



DESENVOLVIMENTO E TRANSFERÊNCIA DE TECNOLOGIA NAS ENGENHARIAS DE MATERIAIS E METALÚRGICA

Amanda Fernandes Pereira da Silva
(Organizadora)

**Atena**
Editora
Ano 2022



DESENVOLVIMENTO E TRANSFERÊNCIA DE TECNOLOGIA NAS ENGENHARIAS DE MATERIAIS E METALÚRGICA

**Amanda Fernandes Pereira da Silva
(Organizadora)**

Atena
Editora
Ano 2022

Editora chefe

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Editora executiva

Natalia Oliveira

Assistente editorial

Flávia Roberta Barão

Bibliotecária

Janaina Ramos

Projeto gráfico

Bruno Oliveira

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

Imagens da capa

iStock

Edição de arte

Luiza Alves Batista

2022 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2022 Os autores

Copyright da edição © 2022 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição-Não-Comercial-Não-Derivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

Conselho Editorial**Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Profª Drª Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná



Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho
Prof. Dr. Juliano Bitencourt Campos – Universidade do Extremo Sul Catarinense
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora
Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista



Desenvolvimento e transferência de tecnologia nas engenharias de materiais e metalúrgica

Diagramação: Camila Alves de Cremo
Correção: Mariane Aparecida Freitas
Indexação: Amanda Kelly da Costa Veiga
Revisão: Os autores
Organizadora: Amanda Fernandes Pereira da Silva

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

D451 Desenvolvimento e transferência de tecnologia nas engenharias de materiais e metalúrgica / Organizadora Amanda Fernandes Pereira da Silva. – Ponta Grossa - PR: Atena, 2022.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-258-0565-8

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.658221508>

1. Engenharia de Materiais. 2. Metalurgia. I. Silva, Amanda Fernandes Pereira da (Organizadora). II. Título.

CDD 669

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

www.atenaeditora.com.br

contato@atenaeditora.com.br



Atena
Editora
Ano 2022

DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.



DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access*, *desta forma* não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.



APRESENTAÇÃO

A engenharia de materiais é um campo interdisciplinar que abrange o conhecimento acerca dos materiais e a relação que exige entre processamento, estrutura, propriedade e desempenho. É necessário compreender a interdependência entre esses componentes para que o material seja manuseado e aplicado da forma correta. A engenharia de materiais desenvolve modos de transformar esses materiais em dispositivos ou estruturas úteis.

A classificação dos materiais sólidos abrange, levando em consideração a composição química e estrutura atômica: metais, cerâmicas, polímeros, compósitos e materiais avançados (aplicação). Nesse sentido, a busca por materiais com melhores propriedades físico-químicas, mecânicas, melhor comportamento térmico, tem sido alvo de grande destaque nesse meio. É comum profissionais da engenharia, sejam eles mecânicos, civis, químicos, ou elétricos, cientistas se depararem com problemas de projeto envolvendo materiais.

Desta forma, neste livro são destacados trabalhos científicos nesse ramo da Engenharia de Materiais com pesquisas atuais. Apresenta desenvolvimento de novos materiais com combinações máximas ou ideais requeridas de acordo com sua aplicação já existente.

Por isso, esta obra surge com grande importância para o meio acadêmico sabendo que cientistas de materiais e engenheiros precisam estar envolvidos na investigação de novos produtos com melhorias para situações reais.

Boa leitura!

