

2

Equações de movimento, condições iniciais e de fronteira

2.1

Formulação do método

Os materiais granulares são encontrados normalmente na natureza, e possuem grande importância em diversos processos industriais. Por exemplo: problemas envolvendo a dinâmica de avalanches e deslizamentos, inúmeros problemas na indústria de mineração, problemas relacionados a transporte de cargas compostas por grãos, engenharia de silos para armazenamento de produtos agrícolas como cereais e problemas relacionados a mistura e homogeneização de compostos na indústria farmacêutica.

Esses materiais exibem uma fenomenologia bastante complicada, e ainda não foi completamente explicada. De fato, eles podem ser deformados como corpos sólidos (54), possuem a habilidade de fluir como um líquido, e ainda, podem ser comprimidos como gases.

A simulação numérica é considerada uma aliada poderosa no entendimento desses problemas. Como apontado por Cleary em 2004 (16), a simulação é uma forma cada vez mais comum na otimização de processos industriais de engenharia.

Com o aumento do poder computacional, a implementação de métodos numéricos que se focam no agregado granular, deduzindo a característica global a partir de observações individuais sobre cada grão, são cada vez mais relevantes, conforme Donze et al. (24) e Yang et al. (84).

Dada a grande descontinuidade de um material granular, é natural esperar que ao simulá-lo seja empregado um método que trate naturalmente esse problema, como é o caso do DEM. De fato, a comunidade de simulação vem mostrando mais interesse nesse método, para tratar problemas dessa natureza.

Resumindo, o DEM é um esquema numérico de simulação, onde o material granular é representado por objetos discretos que podem se mover e interagem por pontos de contato. E medidas estatísticas do comportamento global do sistema granular são tomadas com base no movimento e interações individuais. Esse método é comumente utilizado em situações onde o conheci-

mento teórico, físico e matemático ainda não é suficientemente desenvolvido, como comentado por Ferrez (26).

Nas próximas seções, serão introduzidos os tópicos necessários para determinar as equações utilizadas na modelagem das iterações entre os grãos. Também discutiremos sobre as equações que modelam o comportamento cinemático desses elementos.

2.2

Equações de movimento

Os materiais granulares são compostos por um grande número de partículas, cujos tamanhos variam de micrômetros a centímetros. Essas partículas interagem por forças de curto alcance, geralmente por contato mecânico. As forças de longo alcance, como eletrostáticas, não serão consideradas na modelagem.

A dinâmica do material granular é controlada segundo as equações de movimento de Newton, que são aplicadas tomando como base as posições, as geometrias e as orientações dos grãos.

Dada uma partícula i em um conjunto com N grãos as equações de movimento são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\varphi}_j, \vec{\omega}_j) \\ \frac{\partial^2 \vec{\varphi}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{\hat{J}_i} \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\varphi}_j, \vec{\omega}_j), \quad (j = 1, \dots, N) \end{aligned} \quad (2-1)$$

onde \vec{r} é a posição da partícula, m é a massa, $\vec{\varphi}$ é a orientação angular, $\vec{\omega}$ é a velocidade angular, \vec{v} é a velocidade linear, \hat{J} é o momento de inércia, \vec{M} é o torque, t é o tempo e \vec{F} é o vetor força.

\vec{r}	Posição	\vec{M}	Torque	$\vec{\omega}$	Velocidade angular
m	Massa	t	Tempo	\vec{v}	Velocidade linear
\hat{J}	Momento de inércia	$\vec{\varphi}$	Orientação angular	\vec{F}	Força

Com isso a força \vec{F}_i e o torque \vec{M}_i , que atuam sobre a partícula i de massa m_i e momento de inércia \hat{J}_i , são funções das posições das partículas \vec{r}_j , de suas orientações angulares $\vec{\varphi}_j$, da velocidade linear \vec{v}_j e da velocidade angular $\vec{\omega}_j$.

A figura 2.1 mostra como algumas dessas propriedades descrevem uma partícula em 2D.

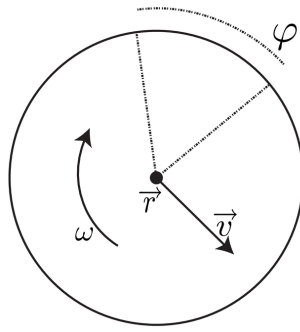


Figura 2.1: Elementos de uma partícula circular bidimensional.

Em duas dimensões, as equações do movimento são simplificadas. Devido ao fato de que a orientação φ_i , a velocidade angular ω_j e o momento de inércia J_i são representados por valores escalares.

Em duas dimensões as equações do movimento de Newton são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \varphi_j, \omega_j) \\ \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{J_i} \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \varphi_j, \omega_j), \quad (j = 1, \dots, N) \end{aligned}$$

onde, agora φ, ω, J assumem valores escalares.

Como é de se esperar, é considerado que duas partículas exercem força, uma sobre a outra, somente quando estão em contato mecânico.

