0,2	30°
1b	0,2	45°
1c	0,2	60°
2a	0,4	30°
2b	0,4	45°
2c	0,4	60°
3a	0,6	30°
3b	0,6	45°
3c	0,6	60°
4a	0,8	30°
4b	0,8	45°
4c	0,8	60°

4.2.5 Avaliação do ângulo

Após executado o experimento onde os grãos passam pelo funil, foi realizada a avaliação do ângulo formado na pilha. Esse ângulo foi medido em todas as pilhas formadas para verificar a interferência da variação dos parâmetros no ângulo formado.

Figura 21 – Método utilizado para medir ângulo da pilha.

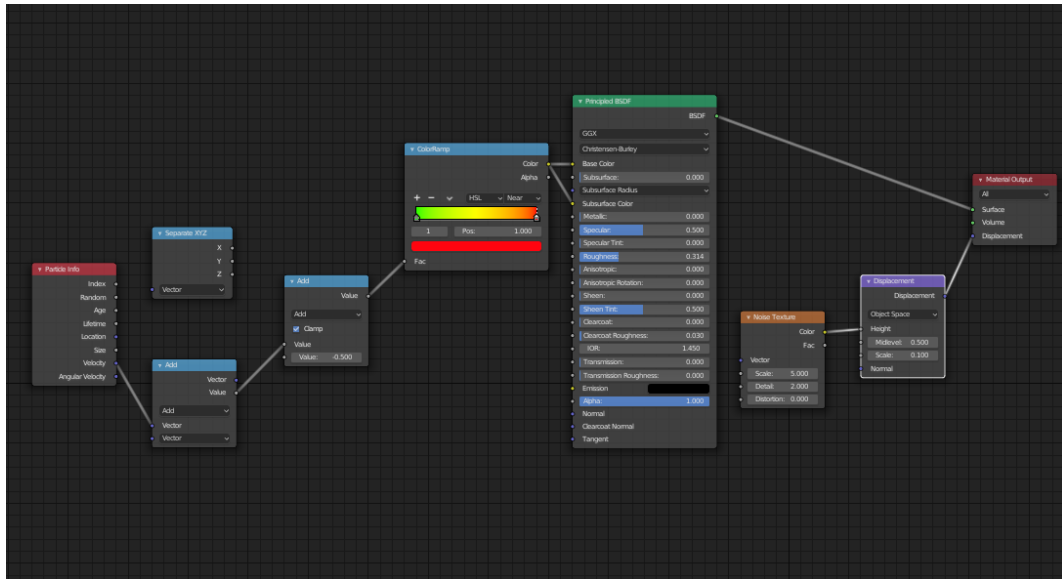


Na [Figura 23](#) é apresentado o método utilizado para medir o ângulo das pilhas. Primeiramente foi feita uma medida vertical do pico da pilha (ponto mais alto da pilha) até a superfície. Em seguida, traçada uma diagonal do grão mais distante da linha vertical da segunda camada de grãos (desconsiderando a primeira camada de grãos) até o pico da pilha. O ângulo foi medido da base até a diagonal α e β . A medida foi feita dos dois lados da pilha na mesma vista, conforme ilustrado na figura.

4.2.6 Avaliação da velocidade

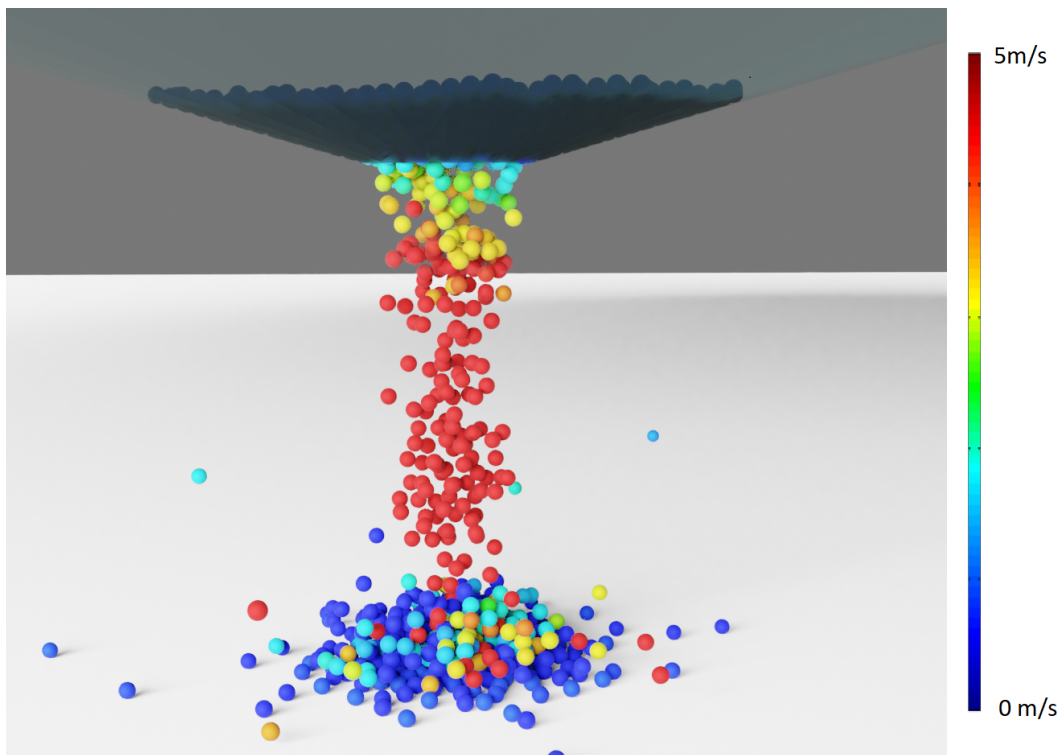
A velocidade será avaliada em um mapa de calor gerado a partir da alteração da cor do grão em função da velocidade.

Figura 22 – Parametrização em nós no Blender™ para alterar cor da superfície dos grãos em função da velocidade.



Essa alteração é feita por combinação de parâmetros no programa, a Figura 22 apresenta o método de nós, utilizado de coloração dos grãos em função de sua velocidade no Blender™. O nó de curva RGB permite correções de cores para a superfície de acordo com o contexto, no caso a velocidade. Na Figura 23 é apresentada a modificação de cores aplicada ao sistema.

Figura 23 – Variação da cor do grão obtida em função da velocidade.



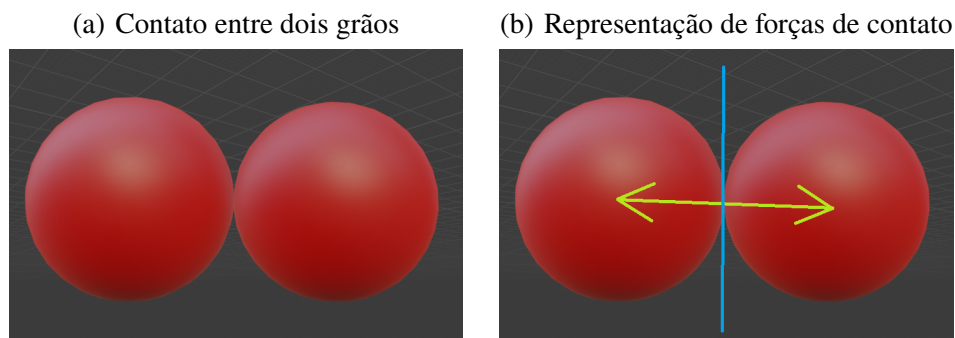
5 Resultados dos Testes

Neste capítulo serão apresentados os resultados dos testes deste projeto, através de visualizações e análises a respeito dos testes da simulação, tais como: verificação de interação entre grãos; interação entre grãos e elementos estáticos, código de montagem inicial do sistema, teste de fluxo em funil e alteração da cor do grão em função da velocidade.

5.1 Testes de interação entre grãos

O primeiro resultado a ser verificado dos testes do programa é a interação entre grãos. Este resultado é importante para verificar se a força de interação no contato entre as esferas está funcionando. Foi verificado que as esferas colidem de forma satisfatória, respeitando as forças de ação e reação. A [Figura 24](#) apresenta o momento de colisão entre duas esferas. Após se colidirem, a força de reação movimenta cada esfera em sentidos opostos, como esperado.

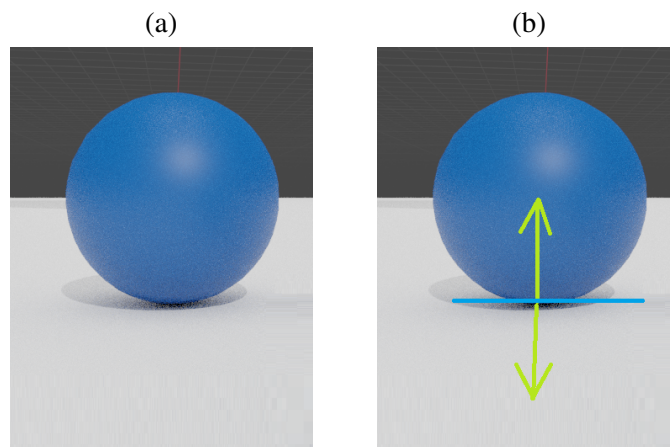
Figura 24 – Testes de interação entre grãos



5.2 Testes de interação entre grão e elemento estático

O teste de interação entre grão e os elementos estáticos é semelhante ao teste de interação grão-grão. Neste caso, a esfera foi colocada em contato com uma superfície plana sob ação da força da gravidade. Como esperado, a esfera realizou contato com a superfície como representada na [Figura 25](#). O resultado foi satisfatório, permitindo o mesmo contato entre o grão e superfície do funil.

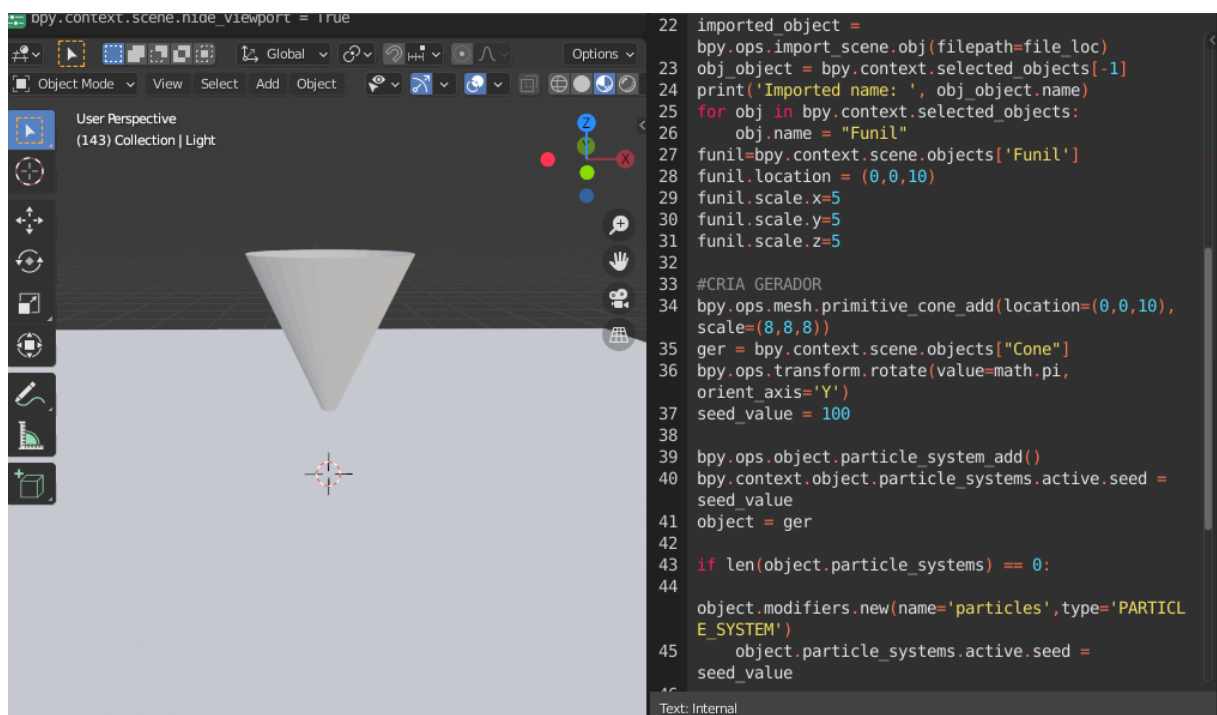
Figura 25 – Testes de interação entre grão e plano. (a) Contato entre grão e superfície. (b) Representação de forças de contato.



