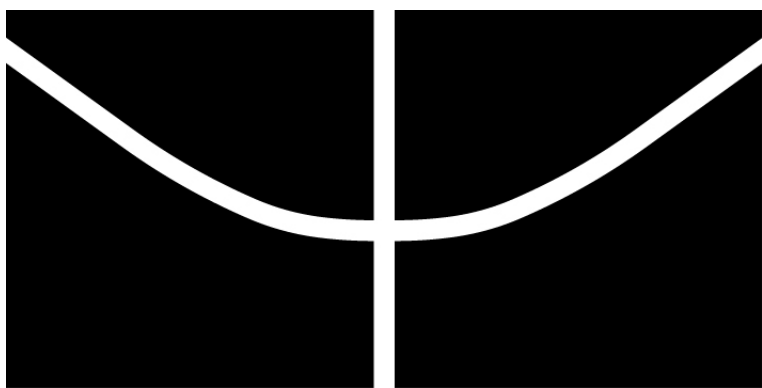


Introdução à Simulação Híbrida de Escoamentos de Partículas em Fluidos

Dinâmica Molecular

Juarez Aires Sampaio Filho

Universidade de Brasília - Departamento de Matemática



UnB

Introduction

O comportamento da mistura que se forma quando fazemos passar um fluido por um material granular ainda não foi completamente entendido. Uma das ferramentas atualmente utilizadas para o estudo de tal fenômeno é a simulação computacional. Para isso precisamos ser capazes de descrever as interações das partículas granulares entre si e do fluido com as partículas.

A interação entre as partículas do material granular pode ser simulada pelo uso da dinâmica molecular. Essa técnica consiste em fornecer um modelo para as forças de interação trocadas entre as partículas em colisão. A partir dessas forças a equação de movimento pode ser integrada numericamente e obtêm-se a trajetória de cada partícula individualmente.

A simulação do fluido é baseada nas equações de Navier-Stokes. Para resolvermos numericamente as equações utilizamos diferenças finitas, técnica por meio da qual transforma-se a solução da equação diferencial na solução de um conjunto de sistemas lineares.

Metodologia

O trabalho realizado focou a primeira etapa dos processos envolvidos na simulação computacional do escoamento de partículas em fluidos, isto é, a simulação da interação entre partículas por meio da dinâmica molecular e as dificuldades de uma implementação eficiente. Descrevemos a seguir as ideias chaves utilizadas.

Dinâmica Molecular

Essa técnica fornece um modelo para as forças envolvidas nos instantes de colisão. Para isso, o material granular é visto como um conjunto de partículas circulares capazes de sofrerem deformação. Essa deformação é simulada deixando que as partículas sofram interpenetrações elásticas ξ , isto é, durante uma colisão permitimos que as partículas possuam áreas de superposição, mas essas áreas de superposição produzem forças no sentido de afastá-las. O comportamento dessa força é representado pela lei de Hooke com constante elástica k_r e constante de amortecimento k_v .

As principais grandezas físicas utilizadas são mostradas na figura ao lado. Sejam \vec{x}_1 e \vec{x}_2 as posições, R_1 e R_2 os raios, \vec{v}_1 e \vec{v}_2 as velocidade das partículas 1 e 2 respectivamente e \vec{n} e \vec{t} as direções normais e tangentes. Temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\text{overlap})\xi = \max(0, R_1 + R_2 - |\vec{x}_2 - \vec{x}_1|) \\ (\text{direção normal})\vec{N} = \frac{\vec{x}_2 - \vec{x}_1}{|\vec{x}_2 - \vec{x}_1|} \\ (\text{v de aproximação})\vec{V} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \\ (\text{v normal})V_n = \vec{\xi} = \vec{V} \cdot \vec{N} \\ (\text{v tang.})\vec{V}_t = \vec{V} - \vec{\xi}\vec{N} \\ \vec{F}_n = f_n\vec{N}, \\ f_n = -(k_v\xi^\alpha\dot{\xi} + k_r\xi^\beta) \end{array} \right. \quad (1)$$

