



UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
ESCOLA DE MINAS
COLEGIADO DO CURSO DE ENGENHARIA DE CONTROLE E
AUTOMAÇÃO - CECAU



GABRIEL CARVALHO MATOSO

SIMULAÇÃO DE FLUXO DE MICROPARTÍCULAS E PARTÍCULAS
MACROSCÓPICAS.

MONOGRAFIA DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE CONTROLE E
AUTOMAÇÃO

Ouro Preto, 2022

GABRIEL CARVALHO MATOSO

**SIMULAÇÃO DE FLUXO DE MICROPARTÍCULAS E PARTÍCULAS
MACROSCÓPICAS.**

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Controle e Automação da Universidade Federal de Ouro Preto como parte dos requisitos para a obtenção do Grau de Engenheiro de Controle e Automação.

Orientador: Prof. Adrielle de Carvalho Santana, Ph.D.

Coorientador: Mateus Coelho Silva, M.Sc.

**Ouro Preto
Escola de Minas – UFOP
2022**

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

M433s Matoso, Gabriel Carvalho.

Simulação de fluxo de micropartículas e partículas macroscópicas.
[manuscrito] / Gabriel Carvalho Matoso. - 2022.
36 f.: il.: color., gráf..

Orientadora: Profa. Dra. Adrielle de Carvalho Santana.

Coorientador: Prof. Me. Mateus Coelho Silva.

Monografia (Bacharelado). Universidade Federal de Ouro Preto.
Escola de Minas. Graduação em Engenharia de Controle e Automação .

1. Simulação (Computadores). 2. Sistemas de computação. 3.
Simulação (Computadores) - Fluxo de micropartículas. 4. Simulação
(Computadores) - Fluxo de partículas macroscópicas. I. Santana, Adrielle
de Carvalho. II. Silva, Mateus Coelho. III. Universidade Federal de Ouro
Preto. IV. Título.

CDU 681.5

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
ESCOLA DE MINAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CONTROLE E
AUTOMACAO



FOLHA DE APROVAÇÃO

Gabriel Carvalho Matoso

Simulação de Fluxo de Micropartículas e Partículas Macroscópicas

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Controle e Automação da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Engenharia de Controle e Automação

Aprovada em 18 de Outubro de 2022

Membros da banca

Profa. Dra. Adrielle de Carvalho Santana – Orientadora (DECAT, UFOP)
M.Sc. Mateus Coelho Silva - Coorientador (PPGCC - UFOP)
MSc. Alexandre Candido Soares - Convidado (REDEMAT - UFOP/UEMG)
MSc. Yara Daniel Ribeiro - Convidada (REDEMAT - UFOP/UEMG)

Adrielle de Carvalho Santana, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 19/10/2022.



Documento assinado eletronicamente por **Adrielle de Carvalho Santana, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 19/10/2022, às 16:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0410829** e o código CRC **0E8274BD**.

*Este trabalho é dedicado a todos que me ajudaram nesta corrida,
que estiveram ao meu lado nos momentos de dificuldades,
e as fizeram menores, para que eu conseguisse concluir este ciclo em paz.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço à todos e todas que estiveram ao meu lado nesta importante etapa da minha história, seu mérito é cravado e reconhecido ao longo deste trabalho e que sua importância esteja presente em cada vírgula que pontua este trabalho.

Um agradecimento especial aqueles que fizeram esta trajetória a melhor o possível e estiveram ao meu lado durante o percurso, agradeço aos amigos de sempre, Filtro, Hugo, Igor, Gustavo, Apu e Bruno (in memoriam), por todas as aventuras que tivemos e por terem sido a alegria presente em todos os momentos da minha vida, sem vocês eu não teria forças.

Aos amigos que tive a honra de conhecer enquanto em Ouro Preto, Fred e Felipe, obrigado por me acompanharem durante todos problemas que sozinho eu não soube lidar, e só vocês souberam como solucionar, obrigado pela paciência comigo.

Agradeço a Mayumi por ter estado ao meu lado durante todas as dificuldades ao longo do meu percurso na faculdade, só você viu as noites viradas estudando e todo esforço que foi feito para que isso fosse possível, obrigado por ter visto de perto meu desespero e conseguir reconfortá-lo.

A Pedro meu irmão e a minha vó Gelva que cuidaram e se preocuparam comigo como um filho, não tenho como retribuir a vocês tudo que me foi ensinado e fornecido, vocês são a razão de eu ter saído desta jornada vitorioso.

E principalmente agradeço aos meus pais Sinara, Péricles e Nem (in memoriam), sem vocês, nada disso existiria, seu apoio incondicional fez tudo ser possível.

”O homem não teria alcançado o possível se, repetidas vezes, não tivesse tentado o impossível.”
- (Max Weber)

RESUMO

Sistemas granulares apresentam comportamentos não previstos na mecânica de fluídos ou na mecânica de sólidos. Muito embora no passado tenham sido tratados num ou noutro campo, nas últimas décadas desenvolveu-se todo um novo campo teórico visando analisar fenômenos que eram conhecidos, mas não bem descritos na literatura. No Movimento em Silos, diversas situações podem ocorrer. Um exemplo bastante curioso e muito conhecido é o escoamento de grãos numa ampulheta. Ao contrário dos líquidos, a pressão nas paredes não é proporcional à altura. Ao escoar, os grãos podem formar arcos de tensão, bloqueando o fluxo. Fluxo de grãos em silos é um tema de interesse de diversos setores da economia. Como os silos de grãos na agroindústria, passando por minérios na mineração ao fluxo de carvão para a siderurgia. As características do fluxo dos grãos dependem de vários fatores, desde seu formato até suas propriedades mecânicas. Como um sistema granular não é um contínuo, sua descrição por meio de simulação computacional é bastante adequada. Dada essa importância, diversas plataformas comerciais foram desenvolvidas nos últimos anos, com licenças onerosas. Contudo, existem soluções baseadas no método de elementos discretos, capazes de realizar simulações de grande porte. Assim, um problema encontrado para realização simulações eficientes é o desenvolvimento de rotinas adequadas que façam a customização das características necessárias à simulação, bem como possam garantir a paralelização desses softwares. O presente projeto tem por objetivo simular o fluxo de partículas. O trabalho é separado em duas etapas, a primeira utiliza a simulação do potencial de Lennard-Jones (LJ), a segunda etapa simula o escoamento de grãos de areia em um silo. Para tal, são desenvolvidas rotinas para uso em plataformas baseadas no método de elementos discretos - DEM. O foco principal do trabalho é a customização de rotinas com variação de parâmetros típicos dos grãos para aplicações típicas em mineração e siderurgia. A linguagem de programação Python foi a ferramenta computacional escolhida para se resolver o problema. O resultado encontrado no estudo é de caráter quantitativo, donde tem-se como principal métrica o erro de truncamento.

Palavras-chaves: Sistemas granulares, escoamento, silos, partículas.

ABSTRACT

Granular systems exhibit behaviors not predicted in fluid mechanics or solid mechanics. Although in the past they have been treated in one field or another, in the last decades a whole new theoretical field has been developed aiming to analyze phenomena that were known, but not well described in the literature. In Silos Movement, several situations can occur. A very curious and well-known example is the flow of grains in an hourglass. Unlike liquids, pressure on walls is not proportional to height. When flowing, the grains can form tension arcs, blocking the flow. Grain flow in silos is a topic of interest to several sectors of the economy. Like the grain silos in the agro-industry, through ores in mining to the flow of coal to the steel industry. The grain flow characteristics depend on several factors, from its shape to its mechanical properties. As a granular system is not a continuum, its description through computer simulation is quite adequate. Given this importance, several commercial platforms have been developed in recent years, with onerous licenses. However, there are solutions based on the discrete element method, capable of performing large-scale simulations. Thus, a problem found to carry out efficient simulations is the development of adequate routines that customize the characteristics necessary for the simulation, as well as guarantee the parallelization of these softwares. The present project aims to simulate the flow of particles. The work is separated into two stages, the first uses the simulation of the Lennard-Jones (LJ) potential, the second stage simulates the flow of sand grains in a silo. To this end, routines are developed for use in platforms based on the discrete element method - DEM. The main focus of the work is the customization of routines with variation of typical parameters of the grains for typical applications in mining and steel. The Python programming language was the computational tool chosen to solve the problem. The result found in the study is of a quantitative nature, where the main metric is the truncation error.

