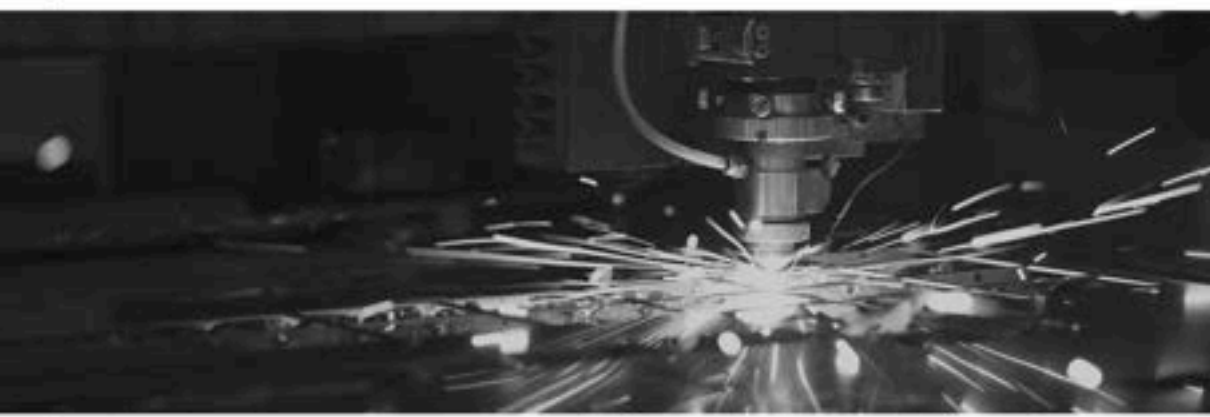




DESENVOLVIMENTO E TRANSFERÊNCIA DE TECNOLOGIA NAS ENGENHARIAS DE MATERIAIS E METALÚRGICA

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

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

Data de aceite: 11/08/2022

Data de submissão: 10/08/2022

Rodrigo Manoel Rufino Leão

Universidade Estadual do Piauí
Teresina – Piauí

<http://lattes.cnpq.br/0104303422060603>

Amanda Fernandes Pereira da Silva

Engenheira Civil
Teresina – Piauí

<http://lattes.cnpq.br/6687283757018503>

Alisson Rodrigues de Oliveira Dias

Universidade Estadual do Piauí
Teresina – Piauí

<http://lattes.cnpq.br/7625882727010720>

RESUMO: A cada ano, uma busca por maior conforto e qualidade de vida vem se acentuando na sociedade. A construção civil está diretamente ligada a esse fator, visto que uma pessoa passa grande parte de seu dia a dia dentro de uma edificação, seja em sua moradia, no trabalho, lazer, dentro outros. Logo, esses locais devem oferecer condições térmicas adequadas para o conforto humano, assim como estão descritas na norma técnica de desempenho das edificações habitacionais. Desta forma, um dos primeiros elementos a se considerar no quesito conforto térmico em uma construção é a alvenaria de vedação, visto que, juntamente com a cobertura, são os sistemas que mais recebem radiação solar, e baseado em seus desempenhos, o ambiente interno sofrerá grandes ou pequenas variações

da temperatura. Este trabalho foi elaborado com o objetivo de analisar o desempenho térmico dos dois tipos de blocos mais utilizados para vedação no Brasil, sendo estes o bloco cerâmico e o de concreto. Para isso, foi realizado um experimento que consistiu em produzir dois painéis de vedação, nas dimensões de 1,0m x 0,80m (altura x comprimento), sendo um de cada tipo de bloco estudado, aquecê-los com uma fonte artificial de calor (câmara térmica) e analisar o comportamento desses sistemas nas fases de aquecimento e de resfriamento, por meio do monitoramento das temperaturas superficiais dos painéis com o auxílio de uma câmera termográfica. Após a realização dos ensaios e análises dos resultados, concluiu-se que, para a localidade em que foi feito o estudo, na zona bioclimática 7 de acordo com a NBR 15220-3, a alvenaria produzida com blocos cerâmicos fornece um melhor desempenho, quando comparada com a alvenaria em blocos de concreto no quesito conforto térmico.

PALAVRAS-CHAVE: Conforto térmico, sistemas de vedações verticais, NBR 15575.

COMPARATIVE ANALYSIS OF THE THERMAL PERFORMANCE OF CERAMIC AND CONCRETE BLOCK MANSORY BY INFRARED THERMOGRAPHY

ABSTRACT: Every year, a search for greater comfort and quality of life has been accentuated in society. Civil construction is directly linked to this factor, since a person spends a large part of their day to day inside a building, whether at home, at work, leisure, among others. Therefore, these places must offer adequate thermal conditions

for human comfort, as described in the Brazilian technical standard for the performance of housing buildings. In this way, one of the first elements to consider in terms of thermal comfort in a building is the masonry seal, since, together with the roof system, they are the systems that receive the most solar radiation, and based on their performance, the internal environment will suffer large or small variations in temperature. This work had the objective of analyzing the thermal performance of two types of blocks most used for sealing in Brazil, the ceramic and concrete blocks. For this, an experiment was carried out that consisted of producing two masonry panels, in the dimensions of 1.0m x 0.80m (height x length), one of each type of block studied, heating them with an artificial heat source (thermal chamber) and to analyze the behavior of these systems in the heating and cooling phases, by monitoring the surface temperatures of the panels with a thermographic camera. After carrying out the tests and analyzing the results, it was concluded that, for the location where the study was carried out, in the bioclimatic zone 7 according to NBR 15220-3, the masonry produced with ceramic blocks provides a better performance, when compared to masonry in concrete blocks in terms of thermal comfort.

KEYWORDS: Thermal comfort, masonry systems, NBR 15575.

1 | INTRODUÇÃO

O conforto térmico nas edificações, seja residencial ou comercial, é de fundamental importância para a satisfação dos usuários. De acordo com *American Society of Heating, Refrigerating and Air Conditioning Engineers - ASHRAE* (2017), conforto térmico é um estado de espírito que reflete a satisfação com o ambiente térmico que envolve a pessoa.

Logo, quando essa satisfação não é proporcionada pela edificação em seu interior, acarreta que além de trazer desconforto aos usuários, também influencia diretamente no consumo energético, uma vez que os ocupantes tendem a tomar medidas para tornar o ambiente interno mais agradável, como exemplo, o uso de aparelhos destinados à climatização.

De acordo com Lamberts (2014), os edifícios foram responsáveis com cerca de 40% do consumo global de energia e cerca de 30% das emissões de gás carbônico (CO₂), atingindo até mesmo percentuais maiores nos dias de hoje. Uma considerável parcela desta energia é destinada para o conforto térmico dos edifícios (YANG; YAN; LAM, 2014).

Por meio do uso de sistemas construtivos com elevada resistência térmica, pode-se reduzir o fluxo de calor através dos sistemas de vedações e, dessa forma, diminuir a carga térmica no interior das edificações. Com isso, torna-se necessário o conhecimento sobre o desempenho térmico dos diferentes tipos de alvenaria que vêm sendo utilizados na construção civil.

Desta forma, o presente estudo teve como objetivo analisar comparativamente o desempenho térmico de diferentes tipos de alvenaria utilizando a técnica da termografia infravermelha.

2 | DESEMPENHO TÉRMICO DAS EDIFICAÇÕES

O desempenho térmico pode ser compreendido como um comportamento térmico de uma edificação frente a parâmetros pré-determinados (ou não) de condições de conforto e desempenho dos materiais. Sua mensuração antes do início da construção, ajuda a estabelecer os limites mínimos ideais para garantir à edificação condições térmicas adequadas para a circulação ou habitação do ser humano (LOPES, 2010).

Na NBR 15220-3 (ABNT, 2005c), para a formulação das diretrizes construtivas estabelecidas pela mesma, para cada zona bioclimática brasileira, dentre os parâmetros considerados, enquadram-se as vedações externas (tipo de parede externa e tipo de cobertura), objeto de estudo desta pesquisa.

Lamberts (2016) afirma que a condutividade térmica depende da densidade do material e representa sua capacidade em conduzir maior ou menor quantidade de calor por unidade de tempo.

De acordo com NBR 15220-1 (ABNT, 2005a), a condutividade térmica (λ) é uma “propriedade física de um material homogêneo e isótropo, no qual se verifica um fluxo de calor constante, com densidade de 1 W/m^2 , quando submetido a um gradiente de temperatura uniforme de 1 Kelvin por metro”. A NBR 15220-2 (ABNT, 2005b) mostra na tabela B.3 do anexo B, a condutividade térmica e o calor específico para diversos materiais de construção, em função de suas densidades de massa aparente.

Atualmente, a termografia infravermelha é uma ferramenta consolidada em testes não destrutivos, sendo utilizada em diversas áreas, tais como militar, medicina humana e veterinária, industrial e na engenharia civil. Nesta, as técnicas de termografia vem sendo usadas para identificações de manifestações patológicas em edificações, pois é possível localizar anomalias não aparentes desde a fase inicial, possibilitando definir as devidas intervenções necessárias para evitar danos maiores.

Além dessa utilização, uma outra possibilidade de uso se dá com o estudo de medidas de conservação de energia. A partir da análise de imagens termográficas é possível localizar pontos de ganhos e perdas de calor em toda parte da edificação, permitindo identificar localidades que estão submetidas tanto à alta quanto à baixa intensidade de radiação solar.

A técnica termográfica, em nível de aplicação, divide-se em passiva e ativa. Na termografia passiva, é considerado que os objetos analisados possuem armazenamento interno de energia térmica ou são sujeitos por uma fonte natural de calor, como exemplo a energia solar. Já na termografia ativa, os objetos analisados são submetidos a uma fonte artificial de aquecimento ou resfriamento, com o objetivo de provocar o fluxo de calor necessário para geração da imagem térmica (MALDAGUE, 2001). Será utilizado então o segundo caso de aplicação para atingir os objetivos deste estudo.

3 | PROGRAMA EXPERIMENTAL

O experimento foi realizado em laboratório na cidade de Teresina, Piauí, com o intuito de minimizar alterações nos resultados causados por agentes externos. O programa experimental consistiu na caracterização dos materiais, montagem dos painéis de vedação, medição e análise dos dados, comparação dos resultados e conclusão sobre qual tipo de bloco apresenta resultados mais satisfatórios com relação ao conforto térmico, para a zona bioclimática em que o local do experimento se localiza, sendo então a zona 7, de acordo com a NBR 15220-3 (ABNT, 2005c).

Foram produzidos dois painéis de alvenaria de vedação (Figura 1) nas dimensões de 1,00 m x 0,80 m (altura x comprimento), sendo um de bloco cerâmico e outro de concreto. Os dois tipos de blocos utilizados nos protótipos possuem dimensões iguais de 9 x 14 x 19 cm, sendo assim, os painéis tinham espessura de 9 cm, visto que foram ensaiados sem qualquer tipo de revestimento, a fim de analisar apenas os materiais dos blocos.

Com o objetivo de fornecer calor aos painéis e reproduzir aproximadamente as condições de aquecimento das faces externas das alvenarias de vedações pela radiação solar, foi construído uma câmara térmica (Figura 2) como fonte artificial de calor, desenvolvida nas dimensões de 40cm x 40cm x 40 cm (altura x largura x comprimento), sendo uma das faces vazada para que se tenha uma única saída do calor produzido pela fonte.



Figura 1 – Painéis de alvenaria de vedação utilizados no estudo: com blocos cerâmicos (à esquerda) e com blocos de concreto (à direita)

Fonte: Autores, 2022.

Os materiais utilizados para a construção da câmara térmica foram: folhas de madeira para revestimento externo, poliestireno expandido (EPS) para revestimento interno, papel

laminado para revestir o EPS, lâmpada de 250 W para fonte de calor, dimmer com um disjuntor, para a regulação da intensidade de luz produzida. Além de materiais extras como cola e pedaços de madeirite, para a estruturação das laterais da câmara térmica.

Para a obtenção dos dados térmicos referentes ao experimento, foi utilizada uma câmera termográfica Modelo Flir CAT S60 (Figura 2), com indicações de temperaturas máximas, mínimas e média nos painéis de alvenaria.

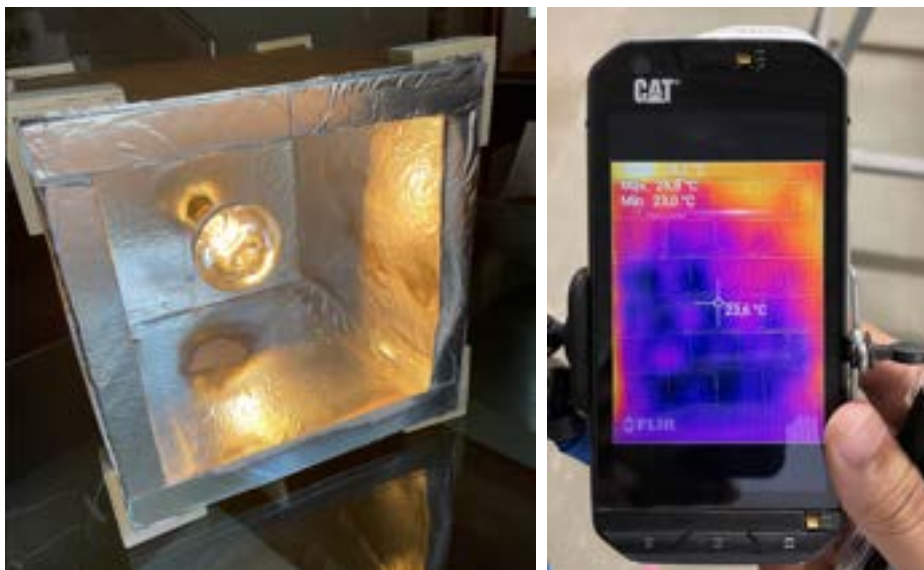


Figura 2 – Câmara térmica utilizada como fonte de calor artificial para aquecimento dos painéis (à esquerda) e câmera termográfica utilizada na coleta dos dados térmicos (à direita)

Fonte: Autores, 2022.

Para evitar que a câmara térmica sofresse algum tipo de deterioração, devido ao fato das temperaturas máximas de ensaio atingirem valores superiores a 100 °C, ultrapassando assim a temperatura de fusão do EPS, foi previamente investigado, por meio do dimmer, uma regulação que permitisse uma geração de calor entre 60 °C e 75 °C na face oposta à lâmpada.