Amanda Fernandes Pereira da Silva

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1..... 1

ANÁLISE COMPARATIVA DO DESEMPENHO TÉRMICO DE ALVENARIAS DE BLOCOS CERÂMICOS E DE CONCRETO POR MEIO DA TERMOGRAFIA INFRAVERMELHA

Rodrigo Manoel Rufino Leão

Amanda Fernandes Pereira da Silva

Alisson Rodrigues de Oliveira Dias

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6582215081>

CAPÍTULO 2..... 15

ANÁLISE DA DUREZA E MICROESTRUTURA DA SUPERLIGA INCONEL 718 SUBMETIDA A SOLUBILIZAÇÃO E ENVELHECIMENTO: COMPARAÇÃO PARA APLICAÇÕES NUCLEARES, AEROESPACIAIS E PETROLÍFERAS

Sara Nunes Rios

Vitória Ferreira de Oliveira Marques

Sérgio Renan Lopes Tinô

Vinicius Carvalhaes

Thamise Sampaio Vasconcelos Vilela

Manoel Ivany de Queiroz Júnior

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6582215082>

CAPÍTULO 3..... 33

ROTINA DE SIMULAÇÃO EM YADE (LIVRE ACESSO) PARA ESCOAMENTO DE GRÃOS EM SILOS DE GRANDE PORTE UTILIZANDO MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS (DEM)

Gabriel Carvalho Matoso

Alexandre Candido Soares

Yara Daniel Ribeiro

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6582215083>

CAPÍTULO 4..... 47

SIMULAÇÃO VIA PYTHON DAS INTERAÇÕES DE ATRAÇÃO E REPULSÃO DE PARTÍCULAS PELO POÇO DE POTENCIAL DE LENNARD-JONES COMO REQUISITO PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO EM SILOS

Gabriel Carvalho Matoso

Alexandre Candido Soares

Yara Daniel Ribeiro

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.6582215084>

SOBRE A ORGANIZADORA..... 55

ÍNDICE REMISSIVO..... 56

SIMULAÇÃO VIA PYTHON DAS INTERAÇÕES DE ATRAÇÃO E REPULSÃO DE PARTÍCULAS PELO POÇO DE POTENCIAL DE LENNARD-JONES COMO REQUISITO PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO EM SILOS

Data de aceite: 11/08/2022

Data de submissão: 16/06/2022

Gabriel Carvalho Matoso

Universidade federal de Ouro Preto - DECAT
Ouro Preto – MG
<http://lattes.cnpq.br/7071168201328013>

Alexandre Candido Soares

Universidade federal de Ouro Preto -
REDEMAT
Ouro Preto – MG
<http://lattes.cnpq.br/5768088781427355>

Yara Daniel Ribeiro

Universidade federal de Ouro Preto -
REDEMAT
Ouro Preto – MG
<http://lattes.cnpq.br/6619922564101297>

RESUMO: A interação entre partículas em sistemas granulares dita o comportamentos que esses partículas apresentarão, desde comportamentos comuns até fenômenos não previstos. A importância do estudo dessas interações é crítica para o Brasil, visto que é um dos maiores exportadores de minério e grãos, que se comportam como sistemas particulares. Com isso, o presente trabalho teve como objetivo idealizar e testar uma rotina em Python, para prever as energias de poço de potencial de Lennard-Jones, para sistemas particulados genéricos, ou seja, com a possibilidade de adaptar os dados para qualquer partícula. Com essas energias de atração e repulsão,

tem-se a possibilidade de cálculos de energia internas desses sistemas com maior precisão, possibilitando a otimização de processos. A rotina executada e apresentada no estudo foi eficiente para prever os valores reais para diversas partículas. A rotina apresenta o poço de potencial e a visualização do comportamento das partículas por meio de imagens.

PALAVRAS-CHAVE: Poço de potencial, partículas, python, silo flow.

SIMULATION VIA PYTHON OF THE INTERACTIONS OF ATTRACTION AND REPULSION OF PARTICLES BY THE LENNARD-JONES POTENTIAL WELL AS A REQUIREMENT FOR SIMULATION OF FLOW IN SILOS

ABSTRACT: The interaction between particles in granular systems dictates the behavior that these particles will present, from common behaviors to unforeseen phenomena. The importance of studying these interactions is critical for Brazil, since it is one of the largest exporters of ore and grains, which behave as particular systems. With this, the present work aimed to idealize and test a routine in Python, to predict the Lennard-Jones potential well energies, for generic particulate systems, that is, with the possibility of adapting the data to any particle. With these energies of attraction and repulsion, it is possible to calculate the internal energy of these systems with greater precision, enabling the optimization of processes. The routine performed and presented in the study was efficient to predict the real values for several particles. The routine presents the potential well and the visualization of the behavior of the

particles through images.