Key-words: Granular systems, flow, silos, particles.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Silhueta genérica da curva do potencial LJ em sistema reduzido de dois átomos (Energia potencial (eixo vertical) vs Distância interatômica (eixo horizontal))	20
Figura 2 – Janela aberta após a execução da rotina de simulação do potencial LJ	22
Figura 3 – Janela de comandos do YADE no tempo = 0s	23
Figura 4 – Gráfico de energias internas do sistema no tempo = 0s	24
Figura 5 – Janela de visualização da simulação do fluxo de grãos no tempo = 0s	24
Figura 6 – Janela de visualização da simulação do fluxo de grãos no tempo > 0s	25
Figura 7 – Janela de visualização da simulação do fluxo de grãos no tempo final	26
Figura 8 – Gráfico de energias internas do sistema no tempo final	26

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

DEM	<i>Discrete Element Method</i>
FEM	<i>Finite Element Method</i>
YADE	<i>Yet Another Dynamic Engine</i>
LJ	Lennard-Jones
SSH	<i>Secure SHell</i>
DM	Dinâmica Molecular
vs	<i>Versus</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

$V(r)$	Energia potencial de Lennard-Jones dependente de r
$F(r)$	Força de Lennard-Jones dependente de r
σ	Parâmetro sigma do átomo analisado
ϵ	Parâmetro épsilon do átomo analisado
β	Coefficiente de amortecimento do sistema
r	Raio entre os átomos do sistema
\hat{r}	Versor na direção de r
∇	Derivada primeira direcional de uma função
i	Índice da i -ésima partícula do sistema
n	Número total de partículas do sistema
E	Energia mecânica do sistema
K	Energia cinética do sistema
U_g	Energia potencial gravitacional do sistema
U_d	Energia dissipativa de amortecimento não viscoso
U_p	Energia dissipativa plástica
m_i	Massa da partícula i
h_i	Altura da partícula i
v_i	Velocidade da partícula i

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	Contextualização	13
1.2	Objetivos	16
1.3	Estrutura do trabalho	16
2	REVISÃO DA LITERATURA	17
2.1	Referencial teórico	17
3	DESENVOLVIMENTO	19
3.1	Metodologia	19
3.1.1	<i>Materials</i>	19
3.2	Procedimento de análise do potencial Lennard-Jones (LJ)	20
3.3	Método de análise da simulação do escoamento de grãos de areia	21
4	RESULTADOS	22
4.1	Simulação via Dinâmica Molecular de interações entre partículas definida pelo potencial de Lennard-Jones	22
4.2	Fluxo de grãos em silo para análise da transformação das energias ao longo da trajetória	23
5	CONCLUSÃO	29
5.1	Trabalhos futuros	29
	REFERÊNCIAS	31
	APÊNDICE A – CÓDIGO DO POTENCIAL LJ	33
	APÊNDICE B – CÓDIGO DA SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DE GRÃOS DE AREIA EM SILO	36

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização

Talvez as primeiras discussões retomando o estudo de um assunto deixado de lado por décadas se deram a partir do famoso trabalho sobre a pilha de areia. Do estudo sobre estabilidade e avalanches numa pilha de grãos, criou-se toda uma teoria que mobilizou parte importante da comunidade de Física Estatística (BAK; TANG; WIESENFELD, 1987). A partir desse primeiro trabalho, muitos grupos começaram a se interessar pela dinâmica de sistemas granulares.

Os materiais granulares são aglomerados de partículas sólidas onde a interação de uma partícula com suas vizinhas ocorre por meio da força de contato. Apesar de que em muitos casos esses grãos serem diminutos, são muito grandes para serem tratados como flutuações termodinâmicas. Os sistemas granulares são sistemas muito longe do equilíbrio termodinâmico. Assim, o tratamento destes deve ser adequadamente feito por meio dos métodos de simulação computacional. (GERVOIS; BIDEAU, 1993)

Exemplos comuns de materiais granulares são areia, sementes, brita e cimento. Esses materiais estão presentes em diversas áreas industriais, da agroindústria aos produtos farmacêuticos, da geologia à mineração e siderurgia Valença e Frota (2011). Materiais granulares são utilizados em propelentes sólidos. Por isso, seu comportamento é estudado por vários grupos de pesquisa em todo o mundo todo, tanto para a pesquisa básica, quanto para as ciências aplicadas e as engenharias. Sistemas granulares apresentam comportamentos bastante interessantes e cuja explicação não encontrava base seja na Mecânica de Fluidos ou na Mecânica do Contínuo.

Vibrações e cisalhamento levam a movimentos convectivos e segregação. Variações de tensão podem causar a formação de cadeias de tensão. Fenômenos curiosos começaram a atrair a atenção dos físicos, como a emergência de grãos de grande tamanho dentro de recipientes com grãos pequenos, a formação de ondas de densidade em canos, estratificação e segregação de grãos de diferentes tipos (SILVA; BERNARDES, 2010).

Segundo Silva e Bernardes (2010), um grande número de estudos experimentais em sistemas granulares começou a ser realizado na década de '90 como estudos quantitativos de compactação, mistura, segregação e padrões formados devido a vibrações. Foram descobertos vários mecanismos (percolação, convecção, inércia, etc) para a segregação de grãos dissimilares; diversos tipos de padrões de ondas estacionárias (listras, hexágonos e defeitos, ondas desordenadas, agrupamentos de excitações localizadas, etc) em camadas de grãos colocados para vibrar; cadeias de tensão altamente não homogêneas e localizadas em meios granulares quase estáticos. Em resumo, esses experimentos em meios granulares revelaram padrões complexos de escoamento similares aos observados em fluidos normais, mas, também, aglomeração, congelamento, plasticidade e histerese.

Um material granular é dito seco quando há um gás contido nos espaços vazios entre os grãos. Por outro lado, quando esses grãos estão completamente ou parcialmente imersos num líquido, o material granular é chamado de molhado. Há Diferenças essenciais nas abordagens de granulares secos ou molhados. No primeiro tipo ocorre apenas uma força de contato repulsiva, dada a tensão elástica entre os grãos. Já no segundo caso, caso haja líquido suficiente entre os grãos, a tensão superficial líquido causa uma força atrativa entre as partículas mesmo que elas não estejam em contato umas com as outras (LIAN; THORNTON; ADAMS, 1993).

Saliente-se que compreender o comportamento de sistemas granulares é fundamental para melhor se entender os fenômenos de liquefação, fenômenos estes responsáveis por desastres recentes em barragens de minérios em Minas Gerais. O tratamento inadequado da mistura de grãos presente nas barragens pode ser a causa principal da ruptura das barragens, conforme assinalado por Silva e Bernardes (2010). Este cita o trabalho de AMANN e MASSAD (2000), que numa dissertação de mestrado defendida na UFOP já assinalava essa possibilidade.

Muitas vezes o comportamento de sistemas granulares é comparado ao de sólidos ou líquidos. Contudo, nem sempre é possível prever o seu comportamento tendo por base experimentos com o estudo dos fluidos ou dos sólidos comuns. Um exemplo claro disso é o que acontece no mais antigo relógio que conhecemos: a ampulheta. Quando a areia escoar por um funil sob ação da gravidade é possível constatar que o fluxo de grãos que passa pelo orifício é constante no tempo, comportamento diferente quando comparado a um líquido comum. Jaeger e Nagel (1992) mostraram que para um material granular esse fluxo é independente da altura da coluna de grãos acima da região de escoamento.

Além disso, vale destacar que o volume ocupado por um material granular pode sofrer variações e isso pode ser verificado facilmente no dia a dia. Por exemplo, para guardar qualquer alimento em grãos é comum as pessoas agitarem o recipiente a fim de obter espaço para caber o máximo de alimento possível. Assim, um material granular não possui só um valor de densidade, mas uma faixa de valores. De acordo com Fullard et al. (2019), onde neste trabalho simulam grãos escoando em um silo com duas aberturas seus resultados são comparados com simulações físicas feitas com grãos de mostarda, percebe-se que o escoamento de grãos tem como relação de vínculo as propriedades dos grãos, onde o escoamento dos grãos de mostarda dependem de seu tamanho, densidade, atrito externo e outras propriedades físicas.

No grupo de pesquisa de propriedades de grãos do departamento de física e física de materiais da UFOP, tem-se buscado estudar a dinâmica de sistemas granulares em diferentes situações. Desde os problemas de empacotamento de grãos em situação de alta densidade Pinto et al. (2007), passando pelo fluxo de grãos em fornos MIDREX Silva (2010), até a formação de correções em estradas de terra Silva (2018). Para se ter uma ideia da atualidade do tema, a pesquisa por “*granular flow in silos*” no Google Acadêmico resultou em 2.290 trabalhos desde 2019.

