

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**DO FLUXO À OBSTRUÇÃO: CONDIÇÕES DE  
ESCOAMENTO ESTÁVEL EM SILOS**

**Leticia Viana Machado da Silva**

São Carlos, SP

Julho de 2025



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**DO FLUXO À OBSTRUÇÃO: CONDIÇÕES DE  
ESCOAMENTO ESTÁVEL EM SILOS**

**Leticia Viana Machado da Silva**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
ao Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
da Universidade Federal de São Carlos, para  
obtenção do título/grau de bacharel em Física.

Orientação: Prof. Dr. Pedro Augusto  
Franco Pinheiro Moreira

Co-orientação: Prof. Dr. Piter Gargarella

São Carlos, SP

Julho de 2025



# Agradecimentos

Para começar, gostaria de expressar minha profunda gratidão aos meus pais, Marli e Rubens, e à minha irmã Denise, por todo o amor, carinho, apoio emocional e financeiro que me permitiram chegar até aqui. Agradeço por cada gesto, cada palavra de incentivo e por toda a disposição em me ajudar a tornar este sonho realidade.

Meu agradecimento mais especial vai para o meu companheiro de vida, Giovanni. Obrigada por todo o amor e cuidado, por tornar mais leves até os dias mais difíceis e por me ajudar a sustentar pesos que eu não conseguiria carregar sozinha. Sou grata por tudo o que você representa na minha vida, tanto pessoal quanto acadêmica.

Agradeço também às minhas amigas Ellen e Maria Verônica, que estiveram ao meu lado ao longo da graduação, compartilhando desabafos, risadas e enfrentando comigo os altos e baixos da vida universitária. Em especial, à Ellen, por tornar os meus dias mais leves com sua presença constante.

Não poderia deixar de lembrar dos amigos que fiz durante o período da pandemia, Augusto e Gabriel. Embora nossas trajetórias tenham seguido caminhos diferentes, vocês foram essenciais para que eu não desistisse lá no início. Incluo aqui também meu amigo Wander, que me acolheu com carinho assim que as aulas presenciais retornaram, e teve um papel importante nesse processo de retomada.

Agradeço ainda aos meus amigos Ewerton, Guilherme, Laura, Matheus e Vinicius, que, mesmo à distância, sempre me apoiaram e me ofereceram momentos de descontração, que foram essenciais para manter o equilíbrio em meio às dificuldades da graduação.

Sou grata ao Prof. Dr. Piter Gargarella, meu orientador na iniciação científica, por reacender em mim o interesse pela programação. Também agradeço ao Prof. Dr. Pedro Augusto Franco Pinheiro Moreira por todo o suporte ao longo deste trabalho, e por acreditar no meu potencial desde o início.

Deixo, também, meu agradecimento a todos os colegas que cruzaram meu caminho ao longo da graduação, em especial aos amigos que fiz por meio dos grupos de extensão dos quais tive o privilégio de participar.

Por fim, agradeço ao CENAPAD-SP (Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo) pela disponibilização dos recursos computacionais que viabilizaram a realização deste trabalho (projeto nº 748), e à FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo

apoio ao longo de dois anos de iniciação científica (processo n° 2022/15683-5), que foi fundamental para aprofundar meu entendimento sobre este tema e suas diversas aplicações.

Assim, deixo aqui meu sincero e eterno obrigado a cada pessoa que, de alguma forma, contribuiu para essa jornada.



# Resumo

Este trabalho tem como objetivo investigar, por meio de simulações computacionais baseadas no Método dos Elementos Discretos (DEM), utilizando o software LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), as condições que favorecem o escoamento estável de materiais granulares em silos. Foram analisados dois parâmetros principais: a razão entre o diâmetro do orifício de saída e o diâmetro das partículas ( $D/d$ ), e o ângulo de inclinação das paredes do funil. Os resultados indicam a existência de um valor crítico para ambos os parâmetros. Para razões  $D/d$  muito pequenas, o fluxo é limitado por barreiras geométricas e aumento de colisões; já para valores muito grandes, a fluidez também diminui, devido ao aumento de forças coesivas entre partículas pequenas. Da mesma forma, ângulos muito baixos favorecem o entupimento, enquanto ângulos elevados promovem um fluxo mais constante, até certo limite. Os resultados das simulações foram comparados com dados obtidos anteriormente, durante a iniciação científica da autora, e mostraram uma boa compatibilidade entre o comportamento observado nos experimentos e o previsto pelo modelo. Esses achados reforçam a ideia de que o escoamento de materiais granulares não depende apenas de aumentar o tamanho da abertura ou o ângulo do funil, mas sim de encontrar uma configuração geométrica bem ajustada, que permita o máximo aproveitamento do fluxo sem causar entupimentos ou perdas de eficiência.

**Palavras-chave:** fluidez, sistemas granulares, entupimento, DEM, LAMMPS.

# Abstract

This work aims to investigate, through computational simulations based on the Discrete Element Method (DEM) using the LAMMPS software, the conditions that favor stable granular flow in silos. Two main parameters were analyzed: the ratio between the outlet diameter and the particle diameter ( $D/d$ ), and the inclination angle of the funnel walls. The results indicate the existence of a critical value for both parameters. On one hand, for very small  $D/d$  ratios, the flow is limited by geometric constraints and increased particle-wall collisions; on the other hand, for very large ratios, flowability also decreases due to the growing influence of cohesive forces between smaller particles. Similarly, very shallow angles tend to favor clogging, while steeper angles promote a more continuous flow—up to a certain limit. The simulation results were compared with experimental data obtained previously during the author's undergraduate research, showing good agreement between the model predictions and observed behavior. These findings reinforce the idea that granular flow does not simply improve by increasing the outlet size or the funnel angle, but rather depends on finding a well-balanced geometric configuration that maximizes particle movement while minimizing clogging and inefficiencies.

**Keywords:** flowability, granular systems, clogging, DEM, LAMMPS.



# Lista de Figuras

2.1	Representação dos arcos formados para razões $D/d$ diferentes. (a) Razão $D/d = 2$ . (b) Razão $D/d = 4$ . (c) Razão $D/d = 8$ . Fonte: Ilustração elaborada pela autora, baseada em (1).	10
2.2	Ilustração comparativa da distribuição de partículas com diferentes tamanhos: (a) sistema com partículas de tamanho uniforme, resultando em maior quantidade de vazios; (b) sistema com partículas de múltiplos tamanhos, permitindo melhor preenchimento dos espaços e maior densidade. Fonte: Imagem elaborada pela autora.	11
2.3	Representação dos diferentes ângulos que foram analisados neste trabalho. Fonte: Imagem elaborada pela autora.	13
3.1	Geometria usada de base para todas as simulações. Fonte: Imagem elaborada pela autora.	22
3.2	Esquema ilustrativo da variação do tamanho das esferas ( $d$ ) em relação ao tamanho da abertura do funil ( $D$ ). Cada configuração representa uma razão diferente, influenciando o escoamento e o comportamento do sistema. Fonte: Imagem elaborada pela autora.	23
3.3	Relação geométrica utilizada para encontrar os valores de $z$ para os diferentes ângulos, com $x$ constante. Fonte: Imagem elaborada pela autora.	24
4.1	Gráficos de vazão em função do tempo para diferentes tamanhos de partículas: a) $d = 1/5$ e b) $d = 1/10$ .	29
4.2	Vazão média em função da razão entre o diâmetro da abertura do silo ( $D$ ) e o diâmetro das partículas ( $d$ ). Neste caso, todas as simulações tem 400 mil partículas, além disso as barras de erros estão posicionadas diretamente sobre os pontos do gráfico. Fonte: Elaborado pela autora.	30

4.3	Vazão média normalizada em função da razão entre o diâmetro da abertura do silo (D) e o diâmetro das partículas (d). Neste caso apenas o quarto ponto foi simulado com apenas 20 mil partículas, as demais tem 400 mil. Fonte: Elaborado pela autora. .	31
4.4	Distribuição do tamanho das partículas. As barras vermelhas representam a distribuição granulométrica de 20 $\mu m$ a 75 $\mu m$ , enquanto as barras azuis representam a distribuição granulométrica de 32 $\mu m$ a 75 $\mu m$ . Fonte: Elaborado pela autora. . . . .	33
4.5	Variação da fluidez em função da distribuição de tamanho das partículas. Os pontos em vermelho correspondem aos dados experimentais obtidos em um trabalho realizado em conjunto com a iniciação científica, enquanto os pontos em preto representam os resultados obtidos por meio das simulações computacionais. Fonte: Elaborado pela autora. . . . .	33
4.6	Vazão média em função do ângulo de abertura do funil. As barras de erros estão posicionadas diretamente sobre os pontos do gráfico. Fonte: Elaborado pela autora. .	35

# Lista de Tabelas

3.1	Propriedades do alumínio. (2)	22
-----	-------------------------------	----



# Lista de Abreviaturas e Siglas

LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
MA	Manufatura aditiva
DEM	Método dos Elementos Discretos
MD	Dinâmica Molecular
CENAPAD-SP	Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo
FAPESP	Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo
SI	Sistema Internacional
OVITO	Open Visualization Tool



# Lista de Símbolos

$D$	Diâmetro do orifício de saída do funil
$d$	Diâmetro das partículas (no estudo de fluidez)
$k$	Parâmetro de correção da equação de Beverloo
$Q$	Vazão de partículas por segundo
$C$	Coefficiente empírico da equação de Beverloo
$g$	Aceleração da gravidade
$\rho$	Densidade do material
$\theta$	Ângulo de inclinação do funil
$\vec{F}$	Força normal
$\vec{X}$	Posição da partícula
$\vec{M}$	Torque da partícula
$m$	Massa da partícula
$I$	Momento de Inércia da partícula
$\vec{\theta}$	Ângulo de rotação da partícula
$\vec{a}$	Aceleração da partícula
$\Delta t$	Passo de tempo
$\vec{v}$	Verlet Velocity

$r$	Distância entre duas partículas
$F_{He}$	Força de Hertz
$R_i$	Raio da $i$ -ésima partícula
$d$	Distância de contato entre duas partículas (na equação do Potencial de Hertz)
$\delta$	Distância de sobreposição entre duas partículas
$R_{eff}$	Raio relativo entre duas partículas
$K_n$	Constante de contato normal
$K_t$	Constante de contato tangencial
$\gamma_n$	Constante de amortecimento normal
$\gamma_t$	Constante de amortecimento tangencial
$v_n$	Componente da velocidade normal
$v_t$	Componente da velocidade tangencial
$\Delta \vec{S}_t$	Deslocamento tangencial entre duas partículas
$m_{eff}$	Massa efetiva entre duas partículas
$m_i$	Massa da $i$ -ésima partícula
$G$	Módulo de cisalhamento
$E$	Módulo de Young
$\nu$	Coefficiente de Poisson
$\alpha$	Coefficiente de resistência do cisalhamento





