

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS (UFSCar)
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA (CCET)
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Karla Raphaela Braga de Melo

**MODELAGEM E ANÁLISE EXPERIMENTAL DO ESCOAMENTO DE ESFERAS
MACIAS EM FLUIDOS VISCOSOS: ESTUDO DE COLISÕES PARTÍCULA-
PARTÍCULA E PARTÍCULA-SUPERFÍCIE E DA INTERAÇÃO PARTÍCULA-
FLUIDO**

São Carlos – SP

2020

Karla Raphaela Braga de Melo

**MODELAGEM E ANÁLISE EXPERIMENTAL DO ESCOAMENTO DE ESFERAS
MACIAS EM FLUIDOS VISCOSOS: ESTUDO DE COLISÕES PARTÍCULA-
PARTÍCULA E PARTÍCULA-SUPERFÍCIE E DA INTERAÇÃO PARTÍCULA-
FLUIDO**

Dissertação de mestrado apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Química da Universidade Federal de São
Carlos, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Engenharia
Química.

Universidade Federal de São Carlos

Orientadora: Prof^ª. Dr^ª. Gabriela Cantarelli Lopes

São Carlos – SP

2020

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE KARLA RAPHAELA BRAGA DE MELO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 20 DE FEVEREIRO DE 2020.

BANCA EXAMINADORA:


Gabriela Cantarelli Lopes
Orientadora, UFSCar


Thiago Faggion de Pádua
UFSCar


Claudio Roberto Duarte
UFU

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida, por me guiar nos momentos difíceis e me proporcionar tantas bênçãos.

Aos meus pais, José Braga e Sônia, meus maiores incentivadores e apoiadores, que mesmo longe, estão tão perto. Pelos quais nutro a maior admiração e amor que existem.

Ao meu namorado, Pedro, por todo o bem que me faz, por compreender os momentos de ausência, por suas palavras de otimismo e todo amor demonstrado. Por me fazer sentir muito abençoada em tê-lo para dividir a vida.

Aos meus familiares, que sempre torceram pela realização dos meus sonhos e enchem minha vida de felicidade.

À minha orientadora, Profa. Dra. Gabriela Cantarelli, pela orientação nesse trabalho, pela paciência e humildade em compartilhar sua experiência e, principalmente, por sua amizade e compreensão.

À Raíssa Andrade, por dividir essa jornada comigo desde o primeiro dia, pela paciência, confiança, amizade e pelo apoio fundamental na realização deste trabalho. Por se tornar uma irmã que levarei para sempre.

Aos alagoanos, Bárbara Andrade, Luiz Daniel e Thalyne Rocha, que são por vezes minha família em São Carlos e fazem a saudade de casa muito menor.

Aos amigos conquistados no mestrado, que trouxeram mais leveza e alegria aos meus dias. Em especial à Laira Borges, por se fazer presente e ter se tornado uma grande amiga.

Aos amigos de laboratório, João Pedro, Ricardo Arbach e Victor Oliveira, pela disposição em ajudar, pelas risadas e conversas compartilhadas.

Aos amigos de graduação, em especial à Jullyana Sirley, Letícia Leite, Iza Toledo e Wedja Vieira, que ainda hoje dividem alegrias, apoiam nas dificuldades e tornaram-se parte da minha vida. E em especial, ao professor João Inácio Soletti, que sempre compartilhou o amor pela Engenharia Química e me inspirou a seguir a carreira acadêmica.

Aos amigos de longa data, principalmente à Roberta Meyce, Livia Brandão, Lisa Danielly, Stephanie Marinho, Priscila Santandrea, Iza Toledo, Gabriela Falcão e Fernanda Amorim, que mesmo com a distância, estiveram ao meu lado com palavras de incentivo e vibraram com cada conquista.

À Universidade Federal de São Carlos, ao CNPQ e à CAPES – código de financiamento 001, pelos recursos oferecidos.

À FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Processo 2018/20711-2) pelo apoio financeiro essencial para realização dessa pesquisa.

Resumo

Escoamentos sólido-fluido são amplamente empregados em processos das indústrias química, bioquímica, alimentícia e de petróleo. Dentre estes, pode-se citar: etapas de cristalização e sedimentação, operações hidrometalúrgicas, contra-lavagem de filtros granulares, adsorção e troca iônica, tratamento de efluentes, entre outros. Nesses processos, a colisão entre partículas ou entre partículas e superfície desempenha importante papel no comportamento fluidodinâmico e na dissipação de energia resultante de colisões e, portanto, compreender o comportamento das partículas neste tipo de escoamento é fundamental para melhorar a eficiência dos processos e equipamentos. Nesse contexto, este trabalho investigou as colisões partícula-partícula e partícula-superfície em escoamentos sólido-fluido, com ênfase em partículas de baixa resistência mecânica, consideradas partículas macias. Para isso, partículas de diferentes propriedades elásticas, superficiais e físicas foram caracterizadas quanto à densidade, diâmetro, rugosidade e módulo de Young. Como partículas rígidas, foram empregadas esferas de ABS (com e sem revestimento), de Fluorelastômero e de Nitrila, enquanto as partículas macias foram sintetizadas a partir de soluções de alginato de sódio em soluções de cloreto catiônicas (Ca^{2+} , Ba^{2+} e Co^{2+}). As interações resultantes das colisões do tipo partícula-superfície e partícula-partícula foram analisadas experimentalmente a partir de medidas de coeficiente de restituição em um equipamento tipo pêndulo. Os resultados demonstraram influência das propriedades superficiais e elásticas sobre o coeficiente, evidenciando uma tendência decrescente desse parâmetro com o aumento da velocidade de colisão, mais significativo sobre as partículas macias, e com a diminuição do módulo de Young. A partir das observações experimentais, foi proposto um modelo de regressão para cada grupo de partículas, a fim de prever o coeficiente de restituição. Além do pêndulo, a influência da velocidade de impacto sobre o coeficiente de restituição das esferas de ABS foi também avaliada a partir de experimentos em queda livre. Observou-se pouca influência da velocidade de impacto sobre as esferas revestidas e maior proximidade entre os resultados obtidos para os dois métodos de medição para as esferas de ABS sem recobrimento. Ainda, foram realizados experimentos em água, nos quais obtiveram-se valores de coeficiente de restituição efetivo significativamente menores, evidenciando o efeito de forças viscosas dissipativas no momento da colisão. Por fim, valores de coeficiente da literatura foram testados em simulações usando Fluidodinâmica Computacional e o Método dos Elementos Discretos. Os resultados demonstraram que as simulações descreveram de modo satisfatório o comportamento das colisões de partículas com propriedades elásticas distintas.

Palavras-chave: Escoamento sólido-líquido; Colisões; Coeficiente de restituição; Coeficiente de restituição efetivo; Fluidodinâmica computacional.

Abstract

Solid-fluid flows are widely used in chemical, biochemical, food and petroleum processes. These include crystallization and sedimentation steps, hydrometallurgical operations, backwashing of granular filters, adsorption and ion exchange, effluent treatment, among others. In these processes, particle or particle-surface collision influences the fluid dynamics and energy dissipation resulting from collisions, and therefore understanding the behavior of particles in this type of flow is critical to improving process and equipment efficiency. In this context, this work investigated particle-particle and particle-surface collisions in solid-fluid flows, with emphasis on low mechanical strength particles, considered soft particles. For this, particles with different elastic, superficial and physical properties were characterized for density, diameter, roughness and Young's modulus. As hard particles, ABS (coated and uncoated), Fluorelastomer and Nitrile spheres were used, while soft particles were synthesized from sodium alginate solutions in cationic chloride solutions (Ca^{2+} , Ba^{2+} and Co^{2+}). The interactions resulting from particle-surface and particle-particle collisions were experimentally analyzed from restitution coefficient measurements on pendulum-type equipment. The results showed influence of surface and elastic properties on the coefficient, showing a decreasing tendency of this parameter with the increase of the collision velocity, more significant on the soft particles, and with the decrease of Young's modulus. From the experimental observations, a regression model was proposed for each particle group in order to predict the coefficient of restitution. In addition to the pendulum, the influence of the impact velocity on the coefficient of ABS spheres was also evaluated from free fall experiments. There was little influence of the impact velocity on the coated balls and greater proximity between the results obtained for the two measurement methods for uncoated ABS balls. Water experiments were also performed, in which significantly lower effective restitution coefficient values were obtained, showing the effect of dissipative viscous forces at the moment of collision. Finally, coefficient values from the literature were tested in simulations using Computational Fluid Dynamics and the Discrete Element Method. The results showed that simulations satisfactorily described the particle collisions behavior with distinct elastic properties.

Keywords: Solid-liquid flow; Collisions; Coefficient of restitution; Effective coefficient of restitution; Computational Fluid Dynamics.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Esquema ilustrativo do funcionamento de um biorreator.	16
Figura 2: Tipos de colisões.	20
Figura 3: Estágios da colisão entre dois corpos.	22
Figura 4: Fluxograma dos procedimentos experimentais empregados no trabalho.	31
Figura 5: ABS sem recobrimento (A), ABS com uma camada de recobrimento (B), ABS com duas camadas de recobrimento (C).	32
Figura 6: Esquema do procedimento experimental para síntese de partículas de alginato.	33
Figura 7: Interface do software OLS4100 e regiões selecionadas para medição.	36
Figura 8: Esquema do aparato experimental usado nos testes de colisão partícula-superfície em queda livre.	38
Figura 9: Imagem (A) e esquema (B) do aparato experimental para a medida do coeficiente de restituição.	39
Figura 10: Esquema das colisões partícula-superfície no aparato experimental tipo pêndulo.	40
Figura 11: Superfície revestida de partículas de ABS sem recobrimento (A), de borracha nitrílica (B) e de alginato de cálcio (C)	41
Figura 12: Fluxograma das simulações realizadas neste trabalho.	42
Figura 13: Malha retangular (A) e seção com maior detalhamento (B)	49
Figura 14: Malha do pêndulo	49
Figura 15: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de Borracha nitrílica.	55
Figura 16: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de Fluorelastômero.	55
Figura 17: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de ABS sem recobrimento.	56
Figura 18: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de ABS com uma camada de recobrimento.	56
Figura 19: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de ABS com 2 camadas de recobrimento.	57
Figura 20: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de alginato.	59
Figura 21: Coeficientes de restituição para partículas de ABS em função da altura de queda.	60
Figura 22: Coeficiente de restituição em função do ângulo inicial de queda, obtido a partir da altura.	65
Figura 23: Coeficiente de restituição em função do ângulo inicial de queda, obtido a partir do ângulo.	65
Figura 24: Coeficiente de restituição em função do ângulo inicial de queda, obtido a partir da velocidade.	65
Figura 25: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto.	66
Figura 26: Coeficiente de restituição das partículas de alginato em função da velocidade de impacto.	69
Figura 27: Coeficiente de restituição para as ABS sem recobrimento, obtido pelos dois métodos experimentais.	69

Figura 28: Coeficiente de restituição para as ABS com 1 camada de recobrimento, obtido pelos dois métodos experimentais.....	70
Figura 29: Coeficiente de restituição para as ABS com 2 camadas de recobrimento, obtido pelos dois métodos experimentais.....	70
Figura 30: Coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações para as partículas de ABS.	74
Figura 31: Coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações para as partículas de borracha nitrílica.	74
Figura 32: Coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações para as partículas de alginato.	74
Figura 33: Coeficiente de restituição em colisões partícula-partícula em função da velocidade de impacto.	76
Figura 34: Coeficiente de restituição das partículas de ABS sem recobrimento em colisões partícula-partícula e partícula-superfície em função da velocidade de impacto.	77
Figura 35: Coeficiente de restituição das partículas de borracha nitrílica em colisões partícula-partícula e partícula-superfície em função da velocidade de impacto.....	77
Figura 36: Coeficiente de restituição das partículas de alginato de cálcio em colisões partícula-partícula e partícula-superfície em função da velocidade de impacto.....	78
Figura 37: Coeficiente de restituição a seco x efetivo em função do ângulo de soltura.	80
Figura 38: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto.	80
Figura 39: Coeficiente de restituição efetivo em função da velocidade de impacto.	81
Figura 40: Comparação entre os métodos do pêndulo e de queda livre.....	83
Figura 41: Coeficiente de restituição em função do número de dados/tempo para as partículas de ABS com recobrimento não uniforme.....	84
Figura 42: Coeficiente de restituição em função do número de dados/tempo para as partículas de Alginato Ca^{2+}	84
Figura 43: Comportamento dos dados de entrada e saída de coeficiente de restituição para as partículas de ABS com recobrimento não uniforme.	86
Figura 44: Comportamento dos dados de entrada e saída de coeficiente de restituição para as partículas de Alginato Ca^{2+}	86
Figura 45: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto para as partículas de ABS com recobrimento não uniforme.....	87
Figura 46: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto para as partículas de Alginato Ca^{2+}	88
Figura 47: Coeficiente de restituição efetivo em função do número de Stokes	89

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Variáveis independentes para a síntese das esferas de alginato	34
Tabela 2 - Planejamento experimental fatorial 3^3 para o preparo de esferas de alginato em solução de Cloreto	34
Tabela 3 - Propriedades das partículas de ABS com recobrimento não uniforme e do fluido	46
Tabela 4 - Propriedades das partículas de ABS com recobrimento não uniforme	46
Tabela 5 - Propriedades de partículas de aço	47
Tabela 6 - Propriedades dos líquidos	47
Tabela 7- Dados da malha	49
Tabela 8 - Formação das esferas de alginato de sódio	50
Tabela 9 - Dados de formação de esferas de alginato com a adição de dióxido de Titânio	51
Tabela 10 - Medidas de diâmetro, circularidade, densidade e módulo de Young para partículas de diferentes propriedades	52
Tabela 11 - Velocidade de compressão de ondas elásticas	53
Tabela 12 - Dados de rugosidade média para partículas poliméricas com diferentes aproximações	54
Tabela 13 - Dados de rugosidade média para partículas de alginato com diferentes aproximações	58
Tabela 14 - Valores de coeficiente de restituição e velocidade de impacto para diferentes alturas de queda*	60
Tabela 15 - Dados de altura de rebatimento e velocidades de impacto e afastamento	62
Tabela 16 - Valores de coeficiente de restituição, determinados a partir das alturas, do ângulo e das velocidades, para partículas rígidas em função do ângulo inicial*	63
Tabela 17 - Valores de coeficiente de restituição para partículas macias em função do ângulo inicial*	64
Tabela 18 - Correlações para o cálculo do coeficiente de restituição	71
Tabela 19 - Valores de deformação máxima	72
Tabela 20 - Coeficientes de restituição experimentais e obtidos por meio de correlação para partículas de ABS	72
Tabela 21 - Coeficientes de restituição experimentais e obtidos por meio de correlação para partículas de borracha	73
Tabela 22 - Coeficientes de restituição experimentais e obtidos por meio de correlação para partículas de alginato	73
Tabela 23 - Valores de coeficiente de restituição e velocidade de impacto para colisões partícula-partícula a partir de diferentes ângulos iniciais*	76
Tabela 24 - Caracterização das esferas de aço	79
Tabela 25 - Coeficiente de restituição efetivo das esferas de aço em água*	79
Tabela 26 - Coeficiente de restituição a seco das esferas de aço*	79
Tabela 27 - Dados de forças de arraste e lubrificação	81
Tabela 28 - Dados de coeficiente de restituição obtidos para as simulações do método do pêndulo e de queda livre	83

Tabela 29 - Valores de coeficiente de restituição de entrada e saída para as ABS com recobrimento não uniforme e partículas de Alginato Ca^{2+}	85
Tabela 30 - Valores de coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto	87

LISTA DE SÍMBOLOS

<i>F</i>	Vetor força	[N]
<i>m</i>	Massa	[kg]
<i>t</i>	Tempo	[s]
<i>v</i>	Vetor velocidade	[m s ⁻¹]
<i>R</i>	Forças de restituição	[N]
<i>D</i>	Forças de deformação	[N]
<i>e</i>	Coefficiente de restituição	[-]
<i>v₂</i>	Velocidade posterior à colisão	[m s ⁻¹]
<i>v₁</i>	Velocidade anterior à colisão	[m s ⁻¹]
<i>e_v</i>	Coefficiente de restituição calculado a partir da velocidade	[-]
<i>g</i>	Gravidade	[m s ⁻²]
<i>h₁</i>	Altura de queda	[m]
<i>h₂</i>	Altura de rebatimento	[m]
<i>e_h</i>	Coefficiente de restituição calculado a partir da altura	[-]
<i>α₁</i>	Ângulo inicial	[rad]
<i>α₂</i>	Ângulo final	[rad]
<i>e_α</i>	Coefficiente de restituição calculado a partir do ângulo	[-]
<i>ω_i</i>	Componente angular da velocidade	[rad s ⁻¹]
<i>v_i</i>	Componente linear da velocidade	[m s ⁻¹]
<i>d_p</i>	Diâmetro da partícula	[m]
<i>k_c</i>	Quantidade de partículas	[-]
<i>f_{pf,i}</i>	Força de interação partícula-fluido	[N]
<i>ρ_p</i>	Densidade da partícula	[kg m ⁻³]
<i>ρ_f</i>	Densidade do fluido	[kg m ⁻³]
<i>f_l</i>	Força de lubrificação	[N]
<i>f_a</i>	Força de adesão	[N]
<i>f_{c,ij}</i>	Força elástica	[N]
<i>f_{d,ij}</i>	Força de amortecimento viscoso	[N]

E'	Módulo de Young composto	[Pa]
E	Módulo de Young	[Pa]
σ	Razão de Poisson e desvio padrão	[-]
m_p	Massa da partícula	[kg]
r_p	Raio da partícula	[m]
G'	Módulo de cisalhamento efetivo	[Pa]
G	Módulo de cisalhamento	[Pa]
δ_n	Deslocamento normal	[m]
δ_t	Deslocamento tangencial	[m]
$M_{t,ij}$	Torque tangencial	[N m]
$M_{r,ij}$	Torque de fricção de rolamento	[N m]
$\mu_{r,ij}$	Coefficiente de fricção de rolamento	[-]
Ra	Rugosidade média	[m]
y	Módulo de Young	[Pa]
F_d	Força de arraste	[N]
C_p	Coefficiente de arraste	[-]
A	Área transversal ao escoamento	[m ²]
F_L	Força de lubrificação	[N]
h	Distância mínima	[m]
Y	Tensão de deformação máxima	[N m ⁻²]

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO	15
1.1. Objetivos.....	17
1.1.1. Objetivo geral.....	17
1.1.2. Objetivos específicos.....	17
1.2. Estrutura da dissertação	18
CAPÍTULO 2: REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	19
2.1. Colisões partícula-partícula ou partícula-superfície	19
2.2. Coeficiente de restituição	22
2.3. Análise computacional de escoamentos sólido-fluido.....	28
CAPÍTULO 3: PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS	31
3.1. Partículas.....	32
3.1.1. Recobrimento das esferas de ABS.....	32
3.1.2. Síntese das esferas de alginato	32
3.2. Caracterização das partículas	35
3.2.1 Densidade	35
3.2.2 Diâmetro	35
3.2.3 Rugosidade	35
3.2.4 Módulo de Young.....	37
3.3. Medidas de coeficiente de restituição.....	37
3.3.1. Queda livre	38
3.3.2. Pêndulo	38
3.4. Medidas de coeficiente de restituição efetivo	41
CAPÍTULO 4: PROCEDIMENTO NUMÉRICO.....	42
4.1. Equacionamento	42
4.2. Simulações	45
4.2.1. Simulações preliminares	45
4.2.2. Simulações de colisões em ar	46
4.2.3. Simulações de colisões em líquidos viscosos	47
4.3. Malhas.....	48
CAPÍTULO 5: RESULTADOS E DISCUSSÃO	50
5.1. Síntese das esferas de alginato.....	50

5.2. Caracterização das partículas	52
5.3. Colisões partícula-superfície em ar	60
5.3.1. Queda livre	60
5.3.2. Pêndulo	62
5.3.3. Queda livre x pêndulo	69
5.4. Correlações para o cálculo do coeficiente de restituição.....	71
5.5. Colisões partícula-partícula.....	75
5.6. Efeito de forças hidrodinâmicas.....	78
5.6.1. Colisões partícula-superfície em água	78
5.7. Análise numérica	83
5.7.1. Teste de independência do método.....	83
5.7.2. Teste de independência da frequência de coleta de dados.....	84
5.7.3. Calibração do parâmetro de entrada.....	85
5.7.4. Variação da velocidade impacto.....	87
5.7.5. Efeito da força de lubrificação	89
CAPÍTULO 6: CONCLUSÕES	91
Referências bibliográficas.....	94

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Escoamentos sólido-fluido são amplamente empregados em processos de diversos setores industriais. Como exemplo, citam-se as etapas de cristalização e sedimentação, operações hidrometalúrgicas, contra lavagem de filtros granulares, adsorção e troca iônica, tratamento de efluentes e outras aplicações das áreas de mineração, petróleo, indústria alimentícia, de energia, química, dentre outras (EPSTEIN, 2003).

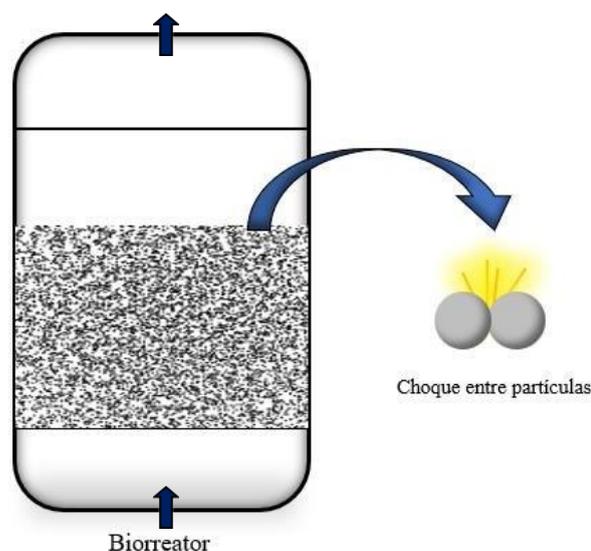
Nesses processos, é fundamental compreender as interações físicas entre partículas e dessas com o fluido circundante, para então conhecer o comportamento hidrodinâmico do sistema multifásico e projetar ou aperfeiçoar os equipamentos utilizados (DU, 2006). Dentre outros fatores, o desempenho desses processos é fortemente influenciado pelas características da fase particulada, que compreende principalmente as propriedades físicas, elásticas e superficiais das partículas. Além da interação entre as fases, essas propriedades também exercem influência sobre as interações das partículas entre si e com as paredes do equipamento, as quais ocorrem principalmente por meio de colisões do tipo partícula-partícula e partícula-superfície.

De modo geral, essas colisões influenciam o movimento das partículas e são responsáveis pela forma como a maior parte da energia cinética é dissipada ao longo do escoamento. Os choques em escoamento sólido-fluido são avaliados principalmente pela frequência de colisões e pelo parâmetro de coeficiente de restituição (AGUILAR-CORONA *et al.*, 2011), o qual é uma medida da elasticidade da colisão e pode ser definido como a razão entre as velocidades relativas posterior e anterior à colisão entre dois corpos em movimento ou entre o corpo e a superfície (DU, 2006; GONDRET, 2002). Esse parâmetro é influenciado por diversas variáveis, como as propriedades das partículas (densidade, rugosidade, elasticidade, tamanho e formato), as características da superfície (material, espessura, rugosidade), as propriedades do fluido (densidade e viscosidade) e a velocidade de impacto no momento da colisão.

Por outro lado, a maioria dos estudos experimentais acerca da influência de diferentes parâmetros sobre o coeficiente de restituição refere-se a partículas rígidas, que não representam a fase sólida presente em escoamentos de determinados equipamentos, como por exemplo, o biorreator de leito fluidizado.

O princípio de funcionamento do biorreator (Figura 1) envolve a passagem de fluido (água residual) através de um leito estático do reator com uma velocidade superficial suficiente para suspender as partículas, podendo contar com o auxílio de ar para a distribuição uniforme do efluente no leito. À medida em que o efluente percola o leito, aumenta-se a densidade de microrganismos na superfície das partículas. Estes consomem parte dos poluentes presentes na fase líquida. Por se tratar de um escoamento denso, tem-se uma alta frequência de colisão de partículas no interior desses equipamentos (BURGHATTE, 2013).

Figura 1: Esquema ilustrativo do funcionamento de um biorreator.



Fonte: Elaborada pelo autor

Em aplicações desses equipamentos, como o tratamento de efluentes, utilizam-se partículas macias com propriedades elásticas diferenciadas, denominadas biopartículas. Essas são compostas por microrganismos imobilizados em uma matriz gelatinosa ou por partículas inertes (rígidas ou macias) revestidas por biofilmes.

Durante as colisões, essas partículas perdem energia no momento de impacto e também por deformação plástica, o que não se observa em colisões com partículas rígidas. Assim, nesses processos são esperados baixos valores de coeficiente de restituição, que podem chegar a valores muito próximos a zero. Essa diferença entre os meios de dissipação de energia para as partículas rígidas e macias evidencia a necessidade de maior investigação sobre o comportamento do coeficiente de restituição para partículas de características elásticas distintas.

Além disso, na Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*), o coeficiente de restituição é tido como um parâmetro essencial para os modelos de contato presentes em simulações envolvendo partículas, principalmente aqueles que utilizam o Método dos Elementos Discretos (DEM, do inglês *Discrete Element Method*), uma vez que este parâmetro descreve a energia absorvida nas colisões durante o escoamento. Sendo assim, para simular escoamentos sólido-fluido com precisão, é fundamental que os valores de entrada desse parâmetro sejam corretamente estimados para garantir a qualidade dos dados de saída. Caso contrário, pode haver pouca confiança nos resultados das simulações.

No entanto, o que se observa é que a maioria dos estudos numéricos utiliza valores genéricos de coeficiente de restituição e trata de colisões de partículas rígidas em escoamentos à seco (como colisões no vácuo ou em um fluido de resistência desprezível), não considerando as deformações permanentes, partículas não esféricas ou a dissipação de energia em fluidos viscosos. Assim, devido à ausência de dados na literatura que possam ser empregados nas simulações, torna-se um desafio analisar numericamente o comportamento de equipamentos como o biorreator.

Diante do contexto apresentado, na seção seguinte são expostos os objetivos geral e específicos do presente trabalho.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo geral

O estudo apresentado nesta dissertação teve como objetivo geral obter uma melhor compreensão sobre as colisões partícula-partícula e partícula-superfície e as interações partícula-fluido em sistemas sólido-fluido com partículas de diferentes propriedades físicas, elásticas e superficiais, com ênfase em partículas de baixa resistência mecânica, a partir do estudo experimental e numérico do parâmetro de coeficiente de restituição.

1.1.2. Objetivos específicos

- Obter experimentalmente dados de coeficiente de restituição;
- Avaliar a influência das propriedades físicas, superficiais e elásticas das partículas sobre o coeficiente de restituição;
- Avaliar a influência de diferentes fluidos circundantes sobre o coeficiente de restituição efetivo;
- Investigar a variação do coeficiente em função da velocidade de impacto;

- Investigar numericamente as colisões por meio de simulações CFD-DEM.

1.2. Estrutura da dissertação

A dissertação apresentada foi dividida em seis capítulos.

No capítulo 1 é apresentada uma introdução ao tema desenvolvido no trabalho, com ênfase nas aplicações de escoamentos sólido-fluido e na influência das colisões sobre esses sistemas.

No capítulo 2 é apresentada uma revisão teórica dos principais tópicos necessários para a melhor compreensão desse estudo. Para isso, são apresentados aspectos físicos envolvendo a dinâmica das partículas em escoamento sólido-fluido, além das definições e relevância do coeficiente de restituição e alguns princípios da Fluidodinâmica Computacional.

Nos capítulos 3 e 4 são descritos a metodologia utilizada nos experimentos e o procedimento numérico usado nas simulações, respectivamente.

No capítulo 5, são apresentados os resultados experimentais e numéricos obtidos a partir dos procedimentos descritos nos capítulos 3 e 4.

Finalmente, no capítulo 6, são apresentadas as conclusões obtidas a partir dos resultados apresentados neste estudo.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Colisões partícula-partícula ou partícula-superfície

Colisões são interações de curta duração entre dois ou mais corpos, ou entre corpos e superfícies de contato, causando simultaneamente a mudança de movimento dos corpos envolvidos no impacto. Em sistemas que envolvem essas interações, no momento do choque de uma partícula, parte do movimento é transferido na forma de energia para a superfície de impacto. Essa energia pode ser quantificada pela equação da quantidade de movimento, obtida a partir da 2ª lei de Newton (Equação 1):

$$F = m \frac{dv}{dt} \quad (1)$$

Esta equação pode ser integrada, resultando na Equação 2. Na qual, surgem os termos correspondentes ao Impulso e Quantidade de movimento, indicando que o Impulso das forças que atuam durante um determinado intervalo de tempo é igual a quantidade de movimento do corpo nesse mesmo intervalo.

$$\underbrace{\int_{t_2}^{t_1} F dt}_{\text{Impulso}} = \int_{v_2}^{v_1} m dv = \underbrace{mv_2 - mv_1}_{\text{Quantidade de movimento}} \quad (2)$$

No momento da colisão, atuam forças impulsivas de deformação que são responsáveis pela dissipação de energia no impacto. Essas são geralmente de curta duração e grande intensidade e tendem a aumentar quanto menor for o tempo de contato, podendo levar a perda significativa de energia mecânica quando estas forças atingem intensidades suficientemente grandes.

Em seguida, o corpo se afasta da superfície devido às forças de restituição, podendo ou não retornar à sua forma original. Os impulsos de deformação e de restituição podem ser obtidos a partir das velocidades da partícula nos instantes anterior, durante e posterior à colisão.