KEYWORDS: potential well, particles, python, silo flow.

1 | INTRODUÇÃO

Os materiais granulares são aglomerados de partículas sólidas, em que a interação de uma partícula com suas vizinhas ocorrem por meio de forças de contato. Os sistemas granulares são sistemas fora do equilíbrio termodinâmico, sendo assim, o tratamento de dados deve ser realizado por métodos de simulação computacional [1-3]

Exemplos comuns de materiais granulares são areias, sementes, britas e minérios. Esses materiais estão presentes em diversas áreas industriais, da agroindústria aos produtos farmacêuticos, da geologia à mineração e siderurgia. Por esse motivo, o comportamento das interações entre partículas é estudado por vários grupos de pesquisa em todo o mundo, tanto para a pesquisa básica, quanto para as ciências aplicadas e as engenharias.

Sistemas granulares apresentam comportamentos interessantes, cuja explicação não encontrava base seja na Mecânica de Flúidos ou na Mecânica do Contínuo [4]. Tem-se como exemplos as vibrações e cisalhamento que levam a movimentos convectivos e segregação, variações de tensão que causam a formação de cadeias de tensão, entre outros [5].

Sabe-se que esses fenômenos curiosos estão atrelados as interações atômicas entre as partículas [3,6,7]. Um grande número de estudos experimentais em sistemas granulares foi realizado com base em análises das energias e distancias do poço de potencial de Lennard-Jones, que dita que um par de moléculas esta sujeita a duas forças distintas em relação à suas distancias físicas: uma força atrativa a grande distância (forças de London - forças de van der Waals) e uma força repulsiva em menores distâncias (o resultado de sobreposição de orbitais de elétrons, relacionados à forças do princípio de exclusão de Pauli) [8,9]. Esses estudos previram por simulações fenômenos quantitativo de compactação, misturas, segregação e padrões formados devido a vibrações [9,10]. Foram descobertos também 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.); cadeias de tensão altamente não homogêneas e localizadas em meios granulares quase estáticos [9-11]. 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, comuns em sistemas de suspensão concentradas.

Um trabalho interessante da compreensão do comportamento de sistemas granulares foi o de Silva (2010), que previu, por meio de simulação, os fenômenos de liquefação responsáveis pelos desastres recentes em barragens de minérios em Minas

Gerais [12].

Além disso, o Brasil é o segundo maior exportador de minério de ferro do mundo e o primeiro em exportação de soja, com valores na ordem de R\$50 bilhões em 2019, demonstrando ainda mais a importância de se compreender sistemas granulares, pois com isso, tem-se a possibilidade de otimização desses processos, diminuindo o custo e aumentando o lucro final [1,2].

Com base nas informações citadas, o presente estudo formulou uma rotina em Python para avaliar o poço de potencial de Lennard-Jones de uma partícula genérica, para poder ser adaptado para qualquer partícula, com a finalidade de avaliar as forças de atração e repulsão do sistema, contribuindo para entender o comportamento da energia interna de sistemas particulares.

2 | OBJETIVO

Formular uma rotina em Python, com a possibilidade de alterar os parâmetros das partículas, para simular o poço de potencial de Lennard-Jones das partículas em um sistema particulado.

3 | METODOLOGIA

A simulação em escala atômica foi realizada para que pudesse ser visto a interação entre átomos utilizando-se da linguagem em Python. Além do gráfico com o poço de potencial, a interação entre os átomos pode ser visualizada em escala macroscópica (imagem).

Os métodos utilizados foram: pygame, random, math, itertools, matplotlib, pyplot. Todos de livre acesso e código aberto.

A rotina e variáveis das partículas foram apresentadas e discutidas no texto.