# Sumário

<b>I</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1	Introdução	3
<b>II</b>	<b>Fundamentação Teórica</b>	<b>7</b>
2	Fundamentação Teórica	9
2.1	Características que modificam a fluidez . . . . .	9
2.1.1	Tamanho das partículas . . . . .	9
2.1.2	A dependência da geometria . . . . .	12
2.1.3	Outras variáveis . . . . .	14
2.2	LAMMPS . . . . .	15
2.3	Potencial de interação entre as esferas . . . . .	17
<b>III</b>	<b>Métodos computacionais</b>	<b>19</b>
3	Métodos computacionais	21
3.1	Determinando a geometria dos sistemas . . . . .	23
3.1.1	Variando o diâmetro das partículas . . . . .	23
3.1.2	Variando o ângulo do funil . . . . .	24
3.2	Análise dos dados . . . . .	24
3.2.1	Validação dos resultados . . . . .	25
<b>IV</b>	<b>Resultados e discussões</b>	<b>27</b>
4	Resultados e discussões	29
4.1	Influência da razão $d/D$ . . . . .	29
4.2	Influência do ângulo de abertura . . . . .	34

<b>V</b>	<b>Conclusão</b>	<b>37</b>
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>39</b>
<b>VI</b>	<b>Referências</b>	<b>41</b>
<b>VII</b>	<b>Apêndices</b>	<b>45</b>



# **Parte I**

## **Introdução**



# 1. Introdução

A física de sistemas granulares é um campo de estudo que investiga o comportamento coletivo de materiais compostos por partículas sólidas, como grãos de areia, sementes e pedras. Esses materiais, conhecidos como granulares, têm propriedades bem distintas de líquidos e gases [3]. Enquanto líquidos e gases interagem por meio de forças intermoleculares ou campos contínuos, nos sistemas granulares, as partículas interagem principalmente por contatos diretos, como colisões e atritos, sem um meio que as conecte de forma contínua. Entender esses sistemas é importante para diversas áreas práticas, como o transporte e armazenamento de grãos, além de fenômenos naturais, como avalanches e deslizamentos de terra [4]. Um dos principais desafios no estudo de sistemas granulares é o fenômeno de entupimento em silos ou funis, uma vez que afeta desde indústrias alimentícias (partículas macroscópicas) até as áreas de engenharia de materiais (partículas microscópicas) [5]. Além disso, falhas no controle dessas dinâmicas podem ter consequências graves em ambientes industriais. Somente em 2023, por exemplo, mais de 100 mortes foram registradas em unidades de armazenamento de grãos no Brasil. [6].

O comportamento do fluxo em sistemas granulares pode ser classificado de três formas principais: contínuo, intermitente e bloqueado (ou entupido). O primeiro ocorre quando as partículas são suficientemente pequenas em relação ao orifício de saída. Assim, o fluxo é estável e as partículas passam de forma ininterrupta, que é um regime de interesse em silos de grãos. No regime intermediário, o fluxo tem alguns entupimentos breves, causados por estruturas como arcos temporários, mas que se desfazem sozinhos. Neste caso, embora não fique totalmente obstruído, o fluxo tem uma oscilação considerável. Por fim, no regime bloqueado, o fluxo é totalmente interrompido por um período longo, devido à formação de arcos estáveis. Este é um fenômeno comum quando a razão entre o diâmetro de abertura e o diâmetro das partículas é pequena ( $< 5$ ), levando em consideração que o sistema tenha partículas o suficiente para permitir a formação dessas estruturas. Esses regimes são determinados por fatores como a razão entre o diâmetro das partículas, o número total de grãos, a existência de

forças coesivas entre as esferas, a ação da gravidade e até a presença de outros materiais. [7]

Além disso, também deve ser levado em consideração fatores como a geometria do silo, a morfologia e o material dos grãos. A Lei de Beverloo [8], estabelece uma relação empírica entre o fluxo de partículas e o diâmetro da abertura, levando em consideração também o tamanho médio das partículas. De acordo com essa lei, a vazão é proporcional a uma potência do diâmetro efetivo da abertura, dado por  $D - kd$ , onde  $D$  é o diâmetro do orifício,  $d$  é o diâmetro das partículas e  $k$  é um parâmetro empírico que desconsidera o efeito de borda do orifício de saída. A influência da morfologia das esferas se dá por causa do atrito existente quando a superfície não é lisa, ou então quando o grão não é esférico.

Um aspecto fundamental deste estudo é a relação entre o diâmetro das partículas e o tamanho da abertura do silo. Bloqueios tendem a ocorrer com mais frequência quando o diâmetro do orifício é pequeno em relação ao tamanho das partículas, já que isso facilita a formação de arcos e pontes que obstruem permanentemente, ou de forma temporária [9]. Um outro fator que deve ser considerado é o ângulo de inclinação do funil. De modo geral, ângulos menores têm uma tendência maior a obstruir a saída de partículas quando comparados com ângulos maiores [10, 11]. No entanto, as condições críticas de tamanho e ângulo que causam entupimento podem variar conforme fatores como a forma das partículas, a distribuição de tamanhos das esferas e as forças de atrito entre elas. Portanto, projetar corretamente o tamanho da abertura em relação ao diâmetro das partículas é essencial para reduzir os riscos de entupimento e otimizar o fluxo granular, sendo um dos fatores fundamentais no projeto de silos e sistemas de escoamento.

Este trabalho tem como objetivo investigar, por meio de simulações de elementos discretos, as condições que alteram a fluidez no escoamento de grãos esféricos em silos. O foco está em como a relação entre o diâmetro das partículas e o diâmetro do orifício do silo, assim como a influência da geometria do silo, em relação à inclinação do cone de saída, afeta o fluxo. Além disso, serão apresentados alguns dos resultados obtidos na iniciação científica da autora, que têm concordância com este trabalho, para assim poder comparar os resultados computacionais e experimentais obtidos em ambas as pesquisas. Durante a iniciação científica, foram estudadas as influências da umidade, distribuição do tamanho de partículas e a adição de nanopartículas de TiC na fluidez de um pó metálico de liga de alumínio. A metodologia deste trabalho consiste em realizar simulações computacionais utilizando o pacote LAMMPS para modelar o escoamento de esferas dentro de um silo. De forma

geral, é um método que modela a colisão entre partículas com uso das equações de Newton. Neste caso, o potencial de interação entre as esferas será descrito pelo modelo de Hertz. Assim, a força de contato entre partículas esféricas elásticas será descrita, levando em consideração a deformação da superfície de contato. [12]

O silo será inicialmente modelado como um cilindro com um orifício central, utilizando um conjunto de regiões definidas no LAMMPS. Serão testadas diferentes proporções entre os diâmetros das esferas e do orifício, com a relação  $1/X$ , sendo  $X = 5, 8, 10, 15$  e  $20$ , para avaliar os regimes de fluidez neste sistema. Após a análise do modelo inicial com o formato fixo, a geometria do silo será ajustada para incluir uma parte cônica, simulando um funil. Nessa parte, o estudo se concentrará em analisar como as paredes inclinadas influenciam a fluidez. Diferentes ângulos de inclinação ( $30^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $60^\circ$ ) serão testados para investigar como esses ângulos afetam a dinâmica das partículas e contribuem para a variação do fluxo granular. [10]

No Capítulo 2, são apresentadas as características que influenciam a fluidez, além do modelo computacional utilizado nas simulações. O Capítulo 3 descreve o processo de modelagem e configuração do código. O Capítulo 4 apresenta os resultados e as discussões pertinentes a este estudo. Por fim, no Capítulo 5, são expostas as conclusões deste trabalho, juntamente com considerações sobre a comparação com os dados experimentais da iniciação científica.



## **Parte II**

# **Fundamentação Teórica**



## 2. Fundamentação Teórica

Nesta seção, serão discutidas algumas das causas associadas ao entupimento e fluxo de sistemas de escoamento granular. Com base nisso, será apresentada a abordagem utilizada para investigar o fenômeno, incluindo a escolha do software de simulação e o tipo de potencial escolhido para modelar as interações entre partículas.

### 2.1 Características que modificam a fluidez

O escoamento de materiais granulares, como o que ocorre em silos e funis, é um fenômeno comum. Embora se comportem de forma semelhante a fluidos em determinadas condições, eles apresentam características únicas, como o entupimento espontâneo da saída a partir de uma formação de arcos estáveis. Entre os diversos fatores que influenciam esse fenômeno, destacam-se dois parâmetros geométricos fundamentais: a razão entre o diâmetro da abertura do funil e o diâmetro das partículas ( $D/d$ ) e o ângulo de inclinação das paredes do funil.

#### 2.1.1 Tamanho das partículas

Para discutir a influência do tamanho das partículas na fluidez, é preciso destacar dois pontos principais: a razão do diâmetro do orifício de saída ( $D$ ) pelo diâmetro das partículas ( $d$ ) e a distribuição do tamanho de partículas (quando as partículas têm diâmetros diferentes). A razão  $D/d$  é um dos fatores mais influentes na ocorrência de entupimentos em sistemas de escoamento granular. À medida que essa razão aumenta, a probabilidade de formação de arcos estáveis diminui. Acima de um valor crítico, o escoamento torna-se contínuo e praticamente livre de bloqueios. Estudos experimentais e simulações computacionais indicam que essa razão crítica depende de diversas características das partículas, como forma, atrito e coesão. Porém, de forma geral, considera-se que esta razão deve ser, no mínimo, igual a 5 para garantir um fluxo estável. [9]

Contudo, há exceções relevantes, como no caso da manufatura aditiva (MA), um processo em que as peças são construídas camada por camada, permitindo a fabricação de geometrias complexas com alta densidade. Na MA que utiliza pós metálicos, por exemplo, são empregadas partículas extremamente finas, com diâmetros que variam da ordem de  $10^{-6}$  a  $10^{-9}$  metros. Nesse caso, forças intermoleculares, como a força de Van der Waals, tornam-se significativas e influenciam diretamente o comportamento do sistema. Quando há uma concentração elevada de partículas significativamente maiores ou menores do que a média, há uma tendência ao aglomeramento, o que pode resultar na obstrução do escoamento [13]. No entanto, esses efeitos não serão abordados neste trabalho.

A Figura 2.1 ilustra que, para valores baixos de  $D/d$ , é necessária uma quantidade pequena de partículas para formar arcos, o que torna os entupimentos mais prováveis. À medida que a razão aumenta, cresce também o número de partículas exigido para a formação desses arcos, tornando o bloqueio do fluxo progressivamente menos provável.

