

UFRRJ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA
TECNOLOGIA QUÍMICA

DISSERTAÇÃO

**Modelagem e Simulação da Sedimentação e Filtração utilizando o
Método de Elementos Discretos**

JOÃO MÁRCIO SUTANA ALVIM

2016



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**Modelagem e Simulação da Sedimentação e Filtração utilizando o
Método de Elementos Discretos**

JOÃO MÁRCIO SUTANA ALVIM

Sob a orientação dos professores:
Luiz Augusto da Cruz Meleiro
Luís Américo Calçada

Dissertação submetida como requisito parcial para a obtenção do grau de **Mestre em Ciências** em Engenharia Química, Área de Concentração em Tecnologia Química.

Seropédica, RJ
Dezembro de 2016

660.2842

A475m

T

Alvim, João Márcio Sutana, 1989-

Modelagem e simulação da sedimentação e filtração utilizando o método de elementos discretos / João Márcio Sutana Alvim. - 2016.

93 f.: il.

Orientador: Luiz Augusto da Cruz Meleiro. Dissertação (mestrado) - Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2016.

Bibliografia: f. 89-93.

1. Separação (Tecnologia) - Teses.
 2. Filtros e filtração - Modelos matemáticos - Teses.
 3. Sedimentação e depósitos - Modelos matemáticos - Teses.
 4. Método de elementos discretos - Teses.
 5. Partículas - Métodos de simulação - Teses.
 6. Engenharia química - Teses.
- I. Meleiro, Luiz Augusto da Cruz, 1965- II. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química. III. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

JOÃO MÁRCIO SUTANA ALVIM

Dissertação submetida como requisito parcial para a obtenção do grau de **Mestre em Ciências** em Engenharia Química, Área de Concentração em Tecnologia Química.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM: 21/12/2016

Prof. Dr. Luiz Augusto da Cruz Meleiro. DEQ/UFRRJ
(Orientador)

Prof. Dr. Luís Américo Calçada. DEQ/UFRRJ
(Orientador)

Prof. Dr. Alexandre Rodrigues Torres. UERJ/FAT/DEQA

Prof. Dr. Maurício Cordeiro Mancini. DEQ/UFRRJ

AGRADECIMENTOS

A Deus por me dar inteligência para ultrapassar os obstáculos da vida e permitir que eu alcançasse meus objetivos.

Aos meus pais, José Márcio e Maria Aparecida, minha irmã, Maria Júlia, e demais familiares pelo amor, compreensão, suporte e incentivo aos meus estudos.

A minha namorada, Brenda, por toda sua dedicação, carinho, amor e, principalmente, paciência durante estes dois anos e meio de trabalho. Sem você nada disso seria possível!

Aos meus orientadores, Luiz Augusto da Cruz Meleiro e Luís Américo Calçada, pela oportunidade de participar deste projeto e por todo o seu apoio e auxílio durante a realização do trabalho. Obrigado pelos ensinamentos, conselhos valiosos e amizade.

Aos amigos, que estiveram presentes e contribuíram direta e indiretamente na realização deste trabalho.

A todos os colegas e funcionários do programa de pós-graduação em engenharia química (PPGEQ) e do laboratório do escoamento de fluidos (LEF), que de alguma forma contribuíram para esta dissertação.

Aos professores da banca pela atenção de ler e estudar este trabalho e pelas importantes contribuições fornecidas.

A CAPES e a PETROBRAS pelo suporte técnico e financeiro concedido a esta pesquisa.

RESUMO

ALVIM, João Márcio Sutana **Modelagem e Simulação da Sedimentação e Filtração utilizando o Método de Elementos Discretos**. 2016. 93p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química, Tecnologia Química). Instituto de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2016.

Dentro do conjunto clássico das operações unitárias de separação sólido-líquido, as técnicas de sedimentação e filtração se destacam como etapas de processamento cruciais para um amplo espectro de atividades da indústria. Neste contexto, o conhecimento adequado das propriedades e características dos sistemas particulados diretamente envolvidos representa um aspecto importante para o projeto seguro e eficiente de equipamentos e processos. Ao longo dos últimos 20 anos, diversas metodologias foram desenvolvidas para estudar tais fenômenos, resultando em uma ampla biblioteca de modelos de sedimentação e filtração disponível na literatura. O presente trabalho apresenta um estudo baseado no uso da simulação numérica em escala de partícula, através do Método de Elementos Discretos ou DEM (do inglês “Discrete Element Method”), para descrever a deposição de sólidos particulados em suspensões. Foram realizadas simulações da sedimentação e filtração em três dimensões como forma de testar o funcionamento do código e a sua capacidade de reproduzir virtualmente tais processos. As propriedades da torta, tais como espessura, porosidade e permeabilidade foram quantificadas ao longo do tempo e comparadas qualitativa e quantitativamente com dados da literatura. A sensibilidade do modelo desenvolvido a variações nas condições operacionais de simulação e nas propriedades físicas do sólido e do líquido também foi analisada. Os dados de fração de sólidos obtidos nas simulações da sedimentação apresentaram uma concordância satisfatória, quando comparados aos valores encontrados na literatura em condições similares, apresentando desvios menores do que 12% para todos os pontos avaliados.

Palavras chave: Modelagem discreta, Dinâmica de partículas, Simulação granular.

ABSTRACT

ALVIM, João Márcio Sutana. **Modeling and Simulation of Sedimentation and Filtration using the Discrete Element Method**. 2016. 93p. Thesis (Master of Science in Chemical Engineering, Chemical Technology). Institute of Technology, Department of Chemical Engineering, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2016.

In the classic set of unit operations of solid-liquid separation, sedimentation and filtration techniques stand out as critical processing steps for a broad spectrum of industrial activities. In this context, the proper knowledge of the properties and characteristics of the particulate systems directly involved represents an important aspect for the safe and efficient design of equipment and processes. Over the past 20 years, several methodologies were developed to study such phenomena, resulting in a huge library of sedimentation and filtration models available in the literature. This work presents a study based on the use of a particle-scale numerical simulation technique called Discrete Element Method (DEM), to describe the deposition of particulate solids in liquids. Tridimensional simulations of the sedimentation and filtration processes were carried out in a previously known flow field, as a way to test the applicability of the code and its capacity to virtually describe such processes. Cake properties, such as thickness, porosity and permeability were quantified over time and compared qualitatively and quantitatively with literature data. The effects of operational conditions, solids and liquid properties on the particulate model's response were also investigated through a series of controlled numerical tests. The packing fraction values obtained in this work for the sedimentation process, when compared to the values found in the literature on similar conditions, showed a satisfactory agreement, with deviations smaller than 12% for all the points assessed.

Keywords: Discrete modeling, Particle dynamics, Granular simulation

LISTA DE SÍMBOLOS

Os principais símbolos usados neste trabalho foram:

A	Área da superfície de filtração	L^2
A_i	Área projetada da partícula i	L^2
C_D	Coefficiente de arraste fluido-partícula	Adimensional
C_n	Coefficiente de amortecimento normal	MT^{-1}
C_t	Coefficiente de amortecimento tangencial	MT^{-1}
d	Diâmetro médio de partícula	L
d_i	Diâmetro da partícula i	L
d_{max}	Diâmetro máximo de partícula	L
E_i	Módulo de Young da partícula i	$ML^{-1}T^{-2}$
E_{eff}	Módulo de Young efetivo	$ML^{-1}T^{-2}$
F_i	Força resultante que atua sobre a partícula i	MLT^{-2}
F_{ij}^c	Força de contato que age sobre i devido à interação com j	MLT^{-2}
F_{ij}^{nc}	Força de longo alcance que atua sobre i devido à interação com j	MLT^{-2}
F_i^f	Força que atua sobre a partícula i devido à interação com fluidos	MLT^{-2}
$F_{ij}^{c,n}$	Componente da força de contato na direção normal	MLT^{-2}
$F_{ij}^{c,t}$	Componente da força de contato na direção tangencial	MLT^{-2}
F_{ij}^e	Força eletrostática que age sobre i devido à interação com j	MLT^{-2}
F_{ij}^v	Força de van der Waals que age sobre i devido à interação com j	MLT^{-2}
F_i^b	Força de empuxo que age sobre a partícula i	MLT^{-2}
F_i^d	Força de arraste que age sobre a partícula i	MLT^{-2}
F_i^{Mag}	Força de Magnus que age sobre a partícula i	MLT^{-2}
F_i^{Saff}	Força de Saffman que age sobre a partícula i	MLT^{-2}
g	Aceleração gravitacional	LT^{-2}
h	Distância de separação entre as superfícies de duas partículas	L
H_a	Constante de Hamaker do sólido	ML^2T^{-2}
H_l	Altura atingida pelo leito de partículas	L
I_i	Momento de inércia da partícula i	ML^2
k	Permeabilidade do meio poroso	L^2
k_c	Permeabilidade da torta de filtração	L^2
K_n	Coefficiente de restauração elástica normal	MT^{-2}

K_t	Coeficiente de restauração elástica tangencial	MT^{-2}
L_c	Espessura da torta de filtração	L
m	Força resistiva fluido - partícula	MLT^{-2}
m_i	Massa da partícula i	M
m_{eff}	Massa efetiva de colisão	M
N	Número total de partículas do sistema	Adimensional
\mathbf{n}_{ij}	Vetor normal unitário que aponta de j para i	Adimensional
P	Campo de pressão no fluido	$ML^{-1}T^{-2}$
q	Velocidade superficial do fluido ou fluxo de filtrado	LT^{-1}
q_0	Fluxo de filtrado inicial	LT^{-1}
Q	Carga elétrica da partícula i	TI
Q_0	Permissividade elétrica do vácuo	$M^{-1}L^{-1}T^4I^2$
\mathbf{r}_i	Posição do centro de massa da partícula i	L
\mathbf{r}_c	Posição do ponto de contato entre as partículas	L
R_i	Raio da partícula i	L
R_{eff}	Raio efetivo de colisão	L
Re_p	Número de Reynolds de partícula	Adimensional
R_m	Resistência do meio filtrante	L^{-1}
R_c	Resistência da torta de filtração	L^{-1}
T_s	Tensão exercida sobre a fase sólida	$ML^{-1}T^{-2}$
T_i	Torque resultante que atua sobre a partícula i	ML^2T^{-2}
T_{ij}^t	Torque tangencial que atua sobre i devido à interação com j	ML^2T^{-2}
T_{ij}^r	Torque de rolamento que atua sobre i devido à interação com j	ML^2T^{-2}
u	Velocidade relativa fluido – partícula	LT^{-1}
u_s	Velocidade média do escoamento cruzado	LT^{-1}
V	Volume de filtrado	L^3
v_f	Velocidade intersticial do fluido	LT^{-1}
v_s	Velocidade intersticial do sólido	LT^{-1}
v_i	Velocidade do centro de massa da partícula i	LT^{-1}
v_{ij}	Velocidade relativa entre as partículas i e j	LT^{-1}
v_{ij}^n	Componente normal da velocidade relativa entre i e j	LT^{-1}
v_{ij}^t	Componente tangencial da velocidade relativa entre i e j	LT^{-1}
w	Massa de sólido seco depositada na torta por área	ML^{-2}

Letras gregas

α	Resistividade local da torta de filtração	$M^{-1}L$
$\langle \alpha \rangle$	Resistividade média da torta de filtração	$M^{-1}L$
γ_n	Fator de amortecimento normal	T
γ_t	Fator de amortecimento tangencial	MT^{-1}
ΔP	Queda de pressão na unidade de filtração	$ML^{-1}T^{-2}$
ΔP_c	Queda de pressão através da torta de filtração	$ML^{-1}T^{-2}$
ΔP_0	Queda de pressão inicial	$ML^{-1}T^{-2}$
ε	Porosidade ou fração de vazios	Adimensional
ε_c	Porosidade do sedimento/torta de filtração	Adimensional
ε_i	Porosidade local em torno da partícula	Adimensional
ε_s	Fração de sólidos do sedimento/torta de filtração	Adimensional
ε_{s0}	Fração de sólidos inicial	Adimensional
ϵ	Coefficiente de restituição do sólido	Adimensional
μ_f	Viscosidade dinâmica do fluido	$ML^{-1}T^{-1}$
μ_c	Fator de atrito de Coulomb	Adimensional
μ_r	Fator de atrito de rolamento	Adimensional
ν_i	Razão de Poisson da partícula i	Adimensional
ν_l	Fração da espessura do leito usada para cálculo da porosidade	Adimensional
ζ_{ij}	Compressão ou deformação mútua sofrida pelas partículas i e j	L
ξ_n	Deformação ou deslocamento na direção normal	L
ξ_t	Deformação ou deslocamento na direção tangencial	L
$\xi_{t,max}$	Deslocamento tangencial máximo	L
ρ_f	Massa específica do fluido	ML^{-3}
ρ_s	Massa específica do sólido	ML^{-3}
φ_i	Orientação angular da partícula i	Adimensional
ω_i	Velocidade angular da partícula i	T^{-1}
$\hat{\omega}_n$	Vetor unitário que atua na direção normal	Adimensional

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Valores dos coeficientes de Gear para sistemas de diferentes ordens.	34
Tabela 2. Modelos de forças utilizados nas simulações 2D.	40
Tabela 3. Modelos de forças utilizados nas simulações 3D.	43
Tabela 4. Modelos de torque utilizados nas simulações 3D.	44
Tabela 5. Parâmetros base utilizados nas simulações 2D.	49
Tabela 6. Parâmetros base utilizados nas simulações 3D.	63
Tabela 7. Comparação entre os resultados de fração de sólidos obtidos neste trabalho e em Dong <i>et al.</i> (2006), considerando diferentes valores de massa específica do fluido.	65

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Esquema de um sedimentador de base circular típico, ilustrando a formação de zonas com diferentes teores de sólidos. Fonte: adaptada de Svarovsky (2000).	4
Figura 2. Esquema do mecanismo de filtração típico. Fonte: adaptada de Svarovsky (2000).	5
Figura 3. Modos de filtração com formação de torta (à esquerda) e filtração em profundidade (à direita). Fonte: adaptada de Svarovsky (2000).	6
Figura 4. Esquema da filtração cruzada. Fonte: adaptada de McCabe <i>et al.</i> (1993).	7
Figura 5. Esquema do processo de filtração de um fluido de perfuração em condições estática (à esquerda) e dinâmica (à direita). Fonte: adaptada de Araújo (2010).	9
Figura 6. Número de publicações relacionadas à simulação discreta de sistemas particulados nos últimos anos (dados até 2005). Fonte: Zhu <i>et al.</i> (2007).	12
Figura 7. Esquema do contato entre duas partículas com forma de disco circular. Se o valor da sobreposição, ζ_{ij} , é maior do que zero então o contato é confirmado.	15
Figura 8. Partículas esféricas compostas. Fonte: adaptada de Pöschel & Schwager (2005).	15
Figura 9. Diferentes formatos de partículas poligonais em 3D, utilizadas nas simulações de elementos discretos. Fonte: adaptada de Matuttis & Chen (2014).	16
Figura 10. Esquema das forças normais e tangenciais decorrentes do contato. Ambas atuam no centro geométrico da região sobreposta, representado pelo vetor de posição \mathbf{r}_c	16
Figura 11. Ilustração da distribuição assimétrica de tensão normal, \mathbf{p}_{ij}^n . Essa tensão é responsável por gerar o chamado torque de rolamento. Fonte: adaptada de Zhu <i>et al.</i> (2007).	17
Figura 12. Representação do modelo linear como uma combinação em paralelo de dois elementos mecânicos: a mola e o amortecedor. Fonte: adaptada de O’Sullivan (2011).	18
Figura 13. Esquema da metodologia de detecção de contatos utilizada pelo algoritmo de mapeamento NBS. Fonte: adaptada de Munjiza & Andrews (1998).	24
Figura 14. Subdivisão do domínio em células idênticas de tamanho d , que corresponde ao diâmetro da maior partícula do sistema. Fonte: adaptada de Munjiza (2004).	25
Figura 15. Esquema ilustrativo, mostrando que a varredura realizada pelo algoritmo NBS se resume apenas aos pares de partículas mapeadas à mesma célula ou às células imediatamente vizinhas (total de oito em 2D). Fonte: adaptada de Munjiza (2004).	26
Figura 16. Importância relativa entre diferentes tipos de forças de longo alcance em função do diâmetro. Neste caso, foram considerados os seguintes parâmetros: $H_a = 6,5 \times 10^{-6} \text{J}$, $h = 1,65 \text{Å}$, $Q_0 = 1$ e $\rho_s = 3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$. Fonte: adaptada de Zhu <i>et al.</i> (2007).	27
Figura 17. Partícula esférica situada em uma região com gradiente de velocidade de fluido. Fonte: adaptada de Crowe <i>et al.</i> (2012).	30
Figura 18. Exemplo do uso de partículas sólidas imóveis para criar paredes rígidas como condições de contorno. Fonte: adaptada de Pöschel & Schwager (2005).	36
Figura 19. Exemplo de condições iniciais geradas de forma padronizada e aleatória sem sobreposição inicial. Fonte: adaptada de Matuttis & Chen (2014).	37
Figura 20. Esquema ilustrativo da geração de partículas nas simulações 2D.	39
Figura 21. Ilustração esquemática do método utilizado para estimar a espessura do leito.	41
Figura 22. Esquema ilustrativo da metodologia utilizada para estimativa da porosidade.	42

Figura 23. Esquema ilustrando a metodologia utilizada no cálculo da porosidade local. Fonte: adaptada de Dong <i>et al.</i> (2003; 2009).	42
Figura 24. Esquema ilustrativo da região de simulação na sedimentação em 3D.....	44
Figura 25. Esquema ilustrativo da região de simulação da filtração plana em 3D.	45
Figura 26. Esquema ilustrativo da região de simulação da filtração cruzada em 3D.....	45
Figura 27. Esquema ilustrativo do escoamento parabólico na direção x. No sentido da filtração o perfil é considerado uniforme. Fonte: adaptada de Hwang & Wang (2001).....	46
Figura 28. Fluxograma simplificado do algoritmo implementado neste trabalho.	47
Figura 29. Instantes iniciais da simulação da sedimentação 2D de 1500 partículas.	50
Figura 30. Instantes finais da simulação da sedimentação 2D de 1500 partículas.....	51
Figura 31. Evolução da espessura de torta com o tempo, para o caso da sedimentação 2D.	51
Figura 32. Evolução da porosidade com o tempo, para o caso da sedimentação 2D.	52
Figura 33. Efeito da massa específica do fluido sobre a espessura do sedimento 2D.....	52
Figura 34. Efeito da massa específica do fluido sobre a porosidade do sedimento 2D.	53
Figura 35. Efeito da viscosidade do fluido na espessura do sedimento 2D.	53
Figura 36. Efeito da viscosidade do fluido na porosidade sedimento 2D.	54
Figura 37. Instantes iniciais da simulação 2D da filtração com queda de pressão constante.....	55
Figura 38. Instantes finais da simulação 2D da filtração com queda de pressão constante.	55
Figura 39. Evolução da espessura de torta com o tempo para o caso da filtração 2D.	56
Figura 40. Evolução da porosidade de torta com o tempo para o caso da filtração 2D.	56
Figura 41. Evolução da permeabilidade da torta com o tempo para a filtração 2D.	57
Figura 42. Evolução do fluxo de filtrado com o tempo para a filtração 2D.....	57
Figura 43. Efeito da queda de pressão máxima na espessura da torta de filtração 2D.....	58
Figura 44. Efeito da queda de pressão máxima na porosidade da torta de filtração 2D.	59
Figura 45. Efeito da queda de pressão máxima na permeabilidade da torta de filtração 2D.	59
Figura 46. Efeito da queda de pressão máxima no fluxo de filtrado na filtração 2D.....	60
Figura 47. Efeito do fluxo de filtrado inicial na espessura da torta de filtração 2D.....	61
Figura 48. Efeito do fluxo de filtrado inicial na porosidade da torta de filtração 2D.	61
Figura 49. Efeito fluxo de filtrado inicial na permeabilidade da torta de filtração 2D.	62
Figura 50. Efeito fluxo de filtrado inicial na queda de pressão na filtração 2D.....	62
Figura 51. Evolução do processo de sedimentação de 1000 partículas monodispersas de 250 μ m de diâmetro.	64
Figura 52. Evolução da espessura do sedimento com o tempo ao longo de 1s de simulação.	64
Figura 53. Evolução da porosidade do sedimento no tempo ao longo de 1s de simulação.....	65
Figura 54. Representação gráfica da comparação entre os dados deste trabalho e de Dong <i>et al.</i> (2006) para a fração de sólidos do sedimento ao final da simulação.....	66
Figura 55. Efeito da massa específica do fluido sobre a espessura do sedimento.	67
Figura 56. Efeito da massa específica do fluido sobre a porosidade do sedimento.	67
Figura 57. Efeito da viscosidade do fluido sobre a espessura do sedimento.	68
Figura 58. Efeito da viscosidade do fluido sobre a porosidade do sedimento.	68
Figura 59. Efeito da constante de Hamaker sobre a espessura do sedimento.	69
Figura 60. Efeito da constante de Hamaker sobre a porosidade do sedimento.	69
Figura 61. Efeito da concentração de sólidos sobre a espessura do sedimento.....	70

Figura 62. Efeito da concentração de sólidos sobre a porosidade do sedimento.	70
Figura 63. Instantes iniciais do processo de filtração plana de partículas de 150 μ m.	71
Figura 64. Instantes finais do processo de filtração plana de partículas de 150 μ m.	71
Figura 65. Evolução da espessura da torta de filtração em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.	72
Figura 66. Evolução da porosidade da torta de filtração em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.	72
Figura 67. Evolução da permeabilidade da torta de filtração em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.	73
Figura 68. Evolução do fluxo de filtrado em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.	73
Figura 69. Efeito da queda de pressão sobre a espessura da torta, obtida durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.	74
Figura 70. Efeito da queda de pressão sobre a porosidade da torta, obtida durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.	74
Figura 71. Efeito da queda de pressão sobre permeabilidade da torta, obtida durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.	75
Figura 72. Efeito da queda de pressão máxima sobre o fluxo de filtrado, obtido durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.	75
Figura 73. Efeito do fluxo inicial sobre a espessura da torta, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.	76
Figura 74. Efeito do fluxo inicial sobre a porosidade da torta, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.	76
Figura 75. Efeito do fluxo do filtrado sobre a permeabilidade da torta, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.	77
Figura 76. Efeito do fluxo de filtrado sobre a queda de pressão na célula, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.	77
Figura 77. Instantes iniciais da filtração cruzada com 1000 partículas monodispersas.	78
Figura 78. Instantes finais da filtração cruzada com 1000 partículas monodispersas.	78
Figura 79. Evolução da espessura da torta formada durante 1s de filtração cruzada.	79
Figura 80. Evolução da porosidade da torta formada durante 1s de filtração cruzada.	79
Figura 81. Evolução da permeabilidade da torta formada durante 1s de filtração cruzada.	80
Figura 82. Evolução do fluxo de filtrado ao longo de 1s de filtração cruzada.	80
Figura 83. Efeito do fluxo de filtrado inicial na espessura da torta de filtração cruzada.	81
Figura 84. Efeito do fluxo de filtrado inicial na porosidade da torta de filtração cruzada.	81
Figura 85. Efeito do fluxo de filtrado inicial na permeabilidade da torta de filtração.	82
Figura 86. Efeito do fluxo de filtrado inicial sobre o fluxo de filtrado na filtração cruzada.	82
Figura 87. Efeito da velocidade axial média na espessura de torta na filtração cruzada.	83
Figura 88. Efeito da velocidade média axial sobre a porosidade na filtração cruzada.	83
Figura 89. Efeito velocidade axial média na permeabilidade da torta de filtração.	84
Figura 90. Efeito da velocidade axial média no fluxo de filtrado.	84

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO DE LITERATURA	3
2.1	Processos de Separação Sólido-Líquido	3
2.1.1	Sedimentação	3
2.1.2	Filtração	5
2.1.3	Filtração na Engenharia de Petróleo	8
2.1.4	Modelagem e Simulação de Sistemas Particulados	10
2.2	O Método de Elementos Discretos	13
2.2.1	Equações Governantes	13
2.2.2	Forças de Interação Mecânica	14
2.2.2.1	Força Normal	18
2.2.2.2	Força Tangencial	20
2.2.3	Algoritmos de Detecção de Contato	23
2.2.4	Forças de Longo Alcance	26
2.2.5	Forças de Interação Fluido-Partícula	28
2.2.6	Integração Numérica das Equações do Movimento	31
2.2.7	Condições de Contorno	35
2.2.8	Condições Iniciais	36
3	METODOLOGIA	39
3.1	Modelagem Matemática	39
3.1.1	Simulações Bidimensionais	39
3.1.2	Simulações Tridimensionais	43
3.2	Descrição do Algoritmo Implementado	46
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	49
4.1	Simulações Bidimensionais	49
4.1.1	Sedimentação	50
4.1.1.1	Efeito da massa específica do fluido	52
4.1.1.2	Efeito da viscosidade do fluido	53
4.1.2	Filtração Plana	54
4.1.2.1	Efeito da queda de pressão máxima	58
4.1.2.2	Efeito do fluxo de filtrado inicial	60
4.2	Simulações Tridimensionais	62

4.2.1	Sedimentação	63
4.2.1.1	Efeito da massa específica do fluido	66
4.2.1.2	Efeito da viscosidade do fluido	67
4.2.1.3	Efeito da constante de Hamaker (força coesiva)	69
4.2.1.4	Efeito da concentração inicial de sólidos	70
4.2.2	Filtração Plana	71
4.2.2.1	Efeito da queda de pressão máxima	74
4.2.2.2	Efeito do fluxo de filtrado inicial	75
4.2.3	Filtração Cruzada	77
4.2.3.1	Efeito do fluxo de filtrado inicial	80
4.2.3.2	Efeito da velocidade média axial	82
5	CONCLUSÕES	85
6	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	87
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	89

1 INTRODUÇÃO

Dentro do conjunto clássico das operações unitárias de separação sólido-líquido, as técnicas de sedimentação e filtração se destacam como etapas de processamento cruciais para um amplo espectro de atividades da indústria, incluindo desde setores de base, tais como o químico e o petroquímico, até a indústria de química fina, como a farmacêutica e a biotecnológica (COULSON & RICHARDSON, 2002).

No caso da sedimentação, o princípio básico consiste em utilizar o efeito da gravidade como uma força motriz para fazer com que os sólidos suspensos, normalmente mais densos que o líquido, se desloquem em direção ao fundo do equipamento, promovendo a separação e formando um leito de partículas conhecido como sedimento (PERRY & GREEN, 1999; SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

De maneira similar, a filtração também é um processo essencialmente mecânico, no qual a separação dos sólidos presentes no líquido ocorre através da passagem da suspensão por um meio poroso ou filtrante. Por se tratar de uma operação capaz de fornecer fatores de separação elevados, produzindo filtrados límpidos e tortas com altos teores de sólidos, este processo de separação é comumente empregado tanto em atividades que lidam com grandes volumes de suspensão, como no caso da purificação de água ou do tratamento de minério, quanto em aplicações que trabalham com quantidades relativamente pequenas, a exemplo da indústria de química fina (SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

Para ambos os processos de separação, o conhecimento adequado das propriedades e das características dos sistemas particulados diretamente envolvidos, bem como da sua influência sobre a dinâmica de crescimento e a estrutura final das tortas, representa um aspecto de fundamental importância para o projeto seguro e eficiente de equipamentos e processos (NI *et al.*, 2006).

Diversas metodologias de pesquisa foram desenvolvidas ao longo dos anos para descrever e analisar a deposição de sólidos particulados em líquidos, resultando em uma vasta coleção de modelos de sedimentação e filtração disponíveis na literatura. Um desses modelos consiste no uso da simulação numérica em escala de partícula, por meio dos chamados métodos de elementos discretos ou simplesmente DEM (do inglês “Discrete Element Method”) (DONG *et al.*, 2003; 2006; ZHU *et al.*, 2007).

Nessa abordagem, as partículas são descritas individualmente segundo um ponto de vista Lagrangeano e as equações do movimento de Newton são empregadas para acompanhar a evolução de cada trajetória ao longo do tempo. O resultado consiste em um alto nível de detalhamento sobre o comportamento da fase sólida, capaz de gerar informações microdinâmicas úteis para a melhor compreensão dos processos de deposição e que dificilmente poderiam ser obtidas através dos modelos fenomenológicos baseados na teoria do contínuo ou mesmo das técnicas experimentais convencionais (DONG *et al.*, 2006; ZHU *et al.*, 2007).

Apesar de originalmente criado para lidar com sistemas particulados na ausência de fluidos, o DEM tem sido usado com sucesso por diversos pesquisadores para reproduzir e analisar processos multifásicos, estendendo a abordagem discreta aos escoamentos sólido-gás e sólido-líquido, conforme abordado nos trabalhos anteriores de DONG *et al.* (2003; 2006), XU & YU (2003), ZHU *et al.* (2007; 2008) e CROWE *et al.* (2012).

O objetivo da presente dissertação é realizar um estudo numérico sobre os mecanismos que governam os processos de formação e crescimento de tortas e sedimentos sob um ponto de vista microscópico, desenvolvendo-se, para tanto, um aplicativo computacional (simulador) baseado no método dos elementos discretos. Neste trabalho,

foram realizadas simulações em duas e três dimensões da sedimentação, filtração plana e filtração cruzada em um campo de escoamento previamente conhecido, como forma de testar o funcionamento do simulador e a sua capacidade de reproduzir virtualmente tais processos. As principais propriedades da torta, tais como espessura, porosidade e permeabilidade, foram determinadas ao longo do tempo e comparadas qualitativa e quantitativamente com dados da literatura. Além disso, também foi analisada a sensibilidade desses parâmetros a variações nas propriedades físicas dos sólidos e do fluido e nas condições operacionais do processo.

A estrutura deste trabalho é composta por seis capítulos. O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica, que contempla um breve resumo sobre os aspectos mais relevantes acerca dos processos de separação entre sólidos e líquidos, com ênfase, especificamente, sobre as operações de sedimentação e filtração com formação de torta nas indústrias química e de petróleo. Além disso, este capítulo também inclui uma descrição mais detalhada de tópicos importantes, envolvidos na modelagem de sistemas particulados através do método de elementos discretos. O Capítulo 3, referente à metodologia empregada nesta dissertação, descreve as condições de simulação e os métodos numéricos e computacionais utilizados para implementar o simulador desenvolvido. No Capítulo 4 são apresentados e discutidos os resultados obtidos por meio das simulações numéricas da sedimentação, filtração plana e filtração cruzada, em duas e três dimensões, através do DEM. O Capítulo 5 traz as principais conclusões obtidas e o Capítulo 6 lista um conjunto de sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Processos de Separação Sólido-Líquido

A ciência e a tecnologia de separação tem um papel fundamental nas indústrias de processos químicos. Desde o início dos anos 1990, aproximadamente metade do investimento de capital e dos custos operacionais envolvidos nas atividades fabris se encontram diretamente associados a processos de separação, incluindo tanto a separação de espécies químicas quanto de fases (PERRY & GREEN, 1999; SVAROVSKY, 2000).

Nesse contexto, as operações de separação sólido-líquido tem um papel crucial. Na verdade, segundo Svarovsky (2000), pode-se dizer que em um vasto espectro de atividades industriais, nas quais suspensões contendo sólidos particulados estão presentes, ao menos algum tipo de separação sólido-líquido é empregado com o objetivo de:

- Recuperar e desidratar sólidos de interesse;
- Recuperar e clarificar o líquido base da suspensão;
- Separar as fases uma da outra antes que elas sejam reutilizadas no processo;
- Separar as fases antes de descartá-las de um processo, seguindo exigências ambientais específicas.

De acordo com McCabe *et al.* (1993), Svarovsky (2000) e Coulson & Richardson (2002), os processos de separação sólido-líquido podem ser classificados de maneira geral, de acordo com a forma como as partículas são coletadas, em: operações de sedimentação/flotação e operações de filtração.

No grupo das operações de sedimentação e flotação, o líquido é confinado em um recipiente estacionário ou giratório, e as partículas podem se mover livremente no interior do mesmo. Neste caso, o processo acontece devido à ação de forças volumares, que agem sobre as partículas devido à presença de um campo externo e/ou interno, o qual pode ser gravitacional, centrífugo ou magnético. À exceção deste último, sempre deverá existir uma diferença de massa específica entre o sólido e o líquido para promover a separação. (SVAROVSKY, 2000).