Os procedimentos adotados para os ensaios foram os mesmos para os dois painéis investigados (bloco cerâmico e de concreto), sendo cada um realizado em um dia diferente, com proximidades nos horários e condições climáticas, para minimizar as alterações entre os ensaios por conta da temperatura ambiente.

Para a realização do ensaio, colocou-se a face vazada da câmara térmica o mais próximo possível do centro de uma das faces do painel de vedação (Figura 3), simbolizando esta face o lado externo das alvenarias que recebem a radiação solar. Já na outra face, com uma distância de aproximadamente 1,50 m, foi posicionada a câmera termográfica,

com o intuito de analisar termicamente o desempenho na face interna das alvenarias.



Figura 3 – Instrumentação do experimento com posicionamento da fonte artificial de calor nas faces externas e da câmara termográfica nas faces internas

Fonte: Autores, 2022.

Antes de ligar a fonte artificial de calor, foram coletadas imagens térmicas das duas faces dos painéis (interna e externa) para identificar a temperatura inicial das alvenarias antes de começar o experimento. Após isso, iniciou-se o processo de aquecimento com duração de 30 minutos, tempo necessário para atingir uma temperatura ideal para a realização do experimento.

Durante esse período (aquecimento), a cada 10 minutos foi coletada uma imagem térmica da face interna, para a posterior análise do comportamento dos blocos no período em que são submetidos a radiação solar. Após os 30 minutos referentes ao aquecimento, removeu-se a fonte de calor e foi analisado o comportamento das alvenarias nas 2 horas seguintes, denominada de período de resfriamento. Durante este período, foram registradas imagens térmicas a cada 30 minutos. Na Figura 4 pode ser visto um fluxograma dessas etapas.



Figura 4 – Fluxograma das etapas aplicadas durante o ensaio para coleta dos dados térmicos

Fonte: Autores, 2022.

4 | RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Painel de vedação com blocos de concreto

As imagens térmicas da face interna coletadas no ensaio com o painel construído com blocos de concreto podem ser visualizadas na Figura 5.

Analisando a primeira imagem, sendo esta obtida na temperatura ambiente (minuto 0), percebe-se que na parte superior encontra-se com maiores temperaturas, visto que embora o experimento tenha sido realizado em laboratório, neste lugar havia aberturas que permitia, mesmo que pouca, a entrada da radiação solar. Além disso, a própria dinâmica do fluxo de ar no ambiente também favorece isto, haja visto que o ar quente tende a subir enquanto que o ar frio tende a descer, devido às suas diferenças de densidade.

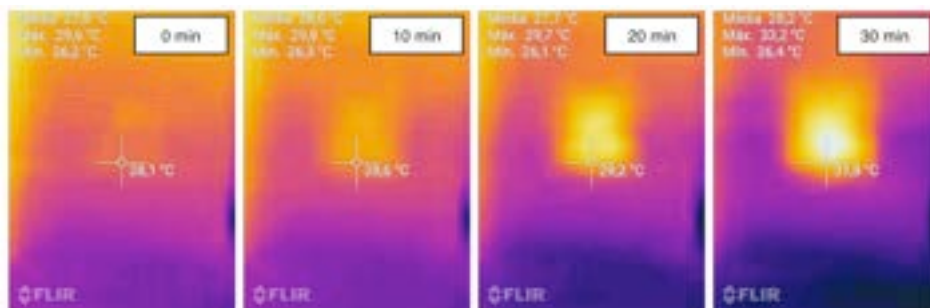


Figura 5 – Imagens térmicas do painel de bloco de concreto durante o período de aquecimento

Fonte: Autores, 2022.

Seguindo com as demais imagens, é perceptível o crescimento da temperatura na parte central das imagens, visto que a câmara térmica (fonte de calor artificial) foi posicionada de forma que ficasse em contato com a parte central das alvenarias, logo essa região será a parte que mais receberá calor durante o experimento, e conseqüentemente a que mais será analisada para atingir os objetivos do estudo.

Após os 30 minutos de aquecimento, além da fotografia térmica tirada da face interna da alvenaria, foi tirada também de sua face externa (lado que recebeu a fonte de calor) para fins de comparação (Figura 6). Comparando a face interna (imagem da esquerda) com a externa (imagem da direita), houve uma variação de 28,8 °C da temperatura máxima detectada.

Após o processo de aquecimento, retirou-se a fonte de calor e foram coletadas imagens térmicas a cada 30 minutos, até concluir um período de 2 horas, tempo necessário para a alvenaria atingir a temperatura que se encontrava antes de iniciar o experimento. As imagens obtidas estão apresentadas na Figura 7.

É possível observar que a face interna do painel atingiu seu pico máximo de temperatura na fase de resfriamento, especificamente após 30 minutos da retirada da fonte de calor. Ao atingir o pico no minuto 30, houve uma queda de aproximadamente 3,7° C no minuto 60, decaindo gradativamente na próxima hora restante, finalizando as 2 horas com uma temperatura relativamente menor que a temperatura inicial.

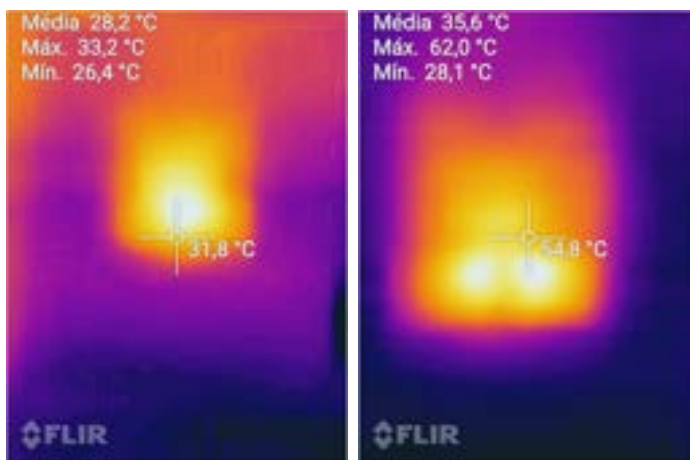


Figura 6 – Imagens térmicas das faces interna (à esquerda) e externa (à direita) do painel com blocos de concreto após 30 minutos de aquecimento

Fonte: Autores, 2022.

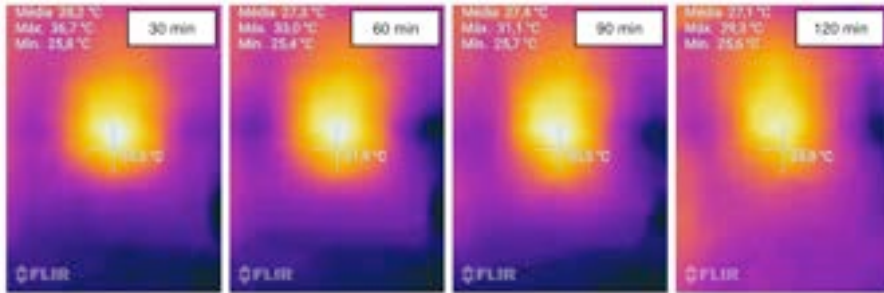


Figura 7 – Imagens térmicas do painel de blocos de concreto durante o período de resfriamento

Fonte: Autores, 2022.

Na Figura 8 é apresentado o comportamento gráfico das temperaturas média, máxima e mínima detectadas na face interna do painel rodudizado com blocos de concreto durante as fases de aquecimento e resfriamento do ensaio.

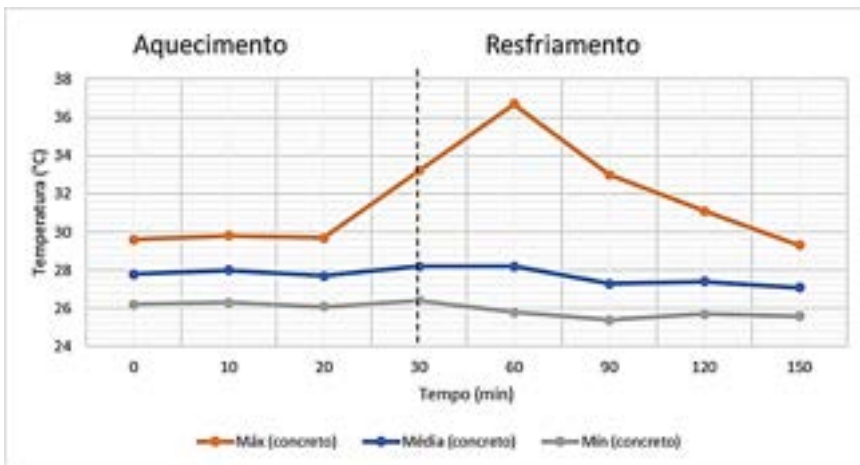


Figura 8 – Comportamento térmico do painel de vedação com blocos de concreto

Fonte: Autores, 2022.

4.2 Painel de vedação com blocos cerâmicos

As imagens térmicas da face interna coletadas no ensaio com o painel construído com blocos de concreto podem ser visualizadas na Figura 9.

É possível observar o crescimento da temperatura na parte central do painel por conta da posição da câmara térmica, identificado pelo aumento do calor no centro das imagens.

Iniciando com uma temperatura máxima de aproximadamente 27,9 °C, após os 30 minutos de aquecimento houve um grande crescimento de 5,3 °C, atingindo 33,2 °C

aproximadamente.

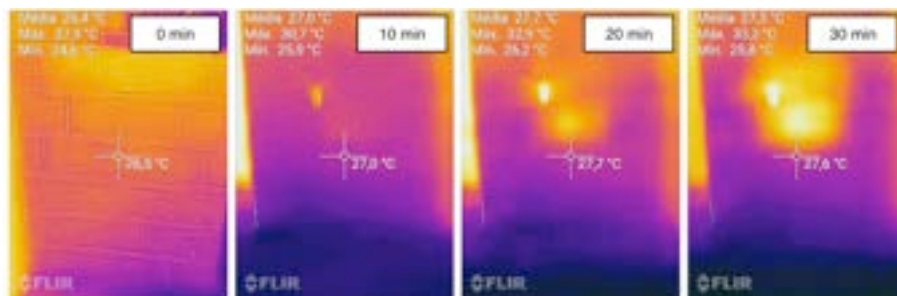


Figura 9 – Imagens térmicas do painel de blocos cerâmicos durante o período de aquecimento

Fonte: Autores, 2022.

Após os 30 minutos de aquecimento, foi obtida uma imagem da face externa do painel para analisar a diferença das duas faces após o aquecimento (Figura 10). Nota-se que a face externa do painel de blocos cerâmicos atingiu um valor máximo de 73,4 °C, enquanto que no painel de blocos de concreto chegou a 62,0 °C (Figura 8), sendo uma diferença de 11,4 °C entre as faces externas dos dois tipos de alvenaria. Já na face interna, os dois painéis atingiram o mesmo valor máximo, de 33,2 °C após os 30 minutos de aquecimento.

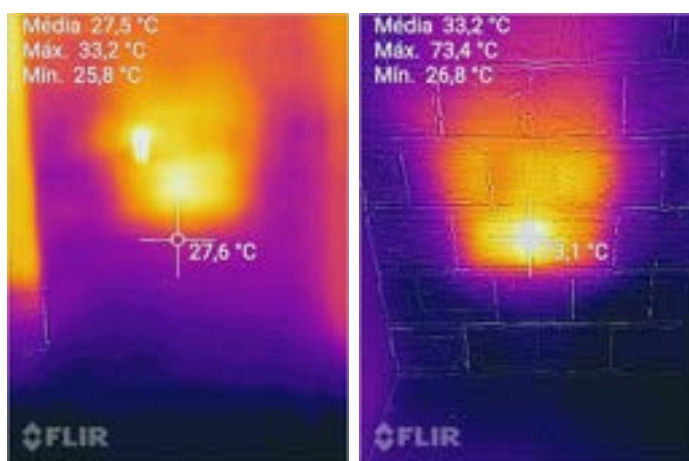


Figura 10 – Imagens térmicas das faces interna (à esquerda) e externa (à direita) do painel com blocos cerâmicos após 30 minutos de aquecimento

Fonte: Autores, 2022.

A Figura 11 apresenta as imagens térmicas capturadas durante o processo de resfriamento do painel de bloco cerâmico, no período de 2 horas, com coleta de imagens

a cada 30 minutos.

Assim como ocorreu para o ensaio com o painel de blocos de concreto, no painel com blocos cerâmicos o pico da temperatura máxima atingida se encontrou na fase de resfriamento, 30 minutos após a retirada da fonte de calor. Porém, no painel de blocos de concreto, com 60 minutos de resfriamento já se observavam valores menores que as temperaturas atingidas no momento de 30 minutos de aquecimento, enquanto que no painel de blocos cerâmicos, mesmo após 60 minutos de resfriamento, este ainda se encontrava com temperaturas maiores do que o momento de 30 minutos de aquecimento.

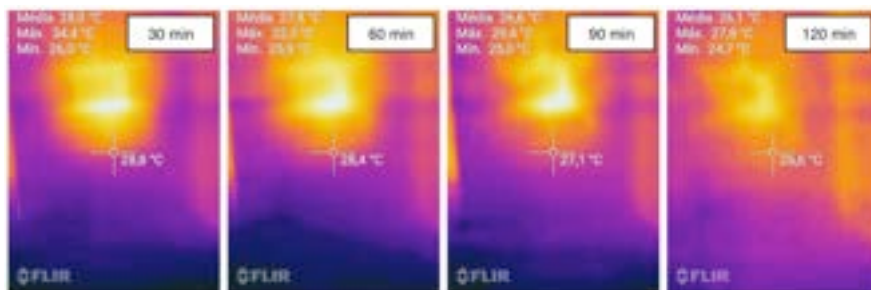


Figura 11 – Imagens térmicas do painel de blocos cerâmicos durante o período de resfriamento

Fonte: Autores, 2022.

Após concluído o tempo de resfriamento, houve uma queda da temperatura máxima de aproximadamente 6,6 °C. Na Figura 12 é apresentado o comportamento gráfico das temperaturas média, máxima e mínima detectadas na face interna do painel roduzido com blocos cerâmicos durante as fases de aquecimento e resfriamento do ensaio.

Para facilitar a análise de comparação entre os resultados dos dois painéis, foi elaborado o gráfico apresentado na Figura 13. Pelo fato de o concreto ter um alto valor de condutividade térmica, ou seja, é um melhor condutor de calor comparado com a cerâmica, o painel de blocos de concreto atingiu temperaturas superiores no pico das temperaturas máximas. Além disso, percebe-se que o painel de blocos de concreto permaneceu com maiores valores nas três variáveis (média, máxima e mínima) após a finalização dos ensaios.