O quociente entre os módulos dos impulsos de restauração e de deformação proporciona o estudo de colisões a partir de uma grandeza denominada coeficiente de restituição, representado na forma da Equação 3.

$$e = \frac{\int R dt}{\int D dt} \quad (3)$$

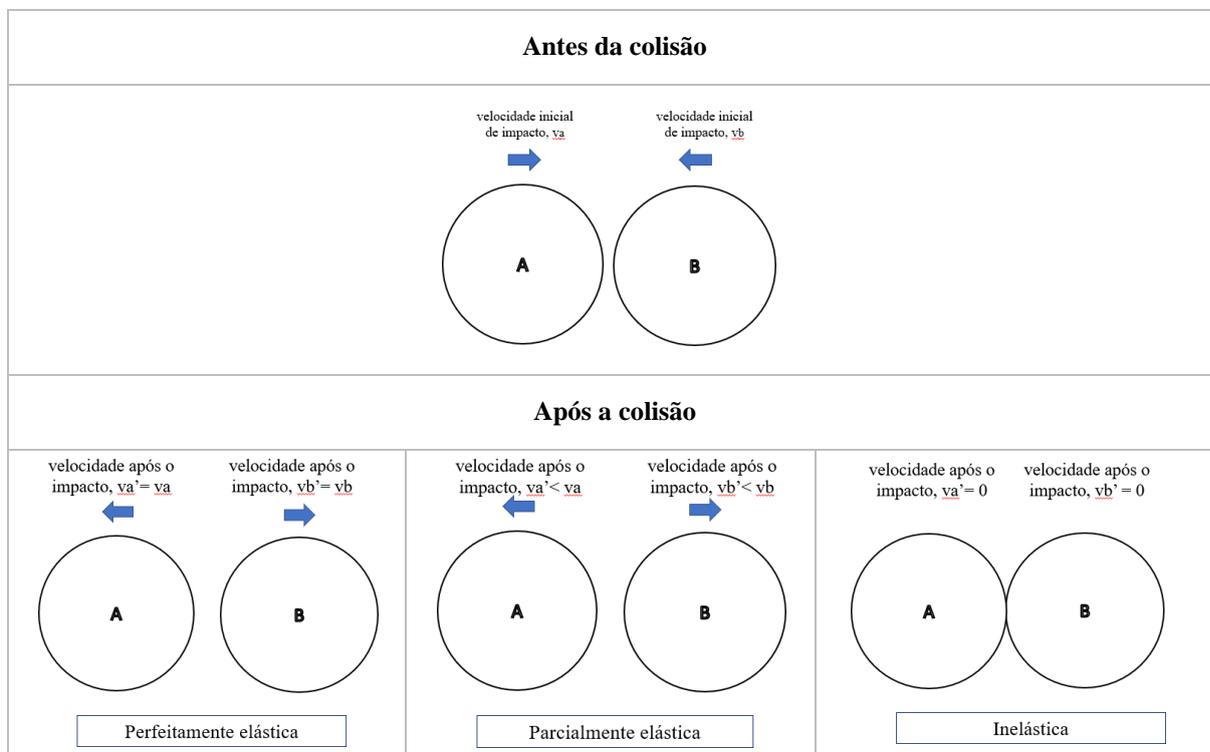
Em que **R** corresponde às forças de restituição e **D**, às de deformação.

Em qualquer colisão, há a conservação da quantidade de movimento do sistema. No entanto, o que distingue uma colisão da outra é a conservação de energia mecânica.

Antes da colisão, os corpos se aproximam com uma energia cinética devido ao seu movimento. Durante, um número grande de ligações moleculares são comprimidas com o impacto e a energia cinética é transformada em energia potencial elástica. Após a colisão, a energia armazenada é convertida em energia cinética à medida em que os corpos se afastam.

Assim, nas colisões a energia cinética inicial pode ser conservada ou dissipada principalmente na forma de calor, atrito ou deformação, conservando a energia total, mas não mais a energia mecânica. De acordo com a forma de conservação de energia, as colisões podem ser classificadas como perfeitamente elásticas, parcialmente elásticas ou inelásticas. Essas são ilustradas na Figura 2.

Figura 2: Tipos de colisões.



Fonte: Elaborada pelo autor

Em uma colisão perfeitamente elástica, toda a energia cinética inicial é convertida em energia elástica momentaneamente e, em seguida, convertida novamente em energia cinética. Portanto, a energia cinética antes e imediatamente após a colisão é conservada.

Na colisão parcialmente elástica, a energia cinética inicial transforma-se parcialmente em energia potencial elástica e outra parte transforma-se em energia térmica, podendo também ser usada como trabalho em deformações permanentes.

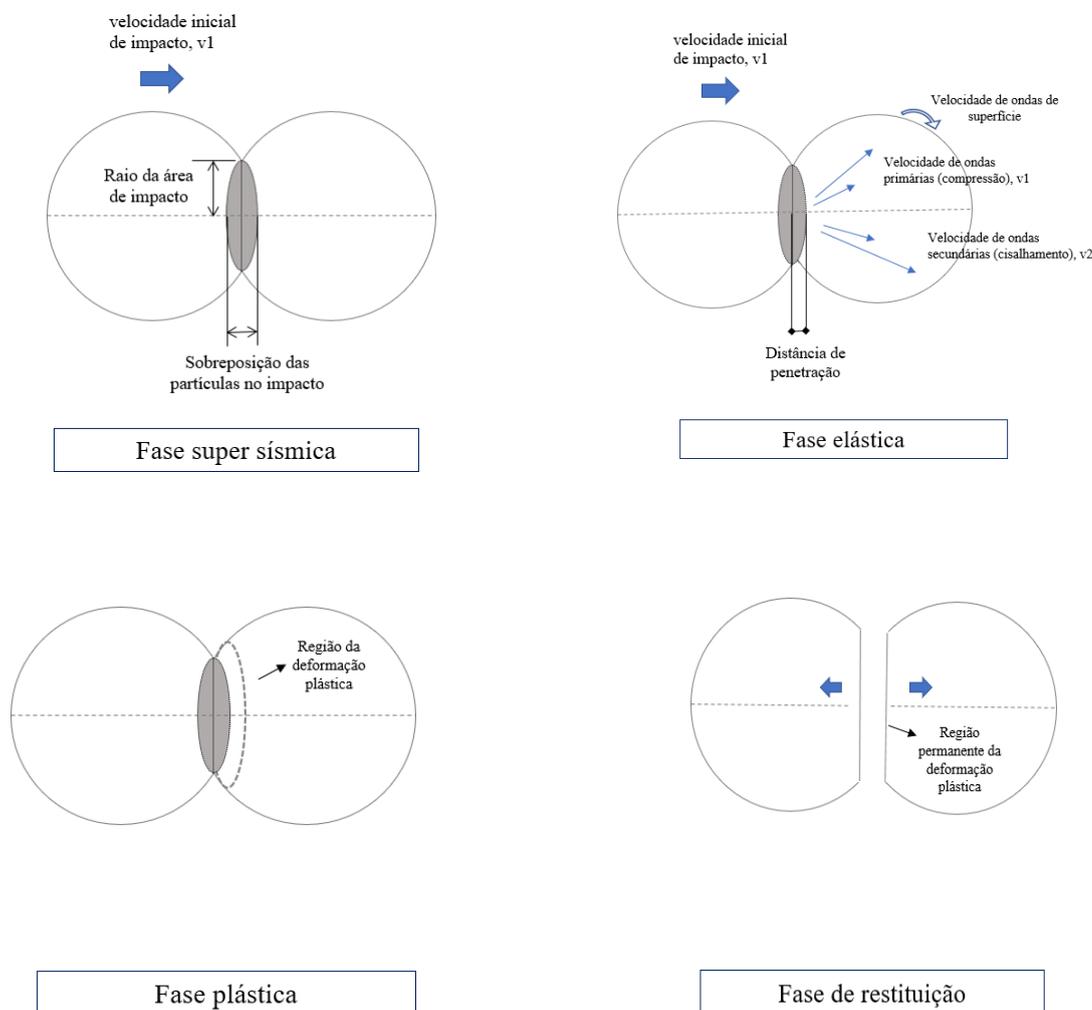
Em uma colisão inelástica, os corpos se unem (ou o corpo e a superfície) e se movem com uma mesma velocidade, não havendo restituição após a colisão. Nesse caso, toda energia cinética no momento do impacto é transferida como calor, plasticidade, fricção ou ondas elásticas, portanto, a energia mecânica é totalmente dissipada em outras formas de energia.

A forma como a energia é dissipada na colisão associa-se com o movimento dos corpos durante a colisão, o qual é descrito por quatro fases: a super-sísmica, a elástica, a elasto-plástica e a de restituição, ilustradas na Figura 3.

A primeira fase (super-sísmica) consiste no impacto inicial entre os corpos e corresponde a um tempo muito curto da colisão, podendo ser negligenciada em diversos sistemas. Na fase elástica, ondas elásticas contribuem para a maior parte de dissipação de energia, mas as forças de deformação não são grandes o suficiente para causar deformação plástica, resultando apenas em deformações elásticas. Quando as tensões resultantes são grandes o suficiente para causar deformação plástica, tem-se a fase elasto-plástica, em que os corpos podem sofrer deformação na região do impacto. Por fim, uma vez que o corpo começa a se afastar, tem início a fase final da restituição, em que as tensões deixam de atuar, até que os corpos não estejam mais em contato. (WEIR e TALLON, 2005; JACKSON *et al.*, 2010; HLOSTA *et al.*, 2018).

As fases da colisão são fundamentais em sistemas sólido-fluido, em que as colisões entre as partículas ou entre as partículas e superfícies desempenham um papel importante no comportamento fluidodinâmico, principalmente em escoamentos densos, no qual o movimento das partículas é controlado não somente por forças de arraste e sustentação, mas também por colisões e forças de contato entre as partículas. Nesses sistemas, diversos fatores exercem influência sobre o tipo e frequência de colisões partícula-partícula e partícula-superfície, tais como a temperatura, ângulo de impacto, tamanho das partículas, propriedades do material e propriedades interfaciais.

Figura 3: Estágios da colisão entre dois corpos.



Fonte: Adaptado de WEIR E TALLON (2005) e HLOSTA *et al.* (2018).

2.2. Coeficiente de restituição

A melhor compreensão das colisões entre as partículas e a superfície, assim como partícula-partícula, dá-se por meio de estimativas de coeficiente de restituição (e). Esse parâmetro é uma medida da elasticidade da colisão e se relaciona com a forma como parte da energia cinética das partículas é dissipada ao longo do escoamento.

O coeficiente de restituição (e) pode ser definido como a razão entre a velocidade relativa posterior (v_2) e a anterior (v_1) à colisão entre dois corpos em movimento ou entre o corpo e a superfície (Equação 4) (DU, 2006; GONDRET, 2002). Os valores de e podem variar entre 0 e 1. Para colisões perfeitamente elásticas tem-se o valor igual a 1 e dissipação de energia

nula, entretanto impactos dessa natureza não ocorrem na realidade. Se a colisão for inelástica, com $e = 0$, não há impulso de restituição e grande parte da energia é dissipada na forma de deformação plástica (ALBUQUERQUE, 2016).

$$e = -\frac{v_2}{v_1} \quad (4)$$

Esse parâmetro também pode ser interpretado como uma medida de conservação de energia mecânica de corpos em colisão. Sendo assim, em escoamentos gás-sólido em ar, para casos em que as forças de arraste e a resistência do ar não têm efeitos relevantes sobre o escoamento, tornando-se negligenciáveis, o coeficiente pode ser obtido considerando que, após o choque, toda a energia cinética é convertida em potencial. Dessa forma, as velocidades v_1 e v_2 podem ser escritas pelas Equações 5 e 6, respectivamente. Enquanto o coeficiente é representado como a raiz quadrada da razão entre as alturas de queda e de rebatimento (ARYAEI *et al.*, 2010; HLOSTA *et al.*, 2018) conforme descrito na Equação 7.

$$v_1 = \sqrt{2gh_1} \quad (5)$$

$$v_2 = \sqrt{2gh_2} \quad (6)$$

$$e = \sqrt{\frac{h_2}{h_1}} \quad (7)$$

Estudos experimentais indicam que diversas variáveis afetam o coeficiente de restituição, como por exemplo: propriedades da partícula (como diâmetro, densidade, módulo de Young ou razão de Poisson), características da superfície de colisão, propriedades do fluido e velocidade de impacto, entre outros.

Quanto às propriedades das partículas, a maior parte dos estudos investiga a influência de propriedades físicas, como o diâmetro, tamanho e forma, sobre o coeficiente. Sendo assim, o efeito de características elásticas, como módulo de Young e razão de Poisson, e superficiais, como a rugosidade, não são comumente investigados nos estudos de colisões.

O módulo de Young é definido como um parâmetro mecânico que mede a rigidez de um material sólido e conseqüentemente, a resistência à deformação elástica sob efeito de uma carga. De modo geral, esse parâmetro descreve a relação entre a tensão transversal aplicada e a

deformação proporcional de um material no regime de elasticidade linear. Maiores deformações são obtidas para um material flexível, que apresentam baixo módulo e se esticam quando puxados ou amassam quando pressionados (JONES e ASHBY, 2018).

Por outro lado, a razão de Poisson é a razão entre as deformações transversal e longitudinal resultantes de uma força de alongamento aplicada (EBNESAJJAD, 2015). Por estarem associadas à resistência do corpo à deformação, tais propriedades devem ser consideradas uma vez que a resistência mecânica do corpo está diretamente associada à deformação do mesmo durante o impacto e, portanto, tende a refletir nos valores de coeficiente de restituição.

Dos estudos recentes acerca do coeficiente de restituição, pode-se citar Aryaei *et al.* (2010) que investigaram a influência do diâmetro das partículas. Para tanto, analisaram colisões de esferas de alumínio e aço, de quatro diâmetros distintos, em superfícies de mesmo material. Foi observado que o coeficiente de restituição diminuiu à medida que os diâmetros das esferas aumentaram.

Lopes *et al.* (2018) avaliaram o comportamento hidrodinâmico de um leito fluidizado de partículas macias e partículas rígidas revestidas com camadas poliméricas que simulavam a presença do biofilme, caracterizadas a partir de diferentes parâmetros, incluindo o coeficiente de restituição. Os resultados mostraram que menores valores de e foram observados para as partículas macias, as quais possuem menor módulo de Young, o que resultou na presença de aglomerados quando estas foram fluidizadas.

Já Ghanbarzadeh *et al.* (2019), por meio de estudo numérico, estudaram o efeito da rugosidade das partículas e constataram que esse parâmetro influencia fortemente nos resultados, de modo que maiores rugosidades levam a menores valores de coeficiente de restituição.

O efeito das características da superfície de colisão sobre o coeficiente de restituição também foi explorado em trabalhos na literatura, como Seifried *et al.* (2010), que estudaram a influência da geometria de contato através da colisão de esferas de aço em superfícies côncavas, convexas e planas e concluíram que a maior dissipação de energia ocorria nas colisões em superfícies convexas, nas quais observaram-se os menores valores de coeficiente de restituição.

Mueller *et al.* (2015) examinaram a relação do coeficiente de restituição de esferas rígidas de vidro com superfícies de vidro de diferentes espessuras e constataram que a espessura

da superfície de contato exerce maior influência para maiores velocidade de impacto, para as quais o coeficiente tende a diminuir.

Dong *et al.* (2018) avaliaram o efeito de diferentes umidades sobre o coeficiente de restituição de micropartículas e constataram a diminuição do coeficiente de restituição normal e do rebote das partículas com o aumento da umidade e, conseqüentemente, a atuação de forças de adesão. Além disso, evidenciaram o aumento da deformação plástica e perda de energia para maiores velocidades de impacto.

Além dos já citados, outros estudos investigam também a relação do coeficiente de restituição com a velocidade de impacto, como Bharadwaj *et al.* (2010), que estudaram o coeficiente de restituição para sólidos farmacêuticos compactados. Os resultados demonstraram que os valores de e aumentam para materiais mais compactados e ainda, que diminuem com o aumento da velocidade de impacto, assim como visto para materiais não farmacêuticos.

Wang *et al.* (2015) estudaram colisões partícula-superfície com grãos de milho arredondos ou compactados em paredes oblíquas, a fim de avaliar a influência da velocidade e posição de impacto sobre o coeficiente de restituição. Posteriormente, Wang *et al.* (2018) deram continuidade a esse estudo com colisões partícula-partícula com grãos de milho congelados e propuseram uma metodologia para obtenção do coeficiente em três dimensões. Em ambos os trabalhos, constatou-se uma tendência decrescente do coeficiente de restituição com o aumento do ângulo de soltura das partículas e, conseqüentemente, de maiores velocidades de impacto. Além disso, constatou-se que diferentes posições de impacto resultam em variações no coeficiente de restituição, mesmo para um mesmo ângulo de soltura.

Já Hlosta *et al.* (2018) investigaram o coeficiente de restituição de materiais como milho, *pellets* de madeira e carvão a partir de um método experimental por meio de um pêndulo duplo para medidas de coeficiente de restituição de duas partículas de diferentes tamanhos e formas. Nesse estudo foi investigada a influência do fio do pêndulo, as propriedades das partículas e a forma de cálculo do coeficiente mais apropriada para partículas não esféricas e observou-se que o coeficiente de restituição é determinado com maior precisão para partículas de diâmetros maiores e ainda, que a velocidade de impacto influencia de forma diferente as partículas de geometrias distintas.

Nos estudos de colisões de partículas em líquidos, o coeficiente de restituição é denominado coeficiente de restituição efetivo. Nesses sistemas, parte da energia é dissipada

devido ao efeito viscoso associado a presença de um líquido. Assim, comparado com o escoamento sólido-gás, as partículas em escoamentos sólido-líquido terão mais energia dissipada devido à viscosidade do líquido ser muito maior do que a do gás e, conseqüentemente, as propriedades do líquido não podem ser negligenciadas no estudo desses sistemas.

O movimento do líquido gera gradientes de pressão e tensões viscosas expressas por forças hidrodinâmicas que atuam nas partículas, dentre as quais, destacam-se as forças de arraste e lubrificação (WANG *et al.*, 2012). Essas apresentam maior magnitude em sistemas com líquidos mais viscosos, contribuindo de forma significativa para a resistência ao movimento do corpo e, conseqüentemente, resultando em uma maior perda energética após o impacto.

A força de arraste é uma força de resistência, de modo que se opõe ao movimento do objeto em escoamento. Essa força é proporcional à velocidade do objeto ao quadrado e pode ser calculada segundo a Equação 8.

$$F_d = \frac{1}{2} C \rho A v^2 \quad (8)$$

Na Equação 8, C é o coeficiente de arraste, ρ é a densidade do fluido, A é a área projetada do corpo perpendicular à direção do escoamento e v é a velocidade relativa do corpo em relação ao fluido.

Em contrapartida, a força de lubrificação é uma força de não conservação por envolver dissipação de energia ou transferência entre os corpos. Essa surge à medida em que duas partículas se movem, aproximando-se ou afastando-se após uma colisão, com apenas uma fina camada de líquido separando-as. A força de lubrificação pode também atuar em colisões partícula-superfície.

Com base na teoria elasto-hidrodinâmica para duas esferas elásticas, proposta por Davis *et al.* (1986), a força de lubrificação pode ser calculada segundo a Equação 9.

$$F_L = \frac{6\pi\mu R^2 v}{h} \quad (9)$$

Em que μ é a viscosidade do fluido, R é o raio da partícula, v é a velocidade relativa de aproximação e h é a distância entre as esferas.

Da Equação 9 infere-se que para escoamentos em ar, uma vez que a viscosidade do ar é muito menor do que a do líquido, a força de lubrificação é muito pequena, tendo efeito

insignificante em comparação com as forças gravitacional, de arraste e de coesão entre as partículas (ZHANG *et al.*, 2005). No entanto, essa força passa a ser significativa para líquidos, interferindo no movimento das partículas imersas no fluido e, portanto, não deve ser negligenciada.

Na abordagem de colisões em líquidos, estudos como de Joseph *et al.* (2001) avaliaram as trajetórias de aproximação e afastamento de partículas rígidas e esféricas de uma gama de materiais, tamanhos e densidades, as quais colidiram contra paredes de diferentes materiais submersas em fluido de composição variável. Já Gondret *et al.* (2002), investigaram experimentalmente o movimentos de esferas colidindo contra uma placa sólida em meio fluido (gás ou líquido) e relacionaram os resultados com o número de Stokes.

Outros enfatizam a influência de uma camada de líquido sobre o coeficiente de restituição, como Ma *et al.* (2013), que avaliaram impactos oblíquos de esferas rugosas, e Ma *et al.* (2016), que aprofundou a abordagem inicial através da avaliação de impactos oblíquos e normais e investigou a influência da configuração e morfologia da camada líquida sobre o coeficiente. Nesses estudos, a presença de um líquido de maior viscosidade demonstra uma tendência à diminuição do coeficiente de restituição, evidenciando a influência de forças de adesão e lubrificação sobre as colisões.

Ainda que se mencionem esses estudos sobre a influência de diferentes parâmetros no valores de coeficiente de restituição, observa-se que a vasta literatura do tema é voltada, principalmente, para as medidas desse parâmetro referente a partículas rígidas em ar, e pouca informação é encontrada sobre o coeficiente de restituição de partículas macias ou o coeficiente de restituição efetivo de partículas imersas em fluidos viscosos. Isso reforça a necessidade de dados experimentais suficientes para determinar o efeito de variados parâmetros sobre o coeficiente de restituição e, conseqüentemente, compreender as colisões em sistemas de fluidização sólido-líquido.

Por conseguinte, uma análise aprofundada desse parâmetro aplicado a sistemas sólido-fluido faz-se necessária, principalmente para obter dados experimentais que ofereçam uma maior compreensão de como as colisões partícula-partícula e partícula-parede influenciam esse tipo de escoamento e ainda, venham a ser utilizados para uma modelagem mais completa de sistemas multifásicos.

2.3. Análise computacional de escoamentos sólido-fluido

A modelagem de escoamentos sólido-líquido é um desafio por apresentar um escoamento complexo e diferentes interações entre as fases. Das diversas ferramentas de simulação, a Fluidodinâmica Computacional (CFD) é uma das mais promissoras para esse tipo de modelagem. A CFD utiliza os princípios de conservação de massa, energia e quantidade de movimento para prever o escoamento, o que a torna uma técnica vantajosa em relação à maioria dos modelos empíricos ou semi-empíricos, nos quais não são abordadas todas as características necessárias para o projeto ou otimização de um leito (CORNELISSEN *et al.*, 2007).

Atualmente existem duas categorias para a abordagem numérica de escoamentos bifásicos sólido-líquido: as abordagens Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana. Na abordagem Euleriana-Euleriana, tanto a fase líquida quanto a fase particulada são analisadas de um ponto de vista da mecânica do contínuo, ou seja, apesar de as partículas sólidas serem entidades individuais, o seu conjunto é tratado como se fosse um meio contínuo. Já na abordagem Euleriana-Lagrangeana, as partículas são modeladas como elementos discretos e, portanto, são analisadas separadamente uma a uma, sendo necessária a aplicação de equações para descrever o movimento individual de cada partícula.

Na formulação Lagrangeana, informações mais detalhadas da fase sólida podem ser inseridas para a utilização do método dos elementos discretos (DEM, do inglês *Discrete Elemento Method*), no qual as partículas podem ser tratadas como esferas rígidas ou flexíveis. O modelo para esferas rígidas, proposto por Allen e Tildesley (1989), costuma ser usado para investigar as colisões entre duas partículas, determinadas a partir de equações da dinâmica clássica. Já a modelagem para esferas flexíveis, proposta por Cundall e Strack (1979), é aplicada para colisões multi-partículas e regimes densos, nos quais as partículas permanecem em contato por um maior período de tempo. Em geral, esse modelo compreende forças elásticas, dissipativas e de atrito e prevê as interações partícula-partícula a partir de forças de contato calculadas em função da deformação das partículas, resultante de choques simultâneos de múltiplos corpos no escoamento. Também possibilita a análise de interações partícula-parede, que não pode ser realizada a partir do modelo de esfera rígida.

Neste tipo de modelagem, o coeficiente de restituição é tido como um parâmetro essencial para os modelos de contato, uma vez que é um dos principais coeficientes de interação e, portanto, é importante para compreender o comportamento dinâmico das partículas.

Nas simulações de escoamentos sólido-fluido, é fundamental que os valores de entrada desse parâmetro sejam constantemente aprimorados para garantir a precisão dos dados de saída. Caso contrário, pode haver pouca confiança nos resultados das simulações. Assim, é importante a criação de um banco de dados de parâmetros de entrada, como o coeficiente de restituição.

Entre os estudos mais recentes de simulações envolvendo leitos fluidizados sólido-líquido, Liu *et al.* (2016) investigaram numericamente o efeito do fluido intersticial na hidrodinâmica do leito fluidizado e na interação entre partículas. Para isso, utilizaram uma ferramenta numérica baseada em DEM para esferas flexíveis, com partículas de diâmetros distintos, a fim de verificar o efeito instantâneo das propriedades do fluido sobre as partículas a partir de um coeficiente de restituição variável.

Os resultados desse estudo evidenciaram boa concordância entre os dados experimentais de trabalhos anteriores e as simulações realizadas e demonstram que, no processo de colisão de partículas, o fluido intersticial tende a gerar mais dissipação de energia. Todavia, esses resultados foram válidos para partículas esféricas e rígidas (vidro e aço) e portanto, não se aplicam a partículas macias e menos esféricas, como as revestidas de biofilme.

As biopartículas foram estudadas por alguns autores nos últimos anos, como Koerich *et al.* (2018) que avaliaram o efeito das forças de arraste e sustentação e das colisões de partículas na fluidização de biopartículas em um biorreator. Para isso, usaram diferentes valores de coeficientes de restituição e concluíram que para a abordagem Euleriana-Euleriana este parâmetro praticamente não altera a altura do leito fluidizado líquido-sólido. Ainda, observaram que os modelos de arraste padrão não eram adequados para escoamentos densos como os encontrados em biorreatores.

Apesar da existência dos supracitados estudos e de diversos trabalhos desenvolvidos para a predição da hidrodinâmica de sistemas multifásicos, os modelos costumam descrever as interações resultantes dos choques partícula-partícula e partícula-parede sem grande relevância para fatores como a esfericidade das partículas, variação de viscosidade do fluido, forças de arraste na interface sólido-líquido e coeficiente de restituição.

Ademais, ainda que este tema tenha ganhado interesse nas últimas décadas, a maioria dos estudos tratam de escoamentos à seco, como colisões no vácuo ou em um fluido de resistência desprezível. Entretanto, estudos sobre o efeito do fluido nas colisões são de grande relevância pois o fluido intersticial entre as partículas em movimento causa maior dissipação

de energia, em comparação com o leito fluidizado sólido-gás, devido ao efeito viscoso (Liu *et al.*, 2017). Além disso, em escoamentos com partículas semelhante às biopartículas, a influência das características físicas e elásticas da fase sólida é pouco investigada, evidenciando a necessidade de pesquisas mais abrangentes sobre a dinâmica da mesma no escoamento sólido-líquido.

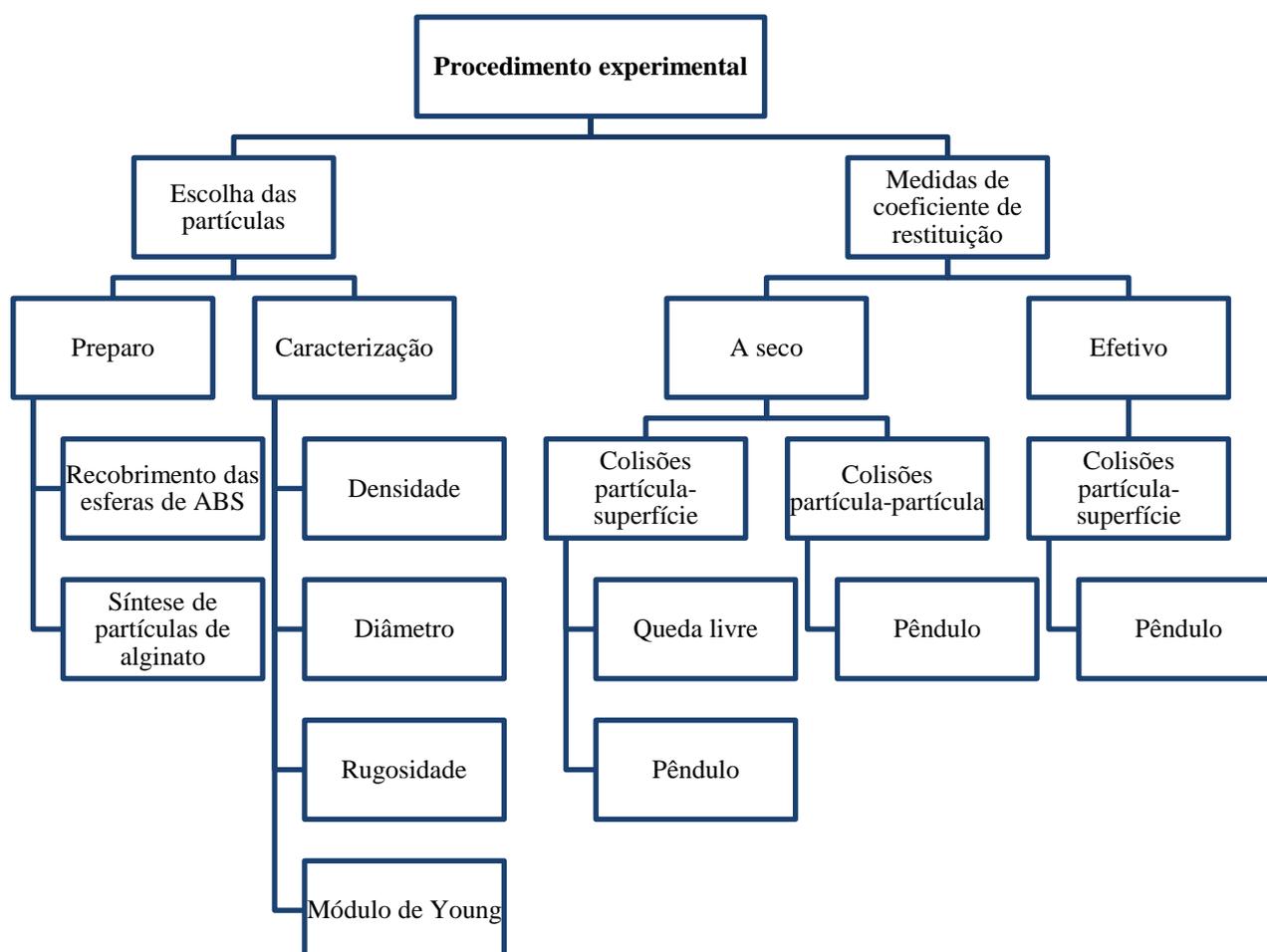
CAPÍTULO 3

PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

O procedimento experimental inclui a escolha, preparação e caracterização das partículas, além da obtenção de dados de coeficiente de restituição para diferentes partículas. As etapas de preparo das partículas e medidas de coeficiente de restituição foram realizadas no Laboratório de Controle Ambiental do Departamento de Engenharia Química (DEQ) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar).

