

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

ESTUDO COMPUTACIONAL DA REOLOGIA DE ESCOAMENTO DE GRÃOS

Letícia Oliveira Silva¹ - eng.leticia@live.com

Allbens Atman Picardi Faria^{1,2,3} - atman@cefetmg.br

¹Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET/MG, Belo Horizonte, MG, Brasil.

²Departamento de Física, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET/MG, Belo Horizonte, MG, Brasil

³Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Sistemas Complexos, INCT-SC.

Resumo. *O estudo da reologia $\mu(I)$ a partir do cisalhamento de um meio granular é estudado em relação a quantidade adimensional que é denominada número de inércia I . Um dos principais objetivos nos estudos relacionados à reologia $\mu(I)$ é a verificação do funcional que rege a dependência entre as variáveis reológicas, como a granulometria dos grãos e suas interações. Neste trabalho, realizamos simulações utilizando o método de Dinâmica Molecular através da técnica Gear Predictor-Corrector de 3ª ordem e empregando o algoritmo Velocity Verlet. Nesta etapa, o objetivo foi verificar o comportamento do perfil de velocidades médias dos grãos durante o escoamento de um material granular confinado através de um funil bidimensional. A verificação foi realizada a partir da comparação dos dados de simulação com a previsão analítica para o comportamento da velocidade em função da distância até o centro de um funil bidimensional utilizando o princípio da conservação de massa.*

Palavras-chave: *Materiais granulares, Dinâmica molecular, Reologia, Número de Inércia, Escoamento de grãos.*

1. INTRODUÇÃO

A reologia $\mu(I)$ é um tema que tem atraído bastante atenção da literatura nos últimos anos por ser um assunto de extrema importância, tanto a academia quanto para a indústria. Materiais granulares são constituídos de grãos em contato formando um sistema de partículas compreendendo conjuntos de grãos individuais ou aglomerados, que podem abranger várias ordens de magnitude em tamanho. Brita, carvão, areia, arroz e café são alguns exemplos de materiais granulares encontrados em nosso dia a dia. As propriedades mecânicas macroscópicas desses materiais estão ligadas às propriedades mecânicas de cada componente, bem como às suas interações (Atman et al., 2005; da Cruz et al., 2005). Materiais granulares são atuantes em diversas áreas, como na agricultura, na indústria de construção e indústria farmacêutica. O deslocamento e o estoque de grãos foram as primeiras adversidades que surgiram, e até hoje

métodos obsoletos e ineficazes são empregados para realização dessas funções. Com o avanço da indústria, esses materiais passaram a ser utilizados em métodos cada vez mais relevantes e a necessidade do refinamento das técnicas cominou por uma melhor compreensão de suas propriedades, exigindo uma demanda por descrições mais nítidas dos fenômenos envolvendo materiais granulares (Atman et al., 2005). O meio granular pode exibir diferentes estados da matéria e variedade de comportamentos com propriedades únicas. Dependendo do modo como é empregado, um material granular pode se comportar como um sólido, um líquido ou um gás. A capacidade de um conjunto granular tem de se comportar como um sólido, um líquido ou mesmo um gás dependendo da condução externa está relacionada à ocorrência de estados metaestáveis, além disso, esses materiais podem manifestar histerese e uma série de outros fenômenos. Estes materiais são desordenados no nível dos grãos, mas se comportam como um sólido ou um fluido no nível macroscópico, exibindo fenômenos como arqueamento, avalanches e segregação (Duran & Reisinger & Gennes, 1999; Atman et al., 2005; Andreotti & Forterre & Pouliquen, 2013).

O estudo dos materiais granulares é hoje um dos temas de pesquisa em física teórica mais relevantes, pois nenhuma teoria consolidada foi capaz de prever os fenômenos apresentados por estes materiais (Duran & Reisinger & Gennes, 1999; Atman et al., 2005). Seja pela ubiquidade desses materiais em nosso cotidiano, seja pelo grande impacto industrial de suas aplicações, este tema é hoje de amplo interesse de pesquisadores (Andreotti & Forterre & Pouliquen, 2013).

Além da área acadêmica, as indústrias de cimento, farmacêutica, alimentícia e petrolífera são possíveis favorecidas pelos eventuais frutos do presente projeto. Na área acadêmica, os aspectos físicos, matemáticos e computacionais são de significativa relevância para inúmeras disciplinas tais como ciência dos materiais, geologia, engenharia civil, matemática aplicada, computação e modelagem computacional (Duran & Reisinger & Gennes, 1999; Atman et al., 2005; Andreotti & Forterre & Pouliquen, 2013).

