

3

Modelos de contato

O tema desse capítulo é a modelagem da força de contato entre duas partículas, isto é, a definição das forças e torques envolvidos no contato. Essa modelagem é fundamental para deduzirmos a aceleração de cada partícula, e depois, integrar o movimento utilizando as equações de Newton.

3.1

Definições elementares da geometria de contato

O modelo mais simples para uma partícula granular é: um disco em 2D ou uma esfera em 3D. Simulações usando esse tipo de geometria são as mais eficientes, pois reduzem a complexidade na detecção dos pontos de contato, entre outros fatores.

Definição 3.1 *Dadas duas partículas esféricas i e j , com centros \vec{r}_i, \vec{r}_j e raios R_i, R_j , definimos a compressão mutua entre i e j , denotada por ξ_{ij} , como*

$$\xi_{ij} \equiv R_i + R_j - \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$$

Em particular, duas partículas A e B estão em contato se $\|\vec{r}_A - \vec{r}_B\| < R_A + R_B$.

A compressão mutua é de importância fundamental para a modelagem, pois a partir dela é definida a principal parcela da quantidade de força repulsiva entre os grãos. E também, com ξ_{ij} se detecta a colisão entre duas esferas. Na figura 3.1 está ilustrada a relação entre ξ_{ij} e a interação entre duas partículas.

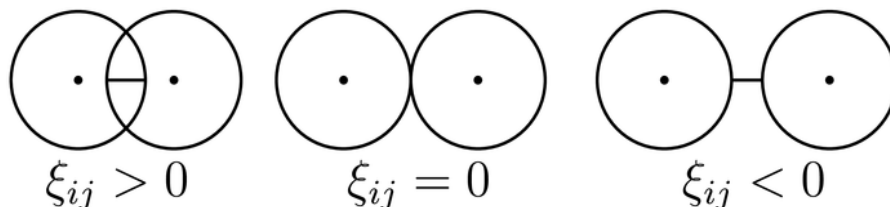


Figura 3.1: A compressão mutua entre dois grãos é positiva quando eles estão em contato.

A força \vec{F}_{ij} atuando entre os grãos i e j é definida como:

$$\vec{F}_{ij} = \begin{cases} \vec{F}_{ij}^n + \vec{F}_{ij}^t & \xi_{ij} > 0 \\ 0 & \xi_{ij} \leq 0 \end{cases}$$

onde \vec{F}_{ij}^n e \vec{F}_{ij}^t são a componente normal e a componente tangente da força, respectivamente.

Em sistemas bidimensionais, a componente normal e a componente tangencial são definidas por

$$\vec{F}_{ij}^n = F_{ij}^n \vec{e}_{ij}^n, \quad \vec{F}_{ij}^t = F_{ij}^t \vec{e}_{ij}^t,$$

onde

$$\vec{e}_{ij}^n = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|}, \quad \vec{e}_{ij}^t = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \vec{e}_{ij}^n.$$

A figura 3.2 exhibe as geometrias de \vec{e}_{ij}^n e \vec{e}_{ij}^t .

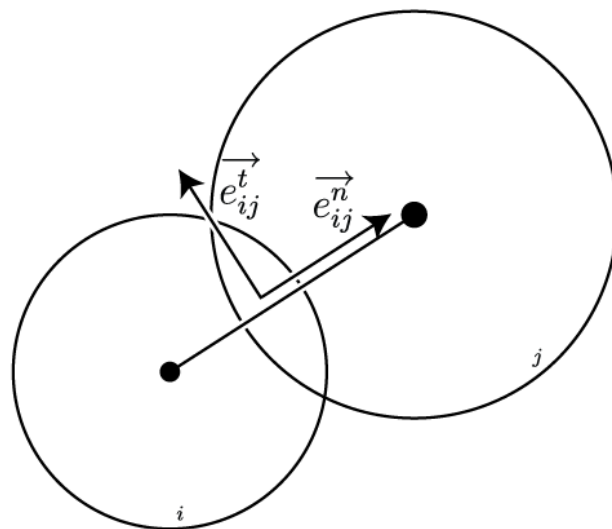


Figura 3.2: Direções de contato: normal e tangente.