Para uma melhor compreensão, a sequência de procedimentos experimentais é apresentada na Figura 4.

Figura 4: Fluxograma dos procedimentos experimentais empregados no trabalho.



Fonte: Elaborada pelo autor

3.1. Partículas

Partículas rígidas poliméricas (esferas de ABS, de Fluorelastômero e de borracha nitrílica) e partículas macias sintetizadas a partir de alginato de sódio foram usadas, totalizando 11 tipos de partículas nos experimentos. As partículas foram classificadas como rígidas e macias de forma qualitativa, de acordo com a percepção de deformações permanentes após qualquer tipo de contato.

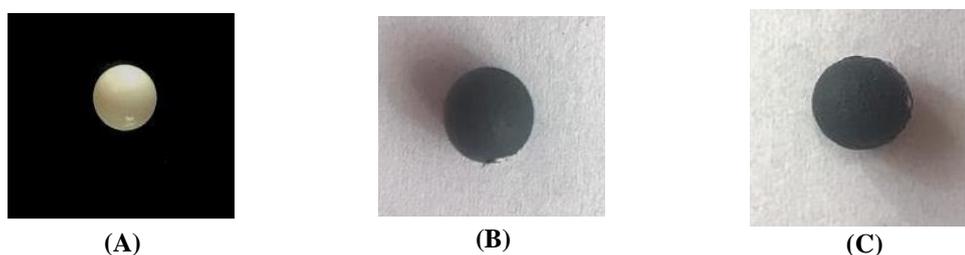
3.1.1. Recobrimento das esferas de ABS

O recobrimento das esferas de ABS foi realizado com o objetivo de avaliar a influência de irregularidades na superfície das partículas sobre as colisões em escoamentos sólido-fluido.

As esferas de ABS (Figura 5) foram revestidas com borracha líquida de alta elasticidade comercializada na forma de *spray* na cor cinza, da marca *hm rubber*[®]. A aplicação sobre as partículas foi feita colocando-as em um recipiente plástico de dimensões 670x440x125 mm. Elas foram então recobertas por um jato de tinta e secas em ar por 2 horas. Em seguida, foram agitadas e novamente recobertas. Parte das esferas foi revestida por uma segunda camada.

O processo de recobrimento foi executado de forma manual, e assim, esta técnica resultou em não uniformidades no recobrimento das partículas, sendo preciso ser aperfeiçoada em trabalhos futuros a fim de proporcionar um padrão entre as partículas recobertas.

Figura 5: ABS sem recobrimento (A), ABS com uma camada de recobrimento (B), ABS com duas camadas de recobrimento (C).



Fonte: Elaborada pelo autor

3.1.2. Síntese das esferas de alginato

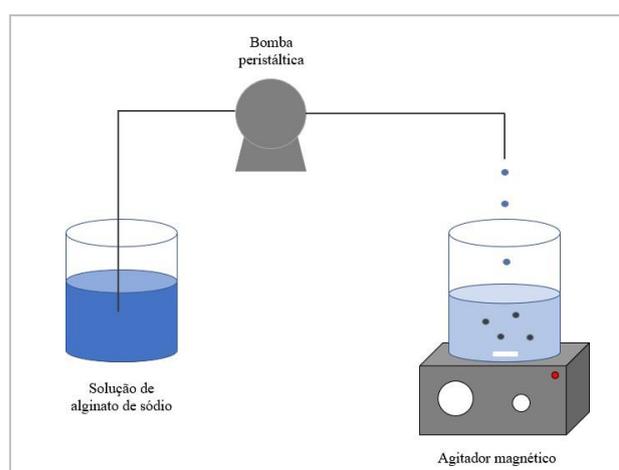
A síntese de partículas a partir do alginato foi proposta a fim de possibilitar o estudo de colisões, com ênfase nas formas de dissipação de energia, com partículas de propriedades elásticas distintas.

O alginato é um polissacarídeo natural composto por uma cadeia de resíduos de α -L-gulurônico (G) e β -D-manurônico (M) e encontrado nas paredes celulares de algas marinhas marrons (Ouwerx *et al.*, 1998; Puguan *et al.*, 2014). A escolha deste composto para síntese de partículas deve-se a suas aplicações industriais (indústrias alimentícia, química e farmacêutica, por exemplo), mas principalmente por sua facilidade em reagir com cátions bivalentes por *cross-linking* no processo de gelificação. Nesse processo, esferas de alginato podem ser formadas pelo gotejamento de solução de alginato em uma solução catiônica, sendo mais comum o emprego de alginato de sódio.

Para o preparo das partículas, a solução de alginato de sódio foi obtida misturando-se alginato de sódio, da marca *Fischer Scientific*[®], em pó à água destilada à temperatura ambiente e agitando-se esta solução durante uma hora, com auxílio de um agitador magnético.

As partículas de alginato foram sintetizadas segundo a metodologia de Ouwerx *et al.* (1998), gotejando-se a solução de alginato de sódio em soluções aquosas de cloretos de Bário, Cálcio e Cobalto, conforme esquematizado na Figura 6. A solução de alginato foi introduzida com auxílio de um duto de silicone (com diâmetros internos de 3 mm e 5 mm) conectado a uma bomba peristáltica, assegurando a reprodutibilidade do experimento. A distância entre o duto e a solução de cloreto foi ajustada conforme a viscosidade da solução de alginato a fim de obter partículas esféricas. Para melhorar a esfericidade das partículas, foi usado um agitador magnético, impedindo a formação de aglomerados com os grânulos das soluções de cátions.

Figura 6: Esquema do procedimento experimental para síntese de partículas de alginato.



Fonte: Elaborada pelo autor

As partículas formadas foram gelificadas em soluções de cloreto catiônicas à temperatura ambiente por 3 horas. Ao término da gelificação, as partículas foram lavadas 3

vezes com água destilada a fim de eliminar resíduos das soluções catiônicas. Então, foram armazenadas em água para evitar desidratação e garantir a execução das demais etapas deste estudo.

Os experimentos foram realizados com base em um planejamento experimental fatorial 3^3 (totalizando 27 sínteses) a fim de avaliar as melhores condições de gelificação das partículas de alginato, conforme apresentado nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1 - Variáveis independentes para a síntese das esferas de alginato

Níveis	Variáveis		
	Tipo de Cátion	Concentração de Alginato de Sódio (g/L)	Concentração de solução de cloreto (g/L)
-1	Bário	15	10
0	Cálcio	20	15
+1	Cobalto	25	20

Tabela 2 - Planejamento experimental fatorial 3^3 para o preparo de esferas de alginato em solução de Cloreto

Corrida Experimental	Tipo de cátion	Concentração de Alginato de Sódio (g/L)	Concentração de solução de cloreto (g/L)
1	1	-1	1
2	-1	1	-1
3	1	1	0
4	-1	-1	0
5	1	1	1
6	0	0	0
7	0	1	1
8	-1	-1	1
9	0	-1	0
10	0	1	0
11	-1	0	-1
12	1	-1	0
13	0	-1	1
14	1	0	0
15	1	-1	-1
16	-1	0	0
17	0	-1	-1
18	1	0	-1
19	1	1	-1
20	-1	0	1
21	-1	1	1
22	0	0	1
23	0	0	-1
24	-1	-1	-1
25	-1	1	0
26	1	0	1
27	0	1	-1

Visando a utilização das partículas sintetizadas na medição do coeficiente de restituição de partículas macias, além dos propostos no planejamento experimental, experimentos de síntese com a adição de dióxido de titânio foram realizados. Neles, foram utilizadas solução de alginato de sódio 20 g/L e soluções de cloreto 15 g/L. A quantidade de dióxido de titânio variou de 12,02, 19,10 e 24,99 g.

Esses experimentos foram realizados a fim de aumentar a densidade das partículas e, portanto, garantir uma trajetória definida durante os testes de coeficiente de restituição.

3.2. Caracterização das partículas

As partículas foram caracterizadas quanto a parâmetros de densidade, diâmetro, rugosidade e módulo de Young.

3.2.1 Densidade

A densidade das partículas foi determinada pela técnica de picnometria. Para tanto, utilizou-se um picnômetro de 25 mL e a água foi empregada como substância padrão, à temperatura ambiente. Uma quantidade suficiente de partículas para preencher cerca de 2/3 do picnômetro foi utilizada e as medidas para cada grupo de partículas foram repetidas cinco vezes.

3.2.2 Diâmetro

Uma metodologia semelhante à de Igathinathane *et al.* (2009) e adaptada por Lopes *et al.* (2018) foi utilizada para as medidas de diâmetro. As partículas foram distribuídas sobre uma superfície plana de modo a não se tocarem e, então, fotografadas com uma câmera de 12 megapixels posicionada perpendicularmente em relação ao plano a uma distância aproximada de 30 cm. As imagens foram tratadas com o software Image Pro e transformadas em imagens binárias. As áreas projetadas das partículas foram convertidas em diâmetros equivalentes.

Dados de circularidade das partículas, a partir das imagens, também foram obtidos com o mesmo software.

3.2.3 Rugosidade

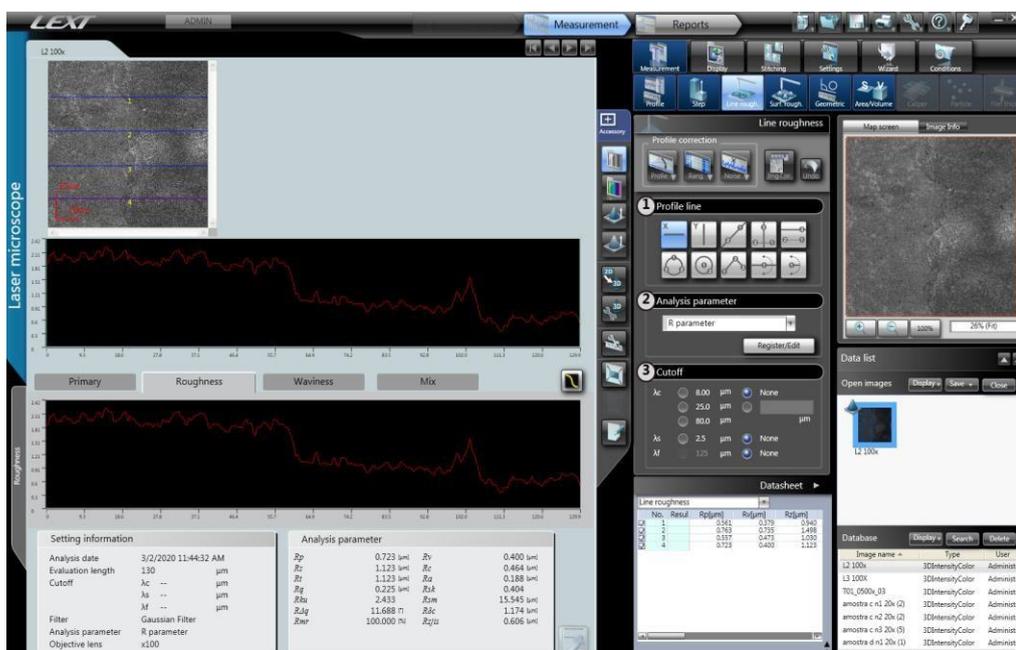
A rugosidade das partículas foi mensurada pela técnica de microscopia confocal.

Para as partículas rígidas (três variações de esferas de ABS, borracha nitrílica e fluorelastômero), as imagens de microscopia foram obtidas com auxílio de um microscópio confocal a laser LEXT OLS4100 da marca Olympus no Laboratório de Caracterização estrutural (LCE) do Departamento de Engenharia de Materiais (DEMA) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar). A média dos valores de rugosidade (Ra) foi calculada para cada grupo a partir de imagens com ampliações de 429, 1072 e 2129 vezes.

Para as partículas de alginato, as análises foram feitas com auxílio de um microscópio confocal a laser LEXT OLS4000 da marca Olympus no Departamento de Odontologia Restauradora da Faculdade de Odontologia da Universidade de São Paulo (USP), em Ribeirão Preto, uma vez que não foi permitido o uso do microscópio do LCE para partículas úmidas. A média dos valores de rugosidade (Ra) foi calculada para cada grupo a partir de imagens com ampliações de 216 e 429 vezes.

Para todas as partículas, as medidas de rugosidade foram obtidas a partir do software de análise de imagem OLS4100, no qual as imagens coloridas foram convertidas em imagens em tons de cinza e posteriormente tratadas para redução de ruído. Em cada imagem, selecionou-se 4 regiões de medição, a partir das quais obteve-se o valor médio da rugosidade, as quais correspondem às linhas azuis na imagem apresentada na Figura 7.

Figura 7: Interface do software OLS4100 e regiões selecionadas para medição.



Fonte: Elaborada pelo autor

3.2.4 Módulo de Young

O módulo de Young das partículas foi obtido a partir de ensaios de compressão utilizando uma célula de carga de 20 N e velocidade de compressão de 3 N/min, realizados pela empresa Afinko. Nos ensaios foram utilizados cinco corpos de prova de cada tipo de partícula. Os testes forneceram como resultados as curvas de resistência à compressão em função da deformação linear do material e para cada curva foi determinado um valor de módulo de Young.

Para cada ensaio, o módulo de Young foi calculado a partir da equação proposta por Leroy (1985), dada pela Equação 10.

$$E = \frac{1,0607 F (1 - \sigma^2)}{D^{3/2} d^{1/2}} \quad (10)$$

Em que D é a deformação dada pela distância entre a posição da célula de carga em uma dada deformação e a posição no primeiro contato com a partícula; d é o diâmetro da partícula (m) e F é a força medida durante a compressão (N).

Já σ corresponde a razão de Poisson e varia de acordo com as características da partícula. Leroy (1985) cita que a razão de Poisson de partículas rígidas varia entre 0,3 e 0,4. Já para as partículas macias, Ouwerx *et al.* (1998) indica um valor igual a 0,5. Assim, para as partículas de ABS, borracha e alginato, foram usados valores iguais a 0,3, 0,4 e 0,5, respectivamente.

Os módulos de Young apresentados na etapa de caracterização foram obtidos como sendo uma média dos valores calculados para cada partícula a partir da Equação 10.

3.3. Medidas de coeficiente de restituição

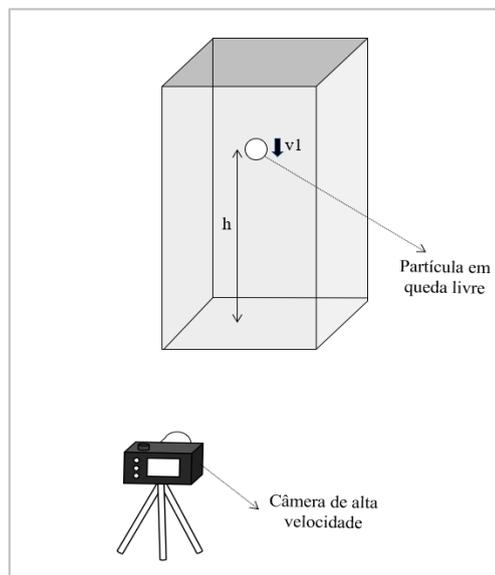
Partículas distintas foram empregadas a fim de avaliar a influência de características físicas, superficiais e elásticas sobre o coeficiente de restituição em colisões partícula-superfície e partícula-partícula em ar.

Para colisões partícula-superfície, dois aparatos experimentais foram usados nas medidas desse parâmetro: queda livre e pêndulo. Para colisões partícula-partícula, somente o aparato experimental tipo pêndulo foi utilizado. Nas duas metodologias, a trajetória das partículas foi gravada com uma câmera de alta velocidade modelo Sony RX100IV a uma taxa de 960 quadros/segundo.

3.3.1. Queda livre

Nos experimentos em queda livre foi usado um tanque de acrílico de base quadrada e dimensões $20\text{ cm } (L_1) \times 20\text{ cm } (L_2) \times 60\text{ cm } (H)$, conforme esquematizado na Figura 8.

Figura 8: Esquema do aparato experimental usado nos testes de colisão partícula-superfície em queda livre.



Fonte: Elaborada pelo autor

Os testes foram realizados com as três variações das partículas de ABS, as quais foram abandonadas de diferentes alturas (60, 30, 20 e 10 cm), percorrendo uma trajetória perpendicular à superfície de acrílico (de 1 cm de espessura), até o momento do impacto. Nesses ensaios, as partículas foram soltas manualmente e o ponto de soltura foi determinado delimitando uma região centralizada em relação à base, a fim de assegurar uma melhor reprodutibilidade dos experimentos e minimizar erros associados à soltura das partículas.

Nesta metodologia, o coeficiente de restituição foi calculado a partir da altura, conforme a Equação 7.

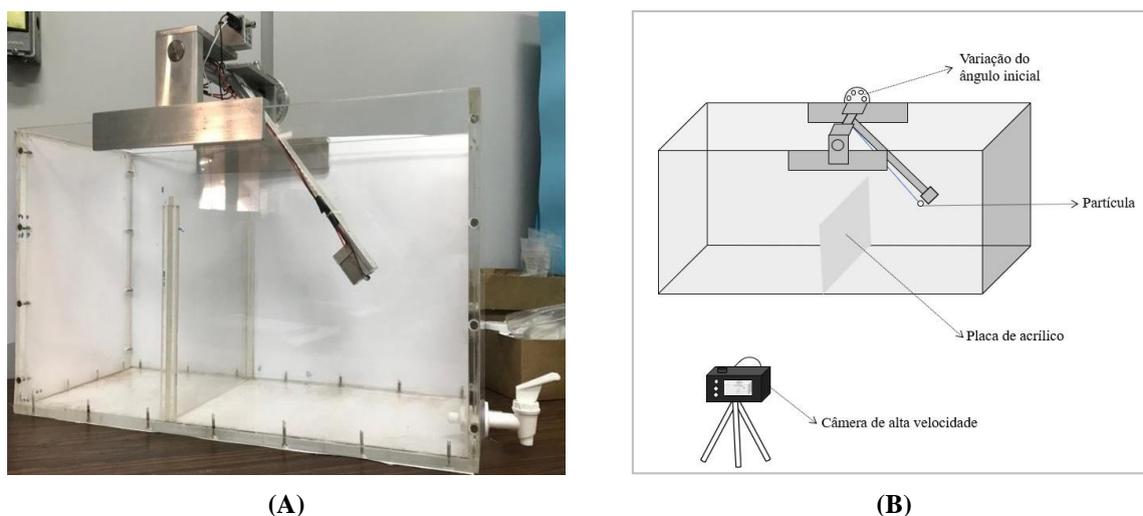
3.3.2. Pêndulo

Na segunda etapa dos experimentos, com base no estudo de Joseph *et al.* (2001), foi utilizado um mecanismo do tipo pêndulo (Figura 9) fixado em um tanque de acrílico de base retangular com dimensões $20\text{ cm } (L_1) \times 50\text{ cm } (L_2) \times 30\text{ cm } (H)$. As partículas foram presas ao suporte regulatório, que serviu de guia para o movimento da partícula (de forma a garantir que as partículas percorram uma trajetória definida), por um fio de nylon de 0,16 mm de espessura e 24 cm de comprimento. Em seguida, foram soltas em ar por acionamento automático. A escolha do fio deu-se com base na literatura, que indica que fios de espessuras discretas

possuem massa insignificante, mesmo para partículas leves como as usadas neste trabalho, de modo que não exercem influência significativa nos resultados de coeficiente de restituição (Joseph *et al.*, 2001).

Esse mecanismo também permitiu avaliar a variação do coeficiente de restituição em função da velocidade de colisão, a qual é ajustada de acordo com o ângulo, fixando-o em diferentes posições.

Figura 9: Imagem (A) e esquema (B) do aparato experimental para a medida do coeficiente de restituição.



Fonte: Elaborada pelo autor

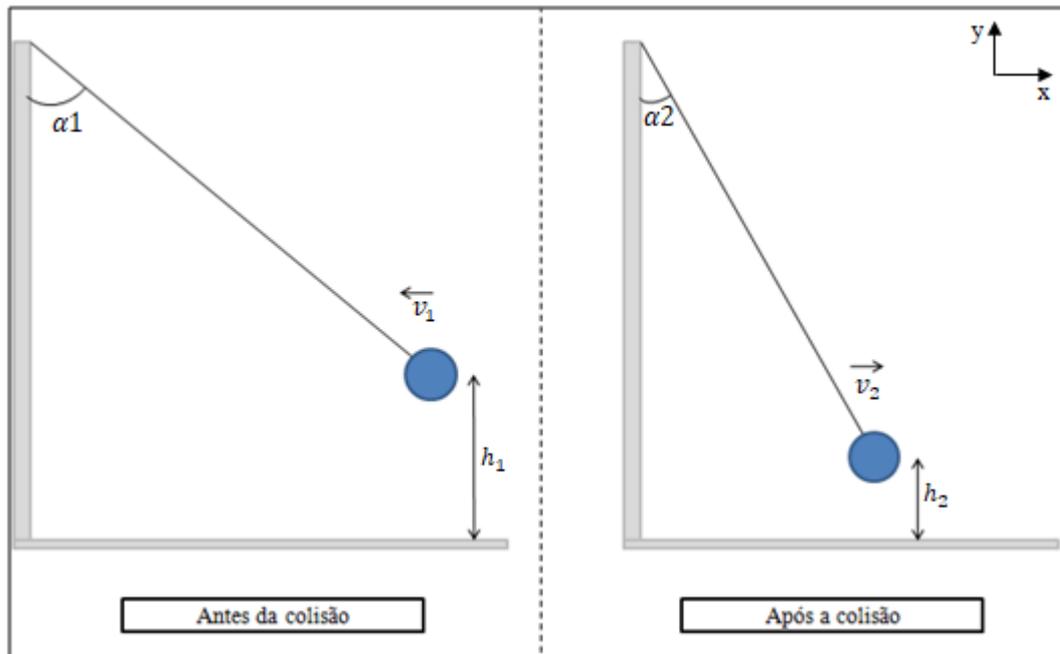
Para as colisões partícula-superfície, foram usadas 11 variações de partículas, as quais colidiram contra uma placa de acrílico de 0,5 cm de espessura, inserida com auxílio de aletas fixadas ao longo do maior comprimento do recipiente.

As partículas comerciais (ABS sem recobrimento, borracha nitrílica e fluorelastômero), as ABS recobertas e as de alginato foram trocadas 2, 3 e 5 vezes, respectivamente. Os experimentos foram repetidos 10 vezes para uma única partícula. Além disso, diferente das demais partículas, as de alginato foram secas em papel de alta absorção por cerca de 5 segundos, por se tratarem de partículas úmidas, a fim de evitar que as mesmas aderissem à superfície e não ocorresse restituição.

Nesta metodologia, os coeficientes de restituição foram calculados pela mesma equação utilizada nos experimentos em queda livre (Equação 7). Além dela, estes também foram calculados a partir da velocidade (Equação 4) e por uma terceira forma de cálculo, em que as alturas de queda e rebatimento são descritas em função dos ângulos inicial (α_1) e final (α_2 – máximo após o rebatimento), sugerida por Hlosta *et al.* (2018). O esquema apresentado na

Figura 10 evidencia as alturas utilizadas nas medidas de coeficiente de restituição, bem como os ângulos correspondentes a cada uma delas. Sendo as alturas de queda e rebatimento referentes à distância entre a partícula e a base do compartimento.

Figura 10: Esquema das colisões partícula-superfície no aparato experimental tipo pêndulo.



Fonte: Elaborada pelo autor

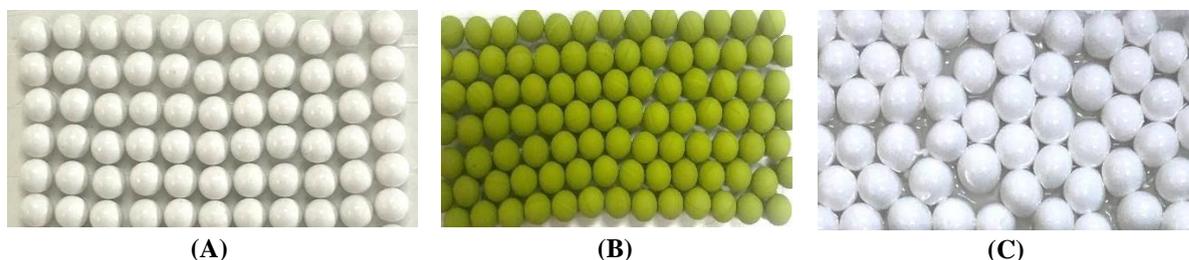
A partir da Figura 8, relaciona-se a altura total do aparato (altura do compartimento de acrílico + altura do suporte metálico do pêndulo) com as alturas de queda e rebatimento e os ângulos correspondentes, obtendo-se a Equação 11. Em que 0,73 corresponde à razão entre o comprimento do fio e a distância entre o suporte e a superfície.

$$e_{\alpha} = \sqrt{\frac{1 - 0,73 \cos \alpha_2}{1 - 0,73 \cos \alpha_1}} \quad (11)$$

Para as colisões partícula-partícula, foram usadas partículas de ABS sem recobrimento, de borracha nitrílica e alginato de cálcio. Cada uma delas colidiu contra uma superfície revestida de partículas semelhantes (Figura 11), representando o choque de uma partícula em movimento contra uma segunda em repouso ($v = 0$). As partículas rígidas (ABS sem recobrimento e borracha nitrílica) foram presas à uma folha de acetato com cola adesiva instantânea e então, fixadas na placa de acrílico. Enquanto as partículas macias (alginato de cálcio) foram atravessadas com linha de nylon de modo a formar grupos de partículas, os quais foram amarrados na folha de acetato, posteriormente fixada na placa de acrílico.

Os coeficientes de restituição foram calculados a partir das velocidades de impacto e afastamento, conforme a Equação 4.

Figura 11: Superfície revestida de partículas de ABS sem recobrimento (A), de borracha nitrílica (B) e de alginato de cálcio (C)



Fonte: Elaborada pelo autor

3.4. Medidas de coeficiente de restituição efetivo

A influência de fluidos mais viscosos nas colisões partícula-superfície foi avaliada a partir de experimentos em água realizados no aparato experimental tipo pêndulo, anteriormente apresentado na Figura 9.

Inicialmente, experimentos foram realizados com partículas de ABS não recobertas, as quais apresentam a maior densidade dentre as partículas estudadas neste trabalho. No entanto, essas não se mostraram densas o suficiente para os testes em água. Assim, os experimentos foram conduzidos com partículas de aço, as quais foram previamente caracterizadas e apresentaram elevada densidade. Além dos testes em água, para efeito de comparação, foram também realizados testes em ar utilizando a mesma metodologia descrita na seção anterior.

Nesses experimentos, variou-se o nível da água e o ângulo de soltura, os quais foram determinados de modo que o pêndulo estivesse acima da superfície da água e as partículas tangenciassem o fluido antes da soltura e, após serem soltas, imergissem imediatamente no fluido, evitando perturbações do líquido. Essa metodologia foi definida devido à limitação experimental de submergir o pêndulo em água, uma vez que o mesmo é constituído por componentes eletrônicos.

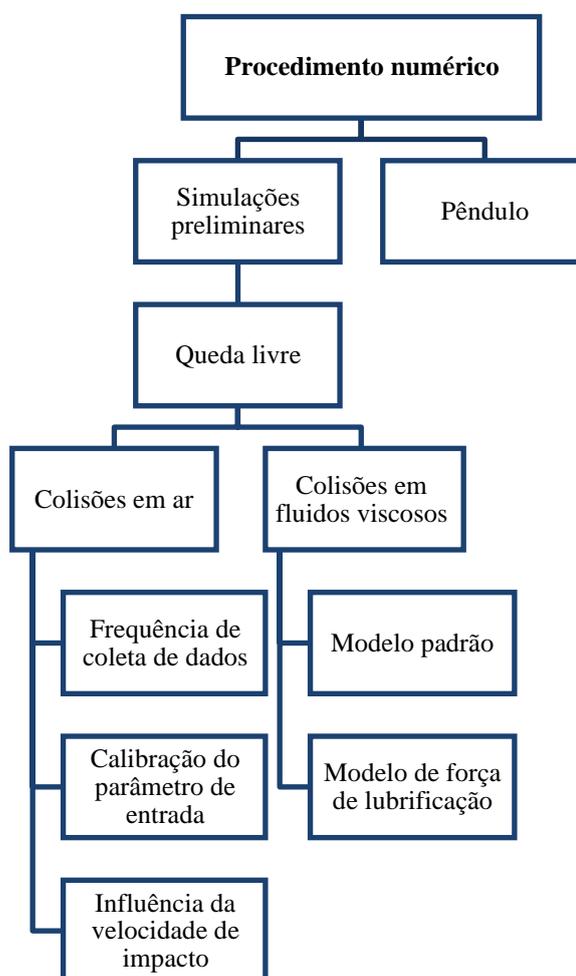
O coeficiente de restituição efetivo foi calculado a partir da Equação 4.

CAPÍTULO 4

PROCEDIMENTO NUMÉRICO

Para uma melhor compreensão do procedimento numérico descrito a seguir, a sequência de simulações é apresentada na Figura 12.

Figura 12: Fluxograma das simulações realizadas neste trabalho.



Fonte: Elaborada pelo autor

4.1. Equacionamento

Simulações dos choques de partículas imersas em fluidos foram realizadas com o intuito de avaliar a validade dos modelos de contato presentes no código aberto CFDEM[®]coupling para diferentes tipos de partículas e colisões. O CFDEM[®]coupling utiliza abordagem Euleriana-Lagrangeana para o cálculo das variáveis do escoamento acoplando os dados obtidos pelo

código OpenFOAM[®], o qual resolve os campos das variáveis do fluido, aos obtidos pelo código LIGGGHTS[®], que aplica o método de elementos discretos (DEM) para determinar o movimento de cada uma das partículas.

A metodologia numérica aplicada na discretização das equações no OpenFOAM[®] é baseado no método dos volumes finitos (MALISKA, 2010), em que as equações diferenciais de variáveis contínuas são transformadas em um sistema de equações algébricas. A equação da continuidade e a equação da quantidade de movimento são governantes para a resolução das variáveis da fase fluida.

No LIGGGHTS, o algoritmo fundamental do DEM é baseado em equações diferenciais de movimento de corpos em contato. Em cada intervalo de tempo, após detectar a colisão das partículas, calcula-se a rigidez de contato, as forças coesivas e as forças resultantes de cada elemento, e então, a segunda lei de Newton (lei de movimento) é utilizada para que se possa obter a velocidade, aceleração e posição atualizadas de cada partícula a partir de um balanço de forças.