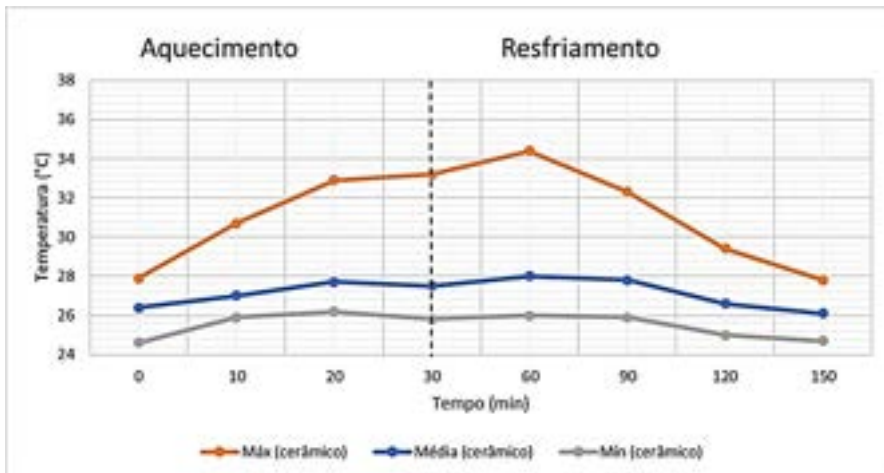


Figura 12 – Comportamento térmico do painel de vedação com blocos cerâmicos

Fonte: Autores, 2022.

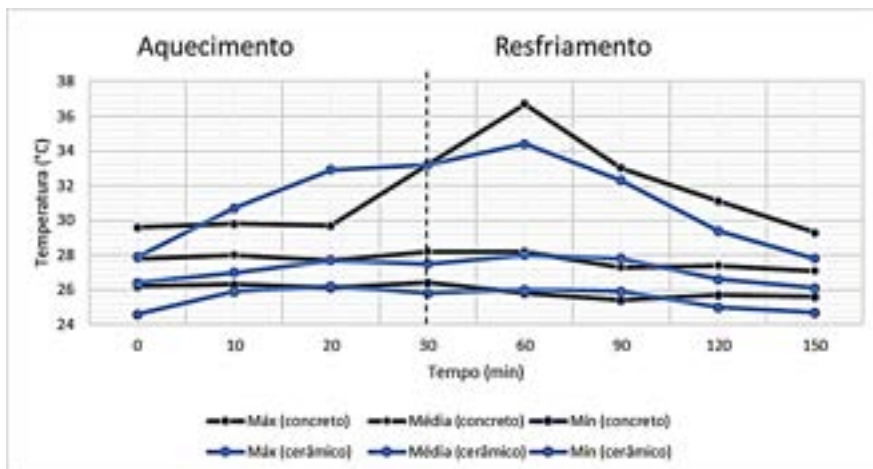


Figura 13 – Comparativo entre os comportamentos térmicos dos painéis estudados

Fonte: Autores, 2022.

Ainda, pelo fato de o concreto possuir uma maior capacidade térmica que a cerâmica, conforme anexo D da NBR 15220-3 (ABNT, 2005c), precisando assim de uma maior quantidade de energia para sofrer uma variação de temperatura, percebe-se que o painel de blocos de concreto permaneceu com uma temperatura constante até os 20 minutos de aquecimento, elevando a temperatura a partir desse ponto, enquanto que o painel de blocos cerâmicos já foi aumentando desde o momento inicial em que começou a receber a fonte de calor, comprovando na prática os valores das propriedades térmicas determinadas pela norma, destes materiais.

5 | CONCLUSÕES

Na análise comparativa de desempenho térmico dos sistemas, o bloco cerâmico apresentou resultados mais satisfatórios, pois embora sua face interna tenha aquecido mais rapidamente, devido ao material cerâmico ter uma menor capacidade térmica que o concreto, ele permaneceu com menores temperaturas durante os ensaios, sendo que no pico das temperaturas máximas, houve uma diferença de aproximadamente 2,3 °C entre os dois painéis.

Logo, torna-se mais satisfatório, em se tratando de desempenho térmico, utilizar o bloco cerâmico na zona bioclimática de número 7. Sendo válido ressaltar que o Brasil é dividido em 8 zonas bioclimáticas de acordo com a NBR 15220-3 (2005), logo é um país com grandes variações climáticas em toda a extensão do território, havendo a possibilidade de variações destes resultados.

A partir disso, conclui-se que esta avaliação não dispensa a análise caso a caso de cada edificação, por isso continua sendo necessário estudar todas as variáveis intervenientes no ambiente construído, já que não existe um sistema construtivo ideal para todo o território brasileiro. Por isso, haverá sempre uma necessidade de estudo antes de iniciar qualquer construção, para que seja determinada qual material apresentará um melhor desempenho térmico, dependendo da localidade em que se encontra a edificação.

REFERÊNCIAS

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 15220-1**: Desempenho térmico de edificações parte 1: Definições, símbolos e unidades. Rio de Janeiro, 2005a.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 15220-2**: Desempenho térmico de edificações parte 2: Métodos de cálculo da transmitância térmica, da capacidade térmica, do atraso e do fator solar de elementos e componentes de edificações. Rio de Janeiro, 2005b.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 15220-3**: Desempenho térmico de edificações parte 3: Zoneamento bioclimático brasileiro e diretrizes construtivas para habitações unifamiliares de interesse social. Rio de Janeiro, 2005c.

AMERICAN SOCIETY OF HEATING, REFRIGERATING AND AIR CONDITIONING ENGINEERS. ASHRAE 55/2017: **Thermal environmental conditions for human occupancy**. Atlanta, 2017

YANG, L.; YAN, H.; LAM, J. C. Thermal confort and building energy consumption implications - a review. **Applied Energy**, Hong Kong - China, v. 115, p.164 - 173, 2014.

MALDAGUE, X.; MOORE, P. O. **Nondestructive Testing Handbook: Infrared and Thermal Testing**. 3 ed. Columbus: NDT, 2001

LAMBERTS, Roberto et al. **Desempenho Térmico de Edificações. Laboratório de Eficiência Energética de Edificações**. Florianópolis - UFSC, 2016.

LAMBERTS, Roberto et al. **Eficiência energética na arquitetura**. 2014. [3.ed.] Rio de Janeiro.

LOPES, T. P. **Desempenho térmico de habitações de interesse social com diferentes sistemas construtivos em Santa Catarina**. 2010. 140 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2010.

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

Data de aceite: 11/08/2022

Sara Nunes Rios

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG)
Departamento 4 - Engenharia Mecânica
Goiânia, GO, Brasil

Vitória Ferreira de Oliveira Marques

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG)
Departamento 4 - Engenharia Mecânica
Goiânia, GO, Brasil

Sérgio Renan Lopes Tinô

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG)
Departamento 4 - Engenharia Mecânica
Goiânia, GO, Brasil

Vinicius Carvalhaes

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG)
Departamento 4 - Engenharia Mecânica
Goiânia, GO, Brasil

Thamise Sampaio Vasconcelos Vilela

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG)
Departamento 4 - Engenharia Mecânica
Goiânia, GO, Brasil

Manoel Ivany de Queiroz Júnior

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG)
Departamento 4 - Engenharia Mecânica
Goiânia, GO, Brasil

RESUMO: Superligas à base de níquel têm sido cada vez mais usadas na indústria aeroespacial, petrolífera, nuclear e outras, devido ao seu comportamento em altas temperaturas. O estudo pretende analisar o comportamento da superliga Inconel 718 para aplicações aeroespaciais, petrolíferas, nucleares e o envelhecimento natural. Para isto, foi necessário a realização de tratamentos térmicos em amostras de Inconel 718 que foram submetidas a solubilização seguida de envelhecimento tanto artificial quanto natural. Para cada aplicação segue-se uma norma onde são especificados os parâmetros de temperatura, tempo e modo de resfriamento para cada tratamento do material. Foram feitas as medidas de durezas e feito a microscopia óptica e medidas de tamanho de grão das amostras para cada aplicação citada, a peça como recebida e também para o envelhecimento natural com o objetivo de analisar os efeitos dos tratamentos térmicos no material e comparar os tipos de aplicações. Também foi analisada uma amostra envelhecida naturalmente, ou seja, cujo envelhecimento é feito a temperatura ambiente e constatou-se que esta endureceu e continuou envelhecendo ao longo dos meses, aumentando sua resistência. Verificou-se também que a precipitação das fases γ' e γ'' é de grande influência para o aumento da dureza e da resistência do material.

PALAVRAS - CHAVE: Inconel 718, Superligas, Solubilização, Envelhecimento.

ABSTRACT: Nickel superalloys have been increasingly used in the aerospace, petroleum, nuclear and other industries due to their high

temperature behavior. The study intends to analyze the behavior of the Inconel 718 superalloy for aerospace, oil, nuclear and natural aging applications. For this, it was necessary to carry out thermal treatments on samples of Inconel 718 that were subjected to solubilization followed by both artificial and natural aging. For each application, a standard is followed where the parameters of temperature, time and cooling mode are specified for each treatment of the material. Hardness measurements were made and optical microscopy and grain size measurements of the samples were carried out for each mentioned application, the part as received and also for natural aging in order to analyze the effects of heat treatments on the material and compare the types of applications. A naturally aged sample was also analyzed, that is, whose aging is done at room temperature and it was found that it hardened and continued aging over the months, increasing its resistance. It was also found that the precipitation of the γ' and γ'' phases is of great influence to increase the hardness and strength of the material.

KEYWORDS: Inconel 718, superalloys, solubilization, aging.

1 | INTRODUÇÃO

Algumas classes de materiais possuem a capacidade de manter suas propriedades em elevadas temperaturas. Suas aplicações são variadas e podem ser encontradas em dutos de motores de turbina a gás, tanques criogênicos, componentes de motor, molas, fixadores, válvulas de gavetas e outras aplicações de alta resistência. Este tipo de material possui três características importantes que são consideradas desejáveis: habilidade de suportar carregamentos em uma temperatura de operação muito próxima a do ponto de fusão desta; resistência a degradação mecânica sob longos períodos de tempo e tolerâncias em ambientes críticos de operação (Reed, 2006). Como exemplo de materiais com essa característica podem ser citadas as superligas, que consistem em ligas a base de ferro, cobalto ou níquel.

Quando são requeridas resistências ao carregamento estático, fadiga e deformação, a superliga de níquel é a que mais se destaca. Estas ligas não são sujeitas a transformações martensíticas e não são possíveis os tratamentos de têmpera e revenimento. Além disso, tem matriz com estrutura CFC e não sofrem transformações alotrópicas até o ponto de fusão. Podem ser trabalhadas a frio, morno e a quente (Meyers e Chawla, 1982).

As ligas de Inconel pertencem à família das superligas de níquel (Ni) e cromo (Cr) que possui uma ampla variedade de composições e propriedades mecânicas. O níquel e cromo fornecem resistência à corrosão oxidação, carburação e outros danos mecânicos causados pela ação de temperaturas elevadas. As ligas de Inconel possuem boas propriedades criogênicas, resistência à fadiga e força mecânica em temperaturas moderadas e um bom comportamento de deformação (Thomas *et al.*, 2006).

As principais fases responsáveis pelas superiores propriedades mecânicas a elevadas temperaturas da matriz γ (cfc) na liga 718 são a fase γ'' (Ni₃Nb - tetragonal), principal fase endurecedora, e a fase coerente com a matriz γ' (Ni₃(Al,Ti)), esta menos

efetiva no endurecimento.

O níquel e cromo contribuem para a resistência a corrosão do Inconel 718. Eles cristalizam como uma fase γ (cúbico de face centrada). Nióbio é adicionado para precipitação de endurecimento γ'' (componente meta estável intermetálico Ni_3Nb , cristal centrado tetragonal). Titânio e Alumínio são adicionados para se transformarem na forma intermetálica γ' ($\text{Ni}_3(\text{Ti},\text{Al})$, cristal cúbico simples). Eles têm um efeito menor de endurecimento do que as partículas γ'' . Uma fase β (intermetálica Ni_3Nb), também chamada de fase δ , pode surgir, é uma partícula de equilíbrio com estrutura ortorrômbica. Todas essas partículas podem precipitar ao longo dos contornos de grão da matriz γ aumentando a resistência do fluxo intergranular da liga em questão.

Desde que se tornou material em “evidência”, o Inconel vem sendo extensivamente estudado por vários grupos de pesquisa de todo o mundo. Não somente a liga 718, mas todos os tipos de Inconel têm sido investigados no que se refere à resistência a corrosão por tensão, corrosão em altas temperaturas, mecanismos de permeação de hidrogênio, morfologia dos filmes, efeitos do tratamento térmico, dentre tantos outros estudos que deem as reais características destas superligas (Schubert, 1983).

Tendo em vista a importância de tal liga e sua constante inserção no mercado, o presente trabalho visa estudar o comportamento da superliga Inconel 718 quando submetido à solubilização seguida de envelhecimento, analisando após estes a microestrutura e propriedades mecânicas da liga Inconel 718 e comparando os resultados obtidos para as aplicações aeroespaciais, petrolíferas e nucleares seguindo as especificações das normas para cada uma e também realizar um estudo sobre o efeito do envelhecimento natural na superliga.

2 | MATERIAIS E MÉTODOS

Fluxograma experimental e preparação das amostras

Para o seguinte estudo e com base nas determinações das normas (AMS 5662 e ASM 1991) e tratamentos citadas no item anterior seguiu-se a metodologia mostrada na Fig. 1 que ilustra de forma resumida os procedimentos feitos para análise do material.