4 | DISCUSSÃO

A rotina implementada em Python para a visualização do potencial de LJ, pode ser observado nas Figuras 1 – 3.

```

18 -*- coding: utf-8 -*-
19
20 import pygame
21 import random
22 import math
23 import itertools
24 import time
25 import matplotlib.pyplot as plt
26
27 tempoExec = input("Digite o tempo de execucao: ")
28 temperatura = 350
29 corDefundo cor = (255, 255, 255)
30 (largura, altura) = (1900, 1000)
31 num_de_particulas = 40
32 epsilon = 0.00000001
33 sigma = 150
34 partícula tam = 10
35 velocidade limit = 10
36 velocidade multiplier = 1
37 energia cinetica = 0
38 energia potencial = 0
39
40 def soma_vetor((angulo1, comprimento1), (angulo2, comprimento2)):
41     x_componente = math.sin(angulo1) * comprimento1 + math.sin(angulo2) * comprimento2
42     y_componente = math.cos(angulo1) * comprimento1 + math.cos(angulo2) * comprimento2
43     comprimento = math.hypot(x_componente, y_componente)
44     angulo = 0.5 * math.pi - math.atan2(y_componente, x_componente)
45     return angulo, comprimento
46
47 def calcula_angulo(a, b):
48     return math.atan2((b.y-a.y), (b.x-a.x)) + math.pi/2
49
50 def l_j_potencial(epsilon, sigma, r):
51     return 4 * epsilon * ((sigma/r)**12 - (sigma/r)**6)
52
53 def l_j_forca(epsilon, sigma, r):
54     return (-24 * epsilon) * (2 * (sigma**12 / r**13) - (sigma**6 / r**7))
55
56 def partícula_dist(a, b):
57     return math.sqrt((a.x-b.x)**2 + (a.y-b.y)**2)
58
59

```

Figura 1: parcela do código da primeira etapa (potencial LJ)

```

60
61 class Particula:
62     def __init__(self, (x, y), tam):
63         self.x = x
64         self.y = y
65         self.tam = tam
66         self.cor = (100, 100, 100)
67         self.espessura = 0
68         self.velocidade = 0
69         self.angulo = 0
70
71     def display(self):
72         pygame.draw.circle(screen, self.cor, (int(self.x), int(self.y)), self.tam, self.espessura)
73
74     def rebater(self):
75         while self.x > largura - self.tam:
76             self.x = 2*(largura - self.tam) - self.x
77             self.angulo = - self.angulo
78         while self.x < self.tam:
79             self.x = 2*self.tam - self.x
80             self.angulo = - self.angulo
81         while self.y > altura - self.tam:
82             self.y = 2*(altura - self.tam) - self.y
83             self.angulo = math.pi - self.angulo
84         while self.y < self.tam:
85             self.y = 2*self.tam - self.y
86             self.angulo = math.pi - self.angulo
87
88     def mover(self):
89         self.x += math.sin(self.angulo) * self.velocidade * velocidade_multiplier
90         self.y += math.cos(self.angulo) * self.velocidade * velocidade_multiplier
91
92 inicio = time.time()
93

