

SIMULAÇÃO DO ÂNGULO DE REPOUSO ESTÁTICO DE RESÍDUO DE ACEROLA EMPREGANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS

K. G. SANTOS¹, M. C. C. FRANCISQUETTI², L. V. FERREIRA², R. C. SANTANA²,
M. A. S. BARROZO²

¹Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Departamento de Engenharia Química

²Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Química

*e-mail: kassiagsantos@gmail.com

RESUMO

O ângulo de repouso estático é uma característica própria do material particulado e é uma função da densidade da partícula, área superficial e forma, além do coeficiente de atrito do material. Neste trabalho, o ângulo de repouso estático de sementes de acerola foram obtidos experimentalmente e por simulação simulados empregando o Método de Elementos Discretos, através do software EDEM. As forças de contato entre as partículas foram representadas pelo Modelo Hertz-Mindlin. A fim de verificar como os parâmetros do modelo de força de contato influenciavam o valor do ângulo de repouso, a técnica de planejamento composto central foi empregada para delinear as simulações. Os resultados mostraram que quais os parâmetros que mais influenciam o comportamento granular da acerola. Também foi possível encontrar um conjunto de valores para os parâmetros que produziram um resultado simulado muito próximo ao valor experimental.

1 INTRODUÇÃO

O conhecimento da dinâmica das partículas em equipamentos como secador em tambor rotativo, leitos fixo e leitos móveis, pode favorecer o projeto e otimização de diversos processos nesses equipamentos, desde que sejam calibrados os parâmetros de força de contato entre as partículas.

A descrição matemática do escoamento de sistemas multifásicos granulares é atualmente uma ferramenta com grande potencial para auxiliar na compreensão do processo de transporte de sólidos. Essa modelagem é complexa e pode ser efetuada por diferentes abordagens (Lagrangeana e a Euleriana), que apresentam vantagens e limitações (SANTOS et al., 2009).

Nas simulações de sistemas multifásicos pela abordagem Euler-Lagrange, o movimento de cada partícula é descrito pela

equação de Newton (balanço de forças). Sempre que surgir uma resultante de forças, ocorrerá uma variação da quantidade de movimento, ocasionando uma aceleração da partícula.

Há duas vias de acoplamento entre a fase particulada e fluida. A via única (*one way*) considera apenas a influência do fluido sobre a partícula, por meio da força de arraste. Já o acoplamento por duas vias (*two way*) é aquele em que além da influência do fluido sobre a partícula, esta também influencia a dinâmica do fluido através da inclusão de termos fonte nas equações de Navier-Stokes, que descrevem o movimento do fluidos Newtonianos.

Quando o sistema a ser simulado é de empacotamento denso, o acoplamento entre a fase fluida e particulada é de duas vias e as forças de contato partícula-partícula

interferem significativamente na dinâmica das partículas e do fluido.

O Método de Elementos Discretos (DEM) tem se mostrado uma boa alternativa para a modelagem de sistemas particulados densos, pois contabiliza o efeito do tamanho e da forma real da partícula, além de permitir uma modelagem detalhada da colisão entre as partículas com outras partículas e com a parede do recipiente (SILVÉRIO et al., 2014).

No entanto, a abordagem DEM necessita de uma calibração prévia dos parâmetros do modelo de força de contato entre partículas, a fim de que o choque destas na simulação seja similar ao que ocorre experimentalmente. Para tal, empregam-se testes experimentais simples, como por exemplo os ângulos de repouso estático e dinâmico das partículas.

Sendo assim, o objetivo deste trabalho consiste na calibração dos parâmetros do modelo de força de contato de partículas do resíduo de acerola, empregando testes de ângulo de repouso estático. Esta calibração foi realizada por meio de simulações DEM e é necessária para as futuras etapas de simulação desse material em outros equipamentos, como o leito de jorro.

A fim de verificar como os parâmetros do modelo de força de contato influenciavam o valor do ângulo de repouso, a técnica de planejamento composto central foi empregada para delinear as simulações.

Como as partículas do resíduo de acerola são úmidas, as forças de contato entre as partículas foram representadas pelo Modelo Hertz-Mindlin com Modelo Coesivo JKR.