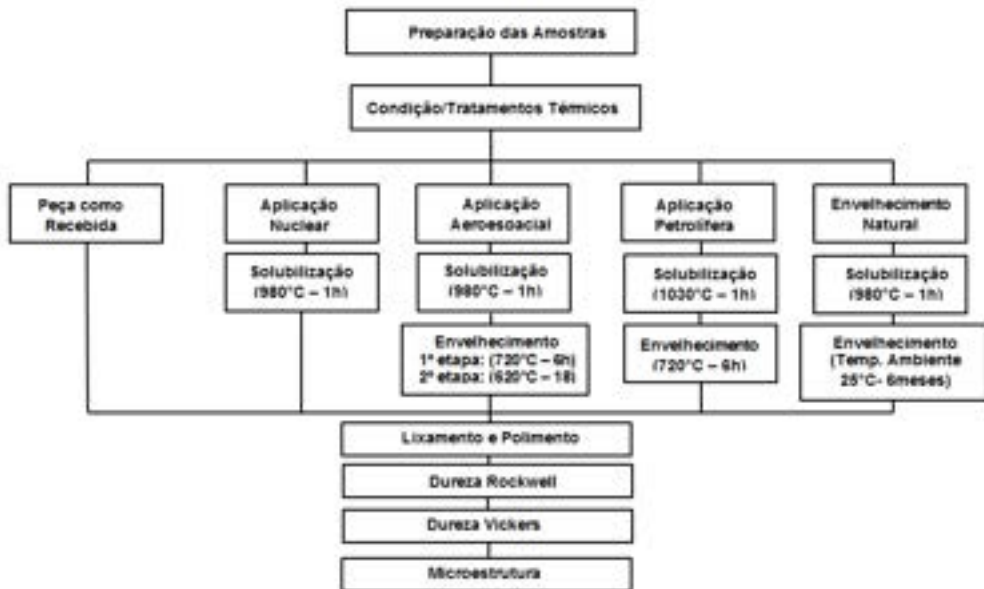


Figura 1: Fluxograma dos procedimentos experimentais.

Realizou-se o corte de amostras de Inconel 718 na cortadora metalográfica em dimensões dentro das especificações definidas pela norma NBR 13284 de preparação de corpos-de-prova para análise metalográfica. Segundo a norma NBR 13284 a altura dos corpos-de-prova deve ser suficiente para manuseio conveniente durante as etapas de lixamento e polimento. As amostras para os estudos foram cortadas em alturas de 10 mm, as quais permitiram o manuseio sem necessidade de embutimento (Fig. 2). Ao total foram cortadas 13 amostras, 3 amostras da peça como recebida, 3 amostras para cada tratamento referente às aplicações nuclear, aeroespacial e petrolífera e 1 amostra para o envelhecimento natural (Tab. 1).



Figura 2: Altura das amostras cortadas para análise.

Quantidade de Amostras Cortadas	
Peça como recebida	3
Solubilizada (Nuclear)	3
Envelhecimento Artificial (Aeroespacial)	3
Envelhecimento Artificial (Petrólifera)	3
Envelhecimento Natural	1
Total	13

Tabela 1: Quantidade de amostras cortadas sem tratamento e para cada tratamento.

Tratamentos Térmicos

As peças foram submetidas aos tratamentos térmicos de solubilização e solubilização seguida de envelhecimento, conforme a norma de inspeção aeroespacial da liga 718 (AMS 5662), a especificação da liga Inconel 718 de petróleo e gás API (UNS N07718), e os parâmetros para aplicação nuclear e envelhecimento natural.

Os meios de resfriamento utilizados foram o ar para aplicações aeroespacial e nuclear, e a água para aplicação de petróleo e gás e para o envelhecimento natural. Para cada tipo de aplicação foram utilizadas três amostras, exceto para o envelhecimento natural que foi utilizada apenas uma amostra. Cada grupo de amostra permaneceu no patamar de temperatura, por um determinado período de tempo determinado pelas normas de cada aplicação. A Tab. 2 mostra as temperaturas a serem trabalhadas para cada tipo de aplicação, os meios de resfriamento e o tempo para a solubilização e a Tab. 3 determina os mesmos parâmetros para o envelhecimento.

Para aplicação aeroespacial, a solubilização foi feita a 980°C por 1 hora, com resfriamento em ar até temperatura ambiente, seguida de envelhecimento a 720 °C por 6 horas e resfriamento no forno até 620°C por 18 horas até o completo envelhecimento, com posterior resfriamento ao ar até temperatura ambiente.

Aplicação	Temperatura de Solubilização (°C)	Tempo de Solubilização (h)	Modo de Resfriamento
Aeroespacial	980	1	Ar
Petróleo e Gás	1030	1	Água
Nuclear	980	1	Ar
Envelhecimento Natural	980	1	Água

Tabela 2: Temperaturas, tempo e resfriamento para a solubilização para amostras de cada aplicação.

Para as aplicações na indústria de petróleo e gás, a solubilização foi realizada a 1030°C por 1 hora, com resfriamento em água, seguida de envelhecimento a 780°C por 6 horas, com resfriamento em água até a temperatura ambiente e, para aplicação nuclear, a

solubilização foi realizada a 980°C por 1 hora, com resfriamento em ar sem envelhecimento.

Aplicação	Temperatura de Envelhecimento (°C)	Tempo de Envelhecimento	Resfriamento
Aeroespacial	720 (1ª etapa) 620 (2ª etapa)	6 horas (1ª etapa) 18 horas (2ª etapa)	1ª etapa: forno 2ª etapa: ar
Petróleo Gás	780	6 horas	Água
Nuclear	-	-	-
Envelhecimento Natural	Temperatura Ambiente	6 meses	Ar

Tabela 3: Temperaturas, tempo e resfriamento para o envelhecimento para amostras de cada aplicação.

Para efeito de estudos foi feito os mesmos tratamentos da nuclear em uma amostra que foi submetida ao envelhecimento natural, que consiste no envelhecimento a temperatura ambiente. Como não há uma norma específica para o envelhecimento natural foram utilizados os parâmetros de solubilização da norma de inspeção aeroespacial da liga 718 (AMS 5662), com resfriamento em água e com envelhecimento a temperatura ambiente durante 6 meses.

Lixamento, polimento, ataque químico e micrografia

Segundo a norma NBR 13284 o lixamento deve proporcionar uma superfície plana e sem deformações, corrigindo as imperfeições da etapa inicial de extração do corpo de prova. O corpo de prova foi preparado em um prato horizontal rotativo onde o corpo de prova será apoiado. A superfície do corpo de prova foi lubrificada com água, para promover a refrigeração e o arraste de partículas extraídas do corpo-de-prova durante a operação. As amostras foram submetidas a lixas de granularidade de 180, 220, 320, 400, 600, 800 e 1200 mesh. Depois de serem lixadas as peças foram polidas e foi usado como abrasivo o óxido de alumínio.

Após o lixamento e polimento as amostras foram submetidas ao ataque químico para revelar a estrutura metalográfica das amostras. O objetivo do ataque químico é permitir a identificação (visualização) dos contornos de grão e as diferentes fases na microestrutura. O reagente utilizado varia de material para material, é escolhido de acordo com os constituintes microestruturais que se deseja contrastar na análise metalográfica (Rohde, 2010). Para o Inconel 718 atacou-se a superfície polida com o reagente Kalling nº 2 (100 ml etanol + 100 ml HCl + 5 g CuCl₂) durante aproximadamente 5 minutos cada amostra.

O ensaio metalográfico consistiu em analisar a microestrutura da peça através de um microscópio óptico com aumentos de 200X e 500X. Após o processo de preparação das amostras, seu devido lixamento, polimento e ataque químico, as amostras foram levadas ao microscópio para realizar a análise de sua microestrutura. Foi utilizado o software AnalySIS

para captura das imagens para análise.

Medidas de tamanho médio de grão

O método utilizado para a medição do tamanho de grão foi o planimétrico de Jeffries, seguindo a norma ASTM E112-96 Standard Test Methods for Determining Average Grain Size.

O método foi aplicado fazendo um círculo sobre as fotomicrografias com o auxílio do software AnalySIS e contando os números de grãos totalmente dentro da área (n_1) e o número de grãos interceptados pelo perímetro da área de teste dividido por 2 (n_2). Para cada aplicação foram realizadas duas medições de tamanho de grão em cada amostra e fez-se a média entre elas.

O número total de grãos equivalentes é dado por:

$$n_{eq} = n_1 + \frac{n_2}{2}$$

A medida de tamanho de grãos, segundo a ASTM, é dada por:

$$N = 2^{G-1}$$

Onde, N = número de grão por polegada quadrada e G = número de grão ASTM.

Ensaio de Dureza

O ensaio de dureza Rockwell consiste em medir a dureza do corpo de prova de Inconel 718, através da aplicação de uma pré-carga. De acordo com a norma NBR NM ISO 6508, o ensaio deve ser realizado sobre uma superfície plana e lisa, isenta de camadas oxidadas. A espessura do corpo-de-prova deve ser pelo menos dez vezes a profundidade de penetração permanente para penetradores cônicos. Ainda segundo a norma NBR NM ISO 6508, deve-se colocar o penetrador com a superfície a ser ensaiada e aplicar a pré-carga sem exceder 3 s, depois aumenta essa força em não menos que 1 s e não mais que 8 s, que deve ser mantida por um tempo de 2 a 4 s. Segundo a norma NBR NM ISO 6508, a distância entre os centros de duas impressões adjacentes deve ser, de pelo menos quatro vezes o diâmetro da impressão (embora não menor que 2 mm) e a distância desde o centro de qualquer impressão a uma borda do corpo-de-prova, deve ser de pelo menos duas vezes o diâmetro da impressão (embora não menor que 1 mm).

Para o ensaio de dureza Rockwell das amostras de Inconel 718, utilizou-se o indentador de diamante e uma carga de 60 kgf, para tanto a medida foi feita em escala Rockwell A, conforme especificado a norma supracitada. Foram realizadas 5 medidas para cada amostra, com distância de 3 mm entre uma medida e outra, sendo que para as discussões posteriores, serão utilizadas as médias dessas medidas para cada aplicação. Este ensaio foi realizado no Laboratório de Materiais do IFG-GO utilizando um durômetro Sussen Wolpert tipo Testor HTI.

Para o ensaio de microdureza Vickers foi realizado conforme a norma ABNT NBR NM

ISO 6507-1:2008, que diz que o corpo de prova deve ter uma superfície lisa e plana, livre de carepa, substâncias estranhas e completamente livre de lubrificantes, e sua espessura deve ser no mínimo 1,5 vezes o comprimento da diagonal da impressão. A norma também diz que o corpo de prova deve ser colocado sobre um suporte rígido, estando firmemente apoiado no suporte, de modo que não ocorra deslizamentos durante o ensaio. O penetrador deverá ser colocado em contato com a superfície de ensaio e a força de ensaio aplicada na direção perpendicular à superfície.

Para obter a dureza do Inconel 718, foram aplicadas cargas de 1 kgf, durante 30 segundos, com penetrador piramidal com ângulo de diedro de 136°. Foram realizadas cinco medições aleatórias de microdureza Vickers ao longo da seção da peça. Este ensaio foi realizado no Laboratório de Materiais do IFG-GO utilizando um microdurômetro Mitutoyo HM 102.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

Microscopia Óptica e Tamanho Médio de Grão

Foi realizada a microscopia óptica da Superliga Inconel 718, na qual para captura de imagens, foram utilizadas lentes de aumentos de 200x e 500x, porém as imagens selecionadas foram as com aumento de 200x, pois deferiram uma melhor observação. As figuras a seguir mostram a microestrutura para as amostras como recebida (Fig. 3), para aplicações nucleares (solubilizadas) (Fig. 4), para aplicações aeroespaciais (Fig. 5) e petrolíferas (Fig. 6) que foram envelhecidas artificialmente e para a envelhecida naturalmente (Fig. 7).

Com exceção dos contornos mais definidos no ataque, as mudanças microestruturais não são muito perceptíveis, tais mudanças requerem o uso do Microscópio Eletrônico de Varredura (MEV) para uma análise mais profunda. Para tanto foi utilizada a análise no MEV de Valle (2010) para casos da peça como recebida, solubilizada e envelhecida artificialmente para estabelecer uma comparação com a microscopia dos casos citados.

No material como recebido na Fig. 3 percebe-se a presença de vários pontos pretos, que são precipitados identificados como carbetos. Tais carbetos são do tipo (Nb,Ti)C e, possivelmente, a maior parte é constituída de NbC, uma vez que a liga possui mais nióbio do que titânio.

Na microestrutura da peça solubilizada para aplicações nucleares a 980 °C por 1 hora (Fig. 4) observa-se a presença de carbetos assim como os identificados no material como recebido. Observa-se, portanto, que não houve dissolução completa dos carbetos durante a solubilização, uma vez que estes ainda aparecem no material após solubilização, mesmo que com menor frequência do que no material como recebido.

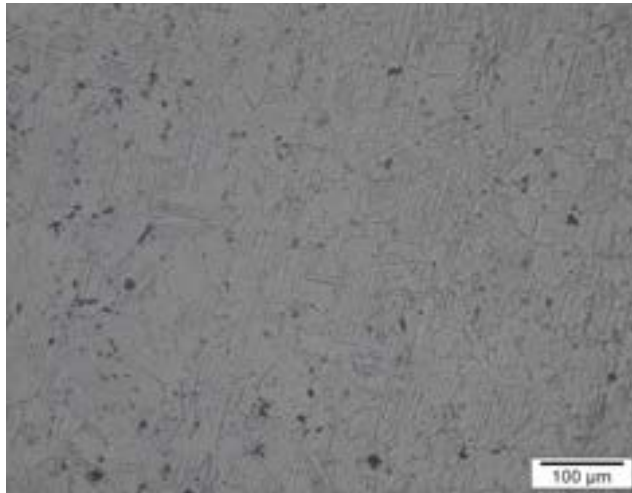


Figura 3: Micrografia óptica do material Inconel 718 como recebido com ampliação de 200x.

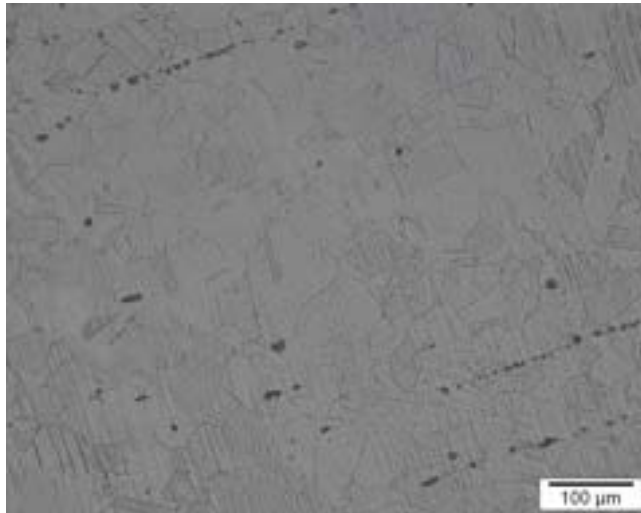


Figura 4: Micrografia óptica do material Inconel 718 solubilizado, para aplicação nuclear com ampliação de 200x.

