

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

CARLOS FELIPE MENDES ALVES

**Análise Computacional da Interação
Fluido-Partícula**

Prof. Dr. Marcello Goulart Teixeira
Orientador

Profa. Dra. Juliana Vianna Valério
Co-orientador

Rio de Janeiro, Julho de 2012

Ficha Catalográfica

Mendes Alves, Carlos Felipe

Análise Computacional da Interação Fluido-Partícula /
Carlos Felipe Mendes Alves. – Rio de Janeiro: UFRJ IM,
2012.

85 f.: il.

Dissertação (Mestrado em Informática) – Universidade
Federal do Rio de Janeiro. Programa de Pós-Graduação em
Informática, Rio de Janeiro, BR–RJ, 2012.

Orientador: Marcello Goulart Teixeira; Co-orientador: Ju-
liana Vianna Valério.

I. Goulart Teixeira, Marcello. II. Vianna Valério, Juliana.
III. Título.

Análise Computacional da Interação Fluido-Partícula

Carlos Felipe Mendes Alves

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Departamento de Ciência da Computação do Instituto de Matemática, e Núcleo de Computação Eletrônica da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Informática.

Aprovado por:

Prof. Dr. Marcello Goulart Teixeira (Orientador)

Profa. Dra. Juliana Vianna Valério (Co-orientador)

Prof. Dr. Webe João Mansur

Prof. Dr. Daniel G. Alfaro Vigo

Prof. Dr. Thiago Gamboa Ritto

Rio de Janeiro, Julho de 2012

*A toda minha família, em especial à
minha esposa Rafaela e meu filho Davi.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por ser minha grande força, principalmente em mais uma etapa vencida.

Aos meus orientadores Marcello Goulart e Juliana Valério que sempre me ajudaram em tudo com muita paciência, dedicação e cobrança, é claro, muitas disciplinas, muito trabalho, enfim só tenho a agradecer.

Agradeço à minha esposa Rafaela que muito me apoiou, me deu confiança e sempre acreditou que eu era capaz e ao meu filho Davi, amo vocês.

Aos meus pais e irmãos pelo apoio e compreensão para a conclusão desta dissertação.

À minha família, em especial minha avó Marlene, tio Didi, Ilza, Jorginho, Daniele e Wellington que sempre me apoiaram e acreditaram em mim.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Informática - PPGI/UFRJ, em especial aos Professores Mauro Rincon, Mitre da Costa, Jayme Szwarcfiter, Luziane Mendonça e Daniel Alfaro.

Aos amigos do mestrado e do laboratório LC3: Rabi, Lucila, Guilherme, Julio, Gabriel e Marcelo.

Ao amigo Leonardo Castro que me apresentou ao Programa e muito me ajudou na programação.

Ao técnico administrativo e amigo Anibal do PPGI-UFRJ pela ajuda e boa vontade que sempre teve em me atender.

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro que recebi durante o mestrado.

Agradeço, de maneira geral, a todos que de certa forma contribuíram para o meu sucesso.

RESUMO

Desenvolveu-se nesta dissertação simulações numéricas de escoamentos com partículas em suspensão. Serão utilizados o método dos Elementos Finitos (MEF) para simular o escoamento de um fluido newtoniano incompressível e o Método dos Elementos Discretos (MED) para simular o movimento das partículas. O principal desafio é o acoplamento dessas duas metodologias na interação fluido-partícula. É realizada a modelagem de uma cavidade bidimensional de tampa móvel onde as partículas não influenciam o escoamento, ou seja, a quantidade de partículas, suas dimensões e sua densidade são tais que o fluido altera o movimento das partículas, mas as partículas não alteram o padrão do escoamento. Considera-se o escoamento em regime permanente e o movimento das partículas é determinado em cada passo de tempo, sob influência do escoamento e das interações partícula-partícula e partícula-parede. Serão apresentados exemplos e resultados preliminares de alguns casos considerados. Por fim, é realizado um estudo sobre a determinação dos coeficientes de rigidez e determina-se uma região de consistência física do problema.

Palavras-chave: Método dos Elementos Finitos, Mecânica dos Fluidos, Simulação Numérica.

Fluid-Particle Interaction

RESUMO

It is presented in this paper numerical simulations of flows with particles in suspension. The Finite Element Method (FEM) is to simulate the flow of an incompressible and newtonian fluid and the Discrete Element Method (DEM) to simulate the motion of particles. The main challenge is the coupling of these two methods in fluid-particle interaction. Modeling a movable cover of two-dimensional cavity in which the particles do not influence the flow, i.e., the amount of particles, their dimensions and their density is are such that the fluid changes the movement of the particles, but the particles do not alter the pattern of the flow; such modeling minimizes the main challenge. Steady state flow is considered the movement of the particles being determined at each time step, under the influence of flow and particle-particle and particle-wall interactions. Examples are be presented and preliminary results of some cases considered. Finally study on the determination of stiffness coefficients is carried out and one determines a region of physical consistency of the problem.

Palavras-chave: Finite Element Method, Fluid Mechanics, Numerical Simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1: Elemento biquadrático de 9 nós.	31
Figura 3.2: Funções base biquadráticas: ϕ_1, ϕ_3, ϕ_6 e ϕ_9	32
Figura 3.3: Numeração local dos graus de liberdade.	33
Figura 3.4: Algoritmo Elementos Discretos.	36
Figura 3.5: Esquema Deslocamento X Força	52
Figura 3.6: Algoritmo de Interação Fluido-Partícula.	58
Figura 4.1: Cavidade tampa móvel.	60
Figura 4.2: Partícula em queda livre nos instantes de tempo $t = 0.2, t = 0.3$ e $t = 0.4$ segundos.	63
Figura 4.3: Partícula colidindo com as paredes inferior e lateral direita.	65
Figura 4.4: Partículas colidindo com a parede inferior e em seguida entre si.	66
Figura 4.5: Partículas colidindo entre si e em seguida com a parede inferior.	67
Figura 4.6: Partículas colidindo com as paredes da esquerda e direita, em seguida com a parede inferior e por último entre elas. Figura da direita: Zoom da colisão entre as partículas.	67
Figura 4.7: Campo de velocidades de um escoamento 2-D com parede fixa. Figura da direita: Zoom do escoamento.	69
Figura 4.8: Intensidade da velocidade na direção x . Figura da direita: Inten- sidade da velocidade na direção y	69
Figura 4.9: Partícula colidindo com o ponto médio da parede da direita no escoamento da figura (4.7). A cor azul (—) mostra a partícula se movimentando em direção a parede e a cor vermelha (—*—) indica que a partícula colidiu e mudou de sentido.	70
Figura 4.10: Partícula colidindo com a parede da direita no escoamento da figura (4.7). A cor azul (—) mostra a partícula se movimentando em direção a parede e a cor vermelha (—*—) indica que a partícula colidiu e mudou de sentido.	70

Figura 4.11: Região do escoamento onde ocorre a colisão partícula-parede representada pela figura (4.10).	71
Figura 4.12: Duas partículas colidindo no escoamento 2D com parede fixa representada pela figura (4.7).	71
Figura 4.13: Duas partículas colidindo no escoamento 2D com parede fixa representada pela figura (4.7).	72
Figura 4.14: Campo de velocidades de um escoamento 2-D com tampa móvel. Figura da direita: Zoom da parte superior esquerda do escoamento.	72
Figura 4.15: Intensidade da velocidade na direção x . Figura da direita: Intensidade da velocidade na direção y	73
Figura 4.16: Partícula liberada na cavidade de tampa móvel da figura (4.14). .	73
Figura 4.17: Colisão entre duas partículas no escoamento da figura (4.14). . . .	73
Figura 5.1: Região de consistência.	76
Figura 5.2: Região de consistência para duas partículas com raios $R_1 = 3.1 \times 10^{-7}$ e $R_2 = 3.2 \times 10^{-7}$	77
Figura 5.3: Ausência da região de consistência para duas partículas com raios $R_1 = 3.0 \times 10^{-7}$ e $R_2 = 3.6 \times 10^{-7}$	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Relação entre as funções base para elementos quadrangulares, onde n e m são os graus de liberdade por elemento.	31
Tabela 3.2: Número do grau de liberdade local \times grau de liberdade.	34
Tabela 4.1: Velocidade u do presente trabalho e u^* (ERTURK; CORKE; GOKCOL, 2005) ao longo de uma linha vertical que passa pelo centro geométrico da cavidade quadrada de tamanho 1, para $Re = 1000$	61
Tabela 4.2: Relação: deslocamento real $H \times H^*$ deslocamento da simulação .	62
Tabela 4.3: Características da partícula.	65
Tabela 5.1: Conjuntos de coeficientes \times Intervalos dos raios.	76

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MEF	Método dos Elementos Finitos
MED	Método dos Elementos Discretos
MLB	Método de Lattice-Boltzmann
SPH	<i>Smoothed Particle Hydrodynamics</i>
$\mathbf{u} = (u, v)$	Vetor velocidade do fluido
ρ	Densidade do fluido
ρ_p	Densidade da partícula
t	Tempo
p	Pressão
μ	Viscosidade do fluido
$\mathbf{x} = (x, y)$	Vetor posição
$\mathbf{W} = (W_1, W_2)$	Função peso vetorial
w	Função peso escalar
R_m	Resíduo da equação da quantidade de movimento
R_c	Resíduo da equação de conservação de massa
Ω	Domínio bidimensional
Γ	Fronteira
ϕ	Função peso para a velocidade
χ	Função peso para a pressão
U_j	Valor da velocidade u no nó j

V_j	Valor da velocidade v no nó j
P_1	Pressão no centro do elemento finito
P_2	Derivada da pressão na direção η
P_3	Derivada da pressão na direção ξ
\mathbf{R}	Vetor dos resíduos
\mathbf{c}	Vetor de incógnitas
J_{ij}	Matriz Jacobiana
m_i	Massa da partícula i
m^{ef}	Massa efetiva entre duas partículas
\mathbf{v}_i	Vetor velocidade da partícula i
$\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$	Velocidade relativa entre as partículas i e j
$\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$	Posição relativa entre os centros das partículas i e j
$ \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j $	Distância entre os centros das partículas
ξ_{ij}	Compressão (ou deformação) mútua das partículas i e j
$\mathbf{F}_{B,i}$	Força total de corpo agindo na partícula i
$\mathbf{F}_{P,ij}$	Força que age sobre a partícula i por sua interação com a partícula vizinha j
N_i	Número de partículas vizinhas
$\mathbf{F}_{W,i}$	Força que age na partícula i por sua interação com a parede
$\mathbf{F}_{F,i}$	Força que atua partícula i por sua interação com o fluido
$\mathbf{F}_{c,ij}$	Força de contato entre as partículas i e j
$\mathbf{F}_{c,n,ij}$	Força de contato normal entre as partículas i e j
$\mathbf{F}_{c,t,ij}$	Força de contato tangencial entre as partículas i e j
$\mathbf{F}_{c,n,iw}$	Força de contato normal entre a partícula i e a parede
$\mathbf{F}_{c,t,iw}$	Força de contato tangencial entre a partícula i e a parede
$\mathbf{F}_{vdw,ij}$	Força coloidal entre as partículas i e j
$\mathbf{F}_{vdw,iw}$	Força coloidal entre a partícula i e a parede
$\mathbf{F}_{HD,ij}$	Força hidrodinâmica entre as partículas i e j

$\mathbf{F}_{HD, iw}$	Força hidrodinâmica entre a partícula i e a parede
\bar{V}_i	Volume da partícula i
\mathbf{g}	Aceleração da gravidade
R_i	Raio da partícula i
R^{ef}	Raio efetivo entre duas partículas
R'	Raio da área de contato
\vec{e}_{ij}^n	Vetor normal unitário
\vec{e}_{ij}^t	Vetor tangente unitário
F_{ij}^n	Força normal entre as partículas i e j
F_{ij}^t	Força tangencial entre as partículas i e j
$F_{el, ij}^n$	Força normal entre as partículas elásticas i e j
Y	Módulo de Young
ν_i	Coefficiente de Poisson da partícula i
ν_w	Coefficiente de Poisson da parede
$\bar{\mu}$	Coefficiente de atrito
$\bar{\mu}_c$	Coefficiente de atrito de Coulomb
$\bar{\mu}_{lam}$	Coefficiente de atrito de laminagem
G_i	Módulo de cisalhamento da partícula i
G_w	Módulo de cisalhamento da parede
γ	Constante de amortecimento global
γ^n	Constante de amortecimento normal
γ^t	Constante de amortecimento tangencial
A	Constante de dissipação em função da viscosidade do material
\mathbf{n}_{ij}	Vetor unitário que une os centros das partículas com direção de i para j
$\delta_{n, ij}$	Sobreposição entre as partículas i e j na direção de \mathbf{n}_{ij}
\mathbf{n}_w	Vetor normal à parede que aponta para o fluido
$\delta_{t, ij}$	Vetor tangente à parede, medido do ponto de primeiro contato

δ_{iw}	Sobreposição da partícula com a parede
d_{iw}	Distância entre o centro da partícula i e a parede
λ	Comprimento de onda
β	Parâmetro definido como $1/3$
Λ_{ij}	Constante de Hamaker entre as partículas i e j dentro do sistema
Λ_{iw}	Constante de Hamaker entre a partícula i e a parede dentro do sistema
Λ_p	Constante de Hamaker das partículas
Λ_f	Constante de Hamaker do fluido
Λ_w	Constante de Hamaker da parede
e	Coefficiente de restituição
K_n	Coefficiente de rigidez normal
$K_{n,1}$	Coefficiente de rigidez normal de aproximação entre duas partículas
$K_{n,2}$	Coefficiente de rigidez normal de afastamento entre duas partículas
$K_{n,w1}$	Coefficiente de rigidez normal de aproximação entre a partícula e a parede
$K_{n,w2}$	Coefficiente de rigidez normal de afastamento entre a partícula e a parede
K_t	Coefficiente de rigidez tangente
$K_{t,0}$	Coefficiente de rigidez tangencial inicial
I	Impulsão
I_r	Impulsão de restauração
I_d	Impulsão de deformação
V_{rn}	Velocidade relativa normal absoluta antes da colisão
V'_{rn}	Velocidade relativa normal absoluta após a colisão
V_{rel}^t	Velocidade relativa tangencial
ω_i	Velocidade de rotação da partícula i
V_{af}	Velocidade relativa de afastamento
V_{ap}	Velocidade relativa de aproximação

$\mathbf{v}_{\max-i}$	Velocidade máxima de impacto entre duas partículas
$\mathbf{v}_{\max-p}$	Velocidade máxima prevista de qualquer partícula dentro do sistema
E_{ci}	Energia cinética inicial
E_{cf}	Energia cinética final

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Motivação	18
1.2	Descrição da Dissertação	19
2	ESTADO DA ARTE	21
2.1	Técnicas para Interação Fluido-Partícula	21
3	DESENVOLVIMENTO	24
3.1	As equações do Movimento e o Método dos Elementos Finitos	24
3.1.1	Equação de Conservação de Massa	24
3.1.2	Equação da Quantidade de Movimento	25
3.1.3	Sistema composto pela equação de continuidade e Navier-Stokes	26
3.1.4	Método dos Resíduos Ponderados	27
3.1.5	Expansão dos Campos	29
3.1.6	Elementos Biquadrático e Linear Descontínuo	30
3.1.7	Solução via Método de Newton	34
3.2	Método dos Elementos Discretos	35
3.2.1	O Movimento das Partículas	37
3.2.2	Forças de Corpo	37
3.2.3	Interação Partícula-Partícula	38
3.2.4	Interação Partícula-Parede	47
3.2.5	Relação entre Coeficientes de Restituição e Coeficientes de Rigidez	50
3.3	Interação Fluido-Partícula	56
4	VALIDAÇÃO E EXEMPLOS DA SIMULAÇÃO	59
4.1	Validação do MEF	59
4.2	Testes e simulações do MED	61
4.2.1	Queda livre	62
4.2.2	Determinação do passo de tempo	62

4.2.3	Cálculo para o teste de parada	64
4.3	Exemplos e simulações	64
4.3.1	Partícula	64
4.3.2	Interação fluido-partícula	67
5	DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE RESTITUIÇÃO	74
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	79
	REFERÊNCIAS	81

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Escoamentos com partículas em suspensão são muito encontrados na natureza e nas indústrias, como por exemplo em processos de sedimentação, em processos de revestimento, no fluxo sanguíneo, nas tempestades de areia, nas indústrias petroquímicas, farmacêuticas, dentre outros. Nos últimos vinte anos a necessidade de compreensão da dinâmica de escoamentos de líquidos com partículas vem crescendo devido ao avanço das indústrias, principalmente as de revestimento, petroquímica, farmacêutica e de cosméticos. Junto com essa necessidade também cresce o interesse em compreender e desenvolver métodos numéricos que possam ser utilizados na simulação de tais escoamentos.