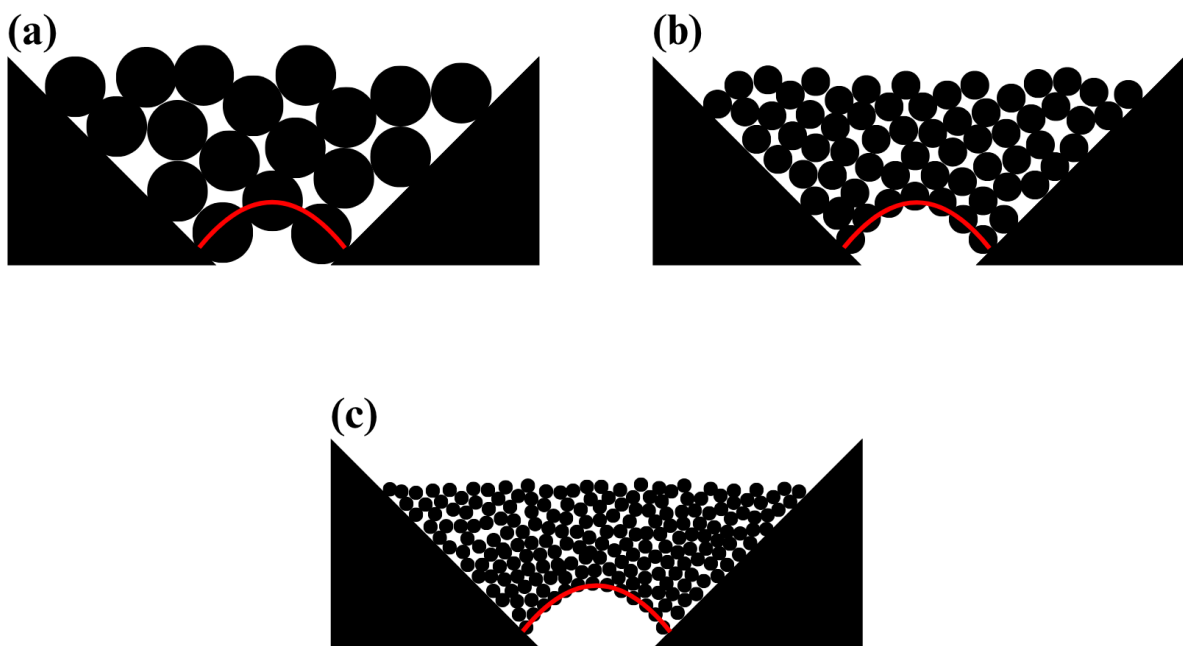


Figura 2.1: Representação dos arcos formados para razões  $D/d$  diferentes. (a) Razão  $D/d = 2$ . (b) Razão  $D/d = 4$ . (c) Razão  $D/d = 8$ . Fonte: Ilustração elaborada pela autora, baseada em [1].

A influência do tamanho não se deve apenas à relação com o tamanho do orifício de saída, mas também serve para a distribuição do tamanho das partículas, quando as partículas têm diâmetros dife-

rentes. Um caso comum em que fica clara essa influência é na manufatura aditiva de pós metálicos. Na manufatura aditiva, é comum que os pós metálicos apresentem uma distribuição de tamanho aproximada a uma gaussiana, com maior porcentagem de partículas em torno de um valor médio. Controlar essa distribuição é muito importante, pois ela influencia diretamente a qualidade dimensional, a integridade superficial das peças produzidas e a reprodutibilidade entre diferentes lotes de material [14]. Partículas fora da faixa ideal podem comprometer tanto o desempenho do processo de fabricação de peças quanto o resultado final: as maiores podem dificultar o fluxo e apresentar resistência à fusão, enquanto as menores contribuem para menor porosidade e melhor acabamento da peça produzida, desde que em proporções controladas, para não prejudicar a fluidez do pó ou causar aglomerações. Idealmente, é esperado encontrar uma granulometria que favoreça a deposição uniforme das camadas e permita a fusão eficiente, garantindo alta qualidade e precisão na peça final, como ilustrado na Figura 2.2.

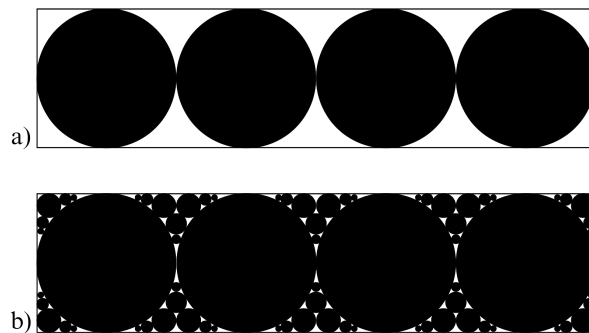


Figura 2.2: Ilustração comparativa da distribuição de partículas com diferentes tamanhos: (a) sistema com partículas de tamanho uniforme, resultando em maior quantidade de vazios; (b) sistema com partículas de múltiplos tamanhos, permitindo melhor preenchimento dos espaços e maior densidade. Fonte: Imagem elaborada pela autora.

O pó metálico mais utilizado nesse tipo de processo é obtido via atomização a gás e deve atender a especificações rigorosas quanto à faixa granulométrica, geralmente entre  $20 \mu m$  a  $75 \mu m$  [14], além de apresentar morfologia esférica, superfície lisa e baixo índice de defeitos, como partículas satélites. Essas propriedades são determinantes para assegurar um bom escoamento pelos tubos do equipamento e a deposição homogênea das camadas. Em relação à formação de arcos, as partículas muito finas tendem a preencher os espaços entre as maiores, o que pode facilitar a formação de pontes estáveis e dificultar a fluidez. Por outro lado, uma fração adequada de partículas maiores contribui para a estabilidade do fluxo e reduz o risco de bloqueios.

## 2.1.2 A dependência da geometria

No escoamento granular, em geral, há dois regimes principais: o fluxo controlado pela geometria e o fluxo denso. No regime controlado pela geometria, a fluidez é determinada, principalmente, pelo tamanho da abertura, independentemente do número total de partículas no sistema. Esse comportamento é bem descrito pela equação empírica proposta por Beverloo [8] que é dada por:

$$Q = C\rho\sqrt{g}(D - kd)^{\frac{5}{2}} \quad (2.1)$$

onde  $Q$  representa a vazão mássica,  $\rho$  é a densidade a granel do material,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $D$  é o diâmetro da abertura,  $d$  é o diâmetro médio das partículas,  $C$  é um coeficiente empírico e  $k$  é um fator de correção associado à borda da abertura.

O modelo clássico considera uma geometria simples, com um orifício circular na base de um silo vertical. Assim, a única força externa é a gravidade. A Equação 2.1 também pode ser adaptada a aberturas de outras formas, como retangulares, com ajustes no expoente da equação para refletir a nova dimensionalidade do sistema [15]. O termo  $D - kd$  representa a abertura efetiva do orifício. A subtração do termo  $kd$  corrige a influência das partículas que se acumulam próximas às bordas, onde o atrito e a formação de arcos estáveis dificultam o fluxo. Portanto, a vazão não depende apenas da área geométrica da abertura, mas da área útil efetiva por onde o fluxo é viável.

Esse modelo é particularmente eficaz quando a razão  $D/d$  é suficientemente grande, de modo que a formação de arcos torna-se menos provável. Para  $D/d \gg 1$ , a equação fornece estimativas bastante precisas. No entanto, para valores próximos de  $D/d \approx 4$  ou menores, o risco de entupimento aumenta significativamente, tornando o modelo menos confiável [16]. Apesar da equação ser bastante precisa em diversas situações práticas, ela possui limitações. Nela não é considerada a ocorrência de bloqueios intermitentes, não é adequada para geometrias inclinadas e não considera coesão ou adesão entre partículas. Além disso, por ser empírica, seus parâmetros  $C$  e  $k$  devem ser determinados experimentalmente para cada sistema [17]. Por outro lado, no regime de fluxo denso, as interações entre partículas passam a ter papel predominante. Nessa situação, fatores como a densidade local, o atrito e as forças de contato influenciam fortemente o comportamento do escoamento. Sistemas com alta compactação ou confinamento tendem a apresentar esse tipo de regime, onde a pressão interna e o rearranjo coletivo de partículas são determinantes para a dinâmica do fluxo.

Outro fator geométrico relevante é o ângulo de inclinação do funil. Em silos com base plana

( $\theta = 0^\circ$ ), as partículas tendem a cair verticalmente, sob influência direta da gravidade. Quando há um funil inclinado, surgem componentes de movimento nas direções inclinadas. Estudos demonstram que o aumento do ângulo do funil favorece tanto o aumento da velocidade média das partículas quanto uma distribuição mais uniforme do fluxo [1, 18]. Isso acontece porque, com ângulos maiores, as partículas tendem a interagir mais com as paredes do funil, o que dificulta a formação de arcos estáveis. Como consequência, o sistema apresenta uma chance menor de entupir e maior de ter um fluxo mais uniforme.

Além disso, estudos experimentais mostram que a influência do ângulo do funil afeta diretamente o comportamento coletivo do fluxo granular. Conforme o ângulo aumenta, o tamanho médio das avalanches também tende a crescer. Esse efeito é ainda mais claro quando relacionado com aberturas de maior ângulo, pois a geometria inclinada do funil impõe restrições aos ângulos possíveis entre partículas adjacentes, como pode ser notado na Figura 2.3, dificultando a formação de arcos suficientemente estáveis para interromper o fluxo. Como resultado, a inclinação do funil atua como um fator geométrico crucial na prevenção de obstruções, especialmente em sistemas com abertura reduzida.

[1]

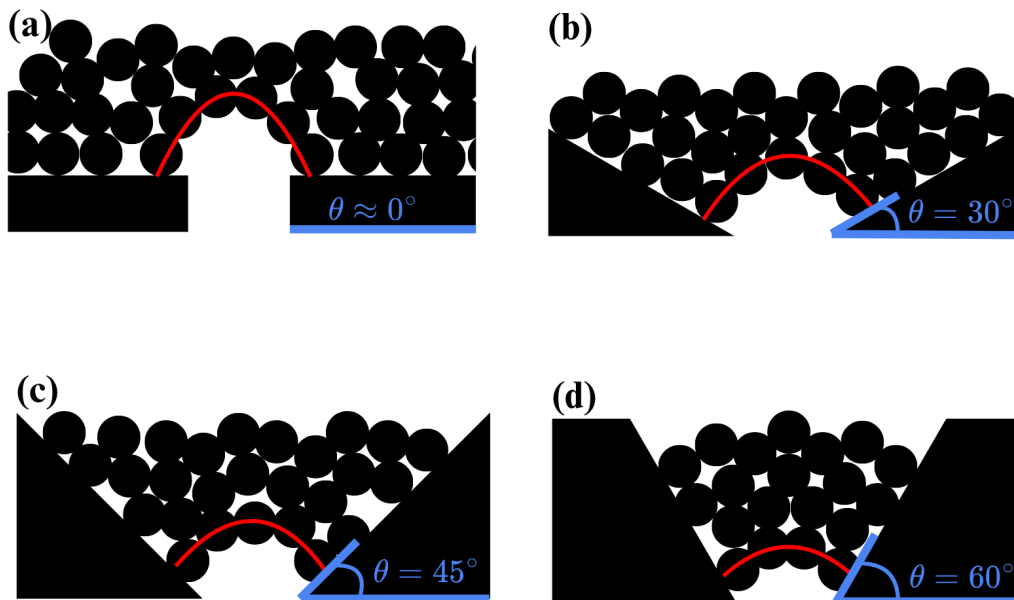


Figura 2.3: Representação dos diferentes ângulos que foram analisados neste trabalho. Fonte: Imagem elaborada pela autora.