2 O MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS

O Método de Elementos Discretos (DEM) envolve a descrição do movimento de cada partícula no escoamento e a modelagem da colisão entre as partículas e os contornos

rígidos, sendo o método mais adequado para lidar com problemas de natureza descontínua, e ao mesmo tempo com grandes níveis de deformação, como é o caso do escoamento granular.

A metodologia DEM e suas variantes estão bem estabelecidas e são descritas em detalhes por Cleary (2008). O algoritmo do DEM é bastante simples e pode ser descrito conforme mostra ao esquema da Figura 1.

Figura 1 - Etapas básicas do ciclo de cálculo do Método de Elementos Discreto



O modelo de contato, usado para contabilizar as forças de interação entre duas esferas rígidas que pertencem a duas diferentes partículas, é baseado no modelo de Hertz-Mindlin, que caracteriza as interações por meio de três coeficientes: coeficiente de restituição, coeficiente de atrito estático e coeficiente de atrito de rolamento.

No modelo de colisão de Hertz-Mindlin, a componente normal da força é baseada na teoria de contato de Hertz (1882), enquanto a força tangencial é baseada no trabalho de Mindlin (1949).

Tanto no cálculo da força normal, quanto da tangencial, há um termo de amortecimento do sistema, relacionado ao coeficiente de restituição (TSUJI et al., 1992), que relaciona a velocidade de separação e a velocidade de aproximação de uma ou mais partículas em uma colisão.

A força normal (F_n) é uma função da sobreposição na direção normal (δ_n) dada por:

$$F_n = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R^*} \delta_n^{3/2} \quad (1)$$

no qual o módulo Equivalente de Young (E^*) e o raio equivalente (R^*) são definidos como:

$$\frac{1}{E^*} = \frac{(1-\nu_i^2)}{E_i} + \frac{(1-\nu_j^2)}{E_j} \quad (2)$$

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (3)$$

onde E_i , ν_i , R_i e E_j , ν_j , R_j são o módulo de Young, razão de Poisson e o raio de cada partícula em contato. Adicionalmente, há a força normal de amortecimento (F_n^d) dada por:

$$F_n^d = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \left[\frac{\ln e}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}} \right] \sqrt{(2E^* \sqrt{R^*} \delta_n^*) m^* v_n^{rel}} \quad (4)$$

onde $m^* = (m_i^{-1} + m_j^{-1})^{-1}$ é a massa equivalente, v é velocidade relativa na direção normal e e é o coeficiente de restituição.

A força tangencial F_t depende da sobreposição na direção tangencial (δ_t) e constante de rigidez (S_t):

$$F_t = -\delta_t S_t = -\delta_t 8G^* \sqrt{R^*} \delta_n \quad (5)$$

no qual G^* é o módulo cisalhante.

A força de amortecimento tangencial, conhecida também como força de repulsão, é dada por:

$$F_t^d = -2\sqrt{\frac{5}{6}} \left[\frac{\ln e}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}} \right] \sqrt{S_t m^* v_t^{rel}} \quad (6)$$

sendo v_t^{rel} , a velocidade relativa tangencial.

A força tangencial é limitada pelo atrito estático definido por Coulomb ($\mu_s F_n$), onde μ_s é o coeficiente de atrito estático.

O coeficiente de atrito de rolamento modela o efeito da rugosidade da superfície de partículas não esféricas. De fato, como a partícula irregular é representada por um conjunto de esferas (método multiesfera), elas não podem rolar umas sobre as outras sem a definição deste coeficiente.

Para tal, o coeficiente de atrito de rolamento introduz um torque artificial que no modelo de contato que se opõe ao movimento de rolamento, como segue:

$$\tau_i = -\mu_r F_n R_i \omega_i \quad (7)$$

no qual μ_r é o coeficiente de atrito de rolamento, R_i é a distância entre o ponto de contato e o centro de massa da partícula e ω_i é a vetor unitário da velocidade angular no ponto de contato.