O objetivo deste trabalho é simular numericamente escoamentos com partículas em suspensão para o melhor entendimento desse tipo de fenômeno. Serão utilizados o método dos Elementos Finitos (MEF) para simular o escoamento de um fluido newtoniano incompressível e o Método dos Elementos Discretos (MED) para simular o movimento das partículas. O principal desafio é o acoplamento dessas duas metodologias na interação fluido-partícula. Estipular um valor para o coeficiente de

restituição e ajustar os coeficientes de rigidez com base nesse valor conforme apresentado na seção (3.2.5), que influencia diretamente na dinâmica das partículas dentro do escoamento, tornou-se um grande desafio. A relação apresentada na literatura (APOSTOLOU; HRYMAK, 2008) para esse coeficiente não se aplica no caso tratado e sua atual relação é aqui explorada. Procura-se entender como é sua dependência com parâmetros geométricos. Para isso, um critério que determina o deslocamento máximo das partículas durante a simulação é proposto para que seja investigado os possíveis valores que o coeficiente pode assumir. É realizada a modelagem de uma cavidade bidimensional de tampa móvel onde as partículas não influenciam o escoamento, ou seja, a quantidade de partículas, suas dimensões e sua densidade são tais que o fluido altera o movimento das partículas, mas as partículas não alteram o padrão do escoamento. Considera-se o escoamento em regime permanente e o movimento das partículas é determinado em cada passo de tempo, sob influência do escoamento e das interações partícula-partícula e partícula-parede. Serão apresentados resultados preliminares de alguns casos considerados, além de um estudo sobre os valores do coeficiente de restituição que dependem dos valores dos coeficientes de rigidez, a ser apresentado no Capítulo 5, dada sua sensibilidade aos parâmetros geométricos tanto da própria partícula como do domínio do escoamento.

1.2 Descrição da Dissertação

O objetivo deste trabalho é compreender um escoamento com partículas em suspensão. Para isso, simula-se um escoamento bidimensional de um fluido newtoniano incompressível utilizando o método de elementos finitos e o movimento das partículas é calculado pelo método dos elementos discretos. O acoplamento entre o escoamento e o movimento das partículas é a chave para o completo entendimento desse tipo de fenômeno e também o maior desafio. Para uma primeira abordagem, será considerado um número relativamente pequeno de partículas dispersas e de raio 20 vezes

menor que a dimensão do domínio do fluido, de modo que possa ser desconsiderada a influência das partículas sobre o escoamento.

No Capítulo 2 são apresentadas as diferentes técnicas para a modelagem da interação fluido-partícula desenvolvidas nos últimos anos.

No Capítulo 3 apresentam-se as equações que governam o fluido e sua discretização por elementos finitos, em seguida o método de elementos discretos é introduzido assim como as forças que atuam na partícula por sua interação com outras partículas, com a parede e com o fluido. Ainda neste capítulo é feito um levantamento sobre as diferentes maneiras de se calcular os coeficientes de restituição e rigidez. E por fim o acoplamento da interação fluido-partícula.

No 4º Capítulo é validado o programa que simula o movimento de um fluido newtoniano incompressível. Calcula-se o passo de tempo aproximado para a simulação com partículas e determina-se um critério de parada para determinar o deslocamento máximo realizado pelas partículas em cada passo de tempo. No final desse capítulo são realizadas simulações de um fluido em estado permanente em duas geometrias diferentes e da interação fluido-partícula.

E no último capítulo é feito um estudo entre os coeficientes de rigidez e o tamanho das partículas. Baseado nesse estudo determina-se uma região de consistência que depende dos valores dos coeficientes de restituição da partícula e da parede e também do tamanho das partículas.

2 ESTADO DA ARTE

2.1 Técnicas para Interação Fluido-Partícula

Este capítulo apresenta um levantamento do estado da arte das diferentes técnicas para a modelagem da interação fluido-partícula desenvolvidas nos últimos anos e algumas serão brevemente descritas a seguir.

Em um dado escoamento com partículas em suspensão onde o escoamento influencia no movimento das partículas e as partículas também podem mudar o padrão do escoamento podemos determinar os campos de pressão e de velocidades resolvendo o sistema de Navier-Stokes por meio de alguma técnica de discretização, tais como o método das diferenças finitas, dos elementos finitos ou volumes finitos, em seguida determinar o somatório de forças sobre cada uma das partículas e, por fim, o deslocamento das mesmas pela resolução da equação de movimento. Para isso é necessário considerar o remalhamento ao longo da simulação devido ao deslocamento das partículas. Com essa abordagem podemos citar os trabalhos HOWARD; DANIEL; MARCEL (1992), HOWARD (1996) e TIPTHAVONNUKUL; CHAN (2007).

Para evitar o remalhamento em cada passo de tempo podemos citar o método de domínio fictício, proposto inicialmente por GLOWINSKI et al. (1999) e depois melhorado por DIAZ-GOANO; MINEV; NANDAKUMAR (2003). Nessa abordagem discretiza-se tanto o domínio do fluido quanto o domínio das partículas e a equação de Navier-Stokes é resolvida em todo o domínio, porém restringindo o campo de velocidades no domínio das partículas de modo que esta tenha um movimento de corpo rígido. Normalmente, a parte transiente do problema é resolvida de forma explícita e os campos de velocidade e pressão são resolvidas por um procedimento iterativo. Com essa abordagem podemos citar também os trabalhos LAGE; LOPES; CARVALHO (2011), LAGE; LOPES; CARVALHO (2009), VEERAMINI; MINEV; NANDAKUMAR (2007), VEERAMINI; MINEV; NANDAKUMAR (2005), DIAZ-GOANO; MINEV; NANDAKUMAR (2000) e PANTAKAR et al. (2000).

Com o objetivo de tratar o fluido e as partículas de forma semelhante temos o método *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) que foi apresentado tanto por LUCY (1977), quanto por GINGOLD; MONAGHAN (1977) para resolver problemas astrofísicos. No entanto, o método é geral o bastante para ser aplicado em vários tipos de problemas em mecânica, tanto de fluidos quanto de sólidos. O método SPH é um método lagrangeano onde o estado de um sistema é representado por um conjunto de partículas que possuem propriedades materiais individuais e se movem de acordo com as equações governantes de conservação. É um método desenvolvido para problemas hidrodinâmicos na forma de Equações Diferenciais Parciais, para problemas sem solução analítica e com soluções numéricas não satisfatórias. O método utiliza funções de suavização, também conhecidas como *kernels*, para interpolar os valores correspondentes através das interações com partículas vizinhas. Detalhes à respeito do método SPH podem ser encontrados LIU; LIU (2003) e NAKAMURA (2007).

Com essa mesma idéia podemos citar o método de Lattice-Boltzmann, que baseia-

se em algoritmos numéricos de micro-partículas para a solução de escoamentos de fluidos incompressíveis. Este método pode ser considerado como uma das mais simples abordagens microscópicas para uma modelagem macroscópica dinâmica. É baseado na equação de transporte de Boltzmann que, ao contrário dos métodos tradicionais que resolvem as equações de conservação de propriedades macroscópicas (isto é, massa, momento e energia) numericamente, modela o fluido na forma de partículas fictícias, e essas partículas executam consecutivos processos de propagação e de colisão em uma malha discreta. Nessa abordagem temos os trabalhos YU et al. (2003), CHEN; DOOLEN (1998) e SHULING (1995).

3 DESENVOLVIMENTO

3.1 As equações do Movimento e o Método dos Elementos Finitos

O sistema de equações que governam escoamentos de fluidos newtonianos incompressíveis é composto pela equação da quantidade de movimento (ou momento), conhecida por equação de Navier-Stokes, e pela equação de conservação de massa (ou continuidade) que serão apresentadas a seguir.

3.1.1 Equação de Conservação de Massa

A equação de conservação de massa ou equação da continuidade para o escoamento de um fluido é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{u} = (u, v)$ é o campo de velocidade, ρ é a densidade (massa específica) do fluido, t é o tempo e o operador $\nabla \cdot$ é o divergente.

Para um fluido em estado permanente o termo $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ da equação (3.1) se anula e a

equação de conservação de massa se reduz a

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.2)$$

Para fluidos incompressíveis, isto é, onde a massa específica não varia, a equação (3.2) é simplificada. Portanto, a equação de conservação de massa para fluidos incompressíveis em regime permanente é dada por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.3)$$

Isto é

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0.$$

3.1.2 Equação da Quantidade de Movimento

A força resultante agindo sobre um sistema é igual à taxa com a qual a quantidade de movimento do sistema está mudando. A equação que descreve a conservação da quantidade de movimento para um fluido newtoniano incompressível é dada por (Segunda Lei de Newton):

$$\underbrace{\rho}_{(I)} \underbrace{\frac{D\mathbf{u}}{Dt}}_{(II)} = \underbrace{-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}}_{(III)}, \quad (3.4)$$

onde p é o campo de pressão, μ é a viscosidade do fluido e $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ depende da posição $\mathbf{x} = (x, y)$ e do tempo t . Os termos (I), (II) e (III) representam, respectivamente, a massa do fluido, a aceleração (derivada da velocidade em relação ao tempo) e o somatório de forças: força de pressão e forças viscosas.

Desenvolvendo o termo (II) da equação (3.4) temos que:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}.$$

Notando que $u = \frac{dx}{dt}$ e $v = \frac{dy}{dt}$ tem-se

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{u}}{Dt}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial x}u + \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial y}v + \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} = \\ &= \begin{bmatrix} u & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} + \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} = \\ &= \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u} + \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} . \end{aligned}$$

Substituindo o desenvolvimento do termo (II) na equação (3.4) obtém-se

$$\rho \left[\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} . \quad (3.5)$$

Como o nosso objetivo é simular um escoamento em estado permanente, o termo $\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}$ se anula e a equação da quantidade de movimento para um fluido newtoniano incompressível pode ser reescrita como

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} . \quad (3.6)$$

3.1.3 Sistema composto pela equação de continuidade e Navier-Stokes

As equações (3.3) e (3.6) formam o sistema composto pela equação de Navier-Stokes e continuidade

$$\begin{cases} \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} , \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 , \\ \text{condições de contorno apropriadas.} \end{cases} \quad (3.7)$$

A equação de Navier-Stokes é não-linear (termo $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$) e de segunda ordem (termo $\nabla^2 \mathbf{u}$). Os campos de velocidade \mathbf{u} e pressão p são obtidos pela solução do sistema (3.7).

3.1.4 Método dos Resíduos Ponderados

Para resolver o sistema de equações diferenciais parciais (3.7) pelo método dos resíduos ponderados, deve-se multiplicar o resíduo da aproximação de cada equação por uma função peso e forçar a integral ao longo de todo o domínio Ω a ser nula.

Multiplicando o resíduo da aproximação da equação da quantidade de movimento por uma função peso vetorial \mathbf{W} e o resíduo da equação de conservação de massa por uma função peso escalar w , obtemos os resíduos ponderados das duas equações do sistema (3.7)

$$R_m = \int_{\Omega} [\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p - \mu \nabla^2 \mathbf{u}] \cdot \mathbf{W} \, d\Omega , \quad (3.8)$$

$$R_c = \int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{u}] w \, d\Omega , \quad (3.9)$$

onde R_m e R_c são os resíduos ponderados das equações da quantidade de movimento e conservação de massa, respectivamente. O escoamento é definido em um domínio bidimensional Ω limitado pela curva Γ .

Resíduo Ponderado da Equação da Quantidade de Movimento

De maneira intuitiva será desenvolvido cada termo do resíduo ponderado da equação de conservação da quantidade de movimento, equação (3.8):

$$R_m = \int_{\Omega} [\rho \underbrace{\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}}_{(A)} + \underbrace{\nabla p}_{(B)} - \mu \underbrace{\nabla^2 \mathbf{u}}_{(C)}] \cdot \mathbf{W} \, d\Omega , \quad (3.10)$$

Do termo (A) tem-se

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \\ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}}_{(A^*)},$$

no termo (B)

$$\nabla p = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix}}_{(B)^*},$$

e do termo (C)

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \end{bmatrix}}_{(C)^*}.$$

Cada componente da função peso vetorial \mathbf{W} pode ser escrita como combinação linear de funções base escalar ϕ_i . Se cada componente W_1 e W_2 pertence a um espaço vetorial de dimensão n , a função peso vetorial \mathbf{W} pertence a um espaço de dimensão $2n$. Substituindo os termos (A*), (B*) e (C*) na equação (3.10) para cada componente da velocidade temos

$$\bullet R_{mx} = \int_{\Omega} \left[\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} - \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right] \cdot W_1 \, d\Omega, \quad (3.11)$$

$$\bullet R_{my} = \int_{\Omega} \left[\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} - \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \right] \cdot W_2 \, d\Omega. \quad (3.12)$$

Usando o Teorema da Divergência para cada componente do resíduo temos

$$\begin{aligned} \bullet R_{mx}^i &= \int_{\Omega} \rho \phi_i \left[u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{\partial p}{\partial x} \phi_i + \\ &+ \mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right] d\Omega - \int_{\Gamma} \phi_i f_x d\Gamma ; \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \bullet R_{my}^i &= \int_{\Omega} \rho \phi_i \left[u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right] + \frac{\partial p}{\partial y} \phi_i + \\ &+ \mu \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right] d\Omega - \int_{\Gamma} \phi_i f_y d\Gamma ; \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Resíduo Ponderado da Equação de Conservação de Massa

O resíduo ponderado da equação de conservação de massa (3.9) não apresenta nenhum termo com segunda derivadas dos campos de velocidade e pressão. Desta forma, não é necessária nenhuma manipulação para remover estes termos.

$$R_c = \int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{u}] w d\Omega = 0 ,$$

onde w é uma função escalar que pertence ao espaço de funções gerado pelas seguintes funções peso: $\{\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_m\}$. As m equações algébricas associadas à equação da continuidade são escritas como:

$$R_c^i = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \chi_i d\Omega ; \quad i = 1, \dots, m . \quad (3.15)$$

3.1.5 Expansão dos Campos

A discretização das equações (3.7) é feita utilizando o método de Galerkin / elementos finitos com o objetivo de determinar os campos de velocidade e pressão que devem ser escritos como uma expansão linear das funções base dos espaços de cada

um dos campos, ϕ_i e χ_i . Usando o método de Galerkin, as mesmas funções peso usadas nas equações da quantidade de movimento e continuidade vão ser usadas para expandir o campo de velocidade e pressão, respectivamente.

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n U_j \phi_j \\ \sum_{j=1}^n V_j \phi_j \end{bmatrix} \Rightarrow 2n \text{ incógnitas}, \quad (3.16)$$

$$p = \sum_{j=1}^m P_j \chi_j \Rightarrow m \text{ incógnitas}. \quad (3.17)$$

As incógnitas do problema discretizado são os coeficientes destas expansões lineares, U_j e V_j ($j = 1, \dots, N$) e P_i ($j = 1, \dots, m$). O número de incógnitas ($2n + m$) é igual ao número de equações algébricas.

3.1.6 Elementos Biquadrático e Linear Descontínuo

A escolha das possíveis combinações de funções base ϕ_i e χ_i não são feitas de maneira arbitrária, já que uma escolha errada de funções base pode levar a formulações instáveis.

Existe uma condição chamada de Babuska-Brezzi que determina se uma certa combinação de espaços de funções para a velocidade e pressão é válida. Esta condição verifica a consistência das aproximações das derivadas. A tabela (3.1) mostra algumas das diferentes combinações de funções base ϕ_i e χ_i usadas para elementos quadrangulares.

A verificação e prova das combinações de funções que satisfazem a condição de Babuska-Brezzi está fora do escopo deste trabalho.

Elementos Quadrangulares	
ϕ_i	χ_i
bilinear ($n = 4$)	constante ($m = 1$)
biquadrático ($n = 9$)	bilinear ($m = 4$)
biquadrático ($n = 9$)	linear descontínuo ($m = 3$)
bicúbico ($n = 16$)	biquadrático ($m = 9$)

Tabela 3.1: Relação entre as funções base para elementos quadrangulares, onde n e m são os graus de liberdade por elemento.