O Brasil é o segundo maior exportador de minério de ferro do mundo, que é o terceiro

item de sua pauta de exportações, responsável por valores da ordem de R\$22 bilhões em 2019 (SILVA; DANEU; SANTOS, 2019). O Brasil também é o maior produtor de soja do mundo (*compete pari passu* com os EUA) e esse é o primeiro item da sua pauta de exportações, por fim o Brasil é um dos maiores produtores de aço do mundo, estando em oitavo lugar no ranking de produtores.

Assim, armazenamento e fluxo de grãos (aqui incluídos grãos de soja, de carvão ou pelotas de minério de ferro) têm importância estratégica para o país. Estudar os meios desse armazenamento e otimização de processos é fundamental. Os estudos são normalmente feitos em modelos físicos ou por meio de simulações, quando não combinando as duas abordagens, a fim de que os modelos físicos sejam usados para “calibrar” os modelos de simulação. Para uma visão abrangente sobre o tema, veja Tejchman (2013). Por outro lado, se estudar um sistema formado por elementos discretos, pode-se usar um modelo que trate desses elementos, como é o caso dos Autômatos Celulares ou o Método dos Elementos Discretos (DEM) ou a Dinâmica Molecular. Assim, ganhar conhecimento e autonomia no desenvolvimento de aplicações voltadas para a indústria de mineração e siderurgia, atuando sinergicamente com outros grupos de pesquisa na UFOP é de grande relevância.

Diversas classes de métodos computacionais podem ser referidas. A escolha tem mais a ver com a natureza do problema. Por exemplo, se têm-se de estudar o fluxo de calor em materiais contínuos, ou mesmo a propagação de tensões mecânicas, utiliza-se um método para solução de equações diferenciais, como o Método dos Elementos Finitos (FEM). O principal motivo da utilização de uma plataforma DEM e não uma FEM, se deve ao fato de que a FEM utiliza métodos finitos com aproximações de resultados tendendo a continuidade, e isso para um sistema consideravelmente grande pode tornar a simulação inviável, já as DEM, apesar de uma maior perda de informações, devido ao truncamento, ainda consegue apresentar bons resultados em tempo de execução extremamente mais viáveis (NITKA; TEJCHMAN et al., 2015).

Plataformas para simulação em *software* livre existem. O *software* YADE, utilizado no trabalho (disponível em <https://www.YADE-dem.org/doc/index.html>) é um exemplo dessas plataformas. A vantagem é que os códigos estão disponíveis e podem ser estudados, de forma inclusive a permitir que o usuário contribua com seu desenvolvimento. O presente trabalho é desenvolvido com YADE, dada a simplicidade de sua instalação e ao fato de que mais pesquisadores brasileiros estão usando-a.

Ainda segundo Nitka, Tejchman et al. (2015), as classes de plataformas de simulação que foram identificadas utilizam o Método de Elementos Discretos para a solução dos problemas. Muito similar à abordagem usada na Dinâmica Molecular, o método define as equações de movimento para um sistema formado por partículas. A cada uma delas é associada uma posição e velocidades, bem como as forças que nela atuam. As interações são de curto alcance e só se produzem pelo contato entre as partículas. No presente caso, apenas existem forças elásticas produzidas pela compressão e forças de atrito entre as partículas. Partículas que não se tocam

não interagem entre si para o caso de grãos, diferentemente dos átomos e moléculas.

Com isso, o presente trabalho pretende demonstrar com base em simulações computacionais a possibilidade de entendimento do problema real sem a necessidade da montagem de um sistema real, em primeira etapa demonstrando em nível superficial a interação de um sistema subatômico e em segunda etapa o fluxo de grãos macroscópicos em um silo.

1.2 Objetivos

Esse trabalho tem como objetivo geral:

- Elaborar um sistema de simulação de fluxo de micropartículas (átomos), utilizando o potencial de Lennard-Jones (LJ) e o fluxo de grãos em silos utilizando rotinas em Python.

Esse trabalho tem como objetivos específicos:

- Desenvolver rotinas de programação utilizando o *software* YADE;
- Selecionar parâmetros que descrevem partículas de areia, de particular interesse para a indústria de mineração.
- Desenvolver estudos preliminares para simulação de processos de liquefação.

1.3 Estrutura do trabalho

Este trabalho está desenvolvido em cinco capítulos, tendo como base a apresentação do objetivo e o método para elaboração do sistema de simulação de escoamento de grãos em silos. No capítulo 1, é apresentada uma breve introdução a respeito do processo de caracterização mineral e sua importância. Além disso, tem-se a enumeração dos objetivos e é indicada a estrutura do trabalho. Em seguida, no capítulo 2, é realizada a revisão bibliográfica acerca do tema estudado, objetivando o levantamento e o entendimento dos materiais e dos métodos a serem utilizados no projeto, assim como o sistema computacional. No capítulo 3 apresenta-se o processo metodológico adotado na pesquisa, bem como a implementação do sistema, montagens e esquemas. No capítulo 4, discute-se os resultados encontrados, analisa-os e compara-os com o objetivo traçado. Por fim, o capítulo 5 apresenta a conclusão do trabalho e as recomendações para trabalhos futuros.

Todos os códigos implementados para a realização do trabalho podem ser encontrados nos apêndices ao final do texto.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo tem por finalidade, apresentar uma revisão dos conceitos e técnicas referentes a simulação computacional de sistemas de partículas, sejam elas microscópicas ou macroscópicas e a linguagem utilizada para sua programação.

2.1 Referencial teórico

Em seu trabalho [Silva e Bernardes \(2018\)](#) dizem que a simulação de problemas reais, utilizando algoritmos e programação, tem grande importância na atualidade, pois pode poupar uma parcela dos gastos operacionais, uma vez que pode se ter uma noção do resultado que será encontrado antes que o processo seja executado.

A Dinâmica molecular (DM) é uma forma de simulação computacional cujo foco principal é o estudo do comportamento de um sistema de partículas em função do tempo. Assim, por meio da integração das equações de movimento para um sistema, determinam-se as propriedades de equilíbrio ou de transporte que o caracterizam ([COLUCI; VAZ, 2007](#)).

Dentro da DM, segundo [Chiquito e Almeida \(1999\)](#) têm-se diferentes formatos de sistemas a serem observados. No trabalho em questão a escolha de um sistema microscópico e um sistema macroscópico se deve a possibilidade de observação da mudança de resultados conforme a dimensão do problema analisado.

As particularidades do comportamento de materiais granulares se devem a dois fatores importantes. O fato da temperatura não ter influência, logo argumentos termodinâmicos não são considerados, e, em segundo lugar, as interações entre os grãos são dissipativas devido ao atrito estático e à inelasticidade das colisões ([JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996](#)).

Sabe-se que métodos de simulação computacional começaram a ser largamente utilizados a partir da década de 60, 70, quando obviamente tornaram-se disponíveis equipamentos com maior capacidade de cálculo. É interessante notar que o algoritmo Metrópoles para o método de Monte Carlo foi introduzido em 1953 ([SILVA; BERNARDES, 2010](#)).

Desde o início da utilização da simulação computacional para representar problemas do mundo real existe a tentativa de aproximar ao máximo os valores obtidos em experimentos dos valores simulados, mas uma dificuldade que não deixa de existir é chamada de erro de truncamento. Segundo [Takeda e Morcelli \(2012\)](#) trata-se de um erro decorrente do uso de processos que, em teoria, são infinitos ou muito grandes para determinar o valor, que se torna pequeno devido ao método aproximado usado para calcular uma função exata, ou seja, é aquele erro causado devido ao fato de um computador nunca ter poder computacional para processar casas decimais suficientes para representar problemas reais. Este processo sem fim é muito

visível em funções matemáticas como exponenciação, logaritmos e funções trigonométricas que podem ser utilizadas para encontrar resultados durante as simulações.