Já na linha das operações de filtração, permite-se que o líquido base percole livremente um meio poroso, enquanto as partículas ficam retidas pelo mesmo. Como a suspensão é impulsionada em direção a esse meio através da queda de pressão, não há a exigência de diferença entre as massas específicas das fases (SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

2.1.1 Sedimentação

A sedimentação por gravidade encerra o conjunto de técnicas através das quais o processo de separação é promovido pela deposição de partículas devido à ação de forças gravitacionais. Como a presença significativa de forças de empuxo concorrentes é comum, esses tipos de operação unitária exigem uma diferença mínima de massa específica entre os sólidos suspensos e o fluido como pré-requisito para a separação (SVAROVSKY, 2000).

Segundo Coulson & Richardson (2002), o fenômeno da decantação de partículas em líquidos pode ser utilizado em uma ampla variedade de processos distintos, incluindo a classificação de sólidos, lavagem, transferência de massa e extração de solventes. Entretanto, o maior volume de aplicações se encontra efetivamente nas operações de

separação sólido-líquido. Cremasco (2012) destaca, por exemplo, que os sedimentadores podem ser largamente utilizados para: (i) obtenção de polpas com concentrações adequadas a um determinado processo subsequente; (ii) espessamento de rejeitos com concentração elevada de partículas; (iii) recuperação de água para reciclo industrial; e (iv) recuperação de partículas ou soluções de operações de lixiviação, utilizadas em processos hidrometalúrgicos.

O princípio físico básico da sedimentação consiste em utilizar o efeito da gravidade como uma força motriz, para fazer com que os sólidos suspensos, normalmente mais densos que o líquido, se desloquem em direção ao fundo do equipamento, promovendo a separação e formando um leito de partículas conhecido como “sedimento”. A maior vantagem desse processo, como seria de se esperar, é o seu baixo custo operacional, bastando um recipiente para confinar a suspensão, linhas de bombeamento e o tempo de residência adequado (McCABE *et al.*, 1993; SVAROVSKY, 2000).

O tipo mais comum de sedimentador é o sedimentador contínuo de base circular, apresentado na Figura 1. Conforme se pode observar a suspensão contendo os sólidos é introduzida através do poço de alimentação situado no eixo vertical. Na sequência, esse volume alimentado cai sob a ação gravitacional até atingir uma altura onde o líquido ao redor possui mesma densidade. Ao longo desse processo três zonas com diferentes concentrações de sólidos são formadas: a região de clarificação, a região de sedimentação livre e a região de compactação. O líquido clarificado é coletado na corrente de “overflow” (extravasante) e o sedimento espessado, no “underflow” (McCABE *et al.*, 1993; COULSON & RICHARDSON, 2002; CREMASCO, 2012).

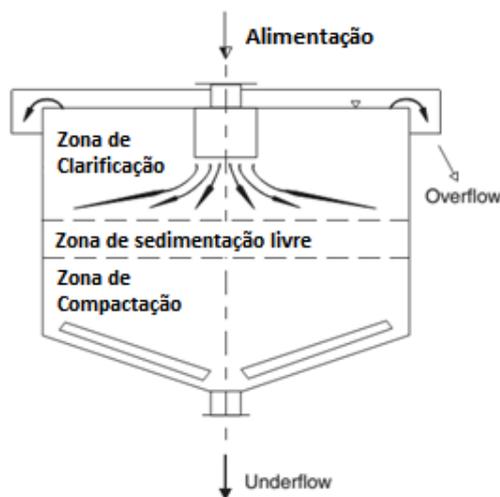


Figura 1. Esquema de um sedimentador de base circular típico, ilustrando a formação de zonas com diferentes teores de sólidos. Fonte: adaptada de Svarovsky (2000).

Do ponto de vista tecnológico, as variáveis de maior importância para o projeto e análise de desempenho de um sedimentador contínuo como o da Figura 1 são a área de seção transversal e a altura do equipamento. Por conta das dificuldades envolvidas na modelagem matemática das equações que governam os movimentos dos sólidos e do fluido e das incertezas no estabelecimento de relações constitutivas para descrever os perfis de porosidade, permeabilidade e pressão nos sólidos das lamelas compressíveis, tais variáveis de projeto acabam sendo determinadas por meio de teorias simplificadas e ensaios de bancada, conduzidos em batelada, diretamente com a suspensão a ser tratada (SVAROVSKY, 2000; MASSARANI, 2002; CREMASCO, 2012).

Alguns trabalhos que podem ser relacionados como contribuições significativas ao estudo da sedimentação em campo gravitacional são: Coe & Clevenger (1916), Kynch (1952), Tiller & Chen (1988), Damasceno (1992), Damasceno & Massarani (1993) e Arouca (2007).

2.1.2 Filtração

A filtração consiste em um processo essencialmente mecânico, onde a separação dos particulados presentes em uma suspensão sólido-líquido é realizada forçando-se o escoamento da mesma através de um meio poroso filtrante, que é permeável ao líquido, mas retém a passagem dos sólidos (McCABE *et al.*, 1993; SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

A percolação do líquido através da matriz porosa é promovida por meio da aplicação de uma queda de pressão através da unidade de filtração, conforme ilustrado na Figura 2. Normalmente, esse ΔP pode ser alcançado através de quatro tipos básicos de força motriz: gravidade, vácuo, pressão e centrífuga. A utilização de cada um desses mecanismos de filtração poderá variar de acordo com a natureza dos materiais a serem separados, com as condições operacionais adotadas e as necessidades de rendimento e eficiência estipuladas em um determinado processo (SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

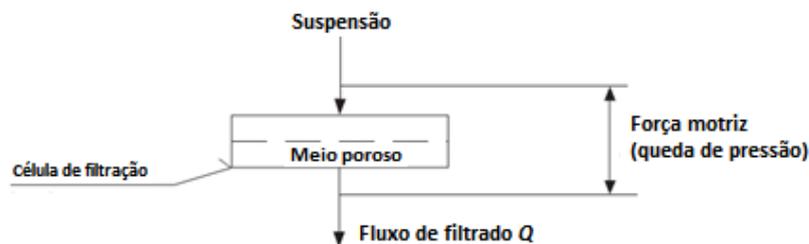


Figura 2. Esquema do mecanismo de filtração típico. Fonte: adaptada de Svarovsky (2000).

Na maior parte das aplicações, os sólidos é que costumam ser o principal produto de interesse, de maneira que os seus tamanhos, formatos e propriedades físicas têm importância fundamental no desempenho do processo. No entanto, também é comum que o objetivo da separação seja a obtenção de um líquido límpido (usualmente conhecido como filtrado), a exemplo dos filtros clarificadores, empregados na indústria cervejeira e no tratamento de água (McCABE *et al.*, 1993; COULSON & RICHARDSON, 2002).

Além disso, a técnica de filtração pode ser empregada tanto em atividades que lidam com grandes volumes de suspensão, como no caso da purificação de água ou do tratamento de minério, quanto em aplicações que trabalham com quantidades relativamente pequenas, a exemplo da indústria de química fina (McCABE *et al.*, 1993; SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

Do ponto de vista operacional, dois tipos distintos de filtração são mais utilizados na prática: a filtração superficial ou com formação de torta (do inglês “cake filtration”) e a filtração em profundidade (do inglês “deep bed filtration”). A Figura 3 apresenta uma ilustração da principal diferença entre esses dois mecanismos (McCABE *et al.*, 1993; SVAROVSKY, 2000).

Conforme se pode notar, na filtração superficial a maior parte das partículas tende a se depositar sobre a superfície da matriz porosa, ao invés do seu interior, formando um

leito deformável normalmente conhecido como torta. Na verdade, a situação ideal é aquela em que os poros da superfície filtrante possuem tamanhos próximos aos dos sólidos coletados, oferecendo pouca resistência ao escoamento e fazendo com que a operação de separação só seja realmente efetiva após a retenção de uma camada inicial, constituída de partículas grandes o suficiente para fechar parcialmente as aberturas e evitar a invasão de finos (SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

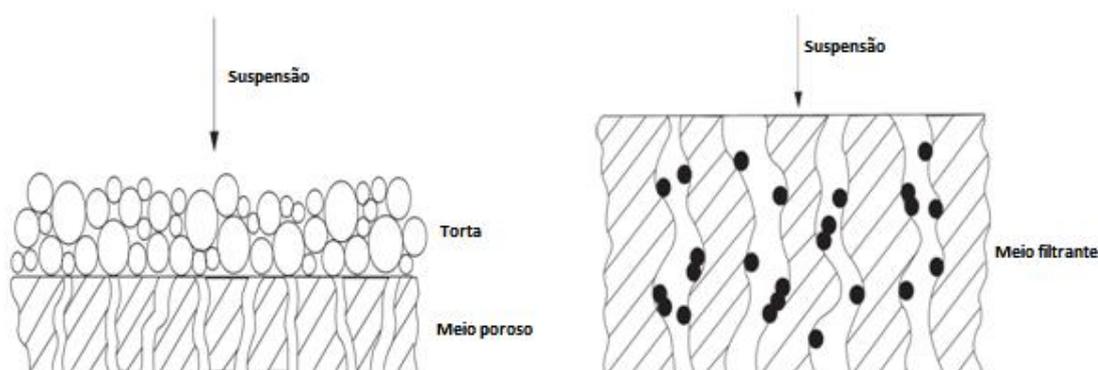


Figura 3. Modos de filtração com formação de torta (à esquerda) e filtração em profundidade (à direita). Fonte: adaptada de Svarovsky (2000).

Na medida em que a espessura da torta cresce de forma gradual, a resistência ao escoamento aumenta progressivamente, dando origem ao verdadeiro meio filtrante do processo para a suspensão que será alimentada subsequentemente (McCABE *et al.*, 1993; SVAROVSKY, 2000; MASSARANI, 2002; COULSON & RICHARDSON, 2002).

Nesse modo de operação, os principais fatores que afetam a taxa de filtração se resumem a:

- i. Queda de pressão na célula de filtração;
- ii. Área disponível na superfície filtrante;
- iii. Viscosidade do filtrado;
- iv. Resistência oferecida pela torta;
- v. Resistência oferecida pelo meio filtrante e pelas camadas iniciais de torta.

No esquema da filtração com formação de torta apresentado na Figura 3, o processo ocorre de tal maneira que a alimentação da suspensão sólido-líquido a ser tratada é feita integralmente de forma perpendicular ao meio filtrante, com escoamento praticamente desprezível na direção paralela. Uma alternativa a esse modo de operação, frequentemente utilizada nas atividades que trabalham com a tecnologia de membranas para realizar a clarificação de efluentes e concentrar suspensões diluídas, é a chamada filtração cruzada (do inglês “cross-flow filtration”). Neste caso, a suspensão também irá apresentar escoamento significativo na direção paralela ao meio filtrante, conforme ilustrado na Figura 4. Como resultado, tem-se a formação de um leito de partículas sobre as paredes permeáveis do filtro, cuja espessura é limitada pela ação erosiva do fluxo axial (SVAROVSKY, 2000; HWANG & WANG, 2001; FERREIRA & MASSARANI, 2005).

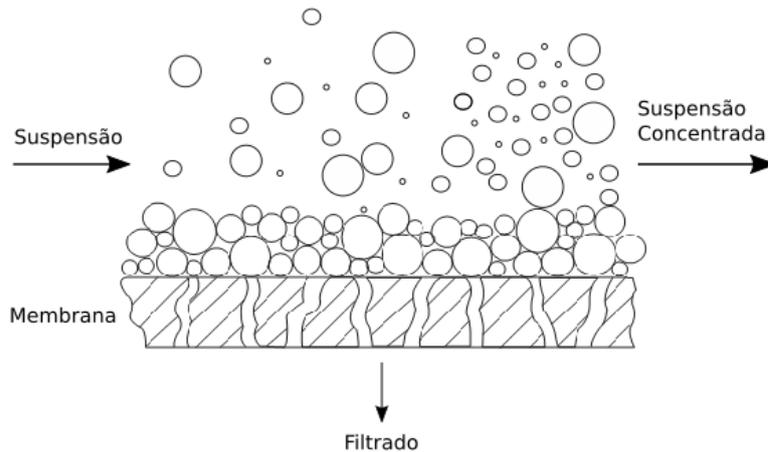


Figura 4. Esquema da filtração cruzada. Fonte: adaptada de McCabe *et al.* (1993).

Na filtração em profundidade, as partículas são em geral menores do que as aberturas do meio filtrante e, portanto, penetram no interior dos poros com superfícies tortuosas, permanecendo retidas devido à ação de mecanismos gravitacionais, inerciais e de difusão (Figura 3 à direita). Por conta disso, a matriz porosa vai sendo gradualmente preenchida pelas partículas coletadas e, eventualmente, níveis impraticáveis de resistência ao escoamento são atingidos, o que exige a interrupção da operação para realizar-se a remoção dos sólidos. As filtrações em profundidade são normalmente empregadas para tratar suspensões diluídas, com concentração de sólidos em torno de 0,1% por volume (SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

Entre os dois tipos, a filtração com formação de torta tem aplicação mais ampla, particularmente na indústria química, devido à possibilidade de lidar com suspensões mais concentradas (SVAROVSKY, 2000).

No estudo da filtração, assim como em outras operações de separação sólido-líquido, as quantidades básicas de interesse para o projeto e análise de desempenho do processo são as relações entre taxa de escoamento do fluido (filtrado) e queda de pressão no sistema. Neste sentido, a lei de Darcy, dada pela equação (1), oferece uma alternativa para o cálculo da velocidade superficial de fluido, q , que percola através de um leito de partículas fixo e uniforme a uma dada diferença de pressão ΔP (SVAROVSKY, 2000; COULSON & RICHARDSON, 2002).

$$q = \frac{\Delta P}{\mu_f R_m} \quad (1)$$

onde R_m é a resistência do meio ao escoamento, igual à ℓ/k , espessura do meio dividida pela permeabilidade do mesmo (L^{-1}); μ_f é a viscosidade dinâmica do fluido ($ML^{-1}T^{-1}$).

Na medida em que as partículas presentes na suspensão sólido-líquido se depositam sobre a superfície do meio poroso, uma torta de filtração com espessura crescente começa a se formar, tomando boa parte da queda de pressão disponível para si. Como resultado, têm-se um aumento efetivo da resistência global ao escoamento com o tempo, fazendo com o fluxo de filtrado caia progressivamente numa operação a ΔP constante, ou, alternativamente, com que a diferença de pressão aumente gradualmente numa operação a fluxo constante (TILLER & COOPER, 1960; SVAROVSKY, 2000).

Na verdade, o que acontece é que com o crescimento da espessura da torta de filtração, o líquido passa a enfrentar uma resistência adicional ao escoamento, R_c , que tende a aumentar com o tempo de operação. Isto é, o meio poroso e a torta são percolados

em série pelo fluido, logo a equação de Darcy precisa ser modificada para incorporar este efeito, conforme descrito na equação (2) (SVAROVSKY, 2000; MASSARANI, 2002).

$$q = \frac{\Delta P}{\mu_f(R_m + R_c)} \quad (2)$$

Onde R_c pode ser diretamente fornecida pelo produto entre a resistividade média da torta, $\langle \alpha \rangle$, relativa a uma queda de pressão ΔP_c , e a massa de sólido seco depositada na torta por unidade de área, w , segundo a equação (3) (MASSARANI, 2002).

$$R_c = \langle \alpha \rangle w \quad (3)$$

Como a maioria das tortas de filtração é compressível, ao menos em alguma medida, a porosidade do leito de partículas torna-se função da posição espacial e tende a diminuir progressivamente ao longo da direção do escoamento, em decorrência da força de arraste adicional exercida pelas camadas superiores da torta sobre as partículas mais próximas do meio filtrante. Por conta disso, a resistividade local varia ao longo da torta e seu valor médio deve ser dado pela equação (4) (TILLER & COOPER, 1960; SVAROVSKY, 2000; MASSARANI, 2002; COULSON & RICHARDSON, 2002).

$$\frac{1}{\langle \alpha \rangle} = \frac{1}{\Delta P_c} \int_0^{\Delta P_c} \frac{dP}{\alpha} \quad (4)$$

$$\alpha = \frac{1}{\rho_s(1 - \varepsilon)k(\varepsilon)} \quad (5)$$

Desse modo, a equação (6) resume a equação básica de trabalho para a filtração com formação de torta, a partir da qual, derivações subsequentes podem ser obtidas para tratar situações mais específicas, a depender das condições operacionais adotadas, dentre outros fatores (McCABE *et al.*, 1993; SVAROVSKY, 2000; MASSARANI, 2002; COULSON & RICHARDSON, 2002).

$$q = \frac{1}{A} \frac{dV}{dt} = \frac{\Delta P}{\mu_f(\langle \alpha \rangle w + R_m)} \quad (6)$$

A descrição completa desse formalismo, partindo-se das considerações propostas pelas teorias da filtração com formação de torta e da filtração simplificada foram discutidas por diferentes autores e pode ser encontrada com maiores detalhes em Svarovsky (2000), Massarani (2002) e Coulson & Richardson (2002).

Ao longo dos anos, diversas metodologias de pesquisa foram desenvolvidas para descrever e analisar a deposição de sólidos particulados em líquidos, resultando em uma vasta coleção de modelos de sedimentação e filtração disponíveis na literatura destacando-se os trabalhos de Tiller & Cooper (1960), Wakeman (1978), Tien *et al.* (1997), Massarani (2002) e Ferreira & Massarani (2005).

2.1.3 Filtração na Engenharia de Petróleo

No processo convencional de perfuração de poços de petróleo em condição de “overbalance”, o diferencial de pressão positivo que se estabelece entre a região anular e a rocha reservatório força o escoamento radial da lama de perfuração em direção às paredes

do poço, fazendo com que a base líquida da suspensão percole através da matriz porosa e invada a formação. Dessa forma, estabelece-se durante a operação um processo de filtração, onde os sólidos particulados que compõem a lama gradualmente se depositam sobre a superfície exposta da rocha formando uma torta de baixa permeabilidade conhecida como reboco (JIAO & SHARMA, 1993).

Na prática, a filtração acontece em dois momentos distintos durante a operação de perfuração. Em condições dinâmicas, ou de filtração dinâmica, a lama em circulação no poço experimenta tanto o escoamento na direção radial quanto na direção axial, de modo que a espessura da torta e conseqüentemente a taxa de filtração é governada por um equilíbrio dinâmico entre a tensão cisalhante exercida pelo fluido e a resistência ao cisalhamento do reboco. Quando, por algum motivo, a circulação é interrompida, o escoamento se mantém apenas na direção radial, provocado pela pressurização do fluido contra a matriz rochosa. Nesta situação, comumente conhecida como filtração estática, a ausência do efeito erosivo do fluxo axial permite o crescimento indefinido da espessura do reboco, que passa a representar a maior resistência à filtração. As condições de filtração estática e dinâmica são ilustradas na Figura 5 (DEWAN & CHENEVERT, 2001).



Figura 5. Esquema do processo de filtração de um fluido de perfuração em condições estática (à esquerda) e dinâmica (à direita). Fonte: adaptada de Araújo (2010).

A formação do reboco nas paredes do poço é benéfica e tem papel importante na minimização da perda de fluido de perfuração e no controle da extensão dos danos à formação, provocados pela penetração de particulados finos, que formam uma torta interna e diminuem a permeabilidade da rocha. No entanto, uma série de problemas também pode surgir quando a espessura dessa torta cresce excessivamente, tais como redução do diâmetro efetivo do poço, geração de torque e arraste excessivos ao girar e recolher a broca, respectivamente, e o estrangulamento diferencial. Dessa maneira, a capacidade de fazer previsões sobre características da torta e sobre o comportamento de variáveis que governam o processo de filtração, tais como a espessura do reboco e a taxa de filtração tem importância crucial na otimização e diminuição de custos das operações de perfuração (JIAO & SHARMA, 1993).

Muitos estudos de cunhos teórico e experimental foram realizados sobre os processos de filtração estática e dinâmica de lamas de perfuração base óleo e base água, objetivando-se definir composições e propriedades ótimas de fluido para aplicação direta em operações de perfuração. Como referências importantes desses estudos na literatura podem-se

destacar os trabalhos de Di Jiao & Sharma (1993), Liu & Civan (1993), Xiao *et al.* (1999) e Dewan & Chenevert (2001).

Neste contexto, o Laboratório de Escoamento de Fluidos (LEF) da UFRRJ também vem estudando, há algum tempo, em parceria com o CENPES/PETROBRAS, o processo de filtração que se estabelece durante a operação de perfuração. Diversos trabalhos foram realizados em condições estáticas e dinâmicas, com as propriedades de torta estimadas tanto para fluidos de perfuração base água como base óleo. Araújo (2010) estudou o processo de filtração cruzada em geometria cilíndrica e avaliou parâmetros da filtração como resistividade média da torta, resistência do meio filtrante, porosidade, tempo de filtração e volume de filtrado. Martins (2013) realizou a montagem de uma célula de filtração HTHP (“high temperature – high pressure”), equipamento comumente empregado na indústria do petróleo para o estudo da filtração estática e dinâmica. Na sequência, Calabrez (2013) desenvolveu um trabalho na mesma célula HTHP para determinar parâmetros das tortas de filtração e invasão de filtrado de fluidos base água e base óleo. Dando continuidade à pesquisa, Silveira (2014) realizou um trabalho para avaliar os parâmetros de filtração estática de fluidos base água, preparados com diferentes faixas de distribuição granulométrica de carbonato de cálcio e diferentes tipos de polímeros viscosificantes.

2.1.4 Modelagem e Simulação de Sistemas Particulados

Diversos modelos matemáticos foram desenvolvidos para estudar o transporte e a deposição de sólidos particulados durante o escoamento de suspensões sólido-líquido em meios porosos, resultando em uma vasta coleção de modelos de sedimentação e filtração disponíveis na literatura (TILLER & CHEN, 1988; LU & HWANG, 1993; DAMASCENO, 1992; TIEN *et al.*, 1997; DEWAN & CHENEVERT, 2001; FERREIRA & MASSARANI, 2005).

Tradicionalmente, a maioria dos problemas envolvendo sistemas particulados tem sido descrita e solucionada por meio de modelos fenomenológicos baseados numa extensão da mecânica do contínuo para incluir as misturas, a chamada teoria do transporte em misturas, que é capaz de descrever, entre outros fenômenos, o escoamento de fluidos em meios porosos (DAMASCENO, 1992; MASSARANI, 2002; AROUCA, 2007).

A hipótese de um *continuum* admite que, do ponto de vista global, os materiais de interesse para engenharia podem ser vistos como meios contínuos, cujas estruturas microscópicas são adequadamente descritas por propriedades físicas médias, que variam suavemente de ponto a ponto no espaço, desde que o comprimento característico do sistema de interesse em particular seja consideravelmente maior do que o livre caminho médio das moléculas do material. Matematicamente o resultado dessa consideração é que propriedades tais como massa específica, temperatura, velocidade, etc., são consideradas funções contínuas da posição e do tempo (FOX *et al.*, 2010; MUNJIZA *et al.*, 2004; BIRD *et al.*, 2004).

A combinação dessas propriedades macroscópicas do material, frequentemente chamadas de equações ou leis constitutivas, com a aplicação dos princípios fundamentais de conservação da massa, energia e quantidade de movimento compõe o formalismo básico dos modelos contínuos. As equações governantes que resultam dessa modelagem aparecem na forma um sistema de equações diferenciais parciais acopladas, que, em conjunto com as condições iniciais e de contorno apropriadas, encerram um determinado problema de valor de contorno/inicial (BIRD *et al.*, 2004).

Nessa linha de abordagem, uma possibilidade de formulação para descrever a fluidodinâmica do escoamento em meios porosos deformáveis, como é o caso das tortas e

sedimentos produzidos nas operações de filtração e espessamento de suspensões, consiste na aplicação da teoria de misturas para modelar o processo multifásico através das equações da continuidade e do movimento tanto para o líquido quanto para os sólidos, juntamente com as equações constitutivas necessárias. As equações (7) a (12) apresentam o conjunto de EDPs que generalizam o problema (MASSARANI, 2002).

Equações da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho_f) + \text{div}(\varepsilon\rho_f\mathbf{v}_f) = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[(1 - \varepsilon)\rho_s] + \text{div}[(1 - \varepsilon)\rho_s\mathbf{v}_s] = 0 \quad (8)$$

Equações do movimento

$$\varepsilon\rho_f \left[\frac{\partial \mathbf{v}_f}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}_f)\mathbf{v}_f \right] = -\text{div}p - \mathbf{m} + \rho_f \mathbf{g} \quad (9)$$

$$(1 - \varepsilon)\rho_s \left[\frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}_s)\mathbf{v}_s \right] = \text{grad } \mathbf{T}_s + \mathbf{m} + (1 - \varepsilon)(\rho_s - \rho_f)\mathbf{g} \quad (10)$$

Equações constitutivas

$$\mathbf{m} = \frac{\mu_f}{k} \varepsilon \mathbf{u}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s \quad (11)$$

$$\mathbf{T}_s = \mathbf{T}(\mathbf{F}_s) \quad (12)$$

Onde ε é a porosidade em um ponto de matriz, ρ_f e ρ_s a massa específica do fluido e do sólido, \mathbf{v}_f e \mathbf{v}_s a velocidade intersticial das fases fluida e sólida, p a pressão no fluido, \mathbf{m} a força resistiva que o fluido exerce sobre a matriz sólida (por unidade de volume do sistema particulado), \mathbf{g} a intensidade do campo exterior, \mathbf{T}_s a tensão exercida sobre a fase sólida e \mathbf{F}_s o gradiente de deformação (MASSARANI, 2002).

Esse sistema de equações diferenciais parciais não lineares, com condições de contorno móveis, é extremamente complexo de se trabalhar e, muito provavelmente, mesmo após a introdução de uma série de hipóteses simplificadoras, seria preciso lançar mão de alguma metodologia numérica sofisticada de integração para se chegar a solução de um problema em particular. Alia-se a isso a dificuldade experimental na determinação do perfil de porosidades e da dependência entre a porosidade, pressão nos sólidos e permeabilidade, que são relações constitutivas necessárias à solução do problema (MASSARANI, 2002).

Em outras palavras, aplicando-se a teoria da mecânica do contínuo à modelagem de processos envolvendo sistemas particulados, é possível determinar distribuições de propriedades macroscópicas do material, tais como massa específica, velocidade e tensão, solucionando-se as equações de balanço pertinentes em conjunto com as relações constitutivas, condições iniciais e condições de contorno apropriadas. Entretanto, as maiores desvantagens desse tipo de técnica consistem na sua forte dependência para com as relações constitutivas escolhidas para descrever o comportamento de um determinado material, as quais são, muitas das vezes, demasiadamente simples, específicas e insensíveis aos efeitos de propriedades microscópicas importantes, tais como tamanho, formato e atrito entre as partículas, além da frequente necessidade de se lançar mão de métodos numéricos sofisticados, tais como diferenças finitas (MDF), volumes finitos (MVF) ou elementos finitos (MEF) para obter-se uma solução aproximada do problema (LANGSTON *et al.*, 1994; ZHU *et al.*, 2005).

Alternativamente, os chamados métodos de elementos discretos, cuja principal característica consiste na consideração explícita de cada partícula, das suas propriedades e interações em determinado material, apresentam-se como opção interessante para realização de modelagens e simulações computacionais que efetivamente incorporem as informações microdinâmicas responsáveis por originar o comportamento macroscópico observado nos sistemas particulados de interesse (ZHU *et al.*, 2008; O’SULLIVAN, 2011).

O fato dos métodos discretos considerarem as partículas como entidades separadas no modelo, torna desnecessária a admissão de considerações globais ou a inclusão de modelos constitutivos sofisticados para descrever o comportamento macroscópico de um material (LANGSTON *et al.*, 1994; ZHU *et al.*, 2007; O’SULLIVAN, 2011).

Diversas técnicas de simulação discreta, em muito impulsionadas pelo crescimento paralelo da tecnologia da computação, foram sendo desenvolvidas nas últimas décadas, tais como: a dinâmica molecular, a dinâmica Browniana, o método de Monte Carlo, os métodos de elementos discretos, dentre outros (ZHU *et al.*, 2005; O’SULLIVAN, 2011; MARSHALL & LI, 2014).

Nesse contexto, o método de elementos discretos, mais conhecido como DEM (do inglês “Discrete Element Method”), consiste em uma técnica de modelagem computacional em que os deslocamentos e as rotações das inúmeras partículas que compõem um material são calculados passo a passo ao longo do tempo, tratando-se, portanto, de um método transiente de análise numérica. Dessa forma, o DEM é capaz de fornecer informações microdinâmicas detalhadas, tais como trajetórias, velocidades instantâneas e forças transientes agindo sobre as partículas, as quais seriam impossíveis de se obter experimentalmente ou através de modelos contínuos convencionais (MARSHALL & LI, 2014; O’SULLIVAN, 2011; ZHU *et al.*, 2007, 2008).

Conseqüentemente, um número cada vez maior de pesquisadores tem começado a utilizar as técnicas de elementos discretos para descrever o comportamento de sistemas particulados em diversas aplicações, conforme pode ser verificado no gráfico da Figura 6 (ZHU *et al.*, 2007; 2008).

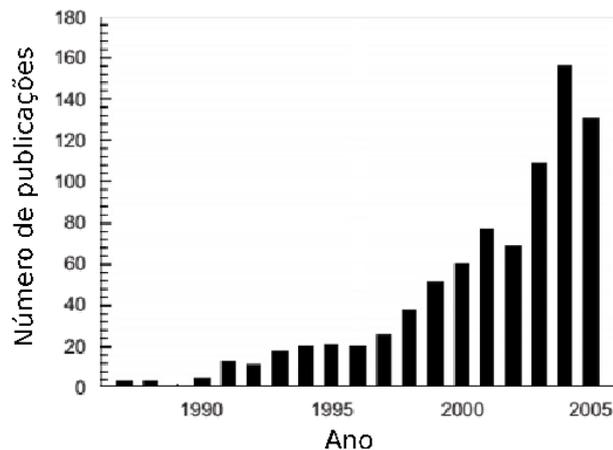


Figura 6. Número de publicações relacionadas à simulação discreta de sistemas particulados nos últimos anos (dados até 2005). Fonte: Zhu *et al.* (2007).

De fato, o método de elementos discretos tem sido empregado na análise de uma enorme variedade de processos que vão desde o estudo da deposição de sólidos sob ação gravitacional, formação de pilhas, escoamentos em silos e esteiras como descrito em Langston *et al.* (1994) e Zhang *et al.* (2001), até o estudo de processos sólido-fluido como a sedimentação, filtração plana e filtração cruzada, transporte pneumático, fluidização e

operação de ciclones e hidrociclones, conforme encontrado em Tsuji *et al.* (1992), Xu & Yu (1997; 2003), Li *et al.* (2002), Hwang & Wang (2001), Dong *et al.* (2003; 2006; 2009).

2.2 O Método de Elementos Discretos

Na técnica de elementos discretos, ou DEM, a proposta é modelar os sistemas granulares por meio de um conjunto finito de corpos discretos de formato regular, que pode ser esférico ou poligonal. Permite-se que eles interajam uns com os outros, com as suas vizinhanças (paredes sólidas de um equipamento, por exemplo) e/ou possivelmente com algum tipo de fluido presente no meio, trocando, assim, energia e quantidade de movimento. No decorrer de tais processos microscópicos, os sólidos poderão apresentar dois movimentos básicos, a translação e a rotação, os quais devem ser governados pelas forças e torques resultantes que agem sobre cada elemento (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; ZHU *et al.*, 2005; 2007).

