

1

Introdução

O termo **Métodos de Elementos Discretos** nomeia uma família de métodos numéricos que simulam o movimento de um grande número de partículas em micro-escala. Essa família está bastante relacionada à outra família de simulação numérica, que é a de dinâmica molecular. A diferença entre elas está no fato que os métodos de elementos discretos incluem as rotações como graus de liberdade, a modelagem dos contatos e ainda admitem geometrias mais complicadas.

Os métodos de elementos discretos estão ganhando interesse em diversas áreas de aplicações por ser um método eficaz para modelar materiais granulares discretos e contínuos. Além disso, com implementações eficientes, hoje é possível simular milhares de partículas em tempo real. Os usos aplicados desses métodos aparecem principalmente na indústria de mineração, na indústria farmacêutica, na engenharia civil, na indústria de óleo e gás, etc..

O principal objetivo dessa tese é o de propor um novo método de elementos discretos, que denominaremos por **GBPM (“Geometric Bounded Particle Method”)**. Ele está baseado no método **BPM (Bounded Particle Method)**, que foi proposto em 2004 por Potyondy e Cundall (56).

O modelo BPM tem como característica a seguinte idéia: Discretizar uma rocha com um grande número de partículas que podem estar unidas através de contatos cimentados. Assim, existem duas físicas presentes: uma que controla a interação partícula-partícula (também conhecida como interação granular) e outra que controla a interação entre partículas que estão cimentadas.

No BPM, a parte física que controla o contato partícula-partícula é baseada no método conhecido como **DEM (Distinct Element Method)**, que também pertence à família dos métodos dos elementos discretos. A parte física do BPM responsável pela interação entre duas partículas cimentadas é controlada por um modelo de contato, que nesse caso do BPM é determinado por duas molas ligadas ao centro das partículas e um modelo de torque.

Nesse ponto, uma importante observação é que: a necessidade do modelo de torque do BPM surge do fato das forças atuarem no centro das partículas. Para evitar a modelagem de torque, propomos uma formulação de contato que

atua na superfície da partícula. E com isso, é possível calcular diretamente o torque que esse contato gera. Levando em conta essa observação, desenvolvemos um novo modelo para a parte física que determina a força de interação entre duas partículas cimentadas. Chamamos esse novo modelo de **contato geométrico**. Esse nome foi escolhido pois o modelo atua utilizando a geometria esférica da partícula, e gera forças na própria superfície da partícula.

No GBPM, a parte física que controla a interação partícula-partícula não está restrita a uma formulação fixa. O usuário possui a opção de acoplar um modelo de contato que melhor se adequa a seu problema. E a parte física que controla as partículas cimentadas é definida pelo modelo de contato geométrico, que por sua vez, dispensa o modelo de torque.

1.1

Contribuições

As principais contribuições dessa tese são:

Novo modelo para simular materiais cimentados em 2D e 3D.

A principal contribuição desse trabalho é um novo modelo de contato para simular materiais cimentados, que batizamos de contato geométrico, e que atua na superfície das partículas. Esse modelo permite o cálculo direto dos torques gerados, dispensando uma modelagem específica para eles.

Cálculo do campo de estresse de forma direta. Devido à utilização do modelo de contato geométrico, é possível calcular o torque total para cada partícula, em consequência, foi possível realizar a extração do campo de estresse de uma simulação, de forma direta. Esse campo é muito importante, pois mostra as direções onde a rocha está se deformando, contribuindo para o entendimento cinemático de uma deformação.

Um nova estrutura de dados espacial para busca de vizinhos. Definimos uma estrutura de dados de busca espacial, que detecta rapidamente os possíveis vizinhos das partículas. Acelerando assim, o cálculo das forças de interação. Ela leva em consideração diversas características que são específicas desse tipo de simulação. Foram realizadas comparações entre a estrutura proposta e estruturas que aparecem na literatura. E, nos casos mais importantes testados a nova estrutura é a mais eficiente em termos de velocidade.

Aplicação do GBPM em computação gráfica. É proposto o uso do GBPM como uma ferramenta de modelagem para aplicações em computação gráfica, empregando as Thin Plate Splines para interpolar a deformação discreta que o GBPM gera.

Simplificação na modelagem com a redução dos parâmetros do modelo de contato em relação ao BPM. O nosso método precisa de um

número menor de parâmetros para ser calibrado, e com isso a modelagem se torna mais simples. Porém, o preço pago é o aumento da complexidade computacional, que é amenizado devido à nova estrutura de dados proposta.

Comparação qualitativa dos diversos modelos de contato partícula-partícula. Como a escolha do melhor modelo de contato partícula-partícula depende da aplicação, apresentamos os prós e contras dos principais modelos. O objetivo é fornecer um guia para a escolha do modelo mais adequado para uma dada aplicação.