Para contabilizar o efeito de coesão entre as partículas, que é significativo no caso de pós e materiais úmidos, emprega-se o Modelo Johnson-Kendall-Roberts (JKR), que realiza aos mesmos cálculos que o modelo Hertz-Mindlin (sem deslizamento na parede) para representar a força elástica tangencial, a força de dissipação normal e tangencial.

Para contabilizar a coesão, a força de elástica na direção normal (F_{JKR}) é baseada na teoria reportada por Johnson, Kendall e Roberts (1971). Essa força depende da sobreposição (δ) e da energia de superfície (γ) da seguinte forma:

$$F_{JKR} = -4\sqrt{\pi\gamma E^*} a^{3/2} + \frac{4E^*}{3R^*} a^3 \quad (8)$$

$$\delta = \frac{a^2}{R^*} - \sqrt{4\pi\gamma a / E^*} \quad (9)$$

O valor máximo da força coesiva ocorre quando as partículas não estão em contato e é dado por:

$$F_{pull-out} = -\frac{3}{2} \pi \gamma R^* \quad (10)$$

No modelo coesivo JKR, a força de fricção depende da parte repulsiva positiva da força normal. Como resultado, o modelo a força de atrito no modelo JKR fornece maiores força de atrito quando a componente de coesão está presente.

3 METODOLOGIA

3.1 Procedimento Experimental

O ângulo de repouso estático é definido como o ângulo interno entre a superfície de uma pilha de partículas e a superfície horizontal e está diretamente relacionado à densidade, área superficial e formato da partícula, bem como ao coeficiente de atrito do material.

As partículas do resíduo de acerola eram compostas basicamente pelas sementes úmidas (cerca de 65% de umidade). Os teste de picnometria com éter de petróleo resultaram em uma densidade aparente das partículas de 738 kg/m^3 . O diâmetro médio de Sauter, obtido por peneiramento, foi de $7,38 \pm 0,13 \text{ mm}$. A esfericidade das partículas do resíduo foi obtida por meio de um analisador óptico de tamanho de partículas, o HAVER CPA3-2, resultando em no valor de $0,68 \pm 0,02$.

Neste trabalho, o ângulo de repouso estático foi medido usando o método do funil fixo, a partir do raio e da altura do cone formado pelas partículas. O valor experimental do ângulo de repouso estático da acerola foi obtido pela média de seis medidas obtidas por meio de análise de imagens.

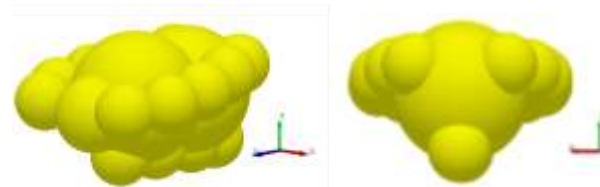
3.2 Procedimento de Simulação

O ângulo de repouso estático foi reproduzido por meio de simulações computacionais empregando DEM, disponível no software EDEM 2.3. O passo de tempo em todas as simulações foi fixado 20% acima do passo de tempo crítico calculado pelo tempo de Rayleigh.

O comportamento de materiais granulares é fortemente dependente do tamanho e da forma da partícula, requerendo uma representação realística da partícula. Nas simulações realizadas, o formato da semente de acerola foi aproximado pelo método multiesfera (Favier et al., 1999). A partícula foi representada por um conjunto de 17 esferas, resultando em uma partícula de volume médio de $3.24 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3$. A Figura 2 mostra as resíduo de acerola criadas pelo método multiesfera.

A simulação do ângulo de repouso estático consistiu no empacotamento de 691 partículas em um cilindro de 0,1 m de diâmetro. Em seguida, a parede do cilindro foi removida, permitindo a formação da pilha de partículas.

Figura 2 - Forma das partículas do resíduo de acerola, obtidas pelo método multiesfera.



A fim de orientar as simulações e obter um modelo matemático capaz de indicar o modo como a variação dos parâmetros de simulação influenciam no ângulo de repouso estático, foi proposto um planejamento composto central (PCC) para os quatro parâmetros investigados: módulo de cisalhamento (G), coeficiente de atrito estático (μ_s), coeficiente de atrito de rolamento (μ_r) e energia de superfície (γ). A relação entre os níveis do PCC e os valores de cada parâmetro encontram-se na Tabela 1.