2.2.1 Equações Governantes

Com base nessas considerações, as equações da segunda lei do movimento de Newton podem ser utilizadas para descrever o comportamento do material particulado de forma dinâmica. Considerando uma partícula qualquer, i , pertencente a um sistema genérico com N elementos discretos, essa lei se resume às equações (13) e (14), para translação e rotação, respectivamente (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad (13)$$

$$I_i \frac{d^2 \boldsymbol{\varphi}_i}{dt^2} = \mathbf{T}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, \dots, N \quad (14)$$

onde \mathbf{r}_i e $\boldsymbol{\varphi}_i$ são os vetores de posição do centro de massa e de orientação angular da partícula i , respectivamente, e \mathbf{F}_i e \mathbf{T}_i representam as forças e torques resultantes que atuam sobre a mesma, respectivamente. A massa, m_i , e o momento de inércia, I_i , de uma partícula esférica com massa específica, ρ_i , podem ser obtidos facilmente por meio das equações (15) e (16), respectivamente (YANG *et al.*, 2000).

$$m_i = \left(\frac{4}{3}\right) \pi R_i^3 \rho_s \quad (15)$$

$$I_i = \left(\frac{2}{5}\right) m_i R_i^2 \quad (16)$$

Conhecendo-se as coordenadas e as velocidades iniciais das partículas, bem como expressões adequadas para a determinação das forças e torques resultantes, as equações (13) e (14) podem ser prontamente solucionadas por meio de algum esquema numérico de integração. Como resultado o modelo fornece trajetórias, velocidades instantâneas e forças transientes que agem sobre as partículas passo a passo no tempo (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Essas informações microdinâmicas podem ser diretamente utilizadas na obtenção de parâmetros importantes para a análise e quantificação de um determinado fenômeno físico, tais como: espessura, porosidade e permeabilidade de torta no caso da filtração (DONG *et al.*, 2003; 2006; 2009; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Diferentes tipos de forças de interação podem estar presentes nos processos de sedimentação e filtração de sólidos particulados, incluindo a força gravitacional, as forças mecânicas de contato, as forças de longo alcance repulsivas e/ou coesivas (elétrica, van der Waals, etc.) e as forças do tipo fluido-partícula. Sendo assim, a resultante sobre um determinado elemento deve ser calculada como a soma vetorial de todas essas contribuições, conforme generalizado na equação (17) (ZHU *et al.*, 2007).

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^c + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^{nc} + \mathbf{F}_i^f + m_i \mathbf{g} \quad (17)$$

onde \mathbf{F}_{ij}^c representa a força de contato que atua sobre a partícula i devido à interação com j ; \mathbf{F}_{ij}^{nc} é força de longo alcance que atua sobre i devido à interação com j ; \mathbf{F}_i^f é a força que atua sobre i devido à sua interação com algum fluido e \mathbf{g} é a aceleração gravitacional.

Da mesma forma, o torque resultante sobre a partícula i pode ser determinado por meio da soma vetorial de todos os torques de interação com os demais elementos do sistema, com as quais essa partícula entra em contato. Neste caso, as contribuições mais comuns incluem o torque gerado pela ação de forças tangenciais e o torque devido ao atrito de rolamento, de acordo com a equação (18) (YANG *et al.*, 2000).

$$\mathbf{T}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{T}_{ij}^t + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{T}_{ij}^r \quad (18)$$

onde \mathbf{T}_{ij}^t é o torque tangencial que age sobre i devido à sua interação com j e \mathbf{T}_{ij}^r é o torque de rolamento que age sobre i devido à sua interação com j .

O equacionamento resumido de alguns modelos matemáticos comumente empregados pelo DEM para calcular as forças e torques que agem sobre partículas esféricas é apresentado nos itens a seguir.

2.2.2 Forças de Interação Mecânica

Vários modelos de partículas se encontram disponíveis na literatura para a implementação direta no método de elementos discretos. A escolha da opção mais adequada a determinada aplicação deve sempre levar em conta um bom compromisso entre o custo computacional e a descrição realística e precisa do comportamento mecânico do sistema (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Durante um evento de colisão, parte da energia cinética associada ao movimento relativo das partículas é dissipada sob a forma de calor e suas superfícies se deformam mutuamente durante o processo. Para tentar descrever a mecânica complexa dessa interação, a proposta do DEM consiste em representar virtualmente as partículas, por meio de corpos rígidos de formato regular (esferas, elipses ou poliedros) e permitir que eles sofram sobreposições suaves durante os seus contatos ao longo da simulação (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; JIN & PATZEK, 2003; O'SULLIVAN, 2011).

Geometricamente, o modelo de partícula mais simples e intuitivo de se trabalhar é o da esfera perfeita (ou disco circular em duas dimensões), em função do ganho significativo em eficiência computacional durante a etapa de detecção de contatos. Para que duas partículas esféricas, i e j , sejam adicionadas à lista de colisões do algoritmo DEM, basta que a soma de seus raios exceda a distância entre seus centros de massa, satisfazendo a desigualdade apresentada na equação (19) (LUDING, 2001; POSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$\xi_{ij} = R_i + R_j - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > 0 \quad (19)$$

onde ξ_{ij} é chamada de compressão mútua, sobreposição ou deformação sofrida pelas partículas durante o contato (L); R_i e R_j representam os raios das partículas i e j , respectivamente (L); \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j são os vetores de posições dos seus centros de massa, respectivamente (L).

Na Figura 7 é apresentada uma ilustração do procedimento adotado pelo método de elementos discretos para representar o contato entre duas partículas circulares (LUDING, 2001).

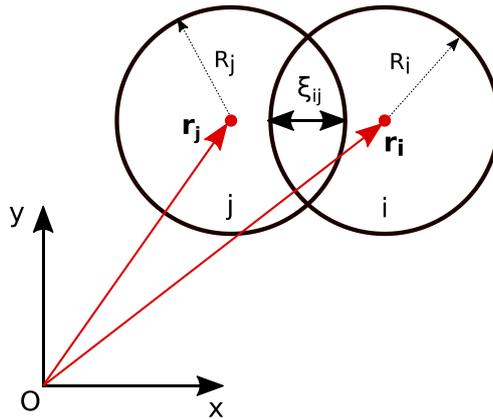


Figura 7. Esquema do contato entre duas partículas com forma de disco circular. Se o valor da sobreposição, ξ_{ij} , é maior do que zero então o contato é confirmado.

Simulações utilizando partículas esféricas compostas ou partículas poligonais, como aquelas ilustradas na Figura 8 e na Figura 9, também são frequentemente encontradas em aplicações do método de elementos discretos na literatura (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

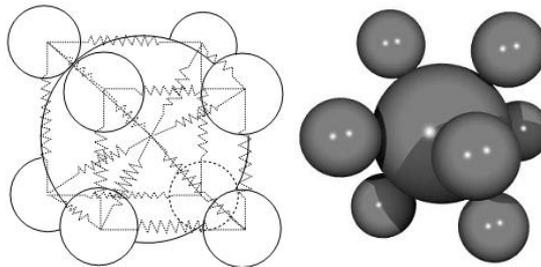


Figura 8. Partículas esféricas compostas. Fonte: adaptada de Pöschel & Schwager (2005).

Devido à sua maior versatilidade em capturar as complexidades de forma dos particulados reais, esses modelos elaborados têm maior utilização em problemas que exigem um alto grau de detalhamento sobre comportamento dos sólidos, especialmente no que diz respeito à mecânica do contato e a descrição do atrito estático entre partículas. Porém, vale ressaltar que identificação de colisões e, conseqüentemente, a quantificação das interações partícula-partícula, sempre será uma tarefa mais difícil do que quando se modela com esferas simples (PÖSCHEL & SCWAGER, 2005; ZHU *et al.*, 2007; MATUTTIS & CHEN, 2014).

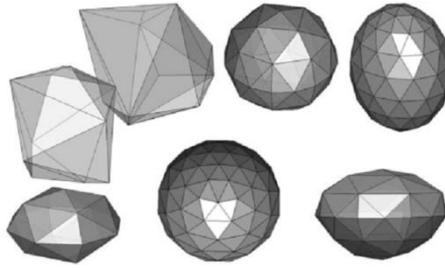


Figura 9. Diferentes formatos de partículas poligonais em 3D, utilizadas nas simulações de elementos discretos. Fonte: adaptada de Matuttis & Chen (2014).

Como a colisão entre duas partículas acontece em uma região finita de seus corpos, devido às deformações decorrentes do impacto, na prática é extremamente difícil quantificar de uma forma absolutamente precisa e geral as forças e torques resultantes que agem sobre cada elemento, uma vez que eles se encontram diretamente vinculados a inúmeros fatores físicos e geométricos (ZHU *et al.*, 2007).

Identificada a ocorrência do contato, o método de elementos discretos busca contornar esse problema empregando modelos reológicos simplificados, baseados em diferentes combinações de elementos mecânicos básicos (molas, amortecedores, etc.), para equacionar, de forma computacionalmente eficiente, as relações de força-deformação entre partículas (DI RENZO & DI MAIO, 2004; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; ZHU *et al.*, 2007; O’SULLIVAN, 2011).

Por simplicidade, os modelos de força para partículas esféricas consideram que a interação mecânica pode ser representada através de uma força que atua em um ponto de contato único, r_c , definido como o centro da região de sobreposição. Admite-se ainda, que essa força seja dividida em duas componentes: uma normal e outra tangencial ao plano de contato, conforme apresentado na Figura 10. Como comentado anteriormente, ambas existem apenas se a sobreposição for detectada (JIN & PATZEK, 2003; ZHU *et al.*, 2007; O’SULLIVAN, 2011).

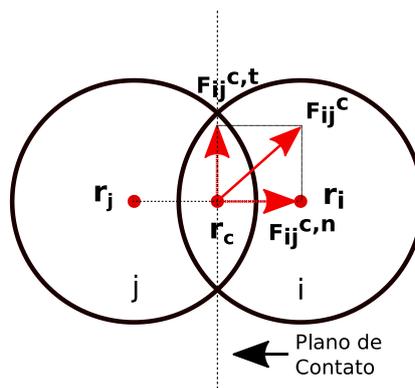


Figura 10. Esquema das forças normais e tangenciais decorrentes do contato. Ambas atuam no centro geométrico da região sobreposta, representado pelo vetor de posição r_c .

Vale observar que as forças representadas na Figura 10 são as componentes da força de contato resultante que atua sobre a partícula i , devido à colisão com a partícula j , F_{ij}^c . Pela terceira lei de Newton, a força correspondente atuando sobre j poderia ser obtida apenas invertendo-se os sentidos dos vetores representados em vermelho (O’SULLIVAN, 2011; MATUTTIS & CHEN, 2014). Matematicamente essas considerações podem ser formalizadas pelas equações (20), (21) e (22).

$$\mathbf{F}_{ij}^c = \begin{cases} \mathbf{F}_{ij}^{c,n} + \mathbf{F}_{ij}^{c,t} & \text{se } \xi_{ij} > 0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (20)$$

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_i + (R_i - 0,5\xi_{ij})\mathbf{n}_{ij} \quad (21)$$

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (22)$$

onde $\mathbf{F}_{ij}^{c,n}$ é a componente normal da força de contato (MLT^{-2}); $\mathbf{F}_{ij}^{c,t}$ é a componente tangencial da força de contato (MLT^{-2}) e \mathbf{n}_{ij} representa o vetor unitário que aponta na direção da linha que une os centros de massa das partículas (adimensional).

Como o DEM admite que as forças de colisão atuem no ponto de contato, \mathbf{r}_c , ao invés dos centros de massa, \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j , elas criam torques que provocam movimentos de rotação nas partículas. Como era de se esperar, a componente normal induz os movimentos translacionais, enquanto a tangencial (atrito) fica efetivamente responsável pela rotação. Dessa forma, o torque gerado sobre uma partícula i devido à sua interação com outra partícula j , pode ser calculado a partir do raio R_i e da força $\mathbf{F}_{ij}^{c,t}$ por meio das equações (23) e (24) (YANG *et al.*, 2000; LUDING, 2001; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$\mathbf{T}_{ij}^t = \mathbf{R}_i \times \mathbf{F}_{ij}^{c,t} \quad (23)$$

$$\mathbf{R}_i = -R_i\mathbf{n}_{ij} \quad (24)$$

onde \mathbf{R}_i representa o vetor radial que liga o centro da partícula i ao ponto de contato com j (L); \mathbf{T}_{ij}^t representa o torque que age sobre i devido à sua interação com j (ML^2T^{-2}).

Segundo Zhu *et al.* (2007), uma outra contribuição importante ao torque resultante é o chamado torque de rolamento, que está diretamente associado à ocorrência de uma distribuição assimétrica de tensão normal sobre as superfícies das partículas durante o contato, conforme ilustra a Figura 11.

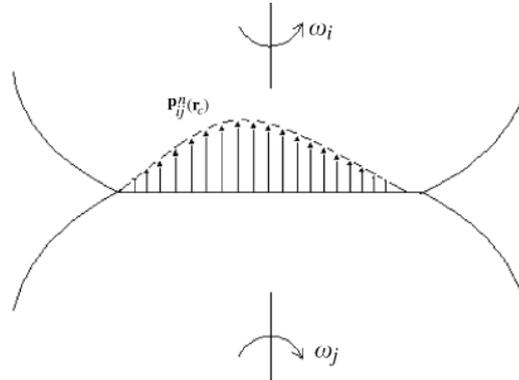


Figura 11. Ilustração da distribuição assimétrica de tensão normal, \mathbf{p}_{ij}^n . Essa tensão é responsável por gerar o chamado torque de rolamento. Fonte: adaptada de Zhu *et al.* (2007).

Comparado ao torque gerado pela ação de forças tangenciais, que pode ser facilmente determinado por meio da equação (23), o torque devido ao atrito de rolamento é notadamente mais complexo de se calcular e ainda representa um tema de intensa discussão na área de elementos discretos. No entanto, segundo reportado por diferentes autores da área, a inclusão desse torque pode ter papel fundamental na modelagem de

processos de formação de leito e pilhas de partículas sólidas (BRILLIANTOV & PÖSCHEL, 1998; IWASHITA & ODA, 1998; ZHU *et al.*, 2007).

Uma opção simples e frequentemente utilizada para representar o efeito do torque de rolamento é o modelo de Brilliantov & Pöschel (1998), apresentado na equação (25).

$$\mathbf{T}_{ij}^r = -\mu_r R_i |\mathbf{F}_{ij}^{c,n}| \hat{\omega}_n \quad (25)$$

onde $\mathbf{F}_{ij}^{c,n}$ é a componente normal da força de contato que age sobre i devido à interação com j (MLT^{-2}); R_i é o raio da partícula i (L); \mathbf{T}_{ij}^r é o torque de rolamento que age sobre i devido à interação com j (ML^2T^{-2}); μ_r é o coeficiente de atrito de rolamento (adimensional); $\hat{\omega}_i$ é um vetor unitário que atua na normal (adimensional).

Vale ressaltar que os torques correspondentes nas duas partículas são paralelos, mas não necessariamente iguais em magnitude. Na verdade, isto só irá acontecer quando os elementos possuírem mesmo diâmetro, caso contrário, o torque que age sobre j , por exemplo, deve ser calculado por $\mathbf{T}_{ji} = (R_j/R_i)\mathbf{T}_{ij}$ (YANG, 2000; LUDING, 2001).

A seguir são apresentadas as formulações de alguns modelos usualmente empregados no DEM para descrever interações mecânicas entre partículas esféricas.

2.2.2.1 Força Normal

A componente normal da força de colisão atua na direção ortogonal ao plano de contato entre as duas partículas, conforme ilustrado anteriormente na Figura 10. Essa força consiste de duas partes: uma conservativa, que descreve o efeito da elasticidade do material, e outra dissipativa, que leva em conta a perda de energia cinética durante a colisão. Existem vários equacionamentos disponíveis na literatura para incorporar o efeito dessa força às simulações. No entanto, apenas alguns modelos de uso mais comum para partículas esféricas, tais como o modelo linear de Cundall-Strack e o modelo não linear de Hertz, foram descritos neste trabalho. Outros exemplos mais específicos podem ser encontrados com relativa facilidade em Luding (2001), Pöschel & Schwager (2005), O'Sullivan (2011) e Matuttis & Chen (2014).

Modelo linear de Cundall-Strack

Originalmente proposto por Cundall & Strack (1979), pesquisadores que deram origem ao método de elementos discretos, este modelo é considerado como a opção mais simples e intuitiva para descrever a mecânica do contato em sistemas granulares. A ideia básica consiste na combinação, em paralelo, de dois elementos mecânicos lineares: uma mola e um amortecedor, conforme ilustrado na Figura 12. A primeira tem o papel de incluir uma contribuição elástica à resposta do modelo e o segundo contempla a dissipação de energia devido às deformações plásticas sofridas pelo material.

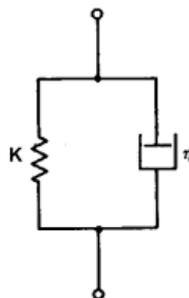


Figura 12. Representação do modelo linear como uma combinação em paralelo de dois elementos mecânicos: a mola e o amortecedor. Fonte: adaptada de O'Sullivan (2011).

A equação (26) traz a formulação mais comum deste modelo, apresentada como uma relação do tipo força–deformação, usualmente utilizada em elementos discretos (CUNDALL & STRACK, 1979; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; JIN & PATZEK, 2003; ZHU *et al.*, 2007).

$$\mathbf{F}_{ij}^{c,n} = K_n \xi_n \mathbf{n}_{ij} - C_n (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij} \quad (26)$$

onde C_n representa o coeficiente de amortecimento viscoso (MT^{-1}); K_n representa o coeficiente de restauração elástica (MT^{-2}); \mathbf{v}_{ij} é o vetor velocidade relativa entre i e j no ponto de contato (LT^{-1}); ξ_n é deformação sofrida pelas partículas na direção normal (L).

Os parâmetros do modelo, K_n e C_n , são responsáveis por controlar a rigidez da partícula e a dissipação de energia durante as colisões, respectivamente, e a especificação adequada dos seus valores pode ter um papel crucial no desempenho final da simulação. De acordo com Cleary & Sawley (2002), valores de K_n na faixa de 10^4 - 10^7 N/m são capazes de fornecer deformações médias de 0,1-1% entre as partículas, o que seria fisicamente coerente de se esperar, levando-se em conta a elevada rigidez dos sólidos particulados reais.

Entretanto, autores como Di Renzo & Di Maio (2004), Pöschel & Schwager (2005) e O’Sullivan (2011), argumentam que não é uma tarefa fácil associar esses parâmetros diretamente às propriedades mecânicas dos materiais. Desse modo, os procedimentos mais comuns para lidar com o problema consistem em duas linhas de abordagem: (i) ajustar artificialmente os valores de K_n e C_n para atingir uma resposta específica e desejada nas simulações, como sugerido por Bell *et al.* (2005); (ii) sintonizar os parâmetros a posteriori, por meio da comparação com dados de sistemas particulados reais, obtidos em laboratório, de acordo com Pöschel & Schwager (2005) e O’Sullivan (2011).

Alternativamente, segundo Cleary & Sawley (2002), o coeficiente de amortecimento, C_n , pode ser derivado diretamente do coeficiente de restituição do material, ϵ , o qual representa a relação entre as velocidades relativas normais das partículas antes e após o evento de colisão, através das equações (27), (28) e (29).

$$C_n = 2\gamma \sqrt{m_{eff} K_n} \ln(\epsilon) \quad (27)$$

$$\gamma = - \frac{\ln(\epsilon)}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(\epsilon)}} \quad (28)$$

$$m_{eff} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (29)$$

Outros procedimentos mais específicos para determinar os parâmetros de contato do modelo linear podem ser encontrados em Luding (2001) e em Di Renzo & Di Maio (2004).

Modelo não-linear de Hertz

Partindo de considerações propostas pela teoria da elasticidade de Hertz (1882), desenvolvida durante seus estudos sobre a força de colisão normal entre partículas esféricas, o modelo apresentado neste tópico propõe uma relação não linear entre força e deslocamento, como uma forma simplificada de descrever a resposta elástica do material ao contato, segundo a equação (30).

$$\mathbf{F}_{ij}^{c,n} = K_n \xi_n^{3/2} \mathbf{n}_{ij} \quad (30)$$

Neste caso, o parâmetro de rigidez da interação, K_n , está diretamente relacionado às propriedades mecânicas do material constituinte das partículas, tais como o módulo de Young e a razão de Poisson, conforme apresentado na equação (31). O que representa uma vantagem de implementação, em comparação ao equacionamento linear, descrito no tópico anterior.

$$K_n = \frac{4}{3} E_{eff} \sqrt{R_{eff}} \quad (31)$$

onde R_{eff} é o raio efetivo das partículas (L) e E_{eff} representa o módulo de Young efetivo ($ML^{-1}T^{-2}$). Ambos podem ser obtidos a partir de parâmetros individuais, como indicado nas equações (32) e (33), caso as partículas sejam compostas de materiais diferentes (DI RENZO & DI MAIO, 2004; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$\frac{1}{R_{eff}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (32)$$

$$\frac{1}{E_{eff}} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j} \quad (33)$$

onde E_i representa o módulo de Young da partícula i ($ML^{-1}T^{-2}$); ν_i é a razão de Poisson da partícula i (adimensional).

No caso de colisão entre uma partícula i e uma parede j , a mesma relação se aplica para o módulo de Young efetivo, E_{eff} , mas para o raio tem-se que $R_{eff} = R_i$ (DI RENZO & DI MAIO, 2004).

De modo a descrever a dissipação de energia devido às deformações plásticas sofridas pelo material no ponto de contato, o modelo também incorpora um termo de amortecimento dependente da velocidade de impacto, podendo ser escrito em sua forma completa pela equação (34) (ZHU *et al.*, 2005).

$$\mathbf{F}_{ij}^{c,n} = \frac{4}{3} E_{eff} \sqrt{R_{eff}} \xi_n^{3/2} \mathbf{n}_{ij} - \gamma_n \left(8 m_{eff} E_{eff} \sqrt{R_{eff}} \xi_n \right)^{1/2} \mathbf{v}_{ij}^n \quad (34)$$

onde \mathbf{v}_{ij}^n representa a componente normal da velocidade relativa entre as partículas i e j no ponto de contato (LT^{-1}). A massa efetiva, m_{eff} , é dada por $m_{eff} = 0,5(m_i + m_j)$. E o parâmetro de amortecimento, γ_n , está diretamente relacionado à viscosidade do material e também pode ser determinado por meio da comparação com resultados experimentais, conforme descrito anteriormente para o caso do modelo linear (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; ZHU *et al.*, 2005; 2007; O'SULLIVAN, 2011).

Por ser um modelo com fundamentação teórica mais sólida e apresentar boa concordância com resultados experimentais obtidos na literatura, este equacionamento tem sido amplamente utilizado nas aplicações em elementos discretos para simular diferentes tipos de fenômenos multifásicos envolvendo sistemas particulados, conforme destacado nos trabalhos de ZHU *et al.* (2005; 2007) e DONG *et al.* (2006; 2009).

2.2.2.2 Força Tangencial

Apesar de ser comum o uso do modelo de esfera perfeita para descrever a compressão mútua e a ação de forças normais durante o contato entre dois elementos discretos, sabe-se que na realidade nenhum sólido particulado tem formato totalmente regular, e que suas superfícies apresentam uma série de irregularidades que caracterizam a

existência de certa rugosidade ou aspereza. Por conta disso, durante os eventos de colisão oblíqua, além das interações normais já mencionadas, surgem forças cisalhantes no sistema, que atuam na direção tangencial ao contato, conforme ilustrado no esquema da Figura 10 (CROWE *et al.*, 2012; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Essas forças de atrito estão intimamente relacionadas com propriedades superficiais das partículas e, segundo diferentes autores, são de fundamental importância para a modelagem realística de sistemas particulados (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; ZHU *et al.*, 2005; 2007; O’SULLIVAN, 2011; MATUTTIS & CHEN, 2014).

A natureza física da força tangencial torna a modelagem das colisões entre partículas esféricas inconsistente em alguma medida, sendo necessário lançar mão de certos mecanismos artificiais para capturar mais precisamente o efeito do atrito nas simulações. Alguns exemplos na literatura, tais como o das partículas compostas e poligonais, citadas anteriormente, sugerem o uso de geometrias mais complexas como alternativa para eliminar parcialmente essa inconsistência, à custa de maior esforço computacional, naturalmente (MUNJIZA, 2004; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

O desenvolvimento de modelos constitutivos para descrever as interações mecânicas entre partículas ainda é um campo de intensa discussão na área relacionada aos elementos discretos, especialmente para o caso das forças tangenciais. Dentre as opções disponíveis, os modelos mais comuns relacionam a intensidade da força de atrito com a componente tangencial da velocidade relativa entre as superfícies no ponto de contato. Esta última pode ser determinada por meio das equações (35) e (36), conhecendo-se as velocidades dos centros de massa e as rotações das partículas i e j (LUDING, 2001; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j + R_i \mathbf{n}_{ij} \times \boldsymbol{\omega}_i + R_j \mathbf{n}_{ij} \times \boldsymbol{\omega}_j \quad (35)$$

$$\mathbf{v}_{ij}^t = \mathbf{v}_{ij} - \mathbf{n}_{ij}(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \quad (36)$$

onde \mathbf{v}_{ij} representa a velocidade relativa entre as partículas i e j no ponto de contato (LT^{-1}); \mathbf{v}_{ij}^t representa a componente da velocidade relativa entre i e j na direção tangencial ao contato (LT^{-1}).

A seguir são apresentados três modelos de forças tangenciais frequentemente encontrados com boa aceitação na literatura, a saber, o modelo de Haff–Werner, o modelo de Cundall–Strack e o modelo simplificado de Mindlin–Deresiewics.

Modelo de Haff–Werner

O modelo de Haff-Werner propõe uma relação linear entre a força tangencial e a velocidade relativa no ponto de contato, conforme apresentado na equação (37) (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$\mathbf{F}_{ij}^{c,t} = -\gamma_t \mathbf{v}_{ij}^t \quad (37)$$

onde γ_t representa uma constante de amortecimento com dimensão $[M/T]$.

Como o sentido de $\mathbf{F}_{ij}^{c,t}$ é contrário ao de \mathbf{v}_{ij}^t , ela pode ser visualizada como uma força cisalhante que atua amortecendo o movimento das partículas na direção tangencial (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Caso ocorram colisões com velocidades relativas muito altas ou forças normais muito baixas, a força de Haff-Werner deve ser limitada pela lei do atrito de Coulomb, assumindo, em módulo, o valor do produto $\mu_c / \mathbf{F}_{ij}^{c,n}$ (onde μ_c representa o fator de atrito do

material). Esta restrição é fisicamente consistente e pode ser formalizada por meio da equação (38) (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$\mathbf{F}_{ij}^t = -\min(\gamma_t |\mathbf{v}_{ij}^t|, \mu_c |\mathbf{F}_{ij}^{c,n}|) \frac{\mathbf{v}_{ij}^t}{|\mathbf{v}_{ij}^t|} \quad (38)$$

De acordo com a literatura, a proposta de Haff-Werner foi utilizada de uma forma relativamente bem sucedida para representar diferentes tipos de fenômenos granulares através da técnica de elementos discretos. No entanto, o modelo parece apresentar alguma dificuldade em lidar com sistemas puramente estáticos, nos quais \mathbf{v}_{ij}^t é essencialmente nula (anulando, também, a própria $\mathbf{F}_{ij}^{c,t}$) (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Para contornar o problema e simular adequadamente o comportamento estocástico de certos sistemas, o DEM conta com diferentes modelos de força mais sofisticados, que dependem do histórico completo da interação partícula-partícula (modelos de Cundall-Strack, Mindlin-Deresiewics, etc.), ou ainda, com partículas de formato geométrico mais realístico, como aquelas da Figura 9 (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Como a força tangencial é determinada por características microscópicas das superfícies das partículas, não existem propriedades macroscópicas e experimentalmente mensuráveis, às quais γ_t poderia ser associada e derivada. Dessa forma, a constante de amortecimento da lei de Haff-Werner deve ser obtida *a posteriori*, por meio da comparação entre resultados numéricos e experimentais (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Modelo de Cundall–Strack

Para contemplar a força de atrito entre partículas esféricas, Cundall & Strack (1979) propuseram um modelo mais complexo, onde $\mathbf{F}_{ij}^{c,t}$ não é avaliada somente por meio das posições e velocidades no tempo presente, mas depende, também, do histórico completo da interação partícula-partícula (CUNDALL & STRACK, 1979; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Na prática, o modelo tenta descrever o fenômeno do atrito estático ativando uma mola na direção tangencial ao plano de contato, que é inicializada no instante em que as partículas entram em contato e permanece ativa até que as superfícies se separem. Dessa maneira, conhecendo-se a componente tangencial da velocidade relativa e a localização do ponto de contato, a força tangencial é obtida diretamente através das equações (39) e (40), onde a integral de \mathbf{v}_{ij}^t atua de forma incremental, acumulando a energia dos movimentos relativos na direção tangencial (CUNDALL & STRACK, 1979; CLEARY & SAWLEY, 2002; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$\xi_t(t) = \int \mathbf{v}_{ij}^t(t) dt \quad (39)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^{c,t} = -K_t \xi_t + C_t \mathbf{v}_{ij}^t \quad (40)$$

O termo $C_t \cdot \mathbf{v}_{ij}^t$ representa a deformação plástica das partículas na direção tangencial, com a constante C_t regulando o grau de dissipação de energia devido ao movimento nessa direção (CLEARY & SAWLEY, 2002).

Assim como no modelo de Haff-Werner, a força de Cundall-Strack também segue o princípio do atrito de Coulomb e tem como limite máximo o produto $\mu_c |\mathbf{F}_{ij}^{c,n}|$ (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

A constante elástica da mola na direção tangencial, K_t , bem como o coeficiente de dissipação tangencial, C_t , normalmente são determinados *a posteriori* por meio do cruzamento entre dados numéricos e experimentais (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Modelo simplificado de Mindlin–Deresiewicz

Trata-se de uma representação matemática mais consistente da mecânica do processo de colisão na direção tangencial. É baseado em uma simplificação da teoria de Mindlin & Deresiewicz (1953), os quais desenvolveram um equacionamento geral para a força de atrito e demonstraram que a relação entre força e deslocamento na direção tangencial depende do histórico completo do processo de contato. A simplificação mencionada neste trabalho foi originalmente apresentada por Langston *et al.* (1994).

Como pode ser observado através da equação (41), o modelo propõe uma relação do tipo não linear entre força e deslocamento tangencial, ξ_t . Este último, assim como na equação de Cundall-Strack, é calculado de forma incremental através da avaliação da integral de v_{ij}^t durante o tempo de contato entre as partículas, conforme a equação (39) (LANGSTON *et al.*, 1994; YANG *et al.*, 2000; ZHU *et al.*, 2005).

$$\mathbf{F}_{ij}^{c,t} = -\mu_c |\mathbf{F}_{ij}^{c,n}| \left\{ 1 - \left[1 - \frac{\min(|\xi_t|, \xi_{t,max})}{\xi_{t,max}} \right]^{3/2} \right\} \frac{\xi_t}{|\xi_t|} \quad (41)$$

$$\xi_{s,max} = \mu_c \xi_n \frac{(2 - v_i)}{(1 - v_i)} \quad (42)$$

Vale notar que este equacionamento permite o cálculo da força atrito diretamente através das propriedades mecânicas das partículas (neste caso, a razão de Poisson, v_i , e o fator de atrito, μ_c) e dos deslocamentos sofridos nas direções normal e tangencial (DI RENZO & DI MAIO, 2004).

Se $|\xi_t|$ exceder o valor de $\xi_{t,max}$, tem início o regime de atrito dinâmico entre as partículas, sendo necessário limitar o valor da força tangencial. Neste caso, o produto $\mu_c |\mathbf{F}_{ij}^{c,n}|$, presente logo à direita do sinal de igualdade da equação (41), garante que o modelo respeite adequadamente a lei do atrito de Coulomb (LANGSTON *et al.*, 1994; YANG *et al.*, 2000; ZHU *et al.*, 2005; DONG *et al.*, 2009; MATUTTIS & CHEN, 2014).

2.2.3 Algoritmos de Detecção de Contato

Definidos os modelos matemáticos mais adequados para descrever a mecânica do contato, é preciso então calcular o somatório das forças e torques resultantes que agem sobre cada partícula, conforme explicitado nas equações (13) e (14). Esta etapa representa o ponto central do método de elementos discretos, uma vez que a eficiência computacional de qualquer simulação é basicamente determinada pela eficiência com a qual os contatos são detectados e quantificados (MUNJIZA & ANDREWS, 1998; MUNJIZA, 2004; MATUTTIS & CHEN, 2014).

A forma mais simples de realizar tal tarefa é através de um algoritmo de checagem direta (ou binária), que verifica, a cada passo de tempo, a chance de colisão entre todos os possíveis pares de partículas (MUNJIZA & ANDREWS, 1998; MUNJIZA, 2004).