Definição 2.1 Dizemos que as partículas esféricas i e j , com centros \vec{r}_i, \vec{r}_j e raios R_i, R_j estão em contato mecânico quando

$$\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| < R_i + R_j.$$

A geometria envolvida nesse processo é ilustrada na figura 2.2.

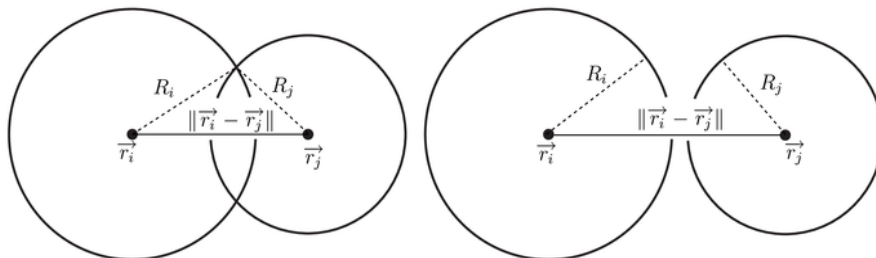


Figura 2.2: Esquerda: partículas em contato mecânico. Direita: partículas não estão em contato mecânico.

A força de repulsão entre duas partículas é modelada utilizando a compressão das partículas em contato. Para partículas granulares, a força \vec{F}_i e o torque \vec{M}_i , atuando sobre a partícula i , são determinados pela soma das iterações de i com os demais grãos do sistema, assumindo que não existe força externa atuando sobre o sistema:

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1, j \neq i} \vec{F}_{ij}, \quad \vec{M}_i = \sum_{j=1, j \neq i} \vec{M}_{ij},$$

Utilizando essa metodologia para modelar os contatos. Serão apenas consideradas as iterações par a par, isso é, assume-se que as intra-penetrações entre as partículas são pequenas, comparadas aos raios.

A força \vec{F}_{ij} e o torque \vec{M}_{ij} gerados durante a colisão das partículas i e j , são funções das posições, orientações e das velocidades de i e j . Com isso, as equações de movimento de Newton (2-1) podem ser integradas numericamente. E a física de interação é especificada através da modelagem que for empregada.

Para podermos integrar o sistema, são necessárias as definições das condições iniciais e de fronteira. A descrição do problema é completa quando o comportamento das partículas do bordo está bem descrito, e as posições e velocidades iniciais são informadas.

2.3

Condições de fronteira

O estudo do sistema granular variando as fronteiras é o foco de muitos dos problemas envolvendo os sistemas granulares. Alguns exemplos desses problemas são: testes compressionais, no estudo de escavação, em aplicações em compressão de solos, efeitos de vibração do bordo atuando sobre o sistema e diversos estudos sobre o deslocamento do material granular em tubos, silos e esteiras.

Um ponto importante é a modelagem da interação do material granular com a parede, que em geral, possui natureza complexa e pouco entendida.

Uma maneira eficaz de definir as propriedades da parede é modela-las também com partículas. Dessa maneira, aplicamos, basicamente, as mesmas regras usadas para modelar o material granular, e com isso, o trabalho de modelagem de condições de contorno complexas é reduzido. E justando-se o tamanho e posição das partículas do bordo, é possível modelar diversos níveis de rugosidade do bordo.

Na figura 2.3 estão ilustrados dois paradigmas para a modelagem das condições de fronteira: na esquerda utilizando partículas, na direita empre-

gando uma discretização com objetos poligonais. A segunda opção possui uma desvantagem: necessita de mais um modelo de contato do tipo polígono-grão.

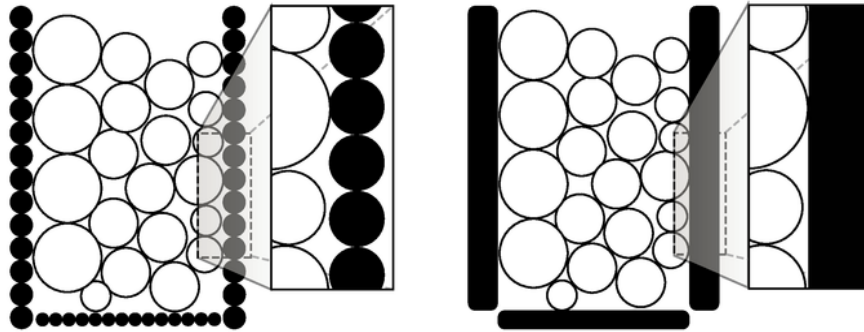


Figura 2.3: Esquerda: fronteira discretizada com partículas. Direita: fronteira definida utilizando objetos poligonais, nesse caso é necessária a modelagem do contato partícula-polígono.

Em geral o movimento da fronteira não depende do movimento do material granular. Assim, as equações de movimento de Newton (2-1) não influenciam o movimento das partículas do bordo. E, dessa forma, as forças geradas durante a colisão de partículas do bordo com partículas do material afetam apenas o comportamento do material.