Será utilizado o elemento biquadrático para a velocidade e o elemento linear descontínuo para pressão. Essa escolha faz com que, no elemento, cada componente da velocidade possua 9 graus de liberdade e o campo de pressão é representado por 3 graus de liberdade, onde o primeiro grau de liberdade é referente a pressão no centro do elemento e os outros dois apresentam as derivadas nas direções x e y , totalizando 21 graus de liberdade por elemento.

A figura (3.1) mostra uma representação esquemática do elemento escolhido com 9 nós e a numeração local dos nós adotada.

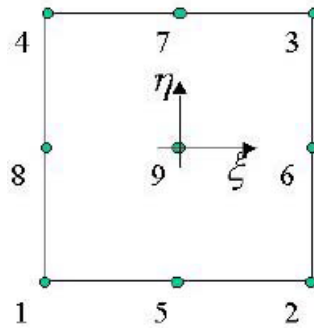


Figura 3.1: Elemento biquadrático de 9 nós.

As funções base elementares ϕ_i utilizadas para expandir o campo de velocidade são lagrangeanas, isto é: $\phi_i(X_j) = \delta_{ij}$, cada função base é igual a 1 no nó associado à função e nula nos demais. Cada coeficiente U_j e V_j representa o valor da velocidade u e v , respectivamente, no nó j . Em termos das coordenadas locais, as funções base

para a velocidade são:

$$\phi_1(\xi, \eta) = \frac{\xi(\xi - 1)\eta(\eta - 1)}{4}$$

$$\phi_2(\xi, \eta) = \frac{\xi(\xi + 1)\eta(\eta - 1)}{4}$$

$$\phi_3(\xi, \eta) = \frac{\xi(\xi + 1)\eta(\eta + 1)}{4}$$

$$\phi_4(\xi, \eta) = \frac{\xi(\xi - 1)\eta(\eta + 1)}{4}$$

$$\phi_5(\xi, \eta) = \frac{(1 - \xi^2)\eta(\eta - 1)}{2}$$

$$\phi_6(\xi, \eta) = \frac{\xi(\xi + 1)(1 - \eta^2)}{2}$$

$$\phi_7(\xi, \eta) = \frac{(1 - \xi^2)\eta(\eta + 1)}{2}$$

$$\phi_8(\xi, \eta) = \frac{\xi(\xi - 1)(1 - \eta^2)}{2}$$

$$\phi_9(\xi, \eta) = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2).$$

A figura (3.2) ilustra algumas destas funções.

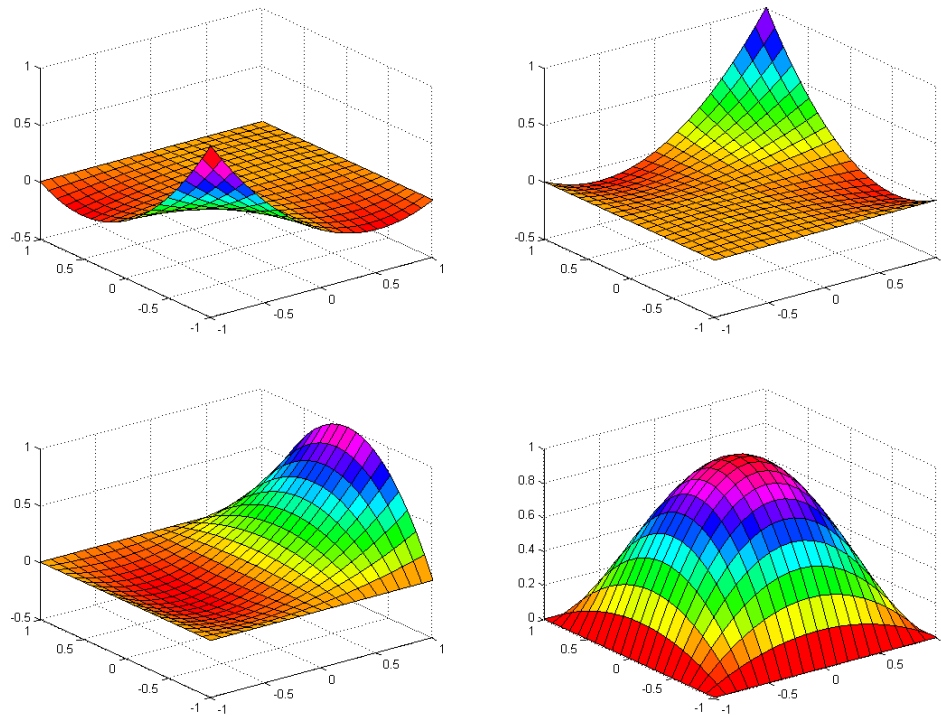


Figura 3.2: Funções base biquadráticas: ϕ_1 , ϕ_3 , ϕ_6 e ϕ_9 .

As funções base utilizadas para expandir o campo de pressão não são lagrangeanas. Para este elemento, elas são escolhidas de forma que o primeiro grau de liberdade de pressão P_1 represente o valor da pressão no centro do elemento; o segundo grau de liberdade P_2 , a derivada da pressão na direção η ; e o terceiro grau de liberdade P_3 , a derivada da pressão na direção ξ . Para isto, a variação da pressão em cada elemento deve ser escrita como: $p = P_1 + P_2 \eta + P_3 \xi$, conseqüentemente, as funções base χ_i são:

$$\chi_1(\xi, \eta) = 1 \quad \chi_2(\xi, \eta) = \eta \quad \chi_3(\xi, \eta) = \xi$$

onde

$$p(\xi = 0, \eta = 0) = P_1, \quad \frac{dp}{d\eta} = P_2 \quad \text{e} \quad \frac{dp}{d\xi} = P_3.$$

O elemento que estamos utilizando possui 9 nós e 21 graus de liberdade. São eles: $U_1, \dots, U_9; V_1, \dots, V_9; P_1, P_2, P_3$. A numeração dos graus de liberdade elementar é totalmente arbitrária. A numeração local adotada é mostrada na tabela (3.2).

A figura (3.3) mostra a numeração local dos graus de liberdade em um elemento.

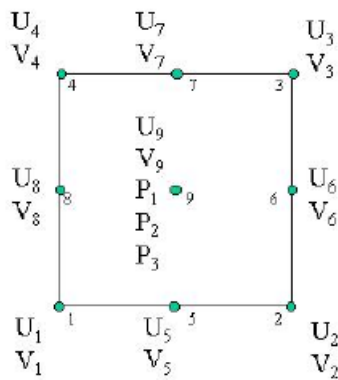


Figura 3.3: Numeração local dos graus de liberdade.

# grau de liberdade local	grau de liberdade
1	U_1
2	U_2
3	U_3
4	U_4
5	U_5
6	U_6
7	U_7
8	U_8
9	U_9
10	V_1
11	V_2
12	V_3
13	V_4
14	V_5
15	V_6
16	V_7
17	V_8
18	V_9
19	P_1
20	P_2
21	P_3

Tabela 3.2: Número do grau de liberdade local \times grau de liberdade.

3.1.7 Solução via Método de Newton

Substituindo as expansões para o campo de velocidade e pressão nas equações dos resíduos ponderados, obtém-se um sistema de equações algébricas não lineares. A não linearidade deve-se ao termo convectivo da equação de Navier-Stokes. Para resolver o sistema não-linear utiliza-se o método de Newton. Este método foi escolhido por se tratar de um método de convergência quadrática, que depende muito da estimativa inicial (ou chute inicial). Para que isso aconteça o chute inicial (vetor velocidade) deve estar "suficientemente próximo" da raiz da função, tornando a convergência do nosso problema rápida.

Esse sistema de equações pode ser representado como:

$$\mathbf{R}(\mathbf{c}) = 0,$$

onde $\mathbf{c} = [U_1, \dots, U_n; V_1, \dots, V_n; P_1, \dots, P_m]^T$ é o vetor de incógnitas do problema e \mathbf{R} é o vetor contendo os resíduos ponderados. Aplicando-se o método de Newton, a solução é obtida pelo processo iterativo a seguir:

Algorithm *Newton*

1. $\mathbf{c} = \mathbf{c}_0$
2. **while** $\|\mathbf{R}(\mathbf{c})\| > \epsilon$
3. **solve** $\mathbf{J}\Delta\mathbf{c} = -\mathbf{R}$
4. $\mathbf{c} = \mathbf{c} + \Delta\mathbf{c}$
5. **end while**
6. **return** \mathbf{c}

Para isto, deve-se calcular a matriz Jacobiana, que representa a sensibilidade do resíduo de cada equação em relação a cada incógnita, dada por $J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial c_j}$.

3.2 Método dos Elementos Discretos

O Método dos Elementos Discretos (MED) é um método utilizado para simular o movimento de partículas de materiais granulares e rochosos, e como o próprio nome sugere em um meio discretizado. Nos últimos anos este método também tem se tornado bastante popular para representar materiais sólidos e para o estudo de problemas de fluxo (meio contínuo) pois segundo POSHEL; SCHWAGER (2004) conduz a uma menor adoção de parâmetros de análise do que os métodos em que o meio é considerado como contínuo.

A partir do entendimento das propriedades mecânicas microscópicas das partículas e o comportamento da interação entre elas, o MED permite avaliar de maneira

macroscópica o comportamento físico e mecânico do modelo estudado.

O diferencial do método está em considerar o meio analisado como um conjunto de partículas com propriedades mecânicas particulares e geometrias definidas (meio discretizado). O mais usual é trabalhar com um conjunto de discos ou esferas, mas pela simplicidade do método também tem sido aplicado para partículas com outras geometrias.

Na formulação clássica do MED, cada elemento é considerado como rígido e permite-se que haja uma sobreposição entre as partículas, desde que sua ordem de magnitude seja pequena em relação ao tamanho das mesmas.

O algoritmo de solução deve apresentar uma rotina de processos, dentre os quais a detecção de colisão entre os elementos, o cálculo das forças resultantes dessas colisões e o cálculo posterior da velocidade resultante. Depois de estabelecidas essas etapas e as condições iniciais, podem ser simulados o movimento dos elementos. A figura (3.4) ilustra o algoritmo.

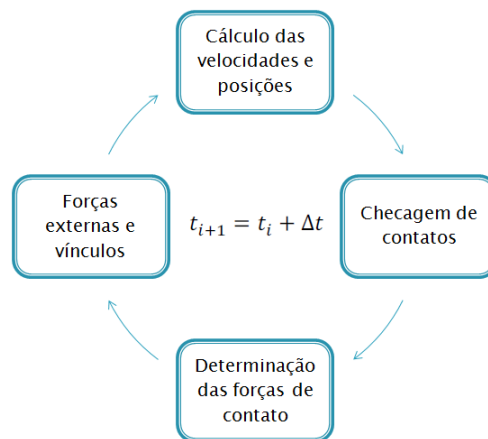


Figura 3.4: Algoritmo Elementos Discretos.

3.2.1 O Movimento das Partículas

O movimento de cada partícula individual é regida pelas leis da conservação do momento linear - a segunda lei de movimento de Newton - expressa, para a partícula i , por

$$m_i \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = \mathbf{F}_{B,i} + \sum_j^{N_i} \mathbf{F}_{P,ij} + \mathbf{F}_{W,i} + \mathbf{F}_{F,i} ,$$

onde, m_i e \mathbf{v}_i são a massa e a velocidade, respectivamente, da partícula i e t é o tempo. $\mathbf{F}_{B,i}$ é a força total de corpo agindo sobre a partícula i ; $\mathbf{F}_{P,ij}$ é a força que age sobre a partícula i por sua interação com as partículas vizinhas j , onde N_i é o número total de partículas vizinhas; $\mathbf{F}_{W,i}$ é a força agindo na partícula i por sua interação com os limites (paredes) do domínio do fluxo e, finalmente, $\mathbf{F}_{F,i}$ é a força agindo sobre a partícula i devido à interação com o fluido.

3.2.2 Forças de Corpo

A força de corpo pode ser descrita como a força que atua em um corpo até que o mesmo entre em movimento provocando uma aceleração. Essa força não é desse corpo, ela apenas atua no corpo fazendo com que ele se movimente.

As forças de corpo tomadas em consideração no nosso modelo são a gravitacional e de flutuabilidade. O resultado final destas duas sobre a partícula i é

$$\mathbf{F}_{B,i} = \bar{V}_i (\rho_p - \rho) \mathbf{g} ,$$

onde \bar{V}_i é o volume da partícula, ρ_p e ρ são as densidades da partícula e do fluido, respectivamente, e \mathbf{g} é a aceleração da gravidade. Para uma partícula esférica de raio R_i , a expressão acima se reduz a

$$\mathbf{F}_{B,i} = \frac{4}{3} \pi R_i^3 (\rho_p - \rho) \mathbf{g} . \quad (3.18)$$

3.2.3 Interação Partícula-Partícula

Cada partícula interage com outras partículas através do contato mecânico, chamado de forças de colisão, através das forças hidrodinâmicas e por meio de forças coloidais.

O modelo mais simples para uma partícula granular é uma esfera. Para alguns casos de simulações em duas dimensões, esferas são reduzidas em discos circulares. As simulações com partículas esféricas são numericamente muito eficientes, demandando um baixo custo computacional, ao contrário de partículas com outras geometrias. Neste caso as colisões de partículas podem ser identificados de uma forma muito simples: duas partículas estão em contato mecânico se (POSHEL; SCHWAGER, 2004),

$$\xi_{ij} \equiv R_i + R_j - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > 0 ,$$

ou seja, se a soma de seus raios exceder a distância de seus centros. Chamamos a quantidade ξ_{ij} de compressão (ou deformação) mútua das partículas i e j , R_i e R_j os raios das partículas i e j , respectivamente e $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ a distância entre os centros das partículas. A determinação do contato entre duas partículas não esféricas não faz parte do escopo desse trabalho, seus detalhes podem ser encontrados em PONCE ATENCIO (2011).

A força de contato entre as partículas é descrita por

$$\mathbf{F}_{c,ij} = \begin{cases} \mathbf{F}_{c,n,ij} + \mathbf{F}_{c,t,ij} , & \text{se } \xi_{ij} > 0 ; \\ 0 , & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Para sistemas bidimensionais, os componentes normal e tangencial podem ser escritos na forma

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{c,n,ij} = F_{ij}^n \vec{e}_{ij}^n , \\ \mathbf{F}_{c,t,ij} = F_{ij}^t \vec{e}_{ij}^t , \end{cases}$$

com os vetores

$$\vec{e}_{ij}^n = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} ,$$

e

$$\vec{e}_{ij}^t = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \vec{e}_{ij}^n.$$

A força normal F_{ij}^n provoca alterações do movimento de translação das partículas e a força tangencial F_{ij}^t provoca alterações do movimento de rotação. As componentes da força são funções da posição relativa das partículas $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ e da velocidade relativa $\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$.

A seguir serão descritas algumas abordagens para a modelagem das forças normal e tangencial da colisão entre esferas.

Forças Normais

Segundo POSHEL; SCHWAGER (2004) a força normal F_{ij}^n consiste em duas partes, uma dissipativa e outra conservadora, sendo calculada da seguinte forma:

$$F_{ij}^n = Y\xi_{ij} + \gamma^n \frac{d\xi_{ij}}{dt}, \quad (3.19)$$

onde Y e γ^n são as constantes elástica (módulo de Young) e dissipativa (amortecimento normal), respectivamente. Para colisões aos pares, a força representada pela equação (3.19) provoca uma diminuição da velocidade relativa normal das partículas por um fator e , chamado de coeficiente de restituição. Este coeficiente é definido por $e = V'_{rn}/V_{rn}$, onde V_{rn} é a velocidade relativa normal absoluta antes da colisão e V'_{rn} é o valor correspondente pós-colisão. A força linear da equação (3.19) corresponde ao coeficiente de restituição

$$e = \exp \left(-\frac{\pi\gamma^n}{2m^{ef}} / \sqrt{\frac{Y}{m^{ef}} - \left(\frac{\gamma^n}{2m^{ef}} \right)^2} \right),$$

onde $m^{ef} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ é a massa efetiva das partículas em colisão. O valor do coeficiente de restituição depende das propriedades do material, do tamanho das partículas, da velocidade de contato entre as partículas, dentre outros. Na seção (3.2.5) discute-se detalhadamente diferentes maneiras de se calcular o coeficiente de restituição.