Valores extremos do PCC foram baseados em trabalhos da literatura e na faixa possível para variação desses parâmetros. Então, nem todas as combinações entre os parâmetros necessariamente conduzem a resultados fisicamente consistentes, mas

permitem verificar o efeito individual dos parâmetros e suas interações sobre a resposta.

Tabela 1 – Relação entre os níveis do PCC e os valores reais de cada variável.

Nível	G^* [Pa]	μ_s	μ_r	γ [J/m ²]
-1,607	$1,178 \cdot 10^6$	0,018	0,004	0,002
-1,000	$3,000 \cdot 10^6$	0,200	0,050	0,024
0,000	$6,000 \cdot 10^6$	0,500	0,125	0,060
+1,000	$9,000 \cdot 10^6$	0,800	0,200	0,096
+1,607	$1,082 \cdot 10^7$	0,982	0,246	0,118

4 RESULTADOS

Neste trabalho, foram avaliados os efeitos dos parâmetros do Modelo Hertz-Mindlin com Modelo Coesivo JKR sobre o comportamento do ângulo de repouso estático simulado do resíduo de acerola, por meio da técnica de superfície de resposta.

A Tabela 2 apresenta o PCC que guiou as simulações, na qual também encontram-se os resultados de ângulo de repouso estático obtidos nas simulações DEM (Φ_{DEM}) e o desvio $\bar{\sigma}$ entre o valor experimental e o simulado. O valor experimental do ARE do resíduo de acerola foi de $39,2^\circ \pm 1,4^\circ$.

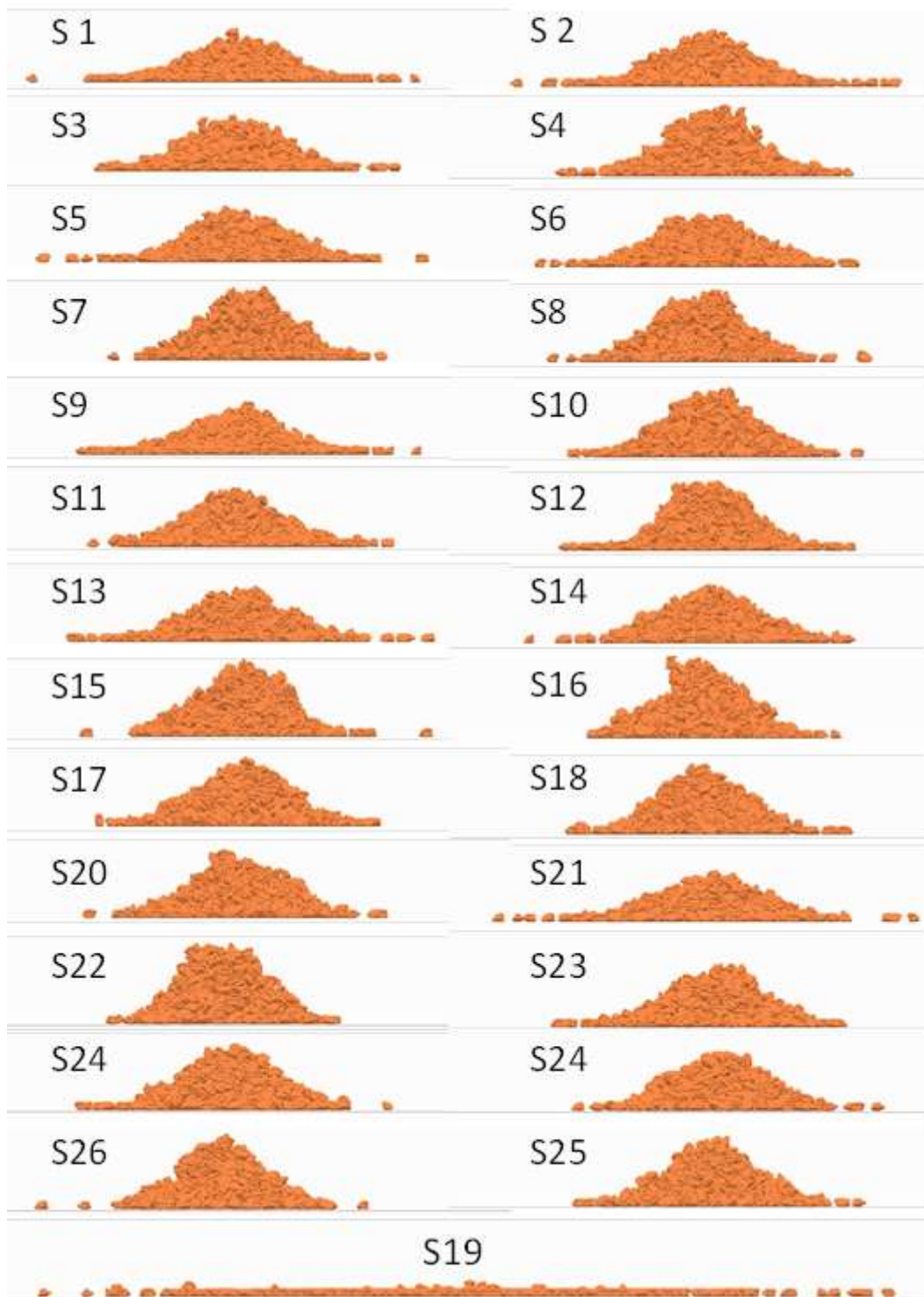
Tabela 2 – PCC empregado nas simulações e resultados simulados do ângulo de repouso estático do resíduo de acerola (com a Razão de Poisson constante igual a 0,25; coeficiente de restituição de 0,8).