Na microestrutura dos materiais envelhecidos artificialmente para aplicações aeroespaciais (Fig. 5) e petrolíferas (Fig. 6) percebe-se também a presença de carbeto, citados anteriormente, porém com tamanhos maiores do tipo $(\text{Nb,Ti})\text{C}$, tanto com alto pico de nióbio e baixo pico de titânio quanto com pico de titânio e nióbios menores. Esta diferença nos teores de nióbio e de titânio nos carbeto $(\text{Nb,Ti})\text{C}$ ocorre porque, de acordo Donachie e Donachie (2002), neste tipo de carbeto, os elementos nióbio e titânio podem ser substituídos um pelo outro durante tratamento térmico. Provavelmente por este motivo, este maior teor de titânio, é verificado somente nas condições envelhecidas. Percebe-se ainda a presença de partículas pequenas no contorno de grão que são identificadas como

fase δ por sua morfologia, pelo seu tamanho e pela cinética de precipitação dessa fase. Não houve dissolução de carbeto durante o envelhecimento. De acordo com o diagrama TTT das diferentes fases do Inconel 718 na Figura 2, a uma temperatura de 720°C e 780°C por 6 horas, que foram os parâmetros utilizados para os dois envelhecimentos artificiais, é suficiente para a precipitação das fases γ' , γ'' e δ .

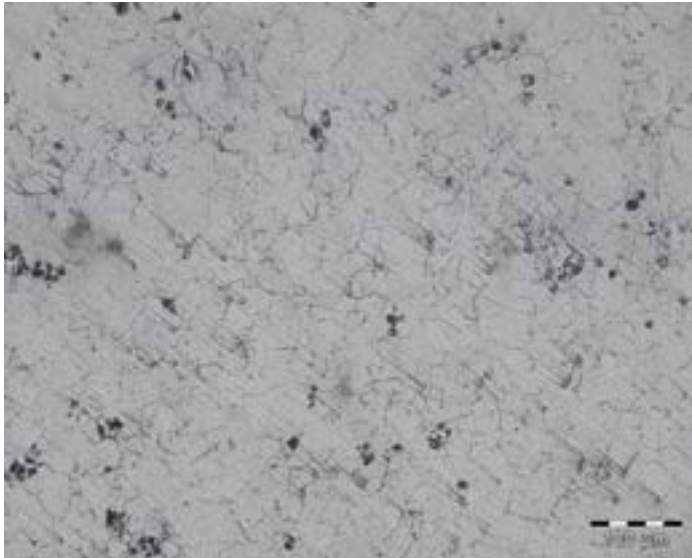


Figura 5: Micrografia óptica do material Inconel 718 com envelhecimento artificial para aplicação aeroespacial com ampliação de 200x.

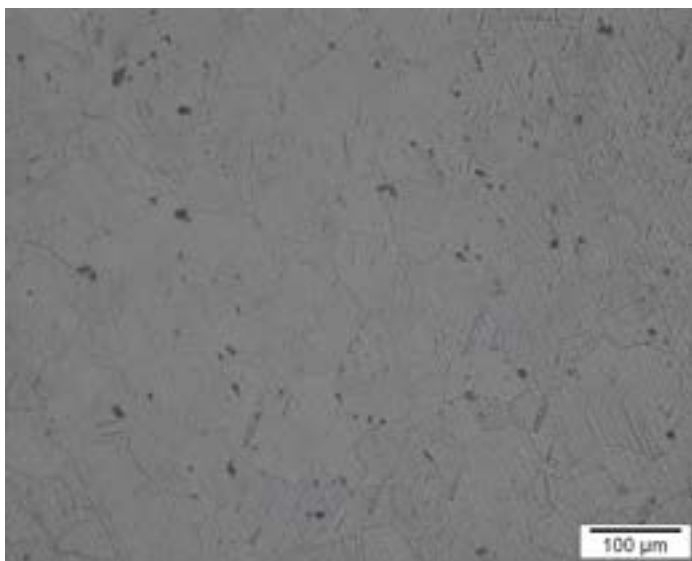


Figura 6: Micrografia óptica do material Inconel 718 com envelhecimento artificial para aplicação petrolífera com ampliação de 200x.

No envelhecimento natural (Fig. 7) ainda percebe-se alguns carbeto, porém com menor frequência se comparado com o material como recebido.

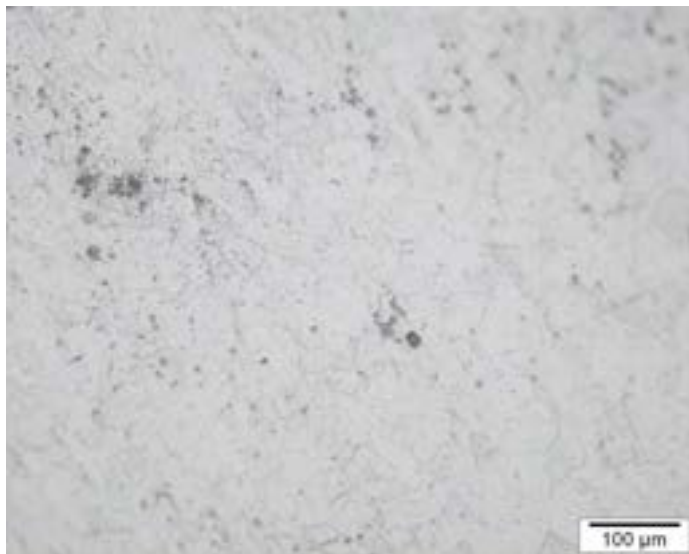


Figura 7: Micrografia óptica do material Inconel 718 com envelhecimento natural com ampliação de 200x.

Espera-se que o tempo de solubilização de 1 hora seja suficiente para solubilizar totalmente as fases γ' e γ'' e parte de fase δ . Segundo análise de Valle (2010) feita no Microscópio Eletrônico de Transmissão (MET) o material após envelhecimento artificial apresenta fases γ' e γ'' dispersas na matriz.

A Tab. 4 mostra os resultados do tamanho médio de grão para cada amostra de cada condição e aplicação.

Comparando o material envelhecido artificialmente para aplicação aeroespacial houve um aumento do tamanho médio de grão e para o envelhecimento artificial para aplicação petrolífera não houve alteração. Comparando a peça solubilizada para aplicação nuclear com a peça como recebida houve uma diminuição do tamanho médio de grão, assim como a envelhecida natural comparada com a peça como recebida.

Tal crescimento controlado do tamanho médio de grão, Tab. 4, pode ser relacionado à presença constante dos carbeto, pois estes refinam a microestrutura durante o tratamento térmico, através do controle do crescimento de grão. Além disso, eles aumentam a resistência da matriz, inibindo o deslizamento nos contornos de grão.

Condição/Tratamento Térmico	Tamanho Médio de Grão (ASTM)
Como Recebido	6
Solubilizado para aplicação nuclear	5
Envelhecimento artificialmente para aplicação aeroespacial	7
Envelhecimento artificialmente para aplicação petrolífera	6
Envelhecimento natural	5

Tabela 4: Resultado do tamanho médio de grão para o material como recebido, solubilizado, envelhecimento artificial e envelhecimento natural.

Dureza Rockwell

As amostras foram submetidas ao ensaio de dureza Rockwell. Para cada amostra de cada aplicação e tratamento foram feitas 5 medidas, lembrando que para cada aplicação foram utilizadas 3 amostras, exceto para o envelhecimento natural que foi utilizada apenas 1 amostra. A partir da média das durezas de cada amostra foram feitas as análises.

Para facilitar a análise na Fig. 8 tem-se a média das médias das durezas de cada caso para assim poder visualizar melhor a diferença. Percebe-se que em comparação da peça como recebida com a solubilizada teve pouca alteração na dureza Rockwell, inclusive há uma diminuição da dureza entre a solubilizada e a peça como recebida. Comparando as duas peças envelhecidas artificialmente (aeroespacial e petróleo e gás) com a peça como recebida houve um aumento da dureza. As duas peças envelhecidas artificialmente, para aplicações aeroespaciais e petrolíferas, obtiveram durezas próximas. A peça que foi submetida ao envelhecimento natural durante 6 meses obteve um aumento na dureza de se comparada com a peça como recebida, mas tal aumento não é tão grande se for comparado com a diferença obtida para as duas peças envelhecidas artificialmente. A Tab. 5 mostra as médias das durezas Rockwell para cada amostra de cada caso citado.

Média Dureza Rockwell (HRA)	
Peça como recebida	
Amostra 1	48,2 ±1,2
Amostra 2	49 ±1,4
Amostra 3	53,4 ±3,1
Solubilizada (Nuclear)	
Amostra 1	50,4 ±1,0
Amostra 2	49,6 ±2,1
Amostra 3	49,4 ±3,4
Envelhecimento Artificial (Aeroespacial)	
Amostra 1	62,2 ±3,1
Amostra 2	65,4 ±6,0
Amostra 3	60,2 ±5,2
Envelhecimento Artificial (Petróleo e Gás)	
Amostra 1	61,6 ±5,9
Amostra 2	65,8 ±2,9
Amostra 3	70,2 ±0,7
Envelhecimento Natural	
Amostra 1	54,2 ±0,8

Tabela 5: Média das durezas Rockwell de cada amostra para cada caso.

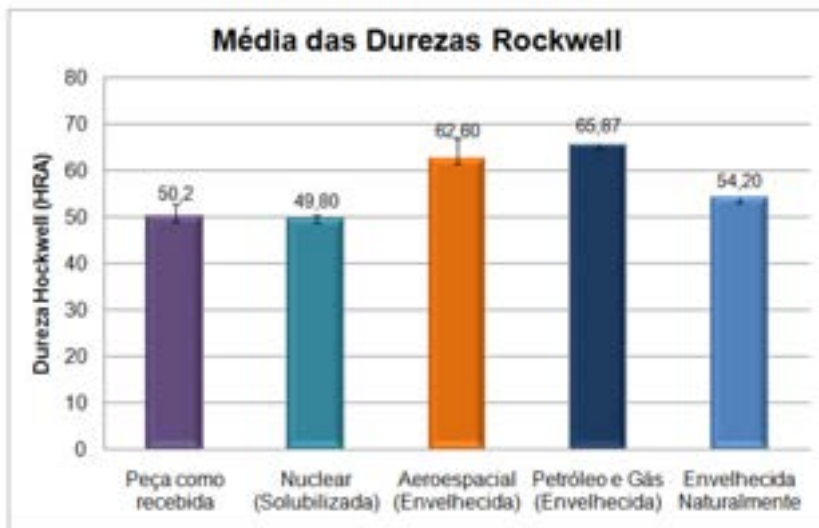


Figura 8: Média das médias das durezas Rockwell para cada caso estudado.

Dureza Vickers

Foram realizadas 5 medidas em cada amostra para cada caso, sendo 3 amostras para cada: peça como recebida, solubilizada (nuclear), envelhecida artificialmente

(aeroespacial e petrolífera) e 1 amostra para o envelhecimento natural. A Tab. 6 mostra a média das durezas para cada amostra de cada caso.

Média Dureza Vickers	
Peça sem Tratamento	
Amostra 1	209,6 ±38,6
Amostra 2	154,2 ±24,5
Amostra 3	149,6 ±7,7
Solubilizada (Nuclear)	
Amostra 1	117,8 ±8,8
Amostra 2	152,4 ±29,5
Amostra 3	119,2 ±14,9
Envelhecimento Artificial (Aeroespacial)	
Amostra 1	226,8 ±16,1
Amostra 2	292,8 ±22,6
Amostra 3	291,4 ±11,9
Envelhecimento Artificial (Petróleo e Gás)	
Amostra 1	262,2 ±10,24
Amostra 2	231,6 ±17,6
Amostra 3	244,8 ±43,0
Envelhecimento Natural	
Amostra 1	227,4 ±8,0

Tabela 6: Média das durezas Vickers para cada amostra de cada caso.

Para facilitar a análise na Fig. 9 tem-se a média das médias das durezas de cada caso para assim poder visualizar melhor a diferença. Percebe-se que em comparação da peça como recebida com a solubilizada houve uma considerável redução da dureza. Verifica-se também que para os casos de envelhecimento artificial, tanto para aplicação aeroespacial quanto para aplicação petrolífera, houve um relevante aumento na dureza para aplicações aeroespaciais e para aplicações petrolíferas. A peça envelhecida naturalmente teve um aumento de dureza Vickers, o qual não é tão alto se comparada com ambos os casos de envelhecimento artificial, nos quais os envelhecimentos ocorreram em um período bem menor de tempo.

Percebe-se também que há medidas nas amostras que ocorrem grandes variações nas durezas que podem ter sido ocorridas devido ao fato de ao realizar o ensaio de dureza Vickers, o indentador tenha pegado uma área de carbeto, a qual possui uma dureza maior.

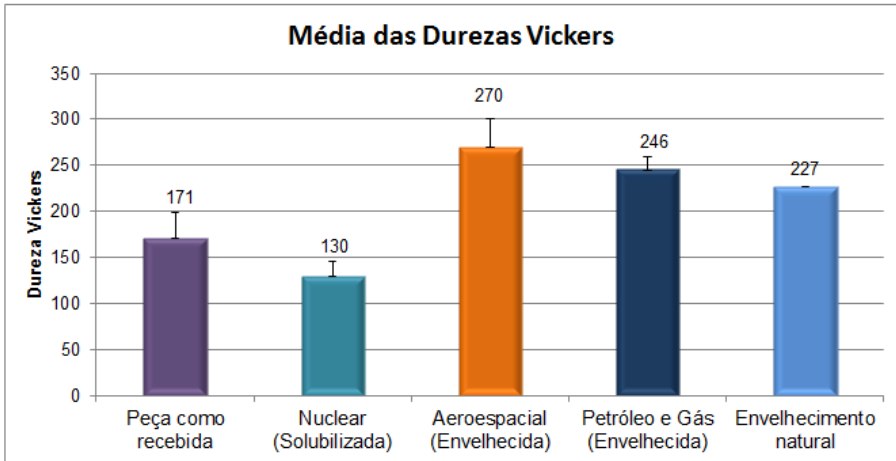


Figura 9: Média das médias das durezas Vickers para cada caso estudado.