5.3 Testes do código em Python

O código inicial (Figura 26) foi testado como ferramenta de criação e parametrização de elementos do sistema representados no ambiente tridimensional do Blender™. O código foi executado de forma satisfatória, montando os experimentos. Todos os elementos foram adicionados e configurados.

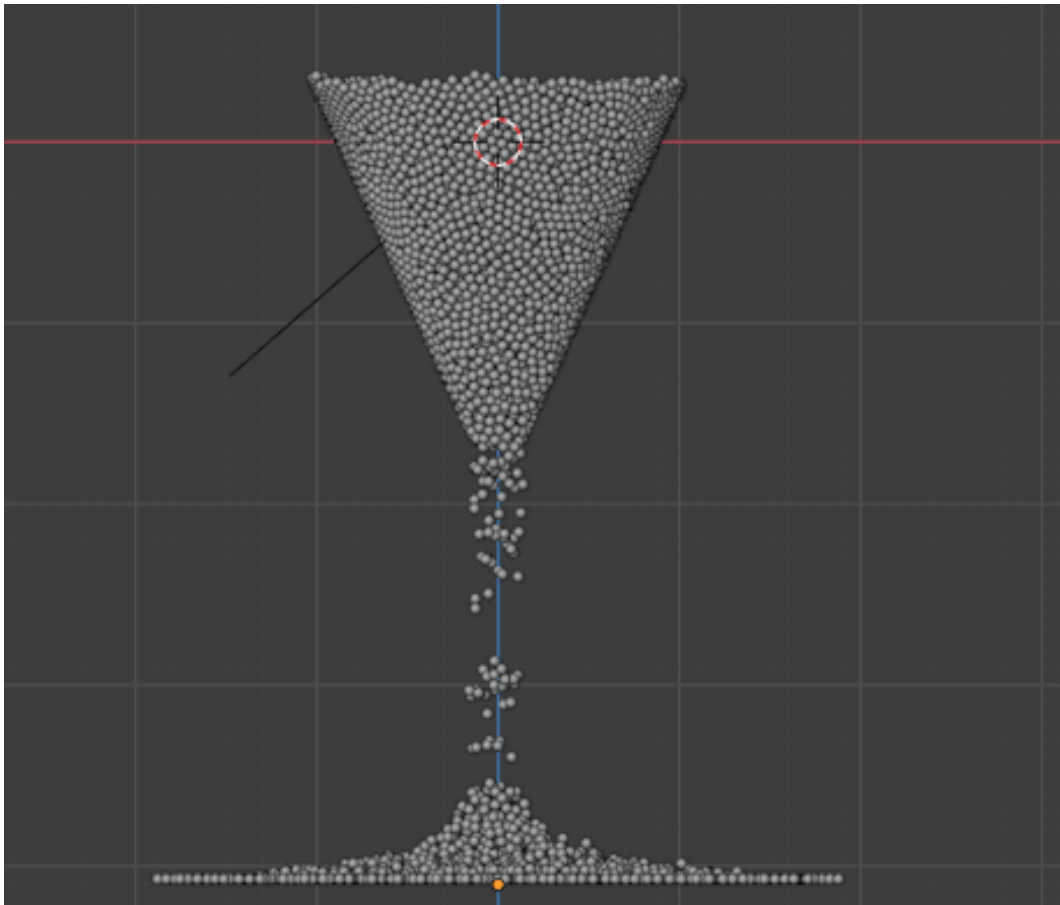
Figura 26 – Captura de tela do Blender™ representando visualização de esquema testes à esquerda e código de preparo à direita.



5.4 Testes de gerador e fluxo em funil

O gerador executou a produção de esferas no interior do cone. As esferas criadas interagiram com o cone de forma satisfatória, permitindo o fluxo de grãos através da abertura inferior, conforme a [Figura 27](#).

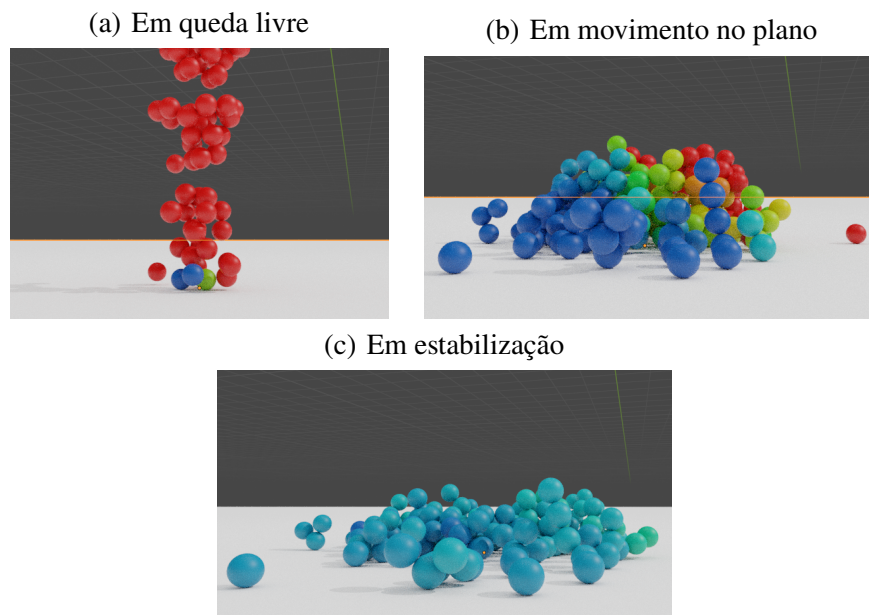
Figura 27 – Testes de gerador e fluxo em funil



5.5 Variação da cor em função da velocidade

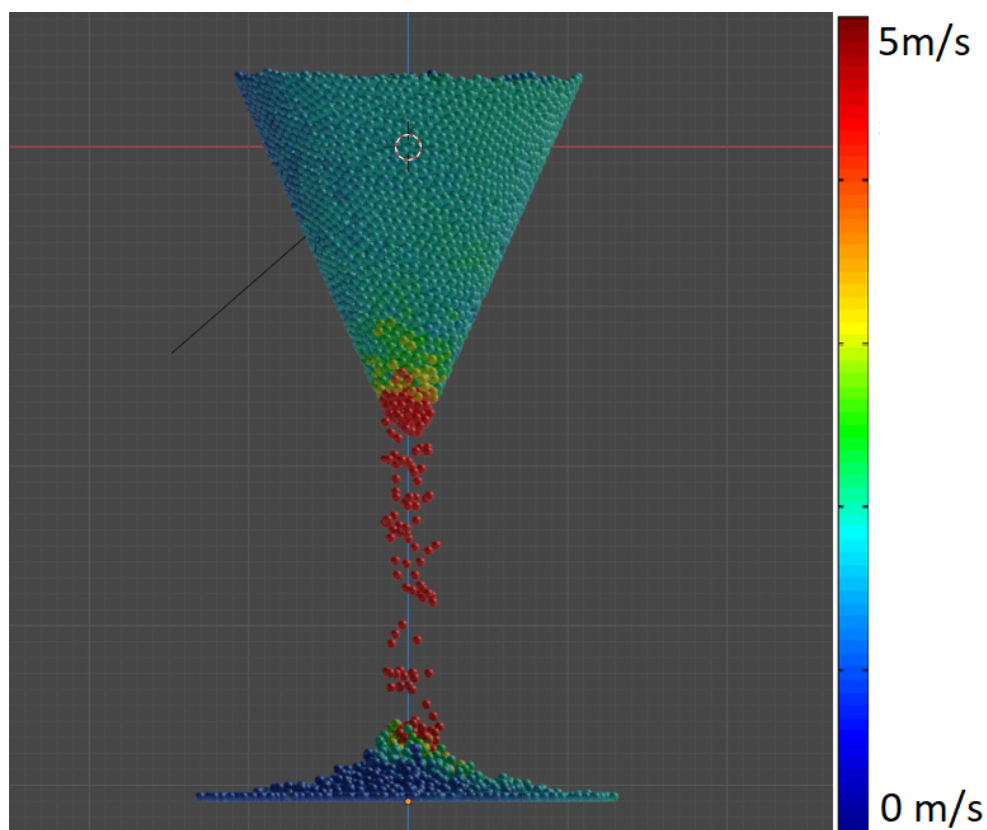
Após configuração e ajuste dos parâmetros de velocidade e cor, no modo de renderização, as esferas apresentaram a superfície com a escala de cor em função da velocidade de cada grão. A [Figura 28](#) apresenta três etapas de testes da alteração da superfície, sendo (a) velocidade em queda livre, (b) velocidade após queda e (c) velocidade dos grãos em estabilização.

Figura 28 – Testes variação da cor em função da velocidade



A Figura 29 apresenta a alteração de cores aplicada no modelo de fluxo do funil em vista frontal. A variação da velocidade é de 0 a 5 m/s, variando respectivamente do espectro azul ao vermelho.

Figura 29 – Variação da cor em função da velocidade parametrizada



6 Resultados dos Experimentos

Neste trabalho foi realizada uma simulação de grãos sob escoamento em funil no programa de computador Blender™. Para estas simulações foram obtidos quatro grupos de resultados:

- Tempo total do fluxo de grãos
- Ângulo da pilha formada
- Forma da pilha formada em vista superior
- Mapa do gradiente de velocidade dos grãos

6.1 Avaliação do fluxo de grãos

Foram obtidos resultados de tempo de escoamento de 2000 grãos em funis com diferentes formatos e calculada a vazão do sistema em grãos por segundo. O experimento possui variação de atrito entre os grãos, variação de ângulo do funil e de disposição inicial das partículas.

A variação da disposição inicial foi feita para verificar repetibilidade dos experimentos, foram utilizadas 5 variações iniciais, sendo assim, 5 grupos de experimentos: Grupo 1 ($Seed = 0$), Grupo 2 ($Seed = 0,1$), Grupo 3 ($Seed = 0,2$), Grupo 4 ($Seed = 0,3$) e Grupo 5 ($Seed = 0,4$). Em cada grupo foram executados 12 experimentos. Ao todo foram executadas 60 simulações.

O resultado dos tempos de fluxo e vazão de cada grupo estão apresentados neste capítulo como tabela e gráfico. Na tabela estão discriminados os nomes dos experimentos, os valores de ângulo do funil, atrito entre os grãos, o tempo de fluxo e a vazão do sistema em grãos por segundo.

Em seguida, foi apresentada uma tabela e um gráfico com os valores médios de todos os grupos para cada parâmetro.