Simulação	X_1 (G^* [Pa])	X_2 (μ_s)	X_3 (μ_r)	X_4 (γ [J/m ²])	Φ_{DEM}	σ [%]
S 1	-1,000	-1,000	-1,000	-1,000	31,19 \pm 0,58	20,36
S 2	-1,000	-1,000	-1,000	1,000	28,39 \pm 1,89	27,52
S 3	-1,000	-1,000	1,000	-1,000	32,98 \pm 0,91	15,80
S 4	-1,000	-1,000	1,000	1,000	43,41 \pm 2,67	-10,83
S 5	-1,000	1,000	-1,000	-1,000	31,39 \pm 3,65	19,86
S 6	-1,000	1,000	-1,000	1,000	30,76 \pm 0,99	21,45
S 7	-1,000	1,000	1,000	-1,000	42,36 \pm 0,87	8,15
S 8	-1,000	1,000	1,000	1,000	39,89 \pm 1,46	1,84
S 9	1,000	-1,000	-1,000	-1,000	29,99 \pm 1,37	23,44
S 10	1,000	-1,000	-1,000	1,000	31,87 \pm 1,71	18,63
S 11	1,000	-1,000	1,000	-1,000	34,88 \pm 0,24	10,95
S 12	1,000	-1,000	1,000	1,000	44,92 \pm 1,92	14,69
S 13	1,000	1,000	-1,000	-1,000	34,69 \pm 0,51	11,44
S 14	1,000	1,000	-1,000	1,000	29,89 \pm 0,35	23,68
S 15	1,000	1,000	1,000	-1,000	49,26 \pm 17,67	25,78
S 16	1,000	1,000	1,000	1,000	39,75 \pm 6,87	1,49
S 17	-1,607	0,000	0,000	0,000	33,75 \pm 1,45	13,84
S 18	1,607	0,000	0,000	0,000	35,59 \pm 1,15	9,13
S 19	0,000	-1,607	0,000	0,000	0,00 \pm 0,00	-
S 20	0,000	1,607	0,000	0,000	39,09 \pm 3,79	0,20
S 21	0,000	0,000	-1,607	0,000	24,50 \pm 0,15	37,45
S 22	0,000	0,000	1,607	0,000	50,93 \pm 5,15	30,04
S 23	0,000	0,000	0,000	-1,607	37,15 \pm 0,20	5,14
S 24	0,000	0,000	0,000	1,607	34,24 \pm 0,26	12,57
S 25	0,000	0,000	0,000	0,000	31,87 \pm 0,11	18,62
S 26	0,000	0,000	0,000	0,000	36,71 \pm 0,20	6,27
S 27	0,000	0,000	0,000	0,000	36,97 \pm 1,27	5,61
S 28	0,000	0,000	0,000	0,000	36,56 \pm 0,69	6,65