A força normal entre esferas elásticas foi obtido por HERTZ (1882) como uma função da deformação ξ_{ij} entre as partículas e dos parâmetros Y (módulo de Young) e ν (coeficiente de Poisson) do material

$$F_{\text{el},ij}^{\text{n}} = \frac{2Y\sqrt{R^{\text{ef}}}}{3(1-\nu^2)} \xi_{ij}^{3/2}, \quad (3.20)$$

para partículas feitas do mesmo material ($\nu = \nu_i = \nu_j$ e $Y = Y_i = Y_j$), sendo o raio efetivo R^{ef} das esferas em colisão, dado por

$$\frac{1}{R^{\text{ef}}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}.$$

Posteriormente este resultado foi generalizado para o contato de partículas viscoelásticas (amortecida), também feitas do mesmo material ($A = A_i = A_j$) (BRILLIANTOV et al., 1996):

$$F_{ij}^{\text{n}} = \frac{2Y\sqrt{R^{\text{ef}}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi_{ij}^{3/2} + A\sqrt{\xi_{ij}} \frac{d\xi_{ij}}{dt} \right), \quad (3.21)$$

com a constante de dissipação A sendo uma função da viscosidade do material. O termo dissipativo em (3.21) segue a partir da solução das equações viscoelásticas para esferas deformadas. A forma funcional do termo dissipativo, $\sqrt{\xi_{ij}} \frac{d\xi_{ij}}{dt}$, também tem sido calculada de outras maneiras como em KUWABARA; KONO (1987) e MORGADO; OPPENHEIM (1997) que, entretanto, não são capazes de especificar A como uma função de parâmetros básicos do material.

As equações (3.20) e (3.21) aplicam-se apenas se ambas as esferas são feitas do mesmo material. No caso de diferentes propriedades dos materiais, o cálculo é mais complexo. A parte elástica fica

$$F_{\text{el},ij}^{\text{n}} = \frac{4\sqrt{R^{\text{ef}}}}{3} \left(\frac{1-\nu_i^2}{Y_i} + \frac{1-\nu_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \xi_{ij}^{3/2},$$

ou seja, a combinação $(1-\nu^2)/Y$ é adicionada em ambas as partículas para se obter o respectivo pré fator para a lei da força elástica. Para $\nu_i = \nu_j$ e $Y_i = Y_j$, a

equação (3.20) é recuperada. Em geral não há nenhuma maneira fácil de adicionar combinações das propriedades dissipativas para obter o parâmetro de amortecimento A na lei da força, como se faz para a lei elástica. Uma idéia seria tratar a combinação $YA/(1 - \nu^2)$ como o análogo da dissipação $Y/(1 - \nu^2)$ e realizar o mesmo acréscimo dos recíprocos. No entanto, mesmo que apenas uma das partículas se deforme conservadoramente ($A = 0$) a colisão também é conservadora, ou seja, não há perda de energia devido à deformações dissipativas de colisões vizinhas de outras partículas. Para evitar esse problema, utiliza-se a média aritmética de A como a constante de amortecimento, resultando

$$F_{ij}^n = \frac{4\sqrt{R_{ij}^{\text{ef}}}}{3} \left(\frac{1 - \nu_i^2}{Y_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \left(\xi_{ij}^{3/2} + \frac{A_i + A_j}{2} \sqrt{\xi_{ij}} \frac{d\xi_{ij}}{dt} \right). \quad (3.22)$$

Novamente para as partículas de mesmo material onde $\nu_i = \nu_j$, $Y_i = Y_j$ e $A_i = A_j$, a equação (3.22) reduz-se a equação (3.21).

Para a componente normal da força de colisão entre esferas elásticas WALTON; BRAUN (1986) propõem um modelo bem diferente dos anteriores. Este novo modelo utiliza dois coeficientes de rigidez diferentes. O coeficiente de rigidez normal $K_{n,1}$ é utilizado quando as partículas estão se aproximando e o coeficiente $K_{n,2}$ quando as partículas estão se afastando. A força normal entre duas partículas i e j é dada por

$$\mathbf{F}_{c,n,ij} = \begin{cases} -K_{n,1} |\boldsymbol{\delta}_{n,ij}| \mathbf{n}_{ij} , & \text{se } \frac{\partial |\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|}{\partial t} \geq 0 ; \\ -K_{n,2} |\boldsymbol{\delta}_{n,ij}| \mathbf{n}_{ij} , & \text{se } \frac{\partial |\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|}{\partial t} < 0 ; \end{cases} \quad (3.23)$$

onde \mathbf{n}_{ij} é o vetor unitário que une os centros das partículas com direção de i para j e $\boldsymbol{\delta}_{n,ij}$ é a sobreposição entre as duas partículas na direção de \mathbf{n}_{ij} . Neste modelo, a energia de dissipação durante a colisão está relacionada com a relação entre a rigidez

dos coeficientes. Na seção (3.2.5) discute-se detalhadamente diferentes maneiras de se calcular o coeficiente de rigidez e a relação que existe entre os coeficientes de rigidez e os coeficientes de restituição.

ROJEK; ONATE (2004) propõem um modelo de amortecimento linear que estabelece que a intensidade da força normal é função dos coeficientes de rigidez normal K_n e de amortecimento global γ , além do valor da deformação ξ_{ij} e da velocidade relativa normal $\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, sendo dada por

$$\mathbf{F}_{c,n,ij} = K_n \xi_{ij} + \gamma (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j).$$

A constante de amortecimento γ , dependente da massa de cada partícula é dada por

$$\gamma = 2\sqrt{m^{\text{ef}} K_n},$$

experimentalmente desenvolvida com o objetivo de minimizar a vibração dos elementos.

Forças Tangenciais

Partículas granulares nunca são esferas perfeitas, mas revelam uma textura de superfície bem complexa. Portanto, em colisões oblíquas, além de forças normais há também forças tangenciais F_{ij}^t (também chamada de força de cisalhamento). Esta força é determinada principalmente pelas propriedades da superfície das partículas granulares e é de essencial importância para a simulação realista de um sistema granular.

Forças tangenciais são modeladas de forma intuitiva e obviamente a velocidade relevante para a força tangencial é a velocidade relativa tangencial V_{rel}^t entre as superfícies das partículas no ponto de contato. O ponto de contato é uma aproximação uma vez que para a descrição das forças normais, assume-se uma certa compressão

ξ das esferas em contato, o que implica uma superfície de contato ou uma linha de contato em duas dimensões. Para parâmetros materiais realistas a área de contato é sempre muito menor do que os raios das partículas em colisão. Portanto, em uma colisão de duas esferas i e j , o ponto de contato para i (ou j) é definida como a interseção da superfície (não deformada) da esfera i (ou j) com o vetor $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ que liga os centros das esferas. Para o caso de esferas rígidas esta definição descreve o ponto de contato com exatidão; para o caso de esferas deformáveis, é uma aproximação.

Segundo POSHEL; SCHWAGER (2004) a velocidade relativa das esferas no ponto de contato resulta, a partir da velocidade relativa dos centros das esferas e da sua rotação, em

$$V_{\text{rel}}^t = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \vec{e}_{ij}^t + R_i\omega_i + R_j\omega_j ,$$

onde $\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ é a velocidade relativa entre as partículas e ω_i e ω_j são as velocidades de rotação das partículas i e j , respectivamente.

Para o modelo de HAFF; WERNER (1986) a lei da força tangencial é dada por

$$F_{ij}^t = -\text{sign}(V_{\text{rel}}^t) \cdot \min(\gamma^t |V_{\text{rel}}^t|, \bar{\mu} |F_{ij}^n|) , \quad (3.24)$$

tendo sido usada com sucesso em muitas simulações. Para velocidade relativa V_{rel}^t pequena ou força normal F_{ij}^n grande, a força tangencial de acordo com a equação (3.24) é um amortecimento linear de cisalhamento que cresce linearmente com a velocidade relativa. A força de cisalhamento é limitada pela lei de atrito de Coulomb:

$$|F_{ij}^t| \leq \bar{\mu} |F_{ij}^n| ,$$

com coeficiente de atrito $\bar{\mu}$ e a constante de amortecimento tangencial γ^t . Para a velocidade relativa grande ou força normal pequena, quando $\gamma^t |V_{\text{rel}}^t|$ excede $\bar{\mu} |F_{ij}^n|$, a força tangencial $|F_{ij}^t| = \bar{\mu} |F_{ij}^n|$ é selecionada em (3.24).

A lei de força (3.24) gera resultados confiáveis em simulações de Dinâmica Molecular, em particular em sistemas onde as partículas colidem principalmente com

velocidades baixas, mas não descansam estaticamente umas sobre as outras, como para o caso de um monte de areia, já que o modelo (3.24) não incorpora o atrito estático. Portanto, este modelo não é adequado para a simulação de sistemas estáticos granulares.

Um outro problema, que diz respeito à constante de amortecimento γ^t , é que a força tangencial é determinada principalmente pelas propriedades de superfície, ou seja, por asperezas muito pequenas na superfície das partículas. Portanto, não há material experimentalmente mensurável constante a partir do qual γ^t poderiam ser derivados. Com isso este coeficiente só pode ser determinado após a comparação dos resultados da simulação com os experimentos.

Já no modelo proposto por CUNDALL; STRACK (1979) o atrito estático é descrito por uma mola atuando em uma direção tangente ao plano de contato. Esta mola é inicializada no tempo t_k de primeiro contato das partículas e ela existe até que as superfícies das partículas sejam separadas umas das outras. O seu alongamento,

$$\sigma(t) = \int_{t_k}^t V_{\text{rel}}^t(t') dt',$$

determina a força de restauração tangencial, mais uma vez limitado pela lei de atrito de Coulomb:

$$F_{ij}^t = -\text{sign}(V_{\text{rel}}^t) \cdot \min(|\kappa^t \sigma|, \bar{\mu} |F_{ij}^n|).$$

A constante κ^t tem de ser determinada a partir da comparação das simulações com resultados experimentais.

Para a componente tangencial da força de colisão, WALTON; BRAUN (1986) propõem um modelo "incremental de escorregamento" que é baseado nos trabalhos de MINDLIN (1949) e MINDLIN; DERESIEWICZ (1953). Nesse modelo, a força tangencial em cada passo de tempo l é incrementada e calculada a partir da força no último passo de tempo $l - 1$ com base no movimento relativo tangencial $\delta_{t,ij}$ das

duas partículas

$$\mathbf{F}_{c,t,ij}^l = \mathbf{F}_{c,t,ij}^{l-1} - K_t \boldsymbol{\delta}_{t,ij} . \quad (3.25)$$

Onde K_t é o coeficiente de rigidez tangente, dada por

$$K_t = \begin{cases} K_{t,0} \left(1 - \frac{|\mathbf{F}_{c,t,ij}| - F_{c,t,ij}^*}{\mu_C |\mathbf{F}_{c,n,ij}| - F_{c,t,ij}^*} \right)^\beta, & \text{para o } \textit{deslizamento} \text{ entre partículas} \\ & \text{com mesma direção e sentido;} \\ K_{t,0} \left(1 - \frac{F_{c,t,ij}^* - |\mathbf{F}_{c,t,ij}|}{\mu_C |\mathbf{F}_{c,n,ij}| + F_{c,t,ij}^*} \right)^\beta, & \text{para o } \textit{deslizamento} \text{ entre partículas} \\ & \text{com mesma direção e sentidos opostos.} \end{cases} \quad (3.26)$$

Aqui, o deslizamento se refere ao movimento tangencial relativo de duas partículas colidindo. Na equação (3.26), $K_{t,0}$ é a rigidez tangencial inicial, β é um parâmetro constante geralmente definido como 1/3 (MINDLIN, 1949), e $F_{c,t,ij}^*$ é inicialmente zero e é posteriormente definida a magnitude da força tangencial total, sempre que a direção do deslizamento entre as partículas muda durante o contato. Se a magnitude da força de colisão normal $|\mathbf{F}_{c,n,ij}|$ muda durante o contato, a força $F_{c,t,ij}^*$ é dimensionada em função da mudança na posição de força normal.

Calculada, a partir das equações (3.25) e (3.26), a força tangencial está sujeita à lei de atrito de Coulomb:

$$|\mathbf{F}_{c,t,ij}| = \bar{\mu}_c |\mathbf{F}_{c,n,ij}| ,$$

onde $\bar{\mu}_c$ é o coeficiente de atrito de Coulomb.

Força Coloidal

As forças coloidais entre as partículas incluem interação de London-Van der Waals de curto alcance e interação eletrostática de longo alcance. A expressão para a força

coloidal entre duas partículas esféricas i e j é (SUZUKI; HO; HIGUCHI, 1969)

$$\mathbf{F}_{\text{vdW},ij} = \frac{\Lambda_{ij} R^{\text{ef}}}{6|\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|^2} \left(\frac{\lambda(\lambda + 22.232|\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|)}{\lambda + 11.116|\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|} \right) \mathbf{n}_{ij}, \quad (3.27)$$

onde λ é o comprimento de onda de atraso (retardo) de London (fixado em 100 nm), e Λ_{ij} é a constante de Hamaker entre as partículas i e j dentro do sistema, que depende das constantes de Hamaker das partículas Λ_p e do fluido Λ_f (ISRAELACHVILI, 1991)

$$\Lambda_{ij} = \left(\sqrt{\Lambda_p} - \sqrt{\Lambda_f} \right)^2.$$

No instante em que as partículas entram em contato, $|\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|$ se reduz a zero e a expressão (3.27) faz com que o valor da força coloidal seja infinita. Para evitar que valores irrealis sejam assumidos, uma distância de corte é implementada nos cálculos: quando as partículas estão mais próximas do que este limiar, a força de Van der Waals é reduzida ao seu valor máximo, calculado com base na distância de corte.

Força Hidrodinâmica

Quando duas partículas se movem em relação umas as outras com apenas uma fina película de líquido de separação entre elas, forças hidrodinâmicas, muitas vezes referidas como força de lubrificação, surgem devido ao movimento do líquido intersticial. No caso mais simples, quando as partículas estão se afastando uma das outras, o líquido tende a fluir para o canal entre as partículas; analogamente, quando as partículas estão se movendo em direção uma a outra, o líquido tende a fluir para fora do canal. O movimento do líquido gera gradientes de pressão e tensões viscosas que são expressas por uma força hidrodinâmica sobre as partículas, tendo um componente normal (na direção que liga os centros das partículas) e um componente tangencial resultante de torque nas partículas. Apenas a componente normal é considerada neste trabalho, pois é dominante (KIM; KARRILA, 1991) e também por não considerarmos que as partículas possam girar em torno do próprio eixo. No

trabalho de KIM; KARRILA (1991) demonstra-se que quando as partículas estão em proximidade a expressão para a força de lubrificação é

$$\mathbf{F}_{\text{HD},ij} = 6\pi\mu [\mathbf{n}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)] (R^{\text{ef}})^2 \frac{1}{|\boldsymbol{\delta}_{n,ij}|} \mathbf{n}_{ij}, \quad (3.28)$$

onde μ é a viscosidade do meio e $\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ é a velocidade relativa entre as partículas. Esta força se opõe a qualquer tentativa de separação ou aproximação entre duas partículas: uma força de repulsão entre as partículas quando estão se movendo uma em direção a outra e uma força de atração quando elas estão se afastando umas das outras. Quando as partículas estão em contato, a força de lubrificação, agindo por si só, impediria o contato de duas partículas. No entanto, forças adicionais agem sobre as partículas se aproximando e as partículas são ásperas para que elas entrem em contato antes que a força de lubrificação atinja valores extremos teoricamente previstos. Para simular o efeito de aspereza, uma distância de corte é usada para impedir que a força de lubrificação alcance valores extremamente grandes.

3.2.4 Interação Partícula-Parede

A interação entre as partículas sólidas e os limites (paredes) do domínio de fluxo é quase similar à interação entre duas partículas. A única diferença significativa é que não há nenhuma força eletrostática entre as partículas e os limites do fluxo. Uma complicação é que a avaliação da distância entre uma partícula e a parede não é simples, pois depende muito da geometria da fronteira. Para uma partícula esférica, a distância do seu centro (um ponto geométrico) à entidade geométrica que representa a parede é informação suficiente. Na tarefa de avaliar essa distância, o livro SCHNEIDER; EBERLY (2003) sobre computação gráfica oferece uma ampla seleção de orientações computacionais e algoritmos. Na discussão que se segue, d_{iw} é a distância entre o centro da partícula i e a parede, $\delta_{iw} = R_i - d_{iw}$ é a sobreposição da partícula com a parede (uma quantidade que é positiva quando há sobreposição entre as duas) e \mathbf{n}_w é o vetor normal à parede, que aponta para o fluido. Uma partícula

colide com a parede quando d_{iw} é menor que o raio da partícula, ou quando δ_{iw} é zero ou positivo.