O estudo da reologia $\mu(I)$ a partir do cisalhamento de um meio granular é estudado em relação a quantidade adimensional que é denominada como número de inércia (I), como pode ser visto na Eq. (1), que descreve a proporção de massa m para as forças de inércia e pressão. Seu valor está vinculado diretamente às particularidades do regime, portanto para um regime *quasi-estático* ($I \leq 10^{-2}$) e para um regime colisional ($I \geq 0,2$) (da Cruz et al., 2005).

$$I = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{m}{P}} \quad (1)$$

Um dos principais objetivos nos estudos relacionados à reologia $\mu(I)$ é a verificação do funcional que rege a dependência entre as variáveis reológicas, como a granulometria dos grãos e suas interações. Assim, o coeficiente de atrito efetivo μ^* (Eq. (2)), a pressão P e a tensão de cisalhamento S , interferem efetivamente na função da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ (da Cruz et al., 2005).

$$\mu^* = \frac{S}{P} \quad (2)$$

Nesta etapa, o objetivo foi verificar o comportamento do perfil de velocidades médias dos grãos durante o escoamento de um material granular confinado através de um funil bidimensional. Considerando um sistema sem gravidade e com uma pressão aplicada nas camadas mais externas, retiramos grãos do centro do sistema e os recolocamos na margem da amostra

formada, conforme a Figura 1 demonstra. Esse tipo de geometria permite que ocorra o cisalhamento onde o número de inércia varia em função da distância até o centro do funil.

Este trabalho tem como objetivo final obter a razão entre a diferença das tensões medidas pela soma das mesmas em função do número de inércia, mas como primeira etapa a verificação foi realizada a partir da comparação dos dados de simulação com a previsão analítica para o comportamento da velocidade em função da distância até o centro de um funil bidimensional utilizando o princípio da conservação de massa.

2. METODOLOGIA

Realizamos simulações utilizando o método de Dinâmica Molecular através da técnica *Gear Predictor-Corrector* de 3ª ordem empregando o algoritmo *Velocity Verlet*. Dadas as posições e velocidades das partículas no tempo t , tentamos prever as posições, velocidades e acelerações em um tempo $t + \Delta t$, usando os valores atuais dessas grandezas.

A ideia geral de um passo de simulação de Dinâmica Molecular é baseada em um algoritmo *Predictor-Corrector*: primeiramente se faz a lista de partículas vizinhas (Procura de Vizinhos), então prediz onde estarão as partículas no instante de tempo subsequente (Preditor), busca os contatos que foram formados com a predição (Detectar Contatos), calcula as forças entre cada partícula em contato (Cálculo de Forças) e corrige as predições de velocidade e aceleração de cada partícula (Corretor). Dadas as posições das partículas, velocidades e outras informações dinâmicas no tempo t , tentamos obter as velocidades das posições em um momento posterior $t + \Delta t$, com um grau de precisão suficiente. Se a trajetória clássica é contínua, então uma estimativa da posição, velocidade e aceleração no tempo $t + \Delta t$ pode ser obtida pela expansão em série de Taylor em torno do tempo até segunda ordem (Allen & Tildesley, 1987).

As listas de *Verlet* são utilizadas em simulações de Dinâmica Molecular para manter eficiente a procura de vizinhos, o sistema é dividido em “caixas” e cada caixa conhece seu vizinho. Na simulação, o cálculo das forças é feito tendo em vista unicamente as partículas da lista, que é atualizada com frequência menor do que a frequência com que são calculadas as forças (Allen & Tildesley, 1987). O uso de listas para identificar os vizinhos mais próximos reduz o custo computacional. A complexidade total do algoritmo, pela teoria de análise de complexidade é $N \log(N)$, sendo N o número de partículas do sistema, lembrando que para procura usual a complexidade do algoritmo era igual a $O(N^2)$.

Neste trabalho, os experimentos numéricos são executados em sistemas granulares bidimensionais formados de grãos e sujeitos a uma pressão de confinamento aplicada nas camadas mais externas. O código foi implementado em linguagem Fortran utilizando os parâmetros descritos na Tabela 1.

