



Uma metodologia para calibração de parâmetros do método de elementos discretos

A methodology for calibration of discrete element method parameters

Joana Leonardi Gemeli¹, Joviano Janjar Casarin², Robson Gonçalves Trentin³

RESUMO

O método de elementos discretos (DEM) tem sido extensivamente adotado para simulação de materiais particulados. Aspectos importantes para tais simulações são a definição adequada de propriedades mecânicas e modelagem apropriada das leis de contato, de forma que esses parâmetros devem ser devidamente determinados a fim de garantir uma modelagem numérica adequada das interações de contato. O foco principal deste trabalho é realizar a calibração dos parâmetros relativos ao DEM. A modelagem numérica concentrou-se no uso do modelo de esferas flexíveis, empregando uma abordagem mola-amortecedor para representar as colisões. O cálculo do passo de tempo considerou o critério de Rayleigh. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura. A influência das características relativas ao DEM e ao passo de tempo foram avaliados por meio do monitoramento da energia cinética máxima das partículas. Os resultados numéricos indicam que é possível aumentar o passo de tempo da modelagem DEM sem que haja prejuízos tanto ao comportamento físico das interações de contato quanto ao agrupamento de partículas. Assim, destaca-se a importância de se calibrar de forma metódica os parâmetros relativos ao DEM com alterações controladas nas propriedades mecânicas das partículas.

PALAVRAS-CHAVE: calibração; DEM; partículas; STAR-CCM+.

ABSTRACT

The discrete element method (DEM) has been widely adopted to simulate granular materials. Important aspects in this sort of simulation include the proper definition of mechanical properties and appropriate modeling of contact laws, so that these parameters need to be properly determined to ensure adequate numerical modeling of contact interactions. This work aims to calibrate the parameters related to DEM. The mathematical modeling focused on the soft sphere model, using a spring-dashpot approach to represent the collisions. The time-step calculation took into consideration the Rayleigh criteria. The numerical results were compared with experimental data available in the literature. The influence of the characteristics related to DEM and the time-step were evaluated by monitoring the particles' maximum kinetic energy. The numerical results indicate that it is possible to increase the time-step of DEM without loss of physical behavior of the contact interactions or in the particle grouping. Thus, emphasizing the importance of calibrating the DEM-related parameters systematically with controlled alteration in the mechanical properties of the particles.

KEYWORDS: calibration; DEM; particles; STAR-CCM+.

INTRODUÇÃO

A simulação do comportamento de partículas tem sido uma área de interesse desde o trabalho pioneiro de (P. A. CUNDALL; O. D. STRACK, 1979). Com a aplicação do método de elementos discretos (DEM), a capacidade de replicar com precisão interações entre partículas tornou-se essencial em uma variedade de aplicações industriais e científicas (SHI et al., 2023) A confiabilidade do DEM está ligada à acurácia do modelo de contato e à seleção adequada das propriedades das partículas, fazendo com que o processo de calibração seja o fator principal para uma simulação realista (ROESSLER et al., 2019).

¹ Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pato Branco, Brasil. E-mail: joana.2001@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 3202928244845072.

² Docente no Curso de Engenharia Mecânica. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pato Branco, Brasil. E-mail: jovianocasarini@utfpr.edu.br. ID Lattes: 8825245016553660.

³ Docente no Curso de Engenharia Mecânica. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pato Branco, Brasil. E-mail: robsontrentin@utfpr.edu.br. ID Lattes: 9922385525517339.



Este artigo se propõe a explorar a calibração do DEM, com foco na determinação de parâmetros e propriedades, para o software STAR-CCM+. Através desse trabalho, busca-se atestar a capacidade do software em simular com precisão tais interações, proporcionando confiabilidade para simulações mais complexas.

MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática das forças de colisão pode ser abordada de duas maneiras, o modelo de esfera rígida e o modelo de esfera flexível. Sendo que, o modelo de esferas rígidas é restrito a aplicações com colisões binárias, não se adequando a necessidade deste trabalho. Portanto, o modelo de esferas flexíveis será utilizado, sendo que nesse modelo a força de repulsão é proporcional a sobreposição entre pares de partículas ou entre partícula e parede.