A interação das partículas com a superfície no momento do impacto é também considerada na fase sólida e o modelo de esfera flexível é usada para modelar as colisões, levando em consideração a deformação das partículas.

Para calcular as forças normais e tangenciais resultantes do choque entre as partículas e a superfície foi usado o modelo de contato de Hertz-Mindlin, o qual se baseia na teoria de contato de Hertz (1882) para o cálculo da componente normal e no estudo de Mindlin (1949) para o cálculo da força tangencial.

No cálculo das forças, as deformações e demais parâmetros de colisão, como coeficiente de restituição, módulo de Young e razão de Poisson, são dados de entrada fundamentais. As equações utilizadas no modelo são apresentadas a seguir:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_{pf} \Delta V + \rho_p \frac{4\pi r_p^3}{3} \mathbf{g} + \sum_{j=1}^{k_c} [(\mathbf{f}_{c,ij}^n + \mathbf{f}_{d,ij}^n) + (\mathbf{f}_{c,ij}^t + \mathbf{f}_{d,ij}^t)] \quad (12)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=1}^{k_c} (\mathbf{M}_{t,ij} + \mathbf{M}_{r,ij}) \quad (13)$$

Em que ω_i e v_i são, respectivamente, as componentes angular e linear da velocidade de uma partícula de diâmetro d_p , e k_c é o número de partículas em interação com a partícula para a qual as velocidades estão sendo calculadas. As forças envolvidas nas equações de movimento das partículas são: a força de interação entre a partícula e o fluido, $f_{pf,i}$, as forças gravitacional e de empuxo, computadas pelo termo $(\rho_p - \rho_f)g\pi d_p^3/6$, a força de lubrificação, f_l , a força de adesão, f_a , e as forças entre partículas, que incluem a força elástica, $f_{c,ij}$, e a força de amortecimento viscoso, $f_{d,ij}$. O torque que age na partícula i pela partícula j inclui duas componentes: $M_{t,ij}$, gerado pela força tangencial, e $M_{r,ij}$, conhecido como torque de fricção de rolamento.

As componentes normais das forças de contato e de amortecimento foram calculadas, respectivamente, pelas Equações (14) e (15).

$$f_{c,ij}^n = \frac{4}{3}E' \sqrt{r_p} \delta_n \cdot \delta_{n,ij} \quad (14)$$

$$f_{d,ij}^n = 2r_p^{1/4} \sqrt{\frac{10m_p E'}{6}} \frac{\ln(e)}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(e)}} \delta_n^{1/4} v_{n,ij} \quad (15)$$

Já as componentes tangenciais dessas forças, pelas Equações (16) e (17), respectivamente.

$$f_{c,ij}^t = 8G' \sqrt{r_p} \delta_n \cdot \delta_{t,ij} \quad (16)$$

$$f_{d,ij}^t = 2r_p^{1/4} \sqrt{\frac{20m_p G'}{3}} \frac{\ln(e)}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(e)}} \delta_n^{1/4} v_{t,ij} \quad (17)$$

Em que E' é o módulo de Young composto [$1/E' = (1 - \sigma_{12})/E_1 + (1 - \sigma_{22})/E_2$], σ é a razão de Poisson. Já r_p e m_p são o raio e a massa da partícula, respectivamente. G' é o módulo de cisalhamento efetivo da partícula [$1/G' = [2(2 - \sigma_1)(1 + \sigma_1)]/G_1 + [2(2 - \sigma_2)(1 + \sigma_2)]/G_2$]. δ_n e δ_t são os deslocamentos normal e tangencial durante a colisão das partículas, respectivamente, e $v_{n,ij}$ e $v_{t,ij}$ são as suas velocidades relativas de colisão normal e tangencial, respectivamente.

O torque gerado na partícula por essas forças é determinado pelas Equações (18) e (19).

$$M_{t,ij} = r_{p,ij} (f_{c,ij}^t + f_{d,ij}^t) \quad (18)$$

$$\mathbf{M}_{r,ij} = \mu_{r,ij} \mathbf{f}_{c,ij}^n + \mathbf{f}_{d,ij}^n |r_p \hat{\omega}_{ij}^n| \quad (19)$$

Em que $r_{p,ij}$ é o vetor alinhado a partir do centro da partícula até o ponto de contato (possui magnitude igual ao raio da partícula) e $\mu_{r,ij}$ é o coeficiente de fricção de rolamento e $\hat{\omega}_{ij} = \omega_{ij} / |\omega_{ij}|$.

4.2. Simulações

Simulações numéricas de experimentos para a determinação do coeficiente de restituição foram realizadas a fim de avaliar a sensibilidade dos modelos de contato diante de colisões partícula-superfície com partículas de características elásticas distintas. Os métodos experimentais simulados correspondem ao método de queda livre e do pêndulo.

O método de queda livre foi simulado com base na metodologia experimental descrita por Lopes *et al.* (2018), na qual as partículas foram soltas em queda livre de uma altura fixa de 97 cm. Por outro lado, as simulações do pêndulo foram baseadas no procedimento experimental descrito nesta dissertação.

As simulações realizadas foram divididas em três grupos. O primeiro, corresponde a simulações preliminares para comparação entre os métodos de queda livre e pêndulo. O segundo grupo, consiste em simulações em ar divididas em testes de independência da frequência de coleta de dados, calibração do parâmetro de entrada e avaliação da influência da velocidade de impacto sobre o coeficiente de restituição. Por fim, o terceiro grupo compreende simulações realizadas em líquidos viscosos. Em todas as simulações, as velocidades de impacto e afastamento foram obtidas como variáveis resposta. A partir delas, o coeficiente de restituição foi calculado segundo a Equação 4.

O escoamento foi considerado laminar e os passos de tempo do LIGGGHTS® e do OpenFOAM® foram definidos iguais a 10^{-5} e 10^{-4} s, respectivamente. O tempo de simulação foi de um segundo.

4.2.1. Simulações preliminares

Nas simulações comparativas entre os métodos de medição do coeficiente de restituição, os dados experimentais de Lopes *et al.* (2018) para partículas de ABS recobertas foram utilizados como parâmetros de entrada, conforme apresentado na Tabela 3.

Tabela 3 - Propriedades das partículas de ABS com recobrimento não uniforme e do fluido

		Densidade (kg/m ³)	Diâmetro (mm)	Módulo de Young (Pa)	Coefficiente de restituição
Partícula	ABS recobertas	1919	5,94	4,09 x 10 ⁸	0,642
Fluido	Ar	1,230	-	-	-

Para garantir a comparação entre os métodos, as partículas de ABS revestidas foram soltas de uma altura de 23,5 cm nas simulações do método de queda livre, que corresponde a um ângulo inicial de aproximadamente 90 graus no método do pêndulo. O coeficiente de restituição utilizado no modelo foi variado entre 0,3 a 0,9 e o coeficiente simulado foi então medido e comparado com os valores inseridos.

As simulações utilizando os diferentes métodos não demonstraram diferenças significativas nos dados de saída fornecidos. Assim, as simulações subsequentes foram realizadas com base na metodologia de queda livre, devido a maior simplicidade na definição da simulação.

4.2.2. Simulações de colisões em ar

Nas simulações em ar, foram utilizadas partículas de características elásticas distintas. Os dados de entrada utilizados correspondem aos valores experimentais de Lopes *et al.* (2018) para partículas de ABS com recobrimento não uniforme (Tabela 3) e de Alginato Ca²⁺. As propriedades dessa última são apresentadas na Tabela 4 a seguir.

Tabela 4 - Propriedades das partículas de alginato de Ca²⁺

		Densidade (kg/m ³)	Diâmetro (mm)	Módulo de Young (Pa)	Coefficiente de restituição
Partícula	Alginato Ca ²⁺	1228	4,88	5,74 x 10 ⁵	0,312

Para o teste de independência da frequência de coleta de dados, variou-se esta frequência em uma faixa de 100 a 2000 dados/s. Já a calibração do parâmetro de entrada foi realizada para diferentes valores de coeficiente de restituição, comparando-os com os dados de resposta a fim de prever o valor mais adequado a ser usado no modelo de contato. Nessas simulações, as partículas foram soltas de uma altura de 97 cm.

O comportamento do coeficiente de restituição em função de diferentes velocidades de impacto foi avaliado nas simulações variando-se a altura de queda. Para isso, as partículas foram soltas em queda livre de alturas entre 0,01 e 1,4 m. Os coeficientes de restituição foram calculados a partir dos dados das velocidades de impacto e de rebatimento.

4.2.3. Simulações de colisões em líquidos viscosos

Nas simulações em líquidos viscosos, as partículas estudadas por Lopes *et al.* (2018) não apresentaram densidade suficientemente elevada para restituir após a colisão. Assim, os dados de entrada correspondem a partículas de maior densidade, conforme descritas no estudo de Joseph *et al.* (2003), no qual partículas de aço colidiram contra uma parede de Zerodur imersas em soluções de água e glicerol.

As propriedades das partículas utilizadas como parâmetros de entrada são apresentadas na Tabela 5.

Tabela 5 - Propriedades de partículas de aço

Material	Diâmetro (mm)	Módulo de Young (GPa)	Densidade (Kg/m ³)	Coefficiente de restituição*
Aço	6,35	190	7780	0.97

*Coeficiente de restituição medido em ar

As propriedades dos líquidos são apresentadas na Tabela 6.

Tabela 6 - Propriedades dos líquidos

Porcentagem de glicerina (%)	Densidade (Kg/m ³)	Viscosidade dinâmica (Pa.s)	Viscosidade cinemática (m ² /s)
74	1189,25	0,0252	2,12 x 10 ⁻⁵
67	1170,20	0,0143	1,22 x 10 ⁻⁵
50	1123,75	0,0050	4,45 x 10 ⁻⁶
0	997,10	0,0009	8,96 x 10 ⁻⁷

As simulações foram realizadas, inicialmente, utilizando somente os modelos de força padrão do LIGGGHTS, a fim de verificar se esses conseguiam descrever os efeitos da lubrificação. Em seguida, um modelo de força de lubrificação (Equação 20) baseado na teoria elasto-hidrodinâmica de Davis *et al.* (1986) foi implementado e então, novas simulações, considerando a atuação dessa força, foram realizadas.

$$F_{lub} = -\frac{6\pi\mu r_{ef} v_n}{h} \quad (20)$$

Da Equação 20 infere-se que a força de lubrificação tende a infinito quando a distância entre os corpos (h) tende a zero. Assim, para garantir o efeito desta força e evitar valores

incongruentes, um parâmetro de distância mínima foi introduzido de forma que a variável h é sempre igual ao parâmetro, quando há contato entre as partículas. De acordo com a literatura, este parâmetro pode ser aproximado pela rugosidade superficial das partículas (ZHANG *et al.*, 2005).

Nas simulações, as partículas foram soltas de uma altura constante igual a 15 cm. A altura inicial da partícula foi diminuída em relação às simulações em ar uma vez que, quando a partícula está imersa em líquido, sua velocidade terminal é atingida em poucos centímetros após a soltura, economizando recursos computacionais. Para avaliar a influência da viscosidade do fluido na dissipação de energia, essa foi variada e o coeficiente de restituição efetivo simulado foi plotado em função do número de Stokes, calculado segundo a Equação 21.

$$St = \frac{\rho_p v_1 d_p}{\mu} \quad (21)$$

O modelo utilizado nessas simulações foi efetuado pelo aluno de iniciação científica, João Pedro Ferreira de Campos. No Apêndice A é apresentado o código da rotina implementada para as simulações incluindo a força de lubrificação.

4.3. Malhas

Dois domínios computacionais foram utilizados a fim de reproduzir os aparatos experimentais utilizados nas medidas de coeficiente de restituição pelo método de queda livre, realizados por Lopes *et al.* (2018), e pelo método do pêndulo, descrito na etapa experimental deste trabalho.

Nas simulações em queda livre, foi utilizada, uma caixa retangular como domínio, de dimensões 50x20x160 cm, as quais equivalem às do aparato utilizado por Lopes *et al.* (2018).

Enquanto para o método do pêndulo, foi usado um quarto de cilindro com raio de 24 cm e 10 cm de comprimento para simular o movimento pendular. A superfície do cilindro foi considerada sem atrito e perfeitamente elástica, de modo que a dissipação de energia da partícula ocorresse apenas no momento do impacto com a parede (mostrada em uma cor mais escura na Figura 11).

As malhas utilizadas nas simulações foram construídas com a ferramenta *blockMesh* no OpenFOAM®. Nas Figuras 13 e 14 são apresentadas as malhas correspondentes à queda livre

e ao pêndulo, respectivamente. Os dados referentes a elas são apresentados na Tabela 7. Apesar da malha utilizada nas simulações da partícula em queda livre ser muito maior do que a malha usada nas simulações do tipo pêndulo, o tamanho do elemento das malhas foi mantido próximo em ambas as malhas.

Tabela 7- Dados da malha

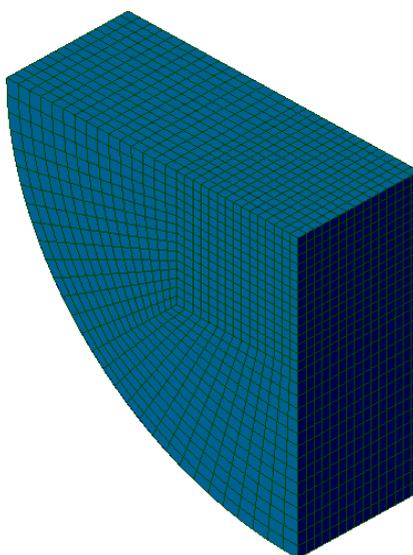
	Queda livre	Pêndulo
Tipo	Hexaédrica	Hexaédrica
Geometria	Tridimensional	Tridimensional
Elementos	160.000	6.750
Tamanho médio dos elementos da malha	1 cm ³	0,8 cm ³

Figura 13: Malha retangular (A) e seção com maior detalhamento (B)



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 14: Malha do pêndulo



Fonte: Elaborada pelo autor

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Síntese das esferas de alginato

As observações obtidas por uma análise qualitativa dos testes para formação das esferas de alginato estão dispostas na Tabela 8.

Tabela 8 - Formação das esferas de alginato de sódio

Concentração da solução de Alginato de Sódio (g/L)	Cloreto	Concentração da solução de Cloreto (g/L)	Tamanho*	Esfera**
15	Bário	10	(+)	(+)
	Cálcio	10	(+)	(+)
	Cobalto	10		(-)
		15	(++)	(+/-)
		20	(++)	(+)
20	Bário	10	(+++)	(+)
	Cálcio	10	(+++)	(+)
	Cobalto	10		(-)
		15	(+)	(+)
		20	(+)	(+)
25	Bário	10	(++)	(+)
	Cálcio	10	(++)	(+)
	Cobalto	10		(-)
		15		(-)
		20	(+++)	(+)

* (+) – menor que a maioria; (++) – semelhante à maioria; (+++) – maior que a maioria

** (+) – esferas formadas; (+/-) – partículas não esféricas formadas; (-) – nenhuma partícula formada

Com base na Tabela 8, observa-se que as esferas foram formadas em todos os experimentos com os cloretos de Bário e Cálcio e apresentaram maiores tamanhos para a concentração de alginato de sódio 20 g/L. No entanto, as esferas de Cobalto não foram formadas

para a concentração de 10 g/L e demonstraram maior dificuldade de formação nas demais concentrações. Essas observações condizem com estudos da literatura, que apontam a menor afinidade do alginato por íons Co^{2+} , embora ocorra o processo de gelificação do alginato de sódio em soluções de cloreto de cobalto (Ouwere *et al.*, 1998). Dessa forma, para as sínteses posteriores (com adição de dióxido de titânio) foram definidas as concentrações de solução de alginato de Sódio 20 g/L e de soluções de cloreto de cálcio, bário e cobalto de 15 g/L.

Na Tabela 9 é apresentada a análise qualitativa dos testes para formação das esferas de alginato com a adição de dióxido de Titânio.

Tabela 9 – Dados de formação de esferas de alginato com a adição de dióxido de Titânio

Quantidade de dióxido de Titânio (g)	Cloreto	Tamanho *	Esfera **
12,02	Bário	(++)	(+)
	Cálcio	(++)	(+)
	Cobalto		(-)
19,1	Bário	(+++)	(+)
	Cálcio	(++)	(+)
	Cobalto		(-)
24,99	Bário	(++)	(+)
	Cálcio	(++)	(+)
	Cobalto	(+++)	(+)

* (+) – menor que a maioria; (++) – semelhante à maioria; (+++) – maior que a maioria

** (+) – esferas formadas; (+/-) – partículas não esféricas formadas; (-) – nenhuma partícula formada

As esferas formadas foram caracterizadas quanto à sua densidade e os resultados obtidos indicaram o aumento da densidade devido à presença do dióxido de titânio. No entanto, da Tabela 9, observa-se que apenas a adição de aproximadamente 25 g de dióxido de titânio promoveu a formação de esferas para todas as soluções catiônicas utilizadas. Assim, para as etapas subsequentes desse trabalho foram utilizadas esferas de alginato com composições definidas de solução de alginato de sódio 20 g/L, soluções de cloreto 15 g/L e proporção (em massa) dióxido de titânio/alginato de sódio 25:2.

5.2. Caracterização das partículas

Os resultados da caracterização das partículas são apresentados na Tabela 10. Para as partículas de alginato, foram utilizadas duas mangueiras de diâmetro interno distinto (3 e 5 mm) no processo de síntese. O resultado da caracterização para ambos está apresentado na tabela, discriminando o diâmetro da mangueira utilizada na primeira coluna.

Tabela 10 - Medidas de diâmetro, circularidade, densidade e módulo de Young para partículas de diferentes propriedades

Partícula	Diâmetro (mm) $\pm \sigma$	Densidade(kg/m ³) $\pm \sigma$	Circularidade $\pm \sigma$	Módulo de Young (Pa) $\pm \sigma$
ABS sem recobrimento	5,944 \pm 0,018	1822 \pm 14	0,981 \pm 0,001	2,83x10 ⁹ \pm 5,06x10 ⁸
ABS com 1 camada de recobrimento	6,028 \pm 0,015	1766 \pm 20	0,945 \pm 0,005	1,87x10 ⁸ \pm 1,42x10 ⁸
ABS com 2 camadas de recobrimento	6,055 \pm 0,008	1775 \pm 31	0,937 \pm 0,010	8,99x10 ⁷ \pm 3,35x10 ⁷
Borracha nitrílica	4,767 \pm 0,060	1357 \pm 26	0,982 \pm 0,003	4,12x10 ⁶ \pm 1,65x10 ⁵
Fluorelastômero	4,768 \pm 0,060	1759 \pm 31	0,985 \pm 0,002	2,88x10 ⁶ \pm 3,54x10 ⁴
Alginato Ba ²⁺ (3 mm)	4,300 \pm 0,198	1077 \pm 35	0,889 \pm 0,014	1,44x10 ⁵ \pm 1,60x10 ⁴
Alginato Ca ²⁺ (3 mm)	4,275 \pm 0,099	1140 \pm 67	0,886 \pm 0,020	1,70x10 ⁵ \pm 3,99x10 ³
Alginato Co ²⁺ (3 mm)	5,234 \pm 0,240	1148 \pm 48	0,879 \pm 0,015	1,81x10 ⁴ \pm 5,45x10 ³
Alginato Ba ²⁺ (5 mm)	4,547 \pm 0,269	1065 \pm 29	0,888 \pm 0,022	1,28x10 ⁵ \pm 2,27x10 ³
Alginato Ca ²⁺ (5 mm)	4,702 \pm 0,199	1070 \pm 27	0,889 \pm 0,019	1,33x10 ⁵ \pm 6,65x10 ³
Alginato Co ²⁺ (5 mm)	5,350 \pm 0,461	1098 \pm 21	0,881 \pm 0,026	1,38x10 ⁴ \pm 6,02x10 ³

Os resultados evidenciam os maiores valores de densidade e diâmetro para o grupo das partículas de ABS, enquanto para as demais partículas notam-se menores variações desses parâmetros entre elas. Quanto ao módulo de Young, observam-se uma ampla faixa de valores, sendo os maiores correspondentes também as partículas de ABS, classificadas como partículas rígidas.

O recobrimento de borracha proporcionou uma redução na densidade das esferas de ABS, no entanto uma segunda camada de recobrimento não promoveu variações significativas nas propriedades desse grupo de partículas.

Quanto às partículas de alginato, o tipo de cátion não exerceu influência expressiva sobre a densidade, com variações de cerca de 4%. No entanto, para o diâmetro observa-se uma maior variação dos resultados (cerca de 20%), o que pode ser justificado pela presença de ligações mais próximas entre o alginato e os íons de Bário, resultando em partículas de menor tamanho.

Os resultados de módulo de Young indicam a maior resistência mecânica para as partículas de Alginato Ba^{2+} e Ca^{2+} . A elasticidade dessas partículas condiz com estudos que associam a maior rigidez das partículas com a afinidade do alginato em relação aos cátions bivalentes. De acordo com a literatura, o alginato apresenta maior eficiência de aprisionamento de íons de Bário e Cálcio, em comparação com os demais, formando um maior número de ligações, que garante rigidez à estrutura dessas partículas. (Ouwerx *et al.*, 1998; Chan *et al.*, 2011; Harper *et al.*, 2014).

Além disso, a síntese das esferas de alginato a partir de mangueiras com diâmetros internos distintos (de 3 mm e 5 mm) resultou em uma variação significativa no diâmetro das partículas de Cálcio e no módulo de Young das partículas de Cobalto. Enquanto as partículas distintas de bário apresentaram diferenças pouco relevantes nas propriedades após a síntese.

A partir dos dados de módulo de Young e densidade, foram calculadas as velocidades de compressão de ondas elásticas, segundo a Equação 22, e o erro propagado. Os valores obtidos são apresentados na Tabela 11.

$$c_o = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (22)$$

A velocidade de propagação de ondas elásticas relaciona-se com o coeficiente de restituição de modo que baixas velocidades indicam que um maior tempo é requerido para que as ondas elásticas se propaguem através da partícula durante a fase elástica da colisão, fazendo com que uma quantidade significativa de energia se dissipe e, portanto, menores valores de coeficiente de restituição sejam obtidos (Weir e Tallon, 2005). Desse modo, com base na velocidade de compressão das partículas, uma menor dissipação de energia e, conseqüentemente, maiores coeficientes de restituição são esperados para o grupo das partículas de ABS.

Tabela 11 - Velocidade de compressão de ondas elásticas

Partícula	Densidade (kg/m ³)	Módulo de Young (Pa)	Velocidade de compressão (m/s)
ABS sem recobrimento	1822	2,83x10 ⁹	1246,29 ± 223,04
ABS com 1 camada de recobrimento	1766	1,87x10 ⁸	325,41 ± 247,13
ABS com 2 camadas de recobrimento	1775	8,99x10 ⁷	225,05 ± 83,95
Borracha nitrílica	1357	4,12x10 ⁶	55,10 ± 2,45
Fluorelastômero	1759	2,88x10 ⁶	40,46 ± 0,87
Alginato Ba ²⁺ (3 mm)	1077	1,44x10 ⁵	11,56 ± 1,34
Alginato Ca ²⁺ (3 mm)	1140	1,70x10 ⁵	12,21 ± 0,77
Alginato Co ²⁺ (3 mm)	1148	1,81x10 ⁴	3,97 ± 1,21
Alginato Ba ²⁺ (5 mm)	1065	1,28x10 ⁵	10,96 ± 0,36
Alginato Ca ²⁺ (5 mm)	1070	1,33x10 ⁵	11,15 ± 0,62
Alginato Co ²⁺ (5 mm)	1098	1,38x10 ⁴	3,55 ± 1,55

Além das propriedades físicas e elásticas, as esferas foram caracterizadas quanto à sua rugosidade média. Os resultados para as partículas rígidas encontram-se dispostos na Tabela 12.

Tabela 12 - Dados de rugosidade média para partículas poliméricas com diferentes aproximações

Aproximação	Ra(μm)±σ		
	429x	1072x	2129x
Partículas			
ABS sem recobrimento	0,207±0,071	0,121±0,065	0,125±0,100
ABS com 1 camada de recobrimento	1,082±0,486	0,845±0,491	0,694±0,607
ABS com 2 camadas de recobrimento	1,784±1,065	0,835±0,345	0,554±0,363
Borracha nitrílica	7,111±1,248	2,994±1,431	2,418±0,726
Fluorelastômero	5,081±0,322	1,934±0,122	1,401±0,237

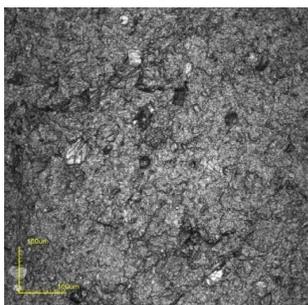
A rugosidade caracteriza-se pelas micro-irregularidades existentes na superfície do material e é quantificada através de medidas relacionadas à altura ou largura das irregularidades.

A rugosidade média (R_a) é o principal parâmetro utilizado para a caracterização da rugosidade e consiste na média aritmética dos valores absolutos de todos os desvios da superfície em relação ao plano médio na área de amostragem.

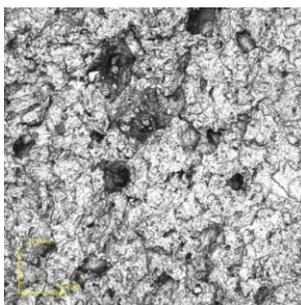
Os valores de rugosidade exercem influência no contato do material com as superfícies. Assim, considerando somente o efeito desse parâmetro sobre o coeficiente de restituição, espera-se que as partículas de borracha nitrílica e fluorelastômero tenham maior tempo de contato com a superfície e, portanto, apresentem menores valores de coeficiente em comparação com as esferas de ABS, uma vez que devem dissipar mais energia no contato com a superfície durante a fase elástica. No entanto, não se pode afirmar isso com base somente na rugosidade, uma vez que outras variáveis podem ter efeito mais pronunciado nesse estudo.

O aspecto das superfícies das partículas é melhor observado nas imagens de microscopia confocal apresentada nas Figuras 15, 16, 17, 18 e 19.

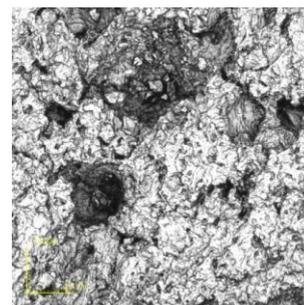
Figura 15: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de Borracha nitrílica.



Borracha nitrílica, 429x



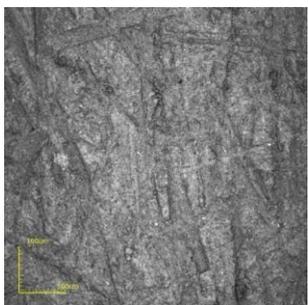
Borracha nitrílica, 1072x



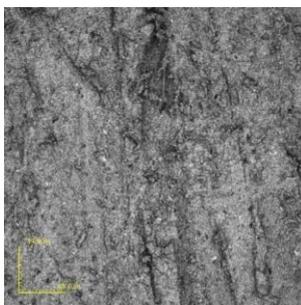
Borracha nitrílica, 2129x

Fonte: Elaborada pelo autor

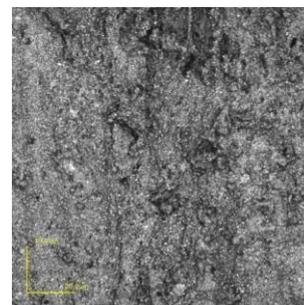
Figura 16: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de Fluorelastômero.



