

Ruan Cardoso Comelli

Meu título

Florianópolis

2017

Ruan Cardoso Comelli

Meu título

Trabalho apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para a obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica

Orientador: Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.

Florianópolis

2017

Ruan Cardoso Comelli

Meu título/ Ruan Cardoso Comelli. – Florianópolis, 2017-
46 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica, 2017.

1. Palavra-chave1. 2. Palavra-chave2. 2. Palavra-chave3. I. Orientador. II. Univer-
sidade xxx. III. Faculdade de xxx. IV. Título

Errata

*** *Aqui a errata* ***

Ruan Cardoso Comelli

Meu título

Trabalho apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para a obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Este Trabalho de Curso foi julgado adequado para a obtenção do título de Engenheiro Mecânico e aprovado em sua forma final pela Comissão examinadora e pelo Curso de Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Prof. Antônio Fábio Carvalho da Silva,
Dr. Eng.
Orientador

Professor

Professor

Florianópolis
2017

*** *Aqui a dedicatória* ***

Agradecimentos

*** *Agradecimentos aqui* ***

*** *Aqui a epígrafe* ***

Resumo

*** *Aqui o resumo* ***

Palavras-chave: *** *palavras-chave aqui* ***

Abstract

*** *Abstract here* ***

Keywords: *** *keywords here* ***

Lista de ilustrações

Lista de tabelas

Lista de abreviaturas e siglas

DEM	Método de Elementos Discretos (<i>Discrete Element Method</i>)
SINMEC	Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor

Lista de símbolos

Γ	Letra grega Gama
Λ	Lambda
ζ	Letra grega minúscula zeta
\in	Pertence

Sumário

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Motivação	27
1.2	Revisão Bibliográfica	28
1.2.1	Sistemas de Partículas	28
1.2.2	O Método dos Elementos Discretos	28
1.2.3	Simuladores Existentes	28
1.3	Objetivos e Contribuições	28
1.4	Organização do Trabalho	29
1.5	Notação Empregada	29
2	MODELO MATEMÁTICO	31
2.1	Equações de Movimento	31
2.2	Modelos de Força de Colisão	31
2.3	Extrapolação de Funções	31
2.4	O Algoritmo de Gear	33
2.4.1	Predição	34
2.4.2	Correção	34
3	O MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS	35
3.1		35
3.2	Acoplamento com outros métodos	35
4	IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL	37
5	CONCLUSÃO	39
	REFERÊNCIAS	41
	APÊNDICES	43
	ANEXOS	45

1 Introdução

1.1 Motivação

A compreensão acerca do comportamento de sistemas de partículas e de materiais granulados cresceu enormemente nas últimas décadas devido aos esforços da ciência e da engenharia. Tais sistemas são amplamente encontrados em processos industriais e nas ciências naturais (Pöschel e Schwager, 2005), tais como matemática aplicada, física de matéria condensada, geomecânica, agricultura, engenharia química, engenharia civil e engenharia mecânica (Ai et al., 2010).

Esses conhecimentos são aplicados na previsão do comportamento mecânico de geomateriais, como rochas, e da propagação de trincas e fraturas em sólidos, na simulação da produção de fármacos, alimentos, detergentes e cosméticos, no desenvolvimento de novos materiais e na modelagem da fragmentação, sedimentação, granulação, escavação, transporte e armazenamento de grãos e do escoamento em máquinas extrusoras (Donzé, Richefeu e Magnier, 2009; Gallas et al., 1996; Marigo e Stitt, 2015).

**** Imagens de aplicações aqui ****

Sendo assim, surge a necessidade de se compreender a mecânica das partículas.

A análise de sistemas de partículas, contudo, costuma ser bastante complexa. Partículas podem interagir umas com as outras e com o meio em que estão imersas. As interações podem ser forças de contato, forças de corpo, trocas de calor, trocas de carga elétrica, entre outras. Ainda, a quantidade de partículas presentes no sistema de interesse pode facilmente alcançar a ordem dos milhões (Pöschel e Schwager, 2005). Além dessas dificuldades, os problemas estudados geralmente assumem geometrias distintas, tais quais a mistura de substâncias para a produção de fármacos ou o transporte de carga a granel.

Com o propósito de executar tais análises, existem três abordagens principais: a experimental, a analítica e a numérica.

No método experimental, procura-se caracterizar os fenômenos físicos através da sua reprodução em ambientes controlados. A grande vantagem desse método é o fato de lidar com a configuração real do sistema estudado. A experimentação, no entanto, resulta em altíssimo custo e muitas vezes é limitada por questões de segurança ou pela dificuldade de reprodução do sistema real. A experimentação é utilizada para validar modelos físicos e matemáticos (Maliska, 2004).