6.1.1 Grupo de experimentos 1 ($Seed = 0$)

Para a primeira variação de posição foi utilizada um $Seed$ de 0. O resultado dos tempos de escoamento e as respectivas vazões para a primeira variação está apresentado na Tabela 2 a seguir.

Grupo de experimentos 1						
Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo	Tempo de queda total	Total de frames	Vazão Q [grãos/s]
1a	2000	0,2	30	00:00:46	1108	43,5
1b	2000	0,2	45	00:00:26	637	76,9
1c	2000	0,2	60	00:00:17	415	117,6
2a	2000	0,4	30	00:01:11	1710	28,2
2b	2000	0,4	45	00:00:43	1034	46,5
2c	2000	0,4	60	00:00:29	689	69,0
3a	2000	0,6	30	00:01:38	2346	20,4
3b	2000	0,6	45	00:01:12	1710	27,8
3c	2000	0,6	60	00:00:40	945	50,0
4a	2000	0,8	30	00:02:30	3607	13,3
4b	2000	0,8	45	00:01:23	2001	24,1
4c	2000	0,8	60	00:00:47	1105	42,6

Tabela 2 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 1

Os valores de vazão para as 2000 esferas referentes ao grupo 1 foram plotados no gráfico da Figura 30 a seguir.

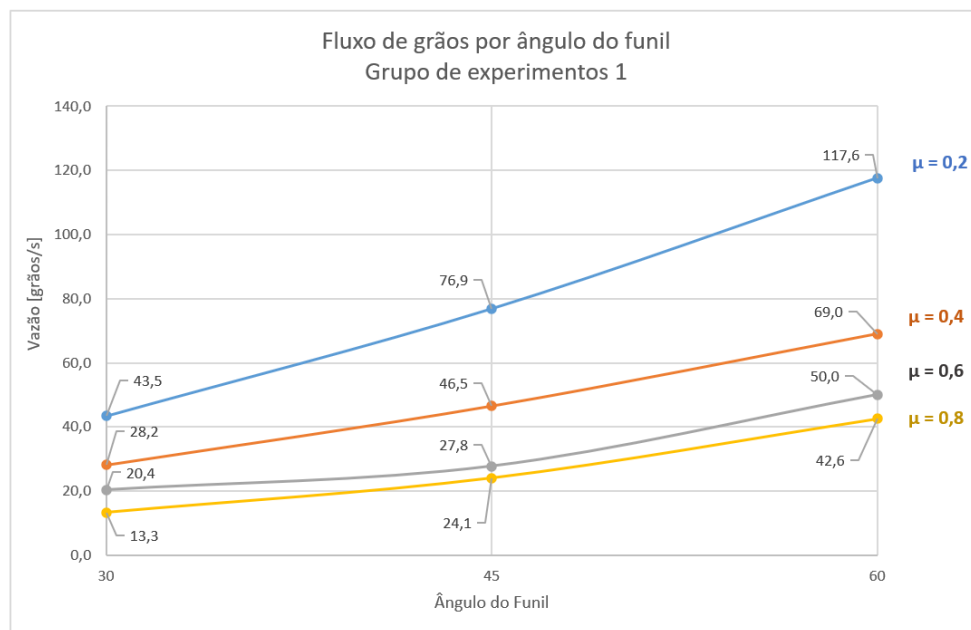


Figura 30 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do atrito entre grãos, referentes ao grupo 1

6.1.2 Grupo de experimentos 2 ($Seed = 0,1$)

Para a segunda variação de posição foi utilizada $Seed$ de 0.1. O resultado dos tempos de escoamento para a primeira variação está apresentado na [Tabela 3](#) a seguir.

Grupo de experimentos 2						
Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo	Tempo de queda total	Total de frames	Vazão Q [grãos/s]
1a	2000	0,2	30	00:00:51	1241	39,2
1b	2000	0,2	45	00:00:27	655	74,1
1c	2000	0,2	60	00:00:18	441	111,1
2a	2000	0,4	30	00:01:19	1887	25,3
2b	2000	0,4	45	00:00:42	1008	47,6
2c	2000	0,4	60	00:00:28	681	71,4
3a	2000	0,6	30	00:01:49	2613	18,3
3b	2000	0,6	45	00:00:58	1396	34,5
3c	2000	0,6	60	00:00:40	942	50,0
4a	2000	0,8	30	00:02:27	3524	13,6
4b	2000	0,8	45	00:01:22	1965	24,4
4c	2000	0,8	60	00:00:50	1193	40,0

Tabela 3 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 2

Os valores tempo de escoamento total, para as 2000 esferas referentes ao grupo 2, foram plotados no gráfico [31](#) a seguir.

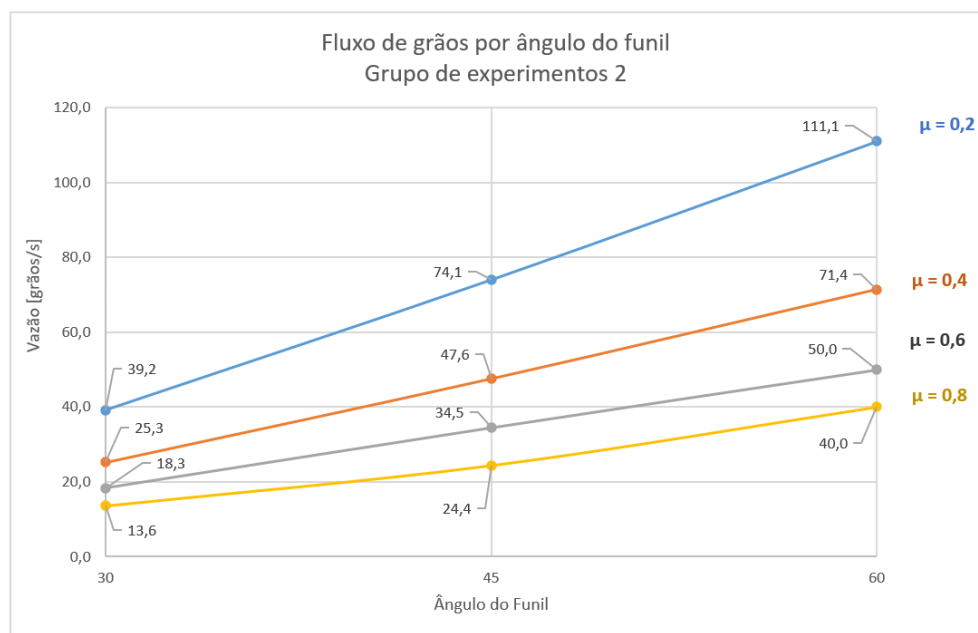


Figura 31 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do coeficiente de atrito entre grãos, referentes ao grupo 2

6.1.3 Grupo de experimentos 3 ($Seed = 0,2$)

Para a terceira variação de posição foi utilizada $Seed$ de 0.2. O resultado dos tempos de escoamento e suas respectivas vazões está apresentado na [Tabela 4](#) a seguir.

Grupo de experimentos 3						
Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo	Tempo de queda total	Total de frames	Vazão Q [grãos/s]
1a	2000	0,2	30	00:00:49	1189	40,8
1b	2000	0,2	45	00:00:27	657	74,1
1c	2000	0,2	60	00:00:18	427	111,1
2a	2000	0,4	30	00:01:17	1858	26,0
2b	2000	0,4	45	00:00:44	1057	45,5
2c	2000	0,4	60	00:00:29	682	69,0
3a	2000	0,6	30	00:02:00	2893	16,7
3b	2000	0,6	45	00:01:05	1557	30,8
3c	2000	0,6	60	00:00:38	909	52,6
4a	2000	0,8	30	00:02:30	3610	13,3
4b	2000	0,8	45	00:01:18	1876	25,6
4c	2000	0,8	60	00:00:47	1128	42,6

Tabela 4 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 3

Os valores tempo de escoamento total, para as 2000 esferas referentes ao grupo 3, foram plotados no gráfico [32](#) a seguir.

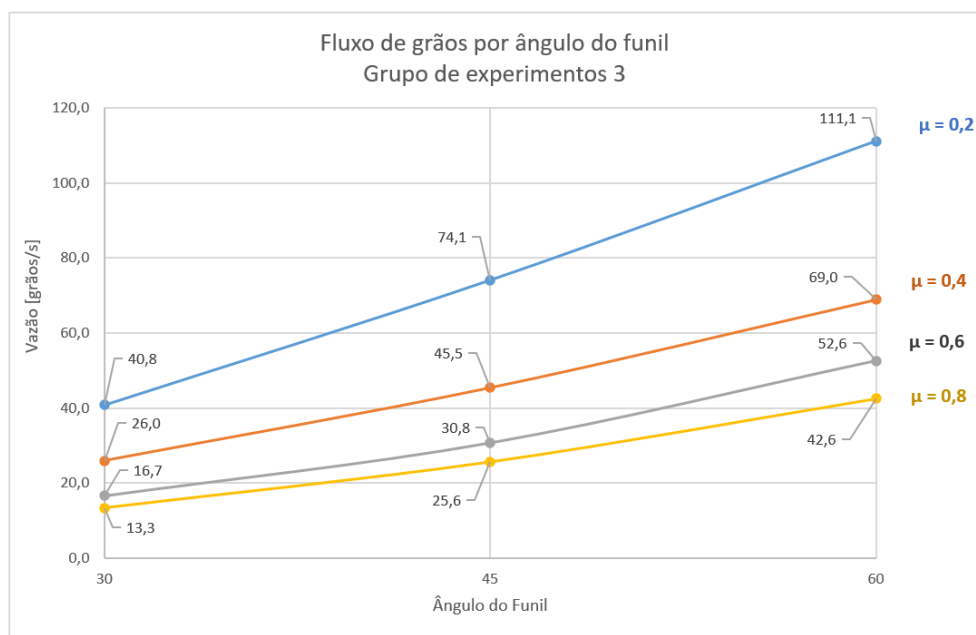


Figura 32 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do atrito entre grãos, referentes ao grupo 3

6.1.4 Grupo de experimentos 4 ($Seed = 0,3$)

Para a quarta variação de posição foi utilizada $Seed$ de 0.3. O resultado dos tempos de escoamento e suas respectivas vazões estão apresentado na [Tabela 5](#) a seguir.

Grupo de experimentos 4						
Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo	Tempo de queda total	Total de frames	Vazão Q [grãos/s]
1a	2000	0,2	30	00:00:49	1174	40,8
1b	2000	0,2	45	00:00:26	625	76,9
1c	2000	0,2	60	00:00:19	447	105,3
2a	2000	0,4	30	00:01:16	1818	26,3
2b	2000	0,4	45	00:00:43	1031	46,5
2c	2000	0,4	60	00:00:29	688	69,0
3a	2000	0,6	30	00:02:01	2897	16,5
3b	2000	0,6	45	00:01:05	1577	30,8
3c	2000	0,6	60	00:00:40	965	50,0
4a	2000	0,8	30	00:02:27	3527	13,6
4b	2000	0,8	45	00:01:26	2071	23,3
4c	2000	0,8	60	00:00:49	1160	40,8

Tabela 5 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 4

Os valores tempo de escoamento total, para as 2000 esferas referentes ao grupo 4, foram plotados no gráfico [33](#) a seguir.