Fluorelastômero, 429x



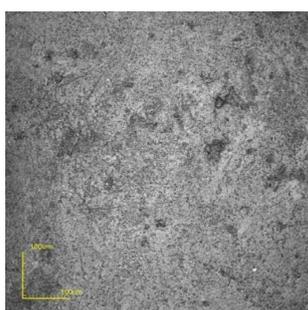
Fluorelastômero, 1072x



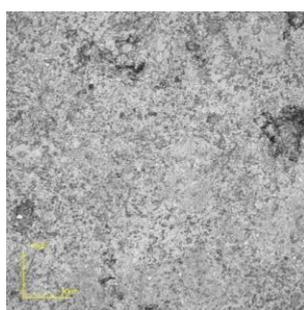
Fluorelastômero, 2129x

Fonte: Elaborada pelo autor

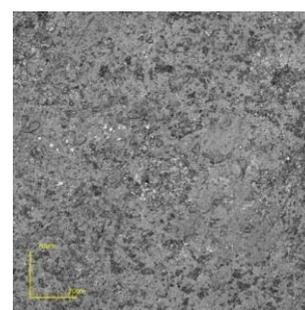
Figura 17: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de ABS sem recobrimento



ABS sem recobrimento, 429x



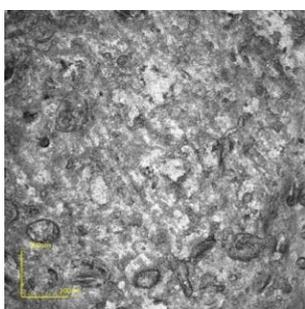
ABS sem recobrimento, 1072x



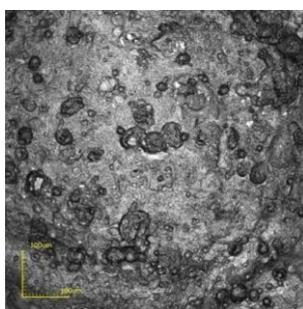
ABS sem recobrimento, 2129x

Fonte: Elaborada pelo autor

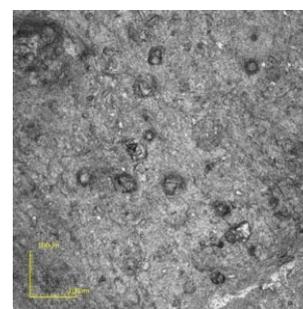
Figura 18: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de ABS com uma camada de recobrimento



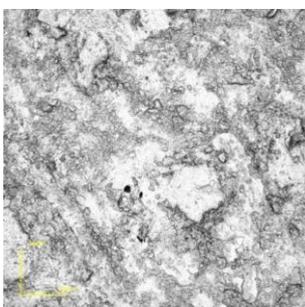
ABS com 1 camada de recobrimento, 429x



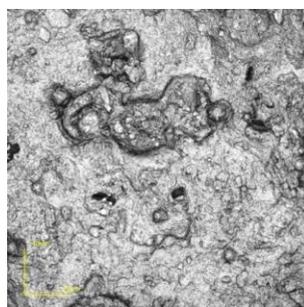
ABS com 1 camada de recobrimento, 429x



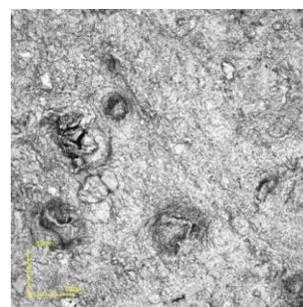
ABS com 1 camada de recobrimento, 429x



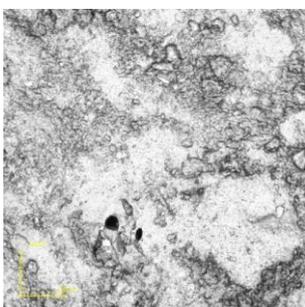
ABS com 1 camada de recobrimento, 1072x



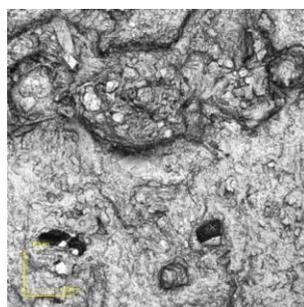
ABS com 1 camada de recobrimento, 1072x



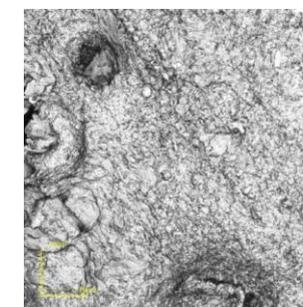
ABS com 1 camada de recobrimento, 1072x



ABS com 1 camada de recobrimento, 2129x



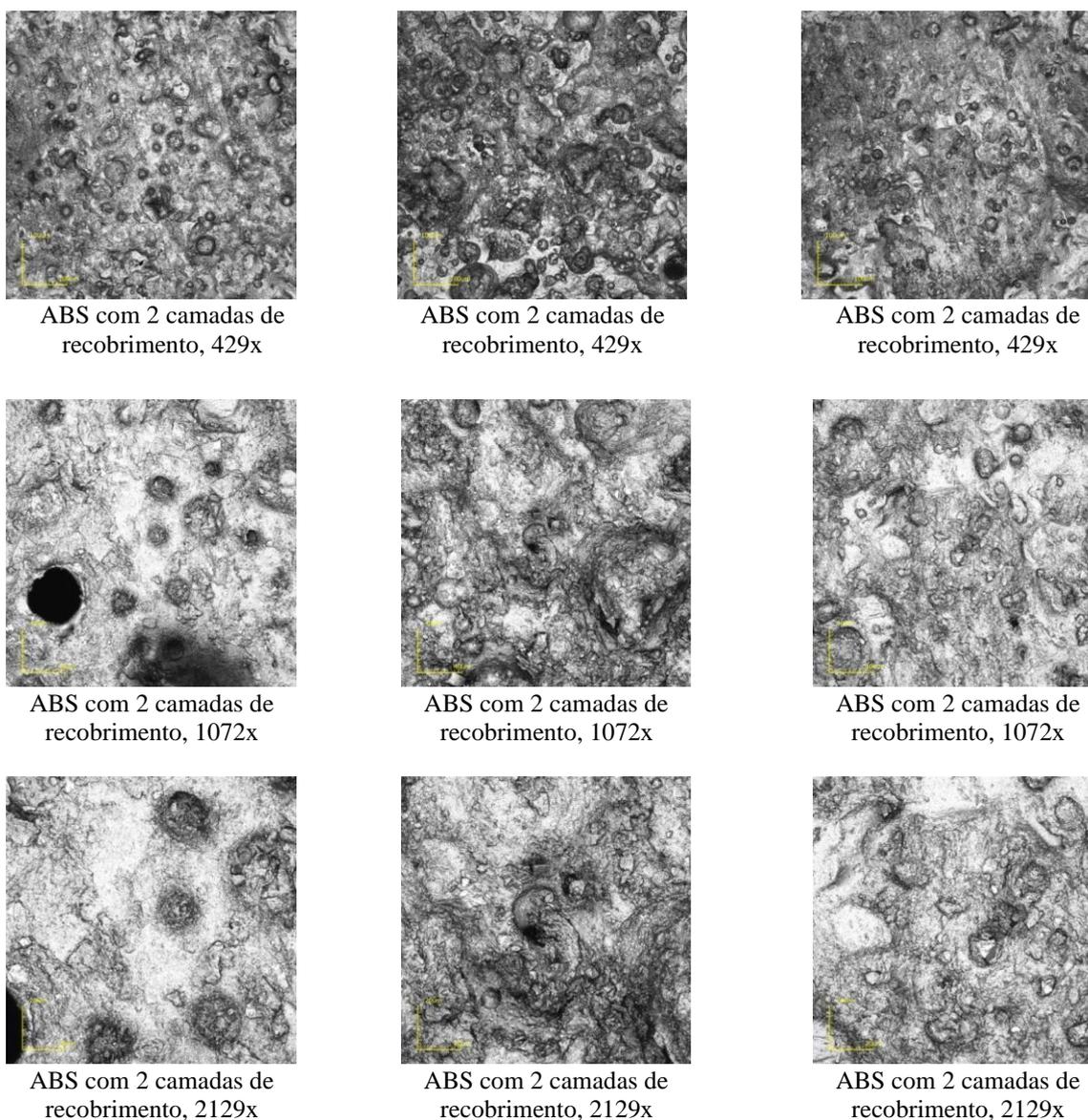
ABS com 1 camada de recobrimento, 2129x



ABS com 1 camada de recobrimento, 2129x

Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 19: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de ABS com 2 camadas de recobrimento.



Fonte: Elaborada pelo autor

As imagens demonstram maior homogeneidade nas superfícies das partículas de ABS sem recobrimento. O recobrimento das esferas resultou em aumento significativo das imperfeições nas superfícies, com aparecimento de cavidades e regiões de maior aspereza, o que também se observa a partir do aumento dos valores da rugosidade média das partículas de ABS, apresentados na Tabela 12.

As esferas de borracha nitrílica apresentam grandes cavidades em sua superfície, o que se reflete nos elevados valores de rugosidade obtidos. Já as esferas de fluorelastômero, não apresentam regiões de cavidade. No entanto, observam-se asperezas e aglomerados de filamentos do material, resultando em uma elevação da rugosidade média desse grupo de partículas.

As diferentes aproximações das imagens exerceram influência nos resultados. Em todos

os grupos de partículas, maiores imperfeições são observadas para um aumento de 2129x. No entanto, observa-se que os valores de rugosidade tendem a diminuir para ampliações maiores, possivelmente por maiores ampliações restringirem a área de análise da superfície.

Além das partículas poliméricas, os dados de rugosidade média foram obtidos para as partículas sintetizadas a partir do alginato de sódio, conforme são apresentados na Tabela 13.

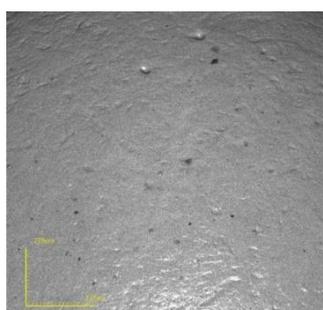
Tabela 13 - Dados de rugosidade média para partículas de alginato com diferentes aproximações

Partícula	<i>Ra</i> (μm) $\pm \sigma$	
	Aproximação	
	216x	429x
Bário (4,300 mm)	0,762 \pm 0,115	0,227 \pm 0,021
Cálcio (4,275 mm)	0,835 \pm 0,196	0,195 \pm 0,017
Cobalto (5,234 mm)	0,900 \pm 0,074	0,251 \pm 0,085
Bário (4,547 mm)	0,817 \pm 0,058	0,222 \pm 0,013
Cálcio (4,702 mm)	0,814 \pm 0,063	0,214 \pm 0,031
Cobalto (5,350 mm)	0,878 \pm 0,049	0,231 \pm 0,033

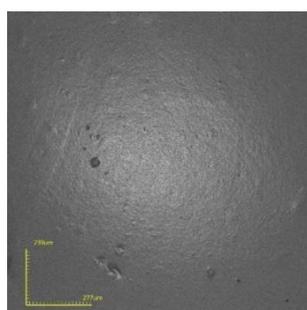
Os dados apresentados na Tabela 13 demonstram uma pequena diferença entre as partículas para uma mesma aproximação e evidenciam baixos valores de rugosidade, os quais se aproximam aos das esferas de ABS sem recobrimento e caracterizam pequenas irregulares nas superfícies das partículas. Assim como para as demais partículas, observa-se também que os valores de rugosidade média diminuem para ampliações maiores, uma vez que as imagens são obtidas a partir de uma área mais restrita da superfície.

As imagens das superfícies das partículas de alginato obtidas por microscopia confocal são apresentadas para diferentes aproximações na Figura 20.

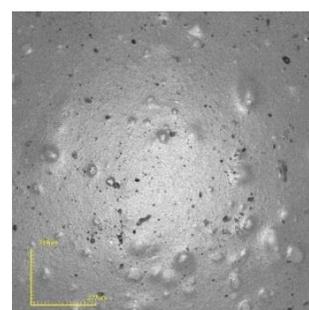
Figura 20: Imagens de microscopia confocal das superfícies das partículas de alginato.



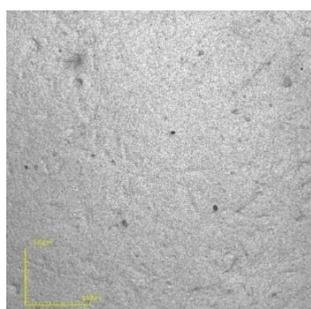
Bário (4,300 mm), 216x



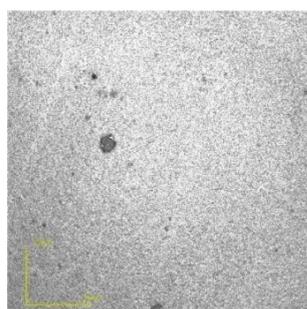
Cálcio (4,275 mm), 216x



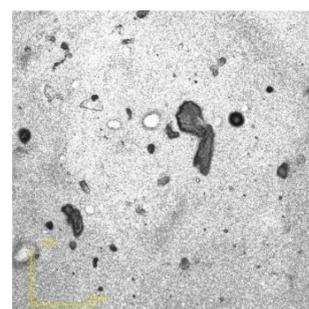
Cobalto (5,234 mm), 216x



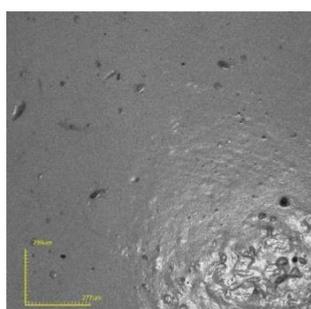
Bário (4,300 mm), 429x



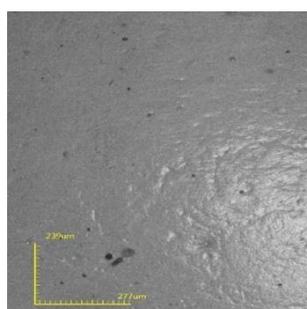
Cálcio (4,275 mm), 429x



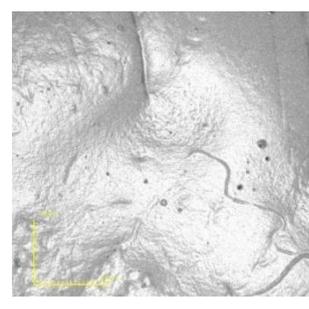
Cobalto (5,234 mm), 429x



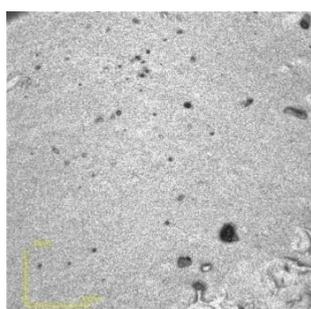
Bário (4,547 mm), 216x



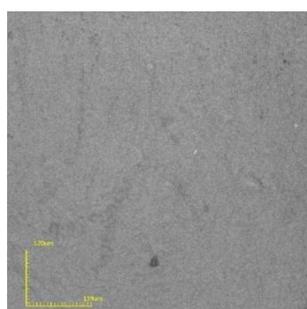
Cálcio (4,702 mm), 216x



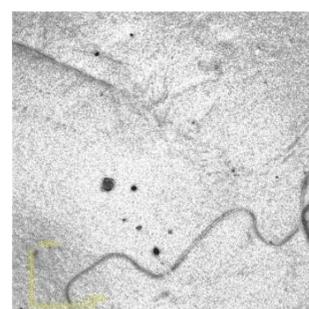
Cobalto (5,350 mm), 216x



Bário (4,547 mm), 429x



Cálcio (4,702 mm), 429x



Cobalto (5,350 mm), 429x

Fonte: Elaborada pelo autor

A Figura 20 demonstra a influência de diferentes aproximações no aspecto das superfícies das partículas nas imagens de microscopia. Além disso, embora os valores de rugosidade não apresentem variações significativas para as diferentes partículas, as imagens de microscopia demonstram que as partículas de bário e cálcio possuem superfícies mais lisas e uniformes, enquanto as de cobalto apresentam maiores irregularidades.

A similaridade entre as superfícies das partículas de bário e cálcio indicam um comportamento semelhante do alginato de sódio na presença desses cátions. Do mesmo modo, o aspecto distinto das partículas de cobalto reforça a diferença no mecanismo de reação entre o alginato e esse íon.

5.3. Colisões partícula-superfície em ar

5.3.1. Queda livre

Os resultados obtidos para os coeficientes de restituição nas colisões partícula-superfície com partícula de ABS em queda livre são dispostos na Tabela 14.

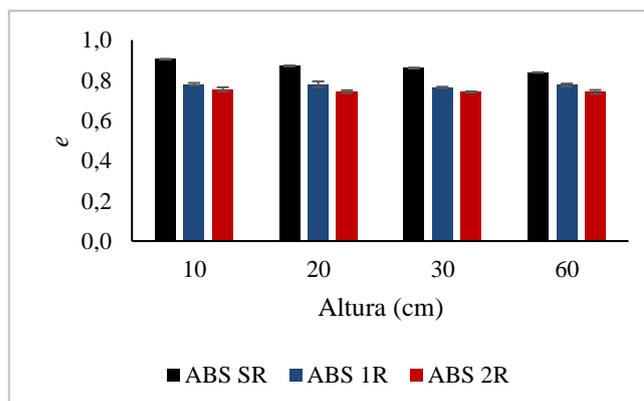
Tabela 14 - Valores de coeficiente de restituição e velocidade de impacto para diferentes alturas de queda*

Altura (cm)	10		20		30		60	
Partícula	<i>e</i>	<i>V</i> _{impacto} (m/s)						
Sem recobrimento	0,905		0,872		0,861		0,839	
	±	1,495	±	1,777	±	2,390	±	3,413
	0,002		0,001		0,002		0,001	
1 camada de recobrimento	0,781		0,780		0,765		0,777	
	±	1,406	±	1,748	±	2,165	± 0,007	3,398
	0,006		0,015		0,003			
2 camadas de recobrimento	0,755		0,744		0,742		0,742	
	±	1,333	±	1,742	±	2,058	±	3,156
	0,010		0,007		0,003		0,010	

*Acompanhados de intervalo de confiança de 95%

Os resultados da Tabela 14 demonstram a influência das propriedades das partículas sobre o coeficiente de restituição, evidenciando maiores valores para as esferas de ABS sem recobrimento, conforme também ilustrado na Figura 21.

Figura 21: Coeficientes de restituição para partículas de ABS em função da altura de queda.



Fonte: Elaborada pelo autor

Com base nas propriedades dessas partículas, observa-se que as partículas de ABS sem revestimento possuem o maior módulo de Young, na ordem de 10^9 , enquanto as partículas de ABS recobertas têm valores na ordem de 10^8 e 10^7 . A maior resistência à deformação elástica das partículas sem recobrimento favorece a menor dissipação de energia, resultando em maiores valores de coeficiente de restituição.

Além das propriedades elásticas, os dados de rugosidade média (Tabela 12) indicam características superficiais bastante distintas entre as esferas de ABS sem recobrimento e das recobertas com uma ou duas camadas, sendo essas últimas menos uniformes. Maiores valores de rugosidade favorecem para um maior tempo de contato das partículas com a superfície, o que faz a partícula perder mais velocidade no momento da restituição.

Além das propriedades das partículas, observa-se que a altura de queda exerce influência significativa sobre o coeficiente de restituição das esferas de ABS sem recobrimento. Os resultados mostram que os valores de e decresceram com a altura de queda, variando de 0,9050 a 0,8388. Para maiores alturas de queda, as partículas colidem na superfície com maiores velocidades de impacto e dissipam uma maior quantidade de energia após colisão, reduzindo o valor do coeficiente.

A velocidade de impacto não demonstra grande relevância nos resultados das partículas de ABS recobertas. O recobrimento das esferas de ABS acarreta em maiores irregularidades na superfície e resulta em partículas não esféricas. E ainda, a composição da camada de recobrimento pode amortecer o impacto das partículas nas colisões, o que reduz a restituição e as velocidades de afastamento.

Nos experimentos, constatou-se que parte das partículas recobertas desviavam significativamente da trajetória vertical, de modo que as imagens obtidas tornavam inviáveis a obtenção da altura de rebatimento. Diante disso, para as partículas recobertas tem-se uma proporção de aproveitamento de 7/10, o que reduz os erros associados a obtenção dos resultados. Mas ainda assim, demonstra que os maiores erros padrão correspondem às partículas revestidas. Essa afirmação indica que a presença do recobrimento torna a trajetória mais errática, podendo inclusive desviar as partículas do plano vertical, e proporciona uma maior variação dos resultados obtidos. A literatura (LI *et al.*, 2004; HASTIE, 2013) reforça que, para partículas irregulares, a trajetória de rebatimento é, na maioria dos casos, desviada do eixo vertical e resulta em uma maior variação dos dados obtidos.

Portanto, o método de queda livre mostra-se impreciso para avaliar a colisão de partículas irregulares, o que pode justificar a pouca influência da velocidade de impacto nesse grupo de partículas. Para garantir a eficácia do método, o experimento precisa ser monitorado e avaliado a partir de duas ou mais direções a fim de evitar imprecisões e promover resultados confiáveis.

5.3.2. Pêndulo

As velocidades antes e após a colisão (v_1 e v_2) e as alturas de rebatimento (h_2) medidas nos experimentos do Pêndulo são apresentados na Tabela 15.

Tabela 15 - Dados de altura de rebatimento e velocidades de impacto e afastamento

Partícula	Ângulo (°)											
	27			50			67			88		
	h_2 (m)	v_1 (m/s)	v_2 (m/s)									
ABS SR	0,131	0,55	0,52	0,172	1,22	1,02	0,207	1,69	1,49	0,254	2,15	1,78
ABS 1R	0,121	0,69	0,61	0,148	1,31	1,07	0,181	1,59	1,29	0,194	1,85	1,40
ABS 2R	0,113	0,66	0,59	0,147	1,09	0,87	0,182	1,68	1,30	0,221	2,14	1,55
Borracha Nitrílica	0,123	0,67	0,60	0,140	1,10	0,87	0,138	1,61	1,14	0,178	1,90	1,30
Fluorelastômero	0,116	0,71	0,62	0,126	1,02	0,71	0,131	1,37	0,80	0,143	1,85	0,86
Bário (4,300 mm)	0,116	0,76	0,64	0,127	0,98	0,72	0,150	1,54	0,93	0,167	1,92	1,07
Cálcio (4,275 mm)	0,123	0,73	0,63	0,143	1,14	0,88	0,147	1,32	0,96	0,165	1,84	1,14
Cobalto (5,234 mm)	0,118	0,64	0,54	0,138	1,07	0,82	0,144	1,35	0,85	0,162	1,81	0,89
Bário (4,547 mm)	0,117	0,72	0,64	0,138	0,93	0,74	0,149	1,25	0,90	0,172	2,05	1,21
Cálcio (4,702 mm)	0,118	0,71	0,63	0,136	1,00	0,80	0,142	1,52	1,04	0,157	1,93	1,10
Cobalto (5,350 mm)	0,118	0,67	0,60	0,137	1,02	0,72	0,136	1,59	0,94	0,162	1,74	0,92

A partir dos dados da Tabela 15, os coeficientes de restituição em ar com o aparato experimental tipo pêndulo foram obtidos a partir de 3 métodos de cálculo, conforme apresentado nas Tabelas 16 e 17.

Os resultados das Tabelas 16 e 17 indicam que a medida do coeficiente de restituição por meio do pêndulo é bastante adequada para partículas esféricas (com desvios abaixo de 0,002). Para as partículas não uniformes, que apresentam menor circularidade, são obtidos maiores desvio nos resultados, além de uma maior discrepância entre os valores pelas diferentes formas de cálculo, o que se deve principalmente à variação da perda de energia devido ao impacto impreciso.

Ademais, variações entre os resultados obtidos pelos três métodos de cálculo foram observadas. De modo geral, embora as medidas de coeficiente a partir da altura de rebatimento e do ângulo de deflexão sejam medições mais diretas e tenham proporcionado resultados satisfatórios, conseguindo prever a variação do parâmetro para partículas distintas, essas formas de avaliação incluem imprecisões na leitura dos pontos nas imagens adquiridas e são obtidas a partir de considerações na equação para o cálculo do coeficiente de restituição, negligenciando a atuação de forças dissipativas no momento do impacto, assim podem ser consideradas mais imprecisas.

Tabela 16 - Valores de coeficiente de restituição, determinados a partir das alturas, do ângulo e das velocidades, para partículas rígidas em função do ângulo inicial*

		Ângulo (°)											
		27			50			67			88		
		e_h	e_α	e_v									
ABS SR		0,934	0,947	0,945	0,896	0,895	0,871	0,860	0,844	0,840	0,823	0,814	0,829
		± 0,003	± 0,002	± 0,005	± 0,005	± 0,005	± 0	± 0,002	± 0,002	± 0,004	± 0,002	± 0,004	± 0,022
ABS 1R		0,898	0,906	0,887	0,831	0,813	0,815	0,804	0,771	0,778	0,719	0,701	0,755
		± 0,002	± 0,002	± 0,001	± 0,005	± 0,006	± 0,004	± 0,003	± 0,005	± 0,018	± 0,012	± 0,007	± 0,086
ABS 2R		0,869	0,896	0,888	0,827	0,811	0,815	0,807	0,789	0,774	0,769	0,731	0,725
		± 0,001	± 0,002	± 0,027	± 0,004	± 0,003	± 0,017	± 0,005	± 0,006	± 0,028	± 0,003	± 0,005	± 0,035
Borracha Nitrílica		0,904	0,905	0,893	0,807	0,782	0,787	0,702	0,708	0,709	0,688	0,673	0,684
		± 0,003	± 0,003	± 0,003	± 0,003	± 0,001	± 0,009	± 0,014	± 0,001	± 0,002	± 0,002	± 0	± 0,025
Fluorelas-tômero		0,878	0,888	0,873	0,767	0,742	0,696	0,684	0,631	0,533	0,617	0,547	0,467
		± 0,001	± 0,001	± 0,001	± 0,011	± 0,004	± 0,001	± 0	± 0,002	± 0,002	± 0,001	± 0,003	± 0,008

*Acompanhados de intervalo de confiança de 95%

Tabela 17 - Valores de coeficiente de restituição para partículas macias em função do ângulo inicial*

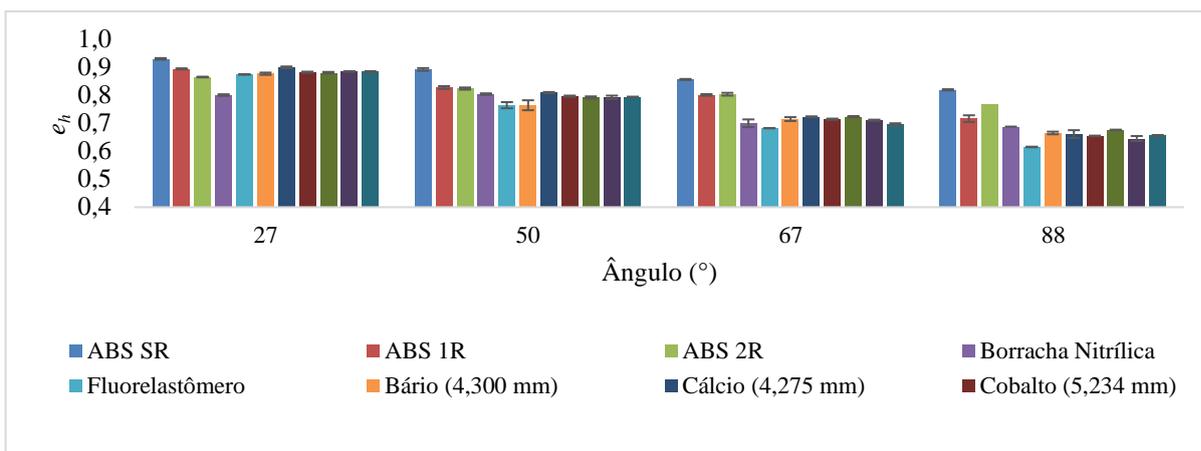
Ângulo (°)												
27			50			67			88			
	e_h	e_α	e_v									
Bário (4,300mm)	0,881	0,905	0,835	0,767	0,774	0,727	0,717	0,664	0,606	0,667	0,595	0,554
	± 0,004	± 0,002	± 0,001	± 0,018	± 0,004	± 0,018	± 0,007	± 0,004	± 0,005	± 0,005	± 0,007	± 0,031
Cálcio (4,275mm)	0,904	0,894	0,866	0,813	0,771	0,772	0,725	0,657	0,727	0,663	0,611	0,622
	± 0,003	± 0,001	± 0,005	± 0,002	± 0	± 0,015	± 0,002	± 0,002	± 0,002	± 0,014	± 0,016	± 0,053
Cobalto (5,234mm)	0,886	0,892	0,855	0,800	0,779	0,750	0,717	0,630	0,673	0,657	0,560	0,506
	± 0,002	± 0,002	± 0,022	± 0,002	± 0,002	± 0,020	± 0,002	± 0,017	± 0,001	± 0,001	± 0,001	± 0,030
Bário (4,547mm)	0,884	0,899	0,887	0,795	0,781	0,796	0,726	0,691	0,720	0,678	0,623	0,590
	± 0,003	± 0,002	± 0,003	± 0,004	± 0,002	± 0,002	± 0,002	± 0,002	± 0,001	± 0,001	± 0,001	± 0,011
Cálcio (4,702mm)	0,889	0,909	0,886	0,796	0,782	0,799	0,713	0,702	0,679	0,647	0,595	0,570
	± 0,001	± 0,002	± 0,003	± 0,006	± 0,002	± 0,013	± 0,002	± 0,001	± 0,011	± 0,009	± 0,001	± 0,009
Cobalto (5,350mm)	0,888	0,910	0,901	0,797	0,795	0,701	0,698	0,692	0,591	0,658	0,566	0,526
	± 0,002	± 0,002	± 0,014	± 0,001	± 0,001	± 0,006	± 0,004	± 0,005	± 0,004	± 0	± 0,005	± 0,036

*Acompanhados de intervalo de confiança de 95%

Os resultados obtidos pela velocidade proporcionaram a maior variação entre os coeficientes de partículas distintas, no entanto, apresentam os maiores desvios, o que se deve principalmente a variações nas casas decimais dos dados, que são expressivas por se tratar de velocidades baixas. Ademais, essa forma de cálculo é considerada a mais precisa, por fornecer resultados fornecidos a partir da definição do coeficiente de restituição e poder ser utilizada de forma mais ampla, como o cálculo do coeficiente de restituição efetivo em líquidos (HLOSTA *et al.*, 2018).

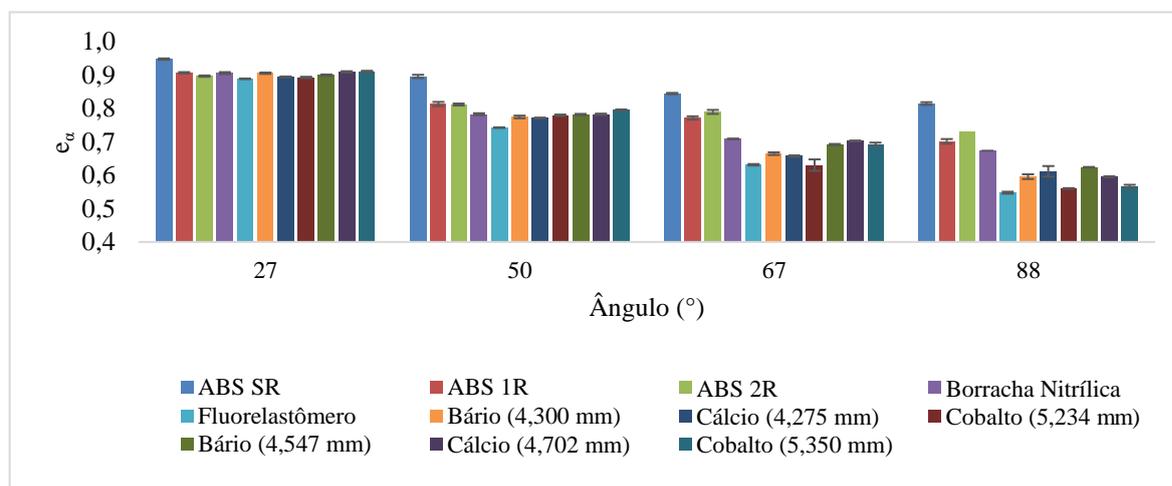
Os resultados de coeficiente de restituição obtidos a partir das três formas de cálculo são apresentados, em função do ângulo inicial, nas Figuras 22, 23 e 24.

Figura 22: Coeficiente de restituição em função do ângulo inicial de queda, obtido a partir da altura.