A Tab. 7 apresenta os resultados dos ensaios de dureza Vickers e a comparação destes valores com o tamanho médio de grão. É apresentado também o desvio padrão das medidas de dureza Vickers. Observa-se que na solubilização houve uma considerável redução na dureza, que pode ser relacionada com a dissolução da fase δ . Após o envelhecimento houve um relevante aumento nos valores de dureza, apesar da diferença de parâmetros utilizados para o envelhecimento artificial das aplicações aeroespaciais e petrolíferas, e as medidas das durezas das duas são bem próximas, apesar da diferença de tamanho médio de grão.

Os resultados das durezas mostraram que a solubilização da superliga Inconel 718 a temperaturas mais elevadas, como as utilizadas para as aplicações estudadas, podem provocar a dissolução total das fases γ' e γ'' e parte de fase δ , uma vez que se percebe um crescimento limitado do tamanho de grão, que é benéfico para impedir uma diminuição drástica da resistência mecânica.

Os tratamentos térmicos de envelhecimento das aplicações aeroespacial e petróleo e gás elevaram os níveis de dureza devido, principalmente, à precipitação das fases endurecedoras γ' e γ'' . Por este motivo, apesar de diferentes tamanhos de grãos nos dois casos de envelhecimento artificial, estes valores são muito próximos nas diferentes condições envelhecidas. Durante o envelhecimento, o tamanho de grão das peças dessas aplicações não aumentou muito, ocasionando a pouca diferença de tamanho de grão e de dureza entre as duas. Como as duas aplicações, aeroespacial e petrolífera, requerem uma dureza maior em altas temperaturas, os resultados obtidos foram satisfatórios tendo em vista que suas durezas aumentaram para as duas aplicações. Levando em conta que tais aplicações requerem altas resistências mecânicas o controle no crescimento de grão para esses casos impediu a diminuição da mesma.

Condição/Tratamento Térmico	Tamanho Médio de Grão (ASTM)	Dureza [HV]
Como Recebido	6	171,13±27,3
Solubilizado para aplicação nuclear	5	129,8±16,0
Envelhecimento artificialmente para aplicação aeroespacial	7	270,3±30,7
Envelhecimento artificialmente para aplicação petrolífera	6	246,2±12,5
Envelhecimento natural	5	227,4±8

Tabela 7: Resultado dos ensaios de dureza Vickers e comparação com o tamanho médio de grão nas diferentes condições de tratamento térmico.

Para aplicação aeroespacial, o material continuou no forno por mais 18 horas a 620°C, esse fato pode ter contribuído para a diferença na dureza Vickers entre as durezas da aplicação aeroespacial e petrolífera, uma vez que tal período a mais no forno pode ter favorecido a precipitação das partículas de forma mais efetiva sem que ocorresse superenvelhecimento

Na aplicação nuclear, como não é realizado o tratamento de envelhecimento, não há formação dos precipitados endurecedores γ' e γ'' , o que impede o efeito de amolecimento induzido pela radiação e melhora a ductilidade. Por isso, o tamanho de grão das amostras e a dureza dessa aplicação não se diferem muito dos tamanhos de grão e das durezas das amostras do material como recebido e do envelhecimento natural.

Portanto, independente do tamanho médio de grão, o mecanismo de endurecimento por precipitação das fases γ' e γ'' se sobrepõe as demais variáveis microestruturais na liga 1718.

O envelhecimento natural obteve um aumento da dureza de, que pode ser considerado um valor não tão satisfatório levando em conta os envelhecimentos artificiais que obtiveram um aumento maior na dureza em relação ao material como recebido em um período bem menor de tempo. Com isso, pode-se constatar que as amostras podem endurecer e levar um certo tempo para aumentarem a sua resistência. Sendo assim, a indústria nuclear, por exemplo, pode aplicar este tipo de envelhecimento e contar com cerca de 6 meses para aumentarem sua dureza. Como o tempo utilizado para realização deste trabalho não foi suficiente para analisar a peça envelhecida naturalmente até o aumento de dureza equivalente ao da aplicação aeroespacial espera-se que, se o aumento continuar linearmente, em 10 meses a dureza seja aumentada até o valor da dureza da peça envelhecida artificialmente para aplicação aeroespacial. Se comparada com outras ligas, como a de alumínio que completa o envelhecimento natural em poucos dias, pode-se dizer que o Inconel 718 possui uma cinética de nucleação mais lenta, uma vez que este demora meses para possivelmente atingir o completo envelhecimento natural. Pode-

se dizer também, que o envelhecimento desta liga é mais lento o que pode impedir o superenvelhecimento, que é um efeito indesejável quando o objetivo é aumentar a dureza do material.

4 | CONCLUSÕES

A peça solubilizada para aplicação nuclear teve sua dureza reduzida comparada com a peça como recebida, tal redução deve-se ao fato de que durante a solubilização houve dissolução total das fases γ' e γ'' , fases as quais são mais efetivas no endurecimento. A não formação de tais precipitados é benéfica para indústria nuclear, pois sem eles não há o efeito de amolecimento induzido pela radiação, que dissolve tais precipitados.

Para aplicações aeroespaciais há necessidade de elevada resistência mecânica, que podem ser obtidas quando ocorre precipitação das fases γ' e γ'' e que estas podem ter sido mais efetivas ainda nessas propriedades dado ao fato desta ter passado por uma segunda etapa no forno. Com os estudos acima e com o aumento de dureza da mesma foi possível comprovar a importância da precipitação de tais fases para o aumento da dureza e resistência do material.

Para aplicações petrolíferas não é exigido uma resistência tão alta quanto para aplicações aeroespaciais, porém é necessária uma combinação de boa resistência mecânica e à corrosão que também são obtidas através da precipitação das fases γ' e γ'' e através do estudo proposto acima foi possível perceber que houve a precipitação de tais fases para essa aplicação.

O tamanho médio de grão para todos os casos obteve baixas variações, tal fato pode ser relacionado a constante presença dos carbeto no material.

A peça submetida ao envelhecimento natural mostrou que tal liga possui uma lenta cinética de nucleação, uma vez que para ocorrer um aumento na dureza em relação a peça como recebida foram necessários 6 meses, tal fato pode contribuir para evitar o superenvelhecimento no material, uma vez que este é submetido à aplicações que requerem altas temperaturas. Pode se dizer que no período de 6 meses o material possivelmente foi ou está sendo envelhecido naturalmente.

AGRADECIMENTOS

Agradecimentos ao suporte técnico dos laboratórios no IFG.

REFERÊNCIAS

ASM Metals Handbook v. 2. Properties and selection of nonferrous alloys and special purpose materials: nickel and nickel alloys. ASM International, USA, 1990.

ASM Metals Handbook v. 4. Heat Treating. ASM International, USA, 1991.

Associação brasileira de normas técnicas. NBR 6508-1: Materiais metálicos - Ensaio de dureza Rockwell. Parte 2: Método de ensaio (escalas A, B, C, D, E, F, G, H, K, N, T). Rio de Janeiro, p. 39. 2008.

Associação brasileira de normas técnicas. NBR 11568: Materiais metálicos - Determinação do tamanho de grão. Rio de Janeiro, p. 30. 2016.

Associação brasileira de normas técnicas. NBR 13284: Preparação de corpos-de-prova para análise metalográfica. Rio de Janeiro, p. 3. 1995.

Donachie MJ, Donachie SJ. Superalloys: A Technical Guide. ASM International, Second Edition, USA, 2002.

Meyers MA, Chawla KK. Princípios de Metalurgia Mecânica. Editora Edgard Blücher, 1982.

Reed RC. The Superalloys: Fundamentals and Applications. Cambridge, Cambridge University Press, 2006.

Rohde RA. Metalografia: Preparação de Amostras. Rio Grande do Sul, Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai, 2010.

Schubert F. Temperature and time dependent transformation: Application to heat treatment of high temperature alloys. ASM, Metals Park, p.3, 1983.

Thomas A, El-Wahabi M, Cabrera JM, Prado JM. High temperature deformation of Inconel 718. Journal of Material Processing Technology, v. 177, pp. 469- 472, 2006.

Valle LCM. Efeitos da solubilização e do envelhecimento na microestrutura e nas propriedades mecânicas da superliga Inconel 718. 2010. 105f. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

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

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: 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, como por exemplo, no escoamento de grãos numa ampulheta que ao contrário dos líquidos, a pressão nas paredes não é proporcional à altura. Por esse motivo, ao escoar, os grãos podem formar arcos de tensão, bloqueando o fluxo. Esse fluxo de grãos em silos é um tema de interesse

de diversos setores da economia. Desde silos de grãos na agroindústria, passando por transporte de minérios na mineração até o fluxo de carvão para a siderurgia, com isso percebe-se a importância desse tema. As características do fluxo dos grãos dependem de vários fatores, como o formato e composição da partícula, até suas propriedades mecânicas. Juntando essa gama de variações e o fato do sistema granular não ser contínuo, sua descrição por meio de simulação computacional é mais adequada para observarmos comportamentos de fluxo. Dada essa importância, diversas plataformas comerciais para monitoramento e previsão de escoamentos foram desenvolvidas nos últimos anos, com licenças de elevado custo. Contudo, existem soluções em código aberto, sendo estes baseados no método de elementos discretos, capazes de realizar simulações de grande porte. Com isso, o presente estudo apresenta um código aberto, adaptado e testado no *Python*, utilizando método de elementos discretos – DEM, com ênfase na aplicação típica em mineração e siderurgia. Esse código dá oportunidade de além de entender as rotinas, adapta-las para o cenário no qual será utilizado.

PALAVRAS-CHAVE: Sistemas granulares, escoamento, silos, arcos de tensão.

SIMULATION ROUTINE IN YADE (OPEN ACCESS) FOR GRAIN FLOW IN LARGE SILOS USING DISCRETE ELEMENT METHOD (DEM)

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 recent decades a whole new theoretical field has been developed to analyze phenomena that were known, but not well described in the literature. In Silos Movement, several situations can occur, such as in the flow of grains in an hourglass that, unlike liquids, the pressure on the walls is not proportional to the height. For this reason, when flowing, the grains can form tension arcs, blocking the flow. This flow of grains in silos is a topic of interest to several sectors of the economy. From grain silos in the agroindustry, through the transport of ores in mining to the flow of coal to the steel industry, with this I realized the importance of this topic. The flow characteristics of the grains depend on several factors, such as the shape and composition of the particle, to its mechanical properties. Adding this range of variations and the fact that the granular system is not continuous, its description through computer simulation is more suitable for observing flow behavior. Given this importance, several commercial platforms for monitoring and predicting flows have been developed in recent years, with high-cost licenses. However, there are open source solutions, which are based on the discrete element method, capable of performing large-scale simulations. With this, the present study presents an open code, adapted and tested in Python, using the discrete element method - DEM, with emphasis on the typical application in mining and steel. This code gives the opportunity to, in addition to understanding the routines, adapt them to the scenario in which it will be used.

KEYWORDS: Granular systems, flow, simulation, python.

1 | INTRODUÇÃO

O início das discussões sobre a dinâmica de sistemas particulados foi o trabalho pioneiro sobre pilha de areia [1]. Partindo dos resultados encontrados, criou-se toda uma teoria sobre o comportamento e interação entre grãos em escoamento, mobilizando boa parte da Física Estatística da época [2]. Com isso, diversos autores correlacionaram a dinâmica de partículas à suas situações. Temos como exemplo o estudo sobre otimização energética em escoamento de grãos e minérios, demonstrando a importância do estudo da dinâmica de sistemas granulares [1-5].

Os materiais granulares são aglomerados de partículas sólidas, no qual a interação entre as partículas ocorrem por forças de contato [2]. Apesar de que em muitos casos esses grãos serem diminutos, são muito grandes para serem tratados como flutuações termodinâmicas, então essas interações são consideráveis [6,7]. Além disso, os sistemas granulares são sistemas muito longe do equilíbrio termodinâmico, sendo necessários métodos de simulação computacional para entender sua dinâmica [8].

Como exemplos comuns de materiais granulares tem-se a areia, sementes, brita, cimento e minérios. Esses materiais estão presentes em diversas áreas industriais como, por exemplo, agroindústria, produtos farmacêuticos, da geologia, mineração e siderurgia. 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.

O Brasil é o segundo maior exportador de minério de ferro do mundo, responsável por valores da ordem de R\$22 bilhões em 2019 [9]. Além disso, também é o maior produtor

de soja do mundo e 8ª maior produtor de aço do mundo, estando em oitavo lugar no ranking de produtores [10]. Assim, armazenamento e fluxo de grãos (aqui incluídos grãos de soja, de carvão ou pelotas de minério de ferro) tem importância estratégica para o país, pois a otimização dos parâmetros pode reduzir muito o custo de produção e transportes desses itens.

Os estudos são normalmente feitos em modelos físicos ou por meio de simulações, ou a combinação das duas abordagens, no qual normalmente os modelos físicos são usados para “calibrar” os modelos computacionais [10].

Para obter informações úteis para processos industriais, foi utilizando o método de elementos discretos (DEM), pois esses métodos permitem abordagens mais realistas e ajustes de parâmetros mais próximos da realidade [1,2].

Diante da importância do monitoramento e simulação de escoamento de partículas, diversas plataformas de simulação estão disponíveis no mercado, porém seu custo, em geral, é muito alto. Assim, os trabalhos de pesquisa têm usado licenças com restrições de tamanho, disponíveis para estudantes ou restritas ao uso acadêmico, limitando as simulações, pois para sistemas mais realistas são necessários milhões ou bilhões de partículas [1,2,11].

Com isso, o presente estudo desenvolveu uma rotina para simulação para o fluxo de grãos em silos, com a possibilidade de simular sistemas de grande porte utilizando o software YADE, que apresenta uma linguagem similar ao *Python*. A vantagem é que os códigos estão disponíveis e podem ser estudados, possibilitando sua adaptação, contribuindo para seu desenvolvimento.

2 | MATERIAIS E MÉTODOS

No presente estudo, foi utilizado como plataforma o YADE (código aberto). As rotinas para customização da plataforma são desenvolvidas em Python. Quando se trabalha com o YADE a importância do contato com o Python é ainda maior, pois ele foi desenvolvido utilizando a sintaxe padrão do Python para escrita de programas.

Outro ponto importante para o desenvolvimento do trabalho foi a utilização do sistema operacional Linux, em questão o Xubuntu versão 18.04 (bionic), pois a plataforma de simulação YADE necessita desse sistema operacional.

O código teve como abordagem a simulação visível (representação visual) dos materiais simulados, além de amostragem das energias envolvidas no processo. O código foi descrito no tópico seguinte.