Força Normal

O modelo de WALTON; BRAUN (1986) para o componente normal da força de colisão semelhante a equação (3.23), é dado por

$$\mathbf{F}_{c,n,iw} = \begin{cases} K_{n,w1} \delta_{iw} \mathbf{n}_w, & \text{se } \frac{\partial \delta_{iw}}{\partial t} \geq 0; \\ K_{n,w2} \delta_{iw} \mathbf{n}_w, & \text{se } \frac{\partial \delta_{iw}}{\partial t} < 0; \end{cases} \quad (3.29)$$

onde $K_{n,w1}$ e $K_{n,w2}$ são, respectivamente, os coeficientes de rigidez normal de aproximação e afastamento entre a partícula e a parede, escolhidos com base no coeficiente de restituição e na penetração máxima permitida entre as partículas e a parede. Uma discussão detalhada para o cálculo do coeficiente de rigidez pode ser encontrada na seção (3.2.5).

Força Tangencial

Para a componente tangencial da força de colisão um dos modelos mais simples foi proposto por DI RENZO; DI MAIO (2005) que consideram colisões entre partículas esféricas e superfícies planas e comparam os resultados experimentais com os resultados teóricos previstos, obtidos pelo trabalho original de MINDLIN (1949) e do modelo de incremento de MINDLIN; DERESIEWICZ (1953). Com base na sua comparação, eles propõem uma ligeira alteração ao modelo de MINDLIN (1949)

$$\mathbf{F}_{c,t,iw} = -\frac{2}{3} \left(8 \frac{G_i G_w}{(2 - \nu_i) G_w + (2 - \nu_w) G_i} \sqrt{R_i} \sqrt{\delta_{iw}} \right) \boldsymbol{\delta}_{t,ij},$$

onde G_i e G_w são os módulos de cisalhamento da partícula e da parede, respectivamente e ν_i e ν_w são, respectivamente, os coeficientes de Poisson da partícula e

da parede. O deslocamento tangencial $\delta_{t,ij}$ é medido do ponto de primeiro contato, cuja direção é tangente à parede da superfície.

Força Coloidal

A força coloidal entre uma partícula e a parede é limitada pela interação de Van der Waals. A expressão de ISRAELACHVILI (1991) utilizada é dada por

$$\mathbf{F}_{\text{vdW},iw} = -\frac{\Lambda_{iw}}{6|\delta_{iw}|} \left[\frac{R_i}{|\delta_{iw}|} + \frac{R_i}{|\delta_{iw}| + 2R_i} + \ln \left(\frac{|\delta_{iw}|}{|\delta_{iw}| + 2R_i} \right) \right] \mathbf{n}_w . \quad (3.30)$$

Aqui, Λ_{iw} é a constante de Hamaker entre a partícula i e a parede dentro do sistema, e dependem das constantes de Hamaker da parede Λ_w , das partículas Λ_p e do fluido Λ_f

$$\Lambda_{iw} = \left(\sqrt{\Lambda_p} - \sqrt{\Lambda_f} \right) \left(\sqrt{\Lambda_w} - \sqrt{\Lambda_f} \right) .$$

No momento em que a partícula entra em contato com a parede δ_{iw} se reduz a zero fazendo com que a força de Van der Waals seja infinita. De forma semelhante à equação (3.27) uma distância de corte é implementada para evitar o aumento exacerbado da magnitude da força.

Força Hidrodinâmica

A força de lubrificação hidrodinâmica está presente quando as partículas se movem a uma curta distância da parede. Apenas o componente normal da força é considerado, porque é dominante (APOSTOLOU; HRYMAK, 2008). A expressão utilizada é a equação (3.28) que para uma superfície plana, com raio de curvatura infinito, reduz-se a

$$\mathbf{F}_{\text{HD},iw} = 6\pi\mu (\mathbf{n}_w \cdot \mathbf{v}_i) \frac{R_i^2}{|\delta_{iw}|} \mathbf{n}_w . \quad (3.31)$$

Uma distância de corte é usada assim como na equação (3.28) para prevenir que a força de lubrificação alcance sua singularidade em zero na separação partícula-parede ($\delta_{iw} = 0$).

3.2.5 Relação entre Coeficientes de Restituição e Coeficientes de Rigidez

Vamos pensar no seguinte exemplo: imagine o choque entre bolas de bilhar, é fácil ver que o movimento das bolas se altera após a colisão, elas mudam a direção, o sentido e a intensidade de suas velocidades. Podemos então definir colisão como sendo a interação entre dois ou mais corpos, com mútua troca de quantidade de movimento e energia. Note que na definição de colisão usa-se a palavra *interação* ao invés de *contato* pois também existem colisões que ocorrem sem que haja contato mecânico (material), como é o caso de um meteorito que desvia sua órbita ao passar pelas proximidades de um planeta.

Quando dois ou mais corpos colidem, estes sofrem deformações, de modo que a área de contato entre os corpos aumenta até atingir um valor máximo dependendo das propriedades dos corpos e, a partir desse momento, estes tendem a voltar a sua forma original, fazendo com que os corpos comecem a se afastar uns dos outros.

Pode-se pensar então em um caso bem simples em que a rapidez de afastamento seja igual a rapidez de aproximação, isto é, onde não haja perda de energia mecânica entre os corpos em contato, o que não acontece na realidade, pois no mundo macroscópico sempre há perda de energia mecânica.

Para estudar as colisões entre dois ou mais corpos existe uma grandeza física chamada de coeficiente de restituição que é definida como o quociente entre os módulos da impulsão de restauração e de deformação. Cabe ressaltar que o coeficiente de restituição não deve depender apenas das propriedades dos corpos que colidem, mas também, segundo POSHEL; SCHWAGER (2004), da velocidade de impacto entre os corpos.

Em física procura-se saber qual o comportamento dos corpos após uma colisão. Para isto são usadas as leis de conservação de energia cinética e momento linear, conforme o tipo de colisão. Antes de falar sobre os tipos de colisões veremos a seguir as diferentes maneiras de se calcular o coeficiente de restituição encontrados na literatura.

De acordo com a definição anterior o coeficiente de restituição é definido como o quociente entre os módulos da impulsão de restauração I_r e de deformação I_d , sendo a impulsão I definida como

$$I = m \cdot (v_f - v_i),$$

onde m é a massa da partícula, v_i é a velocidade da partícula no instante inicial t_i e v_f é a velocidade da partícula no instante final t_f . Definindo v_m como a velocidade no instante de deformação máxima podemos escrever o coeficiente de restituição para as duas partículas como sendo

$$e_1 = \frac{m_1 \cdot (v_{i1} - v_m)}{m_1 \cdot (v_m - v_{f1})} = \frac{(v_{i1} - v_m)}{(v_m - v_{f1})},$$

e

$$e_2 = \frac{m_2 \cdot (v_m - v_{i2})}{m_2 \cdot (v_{f2} - v_m)} = \frac{(v_m - v_{i2})}{(v_{f2} - v_m)}.$$

No momento em que o processo de deformação termina e o processo de restituição se inicia, as duas partículas possuem a mesma velocidade, v_m . Com isso podemos obter uma nova equação a partir das equações anteriores, dada por

$$e = \frac{v_{f1} - v_{f2}}{v_{i2} - v_{i1}}.$$

O coeficiente de restituição entre uma partícula e um corpo fixo, como por exemplo uma esfera em queda livre que colide com uma superfície horizontal, pode ser calculado desprezando a variação da velocidade da superfície, escolhendo de maneira conveniente um referencial de modo que a velocidade dessa superfície seja nula. E a partir da equação anterior obtém-se

$$e = \frac{v_{i1}}{v_{f1}}.$$

Com esse modelo podemos calcular o coeficiente de restituição de uma esfera colidindo com uma superfície horizontal de duas maneiras. A primeira maneira consiste na comparação dos tempos entre três contatos consecutivos e o segundo modo por meio da comparação entre duas alturas máximas consecutivas atingidas pela esfera após contatos com a superfície horizontal.

No modelo de WALTON; BRAUN (1986) o coeficiente de restituição é empregado em dois modos: o coeficiente de restituição constante e o coeficiente de restituição variável.

Existe uma relação entre a força aplicada a um determinado corpo e o seu respectivo deslocamento. Na figura (3.5) temos um diagrama esquemático da força normal. A carga inicial está ao longo da linha do ponto a ao ponto b com coeficiente angular $K_{n,1}$ (coeficiente de rigidez normal de aproximação). Se a descarga é iniciada depois de atingir o ponto b , esta segue o caminho ao longo da linha de b para c . Recarregando novamente, mas a partir do ponto c , segue-se o caminho c, b, d e qualquer descarregamento subsequente ao ponto d segue o caminho d, f, c, a . Dessa forma o modelo de força normal exhibe a posição de dependência da histerese (fenômeno apresentado por alguns sistemas ou materiais que conservam as suas propriedades mesmo na ausência do estímulo que as gerou) que resulta em um coeficiente de restituição menor do que a unidade.

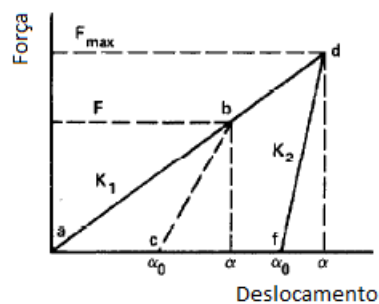


Figura 3.5: Esquema Deslocamento X Força

No primeiro modelo, coeficiente de restituição constante, todas as linhas de descarregamento (por exemplo, \overline{bc} e \overline{df}) têm a mesma inclinação $K_{n,2}$ (coeficiente de rigidez normal de afastamento), e o coeficiente de restituição resultante e é dado por

$$e = \sqrt{\frac{K_{n,1}}{K_{n,2}}} , \quad (3.32)$$

onde e é a relação entre as velocidades relativa final e inicial na direção da normal. Já no modelo de coeficiente de restituição variável, a inclinação da linha de descarregamento $K_{n,2}$ é uma função linear da força máxima F_{\max} atingida antes do descarregamento

$$K_{n,2} = K_{n,1} + SF_{\max} .$$

Para esse modelo, o coeficiente de restituição depende da velocidade relativa de aproximação V_{ap} dada por

$$e = \sqrt{\frac{\omega_0}{SV_{\text{ap}} + \omega_0}} ,$$

com $\omega_0 = \sqrt{\frac{2K_{n,1}}{m}}$.

No trabalho de MISHRA; MURTY (2001) calcula-se o valor do coeficiente de rigidez normal de aproximação $K_{n,1}$ entre duas partículas pela equação

$$K_{n,1} = \frac{4\pi|\mathbf{v}_{\max-i}|^2\rho_p R_{\max}}{3f^2} , \quad (3.33)$$

onde $\mathbf{v}_{\max-i}$ é a velocidade máxima de impacto entre duas partículas, ρ_p é a densidade da partícula, R_{\max} é o raio máximo das partículas e f é a penetração máxima entre as partículas em colisão expressa por uma fração do raio. O parâmetro de rigidez de afastamento $K_{n,2}$ é calculado pela relação (3.32).

DOBRY; NG (1989) limitam atecipadamente a penetração máxima f esperada entre as partículas a uma pequena fração do diâmetro d , a fim de determinar o coeficiente de rigidez K_n , para um modelo amortecido, como sendo

$$K_n = \frac{f^2 m \mathbf{v}_{\max-p}^2}{d^2} ,$$

onde $\mathbf{v}_{\max-p}$ é a velocidade máxima prevista de qualquer partícula dentro do sistema.

Já TSUJI; KAWAGUCHI; TANAKA (1993) determinam o coeficiente de rigidez K_n pela teoria de contato. No caso de duas esferas de mesmo material e tamanho, K_n é escrito como

$$K_n = \frac{Y\sqrt{2R'}}{3(1-\nu^2)},$$

onde Y é o módulo de Young, ν é o coeficiente de Poisson, e R' é o raio da área de contato.

Frequentemente assume-se que o coeficiente de restituição e é uma constante do material. Experiências mostram que esse coeficiente também varia de acordo com a velocidade de impacto. No livro POSHEL; SCHWAGER (2004), o coeficiente de restituição normal é dado por

$$e = \frac{\dot{\xi}(t_c)}{\dot{\xi}(0)},$$

onde $\dot{\xi}_{ij} = \frac{d\xi}{dt}$ é a taxa de deformação e t_c é a duração da colisão. Sabe-se que a medição do coeficiente de restituição é um problema experimentalmente complicado, principalmente tratando-se de velocidades de impacto pequenas. Como vimos anteriormente nesse modelo também existe uma relação entre o coeficiente de restituição e o coeficiente de rigidez. Tem sido demonstrado que a deformação do material devido a uma colisão de esferas está intimamente relacionado com a deformação devido ao movimento de laminagem de uma esfera sobre um plano. O coeficiente de restituição que descreve a perda de energia durante a colisão está diretamente relacionado com o coeficiente de atrito de laminagem, $\bar{\mu}_{lam}$, de uma esfera num plano rígido. Este coeficiente caracteriza o torque que age contrário ao movimento de laminagem devido ao atrito de rolamento, $M = \bar{\mu}_{lam}F^n$, onde F^n é a força normal exercida pelo plano sobre a esfera causada pelo próprio peso m da esfera. Essa relação é dada por

$$K_n = \frac{1-e}{(\rho/m)^{2/5}(\dot{\xi}(0))^{1/5}} = \frac{\bar{\mu}_{lam}}{V_{lam}},$$

onde V_{lam} é a velocidade linear da esfera na direção da laminagem.

As colisões podem ser classificadas em três tipos: a colisão elástica, a colisão parcialmente elástica e a colisão inelástica. A seguir veremos um pouco sobre cada uma delas e a relação que existe entre cada tipo de colisão e o respectivo valor do coeficiente de resituição.

Colisão Elástica ou Perfeitamente Elástica

A colisão elástica é aquela em que o coeficiente de restituição, e , vale 1 e por isso as velocidades relativas de afastamento, V_{af} , e aproximação, V_{ap} , são iguais. Também é a única colisão em que a energia mecânica se conserva, ou seja, a energia cinética antes da colisão, E_{ci} , é igual à energia cinética após, E_{cf} . Note que esse tipo de colisão é difícil de ser encontrado em casos reais. Numa colisão elástica temos

$$\text{Colisão Elástica} \iff \begin{cases} e = 1 \\ V_{af} = V_{ap} \\ E_{ci} = E_{cf} \end{cases}$$

Colisão Inelástica ou Plástica

A colisão inelástica é aquela em que o coeficiente de restituição vale zero e para isso, a velocidade de afastamento deve valer zero. Com a velocidade de afastamento valendo zero, fica fácil concluir que após a colisão os corpos ficam juntos. Essa colisão também é caracterizada como sendo aquela com a maior dissipação de energia mecânica. Com isso temos que

$$\text{Colisão Inelástica} \iff \begin{cases} e = 0 \\ V_{af} = 0 \\ E_{ci} > E_{cf} \end{cases}$$

Colisão Parcialmente Elástica

Existe um outro tipo de colisão onde não ocorre conservação de toda a energia cinética do sistema, mas somente parte dela. É o que chamamos de colisão parcialmente elástica, que tem como característica um coeficiente de restituição com valor entre zero e um. Na natureza é difícil de se encontrar colisões perfeitamente elásticas, encontramos normalmente as parcialmente elásticas. Isto é devido à existência de forças dissipativas durante o processo de colisão, como o atrito ou a deformação dos corpos, que sempre consomem uma parte da energia cinética original, de modo que a energia cinética inicial é maior que a energia cinética final. Nesse caso a velocidade de afastamento é menor que a de aproximação. Ou seja

$$\text{Colisão Parcialmente Elástica} \iff \begin{cases} 0 < e < 1 \\ V_{af} < V_{ap} \\ E_{ci} > E_{cf} \end{cases}$$

3.3 Interação Fluido-Partícula

Neste trabalho simula-se a interação fluido-partícula por meio da resolução do sistema formado pelas equações de Navier-Stokes e continuidade pelo método dos elementos finitos e o deslocamento das partículas pelo método dos elementos discretos, como descrito anteriormente. Para isso são considerados um número relativamente pequeno de partículas dispersas e de raio muito menor que a dimensão do domínio

do fluido, de modo que possa ser desconsiderada a influência das partículas sobre o escoamento.

