



Calibração DEM a partir de casos disponíveis na literatura utilizando software para análise de trajetórias de partículas

Calibration DEM from cases available in literature using software to analyze particles trajectories

Victor L. S. Orso (orientado) *, Prof. Dr. Robson Gonçalves Trentin (orientador) †,
Prof. M. Eng. Joviano Janjar Casarin (coorientador) ‡

RESUMO

O método dos elementos discretos é um esquema de modelagem numérica largamente empregado para simular interações entre partículas sólidas e entre partículas e o meio em que estão. A solução adequada para os problemas de colisões entre partículas depende do processo de calibração dos parâmetros relativos ao coeficiente de restituição e às constantes de rigidez entre os pares de contato. O objetivo deste trabalho é realizar a modelagem numérica de fenômenos observados em experimentos que envolvem interações partícula-parede e partícula-meio. Os resultados numéricos são confrontados com dados experimentais descritos por artigos disponíveis na literatura. Os parâmetros utilizados nos artigos foram implantados no software Ansys Fluent com a ferramenta “*dense discrete phase model*”. Os resultados obtidos foram considerados satisfatórios, indicando a aplicabilidade do método dos elementos discretos para caracterizar as interações partícula-parede e partícula-meio.

Palavras-chave: DEM, Ansys Fluent DDPM-DEM, partículas, calibração

ABSTRACT

The discrete element method is a numerical modeling scheme widely employed to simulate interactions between solid particles and between particles and the surrounding medium. The adequate solution for the problems of collisions between particles depends on the process of calibration of the parameters related to the restitution coefficient and the spring constant of the pairs in contact. The objective of this work is to perform the numerical modeling of phenomena observed in experiments involving interactions particle-wall and particle-medium. The numerical results are confronted with experimental data described by articles available in literature. The parameters used in the articles were implanted in the software Ansys Fluent with dense discrete phase model tool. The results obtained were considered satisfactory, indicating the applicability of discrete element method to characterize the interaction particle-wall and particle-medium.

Keywords: DEM, Ansys Fluent DDPM-DEM, particles, calibration

1 INTRODUÇÃO

O método dos elementos discretos (DEM) foi desenvolvido por P. A. Cundall & Strack (1979) na década de 70 com o objetivo de analisar problemas envolvendo o comportamento de rochas. O modelo é uma

* Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pato Branco, Paraná, Brasil; victororso88@gmail.com

† Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Pato Branco; robson trentin@utfpr.edu.br

‡ Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Pato Branco; jovianocasarin@utfpr.edu.br



abordagem lagrangiana e utiliza as forças de contato de equilíbrio e deslocamento para descrever as interações de partículas com o meio e as colisões partícula-partícula e partícula-parede (Cundall & Strack, 1979).

Em engenharia, o modelo numérico possui vasta aplicação em áreas que envolvam partículas, como o desenvolvimento de ferramentas para avaliação de supersaturação e solubilidade em sais de incrustação (Cosmo 2013) e o monitoramento da formação de aglomerados indesejados na mistura de pós farmacêuticos (Behjani et al., 2019). O DEM também pode ser utilizado para a interação solo-ferramenta (Ucgul, Saunders & Fielke, 2017), uma vez que o solo é formado por partículas que interagem entre si e com a ferramenta. No entanto, essas interações necessitam de calibração e de um modelo adequado para que as simulações numéricas sejam coerentes (Yan et al., 2015). Portanto, será o modelo a ser utilizado capaz de garantir resultados em concordância com dados experimentais?

As análises realizadas por meio de simulações numéricas são importantes para avaliar as trajetórias de partículas estudadas por P. A. Cundall & Strack (1979). Dentre os softwares disponíveis, o Ansys Fluent possui grande potencial para essa tarefa e, quando aliado ao DDPM-DEM, soluciona satisfatoriamente os problemas envolvendo interações entre partículas e interações de partículas com paredes sólidas. O presente trabalho visa confirmar essa característica do software através da avaliação numérica de resultados experimentais realizados na literatura, mais especificamente os artigos de Mordant & Pinton (2002) para interação partícula-fluido e Gondret, Lance & Petit (2002) para interação partícula-parede. Atestando a eficácia tanto com colisões envolvendo partículas quanto com as interações de partículas e o meio circundante, é possível especificar os parâmetros mais adequados para as simulações.