A Figura 3 mostra os ângulos de repouso obtidos nas simulações DEM. A partir dos dados da Tabela 2 e Figura 3, pode-se observar que o ângulo de repouso estático

simulado varia significativamente de uma simulação pra outra, compreendendo valores entre 0° e 50° .

Figura 3 – Ângulos de repouso estático (ARE) simulados com os parâmetros do PCC (Tabela 2).



A Simulação S19 foi a única em que não se formou uma pilha com o material, mostrando que valores de coeficiente de atrito estático próximos de zero não permitiram a formação da pilha de partículas.

O maior valor do ARE encontrado foi referente às simulações S15 e S22, sendo esta na condição do maior nível do coeficiente de atrito de rolamento.

Uma análise de regressão múltipla foi realizada para quantificar o efeito dos parâmetros do modelo de forças de contato de Hertz-Mindlin sobre o ângulo de repouso estático simulado. A fim de obter a equação que descreve a resposta em função das variáveis independentes, um teste de hipóteses usando a estatística *t* de *Student* para identificar os parâmetros significativos. Os coeficientes da equação estimados pelo método de mínimos quadrados com nível de significância maior que 10%, ($p > 0,1$) foram negligenciados. A equação de ajuste para o ARE simulado, é dada por ($R^2 = 0,817$):

$$\Phi_{DEM} = 36,37 + 1,78X_2 + 5,75X_3 + 2,63X_2X_4 \quad (11)$$

Pode-se observar que o ARE do resíduo aumenta com o aumento dos coeficientes de atrito estático e de rolamento, sendo este último a variável que mais influencia a resposta. Já o aumento do termo de interação entre o coeficiente de atrito estático e a energia de superfície diminuem o valor do ângulo simulado.

O coeficiente de atrito de rolamento é também conhecido como a resistência ao rolamento. Por isso um aumento da resistência ao rolamento produz uma pilha com maior angulação (SOUZA et al., 1995). Zhou et al. (2002) e Santos et al. (2012) simularam o ângulo de repouso estático de esferas de vidro de diversos diâmetros e

também concluíram que o ARE aumenta com o aumento do coeficiente de atrito de rolamento.

A Figura 4 mostra a comparação do ARE simulado e experimental, no qual pode-se observar uma grande similaridade no ângulo formado.

Figura 4 – Comparação entre os ângulos de repouso estático: (a) experimental, (b) simulado (S8).



(a)



(b)

Quando comparados os valores simulados e a medida experimental do ARE, as simulações S8 ($39,89^\circ$) e S20 ($39,09^\circ$) foram as que mais se aproximaram do valor experimental de $39,2^\circ$, apresentando erro de 1,84% e 0,2% respectivamente.

Segundo Zouza et al (1995), o coeficiente de atrito estático pode ser calculado como a tangente do ARE. Assim, o valor experimental do coeficiente de atrito estático seria 0,81, muito próximo do valor

encontrado pela simulação 8, considerada uma das duas melhores condições simuladas.

Assim, optou-se por escolher os parâmetros dessa simulação como os que melhor representam o contato entre as partículas do resíduo de acerola.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho, propôs-se encontrar os parâmetros do Modelo Hertz-Mindlin que melhor representam o comportamento fluidodinâmico do resíduo de acerola. Para tal, empregou-se na calibração a medida do ângulo de repouso estático.

Um PCC foi proposto para investigar os resultados de uma larga faixa dos parâmetros. A análise de regressão múltipla dos ângulos obtidos nas simulações revelaram que neste sistema, o coeficiente de atrito de rolamento é o parâmetro que mais influencia o ARE. O Aumento dos coeficientes de atrito estático e de rolamento aumentam o ângulo de repouso simulado.