Quando se trabalha com elementos de formato esférico, a operação de verificação pode ser realizada através da equação (19), conforme comentado no início do Item 2.2.2. Uma vez que cada checagem envolve uma multiplicação de ponto flutuante, o número total de operações de ponto flutuante necessário para detectar todas as colisões é obtido por meio da equação (43) (MUNJIZA, 2004).

$$n_N = \frac{N^2 - N}{2} \propto N^2 \quad (43)$$

O resultado representa um forte impacto negativo sobre o tempo de CPU consumido pela simulação, que fica diretamente proporcional ao quadrado do número total de elementos discretos envolvidos no problema, N . O que significa, por exemplo, que, se dobrando o tamanho do sistema, também dobra o tempo de computação do problema. (MUNJIZA, 2004; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Em problemas reais de larga escala, que envolvem grandes quantidades de partículas capazes de se mover livremente e colidir a qualquer instante de tempo, a etapa de processamento de contatos pode chegar a representar 60% do custo computacional total da simulação, caso o algoritmo de checagem direta seja utilizado (MUNJIZA, 2004).

Em função disso, diversas metodologias que partem de abordagens distintas podem ser encontradas na literatura com o objetivo aperfeiçoar a etapa de detecção de contatos. Alguns exemplos de algoritmos clássicos e de uso comum podem ser encontrados em Allen & Tildesley (1987), Munjiza & Andrews (1998), Munjiza (2004), Pöschel & Schwager (2005) e Matuttis & Chen (2014).

Por conta da sua robustez e do bom compromisso que apresenta entre eficiência no uso de memória RAM, tempo de CPU e facilidade de implementação, o algoritmo de detecção de contatos empregado neste trabalho é o algoritmo NBS (do inglês “No Binary Search”), originalmente proposto por Munjiza & Andrews (1998). A metodologia utilizada pelo algoritmo tem por objetivo eliminar dos cálculos envolvidos na etapa de processamento de contato, os pares de partículas que se encontram muito distantes umas das outras e, que por questões geométricas, não teriam chance efetiva de colidir. Para tanto, dois conceitos básicos são empregados: subdivisão espacial da região simulada e mapeamento das posições de cada elemento discreto (MUNJIZA & ANDREWS, 1998).

Considerando, por simplicidade, um sistema genérico bidimensional, composto por N elementos discretos de formato circular, confinados em uma região finita de dimensões x_{min} , x_{max} , y_{min} e y_{max} , o primeiro passo do código consiste em subdividir o espaço em células idênticas, conforme ilustrado na Figura 13. O tamanho das mesmas é sempre escolhido com base no diâmetro, d , da maior partícula do sistema. De modo que, cada uma das partículas, da maior à menor, caberá perfeitamente dentro de uma única célula (MUNJIZA & ANDREWS, 1998).

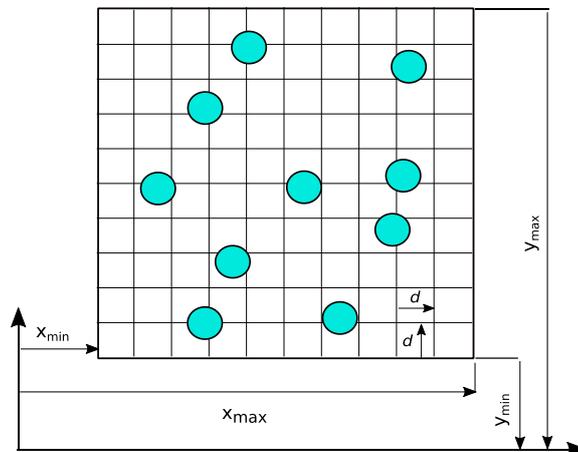


Figura 13. Esquema da metodologia de detecção de contatos utilizada pelo algoritmo de mapeamento NBS. Fonte: adaptada de Munjiza & Andrews (1998).

Na sequência, os elementos são mapeados por células individuais de acordo com a posição atual dos seus centros de massa. Matematicamente, isto é feito atribuindo-se a cada elemento um número inteiro de identificação, 1, 2, 3,..., $N-1$, N , obtido através da normalização de coordenadas apresentada pelas equações (44) e (45) (MUNJIZA & ANDREWS, 1998).

$$x_i^{int} = 1 + int\left(\frac{x_i - x_{min}}{d}\right) \quad (44)$$

$$y_i^{int} = 1 + int\left(\frac{y_i - y_{min}}{d}\right) \quad (45)$$

onde x_i e y_i representam as coordenadas cartesianas do centro de massa de uma partícula genérica i , e d , representa o diâmetro da mesma. O operador “ int ”, presente em ambas as equações, tem a função de converter o resultado da divisão no valor inteiro mais próximo (MUNJIZA & ANDREWS, 1998).

De forma similar, a cada célula atribui-se um par identificador de números inteiros (i_x, i_y) , onde $i_x = 1, 2, 3, \dots, N_x$ e $i_y = 1, 2, 3, \dots, N_y$, com os valores de N_x e N_y representando os números totais de células nas direções x e y , respectivamente, de acordo com as equações (46) e (47) (MUNJIZA & ANDREWS, 1998; MUNJIZA, 2004).

$$N_x = \frac{x_{max} - x_{min}}{d} \quad (46)$$

$$N_y = \frac{y_{max} - y_{min}}{d} \quad (47)$$

Essa metodologia de mapeamento garante que cada elemento discreto seja atribuído a apenas uma única célula, conforme ilustrado na Figura 14, onde os pontos pretos representam os centros de massa das partículas (MUNJIZA, 2004).

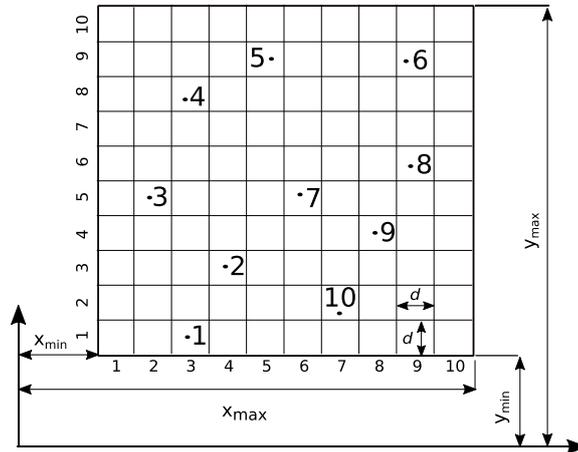


Figura 14. Subdivisão do domínio em células idênticas de tamanho d , que corresponde ao diâmetro da maior partícula do sistema. Fonte: adaptada de Munjiza (2004).

A última etapa consiste em encontrar quais elementos discretos, dentre aqueles mapeados, possivelmente se encontram em contato. Como pode ser percebido através da Figura 14, é impossível que duas partículas associadas a células que não são vizinhas próximas colidam efetivamente. Assim, a detecção de contatos pelo algoritmo NBS se resume a um procedimento de checagem direta envolvendo apenas os elementos

provenientes de uma mesma célula central ou de células adjacentes, conforme apresentado na Figura 15 (MUNJIZA & ANDREWS, 1998).

Procedendo a verificação de contatos dessa forma, uma análise numérica detalhada, realizada por Munjiza & Andrews (1998), indica que para o algoritmo NBS, o número total de operações algébricas necessário para detectar todas as colisões é diretamente proporcional ao número total de elementos discretos, N , e não mais a N^2 , o que torna o código notadamente mais eficiente em uso de CPU quando comparado ao procedimento de checagem binária simples (MUNJIZA & ANDREWS, 1998; MUNJIZA, 2004).

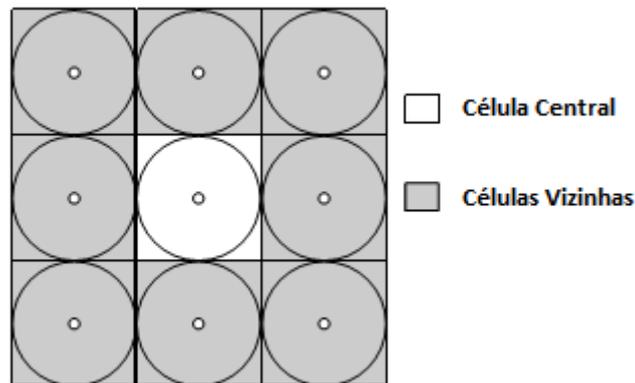


Figura 15. Esquema ilustrativo, mostrando que a varredura realizada pelo algoritmo NBS se resume apenas aos pares de partículas mapeadas à mesma célula ou às células imediatamente vizinhas (total de oito em 2D). Fonte: adaptada de Munjiza (2004).

Resumidamente, algumas outras características deste algoritmo que merecem ser citadas são (MUNJIZA & ANDREWS, 1998):

- Possui tempo de CPU proporcional ao número total de elementos;
- Apresenta bom desempenho no gerenciamento de memória RAM;
- A sua extensão para simulações 3D, apesar de longa, é conceitualmente simples;
- É considerado um algoritmo fácil de programar.

Além do algoritmo NBS, muitas outras metodologias podem ser encontradas na literatura para aperfeiçoar o processamento de contatos em um código DEM. Alguns exemplos de destaque que poderiam ser listados são: o algoritmo de Verlet, o algoritmo “Lattice”, o algoritmo “Screening”, o algoritmo “Sort and Sweep” e o algoritmo “Willians-C-grid”. A escolha da melhor opção normalmente irá depender das características específicas do problema a ser abordado. Maiores detalhes sobre esses e outros algoritmos não mencionados neste trabalho podem ser encontrados em Allen & Tildesley (1987), Munjiza & Andrews (1998), Munjiza (2004), Pöschel & Schwager (2005), O’Sullivan (2011) e Matuttis & Chen (2014).

2.2.4 Forças de Longo Alcance

Quando o sistema modelado é composto por particulados finos (diâmetros médios menores que $1000\mu\text{m}$), além das interações de contato mecânico mencionadas no Item 2.2.3, certas forças de longo alcance adquirem um papel mais significativo na dinâmica do processo de deposição. Nessa linha de modelos, alguns exemplos de destaque são: a força

coesiva de van der Waals e a força eletrostática de Coulomb. Elas podem agir de forma concorrente ou sucessiva e suas importâncias relativas no que se refere ao equilíbrio de forças de um sistema particulado irão depender de uma série de fatores físicos distintos, conforme ilustrado no gráfico da Figura 16 (ZHU *et al.*, 2007; MATUTTIS & CHEN, 2014).

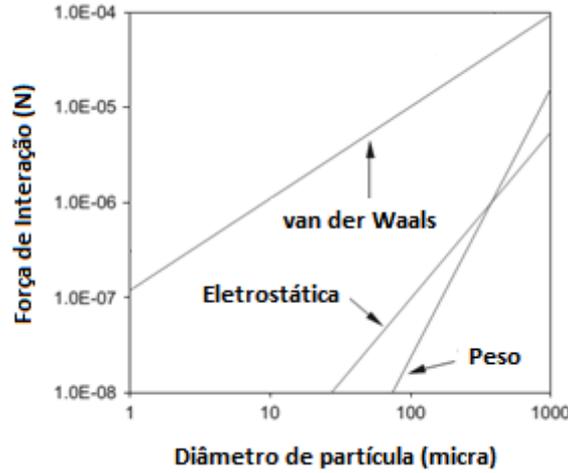


Figura 16. Importância relativa entre diferentes tipos de forças de longo alcance em função do diâmetro. Neste caso, foram considerados os seguintes parâmetros: $H_a = 6,5 \times 10^{-6} \text{ J}$, $h = 1,65 \text{ \AA}$, $Q_0 = 1$ e $\rho_s = 3 \times 10^7 \text{ kg/m}^3$. Fonte: adaptada de Zhu *et al.* (2007).

A força eletrostática surge entre partículas carregadas e normalmente pode ser estimada pela equação clássica de Coulomb, aqui representada pela equação (48) (ZHU *et al.*, 2007).

$$F_{ij}^e = - \frac{Q^2}{16\pi Q_0 h^2} \left(1 - \frac{h}{\sqrt{R^2 + h^2}} \right) \mathbf{n}_{ij} \quad (48)$$

onde F_{ij}^e é a força eletrostática atrativa que age sobre i devido à interação com j (MLT^{-2}); R_i é o raio da partícula i (L); h é a distância de separação entre as superfícies das duas partículas (L); Q é a carga elétrica da partícula (TI) e Q_0 é a permissividade elétrica do vácuo ($\text{M}^{-1}\text{L}^{-1}\text{T}^4\text{I}^2$).

Uma comparação feita por Rumpf (1962) entre a força coesiva de van der Waals e as forças eletrostáticas induzidas por excesso de cargas em partículas com diâmetros da ordem de micra, sugere que a primeira pode chegar a ser uma ordem de grandeza superior à segunda, em módulo. Na verdade, para partículas com diâmetro maior que $1 \mu\text{m}$, alguns autores argumentam que a força eletrostática pode inclusive ser desprezada com boa aproximação (YANG *et al.*, 2000; ZHU *et al.*, 2007).

A força coesiva de van der Waals normalmente tem origem nas interações moleculares que se estabelecem entre as superfícies de duas partículas sólidas. Para incorporar o seu efeito nas simulações, o DEM faz uso da teoria de Hamaker (1937), a qual admite, em linhas gerais, que as interações entre átomos (ou moléculas) individuais são aditivas, de modo que a resultante de van der Waals entre corpos macroscópicos pode ser obtida por meio da integração sobre todos os pares de átomos (ZHU *et al.*, 2007; CROWE *et al.*, 2012).

O modelo de força coesiva implementado neste trabalho é o mesmo descrito por Israelachvili (1991) e Yang *et al.* (2000) para esferas idealmente lisas (do inglês “smooth spheres”), conforme apresentado na equação (49).

$$\mathbf{F}_{ij}^v = -\frac{H_a}{6} \frac{64R_i^3 R_j^3 (h + R_i + R_j)}{(h^2 + 2R_i h + 2R_j h)^2 (h^2 + 2R_i h + 2R_j h + 4R_i R_j)} \mathbf{n}_{ij} \quad (49)$$

onde \mathbf{F}_{ij}^v representa a força de van der Waals que age sobre i devido a sua interação com j (MLT^{-2}); R_i representa o raio da partícula i (L) e h é a distância de separação entre as superfícies de i e j (L);

O parâmetro H_a , conhecido por constante de Hamaker, teoricamente depende de diversos fatores relacionados às propriedades físicas e químicas das duas partículas e não é de fácil quantificação. Na modelagem numérica usando elementos discretos, ela é frequentemente tratada como uma propriedade da partícula a ser determinada empiricamente (YANG *et al.*, 2000; DONG *et al.*, 2006).

Conforme pode ser observado através da equação (49), na medida em que a distância de separação entre as partículas, h , tende a zero, a força coesiva tende ao infinito, introduzindo um problema de singularidade no modelo (divisão por zero quando $h \rightarrow 0$). A literatura sugere que esse contratempo pode ser contornado especificando-se uma distância de corte, h_{min} , para evitar a eventual ocorrência de uma força atrativa desproporcional e sem sentido físico nas simulações. Segundo Zhu *et al.* (2007), um ponto de referência razoável para essa distância mínima seria o valor de 1nm (ISRAELACHVILI, 1991; YANG *et al.*, 2000; ZHU *et al.*, 2007).

Além das forças eletrostáticas e de van der Waals, outros tipos de interação de longo alcance, coesivas e/ou repulsivas, podem ser incluídas em uma simulação DEM, a exemplo das forças capilares, associadas à presença de fluido intersticial entre as partículas. Maiores detalhes sobre essa e outras forças específicas podem ser encontrados em referências como Luding (2001), Zhu *et al.* (2007) e Crowe *et al.* (2012).

2.2.5 Forças de Interação Fluido–Partícula

Quando um ou mais fluidos estão presentes nos espaços vazios entre as partículas, como é o caso na maioria das situações práticas de interesse para a engenharia química, diversas interações do tipo fluido–partícula surgem no sistema, devendo ser adequadamente incorporadas à simulação de elementos discretos (ZHU *et al.*, 2007; CROWE *et al.*, 2012).

As forças fluidodinâmicas capazes de impactar diretamente o movimento das partículas são normalmente divididas em duas categorias: forças volumares, tais como a força gravitacional, a força de empuxo e a força de gradiente de pressão; e em forças de superfície (ou peliculares), a exemplo das forças de arraste e sustentação (DONG *et al.*, 2007; ZHU *et al.*, 2007; CREMASCO, 2012).

A força de empuxo é uma força volumar que age no sentido contrário ao da força peso. Com base no princípio de Arquimedes, ela parte do pressuposto de que a força exercida sobre um corpo submerso depende diretamente do volume de fluido deslocado por ele e que, no caso de uma partícula esférica, corresponde à equação (50) (CREMASCO, 2012).

$$\mathbf{F}_i^b = -\frac{1}{6} \pi d_i^3 \rho_f \mathbf{g} \quad (50)$$

onde d_i é o diâmetro da partícula i (L); F_i^b é a força de empuxo que age sobre i (MLT^{-2}); ρ_f é a massa específica do fluido que envolve i (ML^{-3}); \mathbf{g} é a aceleração gravitacional (LT^{-2}).

A força de arraste representa, fisicamente, uma medida da resistência das partículas em serem arrastadas pelo fluido ao seu redor. De modo geral, ela pode receber a contribuição de três parcelas, conforme apresentado na equação (51) (ZHU *et al.*, 2007; CREMASCO, 2012).

$$\mathbf{F}_i^d = -3\pi d_i \mu_f \mathbf{v}_i - \frac{1}{2} m_f \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} - \frac{3}{2} d_i^2 \int_0^\tau \left(\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right) \frac{dt}{\sqrt{(\tau - t)}} \quad (51)$$

O primeiro termo do lado direito da equação (51) é conhecido como arraste de Stokes e inclui contribuições do arraste de fricção e de forma. O segundo, chamado de força de arraste virtual ou aparente (força transiente), está relacionado à aceleração/desaceleração da partícula em um meio fluido. E o terceiro e último, conhecido por força de Basset, descreve mudanças na camada limite que envolve a partícula em decorrência de sua aceleração/desaceleração. Para alguns autores esses dois últimos termos podem ser desprezados com boa aproximação, sob certas circunstâncias, como por exemplo, no caso em que a relação de massas específicas entre fluido e partícula, ρ_f/ρ_s , é suficientemente baixa ($\sim 0,001$) (ZHU *et al.*, 2007; CREMASCO, 2012).

Levando-se em conta a complexidade da equação (51) em avaliar o efeito dos termos não estacionários sobre o arraste, outra opção disponível na literatura consiste em expressar a força resistiva por meio do coeficiente de arraste, C_D , de acordo com a equação (52) (ZHU *et al.*, 2007; CREMASCO, 2012).

$$\mathbf{F}_i^d = \frac{1}{2} C_D A_i \rho_f |\mathbf{u}| \mathbf{u} \quad (52)$$

onde A_i representa a área projetada da partícula (L^2) e \mathbf{u} é a velocidade relativa fluido-partícula (LT^{-1}), dadas pelas equações (53) e (54), respectivamente.

$$A_i = \frac{\pi d_i^2}{4} \quad (53)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{v}_f - \mathbf{v}_i \quad (54)$$

Para o caso de uma partícula isolada em um fluido qualquer, o coeficiente de arraste fluido-partícula, C_D , é dependente do número de Reynolds e das propriedades físicas do fluido, podendo ser determinado por meio de correlações já bem estabelecidas na literatura para todos os regimes de escoamento ao redor de uma esfera: de Stokes, intermediário, de Newton e turbulento (CREMASCO, 2012).

Em um sistema particulado, no entanto, a presença de outros sólidos diminui o espaço para o fluido, intensificando a tensão cisalhante que atua na superfície das partículas e, conseqüentemente, o papel da força de arraste na fluidodinâmica do escoamento. Para contabilizar o efeito dessa concentração de sólidos, uma, entre as diversas metodologias disponíveis, consiste em incluir no modelo correlações empíricas baseadas na fração volumétrica de fluido ou porosidade, ε_i , conforme indicado na equação (55) (ZHU *et al.*, 2007).

$$\mathbf{F}_i^d = f(\varepsilon_i) \frac{1}{8} C_D \pi \rho_f d_i^2 |\mathbf{u}| \mathbf{u} \quad (55)$$

onde o coeficiente de arraste, C_D , e a função $f(\varepsilon_i)$, podem ser dados, por exemplo, pela correlação de Di Felice (1994), de acordo com as equações (56) a (59).

$$C_D = \frac{24(1 + 0,15Re_p^{0,687})}{Re_p} \quad se \quad Re_p > 1000 \quad (56)$$

$$C_D = 0,44 \quad se \quad Re_p < 1000$$

$$f(\varepsilon_f) = \varepsilon_i^{-(\chi+1)} \quad (57)$$

$$\chi = 3,7 - 0,65 \exp \left[-\frac{(1,5 - \log Re_p)^2}{2} \right] \quad (58)$$

$$Re_p = \frac{\rho_f d_i \varepsilon_i |\mathbf{u}|}{\mu_f} \quad (59)$$

Esse tipo de correlação já foi utilizado com sucesso em aplicações do DEM para simular diversos problemas envolvendo fenômenos multifásicos, tais como operações de fluidização, transporte pneumático de sólidos, ciclones a gás, sedimentação e filtração, entre outros, conforme pode ser verificado nos trabalhos de Xu & Yu (1997), Xu *et al.* (2003), Dong *et al.* (2006; 2009), Zhu *et al.* (2007; 2008), e Liu & Civan (1993).

As forças de sustentação são forças alinhadas perpendicularmente ao movimento da partícula e estão diretamente associadas à rotação da mesma. O fenômeno físico que dá origem a essa rotação é que define o tipo de força de sustentação. Quando a partícula se encontra em uma região do escoamento em que existe um gradiente de velocidade de fluido, conforme ilustrado na Figura 17, tem-se a formação de uma distribuição não uniforme de pressão na superfície da mesma, proporcionando o surgimento de uma força perpendicular à direção do seu movimento (CROWE *et al.*, 2012).

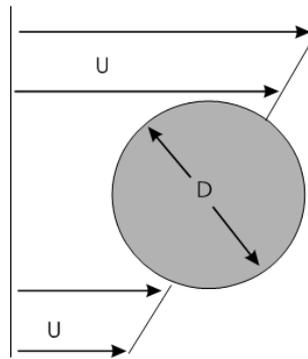


Figura 17. Partícula esférica situada em uma região com gradiente de velocidade de fluido.
Fonte: adaptada de Crowe *et al.* (2012).

Esse efeito é conhecido como *efeito Saffman* e pode ser quantificado para baixos valores do número de Reynolds de partícula por meio da equação (60), (CREMASCO, 2012; CROWE *et al.*, 2012).

$$\mathbf{F}_i^{Saff} = 1,61 d_i^2 (\mu_f \rho_f)^{0,5} |\boldsymbol{\omega}_c|^{-0,5} [(\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_i) \times \boldsymbol{\omega}_c] \quad (60)$$

$$\boldsymbol{\omega}_c = \nabla \times \mathbf{v}_f$$

onde D_i é o diâmetro da partícula esférica i (L); F_i^{Saff} é a força de Saffman que atua sobre i (MLT^{-2}); v_f e v_i são as velocidades do fluido e da partícula, respectivamente (LT^{-1}); μ_f é a viscosidade dinâmica do fluido ($ML^{-1}T^{-1}$); ρ_f é a massa específica do fluido (ML^{-3}).

Quando a rotação da partícula é provocada por outras fontes, como por exemplo, a colisão partícula-partícula ou a colisão entre partículas e paredes, a força de sustentação criada recebe o nome de efeito Magnus e sua intensidade está intimamente relacionada à quantidade de sólidos presentes no sistema (efeito de população). Para números de Reynolds da ordem de uma unidade, a equação (61) pode ser adequadamente utilizada para avaliar a força de sustentação de Magnus em escala de partícula (CROWE *et al.*, 2012).

$$F_i^{Mag} = \frac{\pi}{8} d_i^2 \rho_f [(0,5\nabla \times v_f - \omega_i) \times (v_f - v_i)] \quad (61)$$

onde F_i^{Mag} é a força de sustentação de Magnus que age sobre i (MLT^{-2}); ω_i é a velocidade de rotação da partícula i (T^{-1})

Além dos modelos apresentados até aqui, inúmeras outras forças do tipo fluido-partícula podem ter papel importante na modelagem, a depender da particularidade de cada sistema considerado (ZHU *et al.*, 2007; 2008; CROWE *et al.*, 2012).

2.2.6 Integração Numérica das Equações do Movimento

A integração do conjunto de EDOs que descreve a movimentação dos sólidos em um sistema particulado representa uma tarefa difícil do ponto de vista numérico, tanto em termos de estabilidade como em tempo de computação, uma vez que a frequente ocorrência de interações mecânicas de curto alcance (colisões) entre as partículas dá origem a descontinuidades nos gradientes das variáveis dependentes do problema (posições e orientações angulares) (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Sendo assim, é de fundamental importância que a metodologia numérica adotada seja suficientemente robusta, de modo a garantir que o comportamento do sistema permaneça fisicamente consistente ao longo do processo de integração e, ao mesmo tempo, computacionalmente eficiente, possibilitando que simulações com tempos de computação factíveis sejam realizadas (ALLEN & TILDESLEY, 1987; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Existe na literatura uma enorme variedade de métodos numéricos disponíveis para realizar a integração de sistemas de EDOs acopladas. No entanto, salvo algumas exceções, a maioria deles é apropriada para lidar exclusivamente com equações de primeira ordem. Conforme comentado em tópicos anteriores, a segunda lei do movimento de Newton, representada pelas equações (1) e (2), é de segunda ordem e precisa ser modificada antes que os métodos sejam efetivamente aplicados. Isto pode ser feito facilmente transformando-se as derivadas de posição (velocidades) nas novas variáveis dependentes do problema (equações 62 a 65) (MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{F_i}{m} \quad (62)$$

$$v_i = \frac{dr_i}{dt} \quad (63)$$

$$\frac{d\omega_i}{dt} = \frac{T_i}{I} \quad (64)$$

$$\omega_i = \frac{d\varphi_i}{dt} \quad (65)$$

Após a mudança de variáveis, o produto entre o número de equações e a ordem do sistema permanecerá o mesmo (quatro), como seria de se esperar (MATUTTIS & CHEN, 2014).

Para facilitar a discussão e generalizar a metodologia de solução, as posições e velocidades de cada elemento discreto serão todas representadas por meio dos vetores $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ e $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots)$, respectivamente. Além disso, $\mathbf{y} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \varphi_1, \varphi_2, \dots, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \omega_1, \omega_2, \dots)$, representando o vetor de solução para posições e velocidades, será adotado com variável dependente e t será adotada como variável independente. Dessa maneira, o problema de simular o comportamento dinâmico de um sistema particulado genérico, representado originalmente pelas equações (1) e (2), se resume a integrar numericamente o sistema de EDOS de primeira ordem proposto na equação (66) (MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t) \quad (66)$$

Fornecidas as condições iniciais apropriadas, o comportamento de $\mathbf{y}(t)$ ao longo do tempo pode, em teoria, ser adequadamente obtido (MATUTTIS & CHEN, 2014).

Como comentado anteriormente, para solucionar as equações diferenciais que modelam sistemas granulares, o comportamento robusto e confiável por parte do integrador representa uma característica mais valorizada do que propriamente a obtenção de um alto grau de aproximação nas soluções. Seguindo essa linha de raciocínio, uma breve revisão sobre alguns esquemas de integração numérica possíveis de ser utilizados em elementos discretos será apresentada a seguir, levando-se em conta a estabilidade como principal critério de seleção. Resumidamente, os métodos relacionados foram: o método de Runge-Kutta, o método de Gear o método de Verlet (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Métodos de Runge-Kutta

A família dos métodos de Runge-Kutta consiste em um conjunto de técnicas explícitas ou implícitas que se encontram entre as opções mais versáteis e mais utilizadas para soluções de equações diferenciais de primeira ordem, resultantes da modelagem de inúmeros problemas físicos. São considerados métodos de passo único, pois não exigem a avaliação da função $\mathbf{f}(\mathbf{y}, t)$ em níveis de tempo anteriores ao atual, t_n . Admitindo que a solução numérica, \mathbf{y}_n , seja conhecida nesse instante de tempo, o método de Runge-Kutta atua calculando uma série de gradientes, k_i , em diferentes passos de tempo intermediários $c_1\Delta t, c_2\Delta t, \dots$, com coeficientes $0 \leq c_i \leq 1$, dentro do intervalo conhecido $[0, \Delta t]$ conforme as equações de (67) a (70) (MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$k_1 = f(t_n, \mathbf{y}_n) \quad (67)$$

$$k_2 = f(t_n + c_2\Delta t, \mathbf{y}_n + b_{2,1}k_1\Delta t) \quad (68)$$

$$k_3 = f(t_n + c_3\Delta t, \mathbf{y}_n + (b_{3,1}k_1 + b_{3,2}k_2)\Delta t) \quad (69)$$

$$\vdots$$

$$k_n = f(t_n + c_m\Delta t, \mathbf{y}_n + (b_{m,1}k_1 + b_{m,2}k_2 + \dots + b_{m,m-1}k_{m-1})\Delta t) \quad (70)$$

Esses gradientes são todos obtidos por meio da lei de recorrência do método de Euler explícito e sua média ponderada é utilizada para avançar a solução no tempo através da equação (71). Neste caso, os coeficientes a_i representam os pesos de ponderação, que podem ser negativos ou nulos e devem satisfazer $\sum a_i = 1$ (MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t(a_1k_1 + a_2k_2 + \dots + a_mk_m) \quad (71)$$

Apesar da sua comprovada utilidade para solucionar equações diferenciais ordinárias resultantes da modelagem matemática de inúmeros fenômenos físicos distintos, a metodologia de Runge-Kutta não constitui uma abordagem adequada para lidar com problemas de dinâmica granular. Na verdade, o cálculo e o armazenamento de gradientes de posição e velocidade intermediários, tais como k_i , frequentemente não irá apresentar sentido físico direto na simulação, especialmente no caso em que pré-fatores $b_{i,j}$ negativos forem empregados. Além disso, os cálculos adicionais das forças de interação necessárias para avançar a solução no tempo podem facilmente tornar a simulação proibitiva em termos de custo computacional, ainda que algoritmos de detecção de contato otimizados sejam utilizados. Assim, os métodos de Runge-Kutta são raramente utilizados em simulações de elementos discretos (ALLEN & TILDESLEY, 1987; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Método de Gear

Em contrapartida, apesar de ser relativamente mais complexo de programar, quando comparado a outros esquemas mais comuns (como Euler ou Runge-Kutta, por exemplo), o método de Gear confere ao modelo DEM um ganho considerável em estabilidade, além de permitir que o cálculo das forças de interação, notadamente o maior gargalo de desempenho da técnica, seja realizado uma única vez por passo de tempo (ALLEN & TILDESLEY, 1987; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Como um método explícito, o esquema de Gear consiste de duas etapas distintas que devem ser realizadas em sequência e por repetidas vezes durante o ciclo de integração. São elas a predição e a correção, descritas em maiores detalhes a seguir (ALLEN & TILDESLEY, 1987).