```

Figura 2: parcela do código da primeira etapa (potencial LJ)

```

70 if __name__ == "__main__":
71
72     screen = pygame.display.set_mode([largura, altura])
73     pygame.display.set_caption("Simulação de partículas")
74
75     minhas_particulas = []
76     c = pygame.time.Clock()
77     for a in range(tam_de_particulas):
78         tam = particula.tam
79         x = random.randint(tam, largura-tam)
80         y = random.randint(tam, altura-tam)
81         particula = Particula(x, y, tam)
82         particula.velocidade = 0
83         particula.angulo = 0
84         minhas_particulas.append(particula)
85
86     while time.time()-inicio<tempoexec:
87         energia_cinetica = temperatura**0.5
88         energia_potencial = 0
89         screen.fill((corDefundo_cor))
90
91         for a, b in itertools.combinations(minhas_particulas, 2):
92             temp_lj_forca = lj_forca(epsilon, sigma, particula_dist(a, b))
93             temp_angulo = calcula_angulo(a, b)
94             (a.angulo, a.velocidade) = soma_vetor(a.angulo, a.velocidade, (temp_angulo, temp_lj_forca))
95             (b.angulo, b.velocidade) = soma_vetor(b.angulo, b.velocidade, (temp_angulo+math.pi, temp_lj_forca))
96             energia_potencial += lj_potencial(epsilon, sigma, particula_dist(a, b))
97
98         for particula in minhas_particulas:
99             energia_cinetica += 0.5 * particula.velocidade**2
100             particula.mover()
101             particula.rebater()
102             particula.display()
103             c.tick(120/velocidade_multiplier)
104             pygame.display.flip()
105
106         print("Energia cinetica: ", energia_cinetica)
107         print("Energia potencial: ", energia_potencial)
108
109     pygame.QUIT
110     print("Tempo de execucao: ", round((time.time()-inicio), 2))
111     distancias = []
112     numero_de_particulas = []
113
114     for a, b in itertools.combinations(minhas_particulas, 2):
115         distancias.append(math.floor(particula_dist(a, b)/(a.x+b.x)))
116         numero_de_particulas.append(5)

```

Figura 3: parcela do código da primeira etapa (potencial LJ).

Como pode-se observar, vários parâmetros relacionado as partículas em estudo devem ser inseridos no código.

Após a execução desta rotina no Python 2, tem-se o aparecimento de uma janela do método *PyGame*. Nessa janela, podem-se observar as moléculas interagindo entre si, seguindo as regras do potencial de interação de LJ. Esse método de exibição é de grande importância visto que se tem a possibilidade de variar os parâmetros base encontrados no programa, alterando assim a visualização de interações de átomos de diferentes configurações, importante para as aplicações reais.

Com base nos parâmetros utilizados (vide código), que são catalogados (para testar a eficiência do código), obteve-se a seguinte janela de execução, conforme a Figura 4:

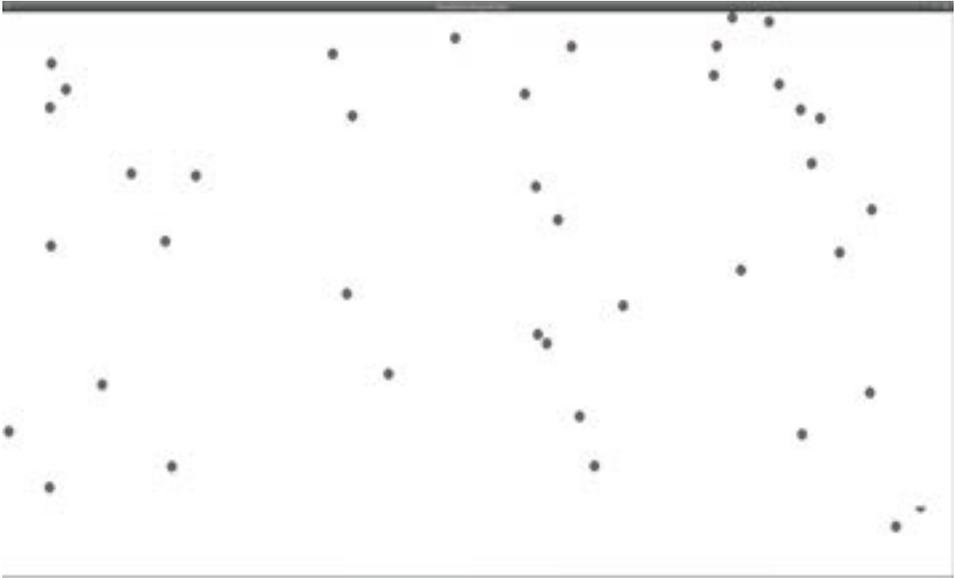


Figura 4: Janela de visualização gerada após a execução do código da primeira etapa (potencial LJ)

Os pontos escuros na imagem representam as partículas, que se movimentam livremente conforme o tempo varia. De maneira geral, quando uma partícula se aproxima suficientemente, ocorre a repulsão mútua dos corpos, quando se afastam a uma distância também suficiente, tem a atração mútua. Esse processo de atração e repulsão é regido pela energia do poço de potencial de LJ, demonstrando a importância da análise desse poço de potencial.