3 | DISCUSSÃO

Diversas classes de métodos computacionais podem ser referidas para simular

qualquer processo. A escolha desse método tem mais a ver com a natureza do problema. Por exemplo, for estudar o fluxo de calor em materiais contínuos, ou mesmo a propagação de tensões mecânicas, usa-se um método para solução de equações diferenciais, como o Método dos Elementos Finitos (FEM), por exemplo [1-3,12].

No presente estudo, foi simulado a queda de grãos genéricos (à definir pelo operador) em silos. Para isso, foi utilizada a classe de plataformas que utiliza o Método de Elementos Discretos (DEM) para a solução dos problemas [1-4,13]. Muito similar à abordagem usada na Dinâmica Molecular, esse 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 [14,15].

Contudo, a escolha de utilizar uma plataforma DEM, se deve ao fato de que o 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, apresenta bons resultados em tempo de execução extremamente mais viáveis [1,2,15,16].

Como considerações, define-se que a maior parte das interações é de curto alcance e só se produzem pelo contato entre as partículas. No presente caso, têm-se somente as forças elásticas produzidas pela compressão e forças de atrito entre as partículas. Partículas que não se tocam não interagem entre si. Com isso, as interações entre os grãos são dissipativas devido ao atrito estático e à inelasticidade das colisões [17]. Outro fato a ser considerado é o fato da temperatura não ter influência, logo argumentos termodinâmicos não são considerados [17,18].

Nas Figuras 1-3 é apresentado o código da simulação em escala visível utilizando o software YADE, para a visualização da formação de pilha de grãos com possibilidade de variação de parâmetros.

```

14 # loading: utt-0 -#
15
16 from yade import pack, plot
17 import time
18 import random
19 import math
20 from yade import ymport
21
22 utils.readParamsFromTable(descriptionIn = 'noDescription',
23 frIn = 0.7, emIn=0.01, etIn=0.01, tcIn=0.0001,
24 rhoIn = 1200.0,
25 dumpvTKIn = 4000
26 )
27
28 from yade.params.table import *
29
30 import shutil
31
32 try:
33     shutil.rmtree('cpt')
34 except OSError:
35     pass
36 os.mkdir('cpt')
37
38 altura = 0
39 rMed = 0
40 angHepeudo = 0
41 contParticulas = 0
42
43 wall = 0, materials.append(ViscElMat(frictionAngle=frIn, density=rhoIn, tc=tcIn, em=enIn, et=etIn,))
44 O.bodies.append(ympart.geshi("hourglass-mesh", scale=500, color=[1,0,1], mask=0))
45 O.bodies.append(geom.facetBox((0, 0, -9), (10, 30, 0), wallMask=03, color=[1,1,1], wire=False))
46
47 sp=pack.SpherePack()
48 sp.toSimulation()
49 sp.makeCloud((-3, -3, 5), (3, 3, 0), rMean=.2, rHolFuzz=.3)
50 sp.toSimulation(color=[ 0, 0, 0])

```

Figura 1: Código para simulação de escoamento de grão em silo – YADE (1).

```

45 for b in O.bodies:
46     if not isinstance(b.shape, Sphere): continue
47     contParticulas=contParticulas+1
48
49 O.engines=[
50     ForceResetter(),
51     InsertionSortCollider([Bo1_Sphere_Aabb(),Bo1_Facet_Aabb()]),
52     InteractionLoop(
53         [Ig2_Sphere_Sphere_ScGeom(),Ig2_Facet_Sphere_ScGeom()],
54         [Ip2_FrictMat_FrictMat_FrictPhys()],
55         [Law2_ScGeom_FrictPhys_CundallStrack()]
56     ),
57     NewtonIntegrator(gravity=(0,0,-9.81),damping=.75),
58     PyRunner(command='checkUnbalanced()',realPeriod=2),
59     PyRunner(command='addPlotData()',iterPeriod=100)
60 ]
61
62 O.dt=1*PWaveTimeStep()
63
64 O.trackEnergy=True
65
66

```

Figura 2: Código para simulação de escoamento de grão em silo – YADE (2).

```

67 def checkUnbalanced():
68     if unbalancedForce() <= 0:
69         0.pause()
70         plot.saveDataTxt('bbb.txt.txt2')
71     for b in B.bodies:
72         if not isinstance(b.shape, Sphere): continue
73         if b.speed > vMax:
74             b.speed = vMax
75
76         print(round(b.state.refPos[0], 2), round(b.state.refPos[1], 2), round(b.state.refPos[2], 2))
77
78         if round(b.state.refPos[2], 2) < altura:
79             altura = round(b.state.refPos[2], 2)
80             rMed = sqrt(round(b.state.refPos[0], 2)**2 + round(b.state.refPos[1], 2)**2)
81
82             rMed /= contParticulas
83             angReposo = math.atan(altura/rMed)
84
85             print("")
86             print('Pilha com ' + str(contParticulas) + ' particulas')
87             print('Altura da pilha: ' + str(round(altura, 2)))
88             print('Razo media da pilha: ' + str(round(rMed, 2)))
89             print('Angulo de repouso da pilha: ' + str(round(angReposo, 2)))
90
91 def addPlotData():
92     plot.addData([0, iter, unbalanced-unbalancedForce(), "E.energy"])
93
94 plot.plots=["i": "unbalanced", "name", "E.energy", "keys"]
95 yade.plot.live = True
96 yade.plot.autosave = True
97
98 plot.plot()
99
100 B.saveTag()
101
102 yade.plot.saveDataTxt('teste.txt', save=0, time)
103
104 from yade import qt
105 qt.View()
106 qt.Renderer()

```

Figura 3: Código para simulação de escoamento de grão em silo – YADE (3).

Após a execução do código no YADE, se tem a geração de três janelas. A primeira é referente a interface de interação do próprio YADE, onde tem-se a possibilidade de acessar comandos da execução, tais como começar, pausar, retroceder, visualizar, mudar o ponto de vista, entre outros mais avançados, representado pela Figura 4. A segunda janela visualizada é a do gráfico onde serão apresentadas as energias internas do sistema, apresentado na Figura 5. A última é a janela da visualização do próprio sistema de grãos, Figura 6, apresentando o comportamento visual dos grãos escoando no silo.



Figura 4: Janela de comandos do YADE.

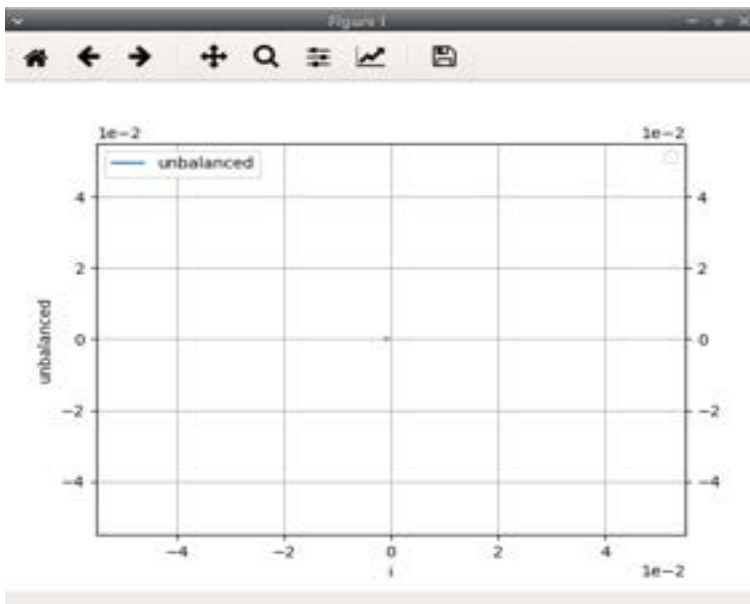


Figura 5: Gráfico de energias internas do sistema.

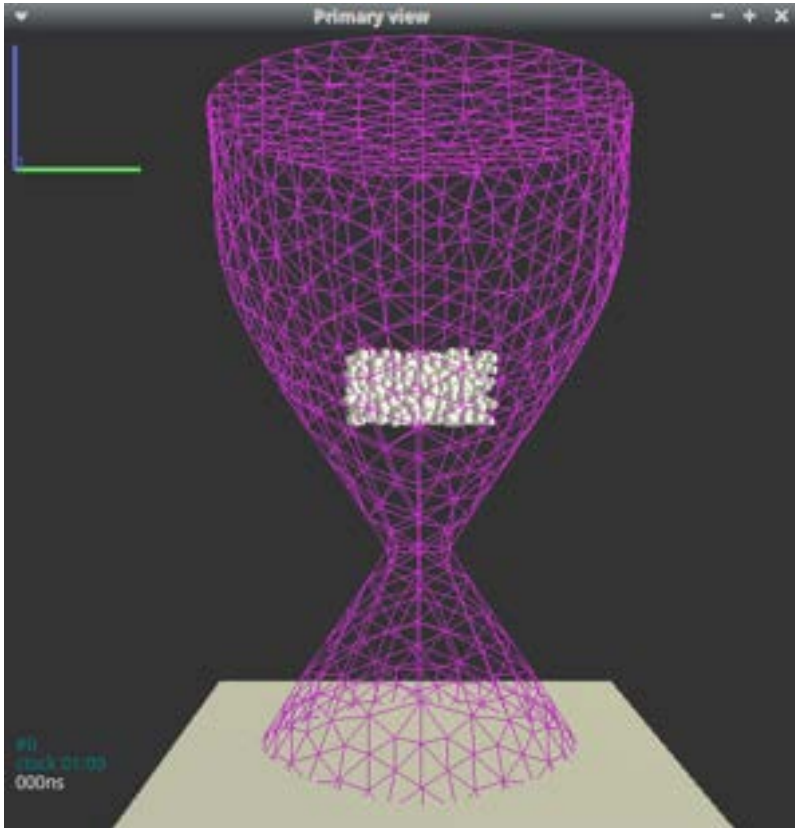


Figura 6: Representação visual dos grãos escoando no silo (momento inicial).

Percebe-se que a geometria escolhida para o silo em questão foi a de um corpo com base cônica, contendo um engargantamento por onde os grãos gerados irão escoar naturalmente devido à ação da gravidade, além das interações entre os próprios grãos em si e com as paredes do silo.

Após a saída, tem-se paredes da parte inferior do cone, criando um limite, pois caso algum destes grãos escape, eles cairão infinitamente, gerando resultados indesejados (dica para evitar outliers).

Após iniciada a simulação, pode-se ver a primeira ação de queda dos grãos na Figura 7.

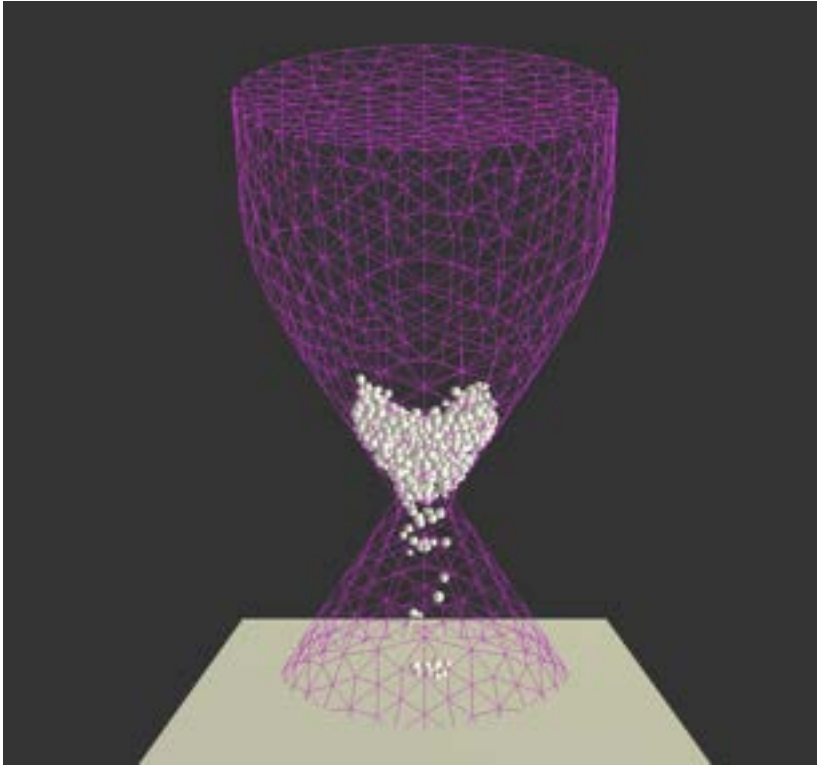


Figura 7: Início do movimento de queda dos grãos em colisão com paredes do silo.

Conforme o tempo da simulação passa, o movimento dos grãos continua, até que seja formada uma pilha sobre o plano e todos os grãos caírem, conforme a Figura 8.

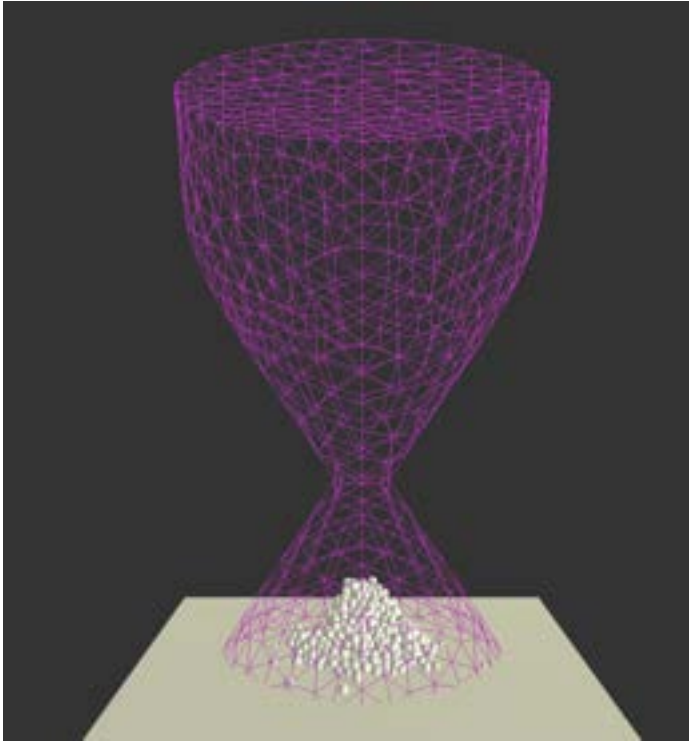


Figura 8: pilha formada após o escoamento dos grãos pelo orifício do silo.