2 MÉTODO

As condições experimentais descritas por Mordant & Pinton (2000) e Gondret, Lance & Petit (2002) foram reproduzidas no software comercial Ansys Fluent DDPM-DEM com intuito de obter as mesmas condições de contorno.

a) Sedimentação de partícula sólida em fluido estacionário

O experimento realizado por Mordant & Pinton (2000) consiste na liberação de uma partícula, sem velocidade inicial, em água e verificar o comportamento de um corpo rígido sob influência de forças hidrodinâmicas e da gravidade.

O objetivo é avaliar a velocidade terminal das partículas. Para realizar a análise no software, foram utilizadas três partículas com densidades (ρ) e diâmetros (d_p) variados, como indicado no Quadro 1:

Quadro 1 - Propriedades físicas e geométricas dos materiais (a)

Material	d_p (mm)	ρ (kg/m ³)
Vidro	1,5	2560
Aço	3	7800
Aço	4	7700
Aço	6	7750
Carboneto de tungstênio	1	14800

Fonte: Mordant & Pinton (2000)

Para todas as simulações, o domínio e a malha utilizados foram os mesmos, consistindo de um paralelepípedo medindo 0,8 x 0,65 x 0,65 m e malha cúbica com aresta medindo 12 mm.

b) Interação partícula-parede e partícula-meio

Gondret, Lance & Petit (2002) analisaram as colisões de uma partícula, liberada verticalmente com velocidade inicial ($Re = 210$) e uma parede. O fluido é o ar, o domínio e a malha são cúbicos com arestas de 50 mm e 15 mm, respectivamente. As propriedades físicas e geométricas estão listadas no Quadro 2:

Quadro 2 - Propriedades físicas e geométricas (b)

Partícula		
Material	d_p (mm)	ρ (10E3 kg/m ³)
Teflon	6	2,15
Meio		
Fluido	μ (Pa.s)	ρ (10E3 kg/m ³)
Ar	1,85E-5	1,20E-3

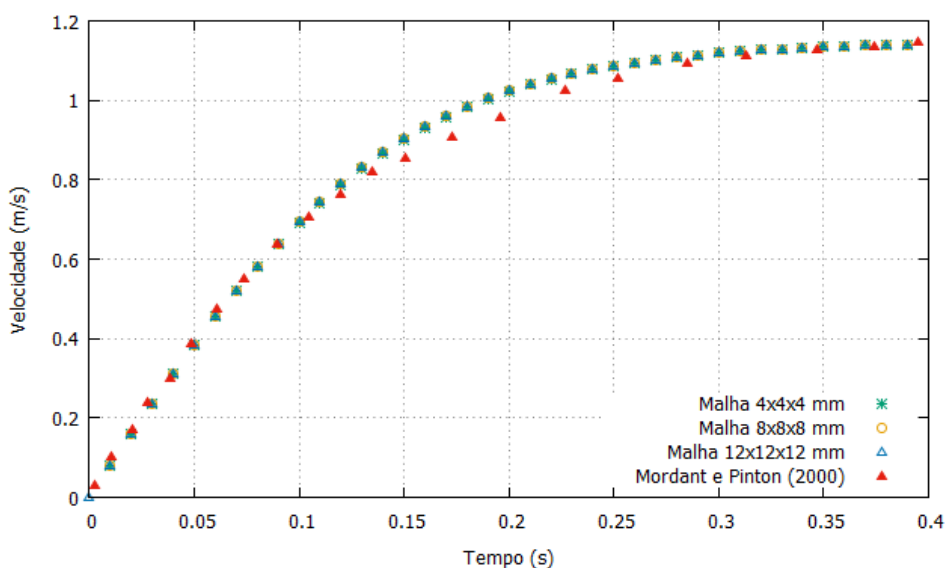
Fonte: Gondret, Lance & Petit (2002)