Uma das condições simuladas (S8) foi selecionada por representar adequadamente o ARE e por ter uma coeficiente de atrito estático próximo do valor experimental.

Este tipo de calibração de parâmetros é uma etapa necessária, sendo que os valores desses parâmetros podem ser empregados em simulações de diversos sistemas granulares contendo o resíduo, como é o caso de secadores de leitos móveis.

NOMENCLATURA

ARE	Ângulo de repouso estático [°]
e	Coeficiente de Restituição
E_i, E_j, E^*	Módulo de Young das partículas i e j e Módulo de Young equivalente [Pa]
F_n, F_t	Forças normal e tangencial [N]

F_n^d	damping force [N]
$F_{pull-out}$	pull-out force [N]
F_{JKR}	Força de contato elástica normal [N]
G^*	Módulo cisalhante equivalente [Pa]
H_0	Altura de leito estático [m]
R_i, R_j, R^*	Raio das partículas i e j e raio equivalente [m]
V_d	Fração volumétrica do resíduo de acerola
v_n^{rel}, v_t^{rel}	Componentes normal e tangencial da velocidade relative [ms ⁻¹]

Símbolos

ε	Porosidade inicial do leito
$\delta_n, \delta_t, \delta$	Sobreposição normal e tangencial
δ_c	Sobreposição máxima entre partículas com força não nula
ϕ	Esfericidade
μ_s	Coeficiente de atrito estático
μ_r	Coeficiente de atrito de rolamento
ν_i, ν_j	Razão de Poisson
τ_i	Torque na superfície de contato [Nm ⁻¹]
γ	Energia de superfície ou interface [Jm ⁻²]

REFERÊNCIAS

- CLEARY, P. W. Predicting charge motion, power draw, segregation and wear in ball mills using discrete element methods. **Min. Eng.**, v. 11, p. 1061, 1998.
- FAVIER, J.F., ABBASPOUR-FARD, M.H., KREMMER, M., RAJI, A. Shape representation of axi-symmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles. **Eng. Computations**, v. 6, p. 467-480, 1999.
- HERTZ, H. On the contact of elastic solids. **J. reine und angewandte Mathematik**, v. 92, p. 156-171, 1882.

JOHNSON, K. L.; KENDALL, K.; ROBERTS, D. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, v. 324, p. 301-313, 1971.

MINDLIN, R.D. Compliance of elastic bodies in contact. **J. Appl. Mech.**, v.16, p.259-268, 1949.

SANTOS, E.G.; MESQUITA, A.L.A.; GOMES, L.M.; NETO, E. F.; MAFRA, M.P. Análise da forma geométrica da partícula na aplicação do Método de Elementos Discretos-DEM. **VII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica - CONEM**, São Luis do Maranhão, 2012.

SANTOS, K. G.; MURATA, V. V.; BARROZO, M. A. S. Three-dimensional computational fluid dynamics modeling of spouted bed. **Can. J. Chem. Eng.**, v.87, p.211-219, 2009.

SILVÉRIO, B. C.; SANTOS, K. G.; DUARTE, C.R., BARROZO, M. A. S.. Effect of the Friction, Elastic, and Restitution Coefficients on the Fluid Dynamics Behavior of a Rotary Dryer Operating with Fertilizer. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v.53, p.8920-8926, 2014.

SOUZA, J. S. I.; PEIXOTO, A.M.; TOLEDO, F.F. **Enciclopédia agrícola brasileira: A-B**, Vol. 1, EdUSP, 1995.

TSUJI, Y., TANAKA, T.; ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. **Powder Technol.**, v. 71, p. 239-250, 1992.

ZHOU, Y.C., XU, B.H. YU, A.B.; ZULLI, P., "An experimental and numerical study of the angle of repose of coarse spheres". Elsevier. **Powder Technology**, v. 125, p. 45-54, 2002.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Capes pela Bolsa de pós-doutorado PNPd Institucional e ao CNPq pela Bolsa PIBIC de Iniciação Científica.