Comparação com trabalhos que são o estado da arte, e metodologia para calibrar o modelo. Também, foram efetuadas comparações do método com testes em laboratório e métodos que são o estado da arte, realizamos uma comparação com o artigo de 2010 de Kazerane e Zhao (39). Em particular, o nosso método foi capaz de reproduzir a física de um experimento de compressão de rocha em 3D, empregando partículas esféricas de maneira mais realista que o método apresentado por esses autores, que utiliza um esquema BPM em 2D com elementos poligonais.

1.2

Trabalhos anteriores

O método dos elementos distintos DEM (do inglês “Distinct Element Method”) para simular materiais granulares teve origem em dois trabalhos dos autores Cundall e Strack publicados em 1978 (17, 68). O termo DEM foi estabelecido no trabalho dos mesmos autores em 1979 (19), e que depois foram estendidos em uma série de artigos (20, 21, 22). O DEM se caracteriza como o método de discretização que utiliza contatos deformáveis e um esquema de integração explícito para as equações de movimento de partículas circulares rígidas.

O primeiro código utilizando o DEM é o BALL (17). Ele é capaz de descrever o comportamento mecânico de partículas circulares em duas dimensões. A extensão do código BALL para três dimensões é o TRUBAL. Esses dois programas se tornaram uma base para uma série subsequente de pesquisas em DEM na década de 80 e foram estudados por diversos autores (77, 78, 53, 14, 33, 38, 71, 49). Esses trabalhos eram focados no entendimento fundamental do comportamento macroscópico de materiais granulares, (solos e areias).

Em 1983, Cundall e Strack (23) resumiram os resultados das observações micro e macroscópicas dos experimentos feitos com o código BALL. Ainda em 1983, Campbell e Brennen (14) publicaram um dos primeiros artigos com simulações de fluxo de Couette com materiais granulares usando DEM.

Existe uma comparação com medidas experimentais para estabelecer modelos mecânicos intra-partículas e partícula-bordo apropriados. Alguns autores seguiram o rumo de desenvolver modelos fisicamente corretos para deformar materiais sob pressão cisalhante (58, 71, 59, 60, 61, 2, 3, 4, 6),

Em 1989, Rothenburg e Bathurst (59) conseguiram derivar uma expressão para o tensor de estresse em duas dimensões, onde a média das forças dos contatos normais e tangenciais são levados em conta. Em 1993 foram propostos algoritmos para o estudo da iteração fluido-sólido em sistemas de partículas com o auxílio do DEM (72, 52).

O DEM, nos dias de hoje, é um método particular de uma classe de métodos numéricos: os Métodos dos Elementos Discretos (18). Nessa classe, os objetos não precisam ser esféricos e eles podem rotacionar e se deslocar livremente, além disso, eles reconhecem e respondem automaticamente a novos contatos entre eles durante a simulação. Alguns trabalhos usando geometrias mais complicadas surgiram para tratar os grãos como elipses, superquadricas e até mesmo poliedros (73, 60, 61, 46, 82, 51, 74, 50, 64, 81, 83, 42, 45, 31, 48), . E com isso, surgiram novos códigos, em particular, o SKRUBAL em 1992 (75), MASOM em 1992 (35) , DISC em 1992 (5) , ELLIPSE2 em 1993 (51), ELLIPSE3 em 1994 (41), DEFORM em 1993 (62), JUMP em 1993 (85), FIBER em 1994 (27) e POLY em 1994 (44). O desenvolvimento e aplicações do método aparecem em uma série de trabalhos (37, 63, 8, 72, 67, 47, 80, 66),

Nas simulações baseadas em DEM o passo de tempo limite para garantir a estabilidade é proporcional ao quadrado da massa dividido pela constante da mola (43). Para simular pequenas partículas com alta dureza é necessário um grande número de iterações. Para poder acelerar o processamento, alguns autores usaram técnicas de paralelização. Em 1998 Meegoda (43) desenvolveu o código TPM ("*TRUBAL for massively Parallel Machines*"), baseado no código TRUBAL, conseguindo um aumento de 800% de performance usando um computador com 512 processadores. Em 1997, Kuraoka e Bosscher (40) desenvolveram uma técnica de paralelismo decompondo o domínio do DEM, baseada no TRUBAL, conseguindo um aumento de 900% de performance usando um computador com 16 processadores com memória compartilhada.

Além de simular os fluxos granulares, o modelo de partículas pode ser usado para simular o comportamento de materiais sólidos. Fazendo que grupos de partículas fiquem "presas" umas as outras, através de pontos de contatos ou outros modelos, de modo que essas aglomerações comportem-se como objetos sólidos, podendo ser tratados como materiais com propriedades elásticas, capazes de fraturar quando um certo critério é atingido.

Os códigos de DEM mais famosos no campo de engenharia de rocha são

o PFC (“*Particle flow code*”) (36) e o código DMC (“*Distinct Motion Code*”) (69, 70, 57).