3 RESULTADOS

3.1 Estudo de independência de malha

Para garantir que a malha utilizada nas simulações fosse coerente, uma análise de malha foi realizada. Foram comparadas as malhas cúbicas com 4, 8, 12 mm de aresta para a partícula com 6 mm e densidade de 7750 kg/m³ (Figura 1). Todas as malhas apresentaram resultados satisfatórios quando comparados com o artigo original.

Figura 1 - Evolução da velocidade da partícula de diâmetro 6 mm ao longo do tempo para diferentes malhas



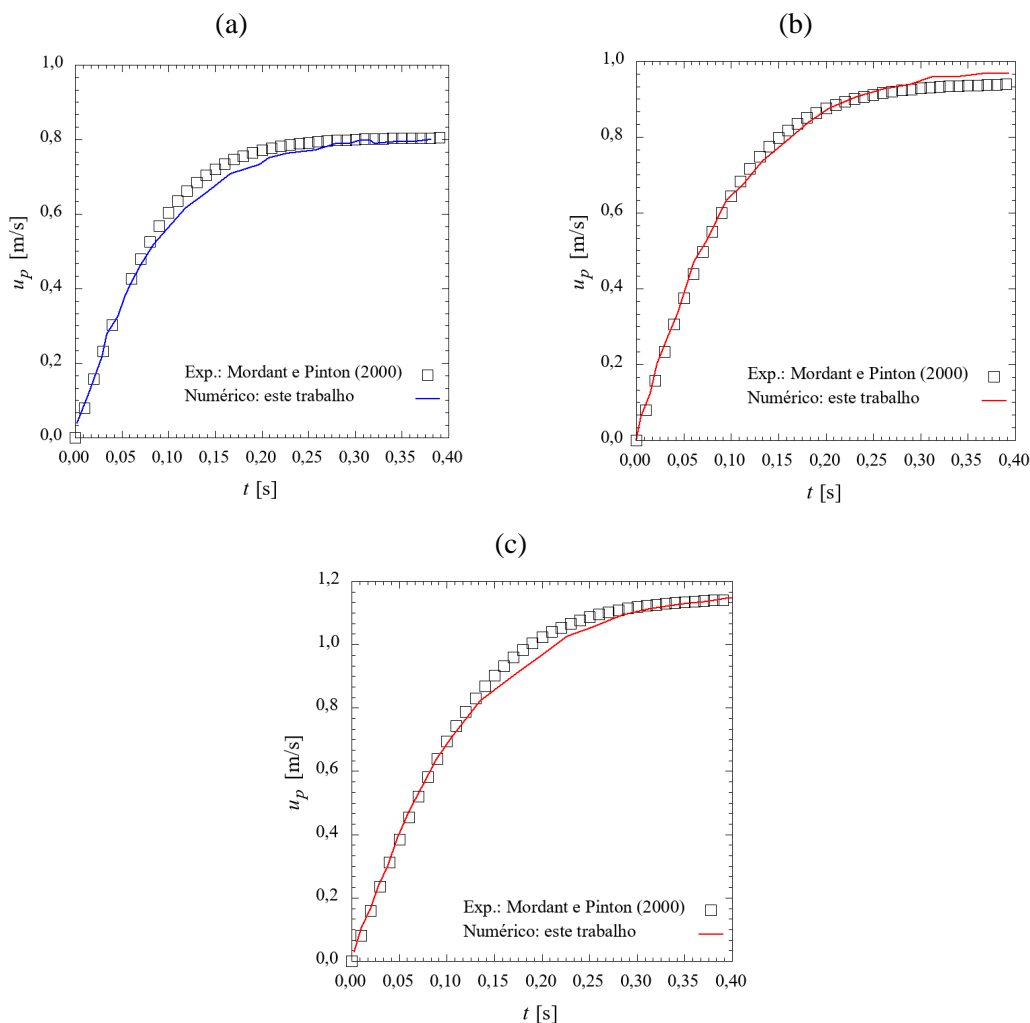
Fonte: Autoria própria (2021)