Tabela 1- Parâmetros do sistema

Número de Grãos	Raio (mín/máx)	Coefficiente de Amortecimento	Raio Central	Pressão de Confinamento	Constante de mola normal e tangencial	Coefficiente de atrito efetivo
11000	0,3 e 0,5	50	10	2000	1000 e 750	0,5

O modelo reológico de Cundall e Strack, que apresenta a interação entre os grãos, consiste em considerar uma mola na direção tangencial e outra na direção normal para simular o

contato mecânico entre dois grãos (da Cruz et al., 2005). Promove-se a dinâmica do cisalhamento quando retiramos grãos do centro da amostra e os depositamos na extremidade do padrão formado com uma determinada periodicidade, conforme ilustra a Fig. 1.

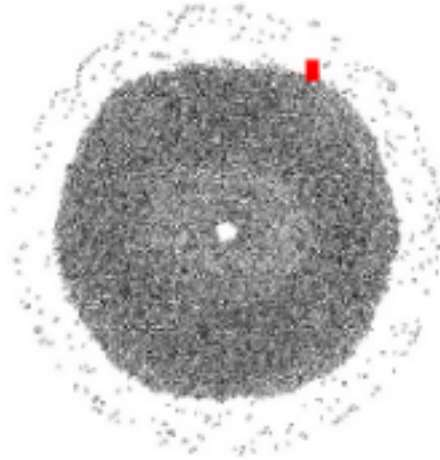


Figura 1- Padrão formado pelos grãos.

3. RESULTADOS

Buscamos relacionar o perfil de velocidades por meio do estudo computacional do escoamento de grãos confinados. A etapa de verificação do modelo foi realizada a partir da comparação dos dados de simulação com a previsão analítica para o comportamento das velocidades, utilizando o princípio da conservação de massa, para obter o funcional da velocidade em função da distância até o centro de um funil bidimensional.

Na Eq. 3, δ representa a espessura da faixa na qual os grãos estão submetidos a uma pressão de confinamento aplicada a partir de uma distância (R). A medida de R é obtida a partir do centro da circunferência. A variável ϕ configura o fator de empacotamento e $\frac{\pi d^2}{4}$ a área de um grão. Para a equação do lado direito da igualdade, \dot{n} indica a taxa em que os grãos são retirados da amostra e Δt o tempo gasto para o grão retornar a amostra. Logo, esta equação mostra duas maneiras de se obter o número de partículas. Do lado esquerdo a partir da lei de conservação de massa e do lado oposto a partir da taxa de extração de grãos.

$$\frac{\delta 2\pi R \phi}{\pi d^2 / 4} = \dot{n} \Delta t \quad (3)$$

Sabendo que,

$$\delta = v(R) \Delta t \quad (4)$$

$$d = 2r \quad (5)$$

onde r é o raio do grão

$$\frac{v(R)\Delta t 2\pi R\phi}{\pi d^2/4} = \dot{n}\Delta t \quad (6)$$

$$v(R) = \frac{\dot{n}d^2}{8R\phi} \quad (7)$$

$$v(R) = \frac{\dot{n}r^2}{2R\phi} \quad (8)$$

Isolando v , obtemos:

$$v(R) = \frac{\dot{n}r^2}{2\phi} \frac{1}{R} \quad (9)$$

Nota-se que a dependência de v em função do raio R é hiperbólica. Deste modo, na Figura 2 é mostrado o ajuste hiperbólico dos dados de simulação, os dados experimentais (símbolos na Figura 2) e o resultado analítico. Percebe-se a excelente concordância verificada entre a previsão teórica e os dados de simulação que permitem concluir que a fase de verificação foi bem sucedida.