A simulação de fluxo de grãos em silos não é recente. [Silva e Bernardes \(2010\)](#) simularam o fluxo de pelotas de minério de ferro em um forno MIDREX. Em seu trabalho podem ser encontradas referências mais antigas de simulação de grãos em silos. Mais recentemente, o método dos elementos discretos (DEM) foi usado para simular o fluxo de minério ([LOPES, 2015](#)). Trabalhos recentes, utilizando DEM, mostram a importância desse tipo de abordagem. Segundo [Calazans et al. \(2020\)](#), a correlação entre o microscópico e o macroscópico se dá no ponto de que todos seguem as mesmas leis da física, porém quando se lida com sistemas infinitamente pequenos, percebe-se que devido às distâncias entre as partículas serem extremamente pequenas, o movimento de uma interfere no das outras e o contrário também é válido. Já em sistemas macroscópicos, estes tipos de problemas apenas existem quando temos a colisão entre as partículas do sistema.

Parte dos trabalhos de simulação usam métodos de elementos discretos, pois esses métodos permitem abordagens mais realistas e ajustes de parâmetros mais próximos da realidade, podendo assim trazer mais informações para os processos industriais. As referências aqui citadas são um exemplo disso. Diversas plataformas de simulação estão disponíveis no mercado, mas seu custo, em geral, é muito alto. Assim, os trabalhos de pesquisa têm usado licenças com restrições de tamanho de sistemas, disponíveis para estudantes ou restritas ao uso acadêmico. A dificuldade é que para simulações mais realistas são necessários sistemas com milhões ou bilhões de partículas ([NITKA; TEJCHMAN et al., 2015](#)).

3 DESENVOLVIMENTO

3.1 Metodologia

Na metodologia adotada para a execução do trabalho, foram desenvolvidas as seguintes ações: Aprendizado de linguagem Python instalação da plataforma YADE. Estudos das principais diretrizes e características do programa. Simulação de geometrias simples. Simulação utilizando parâmetros de sistemas descobertos na área siderúrgica e mineralógica. Estudo de casos típicos, onde para o sistema microscópico visualizou-se a interação genérica de um potencial LJ e para o sistema macroscópico, os parâmetros selecionados foi o de grãos de areia seca. Simulação de geometrias não homogêneas e de partículas não uniformes, onde se teve na simulação macroscópica grãos de diferentes tamanhos, variando conforme uma distribuição aleatória em uma *range* predeterminada. Estudo de um caso típico onde a queda dos grãos tendem a formar uma pilha estática ao final da conversão da energia parcial do sistema.

3.1.1 Materiais

No presente projeto, foi utilizada como plataforma o YADE. As rotinas para customização da plataforma YADE são desenvolvidas em Python. Tem-se no departamento de física da UFOP computadores que foram utilizados para realização de parte das simulações, acessados via SSH, com capacidade de processamento que permitem a simulação de sistemas com dezenas de milhões de partículas em tempo reduzido que durante o desenvolvimento deste trabalho ainda está em execução, rodando uma simulação com número muito superior ao apresentado, o que permite uma visão realística dos problemas considerados.

Outro ponto importante para o desenvolvimento do trabalho, foi a interação com o sistema operacional Linux, no caso o Xubuntu versão 18.04 (bionic). Esse tipo de interação foi necessária no ponto de que a plataforma de simulação utilizada YADE, apenas é disponível para sistemas operacionais UNIX. Grande parte dos procedimentos foram realizados e executados em um notebook Samsung book, com processador Intel Core i3 7th geração com arquitetura x86 com quatro núcleos de processamento sem presença de unidade gráfica de processamento exclusiva. Dentre os aprendizados, o contato com o SSH, protocolo de redes de sistemas linux, foi importante para execução do projeto, onde com o acesso a este, se pôde acessar dados de outros colegas que participaram do projeto, nas máquinas do departamento de física, compartilhadas entre os discentes presentes no projeto, para usá-los como exemplo; e também utilizar as máquinas para que se pudesse executar remotamente grandes simulações com o YADE, como supracitado.

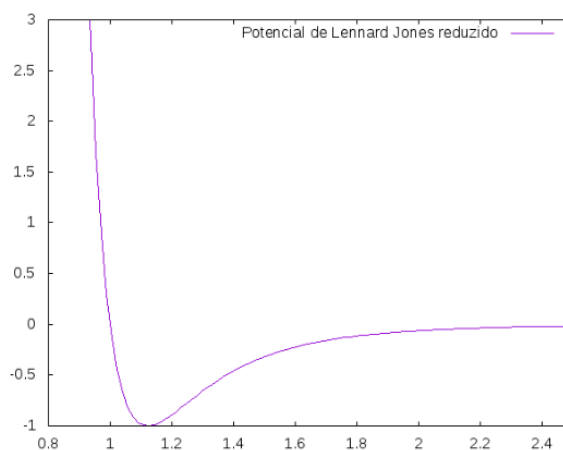
3.2 Procedimento de análise do potencial Lennard-Jones (LJ)

O potencial de LJ é regido pela seguinte equação que está presente nos códigos programados para regerem o fluxo da simulação, conforme a Eq. 3.1:

$$V(r) = 4.\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.1)$$

Onde para um sistema com dois átomos, têm-se a seguinte representação gráfica deste potencial conforme a Fig. 1.

Figura 1 – Silhueta genérica da curva do potencial LJ em sistema reduzido de dois átomos (Energia potencial (eixo vertical) vs Distância interatômica (eixo horizontal))



Fonte: (FRENKEL; SMIT, 2001)

Como se pode ver na Fig. 1, o poço de potencial, se encontra aproximadamente em 1.1 no eixo horizontal, onde antes deste ponto, tem-se a derivada negativa, representando a força de repulsão, e após o ponto, se tem a primeira derivada positiva, representando a força de atração, com a interação entre as partículas sempre tendendo a oscilar em torno do poço, principalmente devido ao fato de que a simulação se trata de uma simulação não dissipativa, onde a energia total do sistema será conservada.

Para que as partículas se movimentem, deve-se observar que é necessário a existência de uma força para que o sistema altere sempre seu estado de movimento, e esta força é fácil de se encontrar por meio do potencial LJ, onde o simétrico negativo de sua derivada primeira em relação a posição equivale a força de interação entre as moléculas, conforme a Eq. 3.2:

$$F(r) = -\nabla V(r) = -\frac{d}{dr}V(r)\hat{r} = 4\epsilon \left(12 \frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - 6 \frac{\sigma^6}{r^7} \right) \hat{r} \quad (3.2)$$

Onde existe a possibilidade de variar os parâmetros base encontrados na simulação, apenas alterando o código do programa, alterando, assim, a visualização de interações de átomos

de diferentes configurações, que apenas diferem nos parâmetros σ e ϵ das equações de LJ.

O procedimento de análise do potencial LJ, a primeira parcela do trabalho, onde se desejava visualizar a interação interatômica, foi apenas de senso crítico, pois a ausência de uma métrica para dizer se o problema estava próximo ou distante do desejado afetou uma análise quantitativa da acurácia da simulação.

A única métrica possível a ser observada na simulação do potencial LJ é o valor das energias cinéticas e potenciais que variam ao longo da execução do algoritmo, onde o somatório de ambas tende à energia mecânica (E) do sistema, tendo em seu estado inicial apenas a temperatura do sistema agindo como a energia cinética inicial, e o próprio potencial LJ que varia de acordo com a posição inicial das partículas no sistema geradas aleatoriamente.

3.3 Método de análise da simulação do escoamento de grãos de areia

O método para análise da segunda parcela do trabalho, onde se desejava visualizar a transformação de energias em um sistema de escoamento de grãos de areia dentro de uma pilha com geometria predefinida, foi a avaliação do erro de truncamento, onde se fazia a diferença entre a energia total inicial do problema e as energias em cada instante de tempo subsequente, em um sistema real, essas duas energias sempre seriam constantes durante todo o percurso, porém, em um sistema simulado, tem-se o aparecimento de um valor diferente entre elas, onde esse somatório das energias é diferente da energia total do sistema no estado inicial, e a essa diferença foi atribuído o nome de *unbalanced* (energia não balanceada). Esta foi a principal métrica adotada. Caso esta energia estivesse elevada, tinha-se a observação de maior erro de truncamento. Caso estivesse reduzida, o erro de truncamento encontrado era menor.