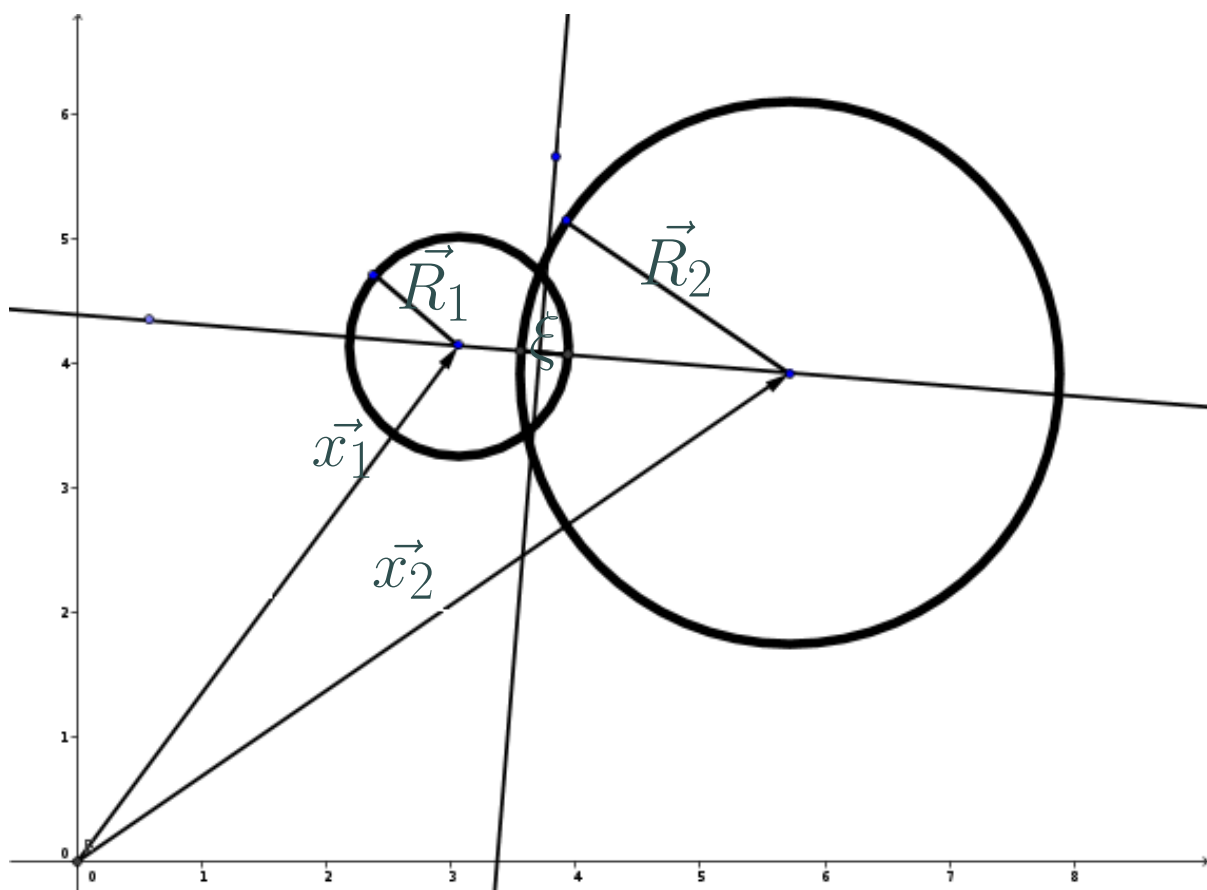


Figura 1: modelo para simulação de forças de colisão

Tabela de Dispersão

Um dos problemas computacionais envolvidos na simulação é a detecção de colisões de forma eficiente. Detectar colisões significa medir a distância entre todas as partículas e determinar qual destas é menor que a soma dos raios das partículas envolvidas, o problema é que, a princípio, todas as partículas são candidatas a colidirem com todas as outras e teríamos de verificar todos os pares possíveis. Gostaríamos de reduzir o número de pares candidatos a colisão ao procurarmos apenas naquelas partículas que estão próximas umas das outras. Um modo de fazer isso é pelo uso de uma tabela de dispersão. Por meio dessa técnica segmentamos o plano em quadrados e, para uma dada partícula, procuramos apenas por colisões nos quadrados vizinhos. Para que isso seja possível, o lado do quadrado deve ser igual ao maior diâmetro encontrado nas partículas sendo simuladas.