Predição

Durante esta etapa as posições, orientações angulares, velocidades e demais derivadas temporais de ordem superior são estimadas no instante de tempo $t + \Delta t$, extrapolando-se os valores atuais (em t) por meio de uma expansão em séries de Taylor, conforme disposto na equação (72) (ALLEN & TILDESLEY, 1987; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2!} \Delta t^2 \mathbf{a}_i(t) + \frac{1}{3!} \Delta t^3 \mathbf{r}_i^{(3)}(t) + \dots \\ \mathbf{v}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \Delta t \mathbf{a}_i(t) + \frac{1}{2!} \mathbf{r}_i^{(3)}(t) + \dots \\ \mathbf{a}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \mathbf{a}_i(t) + \Delta t \mathbf{r}_i^{(3)}(t) + \dots \\ &\vdots \end{aligned} \quad (72)$$

Nesse caso, foram apresentadas apenas as expansões para o vetor de posição do centro de massa da partícula i e suas respectivas derivadas temporais. Entretanto, o mesmo procedimento pode ser aplicado sem restrições aos graus de liberdade angulares (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Deve-se observar que, na etapa de predição as variáveis dependentes do PVI (posições e orientações angulares) são atualizadas sob a consideração de que a força (e o torque) resultante permanece constante no intervalo de tempo Δt . Ou seja, a informação física do sistema, proveniente das equações do movimento, ainda não é propriamente incorporada nesta etapa. Para que trajetórias consistentes sejam obtidas ao longo da simulação, é preciso ajustar os valores preditos por meio da etapa seguinte de correção (ALLEN & TILDESLEY, 1987; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Correção

Nesta segunda parte, as coordenadas preditas são utilizadas para calcular as forças e os torques resultantes que agem em cada partícula, com base nos modelos de interação descritos anteriormente no Item 2.2.2. O desvio entre as acelerações calculadas a partir dessas forças, $\mathbf{a}_i = \mathbf{F}_i/m_i$, e os respectivos valores preditos, \mathbf{a}_i^{pr} , é utilizado para “melhorar” os valores obtidos durante a etapa anterior do método. A correção aplica pesos de ponderação diferentes para cada derivada temporal, conforme pode ser observado através da equação (73) (ALLEN & TILDESLEY, 1987; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_i^{corr}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i^{corr}(t + \Delta t) + \frac{c_0 \Delta t^2}{2} \Delta \mathbf{a}_i(t + \Delta t) \\
 \mathbf{v}_i^{corr}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i^{corr}(t + \Delta t) + \frac{c_1 \Delta t}{2} \Delta \mathbf{a}_i(t + \Delta t) \\
 \mathbf{a}_i^{corr}(t + \Delta t) &= \mathbf{a}_i^{corr}(t + \Delta t) + c_2 \Delta \mathbf{a}_i(t + \Delta t) \\
 \mathbf{b}_i^{corr}(t + \Delta t) &= \mathbf{b}_i^{corr}(t + \Delta t) + \frac{3c_3}{2\Delta t} \Delta \mathbf{a}_i(t + \Delta t) \\
 \vdots & \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots
 \end{aligned} \tag{73}$$

Os valores dos coeficientes de Gear para a correção dependem da ordem da EDO (1ª ou 2ª ordem) e da ordem do algoritmo aplicado (3ª, 4ª ou 5ª ordem). Vale destacar que algoritmos BDF (do inglês, “backward difference formula”), assim como o método de predição – correção de Gear, podem ser condicionalmente instáveis acima da quinta ordem (MATUTTIS & CHEN, 2014).

A Tabela 1 apresenta os valores dos coeficientes c_i para cada possível combinação entre ordem da EDO e ordem do método (MATUTTIS & CHEN, 2014).

Tabela 1. Valores dos coeficientes de Gear para sistemas de diferentes ordens.

Ordem	Valores	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
1	3	5/12	1	1/2			
	4	3/8	1	3/4	1/6		
	5	251/720	1	11/12	1/3	1/24	
	6	95/288	1	25/24	35/72	5/48	1/120
2	3	0	1	1			
	4	1/6	5/6	1	1/3		
	5	(19/90)	3/4	1	1/2	1/12	
	6	(2/16)	251/360	1	11/18	1/6	1/60

Como o método de Gear está disponível para EDOS de primeira e segunda ordens, as equações do movimento de Newton podem ser integradas diretamente, sem a necessidade de redução para sistemas de primeira ordem, com a velocidade como variável dependente (MATUTTIS & CHEN, 2014).

É comum na implementação deste método que a etapa de correção seja realizada repetida vezes dentro de um mesmo passo de tempo, como forma de conferir maior precisão e/ou estabilidade numérica à simulação. Nesse caso, é conveniente ressaltar que, para cada repetição adicional, k , um cálculo de força extra também será necessário. Quando $k > 1$, o procedimento de múltiplas correções pode ser resumido através da equação (74) (ALLEN & TILDESLEY, 1987; MATUTTIS & CHEN, 2014).

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{a}_i^{(k)} &= \Delta \mathbf{a}_i^{corr,(k)} - \Delta \mathbf{a}_i^{corr,(k-1)} \\ \Delta \mathbf{a}_i^{(1)} &= \Delta \mathbf{a}_i^{corr} - \Delta \mathbf{a}_i^{pr}\end{aligned}\tag{74}$$

A avaliação dessas acelerações, através das posições ocupadas pelas partículas e da segunda lei do movimento de Newton, representa a etapa que mais consome tempo de CPU durante uma simulação, conforme mencionado em tópicos anteriores. Portanto, a utilização de um número excessivo de etapas adicionais de correção poderia tornar o código ineficiente. Geralmente, é comum que apenas uma, ou ocasionalmente duas etapas de correção sejam conduzidas nos códigos DEM (ALLEN & TILDESLEY, 1987; PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

Métodos de Verlet

Também é possível encontrar na literatura muitas simulações empregando integradores simpléticos, tais como os métodos de Verlet e velocidade – Verlet, devido à sua grande popularidade na modelagem de partículas em escala molecular. Entretanto, alguns autores consideram a aplicação de tais algoritmos inadequada a sistemas granulares, por conta da sua incapacidade em incluir de forma matematicamente consistente, modelos de força que sejam diretamente dependentes da velocidade das partículas (ALLEN & TILDESLEY, 1987; O’SULLIVAN, 2011; MATUTTIS & CHEN, 2014).

2.2.7 Condições de Contorno

De maneira análoga ao que ocorre em problemas da mecânica do contínuo, é comum que as propriedades dinâmicas e estáticas dos sistemas granulares sejam afetadas de forma impactante pela interação das partículas com as fronteiras do sistema. Assim, é preciso atenção especial no momento de modelar o contato partícula-parede (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Um método eficiente para descrever as propriedades das fronteiras do sistema, segundo Pöschel & Schwager (2005), consiste em construir as superfícies de fronteira a partir de partículas que seguem as mesmas leis de interação que as partículas do material granular. Duas vantagens diretas desse tipo de metodologia que poderiam ser listadas são:

- Escolhendo posições e velocidades apropriadas para as partículas de parede, é perfeitamente possível modelar fronteiras com rugosidade ajustável, de acordo com as necessidades do usuário do código;
- A implementação computacional é fácil, tendo em vista que nenhuma força adicional precisa ser calculada, pelo fato das partículas serem semelhantes àquelas simuladas.

Na Figura 18 apresenta-se um exemplo de condição de contorno com paredes rígidas, construídas a partir de partículas imóveis (de cor preta), para simular o escoamento de sólidos granulares em um silo 2D. Como pode ser observado, escolhendo-se os tamanhos e

as posições adequadas para essas partículas é possível obter paredes de rugosidade perfeitamente ajustável, que podem ser diretamente incorporadas a uma simulação DEM, uma vez que as mesmas leis de interação para partículas livres são válidas e não há a necessidade de se especificar forças adicionais (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

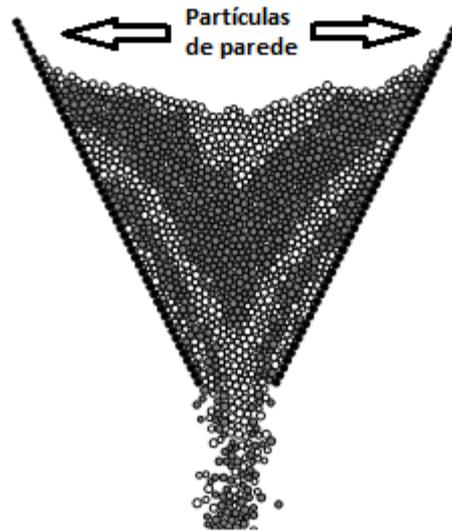


Figura 18. Exemplo do uso de partículas sólidas imóveis para criar paredes rígidas como condições de contorno. Fonte: adaptada de Pöschel & Schwager (2005).

Na maior parte dos casos, a movimentação (se existir) das partículas de parede é independente do deslocamento das partículas internas do material simulado, não sendo, portanto, governada pelas leis do movimento de Newton, mas controlada externamente pelo usuário do programa (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005).

Outra forma importante e muito reportada na literatura para definir condições de contorno são as chamadas condições periódicas. Esta alternativa consiste na extensão periódica da área de simulação em uma ou mais dimensões, de modo reproduzir, virtualmente, sistemas de dimensões infinitas. Em termos práticos, toda vez que uma partícula deixa o sistema de um lado ela é reinserida no outro, por meio da inversão das respectivas coordenadas do seu centro de massa. Uma discussão detalhada sobre o uso de condições periódicas em dinâmica granular pode ser encontrada em textos como Allen & Tildesley (1987), Pöschel & Schwager (2005) e O'Sullivan (2011).

2.2.8 Condições Iniciais

Para iniciar o processo de solução das EDOs através de qualquer método numérico é preciso definir as condições iniciais do sistema, especificando-se os valores das coordenadas e orientações angulares das partículas, bem como de suas respectivas derivadas temporais de ordem superior, $r_i^{(n)}$ e $\varphi_i^{(n)}$ no tempo t_0 (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2015).

As partículas podem ser geradas de forma padronizada, seguindo uma configuração pré-definida, conforme apresentado na Figura 19(a), ou de maneira completamente aleatória, sem forma fixa, de acordo com a Figura 19(b). A maior atenção durante esse processo deve ser em evitar a ocorrência excessiva de sobreposições iniciais entre as partículas, de modo a não comprometer o resultado final da simulação (PÖSCHEL & SCHWAGER, 2005; MATUTTIS & CHEN, 2014).

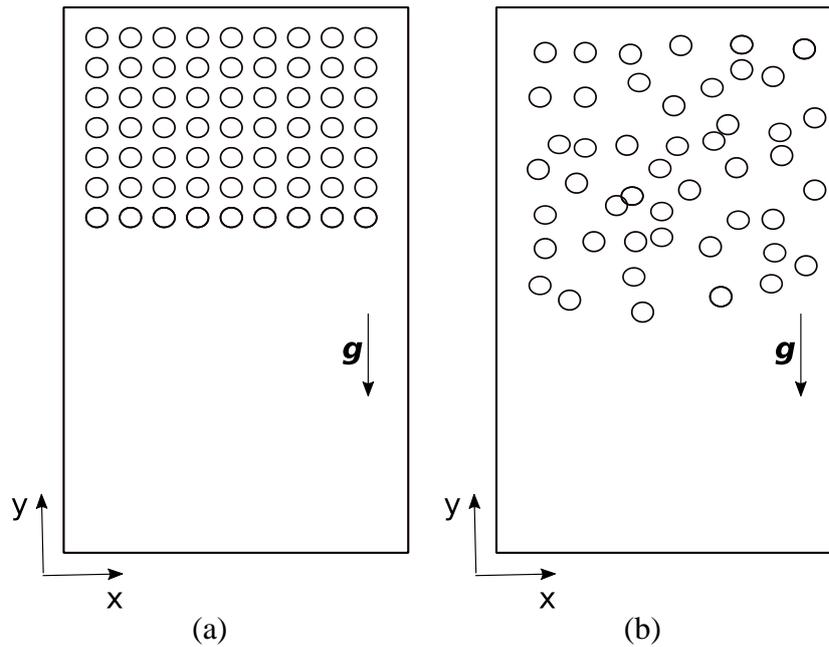


Figura 19. Exemplo de condições iniciais geradas de forma padronizada e aleatória sem sobreposição inicial. Fonte: adaptada de Matuttis & Chen (2014).

Os textos de Pöschel & Schwager (2005), O’Sullivan (2011) e Matuttis & Chen (2014) discutem com maiores detalhes a especificação de condições iniciais para uso no DEM e apresentam alguns algoritmos de geração inicial de partículas que evitam a ocorrência de contatos iniciais.

3 METODOLOGIA

3.1 Modelagem Matemática

Utilizando a metodologia de simulação discreta, apresentada no Capítulo 2, os processos de sedimentação, filtração plana e filtração cruzada foram simulados neste trabalho de forma gradual, seguindo uma escala crescente de dificuldade em termos de modelagem matemática e implementação computacional.

Em um primeiro momento, foram realizadas simulações bidimensionais utilizando algoritmos e modelos de força mais simples, como forma de verificar a implementação correta das diferentes etapas de processamento do código, tais como a geração de partículas, detecção de contatos, cálculo de forças, integração das equações do movimento, etc. Na sequência, partindo de um programa previamente avaliado em simulações 2D, os mesmos processos foram simulados novamente, mas desta vez segundo uma perspectiva tridimensional mais realística, utilizando partículas esféricas e modelos de forças mais complexos. Nos tópicos a seguir, as metodologias, equacionamentos e modelos utilizados em cada etapa de desenvolvimento do código serão apresentados em maiores detalhes. Além disso, uma breve descrição do algoritmo base implementado neste trabalho também é fornecida.

3.1.1 Simulações Bidimensionais

As simulações 2D dos processos de sedimentação e filtração foram implementadas tomando-se como base o modelo de disco circular, para representar os elementos discretos contidos no sistema.

As posições das partículas no tempo t_0 foram geradas de forma aleatória, porém evitando-se, sempre que possível, o contato mecânico inicial no interior da área de simulação. Como pode ser verificado através da Figura 20, as paredes do sistema foram criadas por meio de partículas rígidas e fixas, com as mesmas propriedades físicas e seguindo as mesmas leis de interação mecânica que as partículas livres. Este mesmo procedimento foi utilizado para modelar as camadas extras de partículas fixas que representa o meio poroso no caso específico da filtração.

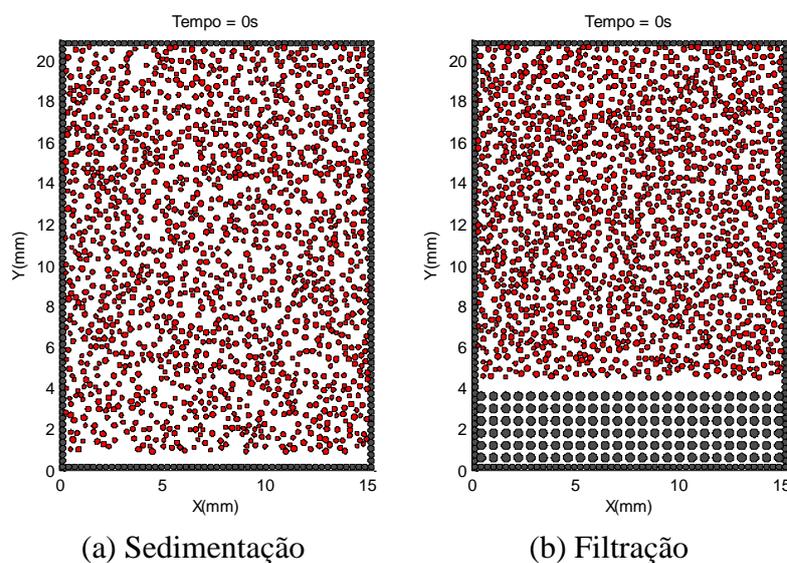


Figura 20. Esquema ilustrativo da geração de partículas nas simulações 2D.

Após a distribuição inicial aleatória, o processo foi simulado de modo que as partículas se depositassem sob a ação da força gravitacional e das forças fluido-partícula, até que atingissem uma posição mecanicamente estável, isto é, com velocidade média nula.

Como nestes estudos de caso o movimento das partículas se restringe a apenas duas dimensões, x e y , as equações de Newton para a translação e rotação de uma partícula genérica i , pertencente a um sistema contendo N partículas, se resumem as equações (75), (76) e (77).

$$\frac{d^2 r_{i,x}}{dt^2} = \frac{1}{m_i} F_{i,x}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j) \quad (75)$$

$$\frac{d^2 r_{i,y}}{dt^2} = \frac{1}{m_i} F_{i,y}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j) \quad (76)$$

$$\frac{d^2 \varphi_i}{dt^2} = \frac{1}{I_i} T_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j), \quad (j = 1, \dots, N) \quad (77)$$

onde $r_{i,x}$ representa a componente x da posição do centro de massa da partícula i (L); $r_{i,y}$ representa a componente y da posição do centro de massa da partícula i (L); φ_i é a orientação angular da partícula i em 2D (adimensional).

Analisando-se essas equações, verifica-se que cada partícula é modelada com três EDOs, gerando um sistema composto por um número total de $3N$ equações diferenciais, metade do que seria necessário para solucionar o sistema tridimensional correspondente. Neste caso, a simplificação advém do fato de que a orientação angular de uma partícula 2D, com formato de disco circular, pode ser completamente descrita por meio de um único ângulo (φ_i passa a ser um escalar, ao invés de vetor).

Os modelos de forças empregados nas simulações 2D para realizar a avaliação das funções $F_{i,x}$, $F_{i,y}$ e T_i são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2. Modelos de forças utilizados nas simulações 2D.

Tipo de força/torque	Equacionamento	Referência
Força de contato normal	$\mathbf{F}_{ij}^{c,n} = K_n \xi_n \mathbf{n}_{ij} - C_n (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij}$	Cundall-Strack equação (26)
Força de contato tangencial	$\mathbf{F}_{ij}^{c,t} = -\min(\gamma_t \mathbf{v}_{ij}^t , \mu_c \mathbf{F}_{ij}^{c,n}) \frac{\mathbf{v}_{ij}^t}{ \mathbf{v}_{ij}^t }$	Haff-Werner equação (38)
Força de empuxo	$\mathbf{F}_i^b = -(1/6)\pi d_i^3 \rho_f \mathbf{g}$	equação (50)
Força de arraste	$\mathbf{F}_i^d = (1/8)f(\varepsilon_i)C_D \pi \rho_f d_i^2 \mathbf{u} \mathbf{u}$	Di Felice equação (55)
Torque tangencial	$\mathbf{T}_{ij}^t = \mathbf{R}_i \times \mathbf{F}_{ij}^{c,t}$	equação (23)

Inicialmente, por conta da facilidade de implementação, o algoritmo básico de checagem direta (ou binária) foi utilizado de forma preliminar em algumas simulações. No entanto, devido a evidente dificuldade apresentada pelo programa em lidar com uma quantidade maior de partículas, esforços foram direcionados durante o processo de aperfeiçoamento do simulador para implementar o algoritmo de vizinhança otimizado NBS, de Munjiza & Andrews (1998), apresentado brevemente no Item 2.2.3. Assim, todos os resultados das simulações bidimensionais, que serão apresentados no próximo capítulo, foram obtidos utilizando-se a versão 2D desse algoritmo. O sistema de EDOs resultante foi integrado com o método de Gear de quinta ordem, conforme descrito no Item 2.2.6.

Como a simulação DEM gera resultados preliminares em termos de posições e velocidades instantâneas das partículas individuais, foi necessário implementar procedimentos de pós-processamento para interpretar tais resultados e convertê-los em informações mais úteis para a análise de engenharia, tais como dados de espessura de sedimento/torta, porosidade, permeabilidade, etc.

A espessura da torta (altura atingida pelo leito de partículas) foi calculada ao longo do tempo como a diferença entre as maiores e menores alturas nas quais fosse possível que planos horizontais interceptassem partículas mecanicamente estáveis, conforme ilustrado na Figura 21.

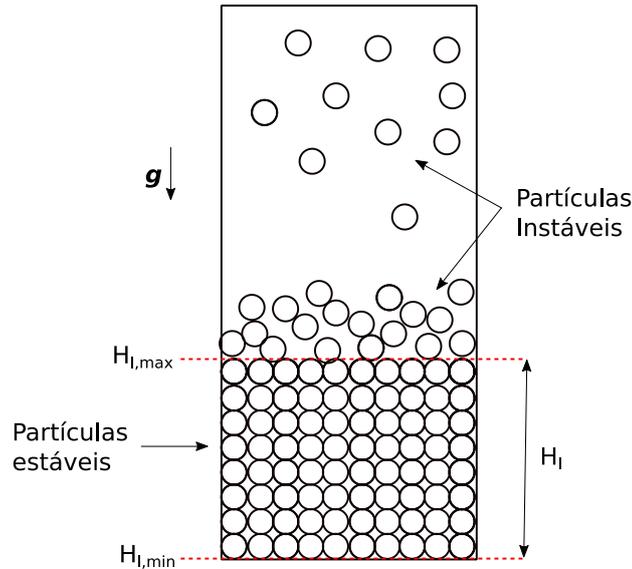


Figura 21. Ilustração esquemática do método utilizado para estimar a espessura do leito.

Os critérios matemáticos utilizados para caracterizar a “estabilidade” das partículas foram selecionados de forma empírica, por tentativa e erro, definindo-se valores máximos permitidos para variações na posição e na velocidade média de cada elemento discreto entre dois passos de tempo consecutivos da integração.

Além disso, a porosidade, parâmetro usualmente utilizado para descrever a estrutura de leitos porosos, também foi quantificada como função do tempo durante os processos de deposição. No intuito de minimizar os efeitos de topo e fundo nos resultados das simulações, o cálculo dessa propriedade foi realizado com base em uma fatia central da torta ao invés da sua área total, adaptando-se a metodologia utilizada por Abreu *et al.* (2003) para estimar a fração de vazios em um leito de partículas 3D.

A representação matemática desse procedimento é descrita nas equações (78) e (79).

$$\varepsilon_c = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N f(y_{min}, y, y_{max}) A_i}{L(y_{max} - y_{min})} \quad (78)$$

$$f(y_{min}, y, y_{max}) = \begin{cases} 1 & \text{se } y_{min} \leq y \leq y_{max} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (79)$$

$$y_{min} = \frac{(1 - v_l)}{2} H_l \quad (80)$$

$$y_{max} = y_{min} + v_l H_l \quad (81)$$

onde y_{max} e y_{min} representam as alturas limites da área de controle utilizada para determinação da porosidade da torta (L); H_l representa a altura atual do leito de partículas

(L); L representa o comprimento do região de amostragem (L); A_i é o área ocupada pela partícula i (L^2); v_i é a fração da altura do leito, utilizada para a estimativa de porosidade (adimensional); e ε_c representa a porosidade média da torta (adimensional).

Nas simulações bidimensionais descritas neste trabalho, a área ocupada pelas partículas no interior da região de amostragem, ao invés do volume, é que foi utilizada nos cálculos da fração de vazios, conforme ilustrado pela Figura 22.

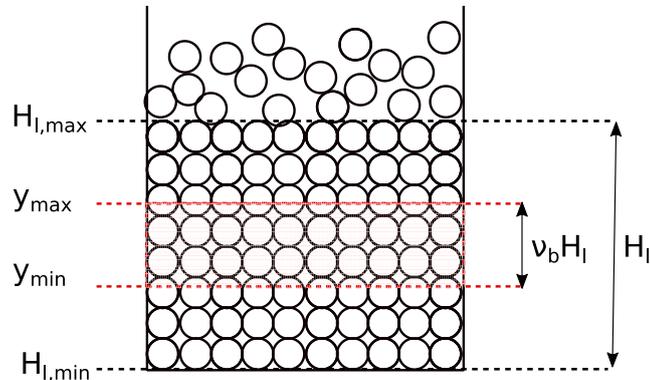


Figura 22. Esquema ilustrativo da metodologia utilizada para estimativa da porosidade.

Como pode ser verificado através da equação (79), a função de seleção $f(y_{min}, y, y_{max})$ exclui do cálculo aquelas partículas cujo centro de massa se encontra fora da área de amostragem. Dessa forma, algumas partículas que estiverem parcialmente inseridas nessa área poderão ter sua contribuição para a porosidade superestimada, enquanto outras serão paralelamente negligenciadas, causando certa compensação de erro, conforme descrito em Abreu *et al.* (2003).

Para o cálculo da força de arraste segundo o modelo de Di Felice (1994), a porosidade local em torno da partícula sólida, ε_i , foi obtida dividindo-se a área simulada em células horizontais, cada uma com altura equivalente a d_{max} , conforme ilustrado na Figura 23.

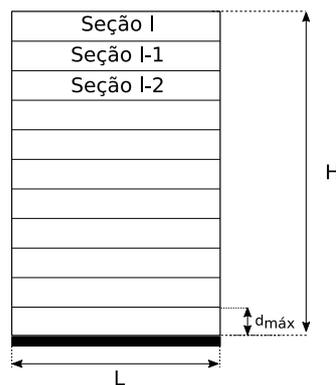


Figura 23. Esquema ilustrando a metodologia utilizada no cálculo da porosidade local.

Fonte: adaptada de Dong *et al.* (2003; 2009).

As porosidades dessas fatias foram calculadas com base na área ocupada pelos sólidos em cada uma delas. Este procedimento foi sugerido nos trabalhos de Dong *et al.* (2003; 2009) e permite a determinação da porosidade local de modo mais acurada.

3.1.2 Simulações Tridimensionais

As simulações tridimensionais utilizaram o modelo de partícula esférica perfeita, descrito com maiores detalhes no Item 2.2, para representar os sólidos particulados em suspensão. Assim como feito nos casos bidimensionais mais simples, permitiu-se que os elementos discretos interagissem uns com os outros, com as paredes do sistema e com o fluido adjacente, trocando energia e quantidade de movimento, de acordo com as leis de força apresentadas no Capítulo 2. Devido à inclusão de uma terceira coordenada (eixo z) na formulação do problema, o conjunto completo de equações do movimento precisou ser utilizado, dando origem a um sistema de EDOs contendo $6N$ equações, como pode ser verificado através das equações (82) a (87).

$$\frac{d^2 r_{i,x}}{dt^2} = \frac{1}{m_i} F_{i,x}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad (82)$$

$$\frac{d^2 r_{i,y}}{dt^2} = \frac{1}{m_i} F_{i,y}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad (83)$$

$$\frac{d^2 r_{i,z}}{dt^2} = \frac{1}{m_i} F_{i,z}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad (84)$$

$$\frac{d^2 \varphi_{i,x}}{dt^2} = \frac{1}{I_i} T_{i,x}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad (85)$$

$$\frac{d^2 \varphi_{i,y}}{dt^2} = \frac{1}{I_i} T_{i,y}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad (86)$$

$$\frac{d^2 \varphi_{i,z}}{dt^2} = \frac{1}{I_i} T_{i,z}(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\omega}_j) \quad j = 1, \dots, N \quad (87)$$

As forças e torques resultantes nas direções x , y e z foram avaliados a cada passo de tempo por meio dos modelos listados na Tabela 3 e na Tabela 4, respectivamente. Em comparação ao caso bidimensional, foram adicionados os modelos de força coesiva de van der Waals e de força de sustentação de Magnus, descritos no Capítulo 2.

Tabela 3. Modelos de forças utilizados nas simulações 3D.

Modelo de Força	Equacionamento
Normal Hertz, equação (34)	$\mathbf{F}_{ij}^{c,n} = \frac{4}{3} E_{eff} \sqrt{R_{eff}} \xi_n^{3/2} \mathbf{n}_{ij} - \gamma_n (8m_{eff} E_{eff} \sqrt{R_{eff}} \xi_n)^{1/2} \mathbf{v}_{ij}^n$
Tangencial Mindlin, equação (41)	$\mathbf{F}_{ij}^{c,t} = -\mu_c \mathbf{F}_{ij}^{c,n} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{\min(\xi_t , \xi_{t,max})}{\xi_{t,max}} \right]^{3/2} \right\} \frac{\xi_t}{ \xi_t }$
Coesiva van der Waals, equação (49)	$\mathbf{F}_{ij}^v = -\frac{H_a}{6} \frac{64R_i^3 R_j^3 (h + R_i + R_j)}{(h^2 + 2R_i h + 2R_j h)^2 (h^2 + 2R_i h + 2R_j h + 4R_i R_j)} \mathbf{n}_{ij}$
Arraste Di Felice, equação (55)	$\mathbf{F}_i^d = \frac{1}{8} C_D \pi \rho_f d_i^2 \varepsilon_i^{-(\chi+1)} \mathbf{u} \mathbf{u}$
Sustentação Magnus, equação (61)	$\mathbf{F}_i^{Mag} = \frac{\pi}{8} d_i^2 \rho_f [(0,5\mathbf{v} \times \mathbf{v}_f - \boldsymbol{\omega}_i) \times (\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_i)]$

Além disso, os modelos de forças de contato mecânico foram substituídos nas direções normal e tangencial pelos equacionamentos mais complexos e, teoricamente mais consistentes, de Hertz e Mindlin-Deresiewics, respectivamente. Por fim, foi incluído um torque extra, devido ao atrito de rolamento que se desenvolve entre as partículas em contato, seguindo o modelo de Iwashita & Oda (1998).

Tabela 4. Modelos de torque utilizados nas simulações 3D.

Modelo de Torque	Equacionamento
Torque tangencial equação (23)	$T_{ij}^t = R_i \times F_{ij}^{c,t}$
Torque de rolamento equação (25)	$T_{ij}^r = -\mu_r R_i F_{ij}^{c,n} \hat{\omega}_n$

No estudo de caso da sedimentação, as condições iniciais (posições e velocidades no tempo zero) foram geradas de forma aleatória e sem sobreposição, assim como foi feito nas simulações bidimensionais. A região simulada neste caso apresenta o formato de caixa retangular (paralelepípedo) com comprimento L , largura W e altura H (em diâmetros de partícula), conforme representado na Figura 24.

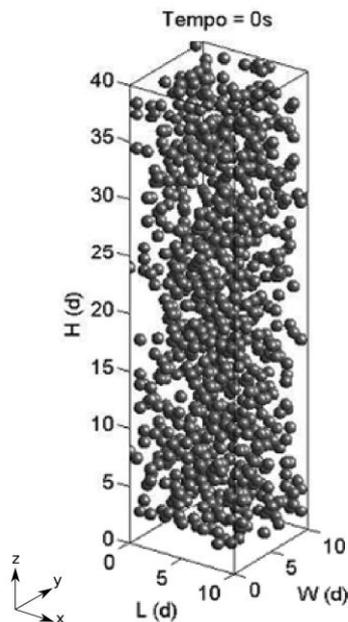


Figura 24. Esquema ilustrativo da região de simulação na sedimentação em 3D.

Já para as condições de contorno, foi adotado o modelo de parede rígida plana em todas as fronteiras do sistema. Neste caso, admitiu-se, para efeito do cálculo das forças partícula-parede, que as mesmas propriedades físicas e as mesmas leis de força válidas para as partículas fossem aplicáveis também às paredes.

Nas simulações das filtrações plana e cruzada, as partículas foram sendo inseridas gradualmente ao longo do tempo, sempre nas cinco primeiras camadas superiores da região simulada, numa tentativa de reproduzir, virtualmente, a operação em modo contínuo

(Figura 25). Além disso, uma camada dupla de partículas sólidas fixas foi programada para modelar a presença do meio filtrante na base da região simulada (partículas em cinza, de acordo com a Figura 25 e a Figura 26).

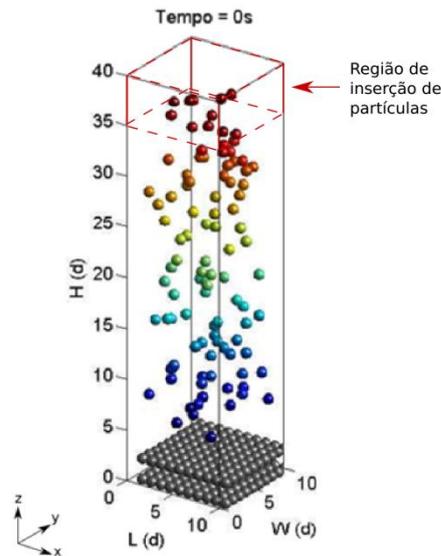


Figura 25. Esquema ilustrativo da região de simulação da filtração plana em 3D.

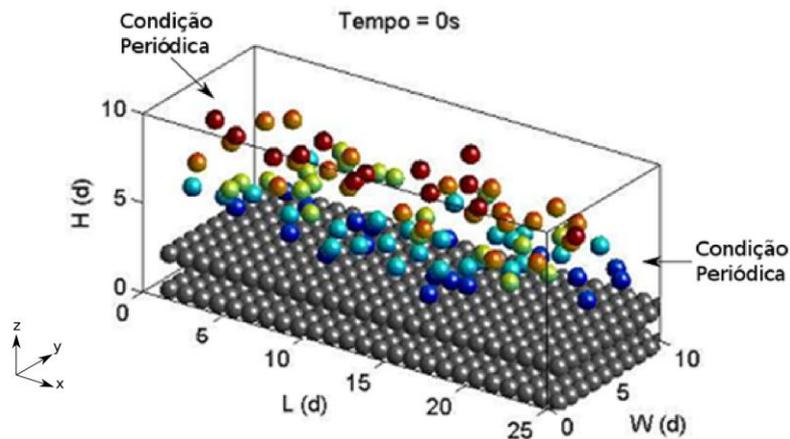


Figura 26. Esquema ilustrativo da região de simulação da filtração cruzada em 3D.