4 RESULTADOS

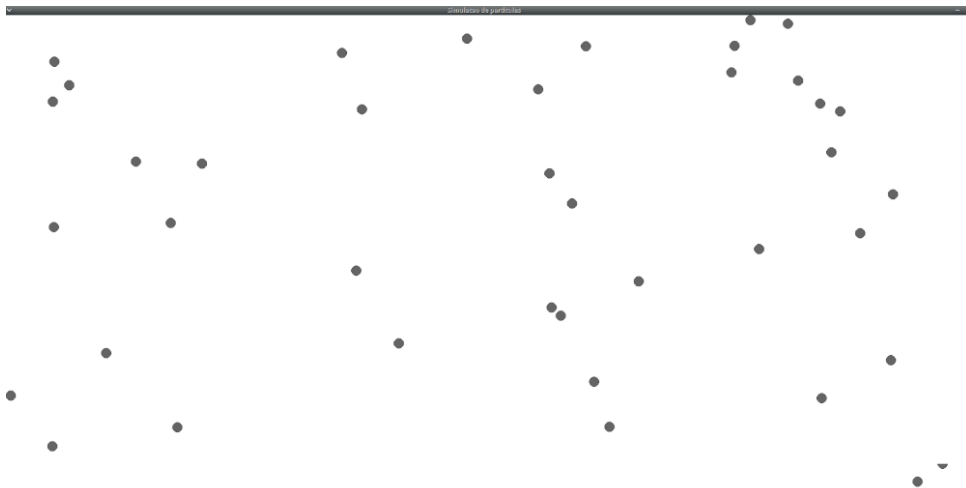
A justificativa da escolha da linguagem de programação Python se deve ao fato de que quando se trata de simulações computacionais, durante o período de desenvolvimento do projeto, é uma das melhores linguagens que existem, tendo bibliotecas de auxílio ao usuário, para representar visualmente problemas simulados, as quais são de fácil importação. Quando trabalhando com o YADE vê-se a importância do contato com o Python, pois o YADE é um *framework* da linguagem e que utiliza a sintaxe padrão do Python para escrita de programas.

4.1 Simulação via Dinâmica Molecular de interações entre partículas definida pelo potencial de Lennard-Jones

A primeira etapa do trabalho foi a simulação em escala atômica utilizando a linguagem de programação Python, para que pudesse ser vista a interação entre átomos. O uso desta linguagem foi feito, pois diversos métodos para facilitar a visualização dos resultados já existem implementados e de fácil acesso nesta linguagem. Os métodos utilizados foram: pygame, random, math, itertools, matplotlib.pyplot. Todas de acesso gratuito.

Após a programação e execução da rotina de código do potencial de LJ para partículas em 2D (vide anexo) no Python 2.7, abrirá uma janela do método PyGame, que terá dentro de si as moléculas interagindo entre si regradas pelo potencial de interação de LJ, conforme a Fig. 2.

Figura 2 – Janela aberta após a execução da rotina de simulação do potencial LJ



Fonte: Elaborada pelo autor

Os pontos escuros na Fig. 2 representam as partículas, que se movimentam conforme o tempo varia, quando elas se aproximam a uma distância inferior ao poço de potencial, tem-se a repulsão mútua dos corpos, quando se afastam a uma distância superior ao poço de potencial,

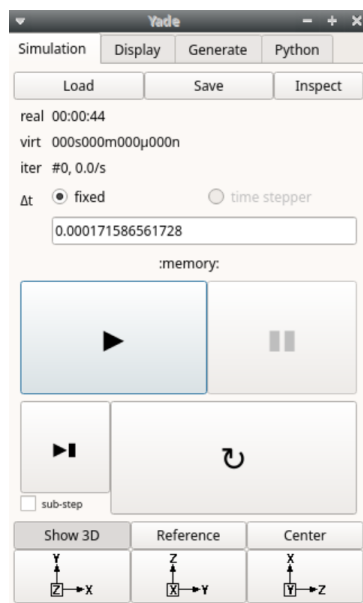
existe uma atração mútua, tudo observado em conformidade com a representação gráfica do potencial LJ.

4.2 Fluxo de grãos em silo para análise da transformação das energias ao longo da trajetória

A segunda parte do projeto foi a simulação em escala visível utilizado o *software* YADE, incorporado da linguagem Python, de código aberto e *free trial*. Os materiais utilizados na simulação do YADE não contemplam deterioração, por se tratar apenas de uma representação visual do problema.

Após a execução do código no YADE, haverá a geração de três janelas, uma com a interface de interação do próprio YADE, onde há a possibilidade de acessar comandos da execução, tais como começar, pausar, retroceder, visualizar, mudar o ponto de vista, entre outros mais avançados. A segunda janela visualizada é a do gráfico onde serão apresentadas as energias internas do sistema, e a última é a janela da visualização do próprio sistema de grãos, a visualização das três janelas citadas está nas figuras 3, 4, 5:

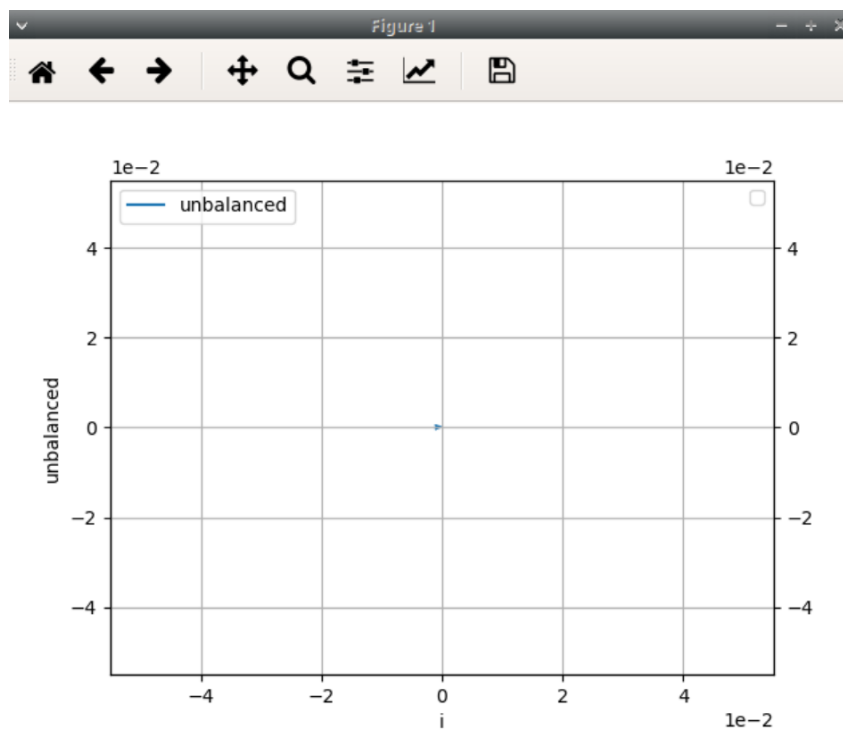
Figura 3 – Janela de comandos do YADE no tempo = 0s



Fonte: Elaborada pelo autor

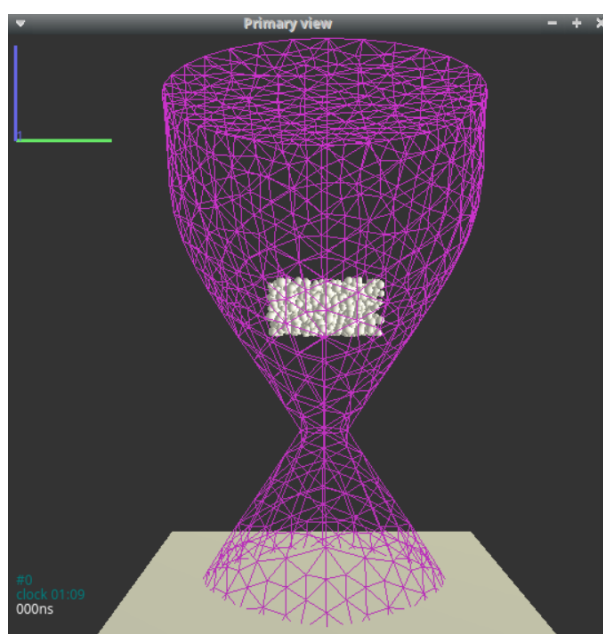
Note que na Fig. 4, não tem-se nenhuma energia ainda representada, como pode-se imaginar. Isto ocorre devido ao fato de a simulação ainda não ter sido iniciada. Após sua inicialização, as curvas serão adicionadas ao gráfico, conforme será visto adiante. Já na figura 5 percebe-se que o sistema foi devidamente gerado, mas que realmente ainda não foi iniciado o processo do fluxo dos grãos. Esse encontra-se pausado na espera pelo acionamento do usuário para que a simulação comece. Também pode-se perceber que a geometria escolhida para o silo