Em três dimensões, o vetor de força tangente se encontra no plano de contato. Esse plano é definido pela interseção das superfícies das duas esferas. A geometria para esse caso está ilustrada na figura 3.3.

As quantidades escalares F_{ij}^n e F_{ij}^t , que são obtidas com o uso de modelagem através de diferentes modelos que serão discutidos nas próximas sessões.

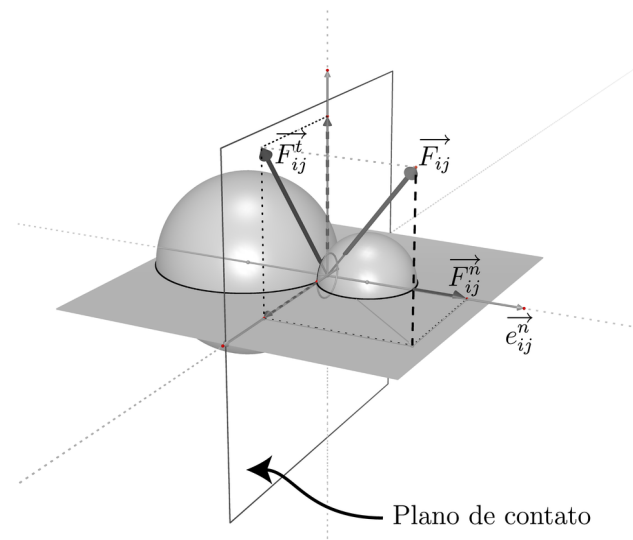


Figura 3.3: Em três dimensões, o vetor de força tangente se encontra no plano de contato. Esse plano é definido pela interseção das superfícies das duas esferas.

Durante a colisão de duas partículas, são assumidas as seguintes hipóteses sobre o modelo: parte da energia cinética é dissipada, a deformação é pequena em relação ao tamanho da partícula e, por último, a forma esférica é preservada, devido às inúmeras colisões.

Em seguida, serão abordados modelos de força normal. Eles serão utilizados em nossas simulações, em particular, serão estudados modelos empregados na formulação do DEM. Em geral, quanto mais realista o modelo for, maior será o esforço computacional necessário.

3.2

Força normal

Vamos descrever agora alguns modelos de força normal que podem ser empregados em uma simulação de material granular.

3.2.1

Modelo linear amortecido

A força normal, F_{ij}^n , consiste de uma parcela dissipativa e uma parcela conservativa:

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

onde γ^n é uma constante dissipativa e Y representa a constante elástica.

Adotamos a notação Y para representar a constante elástica. Mais tarde, será utilizado o mesmo símbolo para o módulo de Young. Essa escolha é

intencional, e vem do fato que esse valor está relacionado à modelagem da dureza do material.

Em colisões que acontecem par a par, essa força causa uma redução na velocidade relativa após a colisão. Essa redução de velocidade define um coeficiente ε .

Definição 3.2 *Definimos o coeficiente de restituição pela equação $\varepsilon \equiv g'/g$, onde g e g' são os valores das velocidades normais relativas antes e após a colisão, respectivamente.*

Ao integrar as equações de movimento de Newton, empregando o modelo linear amortecido, é possível deduzir analiticamente o valor do coeficiente de restituição:

$$\varepsilon \equiv \exp \left(\frac{-\frac{\pi\gamma^n}{2m^{\text{eff}}}}{\sqrt{\frac{Y}{m^{\text{eff}}} - \left(\frac{\gamma^n}{2m^{\text{eff}}}\right)^2}} \right),$$

onde m^{eff} representa a massa efetiva das partículas, que é dado por:

$$m^{\text{eff}} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}.$$

A limitação desse modelo está no fato de que, o coeficiente de restituição ε é independente da velocidade de impacto. Experimentalmente é percebida uma forte dependência de ε com a velocidade de impacto, como é comentado no trabalho de Bridges et al. (11).