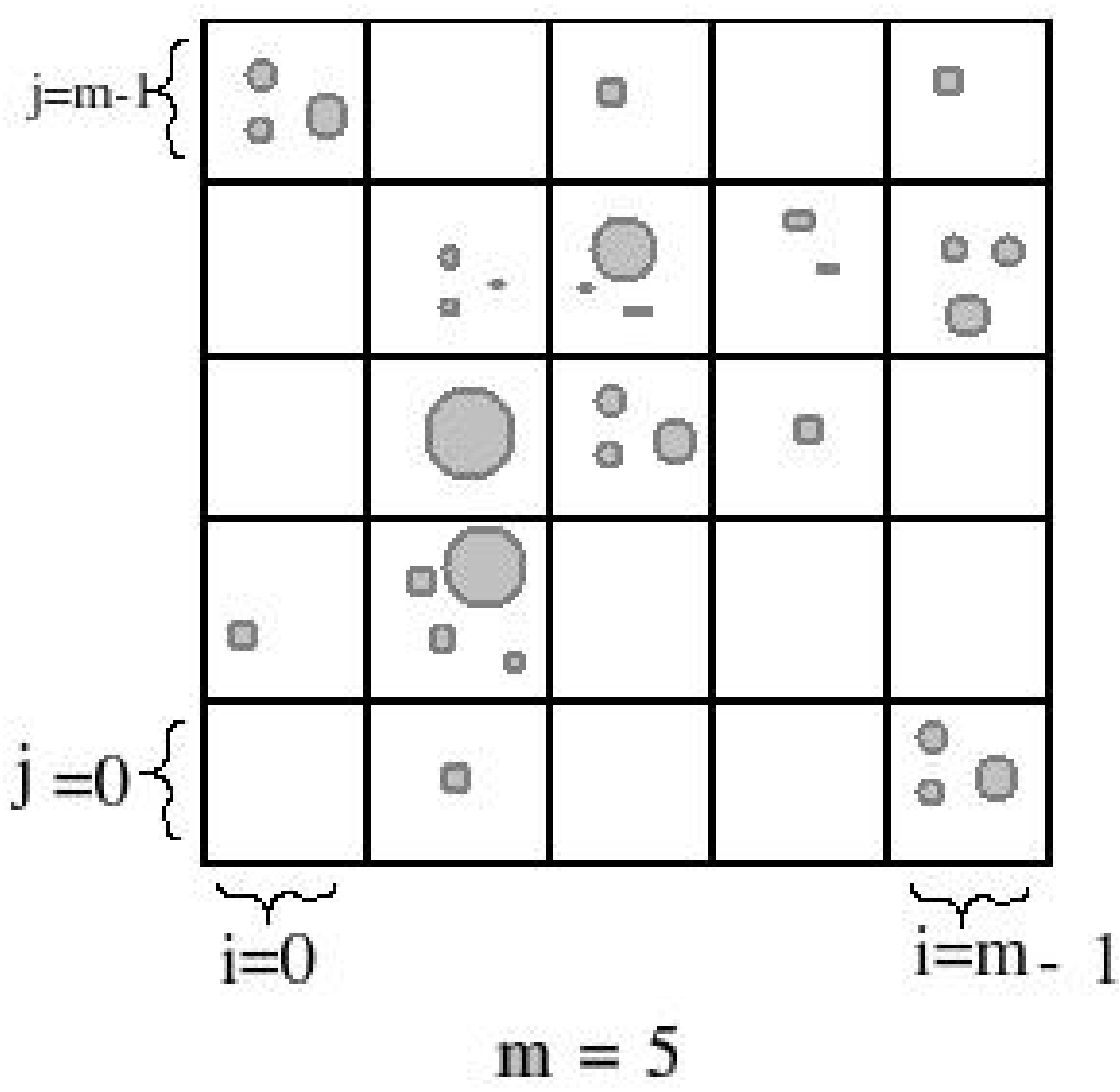


Figura 2: segmentação do plano

Integração Temporal

Depois de calculadas as colisões e as forças envolvidas, integramos a 2ª lei de Newton para obter o movimento. No trabalho realizado utilizamos métodos de primeira e de segunda ordem. As equações utilizadas são mostradas ao lado. Ao utilizar o método de 2ª ordem conseguimos obter bons resultados utilizando incrementos de tempo relativamente altos quando comparados com os incrementos necessários para fazer o método de 1ª ordem funcionar adequadamente.

Resultados

Os resultados simulados são mostrados a seguir. Na figura 3 deixamos um bloco compacto de 500 partículas atingir o solo a partir do repouso em uma pequena altura. A sequência mostra o bloco instantes antes e depois do choque com a superfície e a degeneração do bloco.