O acoplamento entre o escoamento e as partículas é realizado da seguinte maneira: primeiro determina-se o campo de velocidade e pressão do fluido. Como resultado é gerado um vetor solução que contém a velocidade do fluido nas direções x e y nos nós de cada elemento finito. Na segunda parte da simulação esse vetor é usado como um arquivo de entrada para o programa que simula o movimento das partículas. Com as coordenadas das partículas identifica-se em qual elemento finito a partícula se encontra e com isso calcula-se a velocidade da partícula de acordo com a velocidade nos nós do elemento finito a que ela pertence. O cálculo dessas velocidades é realizado utilizando as mesmas funções peso usadas para expandir o campo de velocidade e pressão. Com isso determina-se o deslocamento das partículas considerando, além das forças de corpo, as forças de colisão partícula-partícula e partícula-parede, as forças hidrodinâmicas partícula-partícula e partícula-parede e a força coloidal devido a aproximação entre as partículas imersas no fluido com outras partículas e também com a parede. Esta interação é feita desconsiderando qualquer tipo de influência da partícula no escoamento, uma vez que o fluido encontra-se em estado permanente, não sendo necessário calcular a velocidade do fluido em cada passo de tempo.

Dessa forma, o algoritmo implementado é dado a seguir:

– *Determina o campo de velocidades do fluido;*

Para cada passo de tempo:

– *Determina as forças sobre as partículas:*

– *Força de contatos partícula-partícula e partícula-parede;*

– *Força hidrodinâmica em cada partícula;*

– Força coloidal em partículas suficientemente próximas;

– Calcula campo de velocidades das partículas considerando a velocidade do fluido e efetua deslocamento.

A figura (3.6) esquematiza o algoritmo implementado.

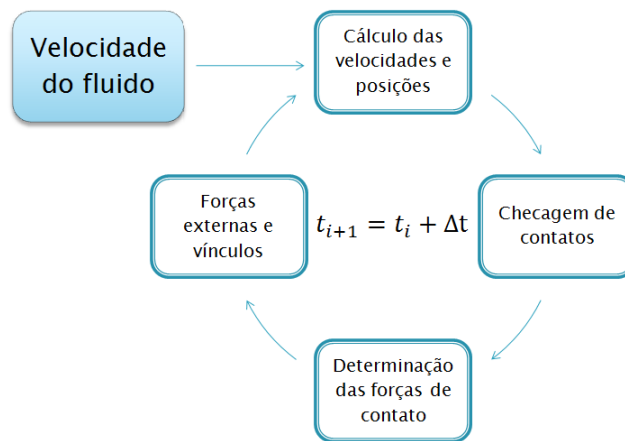


Figura 3.6: Algoritmo de Interação Fluido-Partícula.

4 VALIDAÇÃO E EXEMPLOS DA SIMULAÇÃO

A seguir serão apresentados os testes que validam os programas que realizam as simulações. Toda a implementação do trabalho é dividida basicamente em dois grandes blocos, o primeiro que simula o movimento de um fluido newtoniano incompressível e um segundo que simula o movimento das partículas. Primeiro será validado o programa que simula o escoamento de um fluido (MEF) e a seguir serão realizados alguns testes em relação ao movimento das partículas (MED) e simulações para a colisão entre partículas e partícula-parede.

4.1 Validação do MEF

Inicialmente considera-se um problema de escoamento permanente, para um fluido newtoniano incompressível em uma cavidade bidimensional com tampa móvel como ilustra a figura (4.1).

Os valores dos parâmetros utilizados no problema são: número de Reynolds (Re) que é um número adimensional cujo significado físico é um quociente de forças: forças de inércia entre forças viscosas, sendo dado por $Re = 1000$, o comprimento da cavidade

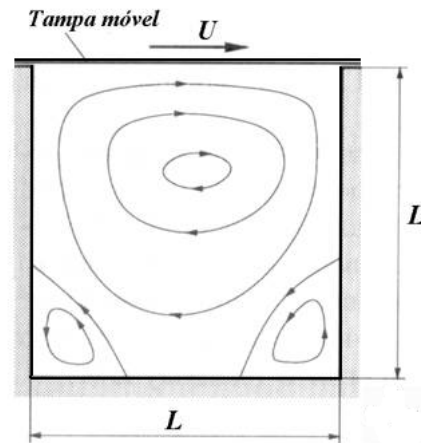


Figura 4.1: Cavidade tampa móvel.

quadrada de lado $L = 1$ m e a velocidade da tampa móvel $U = 1$ m/s. Considera-se o elemento finito retangular biquadrático (9 nós), uma malha de 44×44 elementos, totalizando 7921 nós e 21650 graus de liberdade.

Para a validação foi tomado como referência ERTURK; CORKE; GOKCOL (2005) que simula um fluido incompressível em regime permanente numa cavidade bidimensional de tampa móvel para elevados valores de Reynolds.

Na tabela (4.1) apresenta-se a velocidade u do presente trabalho e a velocidade u^* do trabalho ERTURK; CORKE; GOKCOL (2005) ao longo de uma linha vertical que passa pelo centro geométrico da cavidade.

Nota-se que o maior erro apresentado na malha escolhida é da ordem de 10^{-2} , porém os valores analisados na tabela são de locais do escoamento onde ocorrem o maior gradiente de velocidade, ou seja, o pior caso do escoamento analisado.

y	Vel u^*	Vel u	Erro Abs	Erro Rel
1.000	1.000	1.0000	0.0000	0.0000
0.980	0.7065	0.7136	0.0071	0.0100
0.960	0.5102	0.5187	0.0085	0.0166
0.940	0.4276	0.4354	0.0078	0.0182
0.920	0.3993	0.3995	0.0002	0.0005
0.900	0.3838	0.3826	0.0012	0.0031
0.500	-0.0620	-0.0577	0.0043	0.0693
0.200	-0.3756	-0.3798	0.0042	0.0111
0.180	-0.3869	-0.3972	0.0103	0.0266
0.160	-0.3854	-0.3926	0.0072	0.0186
0.140	-0.3690	-0.3828	0.0138	0.0373
0.120	-0.3381	-0.3523	0.0142	0.0420
0.100	-0.2960	-0.3093	0.0133	0.0450
0.080	-0.2472	-0.2587	0.0115	0.0465
0.060	-0.1951	-0.2045	0.0094	0.0481
0.040	-0.1392	-0.1462	0.0070	0.0502
0.020	-0.0757	-0.0796	0.0039	0.0515
0.000	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela 4.1: Velocidade u do presente trabalho e u^* (ERTURK; CORKE; GOKCOL, 2005) ao longo de uma linha vertical que passa pelo centro geométrico da cavidade quadrada de tamanho 1, para $Re = 1000$.

4.2 Testes e simulações do MED

Para o programa que simula o movimento das partículas serão feitos alguns testes e cálculos, exemplificando o movimento das partículas, será determinado o passo de tempo necessário para a realização da simulação e o cálculo do deslocamento máximo permitido para a partícula.

4.2.1 Queda livre

O primeiro teste realizado basea-se na equação da queda livre no espaço. Essa equação é dada por:

$$H = \frac{-gt^2}{2}, \quad (4.1)$$

onde g é a aceleração da gravidade, t é o tempo de queda e H é a altura.

A tabela (4.2) compara o deslocamento real da partícula H^* calculado pela equação (4.1) e o deslocamento H encontrado pela simulação.

Tempo	H^*	H	Erro Abs	Erro Rel
0.1	0.04904	0.04949	0.00045	0.00917
0.2	0.19614	0.19698	0.00084	0.00428
0.3	0.44130	0.44247	0.00117	0.00265
0.4	0.78453	0.78596	0.00143	0.00182
0.6	1.76519	1.76694	0.00175	0.00099
0.8	3.13812	3.13992	0.00180	0.00057
1.0	4.90030	4.90490	0.00460	0.00093

Tabela 4.2: Relação: deslocamento real $H \times H^*$ deslocamento da simulação

A figura (4.2) ilustra o movimento de uma partícula em queda livre para os instantes de tempo $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$ segundos. A simulação é realizada em uma cavidade bidimensional com $R = 0.02$ m e $g = 9.8$ m/s².

4.2.2 Determinação do passo de tempo

O passo de tempo adequado para a simulação é calculado de acordo com MISHRA; MURTY (2001). Eles apresentam argumentos, baseados em oscilações lineares não amortecidas, para o cálculo de Δt dado por:

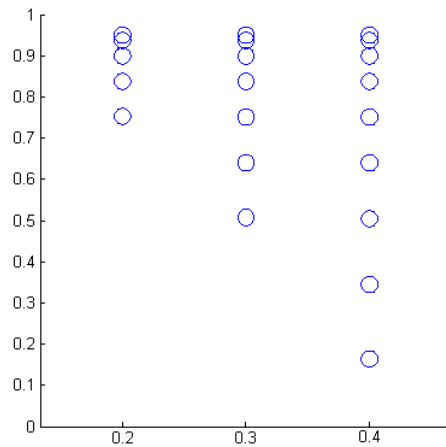


Figura 4.2: Partícula em queda livre nos instantes de tempo $t = 0.2$, $t = 0.3$ e $t = 0.4$ segundos.

$$\Delta t = 0.2 \frac{f R_{\min}}{|\mathbf{v}_{\max-i}|}$$

onde f é a penetração máxima entre as partículas durante a colisão expressa como uma fração do raio da partícula, $\mathbf{v}_{\max-i}$ é a velocidade máxima de impacto e R_{\min} é o raio mínimo das partículas.

Tomando $f = 10^{-4}$, $\mathbf{v}_{\max-i} = 0.14$ m/s e $R_{\min} = 3.0 \times 10^{-7}$ m (já que todas as partículas têm o mesmo tamanho) obtemos um passo de tempo aproximado da ordem de 10^{-10} s.

$$R = 3.0 \times 10^{-7}$$

4.2.3 Cálculo para o teste de parada

Uma das maiores dificuldades para a realização deste trabalho foi a obtenção dos valores dos parâmetros utilizados para a realização da simulação. Destes, podemos destacar o coeficiente de restituição. A primeira análise dos valores usados para o coeficiente de restituição foi feita de forma visual, ou seja, o coeficiente era calibrado seguindo uma determinada relação, como mencionado na seção (3.2.5) e depois disso era feita uma análise visual dos vídeos gerados. Pensando numa análise mais consistente acrescentamos um teste de parada no programa. Este teste mede o deslocamento máximo que a partícula pode realizar durante a simulação, parando o processo caso o deslocamento da partícula seja superior ao máximo permitido. Com este critério de parada é possível calibrar o coeficiente de restituição de forma que as partículas não ultrapassem essa distância limite, permitindo uma nova calibração para esse coeficiente.

Com o passo de tempo $\Delta t = 10^{-10}$ s calculado na seção (4.2.2), e a velocidade máxima da partícula $v = 0.07$ m/s dentro do escoamento, é possível calcular o deslocamento máximo da partícula em cada passo de tempo. O deslocamento máximo é dado por: $\Delta s = v \times \Delta t = 7 \times 10^{-12}$ m.

4.3 Exemplos e simulações

4.3.1 Partícula

A seguir serão apresentados alguns exemplos que simulam partículas em uma cavidade bidimensional. Nos exemplos a seguir considera-se apenas a força da gravidade e as forças de colisão partícula-partícula e partícula-parede.

Os exemplos que serão apresentados consideram partículas de raio $R = 0.01$ m e uma cavidade quadrada de lado $L = 1$ m. Os parâmetros materiais das partículas são mostrados na tabela (4.3) a seguir.

Densidade da partícula, ρ_p	1051 kg/m ³
Coefficiente de Poisson, ν	0.33
Coefficiente de restituição, e	0.8
Constante de Hamaker, Λ_{ij}	1.8×10^{-19} J
Comprimento de onda, λ	100 nm

Tabela 4.3: Características da partícula.

A figura (4.3) simula uma partícula com coordenadas $(x, y) = (0.1, 0.7)$ e velocidade inicial $(u, v) = (1.0, 0.0)$ colidindo inicialmente com a parede e posteriormente com a parede direita.

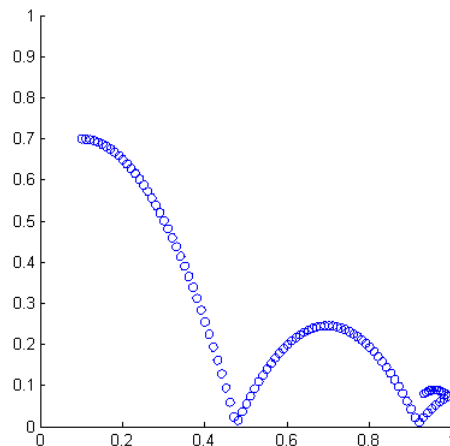


Figura 4.3: Partícula colidindo com as paredes inferior e lateral direita.

Na figura (4.4) exemplifica-se o movimento de duas partículas p_1 (em azul) e p_2 (em vermelho) cujas coordenadas e velocidades iniciais são $(x_1, y_1) = (0.1, 0.6)$, $(u_1, v_1) = (1.0, 0.0)$, $(x_2, y_2) = (0.9, 0.6)$ e $(u_2, v_2) = (-1.0, 0.0)$, respectivamente. As partículas colidem inicialmente com a parede inferior e logo após colidem entre si, percorrendo o mesmo trajeto durante a simulação. Isto deve-se ao fato de que as

partículas possuem a mesma altura, mesma distância das paredes esquerda e direita, e também velocidades absolutas iguais.

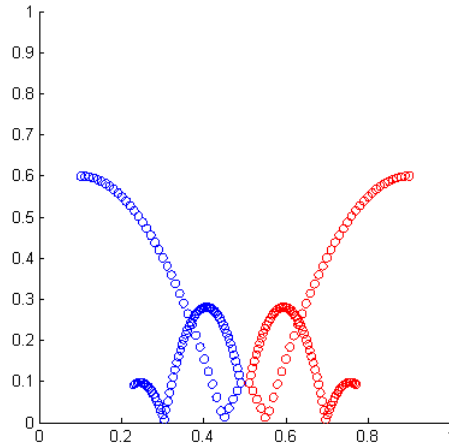


Figura 4.4: Partículas colidindo com a parede inferior e em seguida entre si.

O exemplo da figura (4.5) mostra o movimento de duas partículas: p_1 (em azul) com coordenada $(x_1, y_1) = (0.4, 0.3)$ e velocidade inicial $(u_1, v_1) = (0.8, 0.0)$, e p_2 (em vermelho) com coordenada $(x_2, y_2) = (0.6, 0.3)$ e $(u_2, v_2) = (-0.8, 0.0)$. Note que as partículas colidem entre si antes da queda e depois colidem com a parede inferior também de forma simétrica.

O último exemplo, ilustrado pela figura (4.6), mostra duas partículas colidindo inicialmente com as paredes esquerda e direita, em seguida com a parede inferior e por fim entre elas. As coordenadas e velocidades iniciais das partículas p_1 (em azul) e p_2 (em vermelho) são $(x_1, y_1) = (0.1, 0.4)$, $(u_1, v_1) = (-1.0, 0.0)$, $(x_2, y_2) = (0.9, 0.4)$ e $(u_2, v_2) = (1.0, 0.0)$, respectivamente.

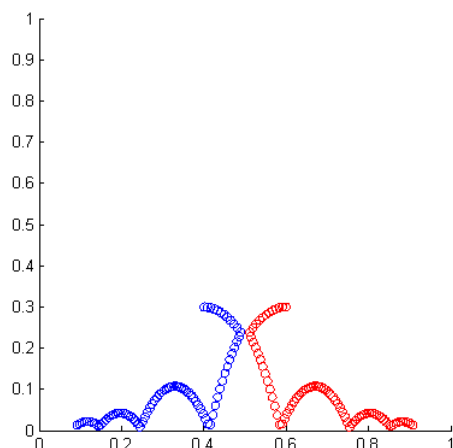


Figura 4.5: Partículas colidindo entre si e em seguida com a parede inferior.

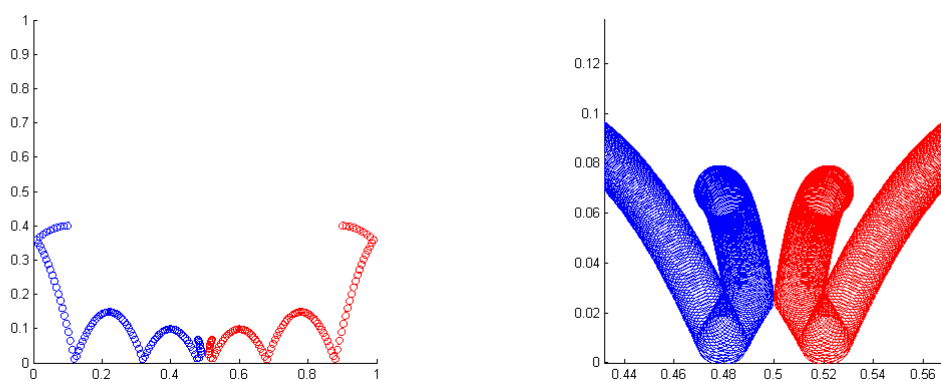


Figura 4.6: Partículas colidindo com as paredes da esquerda e direita, em seguida com a parede inferior e por último entre elas. Figura da direita: Zoom da colisão entre as partículas.