3.2 Interação fluido-partícula

A Figura 2 ilustra o comportamento da velocidade ao longo do tempo da partícula de vidro com diâmetros variados. Os resultados numéricos indicam boa concordância quando comparados aos resultados experimentais obtidos por Mordant & Pinton (2000).

O fluido utilizado foi água em repouso e a partícula injetada sem velocidade inicial. Sob influência das forças hidrodinâmicas e da gravidade, as partículas entram em movimento e atingem uma velocidade máxima, chamada de velocidade terminal, que se mantém constante. A magnitude dessa velocidade terminal foi determinada para cada uma das cinco partículas e o comportamento ao longo do tempo demonstrado nas figuras abaixo. Para as partículas de aço, as velocidades terminais obtidas foram de 0,805 m/s, 0,939 m/s e 1,148 m/s para os diâmetros de 3 mm, 4 mm e 6 mm, respectivamente (Figura 2). Valores próximos aos experimentais, de 0,813 m/s, 0,973 m/s e 1,158 m/s para as respectivas partículas.

Figura 2: Evolução da velocidade da partícula ao longo do tempo e comparação com Mordant & Pinton (2000). Partículas de aço: (a) $d_p = 3\text{ mm}$; (b) $d_p = 4\text{ mm}$; (c) $d_p = 6\text{ mm}$. As velocidades terminais obtidas foram (a) $u_t = 0,805\text{ m/s}$; (b) $u_t = 0,939\text{ m/s}$; (c) $u_t = 1,148\text{ m/s}$



Fonte: Autoria Própria (2021)



O Quadro 3 apresenta uma comparação entre os resultados obtidos e Mordant & Pinton (2000), onde u_t representa a velocidade terminal obtida nas simulações pelo Ansys Fluent. Observou-se um erro relativo máximo de 3,49% entre os resultados obtidos e os artigos:

Quadro 3 - Comparação com Mordant & Pinton (2000)

d_p (mm)	Material	u_t (m/s)	Mordant & Pinton (2000)	Erro relativo (%)
1,5	Vidro	0,219	0,219	0,00
3	Aço	0,805	0,813	0,98
4	Aço	0,939	0,973	3,49
6	Aço	1,148	1,158	0,86
1	Carboneto de tungstênio	0,587	0,590	0,61

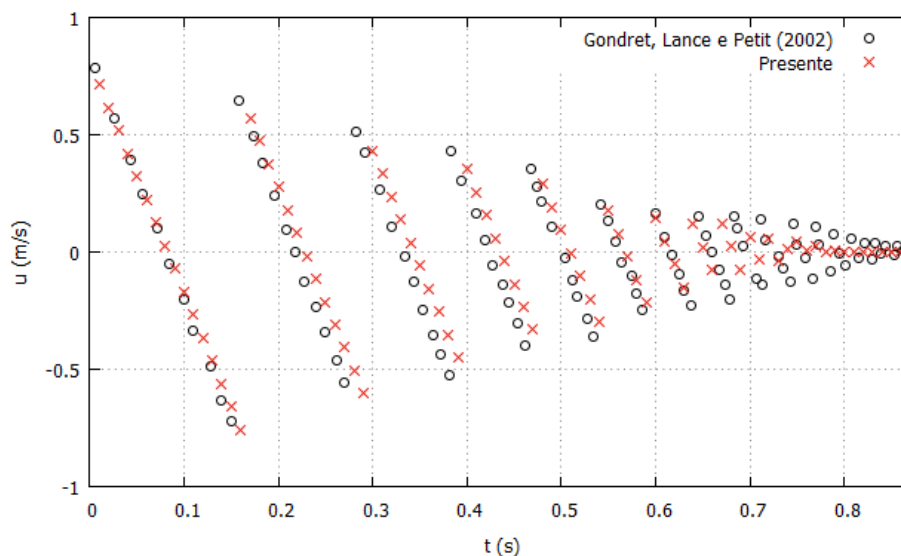
Fonte: Autoria própria (2021)