A formulação da força de contato no DEM é uma variante do modelo mola-amortecedor, onde a mola gera a força repulsiva sendo responsável pela resposta elástica e o amortecedor é responsável pela dissipação de parte da energia cinética, garantindo a existência de colisões além da elástica perfeita. O STAR-CMM+ fornece três modelos de contato: Hertz-Mindlin, mola-linear e Walton-Braun. Considerando que o modelo linear mola-amortecedor é o mais eficiente para descrever a força resultante da colisão (DI RENZO; DI MAIO, 2004). Assim, a força de contato entre duas esferas, i e j , é descrita na Eq. (1):

$$F_{contato} = F_n \mathbf{n} + F_t \mathbf{t} \quad (1)$$

onde F_n e F_t são as magnitudes das componentes normal e tangencial respectivamente. A força na direção normal é definida pela Eq. (2) e a força na direção tangencial é definida pela Eq. (3).

$$F_n = -K_n \delta_n - N_n v_n \quad (2)$$

$$F_t = \begin{cases} -K_t \delta_t - N_t v_t & \text{se } |K_t \delta_t| < |K_n \delta_n| C_{fs} \\ \frac{|K_n \delta_n| C_{fs} \delta_t}{|\delta_t|} & \text{se } |K_t \delta_t| \geq |K_n \delta_n| C_{fs} \end{cases} \quad (3)$$

em que δ_n e δ_t são as sobreposições nas direções normal e tangencial, respectivamente, v_n e v_t os componentes velocidades normal e tangencial da superfície da partícula no ponto de contato e C_{fs} é o coeficiente de atrito estático. Já os parâmetros K_n , K_t , N_n e N_t são a constante de mola normal, constante de mola tangencial, amortecimento normal e amortecimento tangencial, respectivamente. Esses estão representados nas Eq. (4), Eq. (5), Eq. (6) e Eq. (7).

$$K_n = \frac{4}{3} E_{eq} \sqrt{\delta_n R_{eq}} \quad (4)$$

$$K_t = 8 G_{eq} \sqrt{\delta_t R_{eq}} \quad (5)$$

$$N_n = 2 N_{n \text{ amort}} \sqrt{K_n M_{eq}} \quad (6)$$

$$N_t = 2 N_{t \text{ amort}} \sqrt{K_t M_{eq}} \quad (7)$$

onde $N_{n \text{ amort}}$ e $N_{t \text{ amort}}$ são os coeficientes de amortecimento normal e tangencial representados nas Eq. (8) e Eq. (9).



$$N_{n\ amort} = \frac{-\ln(C_{n\ rest})}{\sqrt{\pi + \ln(C_{n\ rest})^2}} \quad (8)$$

$$N_{t\ amort} = \frac{-\ln(C_{t\ rest})}{\sqrt{\pi + \ln(C_{t\ rest})^2}} \quad (9)$$

Neste caso, $C_{n\ rest}$ e $C_{t\ rest}$ são os coeficientes de restituição normal e tangencial respectivamente. Esses coeficientes são dados pela razão entre a velocidade anterior e posterior a colisão, de forma normal e tangencial. É importante destacar que, para velocidades de colisão suficientemente baixas, os coeficientes tendem a 1,0, pois a deformação dos elementos em contato permanece no campo elástico (JOHNSON, 1985). Outros conceitos apresentados nas Eq. (4), Eq. (5), Eq. (6) e Eq. (7), raio equivalente, R_{eq} , massa equivalente, M_{eq} , módulo de elasticidade equivalente, E_{eq} , e módulo de cisalhamento equivalente, G_{eq} , podem ser encontrados em (JOHNSON, 1985).