4.3.2 Interação fluido-partícula

Para as simulações da interação fluido-partícula as dimensões da geometria do fluido são de um aplicador usado na indústria de revestimento (APOSTOLOU; HRYMAK, 2008): $L_x = 2.4 \cdot 10^{-5}$ m de comprimento e $L_y = 6 \cdot 10^{-6}$ m de largura. Os valores dos parâmetros considerados são: densidade do fluido $\rho = 1000$ kg/m³, viscosidade

$\mu = 0.001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ e a velocidade de entrada e de saída do fluido $v = 0.07 \text{ m/s}$, no caso da cavidade com tampa móvel a velocidade da tampa é, também, $v = 0.07 \text{ m/s}$. Foi utilizada uma malha de 40×10 elementos, totalizando 1701 nós e 4602 graus de liberdade.

Em relação à partícula, os parâmetros são os mesmos utilizados na tabela (4.3) da seção (4.3.1).

As forças utilizadas para a realização dos testes serão mostradas a seguir.

- Força de Corpo

A força de corpo utilizada na simulação é a força (3.18).

- Interação Partícula-Partícula

Para a interação partícula-partícula são usados para o modelo de força normal a força (3.23), com a relação entre os coeficientes de rigidez dada pela equação (3.32), para a força coloidal o modelo dado pela equação (3.27) e a força hidrodinâmica por (3.28).

- Interação Partícula-Parede

O modelo de força normal utilizado para a interação partícula-parede é o da equação (3.29), com a mesma relação entre os coeficientes de rigidez da interação partícula-partícula, para a força coloidal o modelo é dado por (3.30) e a força hidrodinâmica por (3.31).

As figuras (4.7) e (4.8) ilustram o escoamento bidimensional de uma cavidade com

paredes superior e inferior fixas onde o fluido entra com uma velocidade constante ao longo do eixo y e apesar de em $x = L_x$ existir uma *parede* para a partícula ela é tal que o fluido sai, como uma *tela* que bloqueia as partículas sem bloquear o fluido.

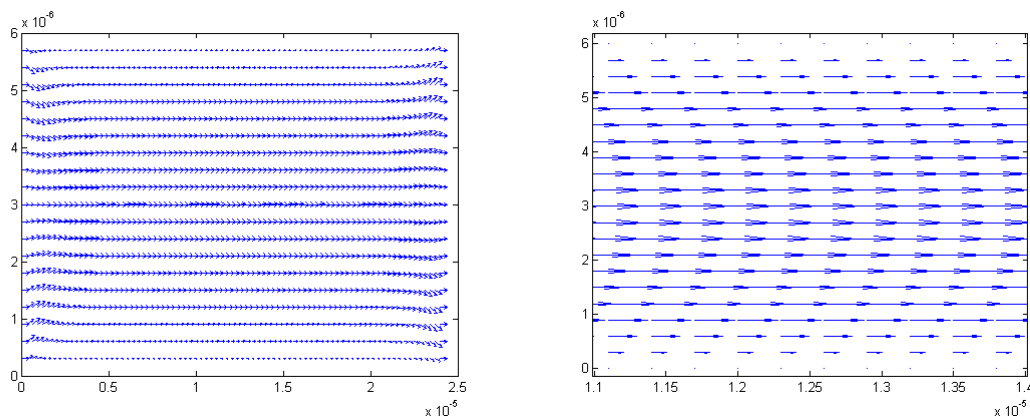


Figura 4.7: Campo de velocidades de um escoamento 2-D com parede fixa. Figura da direita: Zoom do escoamento.

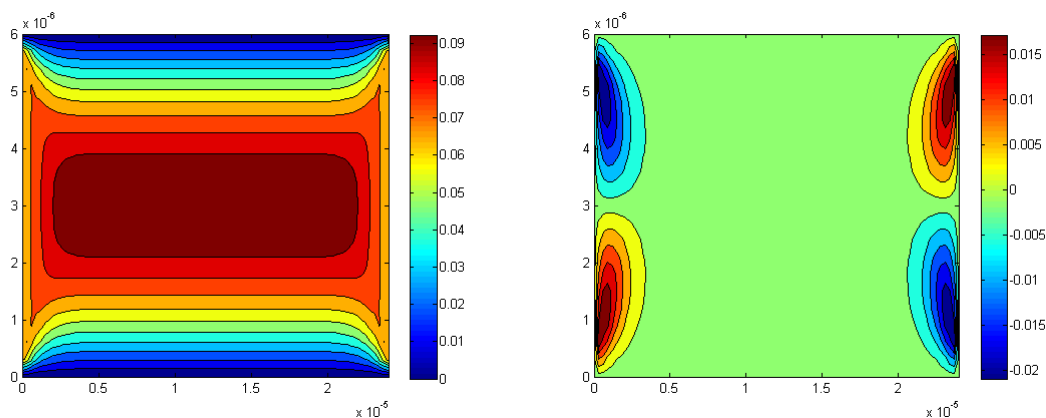


Figura 4.8: Intensidade da velocidade na direção x . Figura da direita: Intensidade da velocidade na direção y .

A colisão da partícula com a parede é ilustrada nas figuras (4.9) e (4.10). Considera-se que a partícula possui velocidade nula no instante em que é liberada no escoamento e em seguida, após interação com o fluido, esta ganha velocidade e se movimenta na direção do escoamento conforme descrito na seção (3.3), sob influência das forças descritas no algoritmo representado pelo esquema da figura (3.4). Na figura (4.9) a

partícula é liberada de uma altura igual a $3 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ e ao se chocar com a parede a partícula mantém sua direção porém em sentido contrário. A partícula da figura (4.10) é liberada em uma altura igual a $5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$.

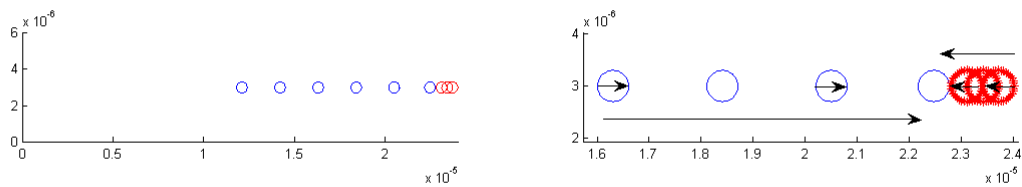


Figura 4.9: Partícula colidindo com o ponto médio da parede da direita no escoamento da figura (4.7). A cor azul (—) mostra a partícula se movimentando em direção a parede e a cor vermelha (— * —) indica que a partícula colidiu e mudou de sentido.

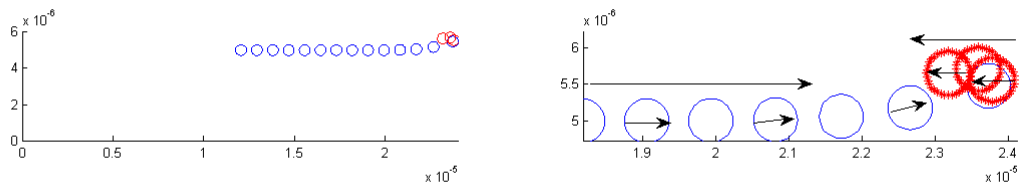


Figura 4.10: Partícula colidindo com a parede da direita no escoamento da figura (4.7). A cor azul (—) mostra a partícula se movimentando em direção a parede e a cor vermelha (— * —) indica que a partícula colidiu e mudou de sentido.

A figura (4.11) mostra exatamente a região do escoamento em que ocorre a colisão entre a partícula e a parede representado na figura (4.10).

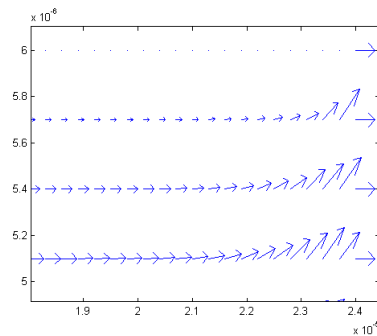


Figura 4.11: Região do escoamento onde ocorre a colisão partícula-parede representada pela figura (4.10).

Note que na figura (4.9) a partícula é liberada da altura média da cavidade, onde o campo de velocidade é praticamente horizontal, e portanto ela apenas muda o sentido após se chocar com a parede. O que não ocorre na figura (4.10) já que a partícula é liberada da parte superior da cavidade fazendo com que a partícula mude não só o sentido mas também a direção.

A colisão do tipo partícula-partícula pode ser vista nas figuras (4.12) e (4.13). Também considera-se que a partícula possui velocidade nula no instante em que é liberada no escoamento e em seguida, após interação com o fluido, esta ganha velocidade e se movimenta. Após as partículas se chocarem suas direções são alteradas, diferentemente do que ocorre quando a partícula é liberada do ponto médio do escoamento e não colide com nenhuma outra.

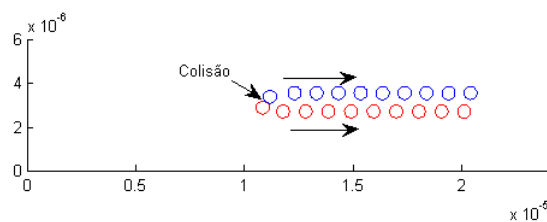


Figura 4.12: Duas partículas colidindo no escoamento 2D com parede fixa representada pela figura (4.7).

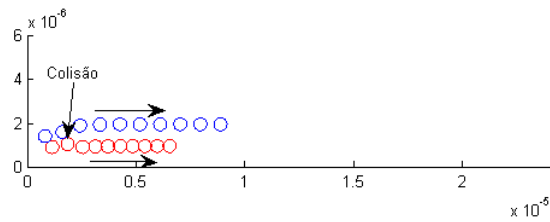


Figura 4.13: Duas partículas colidindo no escoamento 2D com parede fixa representada pela figura (4.7).

As figuras (4.14) e (4.15) ilustram o escoamento bidimensional com tampa móvel.

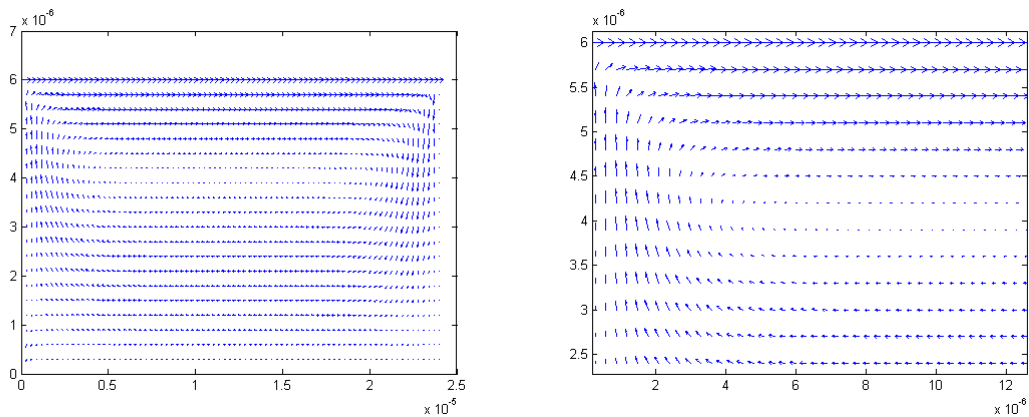


Figura 4.14: Campo de velocidades de um escoamento 2-D com tampa móvel. Figura da direita: Zoom da parte superior esquerda do escoamento.

Resolvido o escoamento bidimensional de tampa móvel, libera-se uma partícula e ela segue a direção do vetor velocidade do escoamento como pode ser visto na figura (4.16).

Com o objetivo de observar a colisão, duas partículas foram colocadas no escoamento da cavidade de tampa móvel, figura (4.17). Observe que novamente após a colisão as partículas mudam sua direção preferencial.

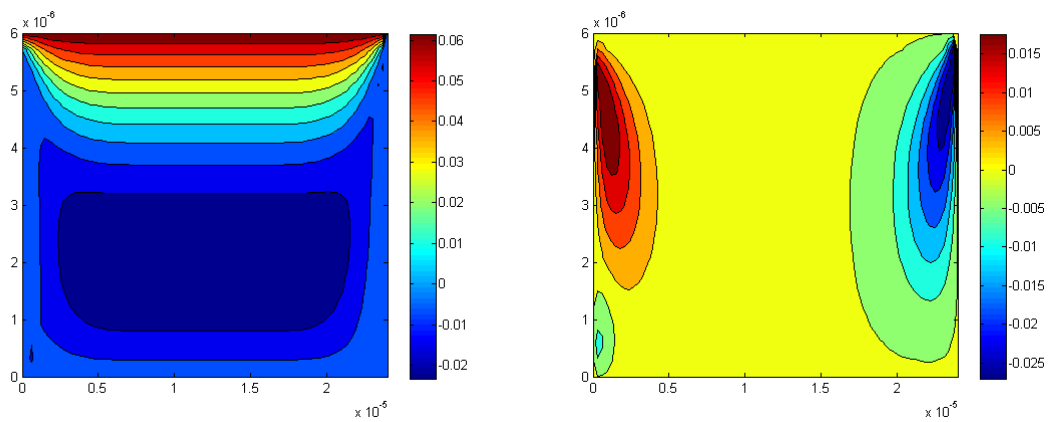


Figura 4.15: Intensidade da velocidade na direção x . Figura da direita: Intensidade da velocidade na direção y .

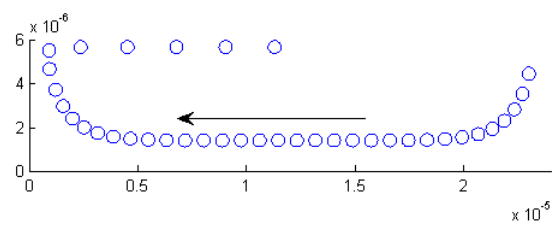


Figura 4.16: Partícula liberada na cavidade de tampa móvel da figura (4.14).

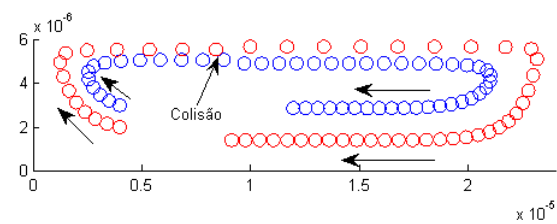


Figura 4.17: Colisão entre duas partículas no escoamento da figura (4.14).

5 DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE RESTITUIÇÃO

O principal objetivo deste trabalho é compreender e simular escoamentos com partículas em suspensão. É interessante observar que não só a partícula se movimenta devido ao escoamento, mas também, em muitos casos, a partícula muda o padrão do escoamento. Essa mudança ou não do padrão do escoamento depende da quantidade de partículas suspensas, do tamanho da partícula e da sua densidade. Com o objetivo de simplificar a modelagem da relação fluido-partícula, inicialmente foi realizada a modelagem de um problema onde o movimento das partículas não alterava o padrão do escoamento. A quantidade de partículas, suas dimensões e sua densidade são tais que o fluido afeta o movimento das partículas, porém as partículas não alteram o comportamento do fluido. Esses resultados podem ser vistos no Capítulo 4.

Como já citado na seção (3.2.5), os coeficientes de rigidez devem depender não apenas das propriedades do material das partículas, mas também de suas velocidades. Segundo MISHRA; MURTY (2001), e citado por APOSTOLOU; HRYMAK (2008), para o problema estudado neste trabalho o coeficiente de rigidez para o contato entre partículas deve ser determinado pela equação (3.33). Porém, ao utilizar esta

expressão nas simulações do deslocamento de partículas suspensas em uma cavidade de tampa móvel (exemplo (4.14) da seção (4.3.2)) o critério de consistência adotado neste trabalho não foi satisfeito. Nos exemplos apresentados, os coeficientes de rigidez foram determinados empiricamente.