Após a janela da visualização das partículas, também foi gerado o gráfico do poço de potencial LJ para as partículas simuladas, apresentado na Figura 5.

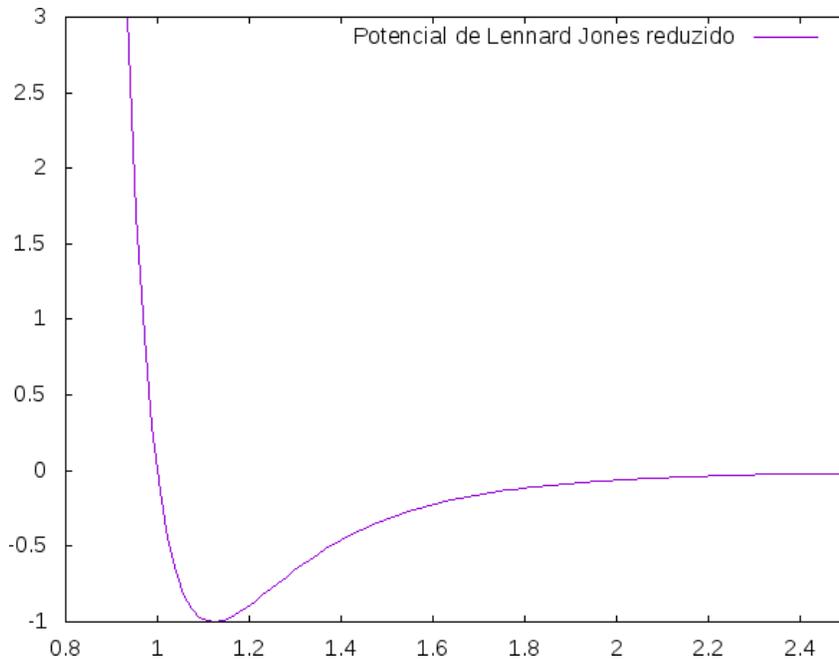


Figura 5: Potencial LJ

Como se pode observar no gráfico da Figura 5, tem-se o poço de potencial que regi o comportamento dessas partículas. Ao analisarmos, foi possível determinar que na distância entre as partículas de 1,1 unidades (eixo x) é o ponto de equilíbrio das forças, sendo que antes desse ponto ($<1,1$), tem-se as forças de repulsão agindo, pois as partículas encontram-se muito próximas. E acima do ponto de equilíbrio ($>1,1$), se tem as forças de atração atuando, pois as moléculas estão se afastando, mas ainda interagindo entre si. Contudo, as partículas costumam se relacionar em distancias próximas ao ponto de equilíbrio, oscilando entre atração e repulsão, ou seja, as partículas se atraem e se repelem em um ciclo incessante próximo ao poço de potencial de LJ, por isso a importância de se realizar esse estudo para qualquer sistema particulado, pois com base nessa distancia de equilíbrio, consegue-se sistemas cada vez mais próximos à realidade. Vale ser ressaltado que essa simulação se trata de uma simulação não dissipativa, então a energia total do sistema é conservada.

5 | CONCLUSÃO

O presente trabalho teve êxito em programar uma rotina para avaliação do poço de potencial de Lennard-Jones, pois os resultados simulados coincidiram com os resultados empíricos.

Com isso, essa simulação se torna de suma importância para prever os valores

da energia interna de sistemas particulados, como em escoamentos em silos de grãos ou minérios, favorecendo o entendimento de fenômenos desses processos, abrindo a oportunidade para sua otimização.