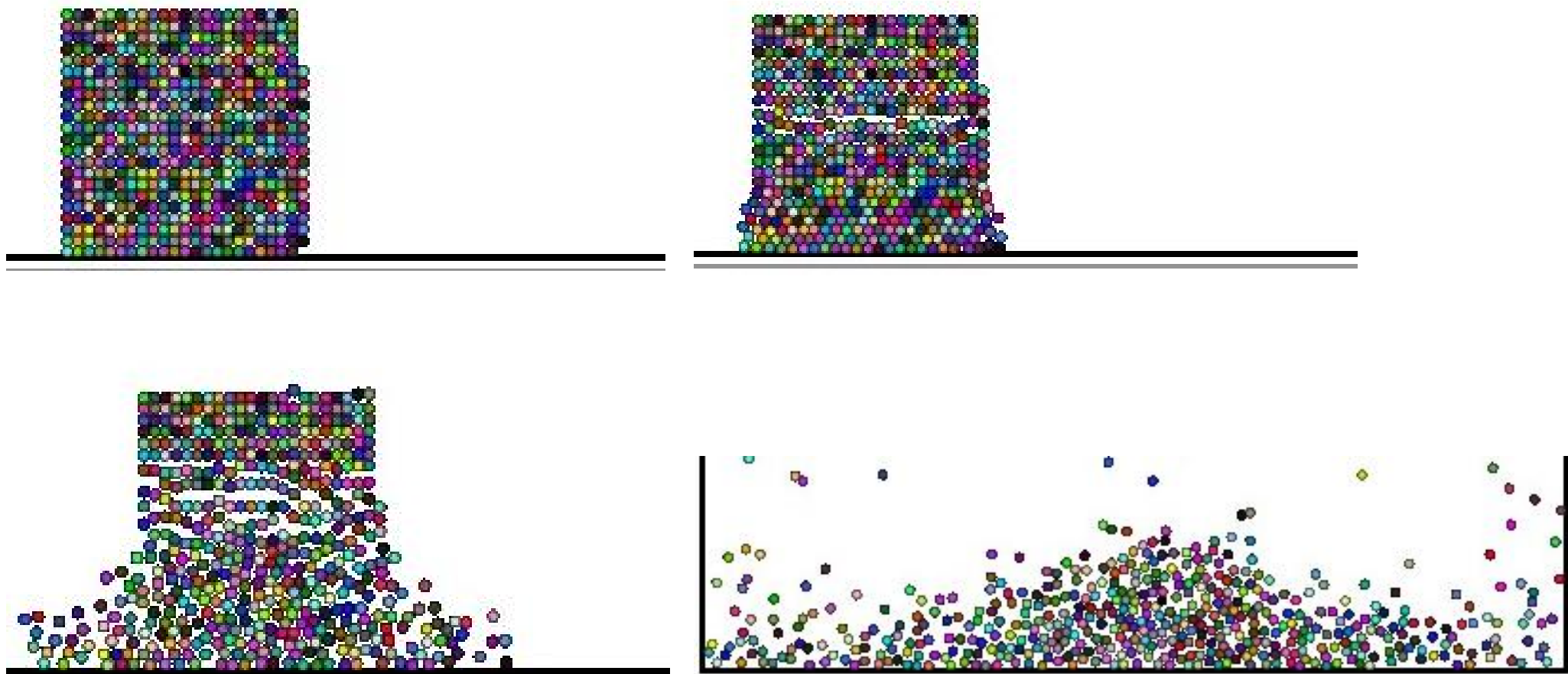


Figura 3: bloco compacto atinge o solo

Na figura 4 colidimos um bloco denso móvel menor com um bloco denso maior inicialmente em repouso. A sequência mostra instantes imediatamente antes e depois da colisão e a degeneração dos blocos.