3.2.2 Modelo elástico

A força de interação entre esferas elásticas foi derivada por Heinrich Hertz (34). A força é função de ξ_{ij} , Y e ν , respectivamente: compressão mutua, módulo de Young e coeficiente de Poisson. A fórmula é dada pela equação:

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

onde R^{eff} representa o raio efetivo de contato das partículas, dado por:

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

3.2.3

Modelo visco-elástico

Brilliantov (12), generalizou o modelo elástico tomando em conta efeitos viscos-elásticos,

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

onde Y é módulo de Young, ν é o coeficiente de Poisson, R^{eff} é raio efetivo do contato, e A é a constante dissipativa. A constante A está relacionada à viscosidade do material.

A dedução completa desta equação pode ser encontrada no trabalho de Brilliantov (12).

O termo dissipativo que aparece na equação (3-2), surge durante a resolução das equações com termos viscos-elásticos para esferas deformadas.

A forma funcional do termo dissipativo, $\sqrt{\xi_{ij}}\frac{d\xi_{ij}}{dt}$, já havia sido derivada usando outras técnicas, que não eram capazes de especificar A como função dos parâmetros do material. Para mais detalhes sobre esse assunto consulte Poschel (55).

As equações (3-1) e (3-2) devem ser aplicadas quando ambas as partículas são do mesmo material. Caso os grãos sejam de diferentes materiais, a equação (3-1) assume a seguinte forma:

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

Em particular, assumindo $Y_i = Y_j$ e $\nu_i = \nu_j$ a fórmula (3-1) é recuperada.

Para partículas com diferentes valores de A , em geral não existe uma maneira simples de combinar essas constantes. Uma heurística que pode ser utilizada, consiste em tomar a média dos coeficientes (55), e assumir a fórmula

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

Novamente, tomando $Y_i = Y_j$, $\nu_i = \nu_j$ e $A_i = A_j$ recuperamos a fórmula (3-2).

3.2.4

Modelo de Walton e Braun

Esse modelo, proposto por Walton e Braun (79, 77) leva em conta se o material está sendo comprimido ou descomprimido. Isso é, se os centros dos grãos estão se aproximando, $\frac{d\xi_{ij}}{dt} > 0$, ou se afastando, $\frac{d\xi_{ij}}{dt} < 0$.

Essa modelagem assume que o material se comporta de formas distintas quando está sendo comprimido ou descomprimido.

$$F_{ij}^n = \begin{cases} Y_l \xi_{ij} & \text{se } \frac{d\xi_{ij}}{dt} \geq 0 \\ Y_u (\xi_{ij} - \xi_0) & \text{se } \frac{d\xi_{ij}}{dt} < 0 \end{cases}$$

onde Y_l e Y_u representam o módulo de Young de compressão e descompressão, respectivamente.

3.2.5

Nota sobre as colisões

As equações descritas acima geram um artefato numérico que deve ser corrigido durante a simulação: o valor de F_{ij}^n pode se tornar negativo. A figura (3.4) ilustra esse fato.

O artefato aparece quando os grãos estão se separando. O sinal da força normal pode mudar, e com isso, a força normal atua como uma força de atração. Esse caso não existe na realidade, e é definida a correção