REFERÊNCIAS

- [1] TEJCHMAN, J. Confined Granular Flow in Silos: Experimental and Numerical Investigations (Springer, 2013).
- [2] BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-Organized Criticality. An explanation of $1/f$ noise. *Phys. Rev Lett*, 59, p. 381 (1987).
- [3] CALAZANS, Leonardo Ferreira et al. Termodinâmica de estados estacionários: entropia, equivalência de ensembles e independência de reservatórios. 2020.
- [4] DA SILVA, T. M. Simulação de Segregação e Ondulações em Estradas Não Pavimentadas. 2016. Dissertação (Ciências - Física dos Materiais) - Universidade Federal de Ouro Preto.
- [5] DA SILVA, T. M.; BERNARDES, A. T. Ripples and Grains Segregation on Unpaved Road. *International Journal Of Modern Physics C*, v.29, p.1850120 - 2018.
- [6] FULLARD LA et al. 2019 The dynamics of granular flow from a silo with two symmetric openings. *Proc. R. Soc. A* 475: 20180462. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.2018.0462>.
- [7] HANSEN, A.; BIDEAU, D. (eds.) Disorder and Granular Media, North-Holland: Amsterdam, 1992
JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; Science 255, 1523 (1992).
- [8] LOPES, P. F. T.; Modelagem de Fluxo em Meios Granulares: Uma abordagem Física, Matemática e Numérica. 2015. Dissertação (Engenharia Mineral) - Universidade Federal de Ouro Preto.
- [9] NEVES, C. E.V.; 2009. Comportamento de Materiais Granulares usando o Método dos elementos discretos. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação Universidade de Brasília. Brasília, 2009.
- [10] PINTO, S. F.; COUTO, M. S.; ATMAN, A.; ALVES, S. G.; BERNARDES, A. T.; REZENDE, H. F. V.; SOUZA, E. C. Granular fingers on jammed systems: new fluid-like patterns arising in grain-grain invasion experiments. *Physical Review Letters*. , v.99, p.e068001 – 2007.
- [11] SILVA, A. C. Simulação computacional da redução direta de minério de ferro em fornos.
- [12] SILVA, W.P. (2010). Estudo do potencial de liquefação estática de uma barragem de rejeito alteada para montante aplicando a metodologia de Olson (2001). Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, Minas Gerais. 120pp.

SOBRE A ORGANIZADORA

AMANDA FERNANDES PEREIRA DA SILVA - Graduada em Engenharia Civil pelo Centro Universitário Santo Agostinho (UNIFSA), é Mestranda em Ciência e Engenharia dos Materiais pelo Programa de Pós-Graduação (PPGCM) da Universidade Federal do Piauí (UFPI). Atua na área de pesquisa Materiais Magnéticos, Semicondutores e Semicondutores Magnéticos Diluídos com aplicações antibacterianas sob orientação do Professor Doutor Ramón Raudel e Professora Doutora Francisca Araújo. Além disso, seus temas de interesse são: Construção Civil, Patologia das Construções, Materiais da Construção Civil, Perícia Judicial, Concreto, Análise do Comportamento de Solos, Ensino de Engenharia e Educação à Distância.

ÍNDICE REMISSIVO

A

Alvenaria 1, 2, 4, 5, 8, 10
Aplicação aeroespacial 19, 24, 25, 26, 28, 30
Aplicação nuclear 19, 23, 25, 26, 30, 31
Aplicação petrolífera 24, 25, 26, 28, 30
Aquecimento 1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12
Arcos de tensão 33

B

Blocos cerâmicos 1, 4, 9, 10, 11, 12

C

Concreto 1, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 55
Conforto térmico 1, 2, 4
Construção civil 1, 2, 55

D

Desempenho térmico 1, 2, 3, 13, 14
Dureza 15, 21, 22, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32

E

Edificação 1, 2, 3, 13
Energia 2, 3, 12, 43, 44, 47, 49, 52, 53, 54
Energia interna 49, 54
Envelhecimento 15, 17, 18, 19, 20, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32
Escoamento 33, 34, 35, 37, 38, 42, 46, 47, 48