A abordagem analítica, por sua vez, busca a obtenção de soluções analíticas para o problema. A vantagem de se obterem soluções em forma fechada é seu baixíssimo

custo de computação quando comparado aos outros métodos. O método analítico, porém, frequentemente depende de hipóteses simplificativas e de geometrias e condições de contorno simples, o que acaba por reduzir a aplicabilidade dessas soluções. Geralmente, utilizam-se soluções analíticas para validar soluções numéricas e auxiliar na busca de métodos mais robustos (Maliska, 2004).

A fim de conciliar exatidão e eficiência, os métodos numéricos despontam como uma poderosa ferramenta capaz de resolver problemas complexos, com geometrias complicadas e grande número de partículas, alcançando, apesar disso, uma elevada rapidez e baixíssimo custo (Maliska, 2004).

Sendo assim, o estudo de sistemas de partículas conta principalmente com a simulação numérica como método de análise.

1.2 Revisão Bibliográfica

1.2.1 Sistemas de Partículas

A definição de partícula não é um consenso entre autores, cada um adotando o conceito mais adequado à aplicação. De forma geral, compreende-se por *partícula* um objeto ao qual são atribuídas propriedades físicas, mas cuja estrutura interna é desconsiderada.

1.2.2 O Método dos Elementos Discretos

*** Falar que DEM=Método de Elementos Discretos e que é possível acoplá-lo com outras famílias de métodos, como CFD, originando o XDEM. ***

1.2.3 Simuladores Existentes

Para suprir essa necessidade, existem diversos *softwares* comerciais e de código aberto, cada qual com seus objetivos, vantagens e desvantagens. Os principais simuladores existentes

*** Citar Rocky, LIGGGHTS e EDEM. Além disso, existem Yade, PFC (Particle Flow Code) ***

1.3 Objetivos e Contribuições

*** Falar do interesse do SINMEC, do acoplamento, e que era necessário, primeiramente, compreender o problema e, em segundo lugar, possuir um programa que se acoplassem facilmente com trabalhos posteriores. Apresentar objetivos e objetivos específicos. ***

Os objetivos deste trabalho são:

1. Desenvolver uma biblioteca computacional para a simulação da dinâmica de partículas através do DEM. Essa biblioteca deve possuir as seguintes características: **** Revisar essas características ****
 - a) Métodos para a importação e exportação de dados;
 - b) Suporte para diferentes modelos de colisão, inclusive para modelos estudados e implementados por um usuário posterior;
 - c) Suporte para um número arbitrário de partículas, as quais podem assumir diferentes formas geométricas e possuir várias propriedades físicas;
 - d) Suporte para a inserção de diferentes tipos de interação entre as partículas. Por exemplo, deve ser possível, com o mínimo de esforço, desenvolver simuladores que, com base na biblioteca, simulem problemas de diversas naturezas físicas, como a movimentação de planetas, a deposição de átomos sobre estruturas, a transferência de calor entre partículas, interações eletrodinâmicas, entre outras.
 - e) Suporte para variadas funções de busca de partículas vizinhas;
2. Implementar um simulador **** descrever esse simulador. Quais são seus objetivos? ****

1.4 Organização do Trabalho

1.5 Notação Empregada

Para facilitar a leitura, algumas convenções são empregadas para a representação de termos matemáticos. **** Quais? Falar dos vetores e das derivadas temporais ****

2 Modelo Matemático

Segundo [Maliska \(2004\)](#), a solução numérica de qualquer problema físico requer sua prévia modelagem matemática. Um modelo matemático é uma representação de um sistema real através de equações. Essas equações são obtidas ao se fazerem hipóteses sobre o comportamento do sistema estudado, e a representatividade do modelo depende das simplificações feitas nesse processo.

**** Falar de métodos explícitos e comentar que o passo de tempo é representado por Δt ****

2.1 Equações de Movimento

Na dinâmica de partículas, os elementos estudados são considerados corpos rígidos ([Pöschel e Schwager, 2005](#)), aos quais aplicam-se a Segunda Lei de Newton (2.1) e a equação de Euler (??).