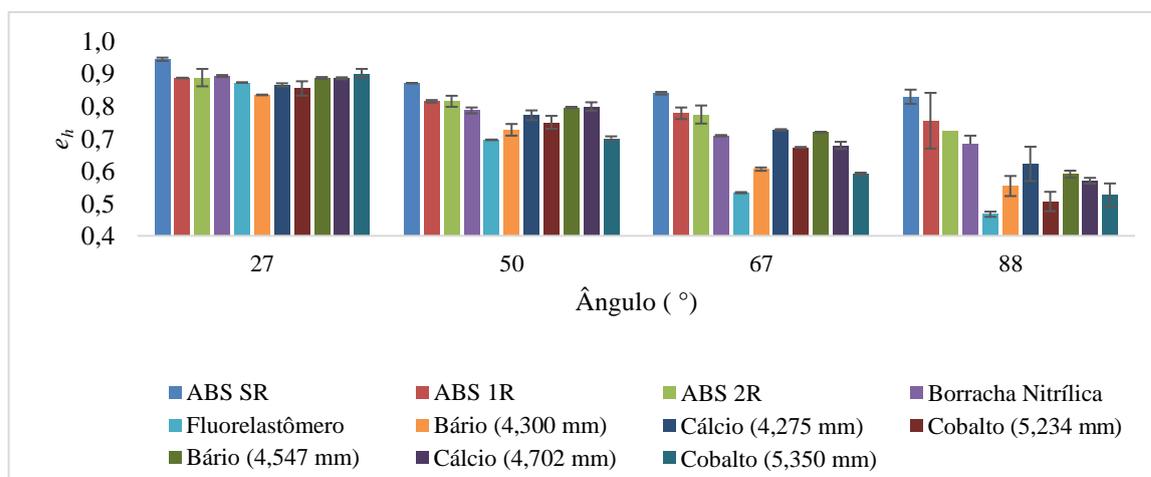
Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 23: Coeficiente de restituição em função do ângulo inicial de queda, obtido a partir do ângulo.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 24: Coeficiente de restituição em função do ângulo inicial de queda, obtido a partir da velocidade.



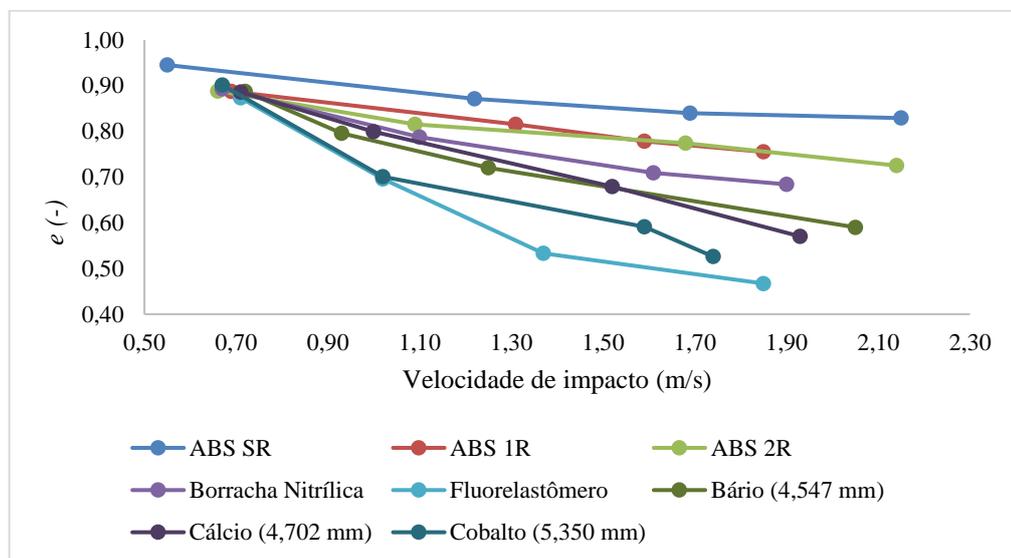
Fonte: Elaborada pelo autor

Os gráficos apresentados evidenciam o efeito do ângulo inicial do pêndulo sobre o coeficiente de restituição de todos os grupos de partículas. Para as partículas de ABS sem recobrimento, nota-se que a variação do ângulo inicial exerce menor influência em comparação com as demais partículas, indicando uma redução de cerca de 14% entre os valores máximos e mínimos de coeficiente. Enquanto para as partículas de alginato observam-se as maiores variações, entre 30% e 40%. Para esse grupo, a redução significativa dos valores de coeficiente de restituição é resultante da modificação na forma das partículas durante as colisões.

Os resultados também expõem uma tendência decrescente do coeficiente em função do ângulo. Para o menor ângulo (de 27°), valores elevados de coeficiente são obtidos para partículas rígidas e macias, indicando a menor dissipação de energia no momento da colisão. Enquanto para maiores ângulos, as partículas colidem com maiores velocidades de impacto e, conseqüentemente, nota-se a diminuição significativa do coeficiente de restituição.

O efeito da velocidade de impacto sobre o coeficiente de restituição (e_v) é melhor observado na Figura 25.

Figura 25: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto.



Fonte: Elaborada pelo autor

Na Figura 25, o coeficiente de restituição decai de forma não linear com o aumento da velocidade de impacto. No entanto, as partículas macias de alginato apresentam maior influência desse parâmetro, conforme observado anteriormente em função do ângulo inicial.

Para as partículas mais rígidas, em colisões em ar, a etapa dominante de deformação plástica não está envolvida na dissipação de energia. Assim, durante a colisão, a maior parte da

energia armazenada é convertida em energia cinética, sem que ocorram grandes dissipações de energia na forma de calor, deformação ou atrito. Portanto, esse grupo de partículas possui maior velocidade de rebatimento e, conseqüentemente, maior coeficiente de restituição.

Por outro lado, uma vez que as partículas de alginato deformam-se plasticamente no momento do impacto, não mais retornando à sua forma inicial, nota-se uma dissipação significativa de energia durante a fase plástica. Em colisões com maiores velocidades, essas partículas perdem mais energia devido ao impacto com a superfície e ainda, tem-se uma deformação plástica mais eficaz, que desempenha um papel dominante na perda de energia na área de contato com o aumento da velocidade. Assim, a maior perda de energia e menor recuo das partículas após a colisão resultam em uma tendência à maior diminuição do coeficiente.

Com o aumento da velocidade de impacto, nota-se uma maior discrepância entre os coeficientes, o que evidencia a influência das propriedades das partículas sobre os resultados. Nesse estudo, os dados de diâmetro e densidade tiveram variações menos expressivas em comparação com as demais, além disso, a literatura relata que esses parâmetros exercem menor influência sobre o coeficiente de restituição (ARYAEI *et al.*, 2010). Sendo assim, a diferença relevante do módulo de Young e as características superficiais distintas das partículas, representadas pela rugosidade média, promovem o efeito mais significativo das propriedades sobre os valores de e .

O módulo de Young proporciona uma medida de rigidez e está associado à resistência do material, assim, partículas de maior resistência à deformação tendem a apresentar maiores coeficientes de restituição. Além disso, esse parâmetro de elasticidade pode ser usado para descrever a deformação da partícula em uma colisão: no estágio elástico, exerce maior influência com o aumento da velocidade de impacto, o que significa que a deformação elástica das partículas aumenta em uma colisão, independente de existir ou não a fase plástica, resultando na diminuição do coeficiente de restituição.

Nos resultados obtidos, as partículas rígidas (as esferas de ABS com e sem recobrimento) de maior módulo de Young, apresentam valores elevados de coeficiente de restituição, indicando, portanto, uma maior resistência à deformação. Por outro lado, os coeficientes das partículas macias de alginato decaem significativamente para maiores velocidades de impacto, como consequência da deformação plástica dessas partículas durante a colisão.

A partir do módulo de Young, os resultados podem também ser discutidos em função da velocidade de compressão de ondas elásticas na fase elástica da colisão. De acordo com a Tabela 11, as maiores velocidades de compressão correspondem às partículas de ABS, indicando uma menor perda energética na fase elástica para essas partículas.

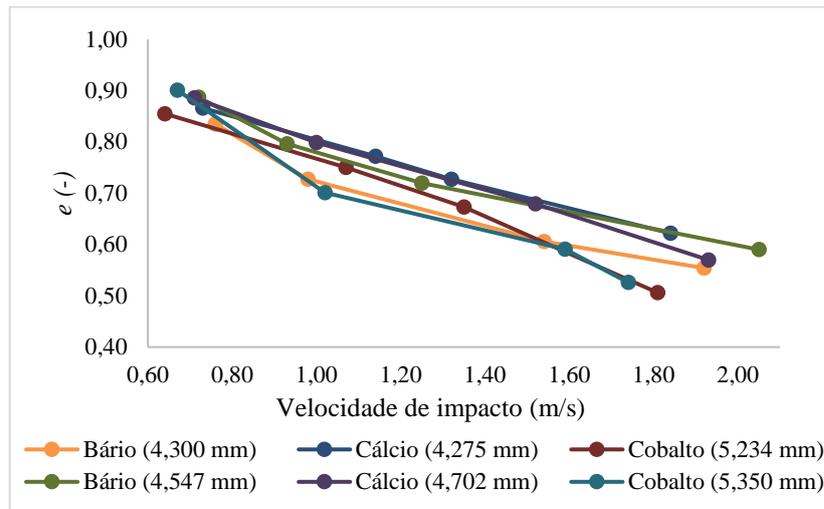
As partículas de borracha, embora sejam classificadas como rígidas, apresentam valores intermediários de velocidade de compressão, com valores de coeficientes de restituição inferiores às partículas de ABS. No entanto, a dissipação de energia é muito mais pronunciada para as partículas de fluorelastômero em comparação com as de borracha nitrílica, indicando que uma pequena variação da velocidade de compressão, associada com outros parâmetros elásticos determinantes, podem exercer forte influência sobre os resultados.

Já partículas de alginato possuem os menores valores de velocidade de compressão e, portanto, os baixos valores de coeficiente de restituição são provenientes tanto da dissipação de energia na fase elástica, quanto de deformações permanentes que ocorrem na fase plástica.

Quanto às características superficiais das partículas, a rugosidade exerce influência no tempo de contato das partículas com a superfície, de modo que partículas de maior rugosidade tendem a ter um tempo de contato prolongado na fase elástica, favorecendo a dissipação de energia nessa fase. Assim, embora tenham valores altos de módulo de Young e tenham sido definidas como partículas rígidas, as partículas de borracha nitrílica e fluorelastômero apresentam elevados valores de rugosidade, que se observa por irregularidades aparentes nas superfícies e, conseqüentemente, tendem a um maior contato com a superfície, o que reflete nos menores valores de coeficiente em comparação com as esferas de ABS. Ademais, essa redução do coeficiente é também resultado da deformação plástica inicial das irregulares das superfícies das partículas, que podem modificar-se ao longo do impacto. No entanto, a relação entre a rugosidade e o coeficiente de restituição é pouco conhecida, intensificando a necessidade de uma investigação mais aprofundada desse parâmetro em trabalhos futuros.

Quanto à influência de propriedades físicas sobre o coeficiente de restituição, destacam-se os resultados referentes às partículas de alginato. Partículas sintetizadas a partir de dutos de diâmetros distintos e, conseqüentemente, com diferentes quantidades de alginato de sódio, apresentaram diferentes diâmetros finais. O coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto para essas partículas é ilustrado na Figura 26.

Figura 26: Coeficiente de restituição das partículas de alginato em função da velocidade de impacto.



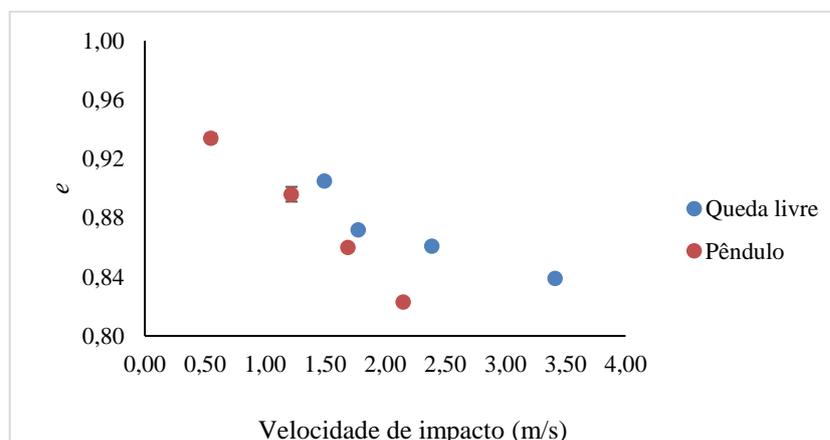
Fonte: Elaborada pelo autor

Um pequeno acréscimo nos coeficientes de restituição é observado para partículas com maiores diâmetros. No entanto, levando em consideração os erros padrão, a influência do diâmetro mostra-se pouco significativa sobre o coeficiente de restituição, como já indicado na literatura para partículas de maior resistência mecânica (ARYAEI *et al.*, 2010). Dessa forma, os resultados reforçam que parâmetros como a velocidade de impacto ou mesmo o módulo de Young dessas partículas, exerceram um efeito muito mais pronunciado em comparação com o diâmetro e densidade das mesmas.

5.3.3. Queda livre x pêndulo

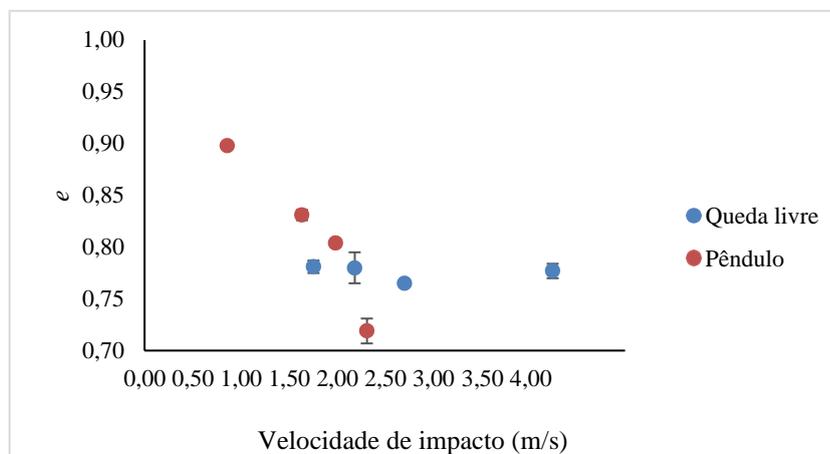
Os resultados para as esferas de ABS não recobertas, com uma e duas camadas de recobrimento obtidos pelos métodos de queda livre e do pêndulo são comparados nas Figuras 27, 28 e 29, respectivamente.

Figura 27: Coeficiente de restituição para as ABS sem recobrimento, obtido pelos dois métodos experimentais.



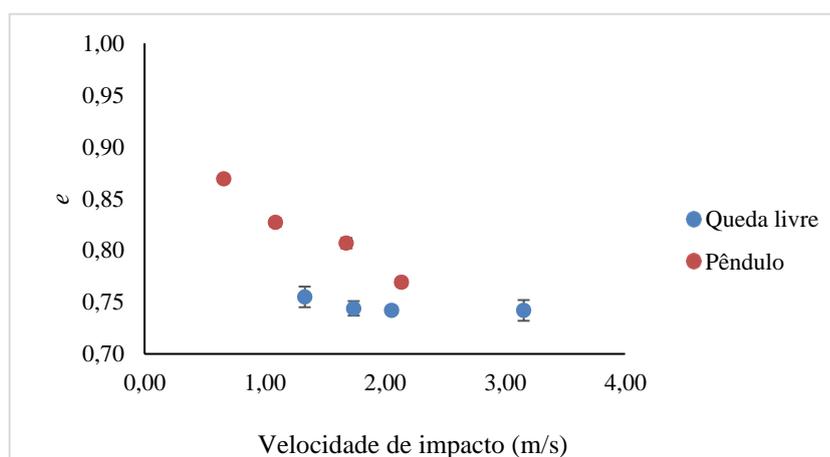
Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 28: Coeficiente de restituição para as ABS com 1 camada de recobrimento, obtido pelos dois métodos experimentais.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 29: Coeficiente de restituição para as ABS com 2 camadas de recobrimento, obtido pelos dois métodos experimentais.



Fonte: Elaborada pelo autor

Os valores de coeficiente de restituição para as esferas de ABS sem recobrimento demonstraram maior proximidade nas duas metodologias (conforme ilustrado na Figura 24), enquanto para as esferas de ABS com recobrimento, a variação de altura não demonstrou influência significativa nos testes em queda livre, conforme se observa nas Figuras 25 e 26.

Como já discutido, o método de queda livre mostrou-se eficaz para partículas esféricas e uniformes, no entanto, para partículas não uniformes (como as ABS com recobrimento) a trajetória de rebatimento é por vezes desviada do eixo vertical, podendo levar a resultados imprecisos. Dessa forma, os resultados reforçam a dependência do coeficiente de restituição de

acordo com a técnica de medição empregada e ainda, sugerem que as técnicas utilizadas poderem oferecer limitações tanto na montagem quanto na execução dos experimentos.

5.4. Correlações para o cálculo do coeficiente de restituição

Estudos da literatura propõem modelos teóricos para o cálculo do coeficiente de restituição com base, principalmente, nos parâmetros que o influenciam e nas fases envolvidas nas colisões. Dentre os modelos usualmente empregados, pode-se citar o proposto por Weir e Tallon (2005), em que o coeficiente de restituição é calculado em função de propriedades elásticas, velocidade de compressão de ondas elásticas e a velocidade de impacto relativa, conforme descrito na Equação 23.

$$e = \frac{v_2}{v_1} = 3,1 \left(\frac{Y}{E} \right)^{5/8} \left(\frac{R_1}{R} \right)^{3/8} \left(\frac{c_0}{v_1} \right)^{1/4} \quad (23)$$

A correlação de Weir e Tallon (2005) foi testada para os dados experimentais desse estudo, no entanto os resultados demonstraram um ajuste insatisfatório, o que se deve principalmente a dependência distinta entre o coeficiente de restituição e a velocidade de impacto das partículas utilizadas na correlação e as desse estudo. Dessa forma, com base nos parâmetros considerados no modelo de Weir e Tallon (2005), a correlação foi modificada de modo que a potência correspondente ao termo da velocidade se ajustasse para cada grupo de partículas.

Assim, foram desenvolvidas correlações empíricas para o cálculo do coeficiente de restituição de cada grupo de partículas, conforme apresentado na Tabela 18.

Tabela 18 - Correlações para o cálculo do coeficiente de restituição

Partículas de ABS	$e = \left(\frac{f_{def}}{E} \right)^{5/8} \left(\frac{c_0}{v_1} \right)^{2/13} \quad (24)$
Partículas de borracha	$e = \left(\frac{f_{def}}{E} \right)^{5/8} \left(\frac{c_0}{v_1} \right)^{1/5} \quad (25)$
Partículas de alginato	$e = \left(\frac{f_{def}}{E} \right)^{5/8} \left(\frac{c_0}{v_1} \right)^{2/5} \quad (26)$

Unidades dos parâmetros: f_{def} (Pa); E (Pa); c_0 (m/s); v_1 (m/s).

Nas Equações 24 a 26, f_{def} é uma função empírica baseada na deformação máxima (ε_{max}) das partículas no regime elástico, apresentada na Equação 27.

$$f_{def} = -5,08 \times 10^n \varepsilon_{max} + 3,86 \times 10^n \quad (27)$$

Em que n é determinado em função da ordem de grandeza do módulo de Young da partícula. Esses valores foram ajustados de forma a se obter baixos desvios em relação aos dados experimentais para o coeficiente de restituição.

A expressão para o cálculo de f_{def} foi obtida a partir de um ajuste linear dos pontos do gráfico tensão x deformação, no qual utilizaram-se como dados os valores de tensão e deformação máxima correspondente para cada uma das partículas. Os valores de deformação máxima são apresentados na Tabela 19.

Tabela 19 – Valores de deformação máxima

Partícula	ϵ_{max}
ABS sem recobrimento	0,04%
ABS com 1 camada de recobrimento	0,22%
ABS com 2 camadas de recobrimento	0,15%
Borracha nitrílica	31,26%
Fluorelastômero	23,24%
Alginato Ba ²⁺ (5 mm)	37,00%
Alginato Ca ²⁺ (5 mm)	37,00%
Alginato Co ²⁺ (5 mm)	67,00%

Os resultados de coeficiente de restituição obtidos pelas correlações e os valores do parâmetro n são mostrados nas Tabelas 20, 21 e 22.

Tabela 20 - Coeficientes de restituição experimentais e obtidos por meio de correlação para partículas de ABS

ABS sem recobrimento ($n = 8$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,55	0,945	0,946	-0,08%
1,22	0,871	0,837	3,95%
1,69	0,840	0,796	5,21%
2,15	0,829	0,767	7,51%
ABS com 1 camada de recobrimento ($n = 7$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,69	0,887	0,934	-5,24%
1,31	0,815	0,846	-3,78%
1,59	0,778	0,821	-5,53%
1,85	0,755	0,802	-6,24%
ABS com 2 camadas de recobrimento ($n = 6,5$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,66	0,888	0,879	-4,89%
1,09	0,815	0,814	-5,86%
1,68	0,774	0,762	-4,34%
2,14	0,725	0,735	-7,36%

Tabela 21 - Coeficientes de restituição experimentais e obtidos por meio de correlação para partículas de borracha

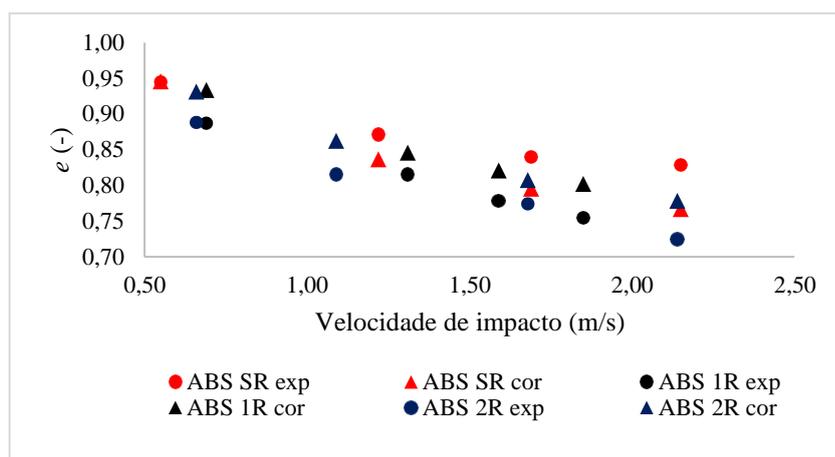
Borracha nitrílica ($n = 5,5$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,67	0,893	0,811	9,20%
1,10	0,797	0,734	6,69%
1,61	0,709	0,680	4,02%
1,90	0,684	0,658	3,76%
Fluorelastômero ($n = 5,5$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,71	0,873	1,042	-19,41%
1,02	0,696	0,961	-38,05%
1,37	0,533	0,906	-69,94%
1,85	0,467	0,853	-82,65%

Tabela 22 - Coeficientes de restituição experimentais e obtidos por meio de correlação para partículas de alginato

Alginato Ba ²⁺ ($n = 5$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,72	0,887	0,926	-4,36%
0,93	0,796	0,836	-4,97%
1,25	0,720	0,742	-3,11%
2,05	0,590	0,609	-3,24%
Alginato Ca ²⁺ ($n = 5$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,71	0,886	0,915	-3,28%
1,00	0,799	0,798	0,13%
1,52	0,679	0,675	0,60%
1,93	0,570	0,613	-7,62%
Alginato Co ²⁺ ($n = 5$)			
Velocidade de impacto (m/s)	e_{exp}	e_{corr}	Desvio
0,67	0,901	0,781	13,31%
1,02	0,701	0,660	5,81%
1,59	0,591	0,553	6,46%
1,74	0,526	0,533	-1,38%

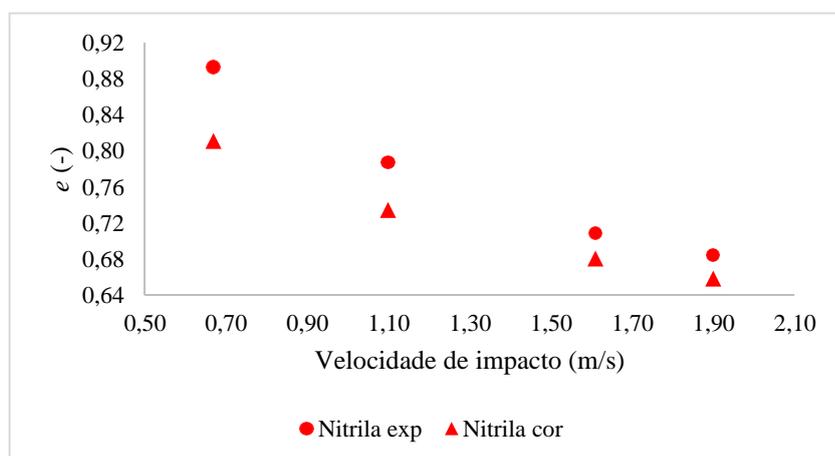
A seguir, os coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações são ilustrados nas Figuras 30, 31 e 32.

Figura 30: Coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações para as partículas de ABS.



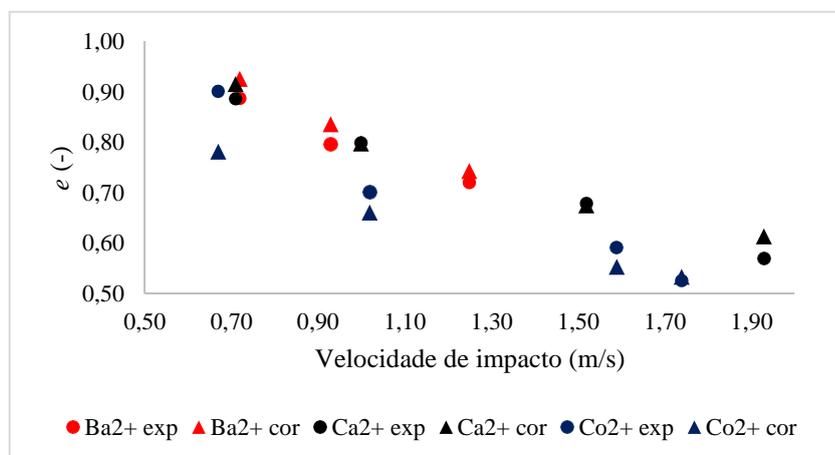
Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 31: Coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações para as partículas de borracha nitrílica.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 32: Coeficientes de restituição experimentais e obtidos pelas correlações para as partículas de alginato.



Fonte: Elaborada pelo autor

Os resultados indicam que as correlações se ajustaram de forma satisfatória aos dados experimentais para a maioria das partículas (com desvios inferiores a 14%). Sendo o melhor ajuste para as partículas de ABS.

No modelo proposto por Weir e Tallon (2005), o coeficiente de restituição varia conforme uma potência constante ($1/4$) da velocidade de impacto. No entanto, no presente estudo, a potência foi ajustada de acordo com a sensibilidade das partículas à velocidade de impacto, de modo a representar com mais precisão o decaimento do coeficiente de restituição com esse parâmetro.

As correlações sugerem uma dependência não linear do coeficiente de restituição com a velocidade de impacto. No entanto, para as partículas de ABS, a menor potência ($2/13$) indica um efeito menos pronunciado em comparação com as demais partículas.

Já para as partículas de borracha, embora sejam consideradas rígidas, a correlação proposta ressalta a influência mais pronunciada da velocidade de impacto. No entanto, a correlação não apresentou um bom ajuste para as partículas de fluorelastômero, o que se comprova pelos elevados desvios, além de resultados fisicamente inconsistentes ($e > 1$). Ainda que as partículas de borracha nitrílica e fluorelastômero tenham características semelhantes, essas comportam-se de modo distinto durante as colisões, portanto, possivelmente variáveis significativas para parte da dissipação de energia não estão sendo consideradas.

Para as partículas de alginato, a correlação demonstra a maior dependência do coeficiente de restituição com a velocidade de impacto. No entanto, essas partículas apresentam maiores desvios em comparação com as demais. Como as partículas de alginato são macias, o efeito da velocidade de impacto na deformação das partículas, a qual não é considerada na correlação.

Embora as correlações tenham proporcionado resultados satisfatórios, o estudo de diferentes parâmetros indica que outras características das partículas, como a rugosidade, exercem influência sobre o coeficiente de restituição. Assim, devem ser consideradas em estudos futuros para a predição do coeficiente de restituição a partir dessas correlações.

5.5. Colisões partícula-partícula

Os resultados obtidos para os coeficientes de restituição nas colisões partícula-partícula são dispostos na Tabela 23.

Tabela 23 - Valores de coeficiente de restituição e velocidade de impacto para colisões partícula-partícula a partir de diferentes ângulos iniciais*

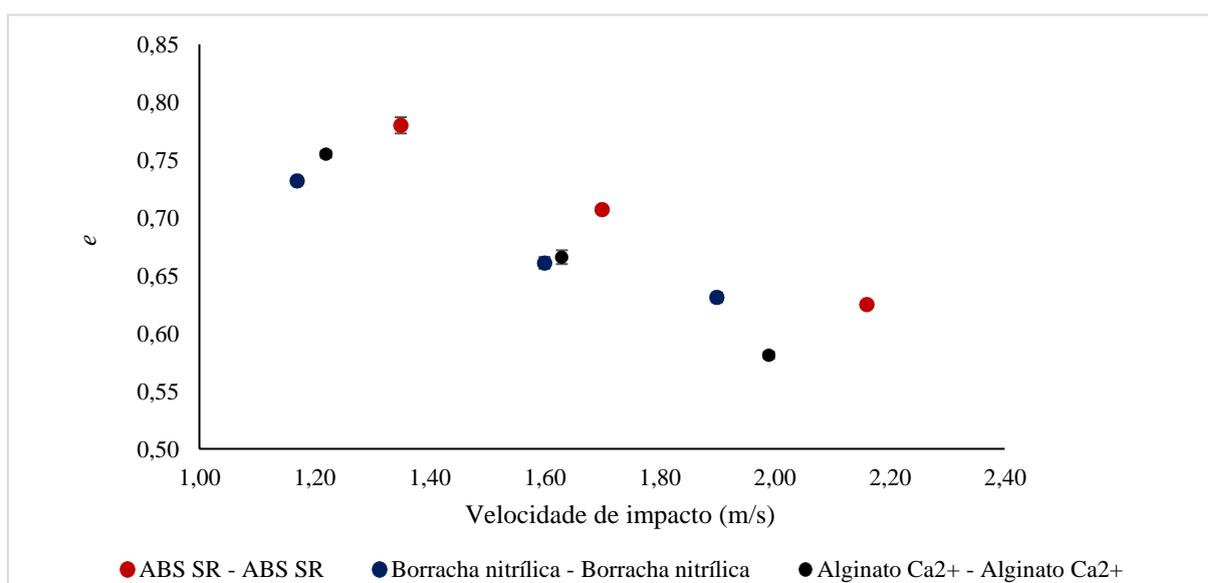
Ângulo (°)	50		67		88	
Partícula	e	V_{impacto} (m/s)	e	V_{impacto} (m/s)	e	V_{impacto} (m/s)
ABS Sem recobrimento	0,780		0,707		0,625	
	\pm 0,007	1,35	\pm 0,003	1,70	\pm 0,003	2,16
Borracha nitrílica	0,732		0,661		0,631	
	\pm 0,003	1,17	\pm 0,005	1,60	\pm 0,004	1,90
Alginato Ca ²⁺ (5,315mm)	0,755		0,666		0,581	
	\pm 0,003	1,22	\pm 0,006	1,63	\pm 0,003	1,99

*Acompanhados de intervalo de confiança de 95%

Diferente do que se observa nas colisões partícula-superfície, os experimentos partícula-partícula demonstraram maior dificuldade nas tentativas de repetir impactos idênticos nos mesmos pontos durante as colisões, devido às irregularidades presentes na superfície, assim notam-se maiores desvios nos resultados.