Os programas PFC e DMC trabalham com a idéia de discretizar um material usando inúmeras bolas de duas e três dimensões. Essas por sua vez, interagem por meio de regras simples nos pontos de contato. Materiais mais complexos podem ser modelados utilizando a idéia de uma rede de ligações paralelas aos contatos (15, 56). A figura 1.1 mostra um exemplo do código PFC2D (36) que usa um modelo BPM para estudar a deformação e fraturas de um material nos arredores de uma perfuração.

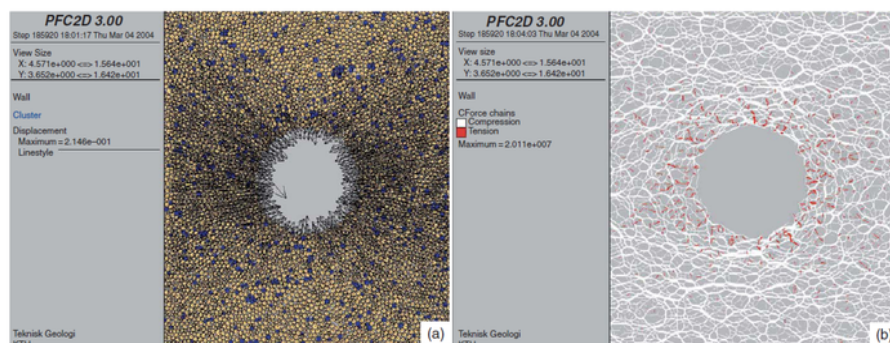


Figura 1.1: Simulação da deformação e dano próxima a uma escavação de rocha (a) distribuição do deslocamento; (b) distribuição das fraturas (em vermelho).

A figura 1.2 mostra o resultado de uma dessas simulações, que emprega o modelo BPM (“*Bonded Particle Model for rock*”) (56) .

1.3

Organização do manuscrito

No capítulo 2 descreveremos as equações de Newton, essas equações controlam o movimento das partículas durante a simulação e por isso são de fundamental importância. Ainda no capítulo 2 explicaremos como modelar a fronteira do problema utilizando partículas. Esse tipo de modelagem apresenta diversas vantagens que são explicadas no texto.

No capítulo 3 serão descritos os modelos de força que definem a iteração partícula-partícula. No final desse capítulo será apresentado uma comparação entre alguns dos modelos, essa comparação serve para podermos determinar um modelo adequado para cada tipo de problema.

No capítulo 4 descreveremos o método BPM (“*Bounded Particle Method*”) e no capítulo 5 apresentaremos a nossa proposta de modelagem: o método GBPM (“*Geometric Bounded Particle Method*”).

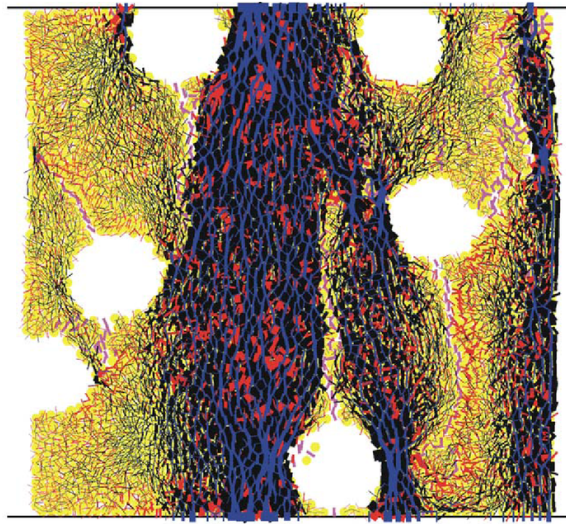


Figura 1.2: Distribuição de forças em um material granular cimentado, mostrando distribuição das fraturas. Extraída do trabalho de Potyondy e Cundall no ano de 2004(56).

No capítulo 6 serão abordados assuntos relativos à integração das equações do modelo. Também, introduziremos temas que servem de base durante a implementação e a maneira de aplicar o modelo no caso 3D.

No capítulo 7 será explicado um método de integração numérica: o método de Gears utilizado para resolver as equações de Newton. Ainda nesse capítulo será explicado o problema de busca por partículas vizinhas, que é o gargalo da simulação. No final do capítulo, será definida uma proposta para uma estrutura de busca espacial, e diversas comparações com outras estruturas espaciais.

No capítulo 8 será descrita a implementação do GBPM, serão apresentados os pseudo-códigos e um diagrama com os módulos do programa.

No capítulo 9 será mostrado o processo utilizado para calibrar os parâmetros do modelo.

No capítulo 10 serão apresentados algumas aplicações utilizando a modelagem GBPM. E apresentaremos comparações do modelo com um experimento feito em laboratório, e também, serão realizadas comparações com outros modelos encontrados na literatura.