Neste ponto da execução da simulação, finaliza-se a etapa de coleta dos dados, resultando no gráfico com a amostragem das energias finalizadas, plotado conforme a Figura 9.

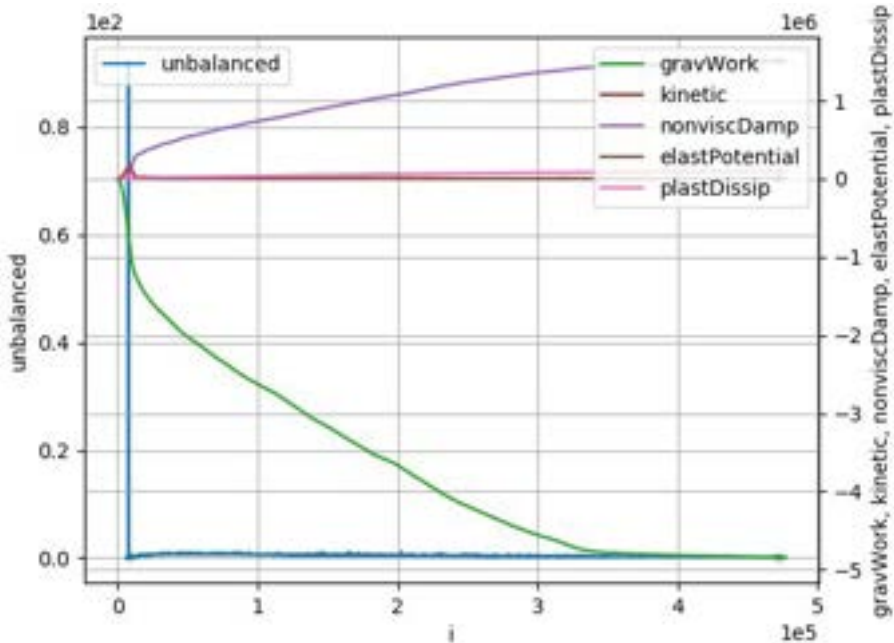


Figura 9: Gráfico com demonstração das energias após a execução da simulação.

Para analisar, a lista das energias contidas no sistema, representado no gráfico da Figura 9, são:

- Potencial gravitacional (verde);
- Cinética (vermelho);
- Amortecimento não viscoso (roxo);
- Potencial elástica (marrom);
- Dissipação plástica (rosa);
- Energia não balanceada (azul).

A energia potencial gravitacional é a energia inicial do sistema, estando armazenada nas partículas no momento inicial da simulação [18]. Após iniciar a simulação, essa energia foi gradativamente convertida em energia cinética [1-3,19]. Nesse momento observa-se uma elevação da energia cinética e uma suavização no decremento da energia potencial gravitacional, como observado no gráfico da Figura 9. Isso pode ser explicado pela desaceleração devido ao contato das partículas com a parede do silo [2,20].

Por causa desse contato das partículas e a parede do silo, observa-se um incremento abrupto das energias dissipativas, pois tais colisões geram dois problemas: a dissipação de energia plástica e a energia de dissipação por amortecimento.

A dissipação de energia plástica é proveniente dos choques com deformações plásticas, representando pequena parcela dos problemas, como observado na Figura 9, pois os grãos apresentam alta resistência (parâmetro configurado) [6,21]. Já a dissipação de energia por amortecimento, que representa sem dúvidas a maior parcela de energia ao final da simulação, é proveniente da dissipação de energia ligada ao choque entre os grãos (perda de calor, absorção de energia pela estrutura), demonstrando a importância desse parâmetro para as simulações, considerando aplicações reais [9,12,18].

Nota-se também que ao longo do processo a energia potencial elástica permanece constante, pois a configuração dos grãos faz com que os mesmos não deformam a ponto de conseguir devolver qualquer energia para o sistema.

Agora o ponto chave dessa simulação é compreender do que se trata a energia não balanceada, e o porquê ela é utilizada como critério de parada da simulação, como observado no código. A energia não balanceada, na realidade é uma compensação de energias de um sistema feito por simulação [3,8]. Isso é devido à conservação da energia total em um sistema fechado, no qual a energia apenas é alterada, mas sempre conservada. Mas no mundo computacional tem-se algo importante a ser levado em consideração, o truncamento [8,13,21].

O truncamento nada mais é do que a incapacidade de um computador carregar todas as informações de um sistema real [3,4]. 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 à posição real das partículas, bordas para sua colisão, velocidades aproximadas, entre outras variáveis, fazem com que o somatório das energias internas do sistema não se mantenham constantes e oscilem [21]. Por isso a necessidade da energia não balanceada.

Ainda sobre a Figura 9, percebe-se na curva da energia não balanceada (azul) uma oscilação maior no instante inicial da simulação. Isso pode ser explicado pela geração das partículas em si e a sua anexação na simulação, contudo, vai decrescendo ao longo do tempo, tendendo a zero num instante final [1,5,6]. Quando essa energia alcança um valor suficientemente pequeno (depende da precisão da simulação), indica que essa simulação alcançou seu propósito, ou seja, os parâmetros estão próximos aos reais. Com isso, justificasse esse parâmetro ser o critério de parada da simulação.

Por fim, a última análise a ser realizada é a do retorno dos resultados finais. Após a execução do problema, teremos três valores a serem analisados: Altura final da pilha, raio médio da pilha e ângulo de repouso da pilha. Isso é gerado após a execução do código, apresentado na Figura 10.

```
Pilha com 1714 particulas
Altura da pilha: 1.04
Raio medio da pilha: 0.56
Angulo de repouso da pilha: 30.87
```

Figura 10: valores dos parâmetros finais da pilha de grãos após a execução da simulação.

Com base nesses parâmetros, os operadores poderão tomar decisões em relação à alteração de algum parâmetro do processo.

4 | CONCLUSÕES

A implementação do código realizada software YADE foi feita com sucesso. Isso vale ser ressaltado, pois esse software utiliza a linguagem do Python e é de livre acesso.

O código compilado tem-se a possibilidade de variar o fluxo de grãos e em diferentes geometrias, visualizando os resultados dessas variações de parâmetros e também sua simulação gráfica. Além disso, o código possibilita a visualização das energias envolvidas no sistema, podendo assim realizar uma avaliação criteriosa do processo.

REFERÊNCIAS

- [1] WANG, Shuai; SHEN, Yansong. Coarse-grained CFD-DEM modelling of dense gas-solid reacting flow. *International Journal Of Heat And Mass Transfer*, [S.L.], v. 184, p. 122302, mar. 2022. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.122302>.
- [2] NAPOLITANO, Erasmo S.; RENZO, Alberto di; MAIO, Francesco P. di. Coarse-grain DEM-CFD modelling of dense particle flow in Gas-Solid cyclone. *Separation And Purification Technology*, [S.L.], v. 287, p. 120591, abr. 2022. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2022.120591>.
- [3] BYŁKA, Rafał; MOLENDĄ, Marek; HORABIŁ, Józef. DEM simulation of the pressure distribution and flow pattern in a model grain silo with an annular segment attached to the wall. *Biosystems Engineering*, [S.L.], v. 193, p. 75-89, maio 2020. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.biosystemseng.2020.02.013>.
- [4] WEINHART, Thomas; LABRA, Carlos; LUDING, Stefan; OOI, Jin Y.. Influence of coarse-graining parameters on the analysis of DEM simulations of silo flow. *Powder Technology*, [S.L.], v. 293, p. 138-148, maio 2016. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2015.11.052>.
- [5] TEJCHMAN, J. *Confined Granular Flow in Silos: Experimental and Numerical Investigations* (Springer, 2013).
- [6] ALVES, Felipe Inácio Cunha, *Produção de Coque Metalúrgico a Partir de Carvão Densificado por brocompactação em Forno de Soleira Aquecida*, 2017. Dissertação (Engenharia de Materiais) - Universidade Federal de Ouro Preto.
- [7] BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-Organized Criticality. An explanation of $1/f$ noise. *Phys, Rev Lett*, 59, p. 381 (1987).

- [8] CALAZANS, Leonardo Ferreira *et al.* Termodinâmica de estados estacionários: entropia, equivalência de ensembles e independência de reservatórios. 2020.
- [9] DA SILVA, T. M. Simulação de Segregação e Ondulações em Estradas Não Pavimentadas. 2016. Dissertação (Ciências - Física dos Materiais) - Universidade Federal de Ouro Preto.
- [10] 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.
- [11] 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>.
- [12] HANSEN, A.; BIDEAU, D. (eds.) *Disorder and Granular Media*, North-Holland: Amsterdam, 1992
JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; *Science* 255, 1523 (1992).
- [13] JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. *Rev. Mod. Phys.* 68, 1259 (1996). LIAN, G.; THORNTON, C.; ADAMS, M. J., *J. Coll. Int. Sci.* 161, 138 (1993).
- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] RESENDE, Hélio Fernando Verona de. *Formação de Padrões em meios Granulares Densos*. 2008. Tese (Engenharia de Materiais) - Universidade Federal de Ouro Preto.
- [18] SILVA, A. C. Simulação computacional da redução direta de minério de ferro em fornos.
- [19] MIDREX. 2010. Tese (Engenharia de Materiais) - Universidade Federal de Ouro Preto.
- [20] SILVA, A. C.; BERNARDES, A. T.; *Iron Ore Direct Reduction: Simulation of In: Encyclopedia of Iron, Steel, and Their Alloys*. 1 ed. : CRC Press, 2016, p. 1903-1909.
- [21] SILVA, A. C.; BERNARDES, A. T. Simulação computacional do escoamento de grãos em silos. *Exacta* (São Paulo. Impresso), v.8, p.45 - 53, 2010.

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 Fluidos 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

```

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

```

59
60 class Particula:
61     def __init__(self, (x, y), tam):
62         self.x = x
63         self.y = y
64         self.tam = tam
65         self.cor = (100, 100, 100)
66         self.espessura = 0
67         self.velocidade = 0
68         self.angulo = 0
69
70     def display(self):
71         pygame.draw.circle(screen, self.cor, (int(self.x), int(self.y)), self.tam, self.espessura)
72
73     def rebater(self):
74         while self.x > largura - self.tam:
75             self.x = 2*(largura - self.tam) - self.x
76             self.angulo = - self.angulo
77         while self.x < self.tam:
78             self.x = 2*self.tam - self.x
79             self.angulo = - self.angulo
80         while self.y > altura - self.tam:
81             self.y = 2*(altura - self.tam) - self.y
82             self.angulo = math.pi - self.angulo
83         while self.y < self.tam:
84             self.y = 2*self.tam - self.y
85             self.angulo = math.pi - self.angulo
86
87     def mover(self):
88         self.x += math.sin(self.angulo) * self.velocidade * velocidade_multiplier
89         self.y += math.cos(self.angulo) * self.velocidade * velocidade_multiplier
90
91 inicio = time.time()
92

```

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("Simulacao de particulas")
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.move()
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.

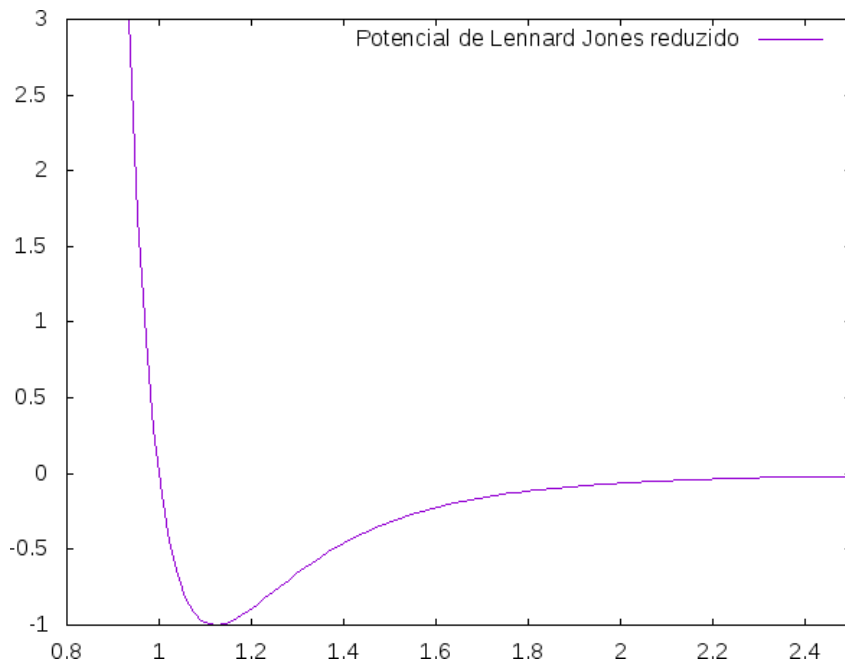


Figura 5: Potencial LJ

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

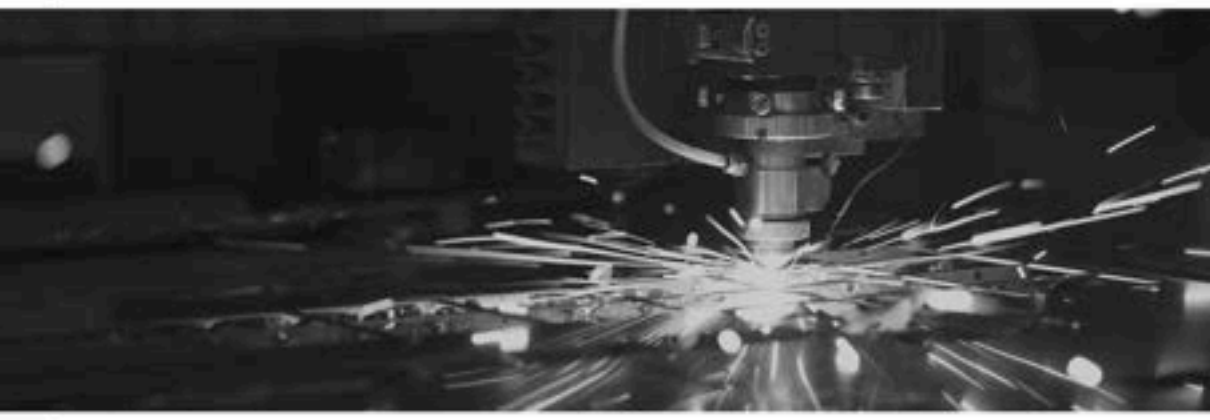
Superligas 15, 16, 17

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