Os valores de coeficiente de restituição em função da velocidade impacto são mostrados na Figura 33.

Figura 33: Coeficiente de restituição em colisões partícula-partícula em função da velocidade de impacto.



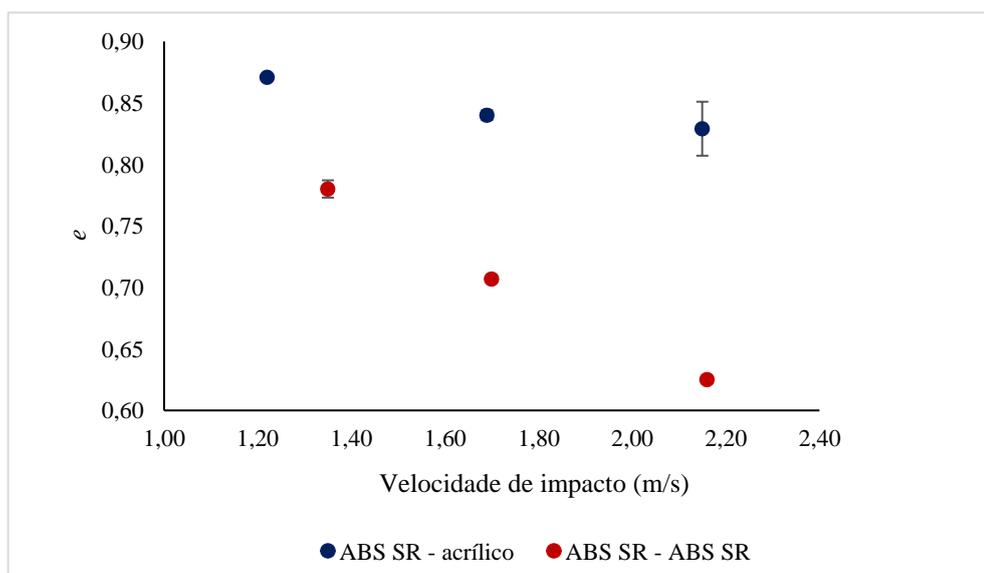
Fonte: Elaborada pelo autor

O coeficiente de restituição nas colisões partícula-partícula diminui à medida que a velocidade de impacto aumenta, como mostrado na Tabela 23 e ilustrado na Figura 33. Isso se

deve ao fato de a força de impacto das partículas no momento da colisão aumentar de acordo com o aumento da velocidade de impacto, como consequência, tem-se uma maior deformação das partículas e, portanto, maior dissipação de energia, como também se observa nos resultados das colisões partícula-superfície.

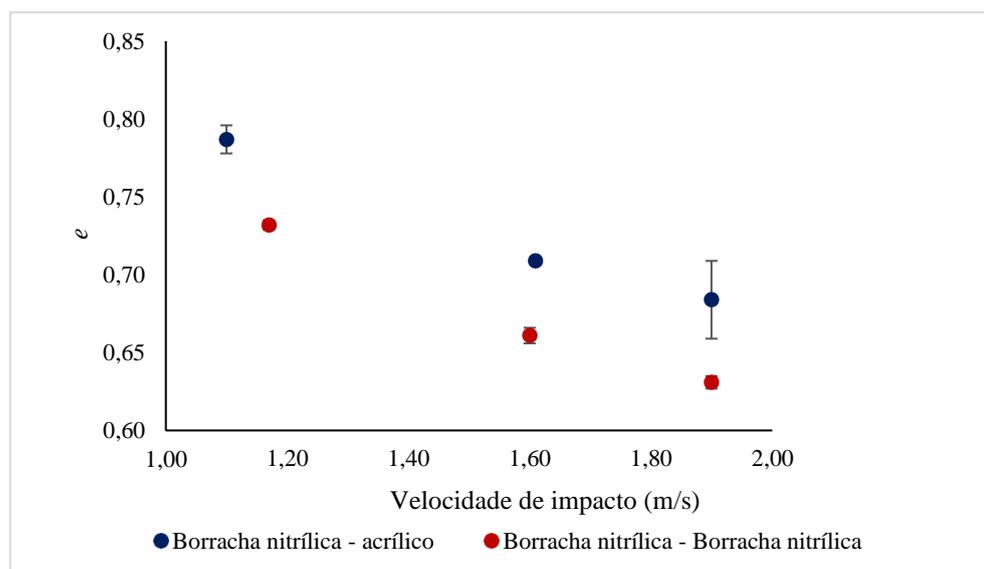
Para efeito de comparação, os resultados das colisões partícula-partícula e partícula-superfície são apresentados em função da velocidade de impacto nas Figuras 34, 35 e 36.

Figura 34: Coeficiente de restituição das partículas de ABS sem recobrimento em colisões partícula-partícula e partícula-superfície em função da velocidade de impacto.



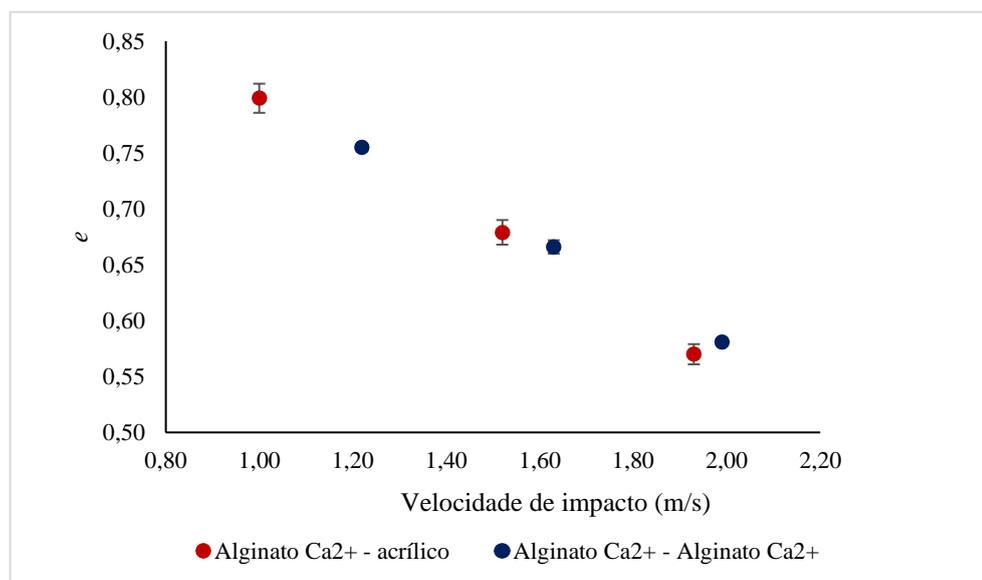
Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 35: Coeficiente de restituição das partículas de borracha nitrílica em colisões partícula-partícula e partícula-superfície em função da velocidade de impacto.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 36: Coeficiente de restituição das partículas de alginato de cálcio em colisões partícula-partícula e partícula-superfície em função da velocidade de impacto.



Fonte: Elaborada pelo autor

Menores coeficientes de restituição são observados para colisões partícula-partícula. Assim, nota-se que os resultados de colisões partícula-superfície não são adequados para representar as interações entre partículas, principalmente para as rígidas.

Para as partículas de alginato de cálcio e borracha nitrílica, tem-se uma redução significativa nos valores de coeficiente de restituição com o aumento da velocidade de impacto para os dois tipos de colisão, evidenciando a influência da velocidade de impacto em ambos os casos. Para as partículas de alginato, são observados valores mais próximos, uma vez que essas partículas dissipam energia predominantemente por deformação permanente, independente da superfície de colisão.

No entanto, para as partículas de ABS, os resultados sugerem que o efeito da velocidade de impacto é mais presente em colisões partícula-partícula. Nessas colisões, as irregularidades na superfície afetam consideravelmente os resultados para as ABS, que não mais colidem contra uma superfície lisa, e são responsáveis por uma maior perda de energia.

5.6. Efeito de forças hidrodinâmicas

5.6.1. Colisões partícula-superfície em água

As partículas de aço utilizadas nos experimentos em água foram caracterizadas previamente quanto ao diâmetro e densidade. Os dados são apresentados na Tabela 24.

Tabela 24 - Caracterização das esferas de aço

Diâmetro (mm)	Densidade (g/cm³)
6,963 ± 0,025	9,551 ± 0,733

Conforme exposto na Tabela 24, a densidade das partículas mostrou-se muito superior à da água, o que garante que a restituição ocorra, tornando-as ideais para os testes de colisão em líquido.

Para efeito de comparação, além dos testes em água, foram feitos experimentos em ar. Os resultados de coeficiente de restituição efetivo e coeficiente de restituição para essas partículas são apresentados nas Tabelas 25 e 26.

Tabela 25 - Coeficiente de restituição efetivo das esferas de aço em água*

Ângulo (°)	Nível de água (cm)	Velocidade de impacto (m/s)	<i>e</i> efetivo
50	15,4 cm	0,43±0,02	0,649±0,013
58	18,5 cm	0,47±0,02	0,641±0,012
67	21,8 cm	0,50±0,03	0,639±0,005

*Acompanhados de intervalo de confiança de 95%

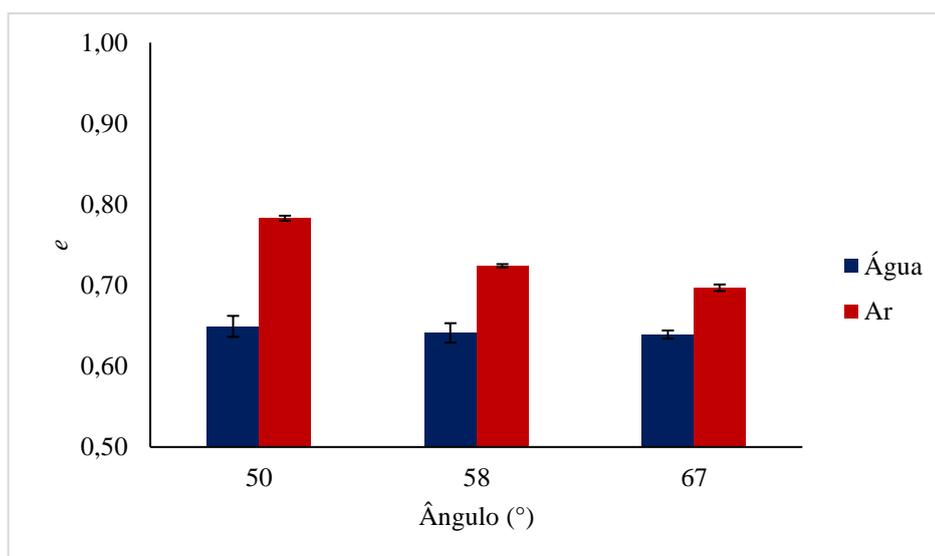
Tabela 26 - Coeficiente de restituição a seco das esferas de aço*

Ângulo (°)	Velocidade de impacto (m/s)	<i>e</i>
50	1,23	0,783±0,003
58	1,35	0,724±0,002
67	1,48	0,697±0,004

*Acompanhados de intervalo de confiança de 95%

A partir das Tabelas 25 e 26, percebe-se que o coeficiente de restituição efetivo diminui quando comparado com o coeficiente de restituição em ar. Além disso, a velocidade de impacto decai consideravelmente quando a esfera está imersa em líquido. Os coeficientes de restituição da partícula em ar e água são comparados na Figura 37.

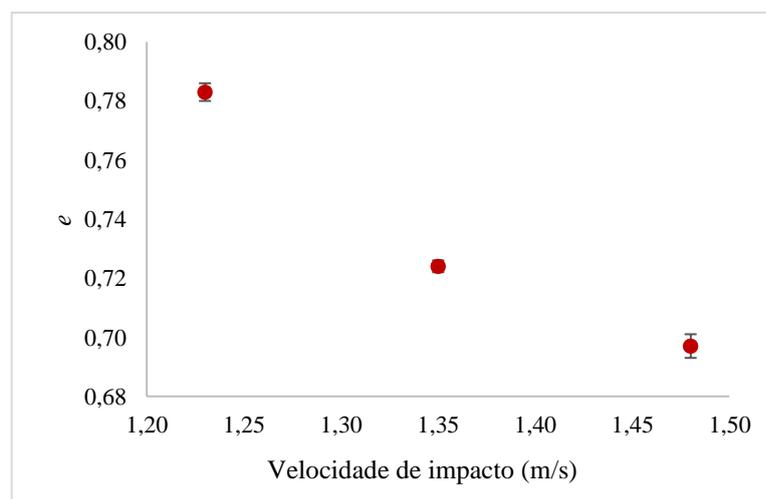
Figura 37: Coeficiente de restituição a seco x efetivo em função do ângulo de soltura.



Fonte: Elaborada pelo autor

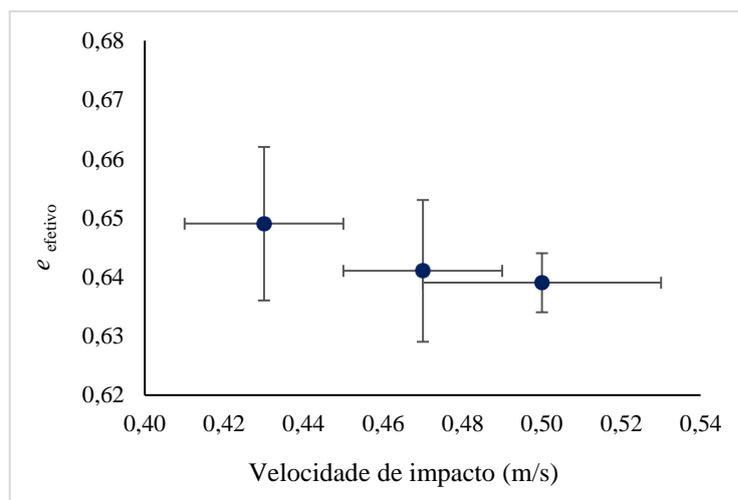
Na Figura 37, enquanto o coeficiente de restituição em ar diminui para maiores ângulos de soltura, evidencia-se que o coeficiente de restituição efetivo parece constante quando a esfera está imersa em líquido. O comportamento das partículas em ar e em água é melhor ilustrado nas Figuras 38 e 39, em que os coeficientes de restituição a seco e efetivo são apresentados em função da velocidade de impacto.

Figura 38: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 39: Coeficiente de restituição efetivo em função da velocidade de impacto.



Fonte: Elaborada pelo autor

Como já discutido em seções anteriores, a Figura 36 evidencia o decaimento do coeficiente de restituição em ar em função da velocidade de impacto. Já para os experimentos em água, a velocidade de impacto praticamente não variou, o que indica que a esfera atinge sua velocidade terminal nos primeiros centímetros de trajetória.

O coeficiente efetivo de restituição também é significativamente menor que os valores obtidos para a esfera no ar. Isso se deve à atuação de forças dissipativas devido à presença do líquido de maior viscosidade. Essas atuam como forças de resistência ao movimento da partícula e são representadas principalmente pelas forças de arraste e lubrificação.

As forças de arraste e lubrificação no momento do impacto foram calculadas segundo as Equações 8 e 9. Para o cálculo da força de arraste, foi utilizado um valor genérico para o coeficiente de arraste de uma esfera (igual a 0,47). Enquanto para a força de lubrificação, foi utilizado uma distância h de 10^{-6} m, de mesma ordem de grandeza da rugosidade média das partículas. Os dados obtidos são apresentados na Tabela 27.

Tabela 27 – Dados de forças de arraste e lubrificação

Água			Ar		
Velocidade de impacto (m/s)	F_L (N)	F_D (N)	Velocidade de impacto (m/s)	F_L (N)	F_D (N)
0,43	$9,84 \times 10^{-2}$	$1,65 \times 10^{-3}$	1,23	$5,11 \times 10^{-3}$	$1,60 \times 10^{-5}$
0,47	$1,08 \times 10^{-1}$	$7,88 \times 10^{-3}$	1,35	$5,61 \times 10^{-3}$	$1,93 \times 10^{-5}$
0,50	$1,14 \times 10^{-1}$	$2,23 \times 10^{-3}$	1,48	$6,15 \times 10^{-3}$	$2,32 \times 10^{-5}$

Da Tabela 27 infere-se que a magnitude das forças viscosas é muito mais pronunciada em água. No caso da força de arraste, essa faz resistência ao movimento da partícula através do fluido, portanto, como a água possui uma viscosidade muito superior à do ar, a resistência que o fluido oferece ao escoamento é muito mais significativa.

Já a força de lubrificação aumenta rapidamente a medida em que a partícula se aproxima da superfície, atingindo um valor máximo no momento do impacto. Essa força gera um efeito de amortecimento durante os estágios de aproximação e afastamento das partículas durante a colisão, assim, devido à dissipação de energia causada pela força de lubrificação, as velocidades imediatamente antes e após o impacto decaem consideravelmente quando comparadas com as obtidas nas colisões em ar (ZHANG *et al.*, 2005).

5.7. Análise numérica

5.7.1. Teste de independência do método

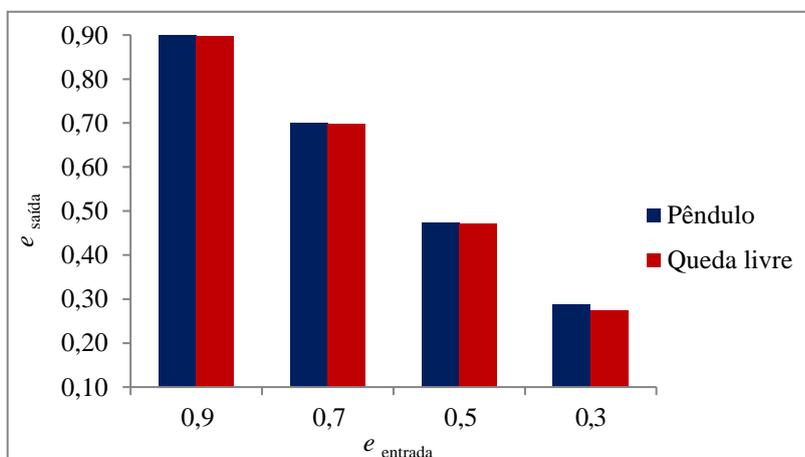
Os dados obtidos para o teste de independência do método para medição do coeficiente de restituição são apresentados na Tabela 28. Na Figura 40, os dados de saída do coeficiente de restituição são ilustrados em função dos diferentes valores de entrada.

Tabela 28 - Dados de coeficiente de restituição obtidos para as simulações do método do pêndulo e de queda livre

e_{entrada}	Pêndulo		Queda livre		Erro relativo
	$e_{\text{saída}}$	$e_{\text{saída}}$	$e_{\text{saída}}$	$e_{\text{saída}}$	
0,9	0,900	0,900	0,898	0,898	0,2%
0,7	0,701	0,701	0,698	0,698	0,4%
0,5	0,474	0,474	0,469	0,469	1,0%
0,3	0,288	0,288	0,273	0,273	5,1%

Os resultados demonstram que a metodologia reproduzida não promoveu variações significativas nos valores de coeficiente de restituição, conforme pode ser visto na Figura 40.

Figura 40: Comparação entre os métodos do pêndulo e de queda livre.



Fonte: Elaborada pelo autor

Nos estudos experimentais, a maior diferença entre os métodos de medição do coeficiente de restituição deve-se principalmente a dificuldade de garantir uma condição adequada de medição, que seja independente do método e tenha efeito somente do material, o que resulta em desvios na trajetória durante o impacto, principalmente para partículas irregulares (HLOSTA *et al.*, 2018). No entanto, esses desvios não ocorrem nas simulações, fazendo com que os dois métodos testados forneçam resultados equivalentes.

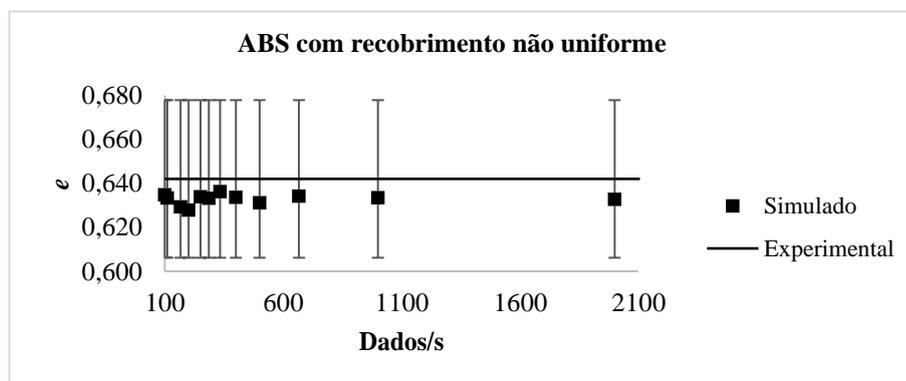
Portanto, apenas a metodologia experimental de queda livre foi utilizada para as simulações subsequentes. Embora o domínio correspondente a ela tenha um maior número de células, o tempo computacional para as duas malhas foi muito semelhante e a malha retangular é mais simples para as etapas de pré e pós processamento, favorecendo a obtenção dos dados nas demais etapas.

5.7.2. Teste de independência da frequência de coleta de dados

Os testes de independência da frequência de coleta de dados foram realizados a fim de garantir que o número de imagens obtidas na simulação não causasse alterações significativas nos resultados encontrados e com isso, garantiu-se a independência dos resultados e a aplicação das mesmas condições de imagens por passo de tempo para os dois grupos de partículas.

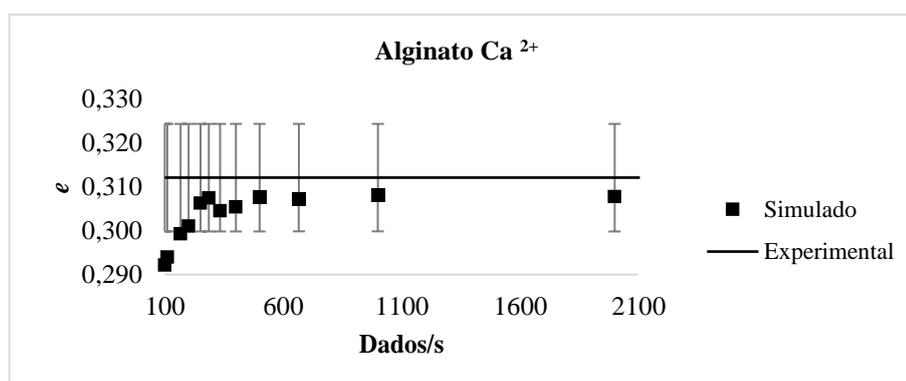
Os dados obtidos para o teste de independência do número de imagens por tempo para as esferas de ABS com recobrimento não uniforme e de Alginato Ca^{2+} são apresentados nas Figuras 41 e 42.

Figura 41: Coeficiente de restituição em função do número de dados/tempo para as partículas de ABS com recobrimento não uniforme.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 42: Coeficiente de restituição em função do número de dados/tempo para as partículas de Alginato Ca^{2+} .



Fonte: Elaborada pelo autor

Os coeficientes de restituição variaram significativamente em relação ao experimental na região de maior oscilação dos resultados, para um menor número de dados/segundo. A partir da relação 400 dados/segundo, observa-se uma menor discrepância entre as simulações, além de maior proximidade entre os valores simulados e experimentais. Assim, analisando os dois grupos de partículas, a razão de 667 dados/segundo foi estabelecida de modo a garantir a independência dos resultados nas simulações subsequentes.

5.7.3. Calibração do parâmetro de entrada

Devido à importância do coeficiente de restituição como parâmetro de entrada em simulações CFD-DEM, a calibração do parâmetro foi realizada com o objetivo de ajustar o dado de entrada para que os resultados simulados tenham comportamentos semelhantes aos reais ou experimentais e assim, possa-se garantir a confiabilidade dos resultados das simulações.

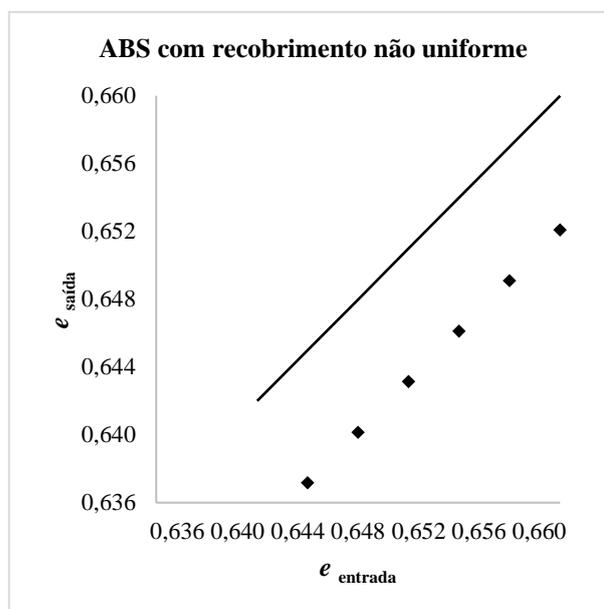
Os resultados da calibração do parâmetro de entrada são apresentados na Tabela 29.

Tabela 29 - Valores de coeficiente de restituição de entrada e saída para as ABS com recobrimento não uniforme e partículas de Alginato Ca^{2+}

ABS com recobrimento não uniforme			Alginato Ca^{2+}		
e_{entrada}	$e_{\text{saída}}$	Erro (%)	e_{entrada}	$e_{\text{saída}}$	Erro (%)
0,642	0,634	1,22	0,312	0,307	1,56
0,645	0,637	1,21	0,315	0,310	1,61
0,648	0,640	1,21	0,318	0,313	1,58
0,651	0,643	1,21	0,321	0,317	1,25
0,654	0,646	1,21	0,324	0,320	1,36
0,657	0,649	1,20	0,327	0,322	1,44
0,660	0,652	1,20	0,330	0,325	1,50

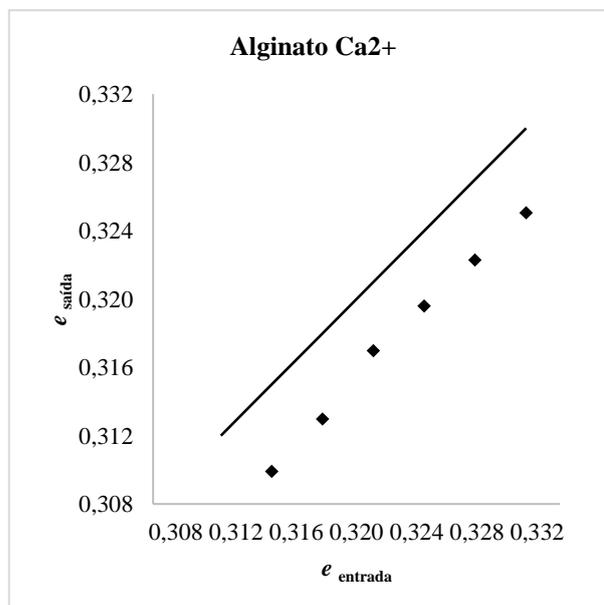
Os valores encontrados na calibração apresentaram boa concordância com os dados utilizados no modelo de contato (e_{entrada}), com variações em torno de 1,21% e 1,47% para as ABS com recobrimento não uniforme e as partículas de Alginato Ca^{2+} , respectivamente. Esse comportamento dos coeficientes de saída em função de diferentes dados de entrada é ilustrado nas Figuras 43 e 44.

Figura 43: Comportamento dos dados de entrada e saída de coeficiente de restituição para as partículas de ABS com recobrimento não uniforme.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 44: Comportamento dos dados de entrada e saída de coeficiente de restituição para as partículas de Alginato Ca^{2+} .



Fonte: Elaborada pelo autor

Nas Figuras 43 e 44, a reta representa a situação ideal em que os dados de entrada e saída são iguais, enquanto os pontos correspondem aos dados de saída obtidos nas simulações. Observa-se, nos dois grupos de partículas, que os dados de resposta foram inferiores aos inseridos no modelo em todas as simulações. Esse resultado indica a necessidade de um ajuste nos dados de entrada da simulação, que devem ser superiores aos experimentais, a fim de obter respostas semelhantes às experimentais. Além disso, indicam a possibilidade de o modelo de

contato implementado no software não conseguir prever completamente todos os parâmetros que interferem nas colisões partícula-superfície e, por isso, haver divergência entre os resultados simulados e experimentais.