### 2.1.3 Outras variáveis

Além do tamanho e da geometria do silo, quando se trata de escalas micrométricas, alguns fatores também influenciam o fluxo, como a umidade das partículas e a adição de nanopartículas de outro material para servir de reforço. A presença de umidade é um fator muito importante na fabricação aditiva de pó metálico, pois influencia diretamente na fluidez do material, fundamental para um processo de fabricação eficiente. Quando o pó metálico entra em contato com moléculas de água, as partículas podem se unir formando aglomerados devido às ligações entre elas [19]. Além disso, a umidade pode causar complicações durante a fusão do pó. A presença de água pode levar à formação de porosidade na peça final, uma vez que a umidade evapora rapidamente durante o aquecimento, deixando espaços vazios ou bolhas no material solidificado. Isso compromete a integridade estrutural e as propriedades mecânicas das peças fabricadas. Técnicas de pré-processamento, como a secagem do pó antes da utilização, podem ser empregadas para remover a umidade residual e melhorar a fluidez do material. Isso contribui para uma distribuição mais uniforme durante a fabricação, reduzindo o risco de defeitos e melhorando a qualidade das peças finais.

Um outro fator é a altura da coluna de partículas (ou sua massa total), que influencia na pressão exercida sobre a saída, afetando diretamente a probabilidade de entupimento e a taxa de vazão. Diferentemente dos fluidos tradicionais, os materiais granulares exibem o chamado efeito Janssen, no qual o atrito entre as partículas e as paredes laterais do silo reduz a transferência de peso diretamente para a base. Isso leva a uma saturação da pressão no fundo, independentemente da altura total da coluna. Contudo, quando observa-se o comportamento dinâmico do fluxo, esse efeito não é suficiente para anular completamente a influência da quantidade de partículas sobre o orifício. Simulações e experimentos indicam que, em colunas mais altas, há um aumento na formação de arcos estáveis devido ao maior confinamento e à compactação mais forte do material. Esse aumento na densidade local pode dificultar o rearranjo das partículas e favorecer o entupimento. Já em colunas mais baixas, o sistema tende a permanecer mais fluido, com menos partículas exercendo pressão sobre o orifício, o que favorece o rompimento de arcos incipientes e reduz a taxa de formação de bloqueios. Este fator é particularmente importante quando o sistema opera próximo ao regime de transição entre fluxo estável e bloqueado. [20]

A adição de nanopartículas secas ao pó de alumínio tem se mostrado uma estratégia eficaz para melhorar a fluidez dos pós metálicos. Por serem extremamente pequenas, essas nanopartículas se

distribuem entre os grãos maiores de alumínio. Isso reduz as forças de coesão que normalmente dificultam o escoamento, como as forças de van der Waals e a adesão superficial. Segundo Gärtner et al. [21], esse efeito pode ser comparado a uma lubrificação em escala microscópica: as nanopartículas se posicionam nos pontos de contato entre os grãos, facilitando o deslizamento entre eles e tornando o rearranjo das partículas mais fácil durante o fluxo. Como resultado, o pó tem menor chance de formar aglomerados, um dos principais fatores que comprometem a fluidez em sistemas com pós metálicos. Dessa forma, o uso de nanopartículas não só melhora o desempenho do material em processos de escoamento, como também amplia seu potencial de aplicação industrial.

## 2.2 LAMMPS

O LAMMPS é um código clássico de simulação da dinâmica de partículas, na qual as interações entre partículas são descritas pelas equações de Newton. É um simulador de modelagem numérica amplamente utilizado, tanto para simulações envolvendo átomos e moléculas, quanto para sistemas macroscópicos compostos por partículas discretas. Ele utiliza uma abordagem de passos finitos de tempo para resolver as equações de Newton, simultaneamente, para cada partícula no sistema [22]:

$$\vec{F} = m \frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} \quad (2.2)$$

$$\vec{M} = I \frac{d^2 \vec{\theta}}{dt^2} \quad (2.3)$$

onde  $\vec{F}$  e  $\vec{M}$  são a força normal e o torque agindo em uma dada partícula,  $m$  e  $I$  a massa e o momento de inércia,  $\vec{X}$  e  $\vec{\theta}$  a posição e o ângulo das partículas, respectivamente.

A solução das Equações 2.2 e 2.3 é dada através de suas integrais, levando em consideração as velocidades e acelerações constantes em um determinado intervalo de tempo. No caso deste trabalho, a terceira lei de Newton não é levada em consideração, pois o pacote *granular* utilizado no código não permite seu uso. Dessa forma, a força resultante após a interação entre duas partículas é calculada individualmente para cada uma delas.

Um fator importante para o uso do LAMMPS é que, além de ser um software de código aberto, também suporta computação paralela. A computação paralela ocorre quando diferentes processadores resolvem partes diferentes da simulação de forma simultânea, resultando em um cálculo mais eficiente.

Neste caso, o método utilizado foi o DEM. Este é um modelo numérico desenvolvido por Cundall e Strack [23], que descreve o movimento de discos 2D e esferas 3D. É um método numérico aplicado no cálculo do movimento e o efeito de um grande número de partículas pequenas. Embora o DEM esteja estreitamente relacionado à dinâmica molecular (MD), esse método geralmente se distingue pela inclusão de graus de liberdade rotacionais e deformação de partículas. Para estudar a fluidez, é necessário entender como se dá a interação entre as partículas. Essa interação microscópica é descrita pelas forças normais e tangenciais não lineares de Hertz, que serão descritas posteriormente.

Para resolver as equações de movimento das partículas em simulações de MD e DEM, o LAMMPS emprega o método de Verlet, um algoritmo de integração numérica amplamente utilizado devido à sua precisão e eficiência computacional. Este método pertence à classe de integradores explícitos, sendo particularmente adequado para sistemas com interações de curto alcance, como aqueles encontrados em simulações de materiais granulares. [24]

O método de Verlet é derivado a partir de uma expansão em série de Taylor das posições das partículas em função do tempo. A cada passo de simulação, com duração  $\Delta t$ , o algoritmo atualiza as posições e velocidades das partículas seguindo uma sequência lógica: atualização da posição, cálculo de novas forças, novas acelerações (fornecidas pelas novas forças) e atualização da velocidade. Esses passos são dados pelas Equações 2.4 2.5 2.6 e 2.7, respectivamente. [24]

$$\vec{X}(t + \Delta t) = \vec{X}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 \quad (2.4)$$

$$\vec{F}(t + \Delta t) \quad (2.5) \quad \vec{a}(t + \Delta t) \quad (2.6)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)] \Delta t \quad (2.7)$$

No contexto do DEM, o uso do velocity-Verlet permite uma descrição precisa do movimento translacional e rotacional das partículas, o que é fundamental para capturar corretamente as interações de contato e a dinâmica coletiva do sistema. Assim, o método de integração adotado no LAMMPS constitui um dos elementos centrais para a fidelidade dos resultados obtidos nas simulações numéricas. Nele, é preservada a energia total do sistema, o que é muito importante em simulações onde a

dissipação e transferência de energia são fatores fundamentais.

Embora existam outros métodos de integração, como Euler e Runge-Kutta, cada um apresenta suas vantagens e limitações. O método de Euler, apesar de simples e computacionalmente leve, possui baixa precisão (erro proporcional a  $\Delta t$ ) e tende a acumular erros rapidamente, sendo mais apropriado para aplicações didáticas. Já o método de Runge-Kutta de quarta ordem oferece alta precisão (erro proporcional a  $\Delta t^4$ ) e melhor desempenho em sistemas não-lineares complexos, mas a um custo computacional elevado, pois exige múltiplas avaliações de força por passo de tempo. Em contrapartida, o método de Verlet, muito utilizado em simulações de dinâmica molecular e sistemas granulares, apresenta um equilíbrio ideal entre precisão, estabilidade e desempenho. Sua simetria temporal e boa conservação de energia o tornam uma escolha satisfatória para modelar sistemas com grande número de partículas interagentes, como os analisados neste trabalho.

## 2.3 Potencial de interação entre as esferas

Nos sistemas granulares, a dissipação de energia ocorre principalmente por meio de colisões inelásticas e forças de atrito. Durante as interações entre partículas, parte da energia cinética é transformada em calor ou dissipada por deformações internas e atrito de deslizamento. Para melhor descrever essa dissipação, foi utilizado o potencial de Hertz. Esse modelo é baseado na teoria da elasticidade de corpos deformáveis e é mais realista para a modelagem de sistemas granulares do que potenciais simplificados, como o de Hooke. A formulação do potencial de Hertz se aplica a materiais elásticos isotrópicos e homogêneos, assumindo que as deformações são pequenas em comparação com o raio das partículas.

Conforme descrito em Brilliantov [25], Silbert [26] e Zhang [22], há força quando a distância  $r$  entre duas partículas de raios  $R_i$  e  $R_j$  é menor que sua distância de contato  $d = R_i + R_j$ . Não há força entre as partículas quando  $r > d$ . Para a força de atrito entre duas partículas granulares, é utilizada a seguinte equação [12]:

$$F_{He} = \sqrt{\delta} \sqrt{R_{eff}} [(K_n \delta n_{ij} - m_{eff} \gamma_n v_n) + (K_t \Delta \vec{S}_t + m_{eff} \gamma_t v_t)] \quad (2.8)$$

onde  $\delta$  é a distância de sobreposição entre as duas partículas,  $R_{eff}$  é o raio relativo entre duas partículas,  $K_n$  a constante de contato normal,  $K_t$  a constante de contato tangencial,  $\gamma_n$  a constante de

amortecimento elástico normal,  $\gamma_t$  a constante de amortecimento elástico tangencial,  $v_n$  a componente da velocidade normal relativa entre duas partículas,  $v_t$  a componente da velocidade tangencial relativa entre duas partículas,  $\Delta\vec{S}_t$  o vetor de deslocamento tangencial entre 2 partículas e  $m_{eff}$  é a massa relativa entre duas partículas.

Esses parâmetros podem ser calculados segundo as Equações [2.9], [2.10] e [2.11]:

$$\delta = d - r \quad (2.9)$$

$$R_{eff} = \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} \quad (2.10)$$

$$m_{eff} = \sqrt{\frac{m_i m_j}{m_i + m_j}} \quad (2.11)$$

No caso hertziano,  $K_n$  é como uma constante de mola não linear e como mostrado nos artigos de Brilliantov e de Zhang:

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (2.12)$$

$$K_n = \frac{4G}{3(1 - \nu)} \quad (2.13)$$

$$K_t = \frac{4G}{2 - \nu} \quad (2.14)$$

com  $G$  sendo o módulo de cisalhamento,  $E$  o módulo de Young e  $\nu$  o coeficiente de Poisson.