$$F_{ij}^n \equiv \max\{0, F_{ij}^n\}. \tag{3-3}$$

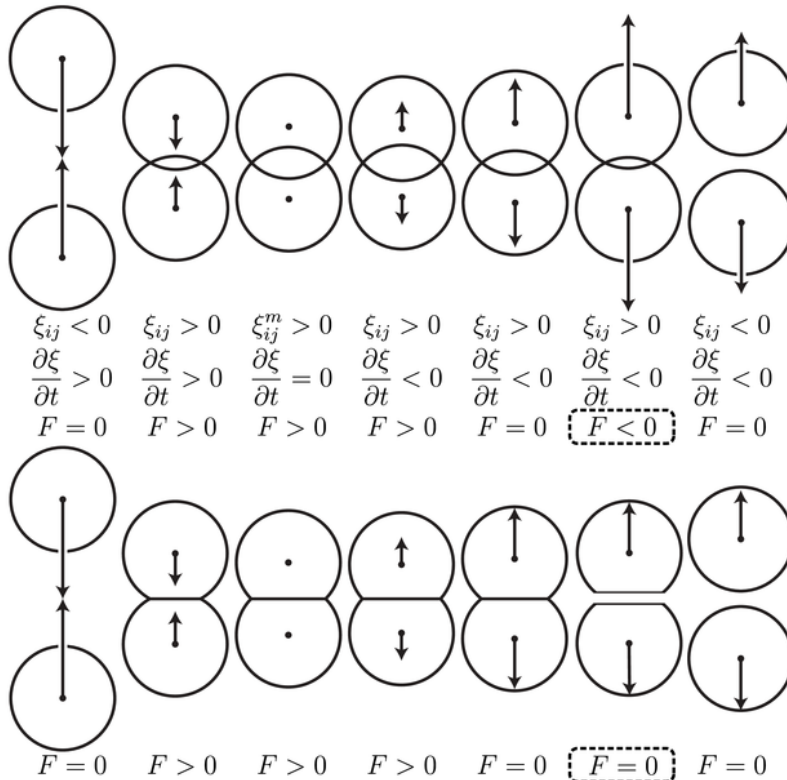


Figura 3.4: Esquema de colisão: diferença entre aplicar ou não a equação (3-3).

3.3

Força tangencial

Os grãos não são esferas perfeitas pois a sua superfície possui uma textura bastante complicada. Devido a isso durante uma colisão oblíqua, além da força normal, forças tangenciais também atuam sobre a partícula.

Porém, não é possível construir uma pilha de esferas perfeitas. Para que isso ocorra, a superfície das esferas deve ser suficientemente rugosa. A força tangencial é geralmente determinada pela textura da superfície da partícula, e é modelada com base na velocidade tangencial relativa no ponto de contato.

Dadas duas partículas i e j , com centros \vec{r}_i e \vec{r}_j , velocidades lineares \vec{v}_i e \vec{v}_j e velocidades angulares $\vec{\omega}_i$ e $\vec{\omega}_j$ definimos:

Definição 3.3 Dadas duas partículas i e j , com centros \vec{r}_i e \vec{r}_j , velocidades lineares \vec{v}_i e \vec{v}_j e velocidades angulares $\vec{\omega}_i$ e $\vec{\omega}_j$ definimos:

A velocidade relativa no ponto de contato $\vec{P}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{2}$:

$$\begin{aligned} \vec{v}_{ij}(\vec{P}_{ij}) &= \vec{v}_j(\vec{P}_{ij}) - \vec{v}_i(\vec{P}_{ij}) \\ &= \left(\vec{v}_i + \vec{\omega}_i \times (\vec{P}_{ij} - \vec{r}_i) \right) - \left(\vec{v}_j + \vec{\omega}_j \times (\vec{P}_{ij} - \vec{r}_j) \right). \end{aligned}$$

Definição 3.4 A velocidade normal relativa no ponto de contato é definida por

$$\begin{aligned} \vec{v}_{ij}^n(\vec{P}_{ij}) &= \text{Proj}_{\vec{e}_{ij}^n} \left(\vec{v}_{ij}(\vec{P}_{ij}) \right) \\ &= \left\langle \vec{v}_{ij}(\vec{P}_{ij}), \vec{e}_{ij}^n \right\rangle \vec{e}_{ij}^n. \end{aligned}$$

Definição 3.5 A velocidade tangencial relativa no ponto de contato é definida por

$$\vec{v}_{ij}^t(\vec{P}_{ij}) = \vec{v}_{ij}(\vec{P}_{ij}) - \vec{v}_{ij}^n(\vec{P}_{ij}).$$

O ponto de contato é uma aproximação, devido à compressão ξ_{ij} que as partículas assumem. No caso de materiais duros essa aproximação é boa, pois os grãos se deformam pouco devido ao contato.