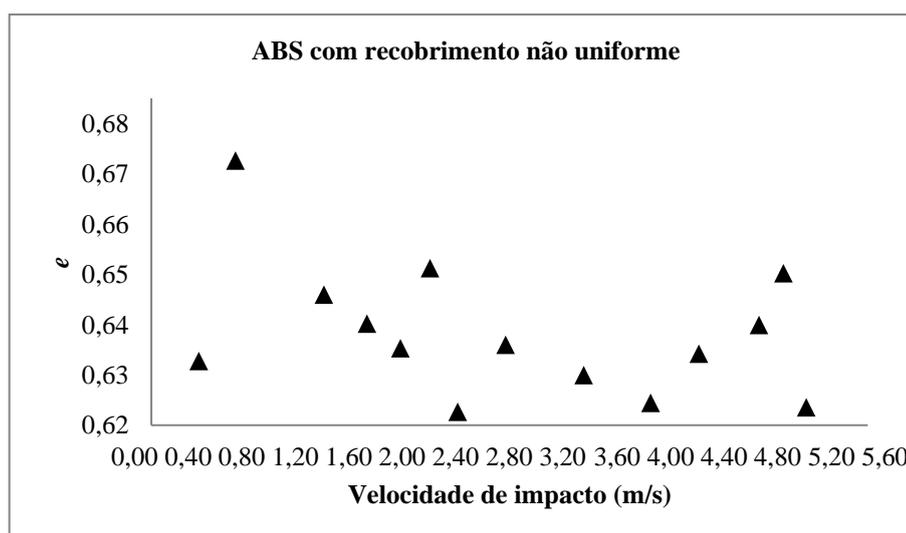
5.7.4. Variação da velocidade impacto

Os dados do coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto são apresentados na Tabela 30 e ilustrados nas Figuras 45 e 46.

Tabela 30 - Valores de coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto

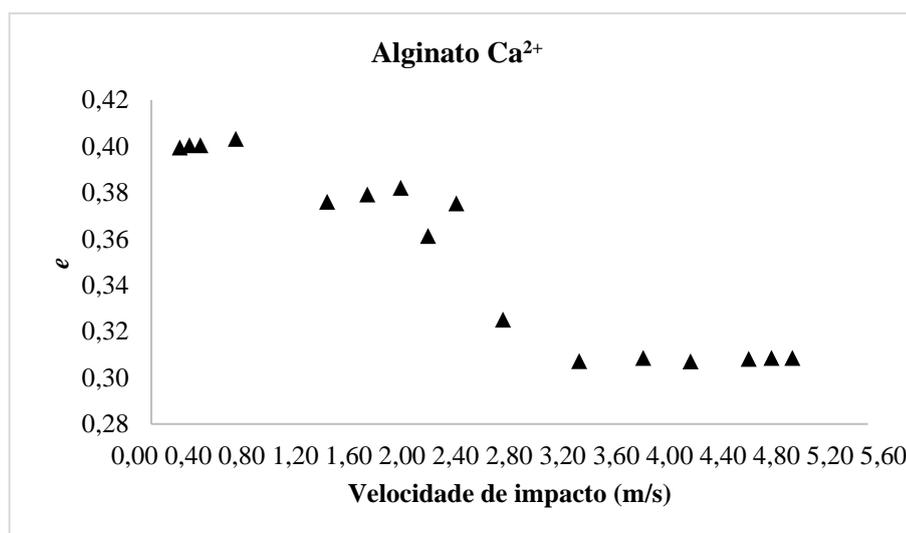
h queda (m)	ABS com recobrimento não uniforme		Alginato Ca ²⁺	
	v impacto (m/s)	e simulado	v impacto (m/s)	e simulado
0,010	0,371	0,633	0,384	0,401
0,025	0,656	0,673	0,660	0,403
0,100	1,348	0,646	1,374	0,376
0,150	1,685	0,646	1,686	0,379
0,200	1,945	0,635	1,948	0,382
0,250	2,177	0,651	2,162	0,361
0,300	2,394	0,623	2,383	0,375
0,400	2,767	0,636	2,748	0,325
0,600	3,379	0,630	3,343	0,307
0,800	3,901	0,624	3,843	0,309
0,970	4,278	0,634	4,214	0,307
1,200	4,748	0,640	4,668	0,308
1,300	4,940	0,650	4,846	0,309
1,400	5,117	0,624	5,011	0,309

Figura 45: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto para as partículas de ABS com recobrimento não uniforme.



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 46: Coeficiente de restituição em função da velocidade de impacto para as partículas de Alginato Ca^{2+} .



Fonte: Elaborada pelo autor

Os resultados confirmam a dependência do coeficiente de restituição com a velocidade de impacto no momento da colisão e indicam que as simulações conseguiram prever de forma satisfatória o significado físico das colisões. Além disso, demonstram o efeito da elasticidade do material sobre os valores de e .

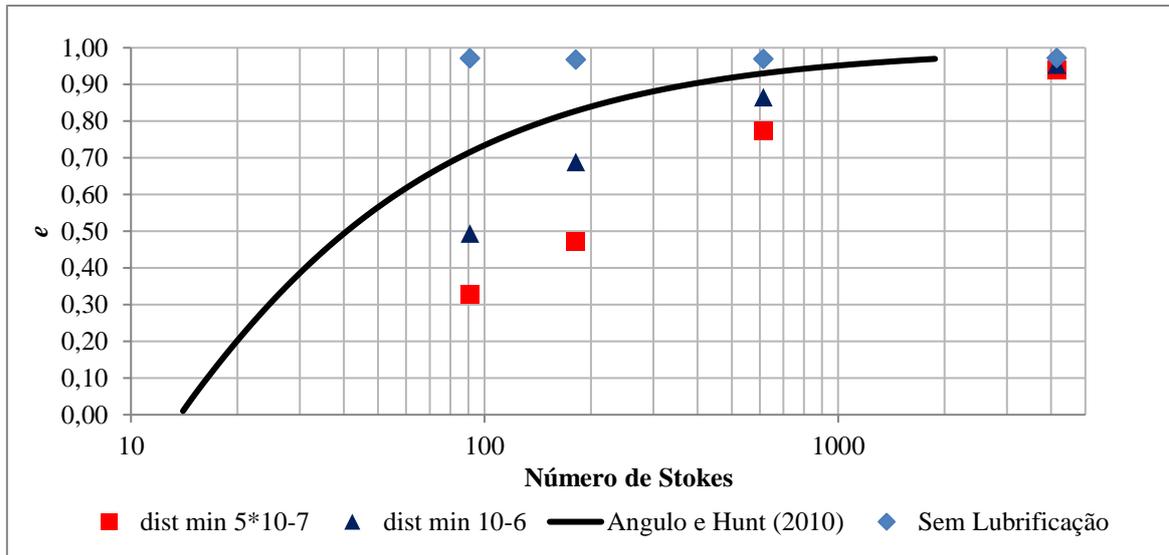
As partículas rígidas, com maior módulo de Young e representadas pelas ABS com recobrimento não uniforme, apresentaram elevados coeficientes, enquanto valores significativamente menores foram obtidos para as de alginato Ca^{2+} . Para as ABS, nota-se um perfil oscilatório nos resultados e pequena variação do coeficiente de restituição devido ao aumento da velocidade de colisão. Enquanto para as partículas alginato Ca^{2+} , os coeficientes de restituição variam significativamente com a velocidade de impacto, confirmando a maior deformação das partículas macias para maiores velocidades de colisão, discutida nos resultados experimentais.

Embora as simulações descrevam de modo satisfatório a influência da velocidade sobre o coeficiente, não se pode afirmar que os resultados quantitativos condizem com a realidade das colisões, uma vez que os dados de coeficiente de restituição inseridos no modelo foram os mesmos para simulações com diferentes alturas de queda e, conseqüentemente, velocidades de colisão distintas. Sendo assim, para uma análise quantitativa dos resultados faz-se necessário que os dados de coeficiente de restituição inseridos sejam variados de acordo com a sensibilidade à velocidade de impacto.

5.7.5. Efeito da força de lubrificação

O efeito das forças viscosas resultantes da presença de líquidos viscosos foi avaliado por meio de simulações considerando ou não a presença da força de lubrificação. Os resultados obtidos são ilustrados na Figura 47.

Figura 47: Coeficiente de restituição efetivo em função do número de Stokes



Fonte: Elaborada pelo autor

Os resultados das simulações são comparados com a curva ajustada (Equação 29) a partir de dados experimentais por Ângulo e Hunt (2010), em que o coeficiente de restituição é função somente do número de Stokes de impacto, independente das características da partícula.

$$e = 1 - \frac{8.65}{St^{0.75}} \quad (29)$$

Os pontos sem a implementação do modelo de força de lubrificação não apresentaram variação significativa em relação ao coeficiente de restituição inserido no modelo, igual a 0,97, o que indica que a viscosidade do fluido não promove dissipação de energia nas colisões em modelos que não consideram a força de lubrificação.

Os dados simulados distanciaram-se dos dados experimentais, uma vez que nas simulações foi utilizada uma altura arbitrária de 0,15 m, que não corresponde a dos experimentos de Joseph (2003). No entanto, os pontos com o modelo implementado para o cálculo da força de lubrificação apresentaram comportamento muito semelhante a curva experimental, indicando que o modelo foi adequado para prever a variação do coeficiente de restituição efetivo em colisões com fluidos de maior viscosidade. E ainda, os menores valores de coeficiente de

restituição foram obtidos para os números de Stokes mais baixos, que correspondem aos líquidos mais viscosos e, conseqüentemente, à maior ação das forças dissipativas.

Além disso, a distância mínima de contato demonstrou influência significativa sobre a resposta das simulações e, portanto, para aplicações mais rigorosas do modelo de força de lubrificação faz-se necessário calibrar o parâmetro e estabelecer um critério de escolha baseado, por exemplo, na rugosidade superficial da partícula.

O efeito desse parâmetro faz-se mais significativo para menores valores de número de Stokes, o que pode ser decorrente do maior tempo de contato em colisões em fluidos mais viscosos, com menor velocidade de impacto. Assim, o parâmetro atuará por mais tempo sobre o cálculo da força de lubrificação, enquanto o inverso acontece para velocidades maiores (fluidos menos viscosos).

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Os resultados obtidos nas etapas experimentais possibilitaram as seguintes conclusões:

As partículas estudadas apresentaram variações significativas entre suas propriedades físicas, superficiais e elásticas. O revestimento das esferas de ABS promoveu um aumento significativo na rugosidade média desse grupo de partículas, devido ao aumento das imperfeições na superfície delas. Enquanto para as partículas de alginato, observou-se a influência das propriedades em função do tipo de cátion e do diâmetro interno da mangueira utilizados na etapa de síntese. Os resultados indicaram o maior módulo de Young para as partículas de alginato de Bário, evidenciando a maior afinidade do alginato por íons Ba^{2+} .

Os valores de coeficiente de restituição possuem grande diferença a partir da comparação entre os métodos da queda livre e o do pêndulo, demonstrando a influência do equipamento utilizado nas medidas desse parâmetro. E ainda, podem-se observar as imprecisões no uso do método de queda livre para testes com partículas de menor circularidade e superfície irregular, o que se observou pela diferença pouco significativa nos resultados obtidos para as esferas de ABS revestidas e soltas a partir de diferentes alturas de queda.

Os resultados obtidos para colisões partícula-superfície no equipamento tipo pêndulo sofreram influência das propriedades das partículas. As partículas macias (de alginato), com menor módulo de Young, apresentaram menores valores de coeficiente de restituição. E ainda, valores baixos de coeficiente de restituição foram observados para partículas com elevada rugosidade (esferas de fluorelastômero), indicando maior contato partícula-superfície, além da influência de parâmetros elásticos não considerados nesse estudo.

Os valores de coeficiente diminuíram com o aumento do ângulo inicial, evidenciando o aumento da velocidade de impacto das partículas no momento da colisão e, conseqüentemente, maior dissipação de energia. As partículas com maiores velocidades de compressão de ondas elásticas correspondem as de maior coeficiente de restituição e têm um efeito menos pronunciado da velocidade de impacto.

Quanto às colisões partícula-partícula, foram observados menores valores de coeficiente de restituição em comparação com colisões partícula-superfície, evidenciando que as irregularidades na superfície revestida por partículas afetaram consideravelmente os resultados.

As correlações propostas para as partículas ajustaram-se de modo satisfatório aos dados experimentais. Além disso, a potência correspondente a cada grupo de partícula evidencia que cada um deles varia de forma distinta com a velocidade de impacto, sendo um efeito menos pronunciado para as partículas de ABS. No entanto, embora as correlações descrevam o comportamento do coeficiente de restituição, deve-se considerar outros parâmetros para uma predição mais precisa desse parâmetro.

Já no estudo de colisões em fluidos viscosos, os resultados indicaram uma diminuição significativa dos valores do coeficiente de restituição efetivo em comparação com os dados a seco, o que comprova a atuação de forças viscosas dissipativas, responsáveis por uma maior dissipação de energia. Além disso, foram observadas velocidades de impacto praticamente constantes e inferiores às de colisões em ar, indicando que a esfera atingiu a velocidade terminal e o impacto foi amortecido pela atuação da força de lubrificação, resultando em menores velocidades.

Quanto à análise numérica, os resultados indicam:

Simulações com diferentes metodologias para o cálculo do coeficiente de restituição não promoveram variações significativas entre os dados de saída. Os resultados indicam que, diferente do que ocorre nos estudos experimentais, não ocorrem desvios durante a trajetória das partículas e, assim, os dois métodos mostram-se adequados nas simulações.

Os valores de coeficiente de restituição obtidos na etapa de calibração do parâmetro de entrada demonstraram-se próximos aos experimentais, com desvios inferiores a 2% para os dois grupos de partículas estudadas. Essa variação indica a necessidade de dados de entrada superiores aos experimentais e a possibilidade de o modelo não conseguir prever completamente todos os parâmetros que interferem nas colisões partícula-superfície.

As simulações conseguiram prever de forma satisfatória o comportamento do coeficiente de restituição, indicando a maior influência da velocidade de impacto sobre as esferas de Alginato.

Por fim, as simulações em fluido indicaram que modelos com a ausência da força de lubrificação praticamente não apresentam variação no coeficiente de restituição efetivo, o que

indica que a dissipação de energia decorrente da atuação de forças viscosas é negligenciada. Por outro lado, os dados obtidos após a implementação do modelo demonstram que o modelo foi adequado para prever a variação do coeficiente de restituição efetivo em colisões com fluidos viscosos, obtendo-se menores valores de coeficiente para maiores viscosidades.

Referências bibliográficas

- AGUILAR-CORONA, C.; ZENIT, R.; ZASBERNAT, O. Collisions in a liquid fluidized bed. *International Journal of Multiphase Flow*, 37:695-705, 2011.
- ALBUQUERQUE, M. V. Modelagem e Análise Dinâmica de um Absorvedor de Vibrações por Efeito de Impacto. Dissertação de mestrado em Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas – Unicamp. Campinas/SP, 2016.
- ARYAEI, A; HASHEMNIA, K; JAFARPUR, K. Experimental and numerical study of ball size effect on restitution coefficient in low velocity impacts. *International Journal of Impact Engineering*, 37:1037-1044, 2010.
- BHARADWAJ, R.; SMITH, C.; HANCOCK, B. C. The coefficient of restitution of some pharmaceutical tablets/compacts. *Internacional Journal of Pharmaceutics*. 402:50-56, 2010.
- BURGHATE, S.; INGOLE, N. W. Fluidized Bed Biofilm Reactor – A Novel Wastewater Treatment Reactor. *International Journal of Research in Environmental Science and Technology*, 3(4): 145-155, 2013.
- CHAN, E.; LIM, T.; VOO, W.; POGAKU, R.; TEY, B. T.; ZHANG, Z. Effect of formulation of alginate beads on their mechanical behavior and stiffness. *Particuology*. 9:228-234, 2011.
- CORNELISSEN, J. T.; TAGHIPOUR, F.; ESCUDIÉ, R.; ELLIS, N.; GRACE, J. R. CFD modeling of a liquid-solid fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 62:6334-6348, 2007.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*. 1:47-65, 1979.
- DAVIS, R. H.; SERAYSSOL, J.; HINCH, E. J. The elastohydrodynamic collision of two spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 163:479-497, 1986.
- DONG, M.; MEI, Y.; LI, X.; SHANG, Y.; LI, S. Experimental measurement of the normal coefficient of restitution of micro-particles impacting on plate surface in different humidity. *Powder Technology*, 335: 250-257, 2018.
- DU, W.; BAO, X.; XU, J.; WEI, W. Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spouted bed: Influence of frictional stress, maximum packing limit and coefficient of restitution of particles. *Chemical Engineering Science*. 61:4558-4570, 2006.
- EBNESAJJAD, S. *Fluoroplastics: Non-Melt Processible Fluoropolymers–The Definitive User's Guide and Data Book*. Second Edition. Elsevier, 2015. ISBN 978-1-4557-3199-2
- EPSTEIN, N.; Applications of Liquid-Solid Fluidization. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*. 1: 1-11, 2003.

- GHANBARZADEH, A.; HASSANPOUR, A.; NEVILLE, A. A numerical model for calculation of the restitution coefficient of elastic-perfectly plastic and adhesive bodies with rough surfaces. *Powder Technology*. 345: 203-212, 2019.
- GONDRET, P.; LANCE, M.; PETIT, L. Bouncing motion of spherical particles in fluids. *Physics of Fluids*.14(2): 643-652, 2002.
- HARPER, B. A.; BARBUT, S.; LIM, L.; MARCONE, M. Effect of various gelling cations on the physical properties of “wet” alginate films. *Food Engineering & Physical Properties*. 79:562-567, 2014.
- HASTIE, D. B. Experimental measurement of the coefficient of restitution of irregular shaped particles impacting on horizontal surfaces. *Chemical Engineering Science*. 101:828-836, 2013.
- HERTZ, H. On the contact of elastic solids. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*. 92: 156-171, 1882.
- HLOSTA, J.; ZUROVEC, D.; ROZBROJ, J.; RAMÍREZ-GÓMEZ, A.; NECAS, J.; ZEGZULKA, J. Experimental determination of particle-particle restitution coefficient via double pendulum method. *Chemical Engineering Research and Design*. 135:22-233, 2018.
- IGATHINATHANE, C.; MELIN, S.; SOKHANSANJ, S.; BI, X.; LIM, C.; PORDESIMO, L.; COLUMBUS, E. Machine vision based particle size and size distribution determination of airborne dust particles of wood and bark pellets. *Powder Technology*, 196(2):202–212, 2009.
- JACKSON, R.L.; GREEN, I.; MARGHITU, D. B. Predicting the coefficient of restitution of impacting elastic-perfectly plastic spheres
- JONES, D. R. H.; ASHBY, M. F. *Engineering Materials 1*. Fifth edition. Butterworth Heinemann, 2018. ISBN 9780081020524.
- JOSEPH, G; ZENIT, R.; HUNT, M; ROSENWINKEL, A. Particle–wall collisions in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 433:329–346, 2001.
- KOERICH, D. M.; LOPES, G. C.; ROSA, L. M. Investigation of phases interactions and modification of drag models for liquid-solid fluidized bed tapered bioreactors. *Powder Technology*. 339: 90-101, 2018.
- LEROY, B. Collision between two balls accompanied by deformation: A qualitative approach to Hertz's theory. *American Journal of Physics*, 53 (4): 346-349, 1985.
- LI, T., ZHANG, J., GE, W. Simple measurement of restitution coefficient of irregular particles. *China Particuology*. 2:274–275,2004.
- LIU, G.; YU, F.; LU, H.; WANG, S.; LIAO, P.; HAO, Z. CFD-DEM simulation of liquid-solid fluidized bed with dynamic restitution coefficient. *Powder Technology*, 304:186-197, 2016.

- LIU, G.; YU, F.; WANG, S.; LIAO, P.; ZHANG, W.; HAN, B.; LU, H. Investigation of interstitial fluid effect on the hydrodynamics of granular in liquid-solid fluidized beds with CFD-DEM. *Powder Technology*, 322:353-368, 2017.
- LOPES, G. C.; BI, X.; EPSTEIN, N.; BALDWIN, S.; GRACE, J. R. Hydrodynamic characteristics of particles with different roughness and deformability in a liquid fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, 185:50-63, 2018.
- MA, J.; LIU, D.; CHEN, X. Experimental study of oblique impact between dry spheres and liquid layers. *Physical Review Research*, 88:033018, 2013.
- MA, J.; LIU, D.; CHEN, X. Normal and oblique impacts between smooth spheres and liquid layers: Liquid bridge and restitution coefficient. *Powder Technology*, 301: 747-759, 2016.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. Segunda edição. [S.l.]: LTC, 2010. ISBN 978-85-216-1396-1.
- MINDLIN, R. D. Compliance of elastic bodies in contact. *Journal of Applied Mechanics*. 16: 259-268, 1949.
- MUELLER, P.; BOETTCHER, R.; RUSSELL, A.; TRUEE, M.; TOMAS, J. A novel approach to evaluate the elastic impact of spheres on thin plates. *Chemical Engineering Science*, 138: 689-697, 2015.
- OUWERX, C; VELINGS, N; MESTDAGH, M.; AXELOS, M. Physico-chemical properties and rheology of alginate gel beads formed with various divalent cations. *Polymer Gels and Networks*, 6(5):393-408, 1998.
- PUGUAN, J. M. C.; YU, X.; KIM, H. Characterization of structure, physico-chemical properties and diffusion behavior Ca-Alginate gel beads prepared by different gelation methods. *Journal of Colloid and Interface Science*, 432:109-116, 2014.
- RUIZ-ANGULO, A.; HUNT, M. Measurements of the coefficient of restitution for particle collisions with ductile surfaces in a liquid. *Granular matter*, 12:185-191, 2010.
- SEIFRIED, R.; MINAMOTO, H.; EBERHARD, P. Viscoplastic Effects Occurring in Impacts of Aluminum and Steel Bodies and Their Influence on the Coefficient of Restitution. *Journal of Applied Mechanics*, 77 (4): 041008, 2010.
- WANG, L.; BAOXIN, W.; WU, Z.; LI, R.; FENG, X. Experimental determination of the coefficient of restitution of particle-particle collision for frozen maize grains. *Powder Technology*, 338: 263-273, 2018.
- WANG, L.; ZHOU, W.; DING, Z.; LI, X.; ZHANG, C. Experimental determination of parameter effects on the coefficient of restitution of differently shaped maize in three-dimensions. *Powder Technology*. 284 (10): 187-194, 2015.
- WANG, S.; GUO, S.; GAO, J.; LAN, X.; DONG, Q.; LI, X. Simulation of flow behavior of liquid and particles in a liquid-solid fluidized bed. *Powder Technology*, 224: 365-373, 2012.

WEIR, G.; TALLON, S. The coefficient of restitution for normal incident, low velocity particle impacts. *Chemical Engineering Science*, 60:3637-3647, 2005.

ZENER, C. The intrinsic inelasticity of large plates. *Physical Review*, 59:669–673, 1941.

ZHANG, W.; NODA, R.; HORIO, M. Evaluation of lubrication force on colliding particles for DEM simulation of fluidized beds. *Powder Technology*, 158:92-101, 2005.

Produção científica referente a esta dissertação

Resumos apresentados em congresso

Melo, K. R. B.; Lopes, G. C. Análise numérica e experimental da colisão de partículas em diferentes fluidos. Simpósio da Área de Sistemas Particulados do DEQ/UFSCar, 2019.

Trabalhos completos apresentados em congressos nacionais

Melo, K. R. B.; Campos, J. P. F.; Lopes, G. C. Estudo numérico do efeito das propriedades das partículas e da velocidade de impacto sobre o coeficiente de restituição, Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica – COBEQ IC, 2019.

Campos, J. P. F.; Lopes, G. C.; Melo, K. R. B. Estudo da influência dos coeficientes de atrito no ângulo de repouso de diferentes partículas. p. 2198-2204. Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica – COBEQ IC, 2019.

Melo, K. R. B.; Lopes, G. C. Síntese e caracterização de partículas de alginato de sódio aplicadas no estudo de colisões de partículas macias, XXIX Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados - ENEMP, 2019.

Trabalhos completos apresentados em congressos internacionais

Melo, K. R. B.; Lopes, G.; Grace, J. Experimental determination of soft particles' coefficient of restitution for wastewater treatment applications. 2nd Latin American SDEWES Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems, Buenos Aires, 2020.

Campos, J. P.; Melo, K. R. B.; Lopes, G. CFD-DEM study of particle collisions in viscous fluids: effect of lubrication force on the effective coefficient of restitution. 2nd Latin American SDEWES Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems, Buenos Aires, 2020.

APÊNDICE A – ROTINA IMPLEMENTADA PARA O CÁLCULO DA FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO

A rotina que calcula a força de lubrificação durante as colisões, implementada pelo aluno de iniciação científica, João Pedro Ferreira de Campos, é apresentada a seguir.

Lubrication force implemented based on
SJKR cohesion force model.

By Gabriela Cantarelli Lopes (gclopes@ufscar.br)
in May 15, 2019

```

.....*/

#ifdef COHESION_MODEL
COHESION_MODEL (COHESION_LUB, lub, 3)
#else

#ifndef COHESION_MODEL_LUB_H_
#define COHESION_MODEL_LUB_H_

#include "contact_models.h"
#include "cohesion_model_base.h"
#include <cmath>
#include "neighbor.h"
#include "global_properties.h"
#include "fix_property_atom.h"

////////////////////////////////////

namespace MODEL_PARAMS
{
    inline static ScalarProperty* createFluidViscosityLub(PropertyRegistry & registry, const
char * caller, bool sanity_checks)
    {
        ScalarProperty*          fluidViscosityScalar          =
MODEL_PARAMS::createScalarProperty(registry, "fluidViscosity", caller);
        return fluidViscosityScalar;
    }
    inline static ScalarProperty* createRoughnessLub(PropertyRegistry & registry, const char *
caller, bool sanity_checks)
    {
        ScalarProperty* RoughnessScalar = MODEL_PARAMS::createScalarProperty(registry,
"Roughness", caller);
        return RoughnessScalar;
    }

    inline static ScalarProperty* createMinSeparationDistanceRatioLub(PropertyRegistry &
registry, const char * caller, bool sanity_checks)
    {

```

```

        ScalarProperty*          minSeparationDistanceRatioScalar          =
MODEL_PARAMS::createScalarProperty(registry, "minSeparationDistanceRatio", caller);
        return minSeparationDistanceRatioScalar;
    }

}

////////////////////////////////////

namespace LIGGGHTS {
namespace ContactModels {
using namespace std;
using namespace LAMMPS_NS;

template<>
class CohesionModel<COHESION_LUB> : public CohesionModelBase {
public:
    CohesionModel(LAMMPS * Imp, IContactHistorySetup * hsetup, class ContactModelBase
* c) :
        CohesionModelBase(Imp, hsetup, c),
        fluidViscosity(0.0),
        Roughness(0.0),
        minSeparationDistanceRatio(0.0)
    {

    }

    void registerSettings(Settings& settings)
    {
        settings.registerOnOff("tangential_reduce",tangentialReduce_,false);
    }

    inline void postSettings(IContactHistorySetup * hsetup, ContactModelBase *cmb) {}

    void connectToProperties(PropertyRegistry & registry)
    {
        registry.registerProperty("fluidViscosity",
&MODEL_PARAMS::createFluidViscosityLub);
        registry.connect("fluidViscosity",          fluidViscosity,"cohesion_model
easo/capillary/viscous");

        registry.registerProperty("Roughness", &MODEL_PARAMS::createRoughnessLub);
        registry.connect("Roughness", Roughness,"cohesion_model easo/capillary/viscous");

        registry.registerProperty("minSeparationDistanceRatio",
&MODEL_PARAMS::createMinSeparationDistanceRatioLub);
        registry.connect("minSeparationDistanceRatio",
minSeparationDistanceRatio,"cohesion_model easo/capillary/viscous");

        if(force->cg_active())
            error->cg(FLERR,"cohesion model lub");
    }
}

```

```

    neighbor->register_contact_dist_factor(minSeparationDistanceRatio);
}

void surfacesIntersect(SurfacesIntersectData & sidata, ForceData & i_forces, ForceData &
j_forces)
{
    const double ri = sidata.radi;
    const double radj = scdata.is_wall ? radi : scdata.radj;
    const double rEff = radi*radj / (radi+radj);

    const double mult = -6*M_PI*fluidViscosity*rEff*rEff/Roughness;
    const double Fn_lub = mult*sidata.vn;

    if(tangentialReduce_) sidata.Fn += Fn_lub;

    if(sidata.contact_flags) *sidata.contact_flags |= CONTACT_COHESION_MODEL;

    // apply normal force
    const double fx = Fn_lub * sidata.en[0];
    const double fy = Fn_lub * sidata.en[1];
    const double fz = Fn_lub * sidata.en[2];

    i_forces.delta_F[0] += fx;
    i_forces.delta_F[1] += fy;
    i_forces.delta_F[2] += fz;

    j_forces.delta_F[0] -= fx;
    j_forces.delta_F[1] -= fy;
    j_forces.delta_F[2] -= fz;
}

inline void endSurfacesIntersect(SurfacesIntersectData &sidata, ForceData&, ForceData&)
{}
void beginPass(SurfacesIntersectData&, ForceData&, ForceData&){}
void endPass(SurfacesIntersectData&, ForceData&, ForceData&){}

void surfacesClose(SurfacesCloseData & scdata, ForceData & i_forces, ForceData &
j_forces)
{
    if(scdata.contact_flags) *scdata.contact_flags |= CONTACT_COHESION_MODEL;

    const double radi = scdata.radi;
    const double radj = scdata.is_wall ? radi : scdata.radj;
    const double r = sqrt(scdata.rsq);
    const double dist = scdata.is_wall ? r - radi : r - (radi + radj);
    const double rEff = radi*radj / (radi+radj);

    const double rinu = 1.0 / r;

```

```

const double dx = sdata.delta[0];
const double dy = sdata.delta[1];
const double dz = sdata.delta[2];
const double enx = dx * rinv;
const double eny = dy * rinv;
const double enz = dz * rinv;

const double vr1 = sdata.v_i[0] - sdata.v_j[0];
const double vr2 = sdata.v_i[1] - sdata.v_j[1];
const double vr3 = sdata.v_i[2] - sdata.v_j[2];

const double vn = vr1 * enx + vr2 * eny + vr3 * enz;
if (dist < Roughness)
{
    if(sdata.contact_flags) *sdata.contact_flags &=
~CONTACT_COHESION_MODEL;
    return;
}
const double mult = -6.*M_PI*fluidViscosity*rEff*rEff;
const double Fn_lub = mult*vn/std::max(Roughness,dist);

const double fx = Fn_lub * enx;
const double fy = Fn_lub * eny;
const double fz = Fn_lub * enz;

    sdata.has_force_update = true;

i_forces.delta_F[0] += fx;
i_forces.delta_F[1] += fy;
i_forces.delta_F[2] += fz;

j_forces.delta_F[0] -= fx;
j_forces.delta_F[1] -= fy;
j_forces.delta_F[2] -= fz;
}

private:
double fluidViscosity;
double Roughness;
double minSeparationDistanceRatio;
bool tangentialReduce_;
};
}
}

#endif // COHESION_MODEL_LUB_H_
#endif

```