G

Grãos 21, 29, 33, 34, 35, 36, 38, 40, 41, 42, 44, 45, 46, 47, 48, 54

I

Inconel 718 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 29, 30, 32
Interação 34, 38, 47, 48, 49, 51

M

Materiais granulares 34, 46, 48, 54
Mecânica 15, 16, 29, 31, 32, 33, 48

Método de elementos discretos (DEM) 33, 35, 36

Microestrutura 15, 17, 20, 22, 23, 25, 32

N

NBR 15575 1, 2

Níquel 15, 16, 17

O

Otimização 34, 35, 47, 49, 54

P

Partículas 17, 20, 23, 30, 34, 35, 36, 43, 44, 47, 48, 49, 51, 52, 53

Poço de potencial 47, 48, 49, 52, 53

Potencial de Lennard-Jones 47, 48, 49

Python 33, 34, 35, 45, 47, 48, 49, 51

R

Resistência 2, 15, 16, 17, 25, 29, 30, 31, 44

S

Silo flow 45, 47, 48

Silos 33, 34, 35, 36, 45, 46, 47, 54

Simulação 33, 34, 35, 36, 37, 38, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 53, 54

Simulação em Yade 33

Sistemas de vedações verticais 1

Sistemas granulares 33, 34, 47, 48, 49

Solubilização 15, 17, 19, 20, 22, 25, 29, 31, 32

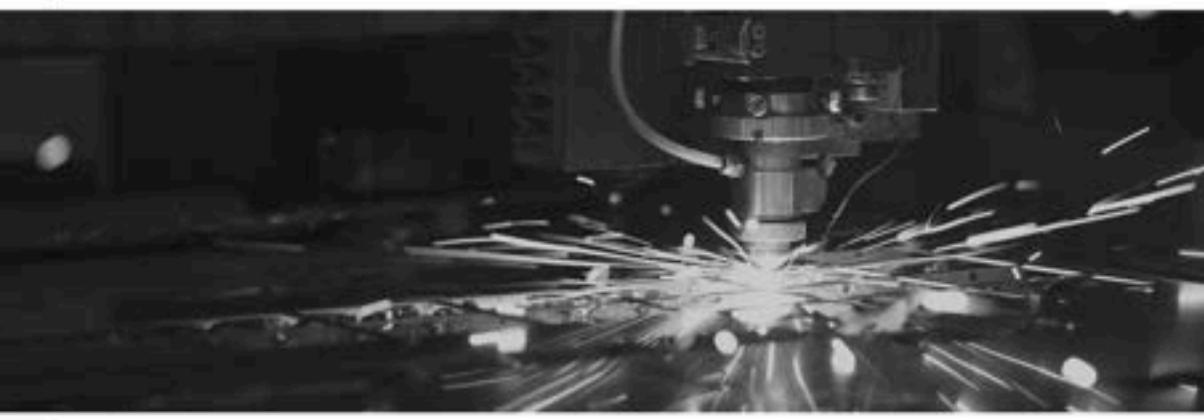
Superligas 15, 16, 17

T

Temperatura 1, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 11, 12, 15, 16, 19, 20, 24, 36

Termografia infravermelha 1, 2, 3

Tratamento térmico 17, 23, 25, 26, 30



DESENVOLVIMENTO E TRANSFERÊNCIA DE TECNOLOGIA NAS ENGENHARIAS DE MATERIAIS E METALÚRGICA

-  www.atenaeditora.com.br
-  contato@atenaeditora.com.br
-  [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)
-  www.facebook.com/atenaeditora.com.br



DESENVOLVIMENTO E TRANSFERÊNCIA DE TECNOLOGIA NAS ENGENHARIAS **DE MATERIAIS E METALÚRGICA**

-  www.atenaeditora.com.br
-  contato@atenaeditora.com.br
-  [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)
-  www.facebook.com/atenaeditora.com.br