Um outra dificuldade na definição dos valores dos coeficiente de rigidez reside no fato deles serem dependentes tanto do diâmetro das partículas quanto da própria geometria do problema. Dessa forma, os valores apresentados em APOSTOLOU; HRYMAK (2008) não foram satisfatórios para as simulações realizadas. Fez-se então necessário, determinar valores apropriados a este trabalho de maneira a tornar as simulações fisicamente consistentes.

Mantendo-se fixo as características do escoamento do fluido (geometria, velocidade da tampa móvel, propriedades físicas etc), realizou-se um estudo da relação entre coeficientes de rigidez e raio das partículas, mantendo-se o coeficiente de restituição $e = \sqrt{\frac{K_{n,1}}{K_{n,2}}} = \sqrt{\frac{K_{n,w1}}{K_{n,w2}}} = 0.8$ (APOSTOLOU; HRYMAK, 2008) e o critério de consistência física da simulação. Assim, neste estudo foi obtido um conjunto de valores para os coeficientes de rigidez e do raio das partículas, obtendo-se uma região de consistência.

Esta região de consistência foi obtida da seguinte forma: mantendo-se fixo os valores dos coeficientes de aproximação $K_{n,1}$ e de afastamento $K_{n,2}$ entre as partículas e também os coeficientes de aproximação e de afastamento $K_{n,w1}$ e $K_{n,w2}$ entre as partículas e a parede, variou-se o valor do raio das partículas, com uma precisão de $10^{-4} \mu m$, com o objetivo de determinar um intervalo de valores consistentes para o raio das partículas; em seguida, variou-se os valores dos coeficientes de rigidez em 10%, mantendo o valor $e = 0.8$ e repetiu-se o processo para determinação do intervalo de consistência para o raio das partículas.

A figura (5.1) a seguir apresenta a região de consistência obtida para o caso da simulação de partículas suspensas em uma cavidade de tampa móvel, como definida no exemplo (4.14) da seção (4.3.2). Ao eixo x estão associados os conjuntos de valores dos coeficientes de rigidez, como pode ser visto na tabela (5.1). Ao eixo y está associado o valor do raio das partículas ($\times 10^{-7}$).

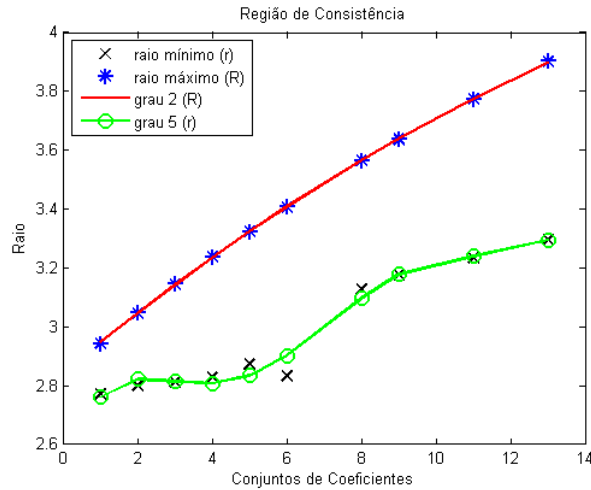


Figura 5.1: Região de consistência.

Conjuntos de coeficientes	Ceficientes de rigidez				Intervalos dos raios ($\times 10^{-7}$)	
	$K_{n,1}$	$K_{n,2}$	$K_{n,w1}$	$K_{n,w2}$	R_{\min}	R_{\max}
1	0.00576	0.009	288	450	2.770	2.942
2	0.00640	0.010	320	500	2.801	3.047
3	0.00704	0.011	352	550	2.814	3.145
4	0.00768	0.012	384	600	2.827	3.237
5	0.00832	0.013	416	650	2.872	3.324
6	0.00896	0.014	448	700	2.833	3.407
8	0.01024	0.016	512	800	3.127	3.564
9	0.01088	0.017	544	850	3.177	3.637
11	0.01216	0.019	608	950	3.233	3.774
13	0.01344	0.021	672	1050	3.297	3.902

Tabela 5.1: Conjuntos de coeficientes \times Intervalos dos raios.

As linhas contínuas na figura (5.1) foram obtidas por ajuste de curva de grau 2 para o limite superior e de grau 5 para o limite inferior, dadas por

$$y = -0.0018x^2 + 0.1048x + 2.8437 ,$$

e

$$y = 0.0001x^5 - 0.0026x^4 + 0.0326x^3 - 0.1720x^2 + 0.3848x + 2.5186 .$$

A importância do resultado apresentado na figura (5.1) reside no fato de facilitar a escolha desses parâmetros de forma a manter a consistência da simulação. Para um dado conjunto de valores de coeficientes de rigidez, obtém-se de forma direta os valores viáveis para o raio das partículas. Por outro lado, dados dois valores de raio de partículas, o conjunto de valores dos coeficientes de rigidez a ser adotado deve ser escolhido entre aqueles que são viáveis para os dois valores do raio, conforme pode ser visto na figura (5.2). Em alguns casos, não é possível determinar coeficientes que satisfaçam aos valores de raio dados, figura (5.3).

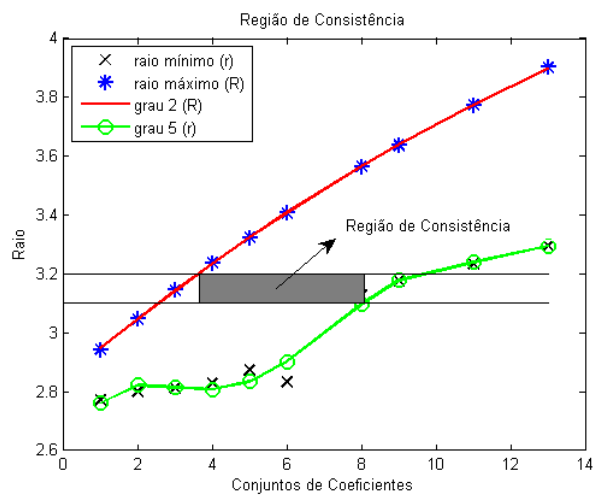


Figura 5.2: Região de consistência para duas partículas com raios $R_1 = 3.1 \times 10^{-7}$ e $R_2 = 3.2 \times 10^{-7}$.

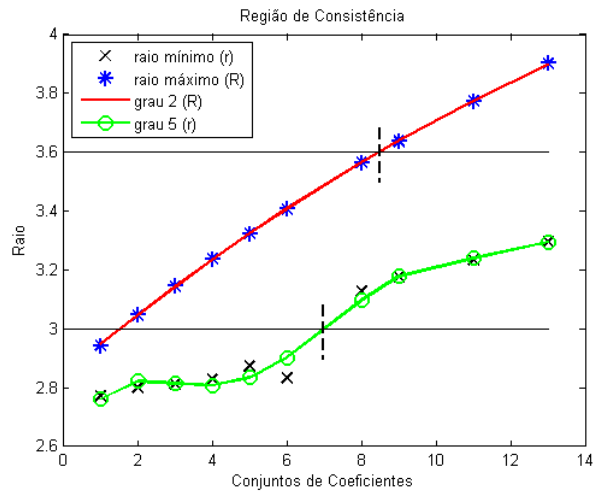


Figura 5.3: Ausência da região de consistência para duas partículas com raios $R_1 = 3.0 \times 10^{-7}$ e $R_2 = 3.6 \times 10^{-7}$.

Vale dizer que um conjunto de valores não deve, necessariamente, pertencer a região de consistência para que a simulação apresente resultados coerentes fisicamente, uma vez que não há garantia de que as partículas irão colidir entre si ou com as paredes em uma dada simulação. Porém, de posse da região acima é possível evitar a perda de tempo em processos de tentativa e erro para obtenção dos valores desses parâmetros.

6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho mostrou a modelagem do escoamento de um fluido newtoniano incompressível pelo Método dos Elementos Finitos e o movimento das partículas pelo Método dos Elementos Discretos em duas geometrias diferentes. Em seguida foi realizado o acoplamento entre estas duas metodologias para a interação fluido-partícula, desconsiderando qualquer influência das partículas no escoamento.

Foi realizado um levantamento bibliográfico sobre as diferentes técnicas para a modelagem de escoamentos com partículas em suspensão e um estudo sobre as diferentes forças que atuam nas partículas, sejam elas pela interação entre partículas, entre as partículas e a parede e também entre as partículas e o fluido.

Realizou-se um estudo sobre as diferentes maneiras de se calcular os coeficientes de rigidez com base no coeficiente de restituição adotado. Foram realizados testes e simulações que comprovaram a necessidade de determinar valores apropriados a este trabalho de maneira a tornar as simulações consistentes.

A principal contribuição deste trabalho é a determinação de uma relação obtida empiricamente entre os conjuntos de valores de coeficientes de rigidez e o tamanho

das partículas, chamada de região de consistência. Com essa região é possível determinar para um conjunto de valores de coeficientes de rigidez o tamanho máximo e mínimo adequado para a partícula e vice-versa.

Pelo ajuste de curva realizado para os pontos máximos e mínimos encontrados, figura (5.1), percebe-se uma relação quadrática entre os coeficientes de rigidez e o raio máximo das partículas e uma relação de grau cinco entre esses parâmetros para os valores mínimos dos raios.

A determinação da região de consistência mostra-se de grande importância para futuras simulações do problema estudado. Sugere-se então, para trabalhos futuros, o estudo da região de consistência para outros valores do coeficiente de restituição, da velocidade da tampa e para outras geometrias do problema. Este estudo pode levar a determinação de uma expressão que relaciona os coeficientes de rigidez, o raio das partículas e os parâmetros acima citados, particularmente a velocidade máxima do fluido, definida pela velocidade da tampa móvel.

REFERÊNCIAS

APOSTOLOU, K.; HRYMAK, A. Discrete element simulation of liquid-particle flows. **Computers and Chemical Engineering**, [S.l.], v.32, p.841–856, 2008.

BRILLIANTOV, N. V.; SPAHN, F.; HERTZSCH, J. M.; POSCHEL, T. A model for collisions in granular gases. **Phys. Rev. E**, [S.l.], v.53, p.5382, 1996.

CHEN, S.; DOOLEN, G. D. Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows. **IBM Research Division**, [S.l.], v.30, p.329–364, 1998.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Geotechnique**, [S.l.], v.29, p.47, 1979.

DI RENZO, A.; DI MAIO, F. P. An improved integral non-linear model for the contact of particles in distinct element simulations. **Chemical Engineering Science**, [S.l.], v.60, p.1303–1312, 2005.

DIAZ-GOANO, C.; MINEV, P. D.; NANDAKUMAR, K. A lagrange multipliers/fictitious domain approach for particulate flow. **In LNCS**, [S.l.], v.2179, p.409–416, 2000.

DIAZ-GOANO, C.; MINEV, P. D.; NANDAKUMAR, K. A fictitious domain/finite element method for particulate flows. **Journal of Computational Physics**, [S.l.], v.192, 2003.

DOBRY, R.; NG, T. T. Proceedings of the 1st International Conference on Discrete Element Modeling. In: 1989, Colorado. **Proceedings...** [S.l.: s.n.], 1989.

ERTURK, E.; CORKE, T. C.; GOKCOL, C. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, [S.l.], v.48, p.747–774, 2005.

GINGOLD, R. A.; MONAGHAN, J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, [S.l.], v.181, p.375–389, 1977.

GLOWINSKI, R.; PAN, T. W.; HESLA, T. I.; D., J. D. A distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. **International Journal of Multiphase Flow**, [S.l.], v.25, 1999.

HAFF, P. K.; WERNER, B. T. Computer simulation of the mechanical sorting of grains. **Powder Techn.**, [S.l.], v.48, p.239, 1986.

HERTZ, T. Uber die Berührung fester elastischer Korper. In: . [S.l.]: J. f. reine u. angewandte Math, 1882. p.92–156.

HOWARD, H. H. Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. **International Journal of Multiphase Flow**, [S.l.], v.22, 1996.

HOWARD, H. H.; DANIEL, D. J.; MARCEL, J. C. Direct simulation of fluid particle motions. **Theoretical and Computational Fluid Dynamics**, [S.l.], v.3, 1992.

ISRAELACHVILI, J. N. Intermolecular and Surface Faces. **Academic Press**, [S.l.], 1991.

KIM, S.; KARRILA, S. J. Microhydrodynamics: principles and selected applications. **Butterworth-Heinman Series in Chemical Engineering**, [S.l.], 1991.

KUWABARA, G.; KONO, K. Restitution coefficient in a collision between two spheres. **Jpn. J. Appl. Phys.**, [S.l.], v.26, p.1230, 1987.

- LAGE, M.; LOPES, H.; CARVALHO, M. S. Flow with suspended particles using fictitious domain and Lagrange multipliers: a fully implicit-fully coupled finite elements approach. **Proceedings of COBEM**, [S.l.], 2009.
- LAGE, M.; LOPES, H.; CARVALHO, M. S. Flow with suspended particles and floating particles. **Journal of Computational Physics**, [S.l.], p.7736–7754, 2011.
- LIU, G. R.; LIU, M. B. **Smoothed Particle Hydrodynamics**: a meshfree particle method. Singapore: World Scientific Publishing, 2003.
- LUCY, L. B. Numerical approach to testing the fission hypothesis. **Astronomical Journal**, [S.l.], v.82, p.1013–1024, 1977.
- MINDLIN, R. D. Compliance of elastic bodies in contact. **Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME**, [S.l.], v.71, p.259–268, 1949.
- MINDLIN, R. D.; DERESIEWICZ, H. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. **Journal of Applied Mechanics, Transactions of the ASME**, [S.l.], v.75, p.327–344, 1953.
- MISHRA, B. K.; MURTY, C. V. R. On the determination of contact parameters for realistic dem simulations of ball mills. **Powder Technology**, [S.l.], v.115, p.290–297, 2001.
- MORGADO, W. A. M.; OPPENHEIM, I. Energy dissipation for quasielastic granular particle collisions. **Phys. Rev. E**, [S.l.], v.55, p.1940, 1997.
- NAKAMURA, F. I. **Animação interativa de fluido baseada em partículas pelo método SPH**. 2007. Dissertação(Mestrado em Informática) — Pontifícia Universidade Católica, PUC.
- PANTAKAR, N. A.; SINGH, P.; JOSEPH, D. D.; GLOWINSKI, R.; PAN, T. W. A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. **International Journal of Multiphase Flow**, [S.l.], v.26, 2000.

PONCE ATENCIO, Y. T. **ANIMAÇÃO BASEADA EM FÍSICA USANDO PARTÍCULAS EM GPUS**. 2011. Tese de doutorado — Universidade Federal do Rio de Janeiro.

POSHEL, T.; SCHWAGER, T. **Computational Granular Dynamics**. Berlin, Germany: Springer, 2004.

ROJEK, E.; ONATE, J. Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, [S.l.], v.193, p.3087–3128, 2004.

SCHNEIDER, P. J.; EBERLY, D. H. **Geometric Tools for Computer Graphics**. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2003.

SHULING, H. **Lattice Boltzmann method for incompressible viscous flow**. 1995. PhD thesis — Kansas State Univ.

SUZUKI, A.; HO, N. F. H.; HIGUCHI, W. Predictions of the particle size distribution changes in emulsions and suspensions by digital computation. **Journal of Colloid and Interface Science**, [S.l.], v.29, 1969.

TIPTHAVONNUKUL, S.; CHAN, D. Numerical Simulation of Granular Particles Moving in Fluid Flow. In: THIRD INTERNATIONAL CONFERENCE ON DISCRETE ELEMENT METHODS, 2007. **Proceedings...** [S.l.: s.n.], 2007.

TSUJI, Y.; KAWAGUCHI, T.; TANAKA, T. In: POWDER TECHNOL., 1993. **Proceedings...** [S.l.: s.n.], 1993.

VEERAMINI, C.; MINEV, P. D.; NANDAKUMAR, K. A fictitious domain method for particle sedimentation. **In LSSC**, [S.l.], v.3743, p.544–551, 2005.

VEERAMINI, C.; MINEV, P. D.; NANDAKUMAR, K. A fictitious domain formulation for flows with rigid particles: a non-lagrange multiplier version. **Journal of Computational Physics**, [S.l.], v.224, 2007.

WALTON, O. R.; BRAUN, R. L. Viscosity, granular temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. **J. Rheol.**, [S.l.], v.30, p.949, 1986.

YU, D.; MEI, R.; LUO, L.-S.; SHYY, W. Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation. **Progress in Aerospace Sciences**, [S.l.], v.39, p.329–367, 2003.