Especificamente no caso da filtração cruzada, as paredes rígidas convencionais foram substituídas por condições periódicas ao longo da direção x . O objetivo disso foi tentar descrever de forma mais realista a dinâmica contínua do escoamento cruzado na simulação. Neste caso, a força de arraste que age sobre as partículas apresenta uma componente extra, devido ao escoamento de suspensão na direção x . Foi preciso, então, definir um perfil de velocidades para o fluido nessa direção. O modelo escolhido neste trabalho foi a distribuição parabólica representada pela equação (88) e pela Figura 27, propostas no trabalho de Hwang & Wang. (2001), que estudaram a migração e a deposição de partículas durante o processo microfiltração cruzada 2D, através da simulação numérica usando a técnica de dinâmica Browniana.

$$v_{f,x} = 6u_s \left[\left(\frac{z}{H} \right) - \left(\frac{z}{H} \right)^2 \right] \quad (88)$$

onde H é altura do canal formado pela célula de filtração (L); u_s é a velocidade média do fluxo cruzado (LT^{-1}); $v_{f,x}$ é a distribuição de velocidades do fluido na direção x (LT^{-1}); z é a posição em relação ao eixo vertical (L).

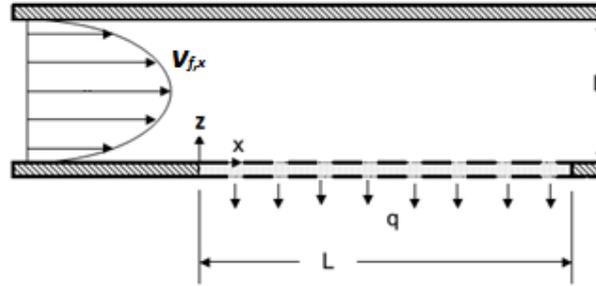


Figura 27. Esquema ilustrativo do escoamento parabólico na direção x . No sentido da filtração o perfil é considerado uniforme. Fonte: adaptada de Hwang & Wang (2001).

A etapa de detecção e quantificação dos contatos foi realizada através da generalização do algoritmo de vizinhança NBS a problemas tridimensionais, conforme comentado no Capítulo 2 e descrito com detalhes em Munjiza (2004).

Já o processo de integração numérica das equações do movimento também foi realizado por meio do método preditor - corretor de Gear de quinta ordem, apresentado no Item 2.2.6.

A espessura do leito de partículas foi avaliada ao longo do tempo seguindo a mesma metodologia empregada nos casos bidimensionais. Novamente, os critérios matemáticos utilizados para caracterizar a estabilidade mecânica das partículas foram ajustados de maneira empírica definindo-se valores máximos permitidos para variações na posição e na velocidade média de cada elemento discreto entre dois passos de tempo consecutivos da integração.

A porosidade do leito também foi calculada de forma similar ao caso 2D, mas dessa vez seguindo o procedimento originalmente adotado por Abreu *et al.* (2003), o qual desconta os volumes ocupados pelas partículas no interior de uma região de amostragem selecionada, para obter uma estimativa da fração de vazios. As equações (89) e (90) formalizam matematicamente esse procedimento.

$$\varepsilon_c = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N f(z_{min}, z, z_{max}) V_i}{A_s (z_{max} - z_{min})} \quad (89)$$

$$f(z_{min}, z, z_{max}) = \begin{cases} 1 & \text{se } z_{min} \leq z \leq z_{max} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (90)$$

onde z_{max} e z_{min} representam as alturas limites do volume de controle utilizado para determinação da porosidade da torta (L); A_s representa a área de seção transversal do mesmo (L^2); e V_i é o volume ocupado pela partícula i (L^3).

3.2 Descrição do Algoritmo Implementado

Partindo da metodologia numérica apresentada até então, um programa computacional foi desenvolvido em linguagem FORTRAN para reproduzir e analisar os processos de formação e crescimento de torta ao longo das operações de sedimentação e

filtração. Um fluxograma resumido do algoritmo geral implementado neste trabalho é apresentado na Figura 28.

Inicialmente o usuário do programa deve informar a geometria do sistema, incluindo as coordenadas das partículas e suas derivadas temporais, bem como as condições de contorno que limitarão a área simulada. Além disso, informa-se também os valores das propriedades do sólido e do fluido que serão utilizadas para a avaliação dos modelos de força. Na sequência, o programa avança de maneira dinâmica, reproduzindo o laço de integração representado na Figura 28 durante um número predefinido de passos de tempo.

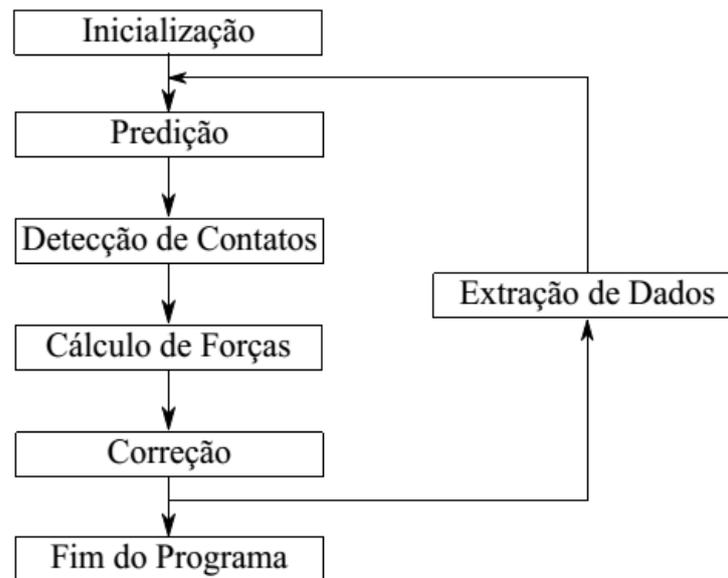


Figura 28. Fluxograma simplificado do algoritmo implementado neste trabalho.

No começo de cada ciclo, as coordenadas e derivadas temporais das partículas no tempo $t + \Delta t$ são calculadas através da expansão em séries de Taylor dos valores presentes no tempo t , correspondendo à chamada etapa de predição do algoritmo de Gear. Com base nesses valores, o algoritmo de vizinhança é chamado para identificar os pares de partículas em possível colisão e construir a lista de contatos.

Uma vez computadas as forças e torques resultantes que agem sobre as partículas, com base nessa lista e nos modelos apresentados neste trabalho, a segunda etapa do método de Gear (correção) é chamada para corrigir as coordenadas e derivadas preditas, obtidas na primeira parte. O programa termina em um instante de tempo predefinido, t_{final} , ou retoma o ciclo de cálculos a partir das coordenadas atualizadas.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados deste trabalho, obtidos por meio das simulações da sedimentação, filtração plana e filtração cruzada, utilizando o programa desenvolvido com base no método de elementos discretos.

Na Seção 4.1, foram contemplados os estudos de caso bidimensionais da sedimentação e filtração plana. A metodologia descrita no Capítulo 3 foi aplicada, tornando possível a obtenção de resultados em termos de espessura, porosidade, permeabilidade de torta e fluxo de filtrado como funções do tempo. Além disso, alterando-se de forma controlada os valores de parâmetros básicos de simulação, também foram avaliados os efeitos das propriedades do fluido e das condições operacionais sobre o desempenho dos processos estudados, bem como a capacidade preditiva do modelo matemático proposto em descrever tais efeitos.

Na sequência, os dados obtidos por meio de simulações 3D dos processos de sedimentação, filtração plana e filtração cruzada foram apresentados e discutidos na Seção 4.2. Também nestes casos, os valores de parâmetros tipicamente envolvidos na descrição de sistema particulados, tais como porosidade, permeabilidade, fluxo de filtrado e queda de pressão, foram calculados ao longo do tempo.

4.1 Simulações Bidimensionais

As simulações bidimensionais foram implementadas utilizando-se um conjunto básico de propriedades físicas típicas para as partículas sólidas e para o fluido. Na Tabela 5 é apresentada uma lista dos valores dessas propriedades, bem como dos parâmetros empregados nos modelos de força e das condições operacionais definidas para a filtração.

Em função das dificuldades e controvérsias reportadas na literatura em se associar, de forma teoricamente concreta e consistente, os parâmetros do modelo de contato às propriedades mecânicas do material, o valor da constante de restauração elástica, K_n , foi selecionado artificialmente entre 10^4 - 10^7 N/m, através de testes preliminares realizados com simulações em menor escala (menor número de partículas). Segundo Cleary & Sawley (2002), valores dentro dessa faixa são capazes de fornecer sobreposições médias entre 0,1-1,0% entre as partículas, o que representa com boa aproximação a rigidez elevada dos particulados reais.

Tabela 5. Parâmetros base utilizados nas simulações 2D.

Parâmetro	Valor	Unidade
Número de partículas, N	1500	-
Diâmetro de partícula, d_i	200-300	μm
Massa específica do sólido, ρ_s	4200	kg/m^3
Constante elástica, K_n	$5,0 \times 10^5$	N/m
Amortecimento normal, C_n	0,0938	kg/s
Amortecimento tangencial, γ_t	10	N·s/m
Fator de atrito de Coulomb, μ_c	0,3	-
Massa específica do fluido, ρ_f	1000	kg/m^3
Viscosidade do fluido, μ_f	1	cP

Já o valor do fator de amortecimento normal, C_n , foi obtido tomando-se como base um coeficiente de restituição $\epsilon = 0,3$, apropriado para uma ampla variedade de materiais

rochosos, de acordo com Cleary & Sawley (2002). O fator de amortecimento tangencial, γ_t , e o fator de atrito de Coulomb, μ_c , também foram ajustados de forma artificial através de simulações em menor escala. Por fim, as propriedades do fluido, tais como viscosidade e massa específica, foram selecionadas de modo a corresponder aproximadamente às da água.

Tanto nos estudos de caso da sedimentação quanto da filtração, as dimensões da região simulada foram especificadas como sendo $L = 50d_{max}$ e $H = 70d_{max}$, tomando por base o diâmetro da maior partícula do sistema. Além disso, especificamente para a filtração, todas as partículas que formam as camadas do meio poroso apresentam o mesmo diâmetro máximo, $1,4d_{max}$.

As magnitudes dos passos de tempo utilizados nas simulações se encontram entre $1,0 \times 10^{-5}$ s e $1,0 \times 10^{-6}$ s, tendo sido determinadas por tentativa e erro. Todas as simulações bidimensionais simuladas requisitaram um tempo de computação médio de 40 minutos em um computador Intel® Core™ i7-4500U com CPU de 1.80GHz e 8Gb de memória RAM.

Nos próximos tópicos são apresentados os resultados obtidos para os casos da sedimentação e da filtração.

4.1.1 Sedimentação

Neste estudo de caso a movimentação do líquido foi desprezada durante os cálculos das interações fluido-partícula, ou seja, considerou-se $v_f = 0$ m/s, haja vista que a movimentação do mesmo é pequena em comparação à dos sólidos. Já o deslocamento desses últimos foi considerado como bidimensional.

Na Figura 29 e na Figura 30 são apresentados os instantes iniciais e finais, respectivamente, da simulação de 1s do processo de deposição de 1500 partículas circulares monodispersas, com $d = 250\mu\text{m}$. Neste caso as partículas de parede, representadas em cor cinza, possuem diâmetro fixo $d_{max} = d = 250\mu\text{m}$.

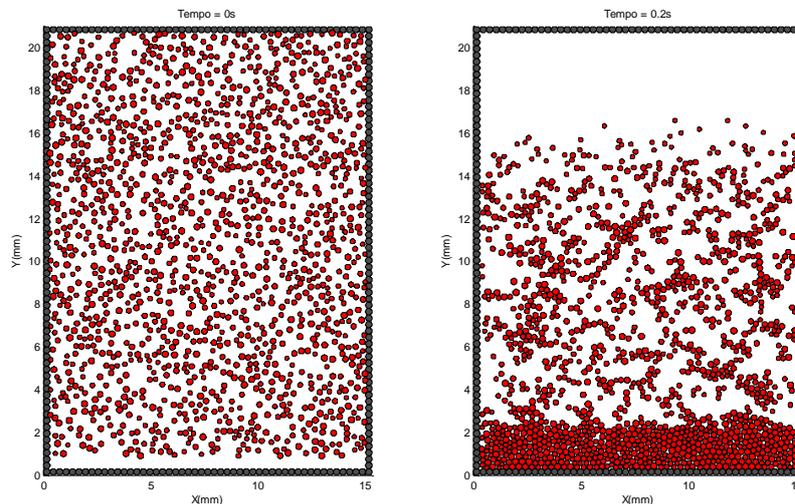


Figura 29. Instantes iniciais da simulação da sedimentação 2D de 1500 partículas.

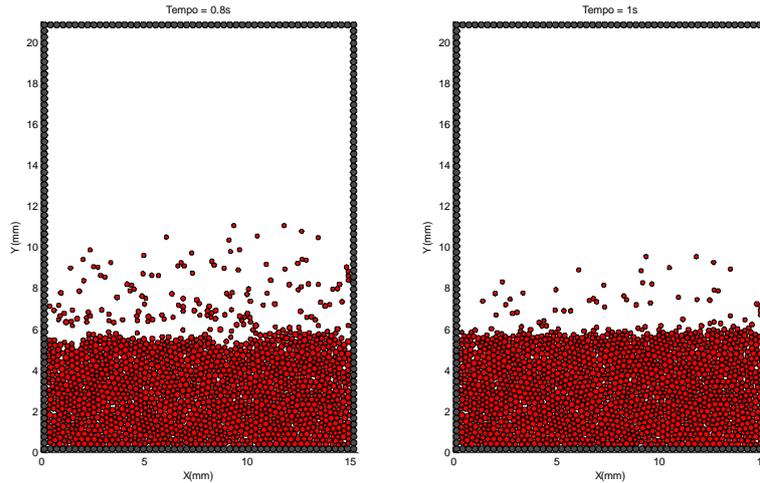


Figura 30. Instantes finais da simulação da sedimentação 2D de 1500 partículas.

Analisando-se os diagramas apresentados nessas figuras é possível verificar que ao final do tempo de simulação, a maioria das partículas já se depositou no fundo do compartimento, produzindo um sedimento mecanicamente estável.

A inspeção dos gráficos de espessura e porosidade do sedimento *versus* tempo, apresentados na Figura 31 e na Figura 32, respectivamente, reforça essa conclusão.

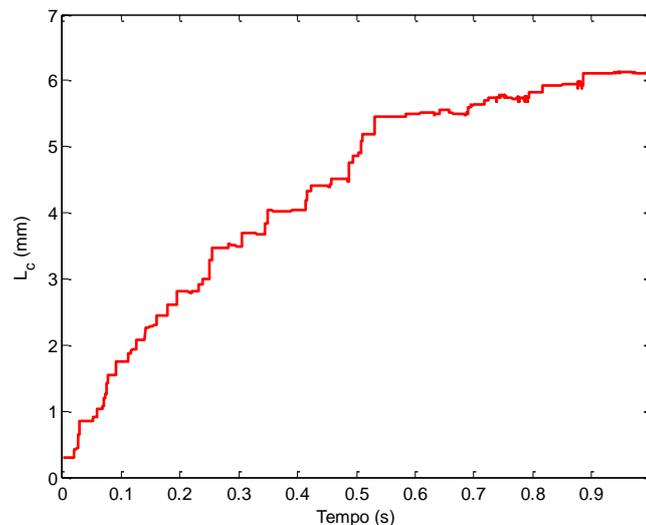


Figura 31. Evolução da espessura de torta com o tempo, para o caso da sedimentação 2D.

Como pode ser observado nesses gráficos, a espessura do sedimento cresce de maneira linear no começo da simulação e tende a atingir um valor final de aproximadamente seis milímetros. Qualitativamente este é um resultado compatível com dados reportados na literatura (DONG *et al.*, 2003; 2006; 2009). Já a porosidade cai de modo acentuado no início do processo e, em seguida, estabiliza em torno de 0,26 (ou seja, 74% do espaço disponível no sedimento são ocupados pelos sólidos). Neste caso, a obtenção de uma alto grau de compactação, notadamente superior a resultados tipicamente reportados na literatura (DONG *et al.* 2006; JIN & PATZEK, 2003), pode estar associada ao fato do cálculo da porosidade ter sido realizado com base na área ocupada pelas partículas, ao invés do seu volume.

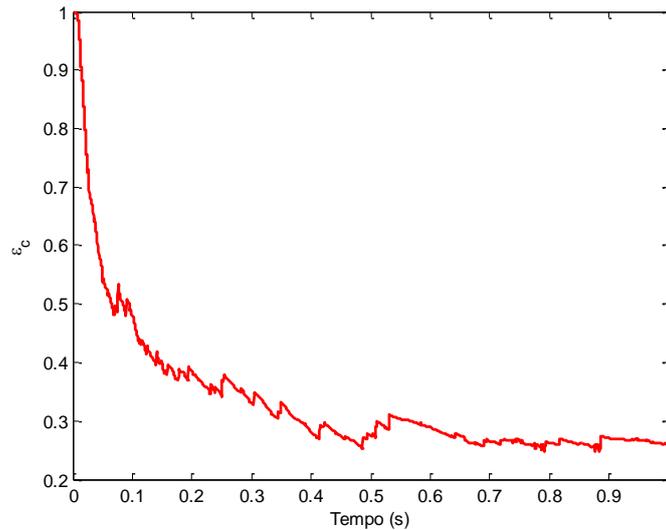


Figura 32. Evolução da porosidade com o tempo, para o caso da sedimentação 2D.

Com o objetivo de explorar o efeito das propriedades do fluido na dinâmica da sedimentação e avaliar a capacidade preditiva dos modelos de força adotados neste trabalho, também foram realizadas simulações com diferentes valores de viscosidade e massa específica de fluido, conforme descrito a seguir.

4.1.1.1 Efeito da massa específica do fluido

A sensibilidade do modelo matemático a variações na massa específica do fluido foi avaliada repetindo-se a simulação anterior para mais dois valores diferentes de ρ_f , a saber, 2000kg/m^3 e 3000kg/m^3 . Os resultados obtidos na forma de gráficos de espessura e porosidade *versus* tempo de simulação se encontram na Figura 33 e na Figura 34.

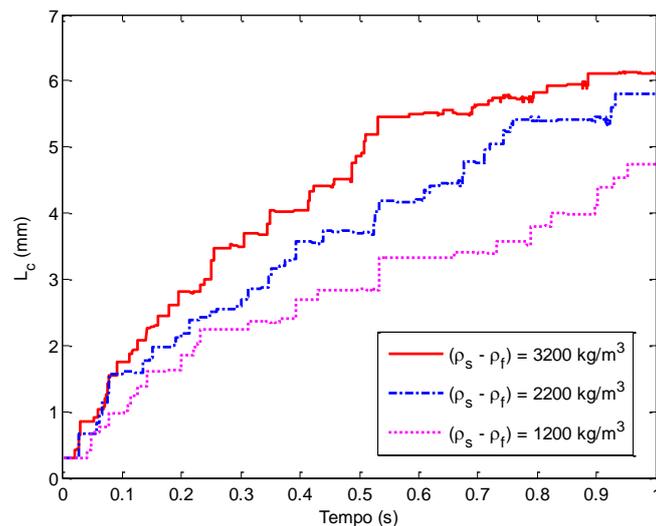


Figura 33. Efeito da massa específica do fluido sobre a espessura do sedimento 2D.

Analisando estes resultados é possível notar que quanto menor a diferença entre as massas específicas do sólido e do fluido, mais lento é o processo de deposição e maior a porosidade do sedimento formado. Tal resultado é fisicamente coerente e pode ser

justificado inspecionando-se as equações dos modelos de força de empuxo e arraste, apresentadas no Capítulo 2 como equações (50) e (55), respectivamente.

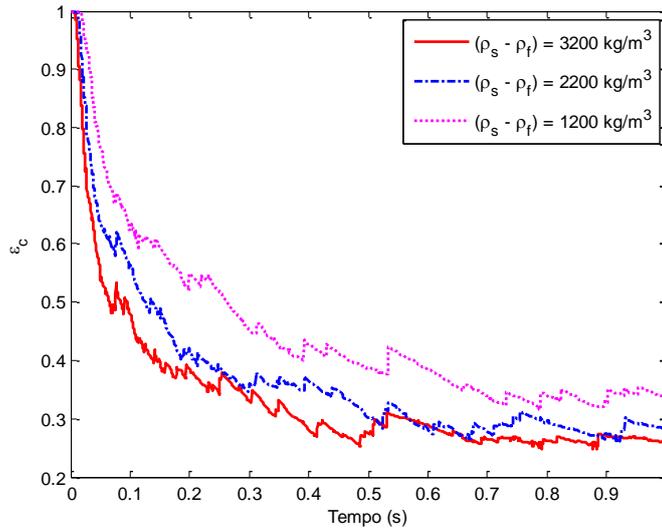


Figura 34. Efeito da massa específica do fluido sobre a porosidade do sedimento 2D.

Além disso, a sedimentação de sólidos em um fluido com maior massa específica normalmente intensifica a ação das forças fluido-partícula, orientadas para cima, o que tende a neutralizar o papel da força motriz gravitacional, desacelerando o movimento de queda e refletindo em uma velocidade terminal menor para as partículas.

4.1.1.2 Efeito da viscosidade do fluido

Neste caso, foram realizadas simulações com três valores de viscosidade de fluido diferentes: 1, 2 e 3cP. Os resultados gerados em termos de espessura e porosidade do sedimento em função do tempo de deposição se encontram na Figura 35 e na Figura 36.

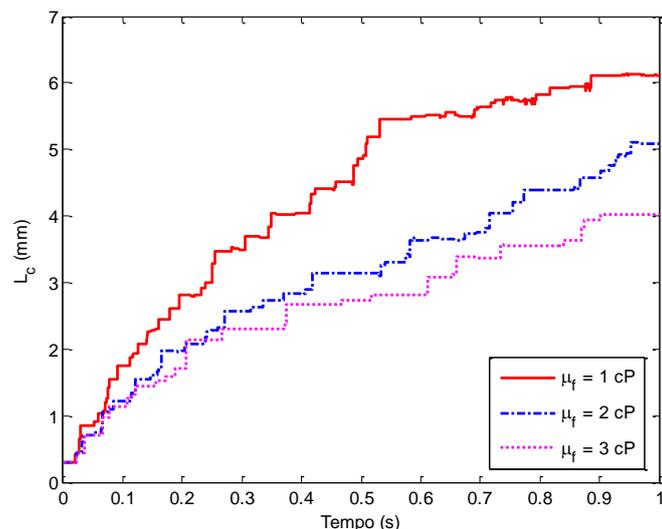


Figura 35. Efeito da viscosidade do fluido na espessura do sedimento 2D.

Verifica-se pela análise desses gráficos que o comportamento do modelo frente às modificações impostas na viscosidade do fluido foi, em alguma medida, similar àquele

observado no caso da massa específica de fluido. Isto é, quanto maior o valor de μ_f , maior o tempo de sedimentação e maior a porosidade do leito de partículas.

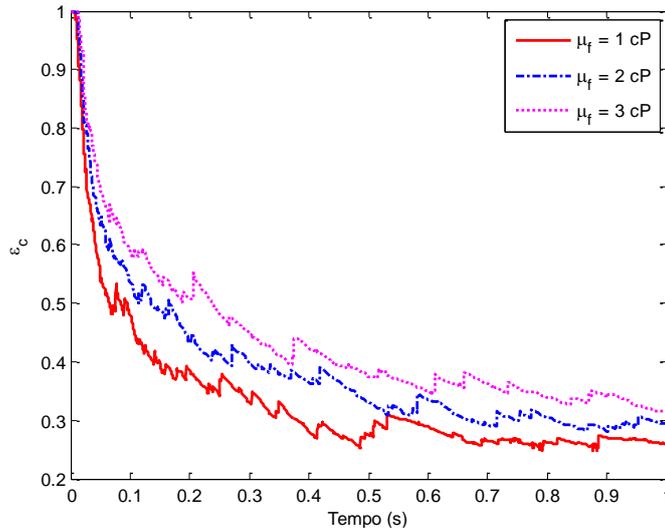


Figura 36. Efeito da viscosidade do fluido na porosidade sedimento 2D.

Verifica-se pela análise desses gráficos que o comportamento do modelo frente às modificações impostas na viscosidade do fluido foi, em alguma medida, similar àquele observado no caso da massa específica de fluido. Isto é, quanto maior o valor de μ_f , maior o tempo de sedimentação e maior a porosidade do leito de partículas.

Do mesmo modo que ocorre com a massa específica, o aumento da viscosidade do fluido intensifica a participação das forças fluido-partícula orientadas para cima, especialmente a força de arraste, no balanço global de forças que governa o movimento de queda dos sólidos. Assim, a tendência de aumento do tempo de sedimentação e da porosidade do leito também é observada neste estudo de caso.

4.1.2 Filtração Plana

O processo de filtração plana bidimensional foi simulado em dois modos de operação distintos: com fluxo de filtrado constante e com queda de pressão constante. Em ambos os casos o perfil de velocidades na direção da filtração foi considerado uniforme e igual ao fluxo de filtrado, $q(t)$. O meio filtrante foi modelado a partir de camadas sucessivas de partículas fixas, com as mesmas propriedades mecânicas daquelas simuladas e com diâmetro correspondente a $1,4d_{max}$.

No caso específico da filtração, ao invés do conjunto de partículas monodispersas simuladas no processo anterior, uma distribuição de tamanhos dada pela equação (91) foi empregada.

$$p(R) = \frac{R_{min}R_{max}}{R_{max} - R_{min}} \frac{1}{R^2} \quad (91)$$

$$R = \frac{R_{min}R_{max}}{R_{max} - Z(R_{max} - R_{min})} \quad (92)$$

onde R , R_{min} e $R_{máx}$ representam o raio de uma partícula qualquer do sistema, o raio da menor partícula do sistema e o raio da maior partícula do sistema, respectivamente; z é um

número aleatório gerado no interior do intervalo [0,1). Os valores dos parâmetros empregados nas simulações também são aqueles relacionados na Tabela 5.

Na Figura 37 são apresentados instantes iniciais e finais da simulação da filtração com queda de pressão constante e igual a 2kPa para um conjunto de 1500 partículas na faixa de 200 a 300 μm de diâmetro. Nesses diagramas as partículas de parede apresentam diâmetro fixo $d_{max} = 300\mu\text{m}$, enquanto as partículas de meio poroso possuem diâmetro de 420 μm (40% maior).

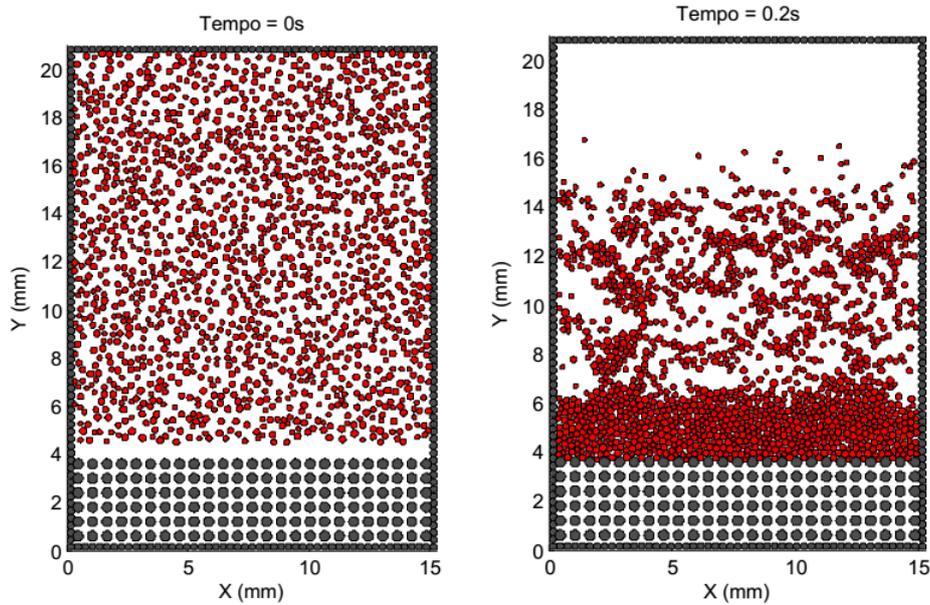


Figura 37. Instantes iniciais da simulação 2D da filtração com queda de pressão constante.

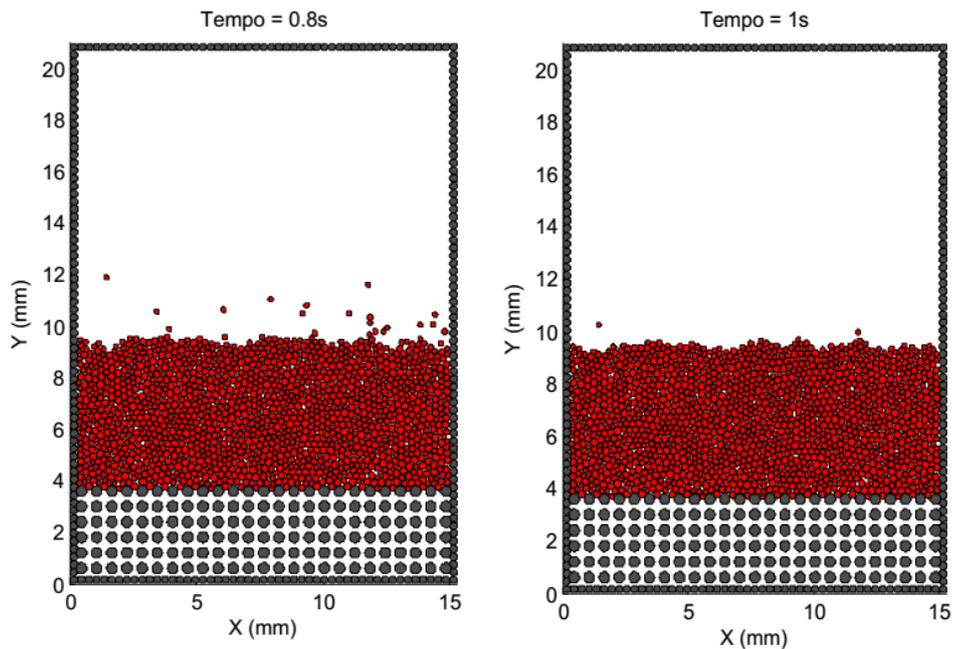


Figura 38. Instantes finais da simulação 2D da filtração com queda de pressão constante.

É possível verificar através dos diagramas apresentados na Figura 38 que, ao final de um segundo de simulação, todas as 1500 partículas do sistema já se encontram depositadas sobre o meio poroso, constituindo uma torta de filtração aparentemente estável.

Na Figura 39 e na Figura 40 são apresentados os gráficos quantificando a espessura e a porosidade da torta ao longo do tempo de operação.

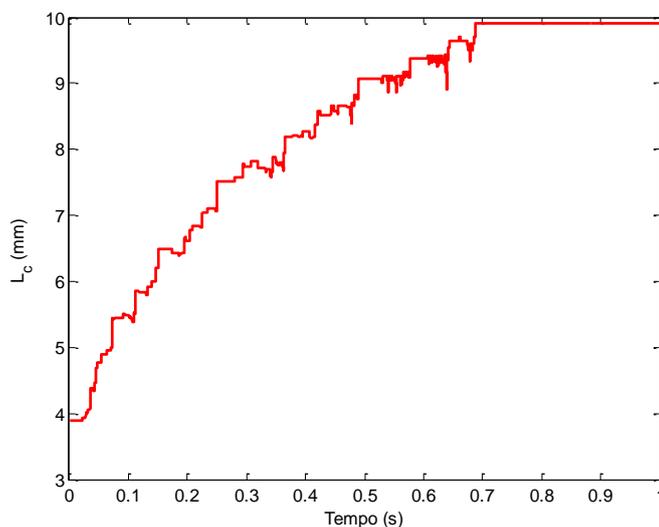


Figura 39. Evolução da espessura de torta com o tempo para o caso da filtração 2D.

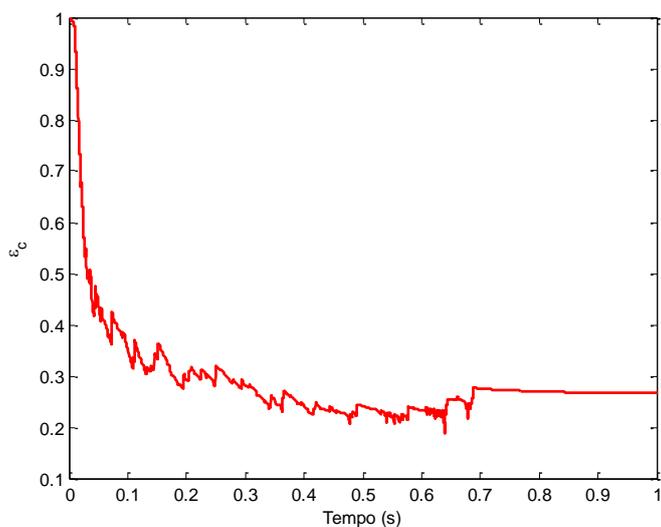


Figura 40. Evolução da porosidade de torta com o tempo para o caso da filtração 2D.