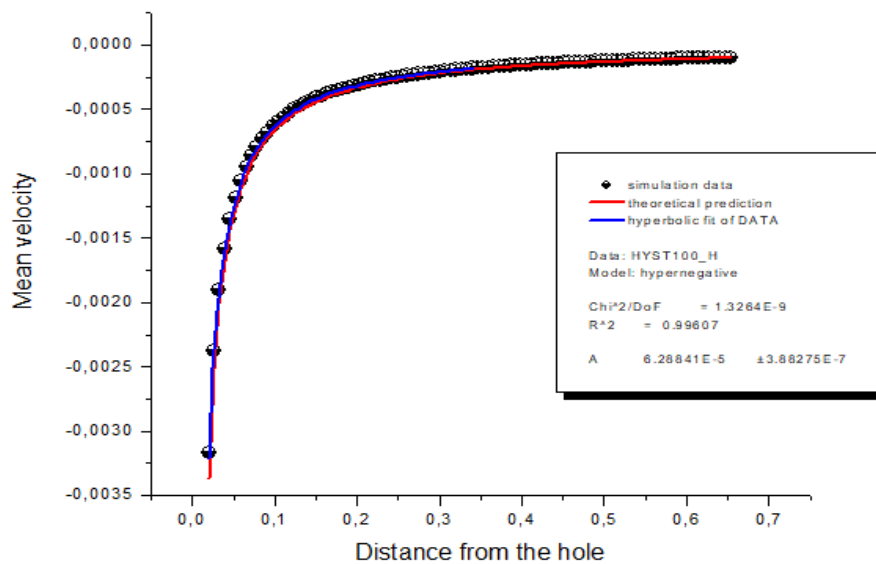


Figura 2- Velocidade média dos grãos em função da distância.

No gráfico a curva na cor azul representa um ajuste de função hiperbólica e a curva na cor vermelha representa a teoria. Nota-se que o valor previsto na teoria é $v(R) = 6,59 \times 10^{-5} 1/R$ é bastante satisfatório de acordo com a inspeção visual da Figura 2.

4. CONCLUSÕES

Este trabalho dispõe como objetivo obter a razão entre a diferença das tensões medidas pela soma das mesmas em função do número de inércia, através da primeira etapa a verificação a partir da comparação dos dados de simulação com a previsão analítica para o comportamento da velocidade em função da distância até o centro de um funil bidimensional utilizando o princípio da conservação de massa.

A partir desse objetivo, estudamos o perfil de velocidades por meio de simulações computacionais durante o escoamento de um material granular confinado. Este modelo para perfil de velocidades foi verificado através de cálculos teóricos utilizando o princípio da conservação da massa para obter o funcional da velocidade, que descreve a velocidade média dos grãos em função da distância até o centro do funil. O valor previsto na teoria $v(R) = 6,59 \times 10^{-5} 1/R$ nos permitiu comparar com o valor obtido a partir dos dados de simulação com a previsão analítica $v(R) = 6,28 \times 10^{-5} 1/R$. Nota-se que o valor previsto na teoria $v(R) = 6,59 \times 10^{-5} 1/R$ é bastante satisfatório de acordo com a inspeção visual da Figura 2. É possível perceber a excelente concordância verificada entre a previsão teórica e os dados de simulação que permitem concluir que a fase de verificação foi bem sucedida. A próxima etapa neste trabalho será a obtenção de perfis de tensão normal e tangencial desse sistema.

Agradecimentos

Agradecemos ao CEFET-MG que nos fornece materiais e condições para desenvolver essa pesquisa. Agradecimento especial ao CEFET-MG e CAPES pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- Allen, M.P. and Tildesley, D.J. (1987), Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, New York.
- Andreotti, B., Forterre, Y., Pouliquen, O. (2013), Granular Media: Between Fluid and Solid, Cambridge University Press, Cambridge.
- Atman, A. P. F., Brunet, P., Geng, J., Rey-dellet, G., Combe, G., Claudin, P., Behringer, R. P., Clement, E. (2005), Sensitivity of the stress response function to packing preparation, Journal of Physics: Condensed Matter, vol 17, Number 24.
- da Cruz, F., Emam, S M. Prochnow, Roux J. N. and Chevoir, F. (2005), Rheophysics of dense granular materials: discrete simulation of plane shear flows, Physical Review E. 72, 021309.
- Duran, J., Reisinger, A., Gennes, P. (1999), Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials. Springer, New York.

REOLOGICAL COMPUTATIONAL STUDY DURING GRAIN DISPLACEMENT

Abstract. *The study of the rheology $\mu(I)$ from the shear of a granular medium is studied in relation to the dimensionless quantity that is denominated as number of inertia (I). One of the main objectives in the studies related to rheology $\mu(I)$ is the functional verification that governs the dependence of rheological variables, such as grain size and their interactions. In this work, we performed simulations using the Molecular Dynamics method using the Gear Predictor-Corrector technique of 3rd order and using the Velocity Verlet algorithm. In this step, the objective was to verify the behavior of the average grain velocity profile during the flow of a confined granular material through a two-dimensional funnel. The verification was performed by comparing the simulation data with the analytical prediction for the velocity behavior as a*

function of the distance to the center of a two-dimensional funnel using the principle of mass conservation.

Keywords: *Granular materials, Molecular dynamics, Rheology, Inertia number, Displacement of grains.*