O passo de tempo máximo permitido para o DEM é restringido pela premissa de que a força agindo sobre uma partícula é afetada apenas pelas partículas da vizinhança próxima durante um único passo de tempo. O STAR-CCM+ apresenta três limitadores para o passo de tempo. Um relacionado a geração e propagação de ondas de choque mecânicos, denominadas ondas de Rayleigh, um critério de tempo limite da duração do impacto perfeitamente elástico entre duas esferas e um critério geométrico.

Dentre os três valores, o passo de tempo é determinado sempre pelo menor valor. Na prática, o critério de Rayleigh é o limitador para maior parte dos casos, exceto partículas se movendo com alta velocidade, que não é o caso desse trabalho. Portanto, o passo de tempo pode ser definido pela Eq. (10).

$$t_{Rayleigh} = \frac{\pi R_i}{V_{Rayleigh}} \quad (10)$$

Sendo que a velocidade de propagação da onda elástica de Rayleigh ao longo da superfície da partícula é determinada pela Eq. (11).

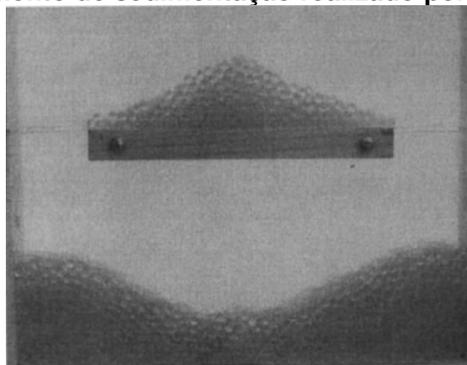
$$V_{Rayleigh} = \frac{0,87 + 1,12v_i}{1 + v_i} \sqrt{\frac{G_i}{\rho_i}} \quad (11)$$

onde R_i , v_i , G_i , ρ_i são o raio, coeficiente de Poisson, módulo de cisalhamento e densidade da partícula respectivamente.

METODOLOGIA

O processo de calibração foi realizado com base no experimento de formação de uma pilha de partículas sedimentando em um compartimento retangular com anteparo, Figura 1 (a) conforme descrito no artigo "*Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation*" (ZHOU et al., 1999). Foram usadas 4000 partículas de 6 milímetros de diâmetro, Figura 1 (b). O artigo trata de partículas de vidro em um recipiente plástico, a fim de tornar a calibração mais generalista e permitir que essa metodologia possa ser utilizada para outros experimentos de sedimentação, o trabalho de (DI RENZO; DI MAIO, 2004) que apresenta partículas e paredes de vidro, foi utilizado para obter as propriedades das partículas e das paredes, conforme apresentadas na Tabela 1:

Figura 1 – Experimento de sedimentação realizado por (ZHOU et al., 1999)



Fonte: ZHOU et al. (1999)

Tabela 1 – Propriedades das partículas e paredes usadas na simulação

Parâmetro	Partícula	Parede
Material	Óxido de Alumínio	Vidro
Densidade	4000 kg/m ³	2500 kg/m ³
Módulo de elasticidade	380 GPa	70 GPa
Módulo de cisalhamento	154 GPa	20 GPa
Coefficiente de Poisson	0,23	0,25
Coefficiente de atrito partícula-partícula	0,092	-
Coefficiente de atrito partícula-parede	-	0,092

Fonte: (DI RENZO; DI MAIO, 2004).

Utilizando os dados da Tabela 1 e as fórmulas das Eq. (4) a Eq. (11) foi possível calcular os parâmetros de simulação. Na Tabela 2 e Tabela 3 estão dispostos os dados calculados, as propriedades mecânicas e as suas respectivas reduções de ordem. As reduções de ordem são necessárias, pois o DEM é um método computacionalmente custoso, porém é importante destacar que à proporção que o passo de tempo aumenta, as suas propriedades mecânicas e suas rigidezes devem ser alteradas na mesma ordem (RACKL; HANLEY, 2017).