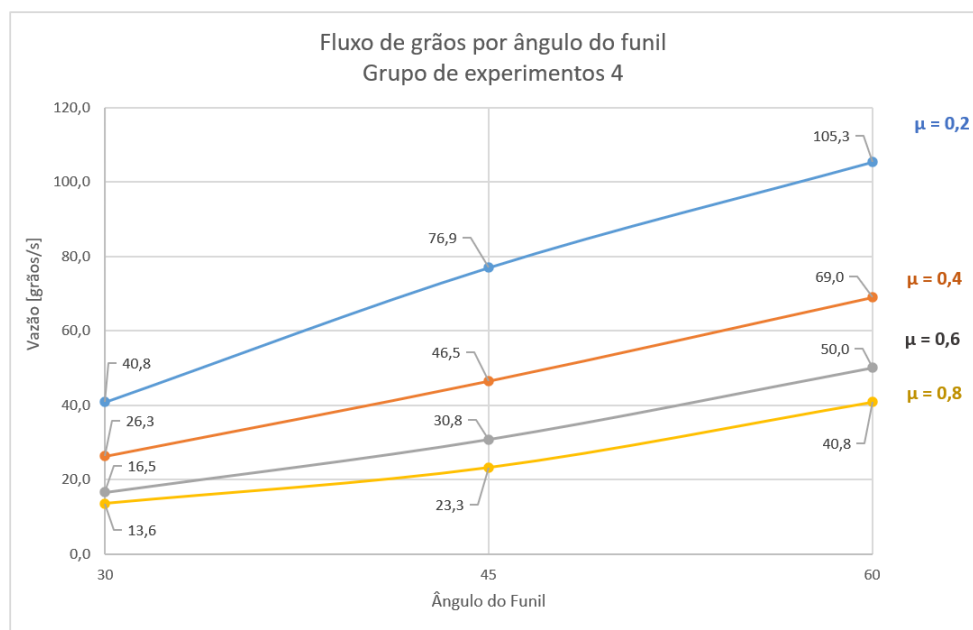


Figura 33 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do atrito entre grãos, referentes ao grupo 4

6.1.5 Grupo de experimentos 5 ($Seed = 0,4$)

Para a última variação (grupo 5), o resultado dos tempos de escoamento e suas respectivas vazões está apresentado na [Tabela 6](#) a seguir.

Grupo de experimentos 5						
Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo	Tempo de queda total	Total de frames	Vazão Q [grãos/s]
1a	2000	0,2	30	00:00:50	1198	40,0
1b	2000	0,2	45	00:00:28	668	71,4
1c	2000	0,2	60	00:00:20	486	100,0
2a	2000	0,4	30	00:01:25	2038	23,5
2b	2000	0,4	45	00:00:44	1067	45,5
2c	2000	0,4	60	00:00:30	717	66,7
3a	2000	0,6	30	00:01:57	2807	17,1
3b	2000	0,6	45	00:01:04	1548	31,3
3c	2000	0,6	60	00:00:41	991	48,8
4a	2000	0,8	30	00:02:45	3961	12,1
4b	2000	0,8	45	00:01:29	2137	22,5
4c	2000	0,8	60	00:00:54	1282	37,0

Tabela 6 – Tabela de tempo total de fluxo e vazão para cada parâmetro referente ao grupo 5

Os valores tempo de escoamento total para as 2000 esferas e $Seed = 0,4$ foram plotados no gráfico 34 a seguir.

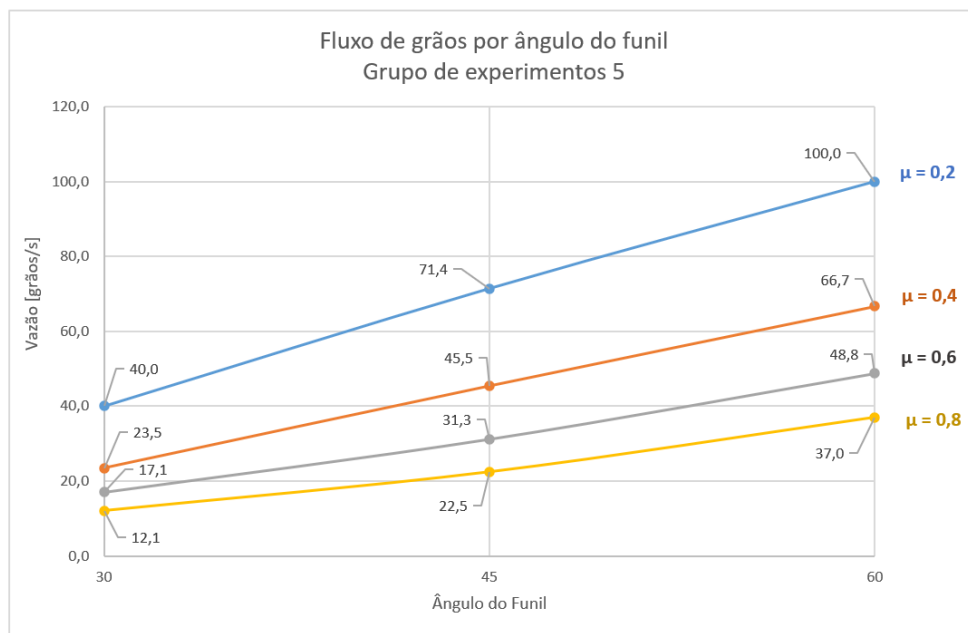


Figura 34 – Gráfico de vazão dos grãos em função do ângulo do funil e do atrito entre grãos, referentes ao grupo 5

6.1.6 Valores médios

O resultado dos tempos de escoamento médio referente a todos os experimentos está apresentado na [Tabela 7](#) a seguir.

Média dos grupos						
Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo	Tempo de queda total	Total de frames	Vazão Q [grãos/s]
1a	2000	0,2	30	00:00:49	1182	40,8
1b	2000	0,2	45	00:00:27	648	74,6
1c	2000	0,2	60	00:00:18	443	108,7
2a	2000	0,4	30	00:01:18	1862	25,8
2b	2000	0,4	45	00:00:43	1039	46,3
2c	2000	0,4	60	00:00:29	691	69,0
3a	2000	0,6	30	00:01:53	2711	17,7
3b	2000	0,6	45	00:01:05	1558	30,9
3c	2000	0,6	60	00:00:40	950	50,3
4a	2000	0,8	30	00:02:32	3646	13,2
4b	2000	0,8	45	00:01:24	2010	23,9
4c	2000	0,8	60	00:00:48	1174	41,7

Tabela 7 – Tabela de tempo total médio de queda e vazão média para cada parâmetro

Os valores tempo de escoamento médio total para as 2000 esferas em todos os experimentos foram plotados no gráfico [35](#) a seguir.

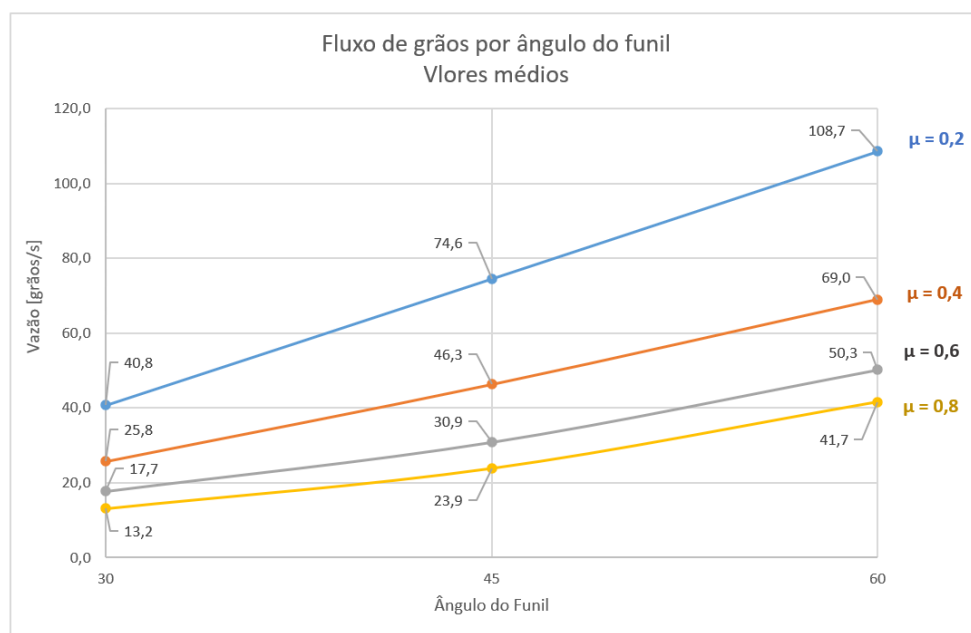


Figura 35 – Gráfico de vazão média dos grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos em função do ângulo do funil e do arito entre grãos

6.2 Avaliação do mapa de velocidades durante o fluxo

Para melhor compreensão e visualização do fluxo de grãos no funil, foi realizada uma análise mapa de cores a partir da velocidade dos grãos. A rampa de cores utilizada varia entre o azul até o vermelho, onde o azul representa baixas velocidades e o vermelho representa velocidades maiores.

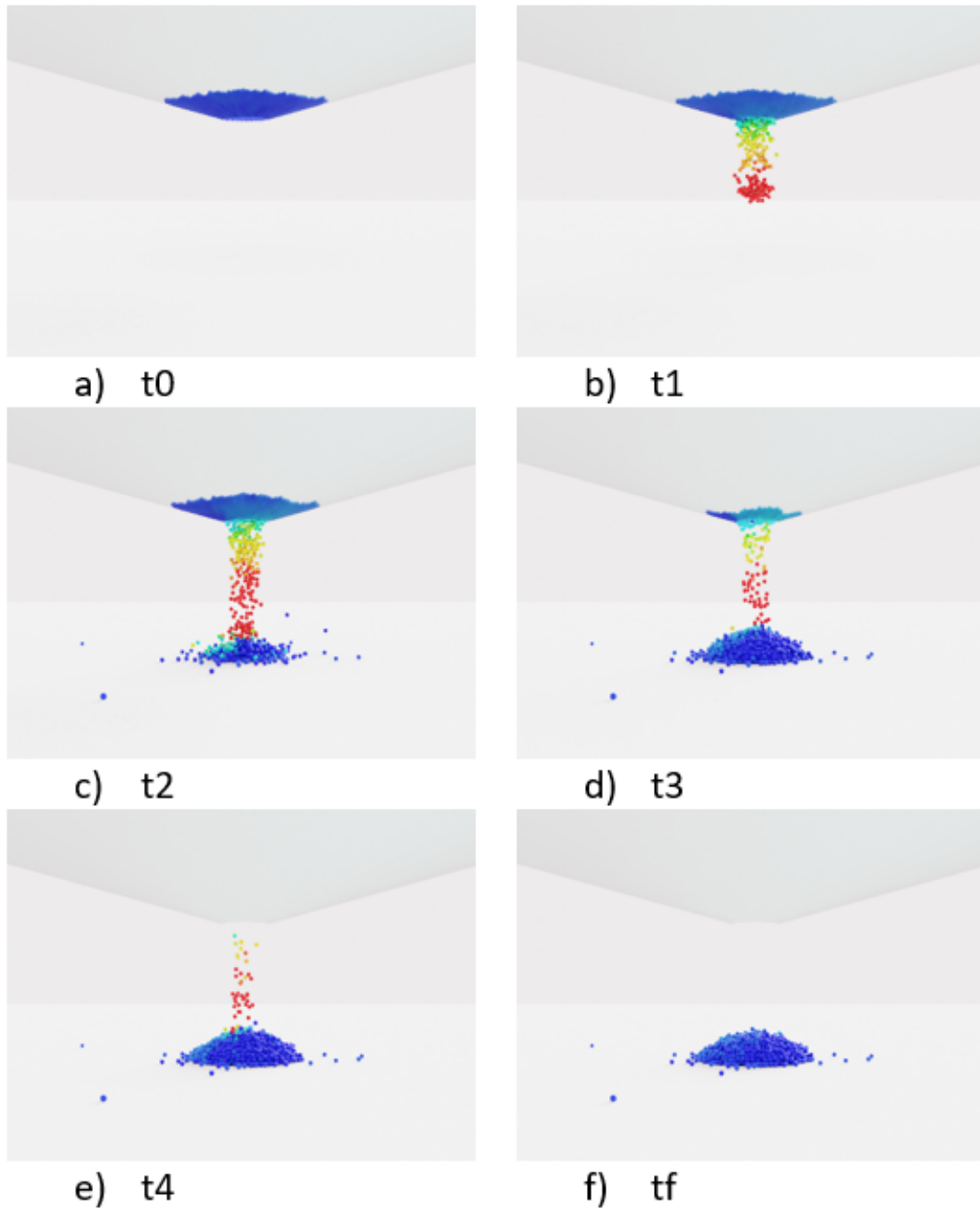


Figura 36 – Mapa de velocidades para subdivisões de tempo. a) t0, momento antes de iniciar o fluxo. b) t1, momento após iniciar o fluxo e antes dos grãos tocarem a superfície. c) t2, momento do fluxo em que os grãos entram em contato com a superfície. d) t3, momento de redução de vazão. e) t4, momento final do fluxo. f) tf, repouso dos grãos na superfície após o fluxo.