Seja \mathcal{P} uma partícula de massa m cuja posição é descrita, em função do tempo, pela função \mathbf{r} . **** Como abordar a questão dos ângulos de Euler? ****

A Segunda Lei de Newton afirma que

$$\mathbf{F}_R = m \cdot \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \quad (2.1)$$

2.2 Modelos de Força de Colisão

[Sampaio \(2017\)](#)

2.3 Extrapolação de Funções

Nos métodos numéricos, a extrapolação de funções possui um papel fundamental por permitir a estimativa dos valores das funções além do conjunto previamente conhecido.

Para simplificação da notação, dada uma função $y : X \rightarrow Y$, define-se

$$y^{[n]} = (y, y', y'', \dots, y^{(n)})$$

nos pontos em que todas as coordenadas estiverem definidas.

Conforme demonstrado por [Brezinski e Zaglia \(2013\)](#), métodos de extrapolação lineares para uma função e suas derivadas podem ser escritos na forma

$$\begin{pmatrix} y^{\text{Pr}} \\ \dot{y}^{\text{Pr}} \\ \ddot{y}^{\text{Pr}} \\ \vdots \\ y^{(n)\text{Pr}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & \cdots & a_{0,n} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & & a_{1,n} \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n,0} & a_{n,1} & & a_{n,n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y \\ \dot{y} \\ \ddot{y} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{pmatrix}$$

ou, de forma mais simples,

$$y^{[n]\text{Pr}} = A \cdot y^{[n]} \quad (2.2)$$

*** Falar que existem diversos métodos de extrapolação e dizer por que escolhemos o de Taylor ***

Teorema 2.1 (Teorema de Taylor). *Seja y uma função com derivadas $y', \dots, y^{(k+1)}$ todas definidas em um conjunto que contenha $[t, t + \Delta t]$, e seja $R_{k,t,y}$ definida por*

$$y(t + \Delta t) = y(t) + y'(t) \cdot \Delta t + \cdots + \frac{y^{(k)}(t)}{k!} \cdot \Delta t^k + R_{k,t,y}(\Delta t).$$

Então

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{R_{k,t,y}(\Delta t)}{\Delta t^k} = 0. \quad (2.3)$$

Uma versão mais completa desse teorema é apresentada e demonstrada por [Spivak \(1994\)](#).

A função $R_{k,t,y}$ é o resto de ordem k para a função y no entorno de t . A equação (2.3) indica que o resto é um termo da ordem de Δt^{k+1} , e motiva a aproximação

$$y(t + \Delta t) \cong y(t) + y'(t) \cdot \Delta t + \cdots + \frac{y^{(k)}(t)}{k!} \cdot \Delta t^k. \quad (2.4)$$

Considerando uma função $\mathbf{F} : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$, o [Teorema de Taylor](#) pode ser aplicado a cada uma de suas funções coordenadas¹, resultando em uma expansão similar à da equação (2.4). Os casos de interesse são $m = 1$, para funções reais; $m = 2$, para vetores bidimensionais como a posição de uma partícula em uma simulação em duas dimensões; e $m = 3$, para simulações em três dimensões.

Assim, o [Teorema de Taylor](#) permite a estimativa do valor de uma função em um ponto $t + \Delta t$ a partir do valor da função e de suas derivadas em um ponto t , e essa estimativa será tanto melhor quanto menor for o valor de Δt .

¹ Escrevendo $\mathbf{F}(t) = (F_1(t), \dots, F_m(t))$, a i -ésima função coordenada de \mathbf{F} é a função F_i .

Com isso, seja \mathbf{r} a função posição de uma partícula. Se a posição for conhecida em um instante de tempo t , ela pode ser *prevista* em um instante posterior $t + \Delta t$ explicitamente:

$$\mathbf{r}^{\text{pr}}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}(t) + \cdots + \frac{\Delta t^k}{k!} \cdot \frac{d^k\mathbf{r}}{dt^k}(t). \quad (2.5)$$

Não somente a posição pode ser prevista, mas suas derivadas (como a velocidade e a aceleração) também:

$$\frac{d\mathbf{r}^{\text{pr}}}{dt}(t + \Delta t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt}(t) + \Delta t \cdot \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}(t) + \cdots + \frac{\Delta t^{k-1}}{(k-1)!} \cdot \frac{d^{k-1}\mathbf{r}}{dt^{k-1}}(t) \quad (2.6)$$

$$\frac{d^2\mathbf{r}^{\text{pr}}}{dt^2}(t + \Delta t) = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}(t) + \cdots + \frac{\Delta t^{k-2}}{(k-2)!} \cdot \frac{d^{k-2}\mathbf{r}}{dt^{k-2}}(t) \quad (2.7)$$

Esse método de extrapolação ainda pode ser aplicado à função de orientação da partícula e a outros graus de liberdade que o problema porventura exija.