3.3.1

Modelo de Haff e Werner

Nesse modelo, a força tangente é linearmente proporcional a velocidade tangente, e limitada de acordo com a lei de Coulomb de atrito. A força de atrito é limitada pela força normal atuando no contato. A fórmula da força tangencial utilizada nesse modelo é a seguinte:

$$F_{ij}^t = -\text{sinal}(v_{ij}^t) \cdot \min \left\{ \gamma^t \left| \vec{v}_{ij}^t \right|, \mu \left| \vec{F}_{ij}^n \right| \right\},$$

onde μ é o coeficiente de atrito de Coulomb, γ^t coeficiente de rugosidade tangente e v_{ij}^t nesse caso é definido como $v_{ij}^t = \left| v_{ij}^t(\vec{P}_{ij}^n) \right|$, onde o sinal depende da velocidade relativa dos pontos: aproximando negativo, se afastando positivo.

Esse modelo foi utilizado com sucesso por Haff e Werner (32), para simular o efeito de segregação de grãos.

A força tangencial cresce proporcionalmente a v_{ij}^t enquanto a lei de fricção de Coulomb for satisfeita:

$$F_{ij}^t \leq \mu \left| \vec{F}_{ij}^n \right|.$$

Depois desse ponto, a força é limitada a $F_{ij}^t = \mu \left| \vec{F}_{ij}^n \right|$. O parâmetro γ^t é determinado pela textura da superfície do grão, tornando um problema determiná-lo a partir do tipo do material. Em geral, esse coeficiente é ajustado à posteriori, comparando os resultados da simulação com experimentos em laboratório.

3.3.2

Modelo de Cundall e Strack: o modelo do DEM

O modelo descrito por Cundall e Strack em 1979 (19), possui um custo computacional relativamente pequeno e simula com boa precisão o comportamento estático. Esse modelo é parte da formulação que caracteriza o DEM.

O atrito estático é descrito como uma mola atuando na direção tangencial do plano de contato. Imagine uma partícula como sendo uma engrenagem de dentes flexíveis. Essa mola é iniciada no tempo t_{ij}^c quando as partículas i e j se tocam, e existe enquanto as partículas estão em contato mecânico.

Seu comprimento é definido pela equação

$$\zeta(t) = \int_{t_{ij}^c}^t v_{ij}^t(x) dx,$$

onde t_{ij}^c representa o tempo onde as partículas i e j se tocam pela primeira vez, e $\zeta(t)$ é o comprimento da mola.

Esse comprimento, $\zeta(t)$, determina a força tangencial, limitada pela lei de Coulomb de atrito através da equação:

$$F_{ij}^t = -\text{sinal}(v_{ij}^t) \cdot \min \left\{ k^t |\zeta|, \mu \left| \vec{F}_{ij}^n \right| \right\},$$

onde μ é o coeficiente de atrito de Coulomb e k^t é o parâmetro elástico tangente. O parâmetro k^t deve ser ajustado experimentalmente. Além do material, k^t depende da geometria e textura da superfície dos grãos.

Para tratar de partículas de diferentes materiais a equação se torna:

$$F_{ij}^t = -\text{sinal}(v_{ij}^t) \cdot \min \left\{ k^t |\zeta|, \mu^{\text{eff}} \left| \vec{F}_{ij}^n \right| \right\},$$

onde μ^{eff} é o coeficiente efetivo de atrito de Coulomb definido por:

$$\mu^{\text{eff}} = \min\{\mu_i, \mu_j\}.$$

Outros modelos são encontrados na literatura, por exemplo, Walton e Braun (79) definem a força tangencial não dependente somente do estado atual da simulação, utilizando informação do passo de tempo anterior.

Para uma discussão mais profunda sobre a força tangente é recomendada a leitura do trabalho de Shafer et al. (65).

3.4 Dissipação de energia cinética

No material granular acontece dissipação de energia cinética. Para isso, precisamos de um modelo de dissipação. Em diversos materiais, vários processos microscópicos são responsáveis pela dissipação, por exemplo, fricção interna, produção de calor e emissão de ondas sonoras.