A Figura 36 apresenta o resultado obtido para 6 frações de tempo. O tempo t_0 é referente ao momento antes de iniciar o fluxo. O tempo t_1 é o momento após iniciar o fluxo e antes dos grãos tocarem a superfície. O tempo t_2 é o momento do fluxo em que os grãos entram em contato com a superfície. O tempo t_3 apresenta um momento de redução de vazão. O tempo t_4 apresenta um momento em que finaliza o fluxo no funil. E o tempo t_f é o momento em que ocorre o repouso de todos os grãos na superfície.

6.3 Avaliação do ângulo de repouso da pilha formada

Após o fluxo dos grãos foi realizada uma análise da estrutura das pilhas formadas. Neste caso, a análise realizada foi a respeito do ângulo complementar da pilha formada.

O quadro a seguir apresenta a forma das pilhas em vista frontal referentes aos experimentos com $Seed = 0$. As colunas 'a', 'b' e 'c' do quadro são referentes ao ângulo do funil, sendo 30° , 45° e 60° respectivamente. As linhas '1', '2', '3' e '4' são referentes respectivamente ao atrito, '0,2', '0,4', '0,6' e '0,8'.

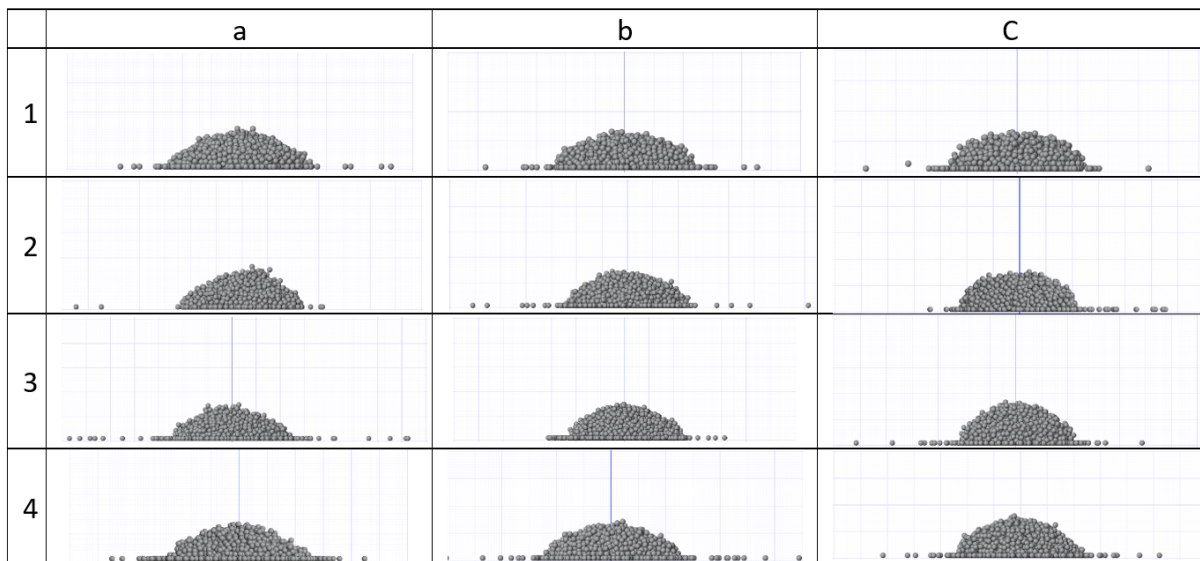


Figura 37 – Pilhas em vista frontal referentes aos experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c para $Seed = 0$

Os ângulos complementares obtidos estão representados na [Figura 38](#) abaixo. Para medir o ângulo, primeiramente foi feita uma medida vertical do pico da pilha até a superfície. Em seguida, traçada uma diagonal do grão mais distante da linha vertical da segunda camada de grãos até o pico da pilha. O ângulo foi medido da base até a diagonal. A medida foi feita dois lados da pilha na mesma vista, conforme ilustrado na figura.

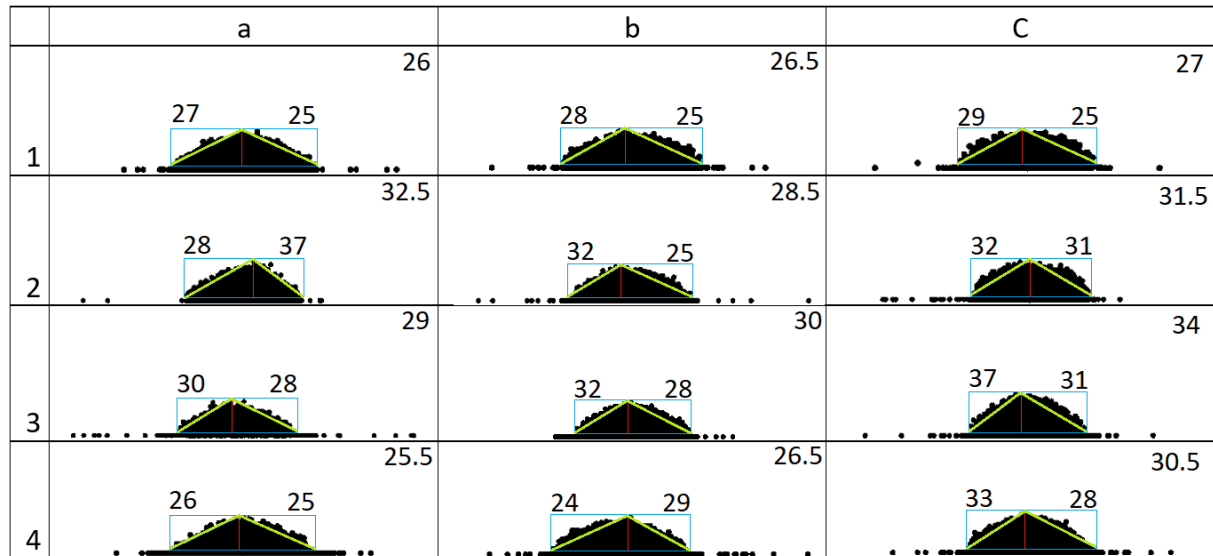


Figura 38 – Pilhas em vista frontal referentes aos experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c para $Seed = 0$

Os valores dos ângulos compilados estão apresentados na [Tabela 8](#) a seguir.

Experimento	N esferas	Coef. de atrito	Ângulo do Funil	Ângulo de pilha 1	Ângulo de pilha 2	Ângulo de pilha médio
1a	2000	0,2	30	27	25	26 (1)
1b	2000	0,2	45	28	25	26,5 (1,5)
1c	2000	0,2	60	29	25	27 (2)
2a	2000	0,4	30	28	37	32,5 (4,5)
2b	2000	0,4	45	32	25	28,5 (3,5)
2c	2000	0,4	60	32	31	31,5 (0,5)
3a	2000	0,6	30	30	28	29 (1)
3b	2000	0,6	45	32	28	30 (2)
3c	2000	0,6	60	37	31	34 (3)
4a	2000	0,8	30	26	25	25,5 (0,5)
4b	2000	0,8	45	24	29	26,5 (2,5)
4c	2000	0,8	60	33	28	30,5 (2,5)

Tabela 8 – Valores de ângulos para experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c

6.4 Avaliação da forma da pilha formada em vista superior

Para este caso, a análise estrutural da pilha é em função de sua forma gerada a partir da vista superior.

O quadro 39 a seguir apresenta a forma das pilhas em vista superior referentes aos experimentos com $Seed = 0$. As colunas 'a', 'b' e 'c' do quadro são referentes ao ângulo do funil, sendo 30° , 45° e 60° respectivamente. As linhas '1', '2', '3' e '4' são referentes respectivamente ao atrito, '0,2', '0,4', '0,6' e '0,8'.

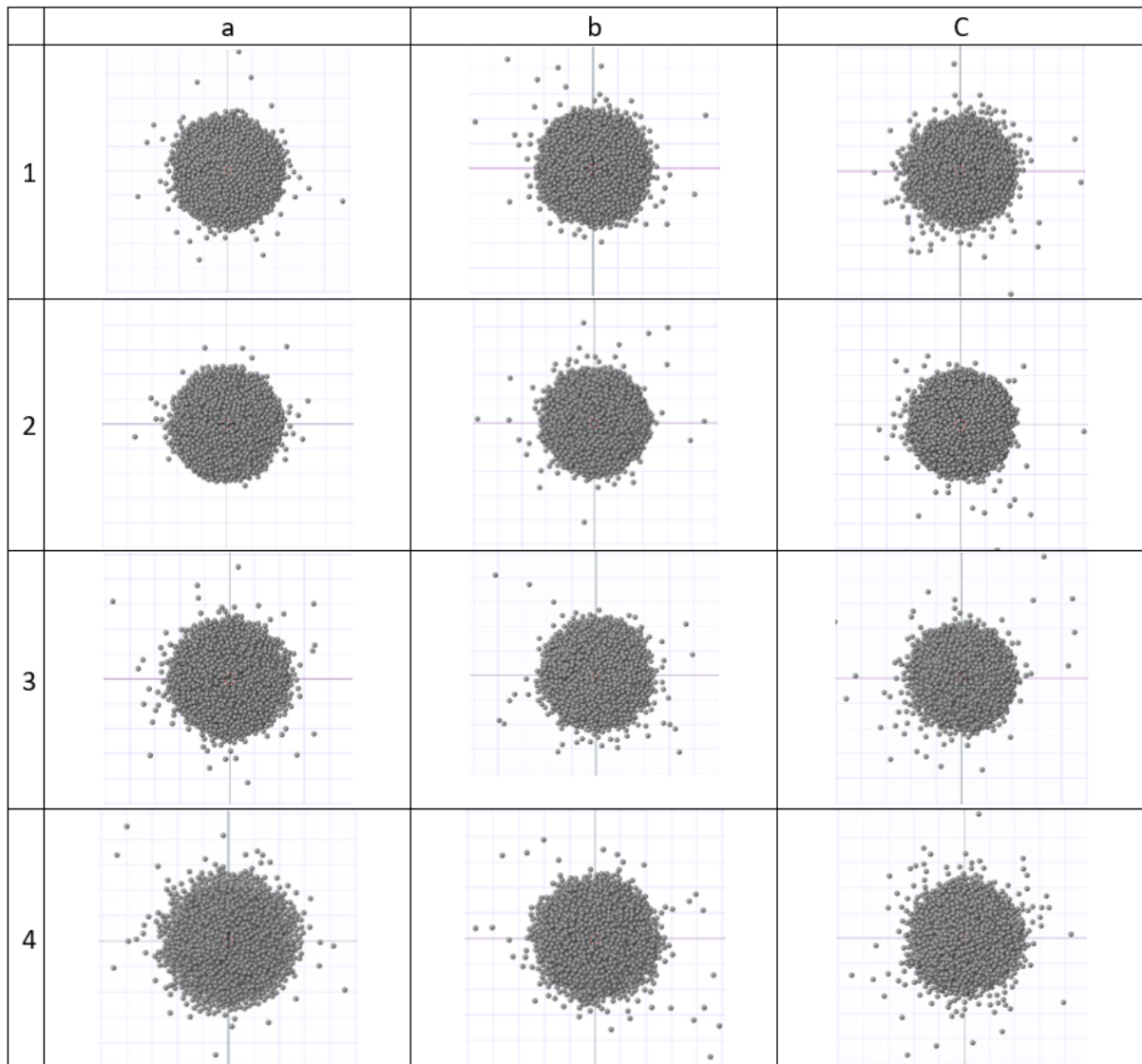


Figura 39 – Pilhas em vista superior referentes aos experimentos 1a, 1b, 1c, 2a, 2b, 2c, 3a, 3b, 3c, 4a, 4b, e 4c para $Seed = 0$