Figura 4 – Gráfico de energias internas do sistema no tempo = 0s



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 5 – Janela de visualização da simulação do fluxo de grãos no tempo = 0s



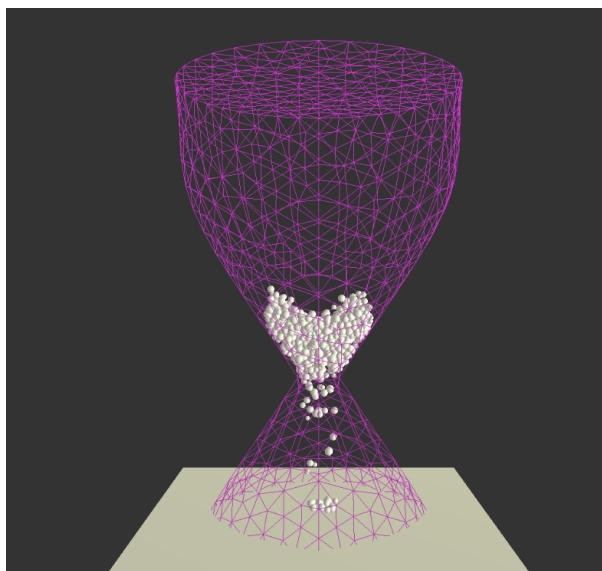
Fonte: Elaborada pelo autor

em questão foi a de um corpo com base cônica, onde existe um engargantamento para que os grãos gerados escoem naturalmente devido a ação da gravidade, e que interajam entre si e com as paredes do silo, e após a saída, estes grãos não escapem do plano onde serão armazenados. Por

isso, as paredes da parte inferior têm também um limite, pois caso algum destes grãos escape, eles cairão infinitamente, gerando resultados indesejados.

Após iniciada a simulação, pode-se ver a primeira ação de queda dos grãos na Fig. 6:

Figura 6 – Janela de visualização da simulação do fluxo de grãos no tempo $> 0s$



Fonte: Elaborada pelo autor

Conforme o tempo da simulação passa, o movimento dos grãos continua, até que seja formada uma pilha sobre o plano, conforme a Fig. 7, assim tendo o instante final da simulação realizada, quando as energia terminarão sua transformação.

Neste ponto da execução da simulação, finaliza-se a etapa de coleta dos dados, onde tem-se o gráfico com a amostragem das energias finalizadas, plotado conforme a Fig. 8:

Finalizada a etapa da coleta da dados, começa a etapa da sua análise. Para esta, pode-se tirar com base nas informações contidas no gráfico de energias Fig. 8. Inicialmente lista-se as energias contidas no sistema, segundo as Eq. 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, que são:

- Cinética (vermelho):

$$K = \sum_i^n m_i \cdot (v_i)^2 / 2 \quad (4.1)$$

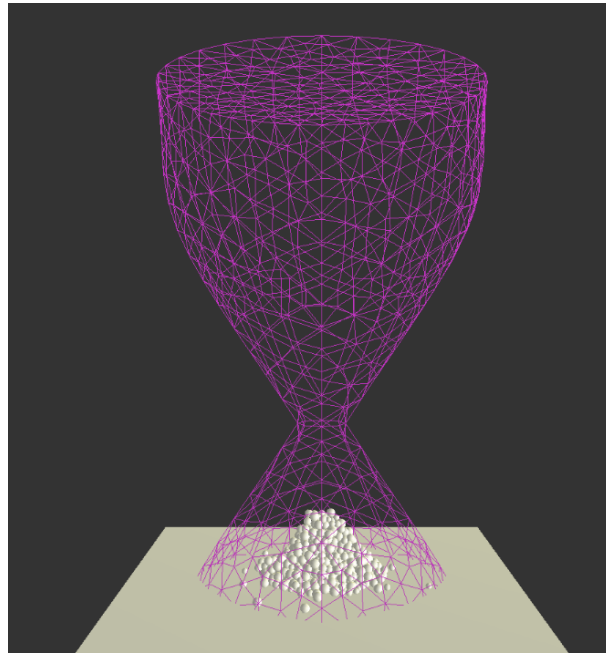
- Potencial gravitacional (verde):

$$U_g = \sum_i^n m_i \cdot g \cdot h_i \quad (4.2)$$

- Amortecimento não viscoso (roxo):

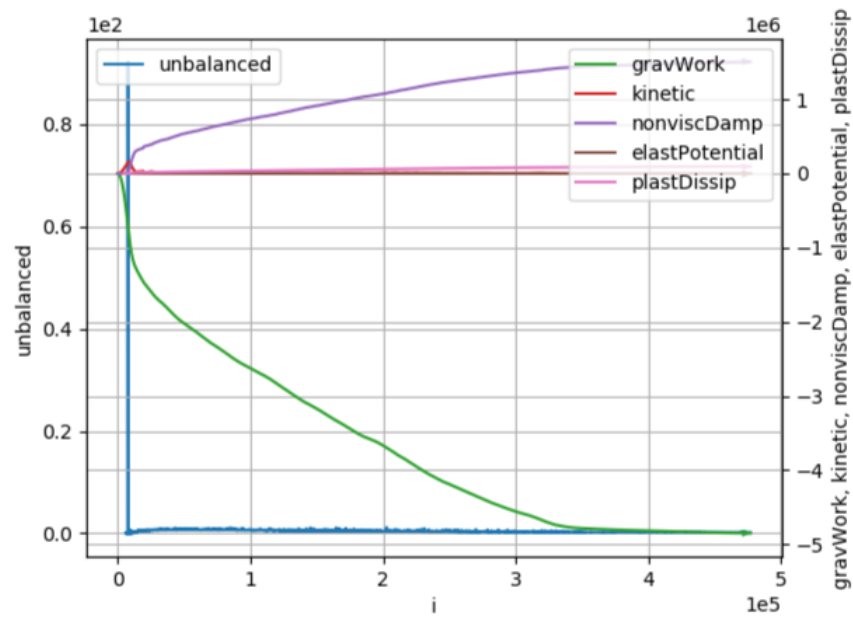
$$U_d = \sum_i^n \beta \cdot v_i \quad (4.3)$$

Figura 7 – Janela de visualização da simulação do fluxo de grãos no tempo final



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 8 – Gráfico de energias internas do sistema no tempo final



Fonte: Elaborada pelo autor

- Dissipação plástica (rosa):

$$U_p$$

a dissipação plástica é calculada com base em aproximação que dependem de fatores variantes do sistema, equação empírica interna a biblioteca do YADE.

- Potencial elástica (marrom): como se trata de um sistema de grãos sólidos, não existe dissipação elástica permanente, pois as microdeformações encontradas no sistema são todas reversíveis.
- Energia não balanceada (azul) se chamarmos a energia total inicial do sistema de E , tem-se:

$$Unbalanced = |E - K - U_g - U_d - U_p| \quad (4.4)$$

A análise da energia começa com a energia potencial gravitacional, que é a energia inicial do sistema, em seu primeiro momento é aquela armazenada que será transformada em um segundo momento em energia cinética. Isto ocorre em um breve momento no gráfico, antes das partículas colidirem com as paredes do silo, algo por volta de $0,1e5$ s no gráfico, onde ocorre uma leve elevação da cinética, e uma suavização no decremento da energia potencial gravitacional, pois quando as partículas (antes apenas em contato com o ar), têm sua queda desacelerada devido ao contato com as paredes do silo. Porém é neste momento, onde ocorre o incremento abrupto das energias dissipativas, pois a colisão entre as partículas e o silo gera dois problemas: a dissipação de energia plástica, que representa pequena parcela do problemas, devido a configuração resistente dos grãos, e a dissipação de energia por amortecimento, que representa, sem dúvidas, a maior parcela de energia ao final do processo de execução da simulação.

Nota-se que ao longo do processo a energia potencial elástica permanece constante, pois devido a configuração dos grãos ter parâmetros similares aos de grãos de areia, os mesmos não deformam a ponto de conseguir devolver a energia para o sistema.

Agora o ponto chave dessa simulação é perceber e entender do que se trata a energia não balanceada, e o porquê dela ser utilizada como critério de parada da simulação. A energia não balanceada, na realidade, não deveria existir, pois não se trata de algo que possa ser visto no mundo real, onde em todos os sistemas fechados tem-se a energia total conservada (apenas alterada) mas no mundo computacional temos algo importante a ser levado em consideração, o truncamento.