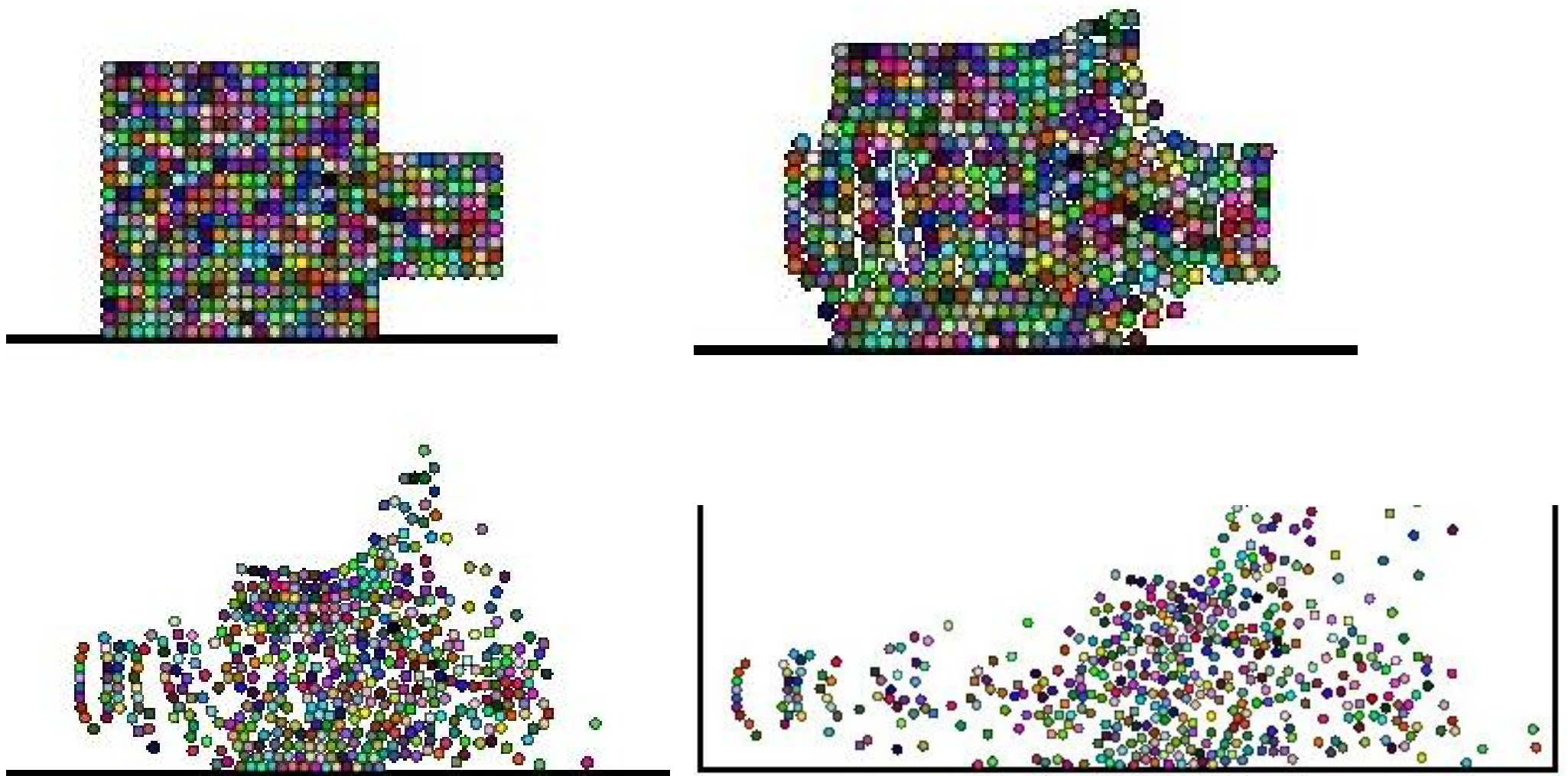


Figura 4: bloco compacto atinge o solo

Na figura 5 vemos um gráfico comparando o algoritmo desenvolvido de procura por colisões com hash e o algoritmo trivial de cálculo de todos os pares possíveis. Os dados experimentais são marcados como pontos e as linhas contínuas são regressões feitas sobre os dados. O gráfico e a regressão obtida nos mostram que nosso algoritmo baseado em hash é linear, enquanto o algoritmo trivial é quadrático. Outra vantagem de nosso algoritmo é que ele é insensível ao número de partículas nas paredes. Ou seja, o custo computacional é função apenas das partículas móveis, diferentemente do algoritmo trivial, onde todas as partículas entram na conta do custo.