A força de contato no modelo de Hertz, a princípio, é puramente elástica. Entretanto, em sistemas reais, há dissipação de energia devido à fricção interna e outras perdas mecânicas [27]. Dessa forma, os coeficientes  $\gamma_n$  e  $\gamma_t$  representam um amortecimento. Esses coeficientes são dados por [12]:

$$\gamma_n = \sqrt{\frac{4m_{eff}k_n}{1 + \left(\frac{\pi}{\log(\alpha)}\right)^2}} \quad (2.15)$$

$$\gamma_t = \frac{1}{2}\gamma_n \quad (2.16)$$

sendo  $\alpha$  o coeficiente de resistência ao cisalhamento do material.

## **Parte III**

### **Métodos computacionais**



### 3. Métodos computacionais

A metodologia adotada neste trabalho se baseia na realização de simulações computacionais utilizando o software LAMMPS. As simulações foram realizadas, em sua maioria, utilizando o supercomputador do CENAPAD-SP, uma rede de centros voltados à computação de alta performance. As demais simulações foram executadas no notebook de uso pessoal da autora. Como a quantidade de partículas varia significativamente entre as simulações, os resultados foram normalizados para evitar distorções na comparação dos resultados.

O objetivo principal da pesquisa é investigar as condições que influenciam a fluidez do escoamento, considerando fatores como a geometria do silo e o diâmetro das partículas. As simulações são realizadas em regime quase estático, sob a ação da gravidade, sem a inclusão de efeitos térmicos. A gravidade é aplicada como um campo constante ao longo do eixo vertical, sendo o único agente externo responsável pelo movimento das partículas.

As partículas são modeladas como esferas quase rígidas (pois possuem áreas de contato que simulam deformação) e idênticas entre si em densidade e diâmetro. Este modelo representa uma simplificação para descrever o comportamento do escoamento granular. Tanto as partículas quanto as paredes do silo foram atribuídas com propriedades mecânicas características do alumínio, como o módulo de Young ( $E$ ), o coeficiente de Poisson ( $\nu$ ) e o coeficiente de atrito estático, conforme mostrado na Tabela 3.1. Esses parâmetros garantem uma modelagem física realista do comportamento das partículas durante o escoamento [12]. O alumínio foi escolhido por ser um material amplamente caracterizado na literatura, de fácil parametrização e por permitir a comparação com estudos prévios desenvolvidos durante a iniciação científica da autora. A geometria usada de base está expressa na Figura 3.1.

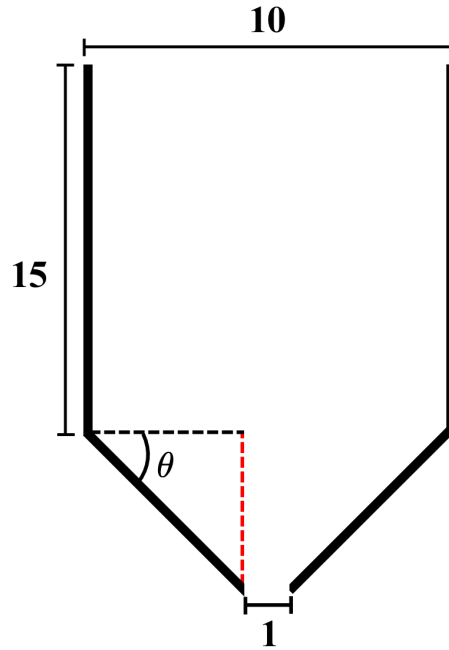


Figura 3.1: Geometria usada de base para todas as simulações. Fonte: Imagem elaborada pela autora.

Tabela 3.1: Propriedades do alumínio. [2]

Densidade [ $kg/m^3$ ]	E [ $GPa$ ]	$\mu$
2700	71	0.33
Resistência a tração [ $MPa$ ]	Resistência ao cisalhamento [ $MPa$ ]	–
76	130	–

As simulações foram realizadas utilizando unidades do Sistema Internacional (SI), apesar do estudo ter sido feito em escala macroscópica, também pode ser utilizado para entender sistemas microscópicos. As condições de contorno usadas são periódicas em todas as direções, garantindo que nenhuma partícula seja perdida ao longo da simulação. O cálculo das forças de interação entre as partículas desconsidera a terceira lei de Newton, ou seja, as forças resultantes das colisões são calculadas individualmente.

Para a análise posterior da fluidez, foi programada a geração de um arquivo contendo a quantidade de partículas que saem pelo orifício do silo ao longo do tempo. Além disso, um segundo arquivo foi gerado com os valores de força, velocidade e posição de cada partícula, permitindo a visualização completa da dinâmica do sistema por meio do software OVITO (Open Visualization Tool). O sistema é inicialmente preenchido com partículas, e o escoamento é iniciado apenas após todas estarem em

repouso. Embora haja uma diferença no comportamento do sistema quando o funil é aberto com partículas ainda em movimento, o que aplicaria uma força adicional nas partículas que estão saindo do silo, esse cenário não será abordado neste trabalho.

### 3.1 Determinando a geometria dos sistemas

#### 3.1.1 Variando o diâmetro das partículas

O sistema simulado consiste em um silo cilíndrico vertical (com inclinação  $\theta \approx 0^\circ$ ) com orifício circular posicionado no centro da base, por onde as partículas podem escoar sob a ação da gravidade. A geometria é definida por comandos do LAMMPS que permitem a construção de regiões cilíndricas e planos de contenção. Para investigar a influência da razão entre o diâmetro do orifício e o diâmetro das partículas ( $D/d$ ) no escoamento, foram simuladas diferentes configurações com  $D/d = 5, 8, 10, 15$  e 20, como apresentado na Figura 3.2. Essa variação busca determinar a razão crítica a partir da qual o fluxo se torna estável, ou abaixo da qual ocorre o bloqueio frequente causado pela formação de arcos de partículas.

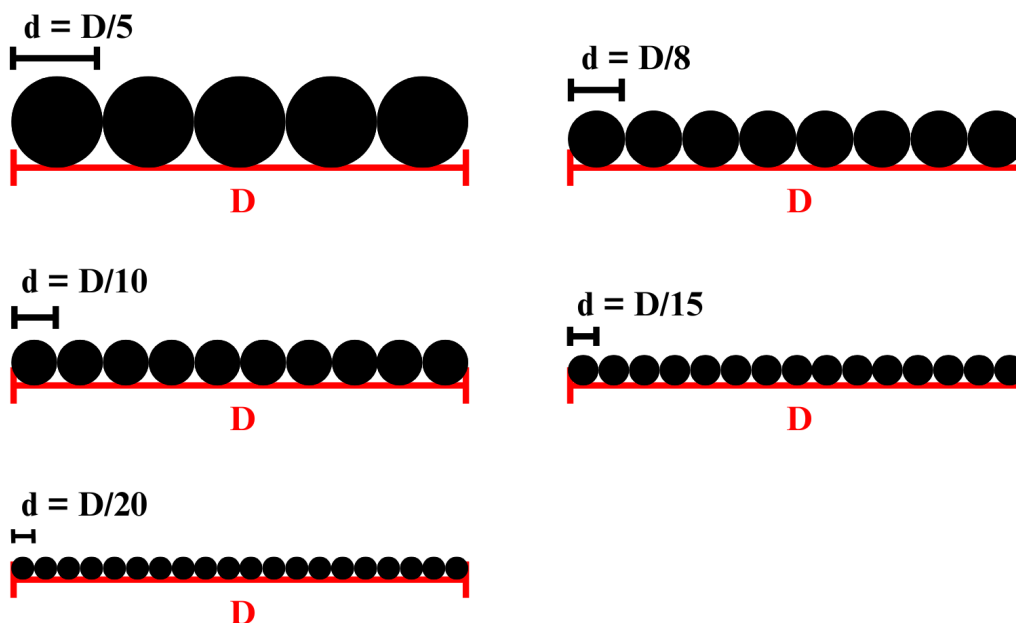


Figura 3.2: Esquema ilustrativo da variação do tamanho das esferas ( $d$ ) em relação ao tamanho da abertura do funil ( $D$ ). Cada configuração representa uma razão diferente, influenciando o escoamento e o comportamento do sistema. Fonte: Imagem elaborada pela autora.

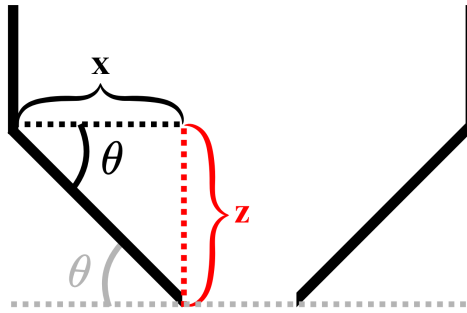


Figura 3.3: Relação geométrica utilizada para encontrar os valores de  $z$  para os diferentes ângulos, com  $x$  constante. Fonte: Imagem elaborada pela autora.

### 3.1.2 Variando o ângulo do funil

Após a análise com o silo cilíndrico simples, foi introduzida uma modificação na geometria do silo, incorporando uma seção cônica na parte inferior, simulando um funil. Essa parte cônica foi construída por meio da inclinação das paredes da base, criando um cone invertido que converge para o orifício central de mesmo diâmetro  $D$  que no caso anterior. Os ângulos de inclinação considerados foram de  $30^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $60^\circ$ , a fim de verificar o impacto das paredes inclinadas na formação de arcos e no comportamento do fluxo.

Como mostrado na Figura 3.1 alguns valores da geometria do silo são constantes, assim foi preciso apenas definir a altura da parte cônica através de geometria, assim como mostra a Figura 3.3.

## 3.2 Análise dos dados

Para a visualização e análise das simulações, foi utilizado o software Ovito, uma ferramenta utilizada para análise de dados de simulação de partículas. O Ovito permite inspecionar visualmente a dinâmica do sistema, detectar a formação de arcos de partículas, calcular métricas de escoamento e gerar gráficos ou vídeos para apresentação dos resultados.

A detecção de entupimentos se dá de duas formas: através da observação direta da parada completa do escoamento das partículas por um intervalo de tempo significativo e pela formação de estruturas de arco visíveis no plano do orifício. A análise foi complementada com gráficos temporais do número de partículas escoadas, o que permitiu a identificação de períodos de escoamento interrompidos por pausas associadas a bloqueios temporários. O comportamento desse fluxo foi estudado com

foco na correlação com a geometria do silo e o diâmetro das partículas.

### **3.2.1 Validação dos resultados**

Por fim, a validação das simulações foi feita por meio da comparação dos resultados obtidos com dados da literatura [28]. Além disso, também foram feitas comparações com os resultados obtidos durante a iniciação científica, cujo tema está em consonância com o deste trabalho.