3.3 Interação partícula-parede

Outros resultados experimentais reproduzidos foram os obtidos por Gondret, Lance e Petit (2002) em que os autores executaram a liberação de uma esfera com velocidade específica cujo número de Reynolds é igual a 210, isto é, com velocidade inicial definida e de um coeficiente de restituição elástica de 0,8. Na medida em que a partícula colide com o solo, uma parcela da energia cinética é dissipada até que a partícula atinja a condição de repouso. O fenômeno descrito se traduz na diminuição de velocidade do corpo rígido.

A Figura 3 ilustra o comportamento da velocidade da partícula ao longo do tempo obtido na simulação. A análise da velocidade da partícula após colisão com a superfície sólida revela que os resultados numéricos concordam de forma satisfatória com os dados experimentais de Gondret, Lance e Petit (2002), com origem em um tempo t , igual a zero segundos. O passo de tempo para modelagem das interações entre partícula e fronteira sólida foi de 0,0001 segundos. Já para a interação da partícula com o fluido, o valor de 0,01 segundos foi utilizado. A rotação da partícula foi desconsiderada.

Figura 3 - Comparação entre o presente trabalho e Gondret, Lance & Petit (2002) relativa à velocidade da partícula em função do tempo



Fonte: Autoria própria (2021)



4 CONCLUSÃO

O software Ansys Fluent aliado ao modelo DDPM-DEM formam uma ferramenta com potencial para simulações envolvendo partículas. A reprodução dos artigos experimentais foi realizada com erro máximo de 3,49%, indicando que o software é adequado e proporcionou resultados esperados tanto na interação das partículas com o meio quanto na ocorrência de colisões com paredes. Portanto, um modelo coerente para futuras simulações pode ser desenvolvido a partir das considerações do presente trabalho.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq - Brasil).

REFERÊNCIAS

- BEHJANI, M. A.; MOTLAGH, Y. G.; BAYLY, A.; HASSANPOUR, A.; "Assessment of blending performance of pharmaceutical powder mixtures in a continuous mixer using Discrete Element Method (DEM)". **Powder Technology**. 366: 73–81. doi:10.1016/j.powtec.2019.10.102. ISSN 0032-5910, 2019.
- COSMO, R. D. P. **Modelagem e Simulação Termodinâmica da Precipitação de Calcita em Condições de Poço**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Espírito Santo, 2013.
- CUNDALL, P. A; STRACK, O.D.L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, vol. 29, no. 1, pp. 47–65, 1979.
- GONDRET, P; LANCE, M; PETIT, L. Bouncing motion of spherical particles in fluids. **Phys. Fluids**, vol. 14, no. 2, pp. 643–652, 2002.
- MORDANT, N; PINTON, J. Velocity measurement of a settling sphere. **Eur. Phys. J.**, vol. 352, pp. 343–352, 2000.
- UCGUL, M.; SAUNDERS, C.; FIELKE, J. M. Discrete element modelling of tillage forces and soil movement of a one-third scale mouldboard plough. **Biosystems Engineering**, v. 155, p. 44–54, 2017. Academic Press.
- YAN, Z.; WILKINSON, S. K.; STITT, E. H.; MARIGO, M. Discrete element modelling (DEM) input parameters: understanding their impact on model predictions using statistical analysis. **Computational Particle Mechanics**, v. 2, n. 3, p. 283–299, 2015. Springer International Publishing.