Tabela 2 – Propriedades e parâmetros calculados e suas reduções para a partícula

Descrição	Configuração	
	Inicial	Redução 1
Propriedades da partícula		
Módulo de elasticidade	380 GPa	38 GPa
Módulo de cisalhamento	154 GPa	15,4 GPa
Constante de rigidez normal (partícula – partícula)	1,79 E+07	1,79 E+06
Constante de rigidez tangencial (partícula – partícula)	2,34 E+07	2,34 E+06
Passo de tempo	1 E-06	1 E-05

Fonte: Autoria própria (2023).

Tabela 3 – Propriedades e parâmetros calculados e suas reduções para a parede

Descrição	Configuração	
	Inicial	Redução 1
Propriedades da parede		
Módulo de elasticidade	70 GPa	7,0 GPa
Módulo de cisalhamento	28 GPa	2,8 GPa
Constante de rigidez normal (partícula – parede)	7,96 E+06	7,96 E+05
Constante de rigidez tangencial (partícula – parede)	1,02 E+07	1,02 E+06
Passo de tempo	1 E-06	1 E-05

Fonte: Autoria própria (2023).

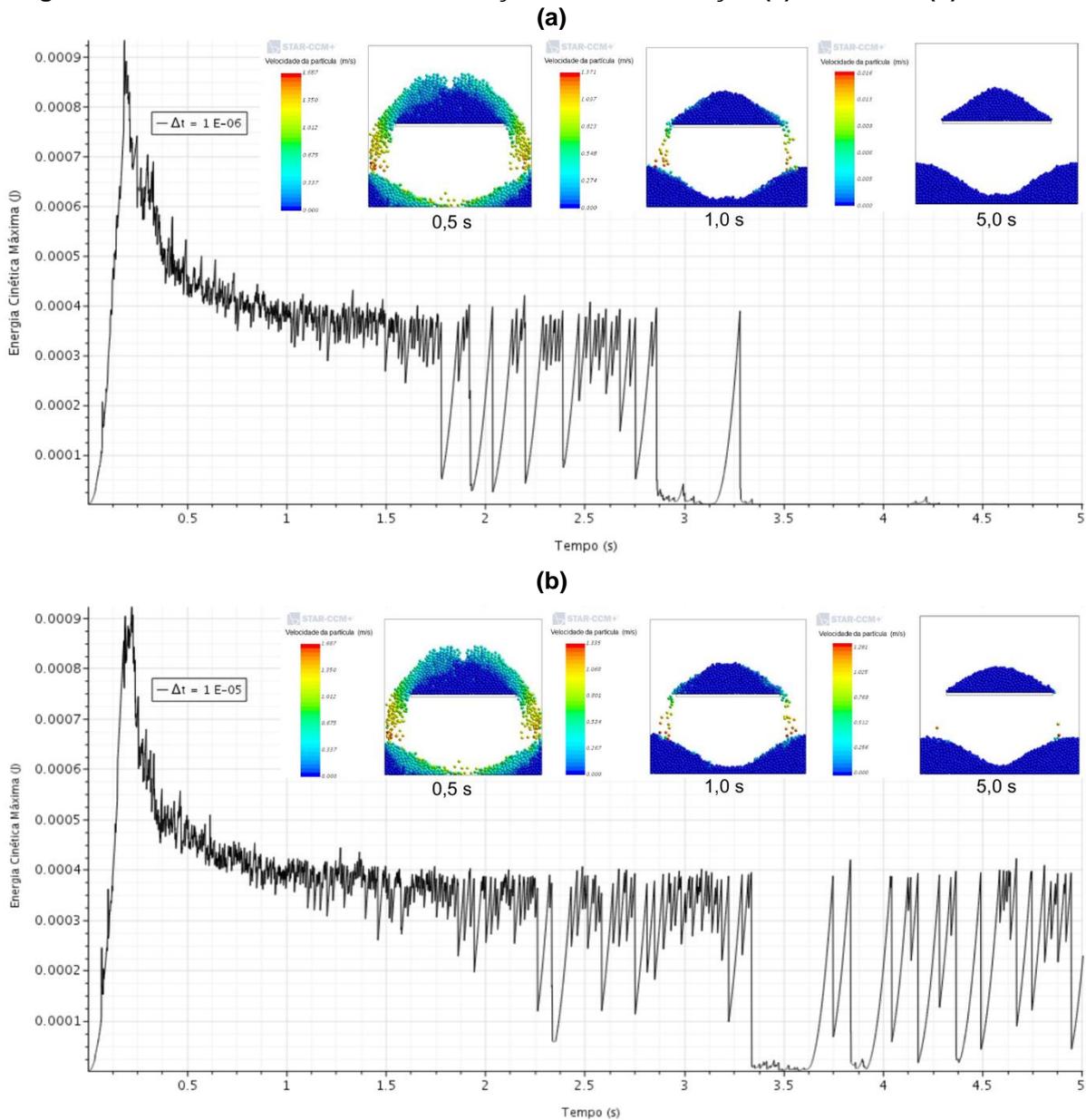


A verificação de que os parâmetros estão adequados é realizada considerando os valores calculados e reduzidos apresentados nas Tabelas 2 e 3. O principal critério de avaliação da estabilidade da simulação é a dissipação da energia cinética máxima das partículas, que com o passar do tempo de simulação, deve cair gradativamente, consequência de um passo de tempo adequado (TSUJI; TANAKA; ISHIDA, 1992).

RESULTADOS

Na Figura 2 (a) e (b) estão dispostos ao fundo os gráficos do monitoramento da energia cinética das partículas e três imagens que formam uma *time-lapse* do experimento de sedimentação, representando 0,5, 1,0 e 5,0 segundos.

Figura 2 – Resultados obtidos nas simulações de sedimentação (a) $\Delta t = 1 \text{ E-}06$ (b) $\Delta t = 1 \text{ E-}05$



Fonte: Autoria Própria (2023).



É possível observar a redução gradual da energia cinética em ambas simulações, o que indica que o sistema está alcançando um estado de equilíbrio, no qual as partículas estão se organizando em uma pilha estável. Essa redução também sugere que as partículas estão interagindo conforme as propriedades físicas esperadas, e que o modelo está reproduzindo com sucesso o comportamento real do sistema.