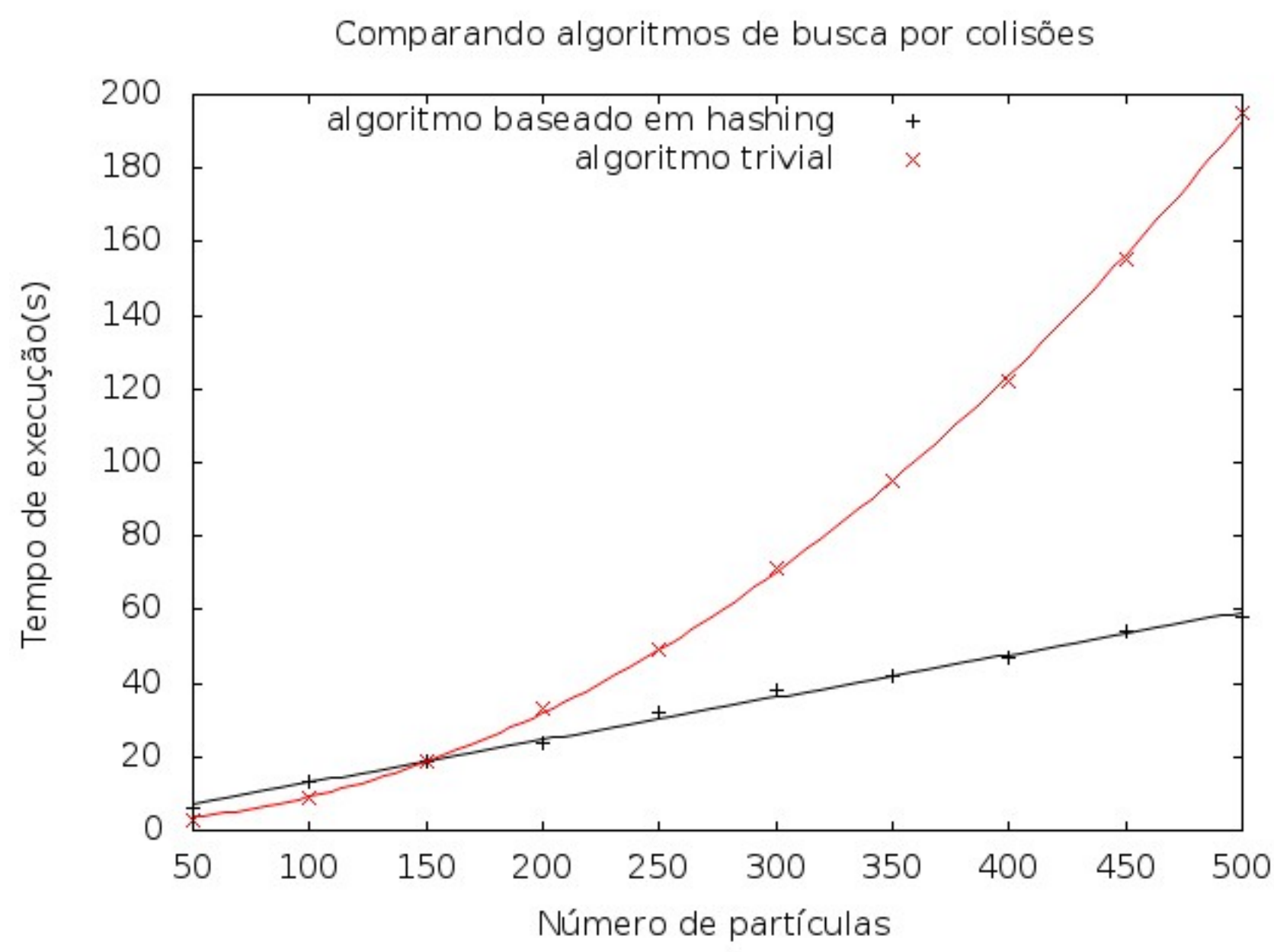


Figura 5: comparando o algoritmo desenvolvido

Conclusões

- O uso de Dinâmica Molecular provê um método simples para simulação de material granular.
- A calibração das constantes envolvidas é etapa importante no desenvolvimento de um simulador.
- A utilização de uma tabela de dispersão reduz o custo computacional para determinação de colisões.
- O custo computacional para se atingir bons resultados pode ser reduzido ao utilizarmos algoritmos de integração temporal de ordem mais alta. Dessa forma podemos utilizar incrementos de tempo maior em troca de precisarmos de mais memória para guardar instantes de tempo anteriores.

Pesquisa Futura

Tendo desenvolvido o simulador para trabalhar com a dinâmica de materiais granulares, a continuação do trabalho é resolver numericamente as equações que regem os fluidos para então simular a interação fluido-partícula. Dentre as ferramentas a serem utilizadas para o equacionamento do fluido estão: diferenças finitas, para lidar com equações diferenciais, métodos de solução iterativa de sistemas lineares e o algoritmo de Chorin para solução de Navier-Stokes.