7 Discussões

7.1 Tempo em função do atrito entre os grãos

Em todos os experimentos foi possível observar uma correlação direta entre o coeficiente de atrito e tempo total de fluxo. É possível perceber essa relação analisando a tabela com os valores médios de tempo. Comparando os experimentos 'a' referentes ao funil com ângulo de 30° , o experimento 1a ($\mu = 0,2$) ocorreu em menos tempo comparado com o 2a ($\mu = 0,4$), que ocorreu em um tempo menor que o experimento 3a ($\mu = 0,6$), que por sua vez ocorreu mais rápido que o experimento 4a ($\mu = 0,8$). Isso também é perceptível para os experimentos b (45°) e c (60°). Essa observação pode ser feita para todas as variações de *Seed* assim como para os valores médios.

O aumento do tempo de fluxo encontrado está diretamente proporcional ao atrito entre grãos dos experimentos. Ou seja, quanto mais atrito entre os grãos mais demorado é para que todos os grãos consigam sair do funil.

7.2 Tempo em função do ângulo de inclinação funil

Para todos os experimentos também é possível observar correlação entre o ângulo do funil e tempo total de fluxo. Essa relação é feita analisando a tabela com os valores médios de tempo. Comparando os experimentos 1 referentes ao coeficiente de atrito 0,2 o experimento 1a (30°) ocorreu em maior tempo comparado com o 1b (45°), que por sua vez ocorreu em um tempo maior que o experimento 1c (60°). E isso também é acontece para os experimentos 2 ($\mu = 0,4$), 3 ($\mu = 0,6$) e 4 ($\mu = 0,8$).

Ou seja, quanto maior o ângulo do funil (quanto mais agudo), menor o tempo total de vazão dos grãos. Isso é justificável pois quanto maior o ângulo do funil, para a mesma quantidade de esferas (2000), maior a altura da pilha de grãos dentro do funil. E quanto maior a altura do empilhamento, maior pressão nas esferas na saída do funil, aumentando a velocidade de escoamento. Outra justificativa é que quanto mais agudo o ângulo, menor a componente da força de atrito entre as paredes do funil, o que também auxilia no aumento da velocidade de saída. Essa observação pode ser feita para todas as variações de grupos e também para os valores médios.

7.3 Análise do gráfico médio de tempo por ângulo e coeficiente de atrito

O Gráfico 35 apresenta no eixo x o valor do ângulo do funil e no eixo y o tempo de fluxo dos grãos. Foram plotadas 4 curvas referente aos 4 valores de atrito.

Para cada grupo foi plotado um gráfico com estas definições, todos os gráficos obtiveram resultados semelhantes. É importante notar que os resultados para diferentes grupo são semelhantes, mas não são iguais. Isso mostra que a variação ocorreu validando a repetibilidade dos experimentos.

7.4 Avaliação do mapa de velocidades durante o fluxo

Na [Figura 36a](#) os grãos estão em repouso no funil, representados pela cor azul, referente a velocidades próximas a 0.

Na [Figura 36b](#) já é possível perceber a aceleração dos grãos após o início do fluxo, a cor vermelha representa velocidades de aproximadamente 5m/s. Nessa etapa de abertura do funil é possível visualizar um agrupamento dos primeiros grãos. Isso é justificável pois são os grãos depositados na saída do funil, e quando é feita a abertura eles caem diretamente pressionados pelos grãos acima e sem sofrer contato com a superfície do funil.

Na [Figura 36c](#) o fluxo de grãos está constante, isso é verificado comparando o diâmetro do fluxo próximo ao bocal e o diâmetro do fluxo próximo à pilha. Nesta etapa ocorre também a deposição dos grãos na superfície. A velocidade no interior do funil varia entre a cor azul escuro e azul claro, mostrando que a velocidade das partículas é maior na região de saída do funil.

Durante a queda os grãos variam entre as cores azul, verde, amarelo, laranja e vermelho e a velocidade varia entre 0m/s e 5m/s. A medida que os grãos atingem a superfície retornam ao azul escuro, o que é esperado, pois começam a entrar em repouso novamente.

Na etapa [36d](#) os grãos dentro do funil ficam em maioria azul claro. Se comparado com a etapa anterior [36c](#). Isso significa que os grãos que estão em contato com a superfície do funil são liberados por último. Com isso, após a saída de todos os grãos que não estão em contato com a superfície do funil, a velocidade de saída dos grãos da superfície aumenta. Quanto menor a quantidade de grãos no funil menor quantidade de pontos de contatos entre grãos e maior velocidade.

De acordo com [36c](#) não é possível medir a velocidade dos grãos que não estão em contato com a superfície no interior do funil, pois para isso seria necessária uma vista em corte do sistema.

Comparando a densidade de grãos no fluxo entre a etapa [36c](#) e a etapa [36d](#), na etapa [36d](#) a densidade é menor. Isso ocorre devido a redução da pressão gerada no interior do funil. Ou seja, há menos grãos empilhados para pressionar a saída dos grãos na borda.

Em [36e](#) o fluxo dentro do funil é finalizado, e os últimos elementos estão em queda em direção à pilha. O gradiente de cores formado na coluna é aproximadamente proporcional aos valores de velocidade em queda livre, isso ocorre pois não há muitos grãos próximos para influenciar a alteração da velocidade destes.

Em [36f](#) a velocidade de todos os grãos se aproxima de 0. Na imagem ainda é possível perceber que em alguns pontos a cor das esferas possuem um azul mais claro, principalmente as

esferas em pontos mais altos. Isso ocorre porque a pilha ainda está acomodando para entrar em repouso. Outro ponto é que, como se trata de uma simulação simplificada, é possível que alguns grãos demorem mais para entrar em repouso, já que algumas perdas reais foram desconsideradas, assim como arrasto, deformação e amortecimento da superfície.

Outro ponto é que para conseguir um experimento mais exato é necessário que seja aumentada a subdivisão de passos da iteração, aumentando o número de subdivisões o experimento se torna mais fiel, no entanto, o tempo de cálculo do experimento aumenta significativamente. É interessante que para isso, seja utilizado um *hardware* eficiente na simulação, que consiga realizar as simulações em um tempo de viável.

Alguns grãos sofreram dispersão e atingiram posições muito distantes da pilha. Como o sistema analisado não possui rolamento, estes grãos não se distanciaram da pilha a partir de rolamento impulsionado pelo contato com outros grãos. Isso ocorreu devido ao recocheteamento dos grãos ao tocar superfície e grãos repouso somado à pressão dos grãos acima ainda em queda, gerando uma componente de velocidade no sentido oposto ao centro. Isso se comprova pois a maioria dos grãos dispersos ocorreram entre t_1 e t_2 . Para reforçar essa análise seria necessário um estudo mais aprofundado do momento entre t_1 e t_2 considerando uma análise mais precisa das velocidades e preferencialmente analisando as componentes vetoriais de x e y das velocidades dos grãos.

7.5 Avaliação do ângulo de repouso da pilha formada

É possível visualizar na [Figura 37](#) a forma das pilhas em vista frontal. Como, nos experimentos executados, o atrito com a superfície foi parametrizado para ser igual a 1 e os grãos do sistema configurados sem rolamento, era esperado que os grãos se aglomerassem próximo ao ponto central de queda.

No entanto, em todos os experimentos ocorreram grãos deslocados da pilha. Uma justificativa para este fenômeno é dispersão dos grãos durante o fluxo. Ou seja, durante a queda, os grãos que colidem entre si, afastam alguns elementos do centro das pilhas.

Como o registro do ângulo de repouso foi realizado no momento em que o último grão do fluxo toca a pilha, é possível correlacionar que nos casos onde o tempo de queda é maior a pilha já tenha cedido. Como é possível visualizar comparando os experimentos a, b e c, referentes aos mesmos coeficientes de atrito. Para os experimentos 1, 3 e 4 o ângulo encontrado é inversamente proporcional aos respectivos tempos de queda. No experimento 2a e 2b, o desvio padrão encontrado foi relativamente alto, o que inviabiliza essa comparação. Para esta análise especificamente, é necessário que sejam realizados mais experimentos para diminuir o erro.

7.6 Avaliação da forma da pilha formada em vista superior

É possível visualizar na [Figura 39](#) a forma das pilhas em vista superior. Para estas análises a posição central das pilhas é coincidente com o ponto $(x,y) = (0,0)$ do Blender™. Esse posicionamento foi feito com o objetivo de perceber uniformidades ou assimetrias de forma.

Em todos os casos do experimento, as formas das pilhas em vista superior é circular. É importante salientar que o atrito entre o grão e a superfície é igual a 1 e os grãos não executam comportamento de rolamento.

Em todas as pilhas o diâmetro da forma circular gerada está inscrita dentro de um raio de 3 metros. É importante ressaltar que para todos os casos o raio do grão é de 0,1 metros.

Comparando os experimentos 1a, 1b e 1c respectivamente com 4a, 4b e 4c, é possível perceber que o diâmetro da pilha é maior para os casos onde o atrito é maior. Isso pode acontecer devido a maior agrupamentos seguidos de desmoronamentos para os casos de maior atrito. Outra possível justificativa é em relação ao tempo de queda, tendo em vista que quanto mais tempo durar a simulação, mais tempo para que os grãos se acomodem aumentando a área. O experimento 4a ocorreu em 2 minutos e 32 segundos, enquanto o experimento 1a ocorreu em apenas 49 segundos.

Alguns dos experimentos apresentaram uma dispersão mais significativa do que outros, como é possível perceber claramente comparando o experimento 1a e 2a com o experimento 4a. Para estes casos, o funil utilizado é o de 30°. Mas para o experimento 1a o atrito é de 0,2, para 2a é de 0,4 e o experimento 4a possui atrito de 0,8.