O truncamento nada mais é do que a incapacidade de um computador carregar todas as informações de um sistema real. Longe disso, o computador na realidade tende a ter seu limite de casas decimais bem curto quando comparado com um sistema real, logo, erros de arredondamento quanto a posição real das partículas, as bordas para sua colisão, as velocidades aproximadas, entre outras aproximações, fazem com que o somatório das energias internas do sistema não se mantenham constantes e oscilem.

Como pode-se perceber, essa oscilação é maior num instante inicial, devido a geração das partículas em si e a sua anexação na simulação, e vai decrescendo ao longo do tempo, tendendo a zero num instante final. Esse instante final é definido no código, pois quando essa energia tiver um valor inferior ao determinado pelo usuário com um bom valor para que a simulação tenha atingido seu propósito, a simulação se encerrará.

A análise dos resultados pode ser expandida para problemas com diferentes geometrias e diferentes parâmetros de simulação, donde têm-se a possibilidade do uso de simulações para simplificar o preço e o tempo de execução de problemas físicos, tais como [Chareyre \(2015\)](#) usou em seu trabalho para simular avanços recentes e passos para acoplamentos multifásicos na área da mineração.

5 CONCLUSÃO

O principal objetivo do desenvolvimento do projeto foi a aprendizagem em lidar com modelos de simulação computacional, tendo como a primeira etapa do processo a aprendizagem do desenvolvimento do próprio modelo de simulação, onde todo o código foi feito por inteiro, para que se pudesse compreender como funciona o *background* de um *software* de simulação. A segunda etapa do projeto foi a de utilização de um *software* de modelagem e simulação de sistemas, onde agora o aluno assumiu o papel de usuário, não mais de desenvolvedor.

Durante a implementação dos códigos das simulações, alguns problemas foram propostos para serem resolvidos e analisados. Dentre os problemas, na primeira etapa, houve a simulação de um sistema de moléculas, onde determinados os dados de entrada conseguiu-se visualizar o comportamento de interação interatômica, para que se pudesse visualizar a interação entre moléculas por meio da simulação. Para a segunda etapa, a implementação no *software* YADE, os principais problemas propostos foram a simulação do fluxo de grãos em geometria predeterminada, com a possibilidade de alteração de parâmetros e geometrias, para se adaptarem quaisquer tipos de grãos, visualizando suas energias ao longo do tempo, e detectando padrões ao final da execução da rotina.

Pode-se perceber que os objetivos propostos para a realização do trabalho foram alcançados com êxito, quando visualiza-se os dois sistemas, micro e macroscópico, temos uma visão geral do que é a simulação computacional de problemas reais, onde a inserção de computadores facilitam muito dois problemas que na prática são difíceis de serem estudados devido a suas dimensões: um infinitamente pequeno, não conseguindo ser visto, e outro imensamente grande, financeiramente inviável.

5.1 Trabalhos futuros

A seguir são apresentadas sugestões para continuidade do estudo abordado neste trabalho:

- Desenvolvimento de métrica para análise do resultado da simulação do potencial LJ.
- Paralelizar a execução dos algoritmos para análise de desempenho rodando em mais de uma máquina ao mesmo tempo.
- Melhorar a otimização dos artifícios matemáticos presentes nos códigos, com finalidade de aumento de desempenho.
- Embarcar o algoritmo em diferentes sistemas e testar seu desempenho em cada sistema e traçar o melhor padrão custo-benefício comparando capacidade de processamento de dados vs valor do sistema.

- Continuidade para simulação de outros problemas de interesse: liquefação e empilhamento a seco.

REFERÊNCIAS

- AMANN, K. A. P.; MASSAD, F. Estacas raiz: Avaliação crítica e proposta de melhoria dos métodos semi-empíricos de estimativa da carga de ruptura. *IV Seminário de Engenharia de Fundações Especiais-SEFE IV*, 2000. p. 279–273, 2000. Citado na página 14.
- BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise. *Physical review letters*, 1987. APS, v. 59, n. 4, p. 381, 1987. Citado na página 13.
- CALAZANS, L. F. et al. Termodinâmica de estados estacionários: entropia, equivalência de ensembles e independência de reservatórios. 2020. Universidade Federal de Minas Gerais, 2020. Citado na página 18.
- CHAREYRE, B. Yade-dem:(not so) recent advances and steps toward multiphase couplings. *Grenoble Geomechanics Group*, 2015. p. 299, 2015. Citado na página 28.
- CHIQUITO, A. J.; ALMEIDA, N. G. de. O potencial de lennard-jones: Aplica ção a moléculas diatômicas. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 1999. v. 21, n. 2, 1999. Citado na página 17.
- COLUCI, V. R.; VAZ, C. U. Z. Simulação de dinâmica molecular usando o potencial de lennard-jones. 2007. 2007. Citado na página 17.
- FRENKEL, D.; SMIT, B. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. [S.l.]: Elsevier, 2001. Citado na página 20.
- FULLARD, L. et al. The dynamics of granular flow from a silo with two symmetric openings. *Proceedings of the Royal Society A*, 2019. The Royal Society Publishing, v. 475, n. 2221, p. 20180462, 2019. Citado na página 14.
- GERVOIS, A.; BIDEAU, D. *Disorder and granular media*. [S.l.]: North-Holland, 1993. Citado na página 13.
- JAEGER, H.; NAGEL, S. Science 255 1523 crossref pubmed google scholar taguchi yh, hayakawa h, sasa s and nishimori h (ed) 1993 dynamics of powder systems. *Int. J. Mod. Phys. B*, 1992. v. 7, p. 9–10, 1992. Citado na página 14.
- JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of modern physics*, 1996. APS, v. 68, n. 4, p. 1259, 1996. Citado na página 17.
- LIAN, G.; THORNTON, C.; ADAMS, M. J. A theoretical study of the liquid bridge forces between two rigid spherical bodies. *Journal of colloid and interface science*, 1993. Elsevier, v. 161, n. 1, p. 138–147, 1993. Citado na página 14.
- LOPES, P. F. T. *MODELAGEM DE FLUXO EM MEIOS GRANULARES: UMA ABORDAGEM FÍSICA, MATEMÁTICA E NUMÉRICA*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Ouro Preto, 2015. Citado na página 18.
- NITKA, M.; TEJCHMAN, J. et al. Modelling of concrete fracture at aggregate level using fem and dem based on x-ray μ ct images of internal structure. *Engineering fracture mechanics*, 2015. Elsevier, v. 147, p. 13–35, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 18.

- PINTO, S. et al. Granular fingers on jammed systems: New fluidlike patterns arising in grain-grain invasion experiments. *Physical review letters*, 2007. APS, v. 99, n. 6, p. 068001, 2007. Citado na página 14.
- SILVA, A. C.; BERNARDES, A. *Simulação computacional da redução direta de minério de ferro em fornos MIDREX*. Tese (Doutorado) — Federal University of Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 13, 14, 17 e 18.
- SILVA, L. M. da; DANEU, R. C. de S.; SANTOS, F. de A. O desempenho da exportação de minério de ferro em relação a produção para consumo interno no brasil. *Revista Linceu On-Line*, 2019. v. 9, n. 1, p. 46–59, 2019. Citado na página 15.
- SILVA, T. K. d. Comportamento de estrada não pavimentada reforçada com geossintético sobre subleito com bolsão compressível. 2018. 2018. Citado na página 14.
- SILVA, T. M. da; BERNARDES, A. T. Ripples and grains segregation on unpaved road. *International Journal of Modern Physics C*, 2018. World Scientific, v. 29, n. 12, p. 1850120, 2018. Citado na página 17.
- SILVA, W. P. d. Estudo do potencial de liquefação estática de uma barragem de rejeito alteada para montante aplicando a metodologia de olson (2001). *Ouro Preto*, 2010. 2010. Citado na página 14.
- TAKEDA, M. N.; MORCELLI, A. E. Cálculo numérico. 2012. 2012. Citado na página 17.
- TEJCHMAN, J. *Confined granular flow in silos: experimental and numerical investigations*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. Citado na página 15.
- VALENÇA, P. d. M. A.; FROTA, C. Misturas areia–asfalto com fibra do açai e resíduo da construção civil para a cidade de manaus. *T e C Amazônia, Ano*, 2011. v. 9, 2011. Citado na página 13.