## **Parte IV**

### **Resultados e discussões**



## 4. Resultados e discussões

### 4.1 Influência da razão $d/D$

Para a análise dos dados, foi considerado, em cada simulação, o valor médio da vazão ao longo do tempo. Os gráficos da vazão em função do tempo para duas das simulações estão apresentados nas Figuras 4.1a e 4.1b; eles serviram de base para o cálculo dos valores médios. Os resultados obtidos revelaram um comportamento interessante da vazão média em relação à razão entre os diâmetros do orifício de saída e das partículas. De acordo com a Figura 4.2, observa-se que o sistema apresenta uma melhora na fluidez até certo ponto.

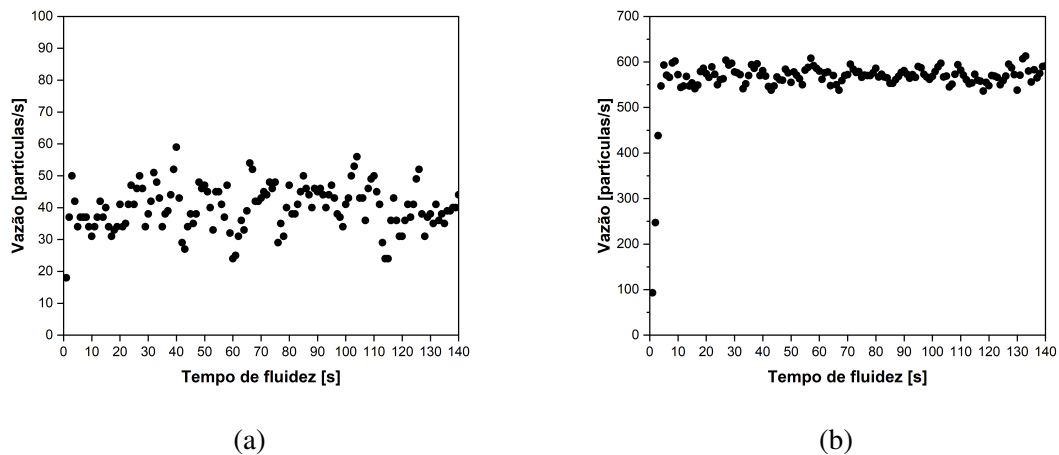


Figura 4.1: Gráficos de vazão em função do tempo para diferentes tamanhos de partículas: a)  $d = 1/5$  e b)  $d = 1/10$ .

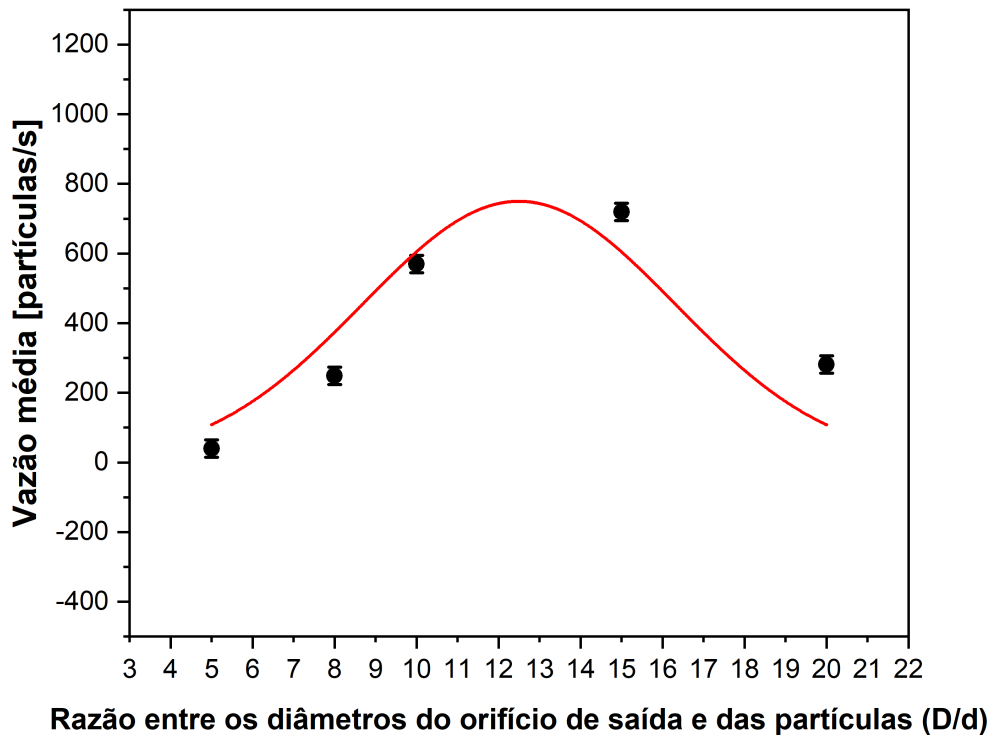


Figura 4.2: Vazão média em função da razão entre o diâmetro da abertura do silo (D) e o diâmetro das partículas (d). Neste caso, todas as simulações tem 400 mil partículas, além disso as barras de erros estão posicionadas diretamente sobre os pontos do gráfico. Fonte: Elaborado pela autora.

No primeiro ponto do gráfico, cujas partículas apresentam um tamanho relativamente grande em relação à abertura do silo, observa-se uma vazão baixa. Embora o escoamento não tenha sido completamente interrompido, ele se mostrou bastante reduzido, indicando que partículas maiores enfrentam maior dificuldade para atravessar a abertura, tanto por limitações geométricas quanto pelo aumento nas colisões com as paredes do silo. No terceiro e quarto pontos do gráfico, é possível identificar uma condição de maior vazão dentre os dados obtidos, caracterizando um regime de fluidez ideal. Nessa situação, a razão entre o diâmetro das partículas e o da abertura permite um fluxo contínuo e eficiente, sem bloqueios ou interferências relevantes. No último ponto analisado, onde as partículas são significativamente menores que a abertura, a vazão volta a diminuir. Esse comportamento pode ser atribuído à intensificação de forças coesivas em escalas menores, como as forças de van der Waals, que promovem a aglomeração das partículas. Esse efeito reduz a mobilidade do material e pode dificultar o fluxo, favorecendo até mesmo o entupimento em casos mais extremos. Observa-se que os pontos apresentam uma tendência que lembra o formato de uma curva gaussiana, com um valor máximo de fluidez. No entanto, essa forma é utilizada apenas como um guia visual para auxiliar na interpretação dos dados, não devendo ser vista como a representação de um modelo físico, pois

seriam necessárias mais simulações com outros valores de  $D/d$  para verificar se essa curva realmente descreve o comportamento do sistema de forma fundamentada.

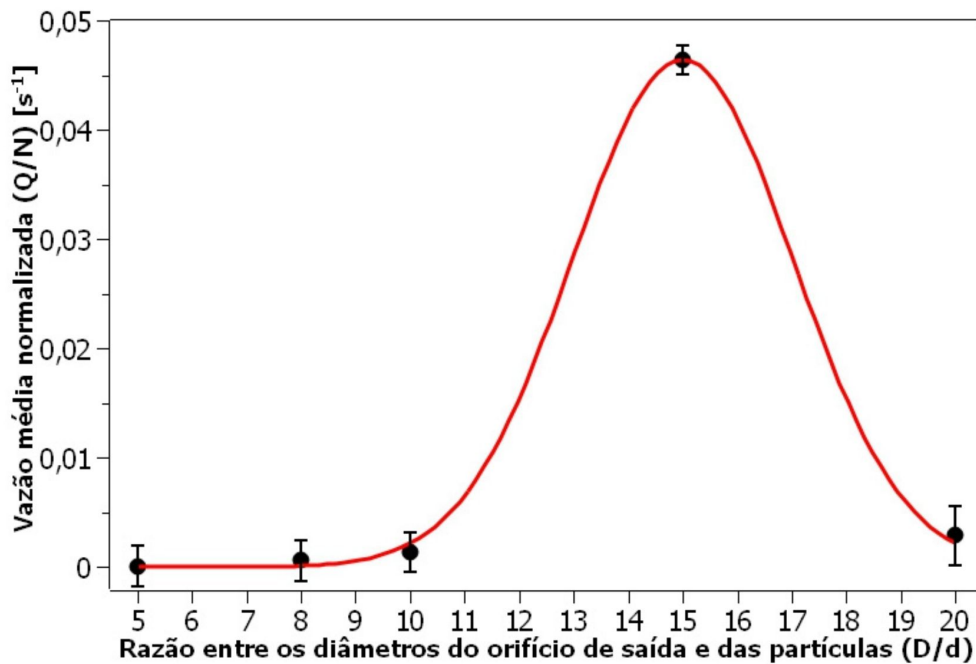


Figura 4.3: Vazão média normalizada em função da razão entre o diâmetro da abertura do silo ( $D$ ) e o diâmetro das partículas ( $d$ ). Neste caso apenas o quarto ponto foi simulado com apenas 20 mil partículas, as demais tem 400 mil. Fonte: Elaborado pela autora.

Durante a análise de dados foram utilizados valores de simulações realizadas tanto em um supercomputador quanto em um notebook pessoal, resultando na Figura 4.3. Ao comparar com a Figura 4.2, nota-se uma discrepância significativa no quarto ponto, correspondente ao valor de  $D/d = 15$ , que foi obtido a partir da simulação no notebook. Uma possível explicação para essa diferença está na quantidade reduzida de partículas utilizada nessa simulação (cerca de 20 mil, em contraste com as 400 mil utilizadas nas simulações executadas no supercomputador), fazendo com que a coluna de partículas seja baixa quando comparada com as demais simulações. Como discutido anteriormente, colunas mais baixas de partículas tendem a apresentar maior fluidez. Isso pode ter levado a uma superestimação da vazão média nesse caso, uma vez que o regime de escoamento foi artificialmente favorecido por uma menor pressão exercida sobre a saída.

Quando os resultados são comparados ao modelo clássico de Beverloo, observa-se que ele não descreve adequadamente os dados obtidos neste trabalho. No regime de partículas grandes, o modelo subestima a redução da vazão, pois não considera de maneira satisfatória as restrições cinemáticas e o aumento nas colisões entre partículas e paredes. Na região de vazão máxima, embora apresente

certa concordância, o modelo não explica a origem do pico de fluidez, já que ignora completamente a presença de forças coesivas. Além disso, ao assumir partículas ideais e sem interações além do contato mecânico, o modelo se torna limitado em contextos nos quais as interações intermoleculares, como as forças de van der Waals, passam a exercer papel relevante no comportamento do sistema.

Durante o desenvolvimento da iniciação científica da autora, foi investigada a influência da distribuição granulométrica na fluidez de uma liga de alumínio. O objetivo era compreender como diferentes faixas de tamanho de partículas afetam o escoamento do material. As distribuições de tamanho utilizadas nos experimentos são apresentadas na Figura 4.4.