A fim de tentar entender este comportamento, é possível correlacionar a forma da pilha com o tempo total de queda. Em 4a o tempo de queda total dos grãos foi maior que em 1a, ou seja, durante a queda dos grãos do experimento 4a os grãos estavam, em média, mais distantes entre si se comparados com os grãos em 1a. Assim, os grãos em 4a possuem mais liberdade de movimentação após caírem na pilha de grãos já depositados e ricochetearem para a direção oposta ao centro. Outra possível explicação ainda em relação ao tempo de queda, é que quanto maior o tempo total do fluxo, mais tempo para que a pilha já depositada se acomode e aumente sua área. Logo, quanto maior a área da pilha, maior a região que o grão possui para ricochetear em direção contrária ao centro.

No entanto, ao comparar os resultados entre 1a e 2a, 1b e 2b, 1c e 3c, não é possível observar essa correlação, já que a dispersão foi maior em 1a, 1b e 1c, onde o tempo de queda é menor. Para os parâmetros do experimento, a pilha com menor dispersão foi a pilha referente ao experimento 2a, na qual o atrito é 0,4, o ângulo do funil 30° e tempo total de fluxo foi de 1 minuto e 18 segundos.

É possível comparar também os resultados de 1a no qual o tempo total de queda foi de 49 segundos com o experimento 4c no qual o tempo de queda foi 48 segundos. Ambos experimentos, apesar da diferença de atrito e do ângulo do funil apresentaram tempos de queda muito semelhantes. No entanto, é possível observar algumas diferenças de dispersão. O Experimento 4c possui maior dispersão se comparado ao 1a. Essa comparação mostra que a

dispersão não é influenciada apenas pelo tempo de queda.

A análise de velocidades do grão mostrou que para um dos casos a maioria dos grãos dispersos ocorreu entre t_1 e t_2 . Para entender melhor esse efeito deve ser proposto um experimento que foque no comportamento do grão neste período.

Para este caso foram comparados os experimentos para $Seed = 0$. Sendo assim, para melhor entendimento do modelo de dispersão das partículas, é necessário analisar a repetibilidade destes experimentos. Ou seja, comparar as formas geradas em $Seed = 0$ com as outras variações ($Seed = 0,1, 0,2, 0,3$ e $0,4$).

7.7 Análise da Dispersão dos Grãos e Formação da Pilha

O experimento com menor tempo total médio de fluxo foi o experimento 1c, referente a um coeficiente de atrito de 0,2 e ângulo de funil de 60° . O experimento com maior tempo total médio de fluxo foi o experimento 4a, referente a um coeficiente de atrito de 0,8 e ângulo de funil de 30° . O fluxo do experimento 1c foi executado em 18 segundos, já o fluxo do experimento 4a foi executado em 2 minutos e 32 segundos.

Para todos os experimentos, foi observado um comportamento diretamente proporcional do tempo total do fluxo de grãos em relação ao atrito. Ou seja, quanto maior o atrito maior tempo total para que os grãos consigam sair do funil. Isso ocorre pois com maior força de atrito entre os grãos é mais difícil que eles consigam escoar e sair do funil, quanto menor o atrito, menor a força de interação, assim o fluxo ocorre com menor resistência.

Em todos os experimentos, o tempo total do fluxo de grãos encontrado é inversamente proporcional ao ângulo do funil. Quanto maior o ângulo do funil, menor o tempo total. Esse comportamento é esperado pois quanto maior o ângulo, para a mesma quantidade de esferas, maior a altura da pilha de grãos dentro do funil, consequentemente, maior pressão nas esferas na saída do funil, aumentando a velocidade de escoamento. E quanto mais agudo o ângulo, menor a componente da força de atrito entre as paredes do funil, o que também auxilia no aumento da velocidade de saída.

Como o atrito da superfície nos experimentos executados foi parametrizado para ser igual a 1 e os grãos do sistema foram parametrizados sem rolamento, era esperado que os grãos se aglomerassem circularmente próximo ao ponto central de queda. Como o registro do ângulo de repouso foi realizado no instante que o último grão do fluxo toca a pilha, é possível correlacionar que em 3 das 4 variações de atrito, os casos onde o tempo de queda são maiores a pilha formada possui um ângulo de repouso menor. No entanto, para esta análise, é necessária uma nova validação com mais amostras de repetibilidade.

Em todos os casos do experimento, as formas das pilhas em vista superior é circular. Em todas as pilhas o diâmetro da forma gerada está inscrita dentro de um raio de 3 metros.

Foi possível perceber, que para os casos analisados, o diâmetro da pilha é maior onde o tempo de queda foi maior. Tendo em vista que quanto mais tempo durar o sistema, mais tempo

para que os grãos se acomodem aumentando a área. O experimento 4a ocorreu em 2 minutos e 32 segundos, enquanto o experimento 1a ocorreu em apenas 49 segundos.

Assim como na vista frontal e na vista superior da pilha foi possível observar grãos dispersos do centro. Em todos os experimentos ocorreram casos de elementos deslocados da pilha. Uma justificativa para este fenômeno é dispersão dos grãos durante o fluxo. Ou seja, durante a queda, os grãos que entram em contato entre si retornam a força normal de um grão contra o outro, afastando alguns elementos do centro das pilhas.

O experimento 4c possui maior dispersão se comparado ao 1a e ambos resultaram em aproximadamente o mesmo tempo total de fluxo. Essa comparação mostra que não é possível afirmar que a dispersão causada é influenciada apenas pelo tempo de queda.

A análise de velocidades do grão mostrou que para o caso analisado a maioria da dispersão dos grãos ocorre entre t_1 e t_2 . Para entender melhor esse efeito deve ser proposto um experimento que foque no comportamento do grão neste intervalo.

Em resumo, os experimentos apresentaram uma correlação esperada entre o tempo total de fluxo dos grãos, o coeficiente de atrito e ângulo do funil. Quanto aos casos de dispersão de grãos, os experimentos executados são insuficientes para identificar correlação. Em relação à formação de pilha e de variação de cor em função da velocidade o comportamento identificado foi esperado. No geral os experimentos foram satisfatórios, abrindo possibilidades de continuação das análises em trabalhos futuros.

7.8 Limitações do Estudo

Apesar de este estudo ter demonstrado a viabilidade do uso do Blender™ para simulações de materiais granulares, é importante reconhecer algumas limitações que podem ter impactado os resultados. Primeiramente, o Blender™ e o Molecular Script Addon, embora versáteis e adaptáveis, não foram originalmente concebidos para simulações científicas detalhadas. Como resultado, pode haver limitações na complexidade das simulações realizadas. Essa limitação decorre do fato de que ferramentas generalistas como o Blender™ podem carecer de recursos específicos essenciais para aplicações científicas avançadas.

Além disso, a escolha dos parâmetros de simulação, incluindo o número fixo de 2000 grãos e os valores específicos para ângulos de inclinação e coeficientes de atrito, pode não abranger toda a gama de condições práticas possíveis. Esses parâmetros foram selecionados por conveniência e para facilitar a replicabilidade dos experimentos, mas podem não representar a totalidade das variáveis relevantes em contextos reais.

Por fim, as limitações computacionais também devem ser consideradas. A capacidade de processamento disponível pode ter restringido a resolução das simulações ou a exploração de sistemas mais complexos, influenciando a abrangência dos resultados. Em simulações computacionais, a limitação de recursos de processamento é um fator crítico que pode afetar tanto a qualidade quanto o escopo dos experimentos realizados.

8 Conclusão

Foram realizados experimentos utilizando o programa de computador Blender™, um software de código aberto e gratuito, auxiliado por um código de cálculos moleculares para interação entre grãos (*Molecular Script Addon*). Esses experimentos foram conduzidos com o objetivo de verificar a usabilidade deste programa para análise de sistemas granulares.

O Blender™ demonstrou-se versátil e adaptável para o controle de variáveis em simulações. Todos os parâmetros puderam ser ajustados utilizando um código desenvolvido em Python, que gerou os experimentos e permitiu a simulação com as ferramentas internas do programa, além do código de cálculo molecular.

O código em Python descrito na Metodologia foi desenvolvido especificamente para este trabalho, com a finalidade de facilitar a replicabilidade. Todos os parâmetros físicos do sistema foram configurados nesse código, que funcionou com êxito para a simulação de todos os experimentos, conforme registrado nos capítulos anteriores.

A instalação e utilização do código molecular no Blender™ foi realizada com sucesso, permitindo a execução das simulações e o ajuste de parâmetros adicionais referentes a sistemas granulares, como o ajuste de passos, intervalos de passos, amortecimento e atrito entre os grãos. Além disso, esse código possibilitou a configuração do número de núcleos de CPU utilizados na simulação.

O programa permitiu visualizar a simulação em tempo real, renderizar em formato de vídeo e imagem qualquer intervalo da simulação, ajustar parâmetros necessários e configurar propriedades físicas e visuais do sistema. As imagens dos experimentos foram geradas a partir de renderização no próprio Blender™ e exportadas para o computador.

Foram realizadas 60 simulações completas, variando parâmetros de ângulo do funil, atrito e repetibilidade. Em todos os casos, ocorreu a geração de grãos, o ajuste inicial no interior do funil, o fluxo dos grãos a partir da abertura inferior do funil até a deposição na superfície.

Após a realização dos experimentos, foram feitas medições das características físicas do sistema. O tempo de escoamento foi medido para todos os experimentos, assim como as características estruturais do primeiro grupo de simulações, incluindo o ângulo de repouso da pilha formada e a forma da pilha em vista superior. Para um dos experimentos (experimento 1a), foi realizada uma análise comportamental do mapa de velocidades em determinados intervalos de tempo.

Esses resultados demonstram que o Blender™ é uma ferramenta eficaz e flexível para a simulação de sistemas granulares, oferecendo uma ampla gama de possibilidades de ajuste e visualização. A replicabilidade dos experimentos, garantida pelo código em Python, e as capacidades de renderização do Blender™ reforçam o potencial desse software para futuras pesquisas na área.

8.1 Sugestão para trabalhos futuros

8.1.1 Método de simulação

- Replicação do experimento em outros programas de simulação, comparando de resultados a partir dos mesmos parâmetros.
- Replicação do experimento com maior subdivisão de passos em hardware com maior eficiência.

8.1.2 Mapa de velocidades

- Análise de mapa de velocidades com vista em corte para verificar mapa de velocidades nas regiões internas do funil e da pilha.
- Medida numérica e gráfica de velocidade por grão para facilitar comparação de velocidade entre grãos.
- Experimento de comparação de velocidades lineares em x e y durante o fluxo para verificar dispersão de grãos.

8.1.3 Análise estrutural da pilha

- Verificação de comportamento turbulento e laminar em fluxo de sistemas granulares.
- Analisar repetibilidade de forma em vista superior, para verificar correlação entre diâmetro, dispersão, atrito e tempo de fluxo.
- Análise de pilha formada utilizando outros parâmetros de superfície, atrito diferente de 1 e amortecimento.
- Análise de componentes vetoriais de força entre grão-grão e em grão-superfície na pilha em repouso.