Como neste caso a velocidade de deposição das partículas depende essencialmente da velocidade de escoamento do líquido na direção de filtração, já que a força de arraste agora se encontra a favor da ação gravitacional, observa-se que a torta é formada rapidamente, atingindo uma espessura final próximo a 0,7s de simulação. A porosidade final fica em torno de 27%, um valor abaixo da média (SVAROVSKY, 2000), que também pode ser provavelmente atribuído ao uso das áreas das partículas, ao invés do seu volume, para realizar o cálculo da fração de sólidos da torta.

Para calcular a permeabilidade alcançada pela torta de filtração e, então, determinar o comportamento do fluxo de filtrado ao longo do tempo, foram incluídas no código as

equações (93) e (94), conhecidas por equação de Kozeny-Carman e Darcy, respectivamente.

$$k_c = \frac{\varepsilon_c^3 d^2}{180(1 - \varepsilon_c)^2} \quad (93)$$

$$q(t) = -\frac{k_c \Delta P}{\mu_f L_c} \quad (94)$$

onde d é o diâmetro médio de partícula (m); k_c é a permeabilidade da torta de filtração (m^2); q é o fluxo de filtrado (m/s); L_c é a espessura da torta (m); ΔP é a queda de pressão através da célula de filtração (Pa); μ_f é a viscosidade do fluido (kg/m·s); ε_c é a porosidade da torta (adimensional).

Os dados de permeabilidade *versus* tempo e fluxo de filtrado *versus* tempo são apresentados nos gráficos da Figura 41 e da Figura 42, respectivamente.

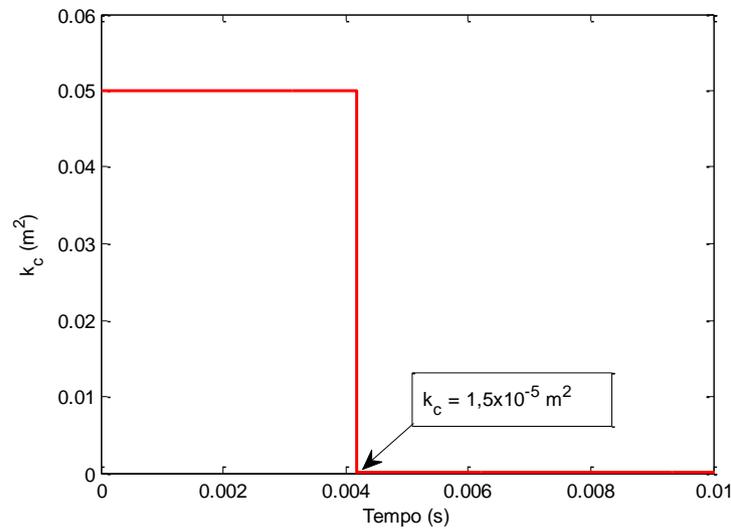


Figura 41. Evolução da permeabilidade da torta com o tempo para a filtração 2D.

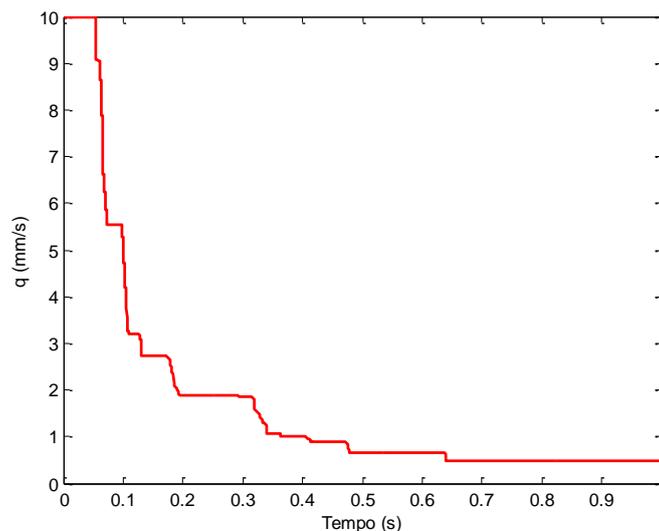


Figura 42. Evolução do fluxo de filtrado com o tempo para a filtração 2D.

No início do processo a permeabilidade apresenta um valor consideravelmente elevado, em função da ausência de sólidos depositados sobre a superfície filtrante (momento em que a porosidade tende a unidade). Logo em seguida, no entanto, observa-se um processo de queda brusca ao longo do tempo no valor de k_c , na medida em que a migração das partículas começa a dar origem à torta de filtração. Como a queda de pressão deve ser mantida constante ao longo de toda a operação, o fluxo de filtrado tende a cair com o tempo para sustentar o valor de $\Delta P = \Delta P_0$, na medida em que a espessura, L_c , cresce, e a porosidade, ε_c , tende a cair.

Com o objetivo de analisar a sensibilidade do modelo às condições operacionais da filtração, também foram realizadas múltiplas simulações nos modos fluxo de filtrado/queda de pressão constante, alternando-se os valores do fluxo de filtrado inicial, q_0 , e da queda de pressão máxima, ΔP_0 , dentro das faixas especificadas na Tabela 5. Os resultados se encontram dispostos a seguir.

4.1.2.1 Efeito da queda de pressão máxima

Neste estudo de caso, o processo de filtração foi simulado tomando-se por base a operação com queda de pressão constante e igual ao máximo ΔP_0 , cuja faixa de operação foi especificada anteriormente na Tabela 5. Foram testados os valores de 2, 4 e 6 kPa e os resultados obtidos pelo programa se encontram dispostos nos gráficos de espessura *versus* tempo e porosidade *versus* tempo, da Figura 43 e da Figura 44, respectivamente.

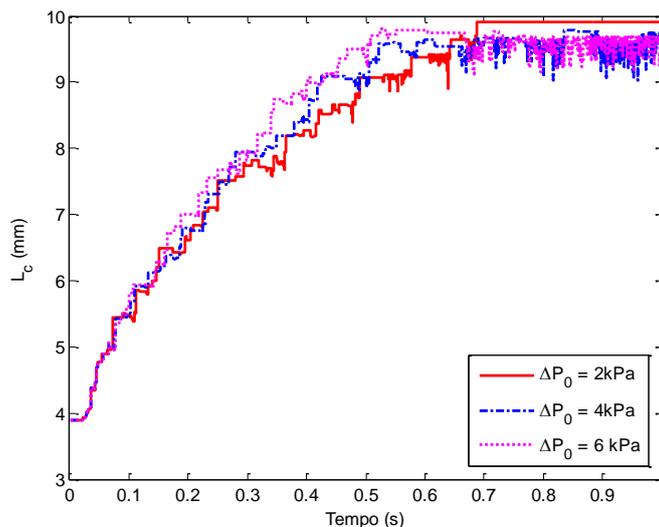


Figura 43. Efeito da queda de pressão máxima na espessura da torta de filtração 2D.

Analisando-se esses dados é possível notar que o aumento da queda de pressão máxima, conforme esperado, tende a acelerar o processo de formação e crescimento de torta (NI *et al.*, 2006). Além disso, dentro do intervalo de pressões analisadas, observa-se que o aumento de ΔP_0 provocou pouca modificação na estrutura final do leito, levando-se em conta que a porosidade média apresentou uma variação máxima de apenas 10%. Este resultado pode estar associado ao já elevado grau de compactação da torta, a qual, por si só, apresenta pouco espaço disponível entre as partículas para compressões adicionais.

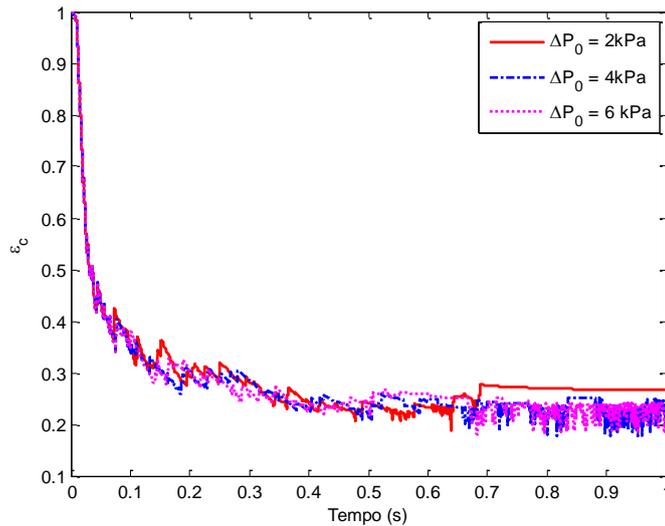


Figura 44. Efeito da queda de pressão máxima na porosidade da torta de filtração 2D.

Com o auxílio das equações de Kozeny-Carman e Darcy também foram construídos os gráficos de permeabilidade *versus* tempo e fluxo de filtrado *versus* tempo, apresentados na Figura 45 e a Figura 46, respectivamente.

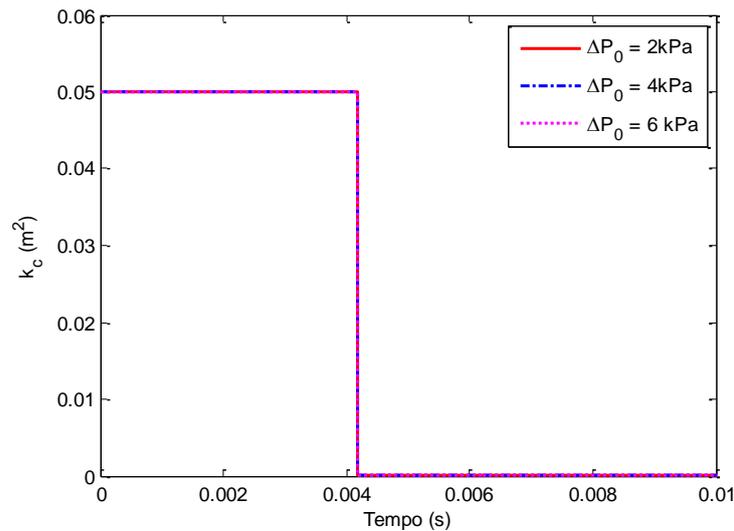


Figura 45. Efeito da queda de pressão máxima na permeabilidade da torta de filtração 2D.

Verifica-se que a variação da queda de pressão máxima parece não apresentar efeito algum sobre a permeabilidade de torta, calculada por meio da equação de Kozeny-Carman (Figura 45). Este poderia ser possivelmente um reflexo do baixo impacto que também se observa sobre a porosidade da torta, induzindo à conclusão de que o modelo bidimensional proposto nesta etapa do presente trabalho não prevê a influência de parâmetros operacionais, tais como ΔP_0 sobre a estrutura final da torta formada.

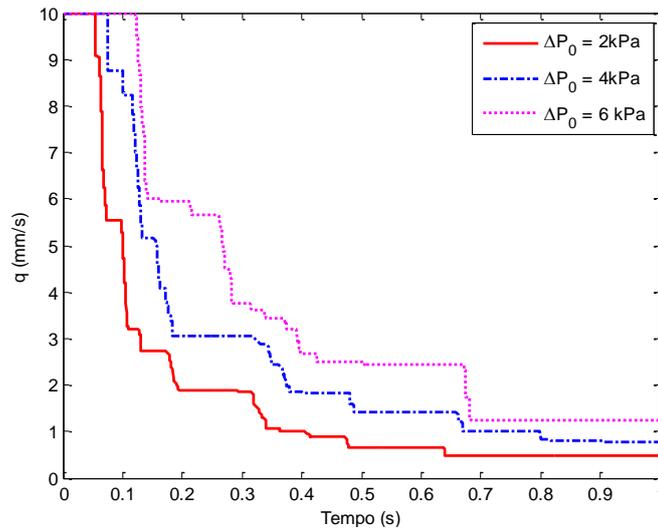


Figura 46. Efeito da queda de pressão máxima no fluxo de filtrado na filtração 2D.

No entanto, conforme previsto em outros trabalhos reportados na literatura, tais como Dong *et al.* (2003; 2009) e Ni *et al.* (2006), o aumento do pressão máxima mantém o fluxo de filtrado elevado por mais tempo durante a operação e tende a aumentar o seu valor ao final da filtração (Figura 46).

4.1.2.2 Efeito do fluxo de filtrado inicial

Para avaliar o efeito do fluxo inicial de filtrado, as simulações apresentadas neste tópico foram realizadas com um valor fixo dessa propriedade, dado por $q = q_0$. Ao longo do processo permitiu-se que a queda de pressão fosse atualizada com o tempo através da lei de Darcy, reescrita na equação (95) explícita em ΔP .

$$\Delta P(t) = \frac{\mu_f L_c q_0}{k_c} \quad (95)$$

onde k_c é a permeabilidade da torta (m^2); q_0 é o fluxo inicial de filtrado (m/s); L_c é a espessura da torta (m); μ_f é a viscosidade dinâmica do fluido ($kg/m \cdot s$).

Os valores de 0,0025, 0,005 e 0,01m/s foram testados e os gráficos de espessura *versus* tempo e porosidade *versus* tempo são apresentados na Figura 47 e na Figura 48, respectivamente.

Similarmente ao que acontece quando o efeito da queda de pressão máxima é avaliado, percebe-se, observando os gráficos da Figura 47 e da Figura 48, que o aumento do fluxo de filtrado inicial favorece o processo de formação e crescimento de torta. Verifica-se, ainda, que os valores de porosidade de torta variaram pouco de um caso para outro.

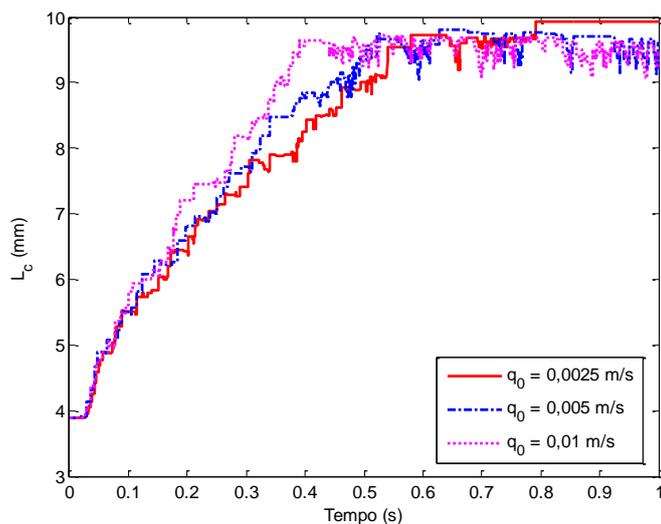


Figura 47. Efeito do fluxo de filtrado inicial na espessura da torta de filtração 2D.

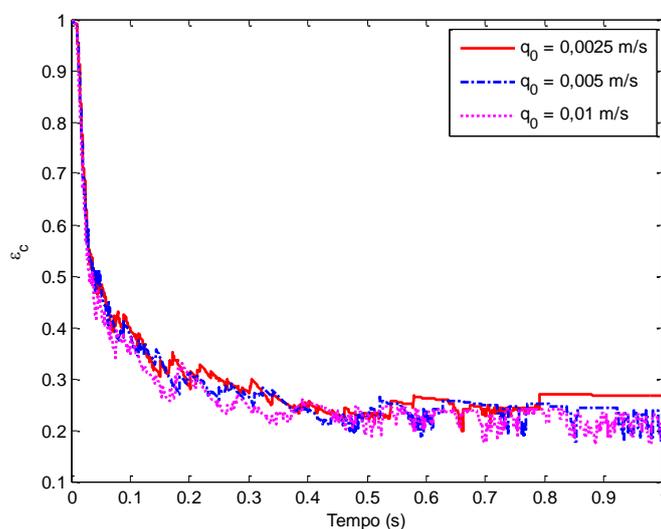


Figura 48. Efeito do fluxo de filtrado inicial na porosidade da torta de filtração 2D.

Também nesses estudos de caso, a permeabilidade da torta e a queda de pressão foram determinadas ao longo do tempo pelas equações de Kozeny-Carman e Darcy, respectivamente, dando origem aos gráficos de permeabilidade *versus* tempo e queda de pressão *versus* tempo apresentados na Figura 49 e na Figura 50, respectivamente.

Assim como aconteceu no estudo de caso anterior, a permeabilidade determinada a partir da equação de Kozeny-Carman apresenta uma queda acentuada logo no início do processo e, na sequência, permanece constante ao longo de toda a simulação.

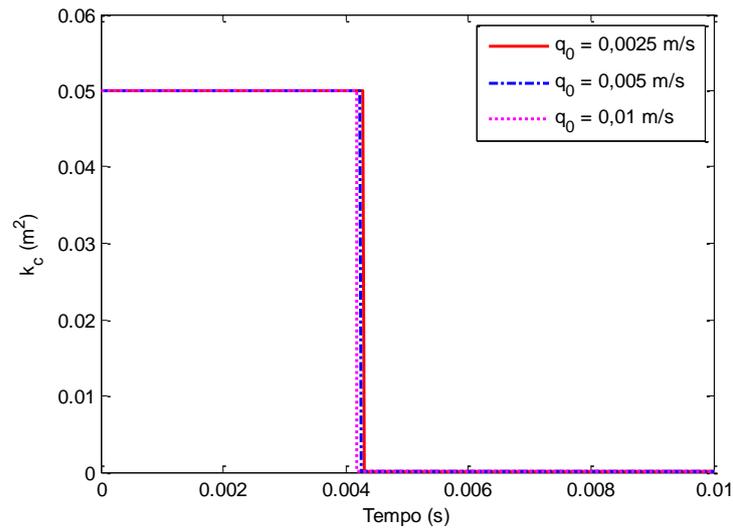


Figura 49. Efeito fluxo de filtrado inicial na permeabilidade da torta de filtração 2D.

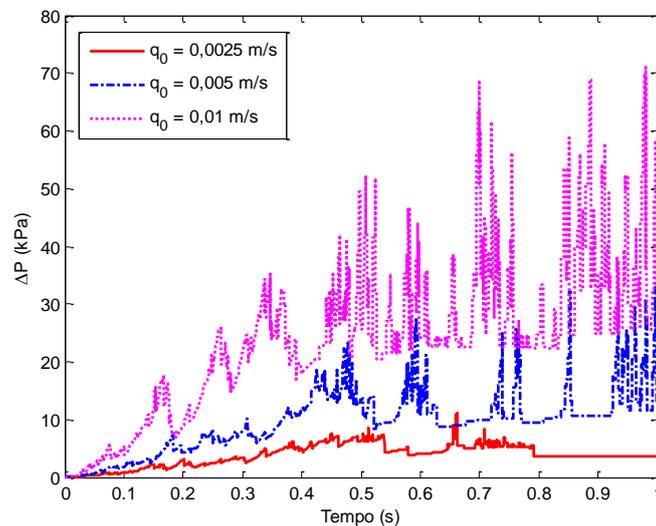


Figura 50. Efeito fluxo de filtrado inicial na queda de pressão na filtração 2D.

De acordo com a curva apresentada na Figura 50, aumentar o fluxo de filtrado inicial faz com que as pressões na célula de filtração tendam a atingir valores maiores ao longo do tempo para sustentar $q = q_0 = \text{cte.}$, na medida em que a torta de filtração vai sendo formada. Este resultado também se encontra qualitativamente de acordo com dados previamente reportados na literatura (SVAROVSKY, 2000; NI *et al.*, 2006).

4.2 Simulações Tridimensionais

Com o objetivo de implementar um modelo computacional capaz de gerar dados mais realistas acerca do comportamento dos processos multifásicos estudados neste trabalho, também foram realizadas simulações tridimensionais da sedimentação, filtração plana e filtração cruzada por meio do DEM.

Como dados de entrada do programa, foram escolhidos os valores de propriedades físicas e condições operacionais relacionados na Tabela 6, em unidades do SI.

Tabela 6. Parâmetros base utilizados nas simulações 3D.

Parâmetro	Valor	Unidade
Número de partículas, N	1000	-
Diâmetro de partícula, d_i	150-500	μm
Massa específica do sólido, ρ_s ,	2460	kg/m^3
Massa específica do fluido, ρ_f	1000	kg/m^3
Viscosidade do fluido, μ_f	1	cP
Módulo de Young, E	$1,0 \times 10^6$	N/m^2
Razão de Poisson, ν	0,29	-
Fator de amortecimento, γ_n	$2,0 \times 10^{-5}$	s
Fator de atrito de Coulomb, μ_c	0,3	-
Fator de atrito de rolamento, μ_r	0,002	-
Constante de Hamaker, H_a	$6,5 \times 10^{-20}$	J

No que diz respeito aos parâmetros mecânicos das partículas sólidas, tais como massa específica, módulo de Young, razão de Poisson, fator de amortecimento, fator de atrito de Coulomb e fator de atrito de rolamento, os valores apresentados correspondem, aproximadamente, a dados típicos de esferas de vidro comuns e foram selecionados com base nos trabalhos de Dong *et al.* (2003; 2006), que estudaram experimental e numericamente a sedimentação de esferas de vidro em soluções binárias de diiodometano/tolueno, tendo obtido boa concordância entre seus resultados. As propriedades do líquido base da suspensão, massa específica e viscosidade, foram selecionadas como sendo aquelas da água pura.

Nas simulações da sedimentação e da filtração plana, as dimensões dos volumes de controle simulados, conforme apresentadas nas figuras do Capítulo 3, foram definidos em termos do diâmetro de partícula como $L = W = 10d$ e $H = 40d$. Já no caso da filtração cruzada, a célula de filtração apresenta maior dimensão na direção horizontal: $H = W = 10d$ e $L = 25d$. Admitiu-se que as partículas componentes das camadas de meio filtrante possuíssem as mesmas propriedades físicas e o mesmo diâmetro, d , das partículas livres.

Da mesma forma como procedido nos estudos de caso bidimensionais, o cálculo da porosidade local em torno de uma partícula qualquer i , ε_i , foi realizado fracionando-se o volume de controle em células horizontais e determinando-se o volume ocupado pelos sólidos em cada um deles, conforme exemplificado anteriormente na Figura 22.

As magnitudes dos passos de tempo utilizados nas simulações se encontram entre $1,0 \times 10^{-6}$ s e $1,0 \times 10^{-5}$ s, tendo sido determinadas por tentativa e erro. Todas as simulações tridimensionais simuladas requisitaram um tempo de computação médio de 7 horas em um computador Intel® Core™ i7-4500U com CPU de 1.80GHz e 8Gb de memória RAM.

4.2.1 Sedimentação

Assim como estabelecido nas simulações bidimensionais, o deslocamento de líquido durante o processo de sedimentação foi admitido como sendo desprezível, enquanto o transporte dos sólidos foi analisado nas três direções coordenadas.

Na Figura 51 apresentam-se instantes da simulação do processo de sedimentação durante 1s para 1000 partículas esféricas com diâmetro de $250\mu\text{m}$.

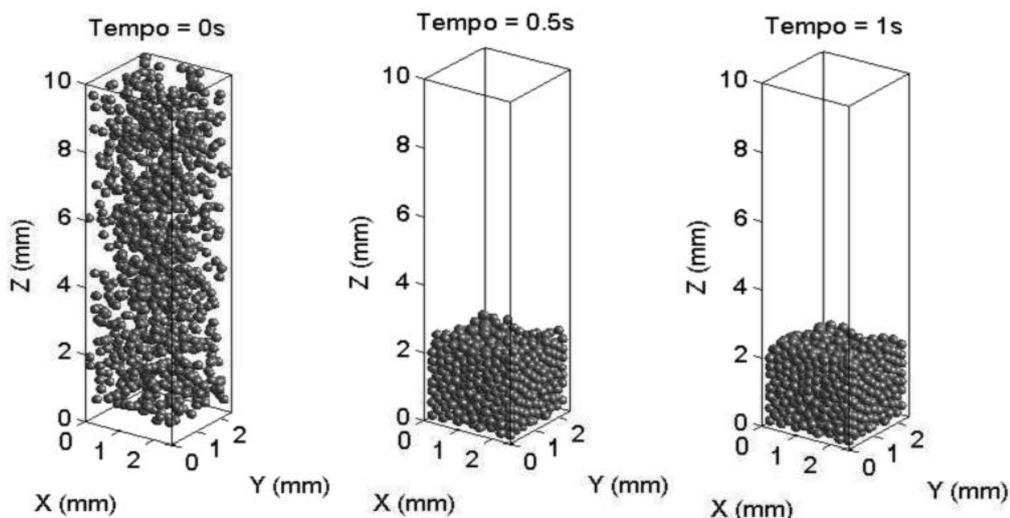


Figura 51. Evolução do processo de sedimentação de 1000 partículas monodispersas de 250 μ m de diâmetro.

Pela observação dos diagramas da Figura 51, nota-se que ao final de 1s de simulação todas as partículas já se depositaram, atingindo, ao menos aparentemente, uma posição mecanicamente estável. Esta conclusão também é reforçada por meio dos gráficos de espessura e de porosidade do sedimento, apresentados na Figura 52 e na Figura 53, respectivamente.

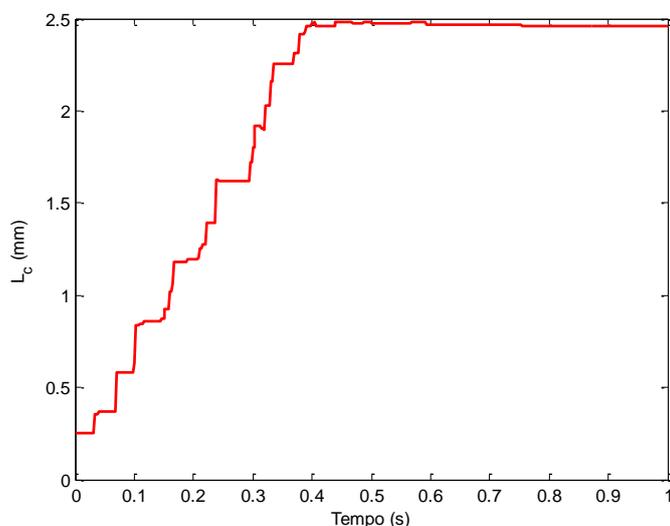


Figura 52. Evolução da espessura do sedimento com o tempo ao longo de 1s de simulação.

Conforme pode ser observado, a espessura da torta cresce de forma linear entre 0s e 0,4s, o que se encontra qualitativamente de acordo com o conhecimento atual sobre sedimentações e, também, com resultados numéricos obtidos por outros autores (DONG *et al.*, 2006; 2009).

Já a porosidade do leito atinge um valor final próximo de 43%, o qual também é compatível com os resultados relatados na literatura em condições de simulação similares (DONG *et al.*, 2006; 2009; JIN & PATZEK, 2003). Este resultado evidencia uma vantagem direta do uso do modelo 3D em comparação ao 2D, já que um valor de porosidade final notadamente mais próximo de valores reais pode ser obtido.

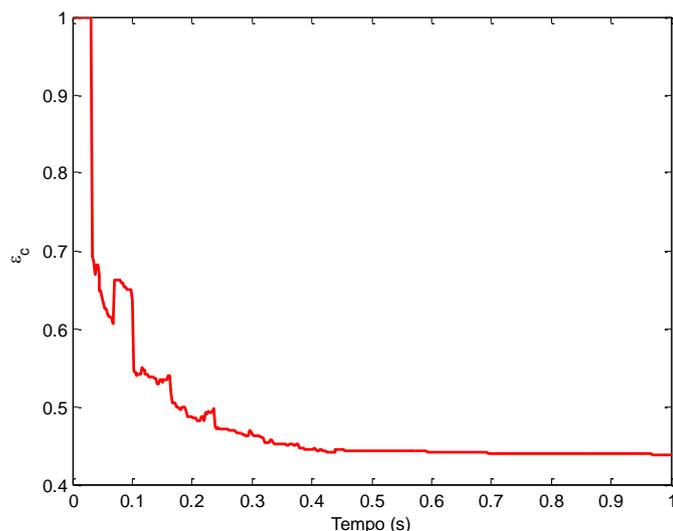


Figura 53. Evolução da porosidade do sedimento no tempo ao longo de 1s de simulação.

Com o objetivo de validar de forma mais evidente os resultados fornecidos pelo programa, foram realizadas simulações de sedimentação para diferentes valores de massa específica do fluido base, em condições similares àquelas encontradas no trabalho de Dong *et al.* (2006). Estes autores reproduziram o processo de deposição de esferas de vidro em uma mistura líquida por meio de experimentos físicos e computacionais, obtendo boa concordância entre os resultados. Na Tabela 7 é apresentada uma comparação entre valores de fração de sólidos encontrados neste trabalho e àqueles fornecidos por Dong *et al.* (2006). Os desvios percentuais foram avaliados tomando os dados daqueles autores como referência.

Tabela 7. Comparação entre os resultados de fração de sólidos obtidos neste trabalho e em Dong *et al.* (2006), considerando diferentes valores de massa específica do fluido.

Fluido	ρ_f (kg/m ³)	ε_s (Este trabalho)	ε_s (Dong <i>et al.</i> , 2006)	Desvio (%)
1	2403,1	0,4875	0,5487	-11,15
2	2352,0	0,5223	0,5682	-8,07
3	2295,9	0,5375	0,5772	-6,87
4	2204,1	0,5554	0,5861	-5,24
5	2102,0	0,5593	0,5921	-5,54
6	1994,9	0,5643	0,5936	-4,95
7	1801,0	0,5866	0,5966	-1,68
8	1602,0	0,5835	0,5981	-2,45
9	1398,0	0,5825	0,6011	-3,09
10	1204,1	0,5861	0,6041	-2,98
11	1005,1	0,5896	0,6056	-2,65
12	795,9	0,5991	0,6056	-1,08
13	500,0	0,5977	0,6071	-1,55

Como pode ser verificado na Tabela 7, os resultados obtidos neste trabalho apresentaram desvios percentuais inferiores a 10% na quase totalidade dos fluidos, exceto para o fluido nº 13, com massa específica de 2403,1kg/m³, em que se verifica a maior

discordância entre os simuladores. Nesse caso, o modelo proposto neste trabalho prevê a formação de sedimentos com menores teores de sólidos. Na Figura 54, encontram-se as curvas com os valores estacionários de porosidade correspondentes a esses dados.

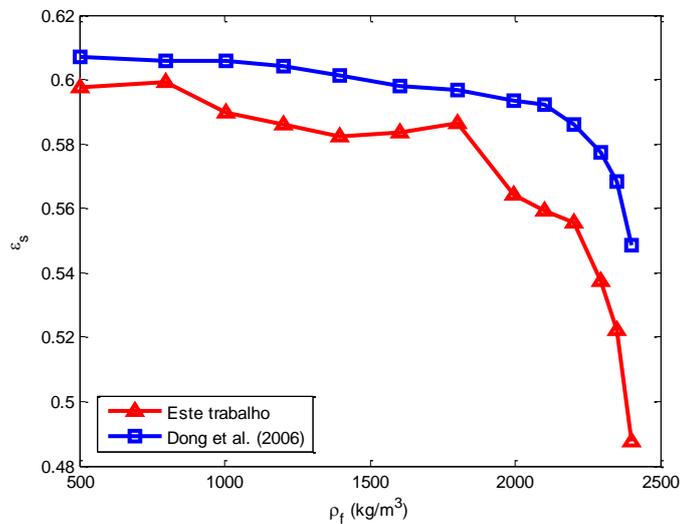


Figura 54. Representação gráfica da comparação entre os dados deste trabalho e de Dong *et al.* (2006) para a fração de sólidos do sedimento ao final da simulação.

Analisando os resultados apresentados, é possível notar em ambos os trabalhos que na medida em que a massa específica do fluido cresce, a fração de sólidos do sedimento formado ao final do processo de deposição tende sempre a diminuir, especialmente na região da curva em que a diferença entre ρ_f e ρ_s é pequena.

Esse comportamento é corroborado pelo conhecimento teórico sobre sedimentações, tendo em vista que o aumento da massa específica do fluido altera o balanço de forças que governa o movimento das partículas no sentido de neutralizar a ação gravitacional, promovendo a formação de sedimentos mais porosos (COULSON & RICHARDSON, 2002; DONG *et al.*, 2006).