APÊNDICE A – CÓDIGO DO POTENCIAL LJ

```

1 import pygame
2 import random
3 import math
4 import itertools
5 import time
6 import matplotlib.pyplot as plt
7
8
9 tempoExec = input("Digite o tempo de execucao: ")
10 temperatura = 350
11 corDeFundo_cor =(255, 255, 255)
12 (largura, altura) =(1900, 1000)
13 num_de_particulas = 40
14 epsilon = 0.00000001
15 sigma = 150
16 partacula_tam = 10
17 velocidade_limit = 10
18 velocidade_multiplier = 1
19 energia_cinetica = 0
20 energia_potencial = 0
21
22 def soma_vetor((angulo1, comprimento1), (angulo2, comprimento2)):
23     x_componente = math.sin(angulo1) * comprimento1 + math.sin(angulo2) *
24         comprimento2
25     y_componente = math.cos(angulo1) * comprimento1 + math.cos(angulo2) *
26         comprimento2
27     comprimento = math.hypot(x_componente, y_componente)
28     angulo = 0.5 * math.pi - math.atan2(y_componente, x_componente)
29     return angulo, comprimento
30
31 def calcula_angulo(a, b):
32     return math.atan2((b.y-a.y), (b.x-a.x)) + math.pi/2
33
34 def lj_potencial(epsilon, sigma, r):
35     return 4 * epsilon * ((sigma/r)**12 - (sigma/r)**6)
36
37 def lj_forca(epsilon, sigma, r):
38     return (-24 * epsilon) * (2*(sigma**12 / r**13) - (sigma**6 / r**7))
39
40 def partacula_dist(a, b):
41     return math.sqrt((a.x-b.x)**2 + (a.y-b.y)**2)
42
43 class Partacula:

```

```
42 def __init__(self, (x, y), tam):
43     self.x = x
44     self.y = y
45     self.tam = tam
46     self.cor =(100, 100, 100)
47     self.espessura = 0
48     self.velocidade = 0
49     self.angulo = 0
50
51 def display(self):
52     pygame.draw.circle(screen, self.cor, (int(self.x), int(self.y)), self.
53         tam, self.espessura)
54
55 def rebater(self):
56     while self.x > largura - self.tam:
57         self.x = 2*(largura - self.tam) - self.x
58         self.angulo = - self.angulo
59     while self.x < self.tam:
60         self.x = 2*self.tam - self.x
61         self.angulo = - self.angulo
62     while self.y > altura - self.tam:
63         self.y = 2*(altura - self.tam) - self.y
64         self.angulo = math.pi - self.angulo
65     while self.y < self.tam:
66         self.y = 2*self.tam - self.y
67         self.angulo = math.pi - self.angulo
68
69 def mover(self):
70     self.x += math.sin(self.angulo) * self.velocidade *
71         velocidade_multiplier
72     self.y -= math.cos(self.angulo) * self.velocidade *
73         velocidade_multiplier
74
75 inicio = time.time()
76
77 if __name__ == "__main__":
78
79     screen = pygame.display.set_mode((largura, altura))
80     pygame.display.set_caption("Simulacao de particulas")
81
82     minhas_particulas = []
83     c = pygame.time.Clock()
84
85     for n in range(num_de_particulas):
86         tam = particula_tam
87         x = random.randint(tam, largura-tam)
88         y = random.randint(tam, altura-tam)
```

```

86     partícula = Partícula((x, y), tam)
87     partícula.velocidade = (-2+4*random.random())
88     partícula.angulo = 0
89     minhas_partículas.append(partícula)
90
91     while time.time()-início < tempoExec:
92         energia_cinetica = temperatura**0.5
93         energia_potencial = 0
94         screen.fill(corDeFundo_cor)
95
96         for a, b in itertools.combinations(minhas_partículas, 2):
97             temp_lj_forca = lj_forca(epsilon, sigma, partícula_dist(a, b))
98             temp_angulo = calcula_angulo(a, b)
99             (a.angulo, a.velocidade) = soma_vetor((a.angulo, a.velocidade), (
100             temp_angulo, temp_lj_forca))
101             (b.angulo, b.velocidade) = soma_vetor((b.angulo, b.velocidade), (
102             temp_angulo+math.pi, temp_lj_forca))
103             energia_potencial += lj_potencial(epsilon, sigma, partícula_dist(a,b)
104             )
105
106         for partícula in minhas_partículas:
107             energia_cinetica += 0.5 * partícula.velocidade**2
108             partícula.mover()
109             partícula.rebater()
110             partícula.display()
111         c.tick(120/velocidade_multiplier)
112         pygame.display.flip()
113         print("Energia cinetica: ", energia_cinetica)
114         print("Energia potencial:" , energia_potencial)
115     pygame.QUIT
116
117     print ("Tempo de execucao:", round((time. time()-início), 2))
118     distancias = []
119     numero_de_partículas = []
120
121     for a, b in itertools.combinations (minhas_partículas, 2):
122         distancias.append(math.floor(partícula_dist(a, b))/(a.x+b.x))
123         numero_de_partículas.append(5)

```

APÊNDICE B – CÓDIGO DA SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DE GRÃOS DE AREIA EM SILO

Para a execução do código, é bom observar que a necessidade da existência do arquivo `.mesh` em questão é fundamental para que o código consiga ser executado.

```

1 from yade import pack, plot
2 import time
3 import random
4 import math
5 from yade import ymport
6
7 utils.readParamsFromTable (descriptionIn = 'noDescription',
8   frIn = 0.5, enIn=0.01, etIn=0.01, tcIn=0.0001,
9   rhoIn = 1500.0,
10  dumpVTKIn = 4000
11 )
12 from yade.params.table import *
13 import shutil
14
15 try:
16   shutil.rmtree ('cpt')
17 except OSError:
18   pass
19 os.mkdir ('cpt')
20
21 altura = 0
22 rMed = 0
23 angRepouso = 0
24 contParticulas = 0
25
26 mat1 = O.materials.append(ViscElMat (frictionAngle=frIn,density=rhoIn,tc=
27   tcIn,en=enIn,et=etIn,))
28 O.bodies.append(ymport.gmsh ("hourglass.mesh", scale=500,color=(1,0,1),mask
29   =5))
30 O.bodies.append(geom.facetBox ((0, 0, -8), (10, 10, 0), wallMask=63, color
31   =(1,1,1), wire=False))
32
33 sp=pack.SpherePack ()
34 sp.toSimulation ()
35 sp.makeCloud ( (-3, -3, 5), (3, 3, 8), rMean=.2, rRelFuzz=.3)
36 sp.toSimulation (color=(.9, .9, .8))
37
38 for b in O.bodies:

```

```

37 if not isinstance (b.shape, Sphere): continue
38 contParticulas=contParticulas+1
39
40 O.engines=[
41     ForceResetter (),
42     InsertionSortCollider ([Bo1_Sphere_Aabb() ,Bo1_Facet_Aabb()]),
43     InteractionLoop(
44         [Ig2_Sphere_Sphere_ScGeom() ,Ig2_Facet_Sphere_ScGeom()],
45         [Ip2_FrictMat_FrictMat_FrictPhys ()],
46         [Law2_ScGeom_FrictPhys_CundallStrack ()]
47     ),
48     NewtonIntegrator(gravity=(0,0,-9.81) ,damping=.75),
49     PyRunner(command='checkUnbalanced()', realPeriod=2),
50     PyRunner(command='addPlotData()', iterPeriod=100)
51 ]
52
53 O.dt=1*PWaveTimeStep ()
54 O.trackEnergy=True
55
56 def checkUnbalanced () :
57     if unbalancedForce ()<.01:
58         O.pause ()
59         plot.saveDataTxt ('bbb.txt.bz2')
60         for b in O.bodies:
61             if not isinstance (b.shape, Sphere): continue
62             '''if b.speed > VMax:
63                 b.speed = VMax'''
64             print(round(b.state.refPos [0], 2), round(b.state.refPos[1], 2), round(
b.state.refPos [2], 2))
65             if round(b.state.refPos [2], 2)>altura:
66                 altura = round(b.state.refPos [2], 2)
67
68 def addPlotData() :
69     plot.addData(i=O.iter,unbalanced=unbalancedForce(),**O.energy)
70
71 plot.plots={'i': ('unbalanced' , None, O.energy.keys)}
72 yade.plot.live = True
73 yade.plot.autozoom = True
74
75 plot.plot ()
76
77 O.saveTmp ()
78 yade.plot.saveDataTxt ("teste.txt", vars=O.time)
79
80 from yade import qt
81 qt.View()
82 r=qt.Renderer ()

```