O comportamento da fronteira deve ser predefinido na simulação. A fronteira se move ao longo de uma trajetória pré-estabelecida. Por exemplo, uma parede em um teste uniaxial se move linearmente no tempo na direção y , como mostrado na figura 2.4.

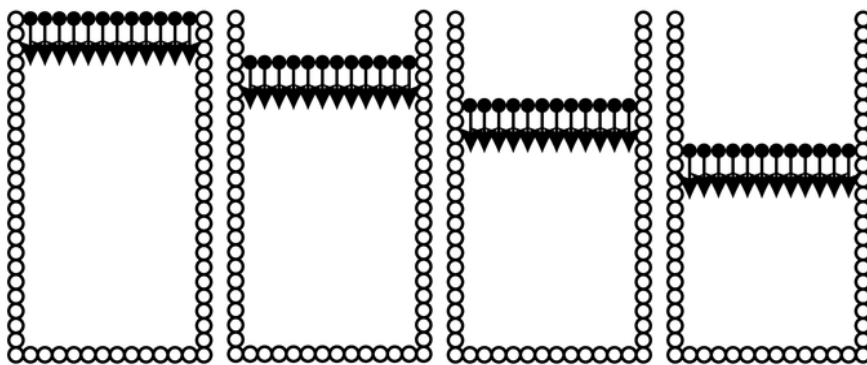


Figura 2.4: Movimento predefinido na fronteira: partículas se movem linearmente na direção y .

2.4

Condições iniciais

Para integrar as equações de Newton (2-1) é necessário definir os valores iniciais da coordenada $\vec{r}_i|_{t=0}$, da velocidade $\vec{v}_i|_{t=0}$, da orientação angular $\varphi_i|_{t=0}$ e da velocidade angular $\omega_i|_{t=0}$ de cada partícula $i = 1..N$.

No caso onde é modelado o comportamento de rocha, utilizando por exemplo os contatos cimentados, também é necessário informar os parâmetros físicos e a geometria dos contatos. Esse assunto será abordado mais adiante.

É possível adotar diversas estratégias para iniciar as posições das partículas. As mais simples devem iniciar as coordenadas empregando um gerador aleatório regular, e em seguida, executar alguns passos de integração até o sistema entrar em equilíbrio. Em geral não é empregada uma amostragem uniforme, pois seria introduzida alguma anisotropia no modelo.

Para encontrar, de forma mais eficiente, um estado de equilíbrio, é natural usar temporariamente parâmetros não realistas nos materiais granulares.

Existem metodologias mais elaboradas para gerar as condições iniciais das partículas. Por exemplo, Benabbou (7) preenche uma região do plano, de fora para dentro, utilizando diagramas de Voronoi para acelerar a detecção de espaço vazio. A figura 2.5 ilustra esse procedimento.

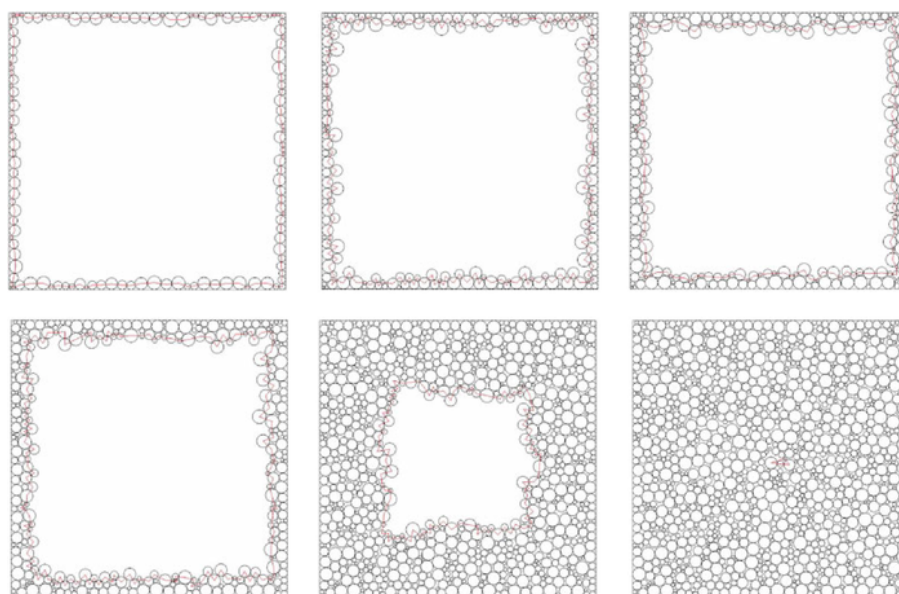


Figura 2.5: Algoritmo elaborado para posicionamento das partículas, baseado no diagrama de Voronoi dos pontos (7).

Na seção 6.1 são dados mais detalhes sobre a modelagem da geometria inicial proposta nessa tese.