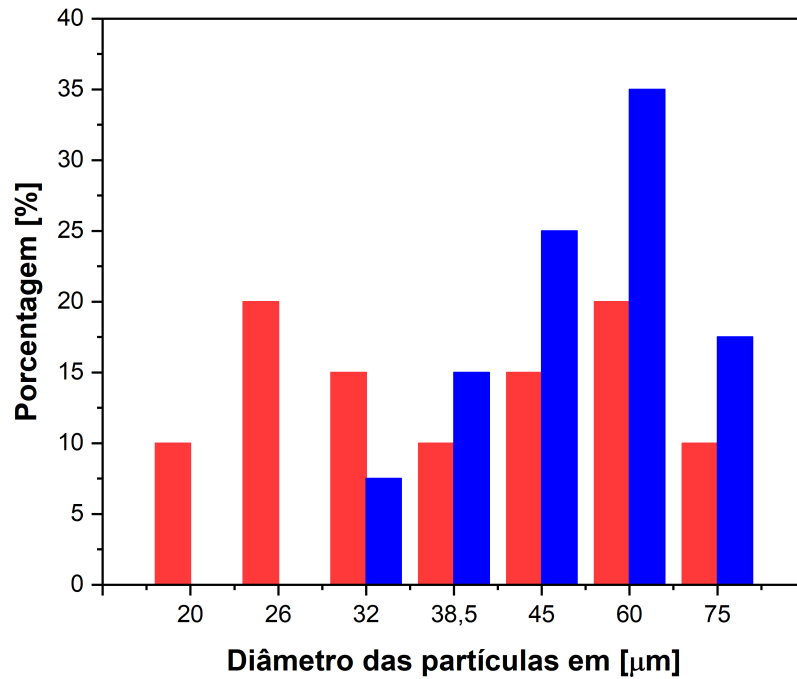


Figura 4.4: Distribuição do tamanho das partículas. As barras vermelhas representam a distribuição granulométrica de 20  $\mu m$  a 75  $\mu m$ , enquanto as barras azuis representam a distribuição granulométrica de 32  $\mu m$  a 75  $\mu m$ . Fonte: Elaborado pela autora.

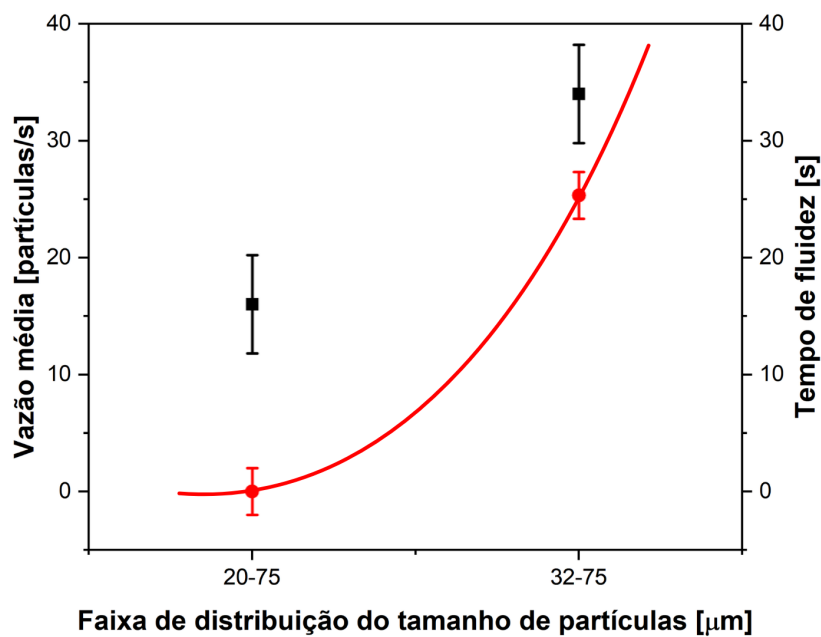


Figura 4.5: Variação da fluidez em função da distribuição de tamanho das partículas. Os pontos em vermelho correspondem aos dados experimentais obtidos em um trabalho realizado em conjunto com a iniciação científica, enquanto os pontos em preto representam os resultados obtidos por meio das simulações computacionais. Fonte: Elaborado pela autora.

Observa-se que, na primeira faixa granulométrica analisada (20–75  $\mu m$ ), há uma maior concentração de partículas finas em comparação com a segunda faixa (32–75  $\mu m$ ), que tem sua distribuição mais concentrada entre 40  $\mu m$  e 60  $\mu m$ . Ao comparar os resultados de fluidez (Figura 4.5) com a análise realizada anteriormente (Figura 4.2), nota-se que a presença de uma fração significativa de partículas muito pequenas contribui para a redução da vazão. Esse comportamento está alinhado com a observação de que partículas menores tendem a se aglomerar mais facilmente devido às forças coesivas, dificultando o escoamento. A curva vermelha representa a equação clássica de Beverloo. Embora apresente similaridade com os dados experimentais, seriam necessários mais pontos para determinar se o comportamento se ajusta de fato a essa equação ou apenas a uma tendência linear. Ainda assim, os resultados reforçam a importância de uma distribuição granulométrica bem ajustada em processos industriais com materiais particulados, já que pequenas variações podem impactar significativamente a eficiência do escoamento.

## 4.2 Influência do ângulo de abertura

Os resultados obtidos mostraram um comportamento bem interessante da vazão com a variação do ângulo de inclinação do funil. Como é possível ver na Figura 4.6, para ângulos menores, entre 0° e 45°, a vazão ficou visivelmente reduzida, o que indica que o atrito com as paredes do silo estava tendo um papel dominante no fluxo. Inclusive, pequenas mudanças no ângulo já causavam uma diferença na fluidez, o que mostra como o sistema é sensível à geometria nessa região. Conforme o ângulo foi aumentando, especialmente entre 45° e 60°, foi possível notar um aumento mais rápido da vazão. Nessa etapa intermediária, os entupimentos não devem acontecer e o material começou a escoar de forma bem mais constante. Isso dá a entender que, a partir desse ponto, a gravidade começa a se sobressair em relação ao atrito e à coesão entre partículas, favorecendo o fluxo. Já para ângulos maiores que 60°, parece chegar a um ponto ótimo, onde a vazão se mantém alta. Nessas condições, os arcos estáticos praticamente não se formavam mais, mostrando que a gravidade estava dominando o comportamento do escoamento. Apesar disso, a partir de certo ponto, os ganhos começaram a ficar bem pequenos, o que sugere que há um limite prático para quanto se pode melhorar só aumentando o ângulo.

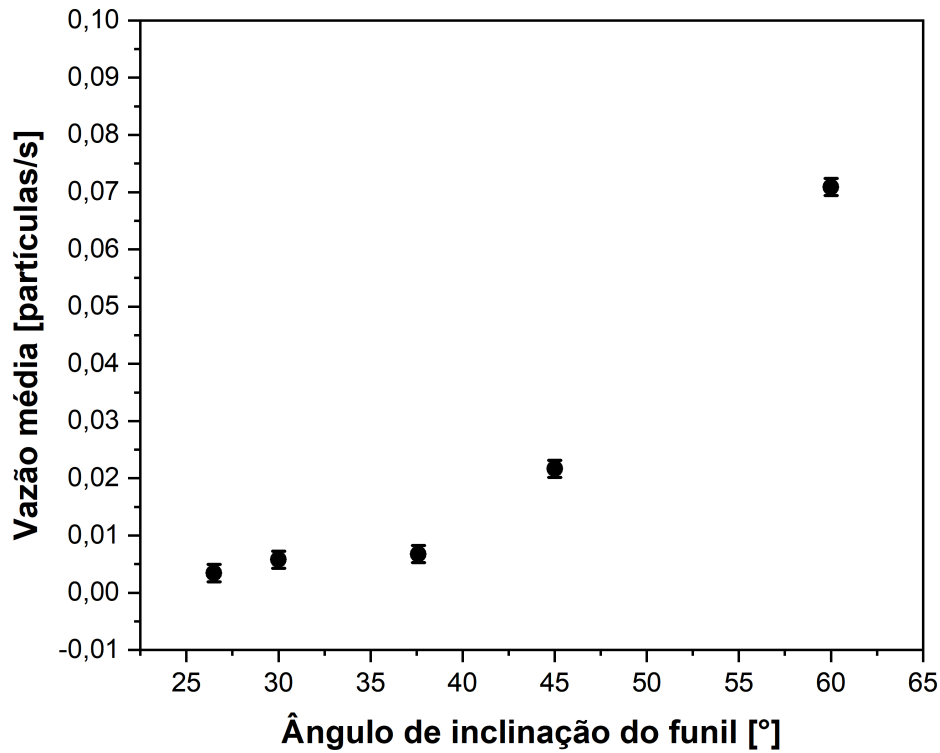


Figura 4.6: Vazão média em função do ângulo de abertura do funil. As barras de erros estão posicionadas diretamente sobre os pontos do gráfico. Fonte: Elaborado pela autora.

Do ponto de vista físico, dá pra entender esse resultado pela redução do atrito efetivo e pela menor chance de entupimento conforme o ângulo cresce. Com inclinações maiores, a força que empurra as partículas contra as paredes diminui, o que facilita o movimento. Além disso, ângulos mais inclinados dificultam a formação de estruturas estáveis que costumam causar bloqueios.



# **Parte V**

## **Conclusão**



## 5. Conclusão

Este trabalho teve como principal objetivo investigar, por meio de simulações computacionais, as condições que favorecem o escoamento estável de partículas em silos, com ênfase em dois parâmetros fundamentais: a razão entre o diâmetro do orifício de saída e o diâmetro das partículas ( $D/d$ ) e o ângulo de inclinação do funil. Ao longo da pesquisa, buscou-se compreender como variações nesses parâmetros podem afetar a transição entre os diferentes regimes de fluxo (contínuo, intermitente e bloqueado), fenômenos de grande relevância tanto na física de sistemas granulares quanto em aplicações industriais.

Os resultados das simulações mostraram que o escoamento granular tende a não responder de maneira linear a alterações no tamanho das partículas e alterações nas condições geométricas. No caso da razão  $D/d$ , observou-se que valores muito baixos resultam em fluxo menor, devido a limitações causadas pelo tamanho das partículas e pelo aumento da colisão com as paredes do silo. Por outro lado, valores muito altos de  $D/d$  também levaram à redução do fluxo, que pode ocorrer devido ao aumento das forças coesivas entre partículas pequenas, como as forças de van der Waals, que favorecem a aglomeração e dificultam o movimento individual das partículas. Entre esses dois extremos, foi identificada uma faixa crítica, com um valor de  $D/d$  no qual a vazão média parece atingir um ponto máximo, indicando um regime de escoamento ideal.

O estudo da inclinação das paredes do funil mostrou que ângulos muito pequenos aumentam o atrito entre partículas e paredes, reduzindo a fluidez e favorecendo a diminuição do fluxo. À medida que o ângulo de inclinação aumenta, a componente da força gravitacional se intensifica, promovendo maior mobilidade. É esperado que em certo momento essa vazão estabilize, entretanto, são necessários mais pontos entre  $60^\circ$  e  $90^\circ$  para poder entender como o sistema se comporta em ângulos maiores até um momento em que estarão, praticamente, em queda livre. Esse comportamento indica a existência de uma faixa angular ideal, tal como observado para a razão  $D/d$ , consolidando a ideia de que o escoamento granular é regido por condições críticas que maximizam sua eficiência.