CONCLUSÕES

Os resultados revelam não apenas que o STAR-CCM+ é um programa capaz de simular a interação partícula-partícula e partícula-parede, mas também que a redução das ordens de grandeza nas propriedades mecânicas dos contatos, que resulta no aumento do passo de tempo, não é prejudicial para o processo sedimentação e formação do leito das partículas.

Agradecimentos

A realização do presente trabalho só foi possível devido ao apoio da Siemens Brasil.

Conflito de interesse

Não há conflito de interesse.

REFERÊNCIAS

- DI RENZO, A.; DI MAIO, F. P. Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes. **Chemical Engineering Science**, v. 59, n. 3, p. 525–541, 2004.
- JOHNSON, K. L. **Contact mechanics**. Cambridge, UK, Cambridge University Press, 1985.
- P. A. CUNDALL; O. D. STRACK. A discrete numerical model for granular assemblies. **Geotechnique**, p. 47–65, 1979.
- RACKL, M.; HANLEY, K. J. A methodical calibration procedure for discrete element models. **Powder Technology**, v. 307, p. 73–83, 1 fev. 2017.
- ROESSLER, T. et al. Development of a standard calibration procedure for the DEM parameters of cohesionless bulk materials – part I: Solving the problem of ambiguous parameter combinations. **Powder Technology**, v. 343, p. 803–812, 1 fev. 2019.
- SHI, Y. et al. Calibration and verification of DEM parameters for particles in transfer chute from rapid flow to stable accumulation. **Advanced Powder Technology**, v. 34, n. 11, 1 nov. 2023.
- TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particle in a horizontal pipe. **Powder Technology**, v. 71, n. 3, p. 239-250, 1992.
- ZHOU, Y. C. et al. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation. **Physica A. Statistical Mechanics and its Applications**, v. 269, p. 539-553, 1999.