Referências

- AL-HASHEMI, H. M. B.; AL-AMOUDI, O. S. B. A review on the angle of repose of granular materials. **Elsevier BV**, v. 330, p. 397–417, maio 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.02.003>>. Citado 3 vezes nas páginas 5, 16 e 17.
- ATMAN, A.; CLAUDIN, P. **Numerical Stress Response Functions of Static Granular Layers**. [s.n.], 2005. 531–536 p. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/3-540-28091-x_53>. Citado na página 13.
- BLENDER-FOUNDATION. **BLENDER**. 2002. Acesso em: 8 de ago. de 2021. Disponível em: <<https://www.blender.org/>>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 25.
- CAMPELLO, E. M. A computational model for the simulation of dry granular materials. **International Journal of Non-Linear Mechanics**, v. 106, p. 89–107, 2018. ISSN 0020-7462. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020746218301409>>. Citado 7 vezes nas páginas 5, 10, 11, 14, 15, 16 e 17.
- COMMONS, W. **Steine.7195.jpg - Wikimedia Commons**. 2020. [Online; accessed 27-November-2022]. Disponível em: <<https://commons.wikimedia.org/>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 14.
- COULOMB, C. A. Essai sur une application des regles de maximis et minimis a quelques problemes de statique relatifs a l’architecture. **Mem. Div. Sav. Acad.**, 1773. Citado na página 17.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, Thomas Telford Ltd., v. 29, n. 1, p. 47–65, mar. 1979. Disponível em: <<https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- DOMÍNGUEZ, J. M. et al. Neighbour lists in smoothed particle hydrodynamics. **Wiley**, v. 67, n. 12, p. 2026–2042, nov. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/fld.2481>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 23.
- DURAN, J. **Sands, Powders, and Grains**. Springer New York, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0499-2>>. Citado 5 vezes nas páginas 5, 10, 14, 15 e 18.
- ELTAWAHNI, H. A.; YU, A. Powder processing: Models and simulations. **Elsevier**, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/b978-0-12-803581-8.11651-0>>. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 19.
- FAZEKAS, S.; KERTÉSZ, J.; WOLF, D. **Computer Simulations of Magnetic Grains**. [s.n.], 2005. 489–501 p. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/3-540-28091-x_48>. Citado na página 13.
- FERNENGEL, J.; HINRICHSSEN, O. Influence of material properties on voidage of numerically generated random packed beds. **Elsevier BV**, v. 233, p. 116406, abr. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.116406>>. Citado na página 13.
- GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. **Oxford University Press (OUP)**, v. 181, n. 3, p. 375–389, dez. 1977. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/mnras/181.3.375>>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.

HÄNEL, D.; LANTERMANN, U. **Simulation of Particle Transport and Structure Formation by Deposition**. [s.n.], 2005. 503–512 p. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/3-540-28091-x_49>. Citado na página 13.

HERTZ, H. Ueber die berührung fester elastischer körper. **Walter de Gruyter GmbH**, v. 1882, n. 92, p. 156–171, jan. 1882. Disponível em: <<https://doi.org/10.1515/crll.1882.92.156>>. Citado na página 20.

HRYCIW, R. D.; OHM, H.-S.; ZHOU, J. Theoretical basis for optical granulometry by wavelet transformation. **Journal of Computing in Civil Engineering**, American Society of Civil Engineers (ASCE), v. 29, n. 3, maio 2015. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(asce\)cp.1943-5487.0000345](https://doi.org/10.1061/(asce)cp.1943-5487.0000345)>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 15.

KRUGGEL-EMDEN, H. et al. Review and extension of normal force models for the discrete element method. **Elsevier BV**, v. 171, n. 3, p. 157–173, fev. 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2006.10.004>>. Citado na página 18.

KUANG, S.; ZHOU, M.; YU, A. CFD-DEM modelling and simulation of pneumatic conveying: A review. **Elsevier BV**, v. 365, p. 186–207, abr. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.02.011>>. Citado na página 13.

LI, X. et al. Investigating the crack initiation and propagation mechanism in brittle rocks using grain-based finite-discrete element method. **Elsevier BV**, v. 127, p. 104219, mar. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2020.104219>>. Citado na página 13.

LIU, M. B.; LIU, G. R. Smoothed particle hydrodynamics (SPH): an overview and recent developments. **Springer Science and Business Media LLC**, v. 17, n. 1, p. 25–76, fev. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11831-010-9040-7>>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.

LIU, S. et al. A symmetric particle-based simulation scheme towards large scale diffuse fluids. **MDPI AG**, v. 10, n. 4, p. 86, mar. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/sym10040086>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 22.

MAGALHAES, F. G. R. **A Study on Granular Hopper Flow via Discrete Element Method Computational Simulations**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 11, 13 e 20.

MATUTTIS, H.-G.; CHEN, J. **Understanding the Discrete Element Method: Simulation of Non-Spherical Particles for Granular and Multi-Body Systems**. Singapore: [s.n.], 2014. ISBN 9781118567203. Citado na página 18.

MONAGHAN, J. Smoothed particle hydrodynamics and its diverse applications. **Annual Reviews**, v. 44, n. 1, p. 323–346, jan. 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-120710-101220>>. Citado na página 22.

POSCHEL, T. **Computational granular dynamics : models and algorithms**. Berlin: Springer-Verlag, 2005. ISBN 978-3-540-27720-0. Citado na página 10.

SUN, W.-K.; ZHANG, L.-W.; LIEW, K. A smoothed particle hydrodynamics–peridynamics coupling strategy for modeling fluid–structure interaction problems. **Elsevier BV**, v. 371, p. 113298, nov. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113298>>. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 21.

TAVARES, A. M. **Simulação de materiais granulares aplicada a transportadores de correia**. Tese (Tese de Doutorado em Modelagem Matemática e Computacional) — Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG), 2018. Citado na página 13.

VERLET, L. Computer "experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. **American Physical Society**, v. 159, n. 1, p. 98–103, jul. 1967. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.159.98>>. Citado na página 22.

WEINHART, T. et al. Fast, flexible particle simulations — an introduction to MercuryDPM. **Elsevier BV**, v. 249, p. 107129, abr. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.107129>>. Citado na página 13.

ZHU, H. et al. Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 23, p. 5728–5770, 2008. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250908004168>>. Citado na página 11.

Apêndices

APÊNDICE A – Código Gerador

Código em Python utilizado no Blender™ para gerar sistema de experimentos e executar simulação.

```
import bpy
import bmesh
from bmesh.ops import spin
import math

n_esferas = 2000
basfunil = 1
alfa = [V1] #Variável para ângulo do funil
topo = 20/(math.tan(alfa* math.pi)) + basfunil
atrito = [V2] #Atrito entre grãos
semente = [V3] #Variável de repetibilidade de experimentos

#DELETA TODOS OS ITENS
item='CAMERA'
bpy.ops.object.select_all(action='DESELECT')
bpy.ops.object.select_by_type(type=item)
bpy.ops.object.delete()

#CRIAR BASE
bpy.ops.mesh.primitive_plane_add(location=(0,0,14))
base = bpy.context.scene.objects["Plane"]
base.scale.x=100
base.scale.y=100

for obj in bpy.context.selected_objects:
    obj.modifiers.new(type='COLLISION', name='colisao_plano')
    obj.collision.damping_factor = 1
    obj.collision.damping = 1
    obj.collision.thickness_inner = 1
    obj.collision.thickness_outer = 1
    obj.collision.friction_factor = 1

#CRIAR FUNIL
bpy.ops.mesh.primitive_cone_add(radius1=topo, radius2=basfunil, depth=10, enter_editmode=False, align='WORLD', location=(0, 0, 25),
scale=(1, 1, 1))

funil = bpy.context.scene.objects['Cone']
bpy.ops.transform.rotate(value=3.14159, orient_axis='X', orient_type='GLOBAL', orient_matrix=((1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)),
orient_matrix_type='GLOBAL', constraint_axis=(True, False, False), mirror=True, use_proportional_edit=False,
proportional_edit_falloff='SMOOTH', proportional_size=1, use_proportional_connected=False, use_proportional_projected=False)

for obj in bpy.context.selected_objects:
    obj.modifiers.new(type='COLLISION', name='colisao_funil')
    obj.collision.damping_factor = 0
    obj.collision.damping = 1
    obj.collision.thickness_inner = 1
    obj.collision.friction_factor = 0
    obj.collision.absorption = 1
    obj.collision.damping_factor = 1

for obj in bpy.context.selected_objects:
    obj.name = "Funil"

#REMOVE TAMPA E BASE DO FUNIL
bpy.ops.object.editmode_toggle()
bpy.ops.mesh.edge_split()
bpy.ops.mesh.separate(type='LOOSE')
bpy.ops.object.editmode_toggle()

bpy.ops.object.select_all(action='DESELECT')
bpy.data.objects['Funil.002'].select_set(True)
bpy.ops.object.delete()

bpy.ops.object.select_all(action='SELECT')
bpy.data.objects['Plane'].select_set(False)
bpy.data.objects['Camera'].select_set(False)
bpy.data.objects['Light'].select_set(False)

bpy.context.view_layer.objects.active = bpy.data.objects['Funil.001']
bpy.ops.object.join()

#CRIAR MODELO DE GRÃO
bpy.ops.mesh.primitive_uv_sphere_add(radius=1, enter_editmode=False, align='WORLD', location=(100, 100, 1), scale=(1, 1, 1))
modelo=bpy.context.scene.objects["Sphere"]
```

```
#CRIAR BASE DO FUNIL
bpy.ops.mesh.primitive_plane_add(location=(0,0,20))
base = bpy.context.scene.objects["Plane.001"]
base.scale.x=1
base.scale.y=1

for obj in bpy.context.selected_objects:
    obj.modifiers.new(type='COLLISION', name='colisao_plano')
    obj.collision.damping_factor = 1
    obj.collision.damping = 1
    obj.collision.thickness_inner = 1
    obj.collision.thickness_outer = 1
    obj.collision.friction_factor = 1

#CRIAR GERADOR
bpy.ops.mesh.primitive_cube_add(size=2.0, calc_uvns=True, enter_editmode=False, align='WORLD', location=(0, 0, 25), rotation=(0.0, 0.0, 0.0), scale=(2, 2, 2, 4.4))
gerador = bpy.context.scene.objects["Cube"]

obj = bpy.context.active_object
if len(obj.particle_systems) == 0:
    obj.modifiers.new("part", type='PARTICLE_SYSTEM')
    part = obj.particle_systems[0]

#PARTICULAS
#EMISSION
settings = part.settings
settings.name = 'graos'
settings.count = n_esferas
settings.frame_start = 0
settings.frame_end = 0
settings.lifetime = 100000
settings.lifetime_random = 0
settings.emit_from = 'VOLUME'
settings.distribution = 'GRID'
settings.grid_resolution = 20
bpy.context.object.particle_systems["part"].seed = 1
bpy.data.particles["graos"].grid_random = semente

#VELOCITY
settings.normal_factor = 0

#ROTATION
settings.use_rotations = False
settings.rotation_mode = 'VEL'
settings.use_dynamic_rotation = False
bpy.data.particles["graos"].angular_velocity_mode = 'NONE'

#PHYSICS
settings.mass = 5
settings.use_multiply_size_mass = True
settings.use_size_deflect = True
settings.damping = 0
settings.integrator = 'VERLET'
settings.timestep = 0.01

#RENDER
settings.render_type = 'OBJECT'
settings.particle_size = 0.1
settings.instance_object = bpy.data.objects["Sphere"]
settings.mol_collision_damp = 0
settings.mol_friction = atrito
settings.use_rotation_instance = False

#MOLECULAR
settings.mol_active = True
settings.mol_selfcollision_active = True
settings.mol_othercollision_active = True
bpy.context.scene.frame_end = 100000
bpy.context.scene.mol_substep = 5

#DENSITY
bpy.data.particles["graos"].mol_density_active = True
bpy.data.particles["graos"].mol_matter = '-1'
bpy.data.particles["graos"].mol_density = 8000

bpy.context.object.show_instancer_for_render = False
bpy.context.object.show_instancer_for_viewport = False
```