A força de amortecimento, denotada por \vec{F}_i^d , aplicada na partícula i é definida por

$$\vec{F}_i^d = -\alpha \left| \vec{F}_i \right| \left(\frac{\vec{v}_i}{|\vec{v}_i|} \right),$$

onde \vec{F}_i é a força resultante atuando sobre a partícula i , \vec{v}_i velocidade da partícula i e α é o parâmetro de dissipação de energia cinética (56).

3.5

Comparação qualitativa dos modelos de contato partícula-partícula

Entre os diversos modelos de contato partícula-partícula, apresentados uma questão importante é definir qual combinação de modelos é adequada conforme a aplicação desejada. A resposta para essa pergunta não é simples e depende de diversos fatores. Nessa seção vamos tentar explicar as vantagens e desvantagens de cada um dos modelos, dessa forma gerando um guia para configurar uma simulação.

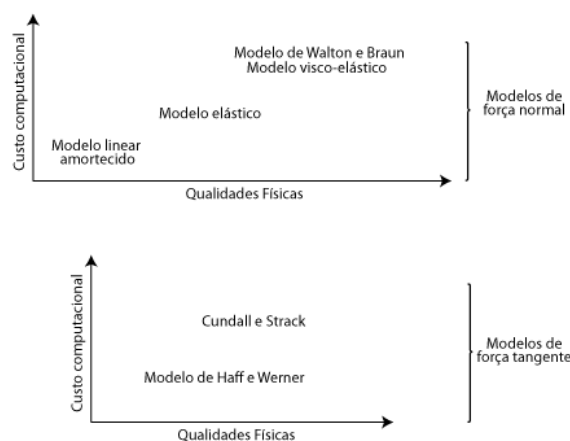


Figura 3.5: Comparação dos modelos quanto a relação custo computacional versus qualidade física.

Para começar, vamos estudar algumas aplicações de exemplo. Suponha que nossa aplicação seja um jogo no computador. Nesse caso, o que se busca, em geral, é a velocidade. E a resposta da pergunta será: Devemos utilizar um modelo que consiga representar a física de forma "visualmente convincente" com a restrição de que o modelo seja o mais rápido possível. Nesse caso, utilizaríamos o modelo linear para calcular a força normal, ignorando a força tangente, e utilizamos um alto valor no parâmetro de dissipação de energia cinética.

Para aplicações onde queremos "imitar" um comportamento, onde não sabemos, a priori, as propriedades do material, por exemplo, para determinar qual sequência de fenômenos geológicos gerou determinada geometria. Nesse caso utilizaríamos o modelo elástico para calcular a força normal, e o modelo de Cundall e Strack para calcular a força tangencial. Escolheríamos alguns parâmetros que modelassem um material "parecido" com o que buscamos imitar, e a partir daí basta modelar as geometrias da simulação. Nesse caso onde só estamos procurando pela geometria do problema podemos nos dar o luxo de utilizar modelos onde os parâmetros não são deduzidos da física.

Em aplicações onde sabemos as propriedades elásticas do material, e buscamos resultados quantitativos devemos utilizar o Modelo visco-elástico ou o modelo de Walton e Braun. Para a força tangente não temos muita opção, somente fazendo um estudo paramétrico para determinar o melhor modelo e melhor conjunto de parâmetros.

Para facilitar na escolha do melhor modelo de força, fornecemos dois gráficos comparando os modelos qualitativamente. O primeiro relacionando o custo computacional à qualidade física, veja figura 3.5. O segundo comparando os modelos quanto as suas qualidades e defeitos, veja a figura 3.6.

	Parâmetros deduzidos da física	Parâmetros sem relação física	Modela compressão/descompressão	Geometrias além de bolas	Funciona em 3d	Implementação simples	Coefficiente de restituição depende da velocidade de impacto
Modelo de Walton e Braun	V		V		V	V	V
Modelo visco-elástico	V				V	V	V
Modelo elástico	V				V	V	V
Modelo linear amortecido		V		V	V		
Cundall e Strack		V		V			
Modelo de Haff e Werner		V			V	V	

} Modelos de força normal

} Modelos de força tangente

Figura 3.6: Comparação qualitativa dos modelos de força partícula-partícula.