Outros métodos de extrapolação bastante utilizados são o método de Richardson e os métodos de Runge-Kutta possuem diferentes comportamentos em termos de exatidão e estabilidade (Gear, 1971).

Com isso, é possível prever os valores das funções de interesse de maneira bastante razoável. No entanto essa predição geralmente não é exata. Uma das razões para isto é que o truncamento da expansão de Taylor, ou qualquer outro método de extrapolação que se use, despreza a função resto, que não é necessariamente nula. Ainda assim, essa diferença é aceitável quando se utilizam passos de tempo suficientemente pequenos.

A principal fonte de erros da equação (2.5) é que não se considera, em nenhum momento, a ação de forças externas que porventura atuem sobre a partícula entre os instantes t e $t + \Delta t$. É necessário, então, *corrigir* a posição prevista. Essa correção pode ser feita através do algoritmo de Gear, apresentado na seção 2.4.

2.4 O Algoritmo de Gear

*** Reescrever isso: ***

Gear (1971) considerou o problema de extrapolar funções sujeitas a equações diferenciais. Dada uma função y tal que $y(t_0), y'(t_0), \dots, y^{(p)}(t_0)$ existem e são bem conhecidos, o objetivo é determinar os valores de $y(t_0 + \Delta t), y'(t_0 + \Delta t), \dots, y^{(p)}(t_0 + \Delta t)$ sabendo que y deve satisfazer uma equação diferencial da forma

$$y^{(p)} = f(y, y', \dots, y^{(p-1)}, t).$$

Do resultado desse estudo originou-se o que é conhecido por algoritmo de Gear (Pöschel e Schwager, 2005). O algoritmo consiste de duas etapas: a *predição* e a *correção*.

2.4.1 Predição

A etapa de predição é responsável por obter uma estimativa para $y(t_0 + \Delta t), y'(t_0 + \Delta t), \dots, y^{(p)}(t_0 + \Delta t)$.

A predição é feita através de extrapolações, e é comum utilizarem-se extrapolações polinomiais. Dentre os principais métodos de extrapolação polinomial estão a extrapolação por expansão de Taylor, extrapolação de Richardson e interpolação de Aitken (Gear, 1971).

2.4.2 Correção

Primeiramente, define-se uma função de erro

$$F(\mathbf{a}) = \frac{\Delta t^p}{p!} \cdot f\left(a_0, \frac{a_1}{\Delta t}, \frac{2a_2}{\Delta t^2}, \dots, \frac{(p-1)! \cdot a_{p-1}}{\Delta t^{p-1}}, t\right) - a_p$$

*** Continuar ***

3 O Método de Elementos Discretos

O Método de Elementos Discretos, ou DEM¹, **** Explicar que é um tipo de método explícito no tempo, com partículas que interagem entre si ****

3.1

3.2 Acoplamento com outros métodos

¹ Do inglês, *Discrete Element Method*

4 Implementação Computacional

5 Conclusão

Referências

- AI, J. et al. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technology*, 2010. Citado na página 27.
- BREZINSKI, C.; ZAGLIA, M. R. *Extrapolation Methods: Theory and Practice*. [S.l.]: Elsevier Science, 2013. v. 2. (Studies in Computational Mathematics, v. 2). Citado na página 31.
- DONZÉ, F. V.; RICHEFEU, V.; MAGNIER, S.-A. Advances in discrete element method applied to soil, rock and concrete mechanics. *Electronic Journal of Geotechnical Engineering*, 2009. Citado na página 27.
- GALLAS, J. A. C. et al. Molecular dynamics simulation of size segregation in three dimensions. *Journal of Statistical Physics*, v. 82, 1996. Citado na página 27.
- GEAR, C. W. *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. [S.l.]: Prentice-Hall, Inc., 1971. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. [S.l.]: LTC Editora, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 27, 28 e 31.
- MARIGO, M.; STITT, E. H. Discrete element method (dem) for industrial applications: Comments on calibration and validation for the modelling of cylindrical pellets. *KONA Powder and Particle Journal*, 2015. Citado na página 27.
- PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. *Computational Granular Dynamics*. 1. ed. [S.l.]: Springer, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 27, 31 e 34.
- SAMPAIO, M. A. B. *O Método dos Elementos Discretos com Superelipsóides usando a Parametrização das Rotações de Rodrigues*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2017. Citado na página 31.
- SPIVAK, M. *Calculus*. 3. ed. [S.l.: s.n.], 1994. Citado na página 32.

Apêndices

Anexos