Outro aspecto relevante discutido neste trabalho foi a influência da quantidade de partículas no sistema. Como demonstrado, simulações com colunas mais baixas de material apresentaram uma fluidez artificialmente maior, o que pode ser atribuído à menor pressão sobre o orifício e à menor compactação das partículas. Esse achado reforça a necessidade de considerar não apenas a geometria do silo, mas também as condições iniciais do sistema ao interpretar os dados de escoamento. A comparação entre os dados obtidos nas simulações e os resultados previamente adquiridos durante a iniciação científica da autora serviu como validação do modelo utilizado. Em ambos os casos, verificou-se que um sistema com uma grande quantidade de partículas pequenas apresenta uma vazão menor.

Por fim, os resultados obtidos têm aplicação direta no dimensionamento de silos industriais e em processos que envolvem materiais particulados. O conhecimento das condições geométricas que favorecem ou dificultam o escoamento pode ser decisivo para evitar entupimentos e otimizar fluxos, tanto em escala macroscópica quanto em contextos como a manufatura aditiva. Assim, a metodologia de simulação por elementos discretos mostrou-se eficaz para a análise de sistemas complexos e pode ser expandida para incluir outros fatores, como forma das partículas, umidade e efeitos térmicos.

## **Parte VI**

### **Referências**



# Referências Bibliográficas

- 1 LÓPEZ-RODRÍGUEZ, D. et al. Effect of hopper angle on granular clogging. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 99, p. 032901, Mar 2019.
- 2 MATWEB: Material Property Data. <<https://www.matweb.com>>.
- 3 JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 68, p. 1259–1273, Oct 1996.
- 4 DAI, L. et al. Discrete element simulation of powder flow in revolution powder analyser: Effects of shape factor, friction and adhesion. *Powder Technology*, v. 408, p. 117790, 2022. ISSN 0032-5910.
- 5 DURAN, J.; BEHRINGER, R. Sands, powders, and grains: An introduction to the physics of granular materials. *Physics Today*, v. 54, 04 2001.
- 6 (TST), T. S. do T. *Mortes em espaços confinados: o arriscado trabalho em silos de armazenamento*. 2025. Acessado em: 5 jun. 2025. Disponível em: <<https://www.tst.jus.br/-/mortes-em-espacos-confinados-o-arriscado-trabalho-em-silos-de-armazenamento>>.
- 7 KUNTE, A.; DOSHI, P.; ORPE, A. Spontaneous jamming and unjamming in a hopper with multiple exit orifices. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, v. 90, 08 2014.
- 8 BEVERLOO, W.; LENIGER, H.; VELDE, J. van de. The flow of granular solids through orifices. *Chemical Engineering Science*, v. 15, n. 3, p. 260–269, 1961. ISSN 0009-2509.
- 9 LAI, P.-Y.; PAK, H.; TO, K. Jamming of granular flow in a two-dimensional hopper. *Physical Review Letters*, v. 86, 02 2001.
- 10 AI, J. et al. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technology*, v. 206, n. 3, p. 269–282, 2011. ISSN 0032-5910.
- 11 LANGSTON, P.; TüZÜN, U.; HEYES, D. Discrete element simulation of granular flow in 2d and 3d hoppers: Dependence of discharge rate and wall stress on particle interactions. *Chemical Engineering Science*, v. 50, n. 6, p. 967–987, 1995. ISSN 0009-2509.
- 12 THOMPSON, A. P. et al. Lammmps - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Comp. Phys. Comm.*, v. 271, p. 108171, 2022.
- 13 MA, Y. et al. Numerical simulation of the effect of fine fraction on the flowability of powders in additive manufacturing. *Powder Technology*, v. 360, p. 608–621, 2020. ISSN 0032-5910.
- 14 BAITIMEROV, R. et al. Influence of powder characteristics on processability of alsi12 alloy fabricated by selective laser melting. *Materials*, v. 11, p. 742, 05 2018.
- 15 NEDDERMAN, R. M. *Statics and Kinematics of Granular Materials*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1992.

- 16 MANKOC, C. et al. The flow rate of granular materials through an orifice. *Granular Matter*, v. 9, p. 407–414, 2007.
- 17 JANDA, A.; ZURIGUEL, I.; MAZA, D. Flow rate of particles through apertures obtained from self-similar density and velocity profiles. *Physical Review Letters*, v. 108, n. 24, p. 248001, 2012.
- 18 CHOI, J.; KUDROLLI, A.; BAZANT, M. Velocity profile of granular flows inside silos and hoppers. *Journal of Physics Condensed Matter*, v. 17, 02 2005.
- 19 MARCHETTI, L.; MELLIN, P.; HULME, C. N. Negative impact of humidity on the flowability of steel powders. *Particulate Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 40, n. 6, p. 722–736, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/02726351.2021.1995091>>.
- 20 FANG, W. et al. Clogging transition of granular flow in porous structures. *Phys. Rev. Res.*, American Physical Society, v. 6, p. 033046, Jul 2024.
- 21 GÄRTNER, E. et al. Reducing cohesion of metal powders for additive manufacturing by nanoparticle dry-coating. *Powder Technology*, v. 379, 10 2020.
- 22 ZHANG, H.; MAKSE, H. Jamming transition in emulsions and granular materials. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, v. 72, n. 1 Pt 1, p. 011301, July 2005. ISSN 1539-3755.
- 23 CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, v. 29, p. 47–65, 1979.
- 24 SWOPE, W. C. et al. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters. *The Journal of Chemical Physics*, v. 76, n. 1, p. 637–649, 1982.
- 25 BRILLIANTOV, N. V. et al. Model for collisions in granular gases. *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*, v. 53 5, p. 5382–5392, 1996.
- 26 SILBERT LEO, E. D. G. G. S. H. T. C. L. D.; PLIMPTON, S. J. Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology. *Physical review*, v. 64, 2001.
- 27 DAI, L. et al. Characterizing the intrinsic properties of powder – a combined discrete element analysis and hall flowmeter testing study. *Advanced Powder Technology*, v. 32, n. 1, p. 80–87, 2021. ISSN 0921-8831.
- 28 ZURIGUEL, I. et al. Clogging transition of many-particle systems flowing through bottlenecks. *Scientific Reports*, v. 4, p. 7324, 2014.

## **Parte VII**

### **Apêndices**



# Apêndice A - Código utilizado neste trabalho

```
# informações gerais da simulacao #

atom_style      sphere
boundary        p p p
units           si
newton          off
comm_modify     mode single group all vel yes

variable        pi equal 3.14159
variable        seed equal 2213

# variáveis do sistema #

variable        dt equal 1e-6
variable        tfill equal 10/{dt}
variable        trun equal 50/{dt}

# partículas #

variable        N equal 40000
variable        diametro equal 0.05
variable        r equal {diametro}/2
variable        densidade equal 3000
variable        massa equal 4*{pi}*{densidade}*{diametro}/3

# parâmetros de geometria #
# caixa de simulação (caixa total do sistema) #

variable        xlo equal -5.1
variable        xhi equal 5.1
variable        ylo equal -5.1
variable        yhi equal 5.1
variable        zlo equal -10.1
variable        zhi equal 15.1

# parametros da caixa de simulacao #

region          reg block {xlo} {xhi} {ylo} {yhi} {zlo} {zhi} units box
create_box      1 reg
neighbor        0.0755 bin

# Geometria dos envoltorios #

region          powder cylinder z {xc} {yc} {raio maior} {z powder menor} {z powder maior} units box
region          cylreg cylinder z {xc} {yc} {raio maior} {z con maior} {z cilindro} open 1 units box
region          conereg cone z {xc} {yc} {raio menor} {raio maior} {z con menor} {z con maior} open 1 open 2 units box
region          regfunil union 2 conereg cylreg
region          saida cylinder z {xc} {yc} {raio menor} {z saida menor} {z saida maior} units box
region          chao plane 0 0 -10 0 0 1 units box
region          regtampa plane 0 0 -0.1 0 0 1 units box

# integrador #

timestep        {dt}
fix             integrador all nve/sphere
fix             g all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0

# cria o pó (partículas) e define a interacao entre as partículas #
group           saida_grupo dynamic all region saida

fix             ins all pour $N 1 {seed} region powder &
               diam one {diametro} dens {densidade} {densidade}

compute         num_saida saida_grupo property/atom type
compute         count_saida saida_grupo reduce sum c_num_saida
variable        num_saida equal c_count_saida

variable        timestepsaida equal step
fix             monitor_saida all print 200000 "{timestepsaida} {num_saida}" file Grafico_ICC_20.txt screen no
```

```

variable      xc equal 0.
variable      yc equal 0.

# silo #

variable      zconemaior equal 0.
variable      zconemenor equal -0.1
variable      zcilindro equal 15.
variable      raio menor equal 0.5
variable      raio maior equal 5.
variable      htampa equal -1.5
variable      zchaomaior equal -9.
variable      zchaomenor equal -10.
variable      raiochao equal 2.55

# região de contagem da avalanche #

variable      zpowdermaior equal 14.
variable      zpowdermenor equal 5.
variable      zsaidamaior equal -1.
variable      zsaidamenor equal -5.

# propriedade do material #

variable      meff equal sqrt( ${massa} ${massa} / ( ${massa} + ${massa} ) )
variable      EYoung equal 71e6
variable      Poisson equal 0.33
variable      coeffFric equal 76
variable      coeffRes equal 130
variable      GShear equal ${EYoung} / ( 2 * ( 1 + ${Poisson} ) )
variable      kn equal 4.0 * ${GShear} / ( 3 * ( 1 - ${Poisson} ) )
variable      kt equal 4.0 * ${GShear} / ( 2 - ${Poisson} )
variable      gamma_n equal 1e1 * sqrt( 4 * ${meff} * ${kn} / ( 1 + ( ${pi} / log( ${coeffFric} ) ) ^ 2 ) )
variable      gamma_t equal ${gamma_n} * 0.5

# potencial de interacao #

pair_style    gran/hertz/history ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1
pair_coeff    * *

# cria os envoltorios #

fix          funil all wall/gran/region hertz/history ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region regfunil
fix          tampa all wall/gran/region hertz/history ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region regtampa
fix          chao all wall/gran/region hertz/history ${kn} ${kt} ${gamma_n} ${gamma_t} ${coeffFric} 1 region chao

# parametros de outputs #

thermo       100000
thermo_modify flush yes lost warn
compute      1 all coord/atom cutoff ${r}
compute      2 all ke/atom

thermo_style custom step cpu atoms density

# variable      v equal vx*vx+vy*vy+vz*vz

dump         dump all custom 200000 TCC_20.dump id radius x y z c_1 c_2 vx vy vz fx fy fz

# Run simulation #
# preenchimento #

run          ${tfill}

# abertura da tampa #

unfix       tampa
run         ${trun}

```