Na sequência, aplicando a metodologia apresentada nas seções anteriores, foram realizadas simulações alterando-se os valores de propriedades das partículas e do líquido, tais como: concentração inicial de sólidos, constante de Hamaker do sólido, massa específica e viscosidade do fluido.

4.2.1.1 Efeito da massa específica do fluido

No intuito de explorar o efeito da massa específica do fluido sobre o processo de sedimentação, foram realizadas simulações a partir dos parâmetros base apresentados na Tabela 6, porém alternando o valor de ρ_f entre 500 – 2000kg/m³. Os resultados para espessura e porosidade do sedimento ao longo do tempo são apresentados na Figura 55 e na Figura 56, respectivamente.

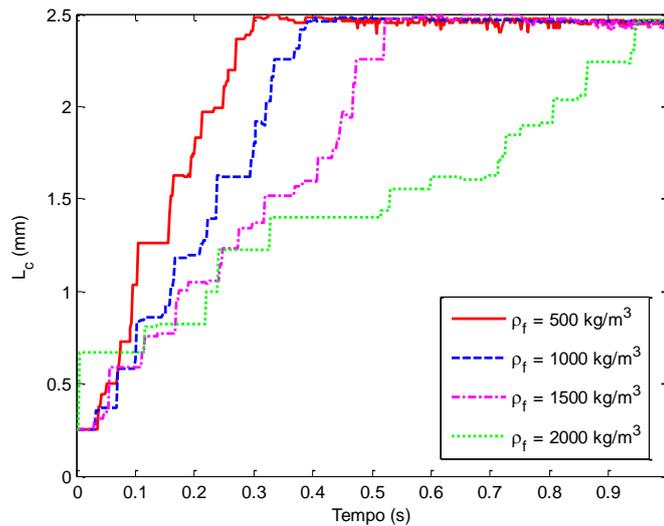


Figura 55. Efeito da massa específica do fluido sobre a espessura do sedimento.

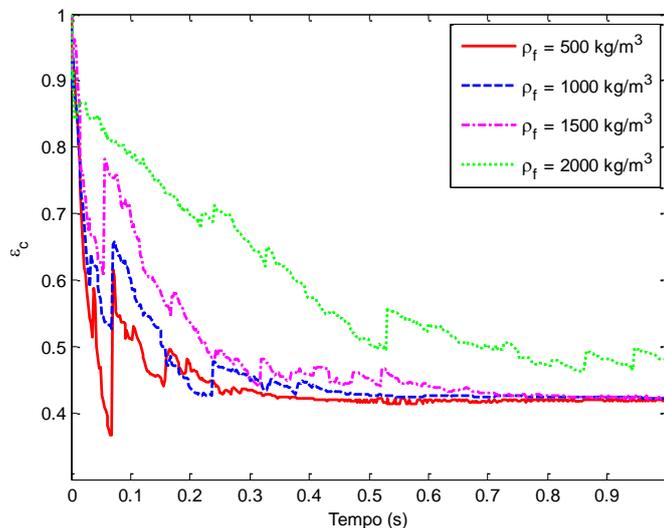


Figura 56. Efeito da massa específica do fluido sobre a porosidade do sedimento.

De acordo com esses resultados, observa-se que a massa específica do fluido afeta a dinâmica de deposição dos sólidos. Quanto maior o seu valor, maior será a intensidade das forças fluido-partícula direcionadas para cima, especialmente o empuxo. Isto faz que elas sejam mais eficientes em neutralizar a ação da força motriz gravitacional, reduzindo a velocidade terminal da partícula e aumentando o tempo de sedimentação, o que concorda qualitativamente com os resultados anteriores, obtidos para simulações 2D, e também com o conhecimento atual sobre sedimentações (COULSON & RICHARDSON, 2002).

Conforme pode ser conferido por meio do diagrama exposto na Figura 56, nota-se uma tendência de aumento da porosidade na medida em que a diferença entre as massas específicas do fluido e da partícula diminui.

4.2.1.2 Efeito da viscosidade do fluido

O efeito da viscosidade do fluido foi analisado por meio de simulações considerando três valores diferentes de μ_f entre 1 e 10cP. O comportamento da espessura e da porosidade do sedimento como funções do tempo foi compilado na Figura 57 e na Figura 58 a seguir.

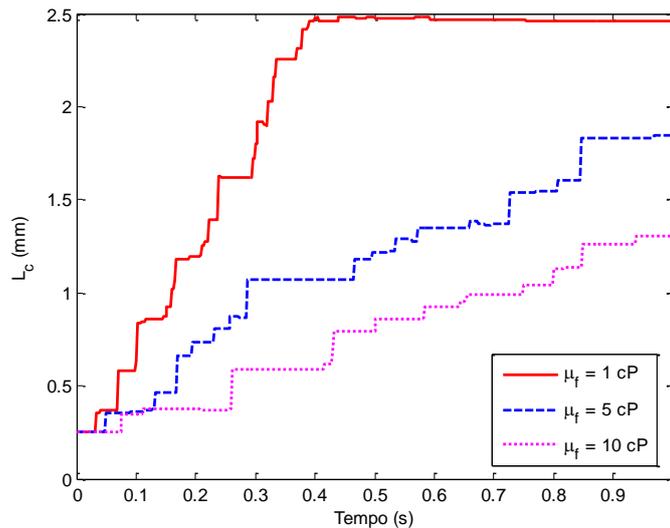


Figura 57. Efeito da viscosidade do fluido sobre a espessura do sedimento.

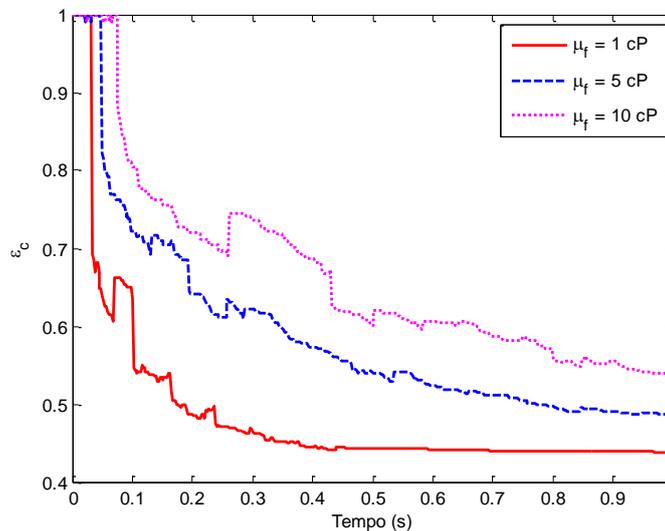


Figura 58. Efeito da viscosidade do fluido sobre a porosidade do sedimento.

Assim como acontece nas simulações 2D, o aumento da viscosidade do fluido acentua a ação das forças de interação que restringem o movimento das partículas, com destaque especial para a força de arraste.

Dentro da faixa de viscosidades testada neste trabalho, o aumento do parâmetro provoca alterações notáveis na dinâmica da deposição, conforme ilustrado na Figura 57. Enquanto o sistema com 1cP de viscosidade atinge uma espessura de torta estável em aproximadamente 0,3s, a espessura da torta do sistema correspondente com 10cP continua crescendo até o final do tempo de simulação.

Um comportamento similar pode ser observado no gráfico de porosidade *versus* tempo (Figura 58), onde o aumento da viscosidade do fluido base de 1 à 10cP produz diferenças sensíveis nos valores finais de ϵ_c , ao contrário do que foi observado nos testes de massa específica. Novamente, essa diferença pode estar diretamente associada a uma maior dependência da força de arraste com a viscosidade, segundo o modelo de Di Felice (1994), dado pela equação (55) no Capítulo 2.

4.2.1.3 Efeito da constante de Hamaker (força coesiva)

A constante de Hamaker do sólido, parâmetro importante para a caracterização das forças coesivas que atuam entre particulados finos durante os processos de deposição, também foi avaliada neste trabalho. Partindo dos dados base especificados na Tabela 6, foram admitidos dois valores diferentes para H_a : $6,5 \times 10^{-20}$ e $5,7 \times 10^{-21}$ Joules. Os resultados obtidos a partir das simulações com esses valores são apresentados na Figura 59 e na Figura 60, para dados de espessura e porosidade do sedimento *versus* tempo, respectivamente.

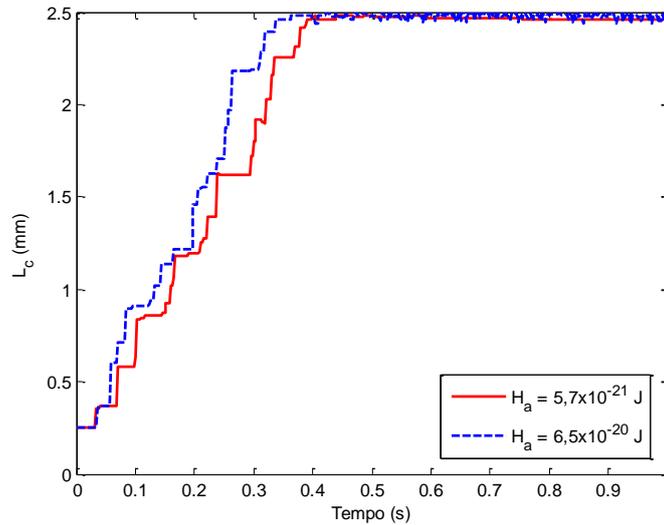


Figura 59. Efeito da constante de Hamaker sobre a espessura do sedimento.

Analisando a Figura 59 é possível verificar que mesmo com a variação imposta na constante de Hamaker, os sedimentos atingem a espessura final ao mesmo tempo, isto é, em torno de 0,4s de simulação. Este comportamento apresenta boa concordância com resultados previamente reportados na literatura por outros pesquisadores (Dong *et al.*, 2006), os quais atribuíram tal comportamento ao fato da distância média entre as partículas durante a sedimentação ser relativamente grande, fazendo com que as forças coesivas tenham menor impacto sobre a velocidade terminal das partículas.

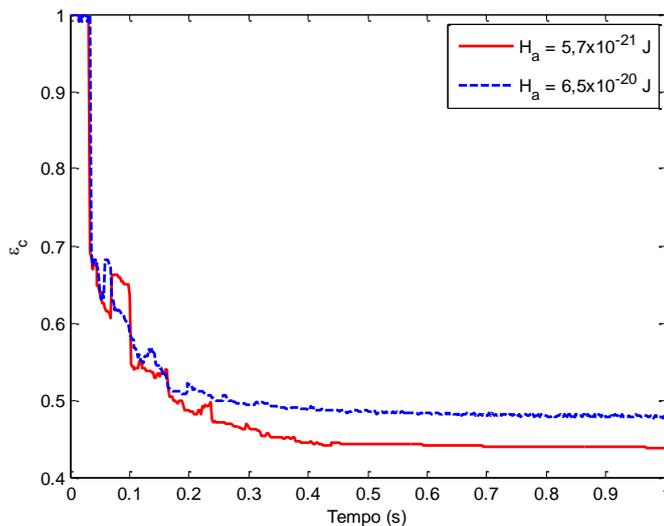


Figura 60. Efeito da constante de Hamaker sobre a porosidade do sedimento.

Por outro lado, em decorrência do efeito atrativo gerado pela força de van der Waals, intensificado pelo aumento de H_a , o movimento de rearranjo das partículas no leito fica parcialmente comprometido e essa dificuldade para se deslocar, de modo a assumir posições mais estáveis do ponto de vista mecânico, se reflete em uma porosidade elevada, de acordo com o perfil apresentado na Figura 60.

4.2.1.4 Efeito da concentração inicial de sólidos

Com o objetivo de analisar o efeito da concentração inicial de sólidos no processo de deposição, o número total de partículas simuladas foi variado entre 500 e 2000 partículas. Elas foram geradas no interior do mesmo volume de controle mencionado na Seção 4.2.1. Os resultados obtidos para os parâmetros básicos de simulação foram resumidos na Figura 61 e na Figura 62 a seguir.

Como era de se esperar, quanto a maior a concentração de sólidos no sistema, maior a espessura final da torta formada. Além disso, a maior presença de partículas confinadas em um mesmo volume aumenta a frequência de colisões e reduz o espaço para o fluido, condições que contribuem para o aumento do tempo de sedimentação (Figura 61).

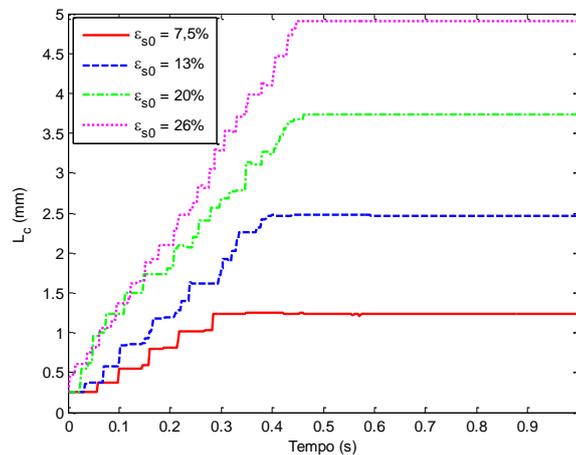


Figura 61. Efeito da concentração de sólidos sobre a espessura do sedimento.

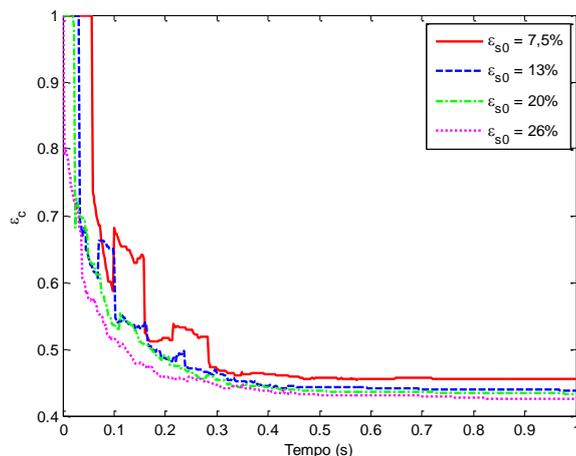


Figura 62. Efeito da concentração de sólidos sobre a porosidade do sedimento.

Por outro lado, a porosidade parece ser pouco afetada por essa variável, apresentando uma tendência de diminuir juntamente com a quantidade de partículas.

4.2.2 Filtração Plana

O código desenvolvido neste trabalho também foi utilizado para simular o processo de filtração plana, operando em dois modos distintos: com queda de pressão constante e com fluxo de filtrado constante. O conjunto de parâmetros físicos relacionados na Tabela 6 e utilizados no estudo de caso da sedimentação foi novamente empregado.

Especificamente no caso da filtração, em uma tentativa de reproduzir a operação em modo contínuo, os sólidos foram sendo introduzidos gradualmente na região simulada a uma taxa constante de 0,00125 partículas por passo de tempo. A superfície do meio filtrante foi modelada por meio de uma camada de partículas sólidas fixas, com as mesmas propriedades mecânicas das partículas livres e diâmetro igual $150\mu\text{m}$.

A Figura 63 e a Figura 64 apresentam instantes iniciais e finais da simulação ao longo de um segundo, respectivamente. Neste caso, considerou-se que a operação foi conduzida com $\Delta P = \Delta P_0 = 2\text{kPa}$. O fluxo de filtrado inicial foi de $0,01\text{ m/s}$.

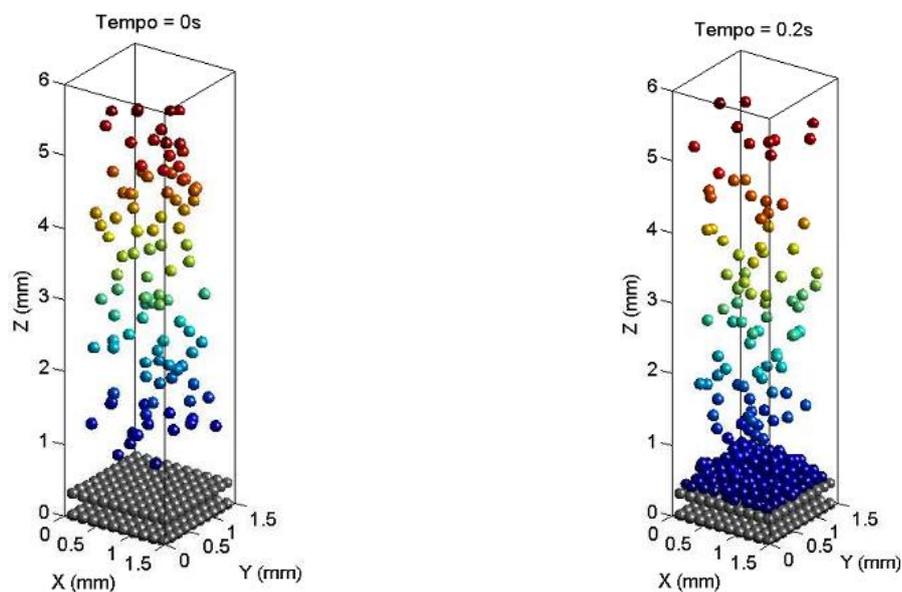


Figura 63. Instantes iniciais do processo de filtração plana de partículas de $150\mu\text{m}$.

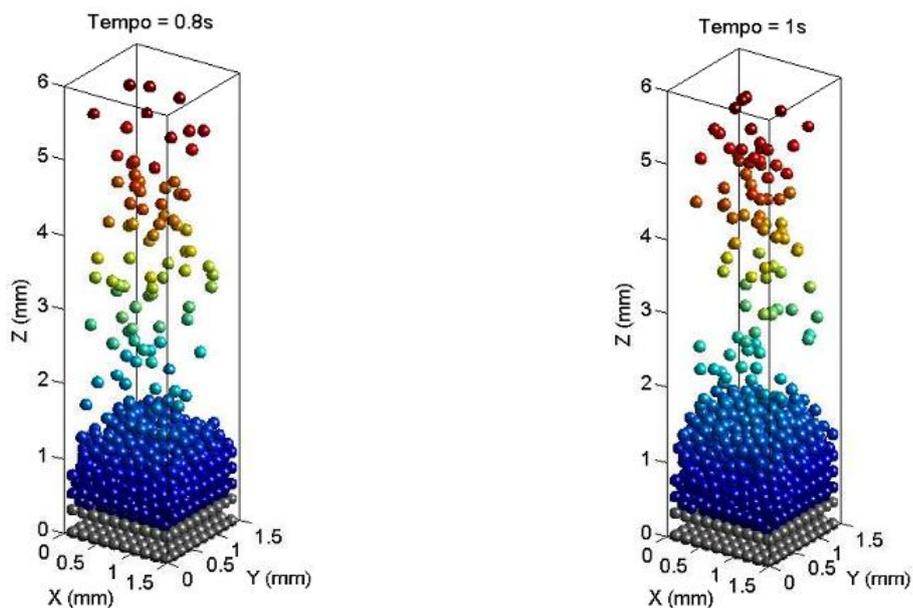


Figura 64. Instantes finais do processo de filtração plana de partículas de $150\mu\text{m}$.

De acordo com os diagramas apresentados, ao final de um segundo de simulação boa parte dos sólidos alimentados já se depositou sobre a superfície do meio filtrante, formando um leito estável. O gradiente de cores indica o grau de movimentação das partículas, variando do azul, representando partículas que já se encontram estáveis e depositadas na torta, ao vermelho, que contempla os elementos que acabaram de ser alimentadas à célula de filtração.

Os gráficos da Figura 65 e da Figura 66, apresentam os resultados da simulação para a espessura e porosidade da torta *versus* tempo ao longo de 1s.

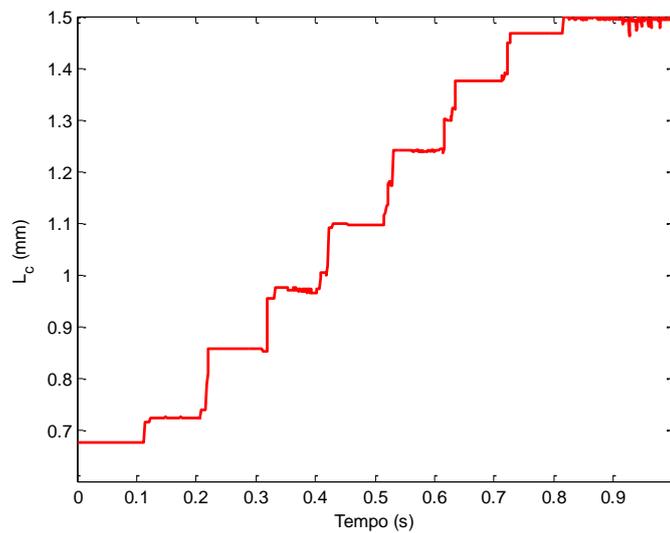


Figura 65. Evolução da espessura da torta de filtração em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.

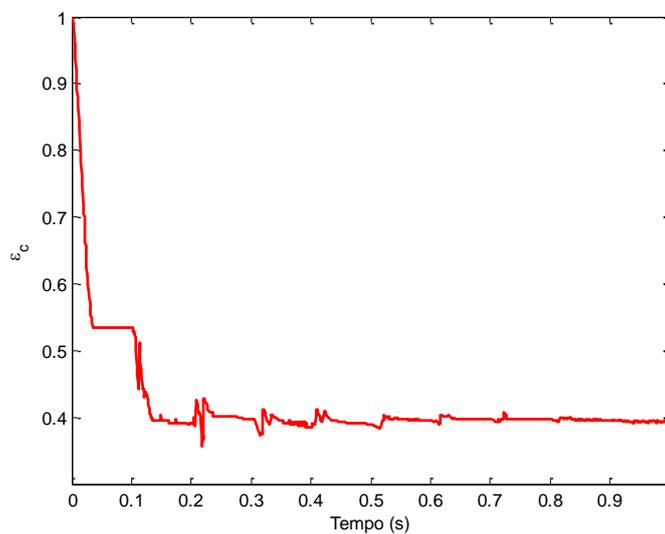


Figura 66. Evolução da porosidade da torta de filtração em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.

Pode-se notar, através da Figura 66, que a porosidade cai acentuadamente logo no início do processo, na medida em que as primeiras partículas se acumulam sobre o meio filtrante e começam a delinear a estrutura da torta de filtração. Após esse primeiro momento, com taxas de deposição elevadas e consequentes variações da porosidade e da espessura, valor final de aproximadamente 0,39 é alcançado.

Admitindo que o leito simulado neste trabalho seja composto por um meio poroso isotrópico e homogêneo, as equações de Kozeny-Carman e de Darcy foram utilizadas para estimar o comportamento da permeabilidade da torta e do fluxo de filtrado ao longo do tempo. Os resultados obtidos foram sintetizados nos gráficos da Figura 67 e da Figura 68.

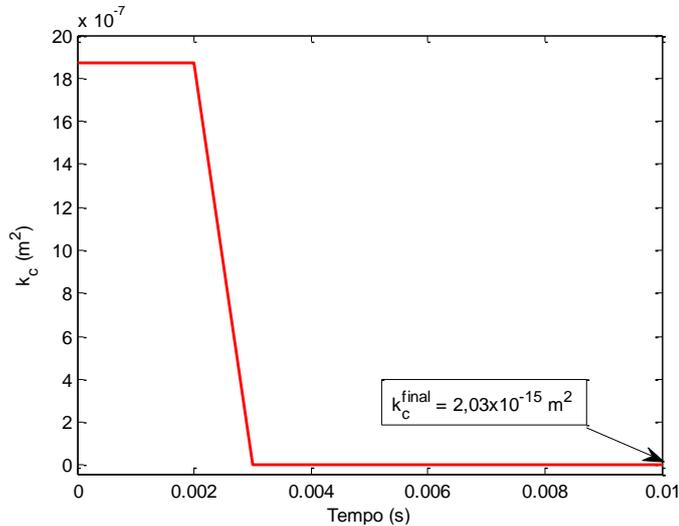


Figura 67. Evolução da permeabilidade da torta de filtração em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.

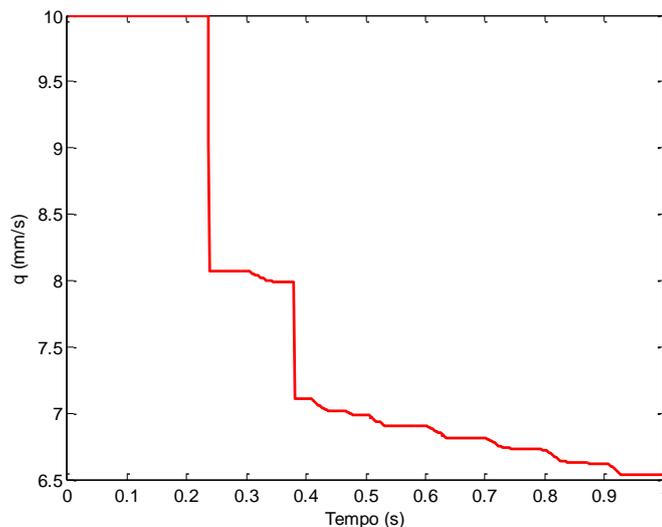


Figura 68. Evolução do fluxo de filtrado em função do tempo para operação conduzida com queda de pressão constante de 2kPa.

Verifica-se que a mesma tendência de queda brusca é observada para a permeabilidade ao longo do tempo, a qual atinge um valor final mínimo de $2,03 \times 10^{-15} m^2$ logo nos primeiros 0,01s de simulação.

Já o fluxo de filtrado começa cair entre 0,2s e 0,3s para manter a diferença de pressão constante no sistema, atingindo o valor final de 6,53 mm/s. Um comportamento qualitativamente de acordo com dados reportados por Dong *et al.* (2009).

Assim como foi feito para as simulações 2D, a sensibilidade do modelo de filtração plana 3D às condições operacionais foi analisada através de múltiplas simulações nos

modos fluxo de filtrado/queda de pressão constante, para diferentes valores de q_0 e ΔP_0 , respectivamente. Os resultados são apresentados a seguir.

4.2.2.1 Efeito da queda de pressão máxima

Neste estudo de caso, o processo de filtração foi simulado tomando-se por base a operação com uma queda de pressão constante. Foram testados os valores de 1, 2 e 3 kPa e os resultados obtidos pelo programa se encontram dispostos nos gráficos de espessura *versus* tempo, na Figura 69, e porosidade *versus* tempo, na Figura 70.

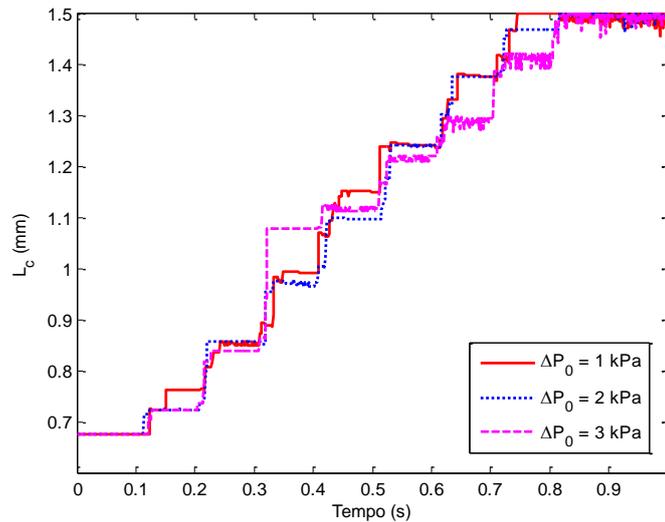


Figura 69. Efeito da queda de pressão sobre a espessura da torta, obtida durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.

Analisando-se as curvas de espessura da Figura 69 é possível perceber que o aumento da diferença de pressão na célula faz com que o processo de deposição das partículas aconteça de forma mais rápida.

Similarmente, nota-se também uma pequena queda na porosidade final nas curvas da Figura 70, indicando uma tendência de formação de tortas mais compactas.

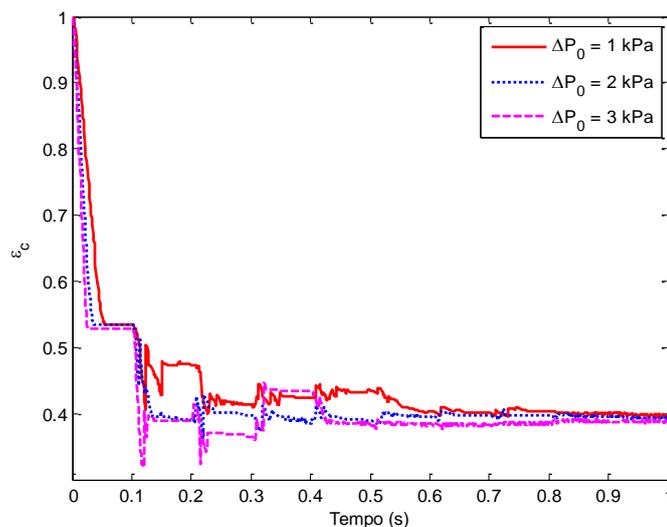


Figura 70. Efeito da queda de pressão sobre a porosidade da torta, obtida durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.

Os efeitos dessa variação na pressão de operação sobre a permeabilidade da torta e sobre a taxa de filtração podem ser verificados através das curvas de permeabilidade *versus* tempo, na Figura 71, e de fluxo de filtrado *versus* tempo, na Figura 72.

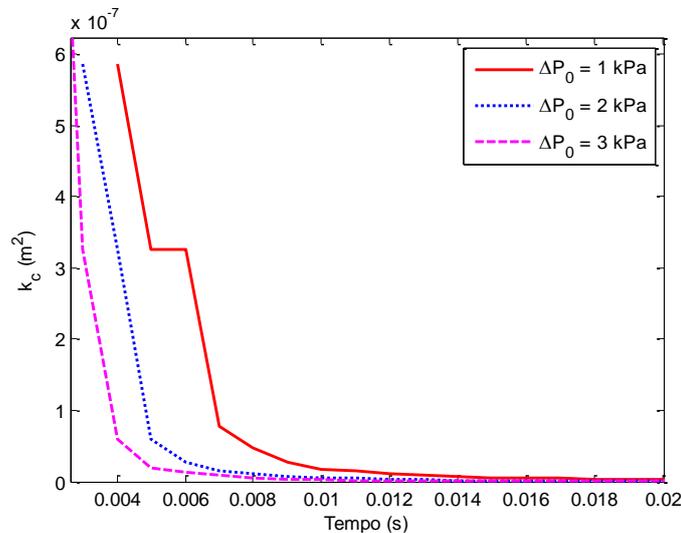


Figura 71. Efeito da queda de pressão sobre permeabilidade da torta, obtida durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.

É interessante notar nestes gráficos que como a torta demora mais tempo para ser formada na operação a 1kPa, o fluxo de filtrado também leva mais tempo para começar a deixar o sistema, em comparação aos outros casos com pressões de operação maiores. No entanto, quanto maior o valor de ΔP , menor é o valor final do fluxo de filtrado, resultado compatível com dados reportados por outros autores (DONG *et al.*, 2003; 2006)

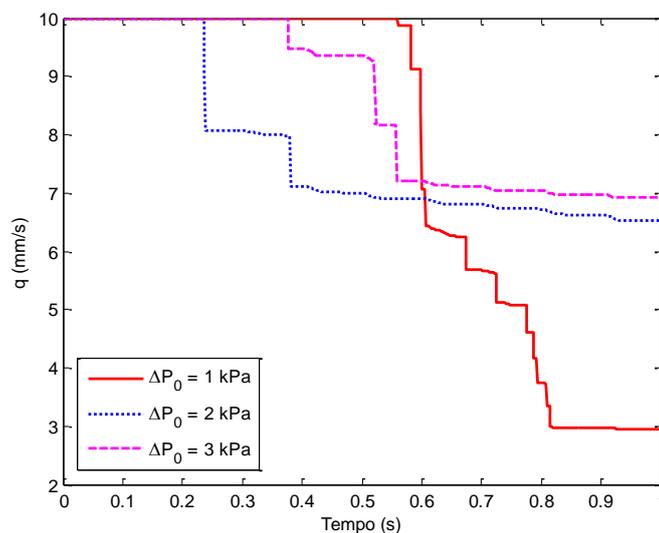


Figura 72. Efeito da queda de pressão máxima sobre o fluxo de filtrado, obtido durante a simulação da operação a ΔP constante usando o modelo de filtração plana 3D.

4.2.2.2 Efeito do fluxo de filtrado inicial

A filtração também foi simulada tomando por base a operação com fluxo de filtrado constante. Os testes numéricos foram reproduzidos para três valores de fluxo, quais sejam

0,0025, 0,005 e 0,01 m/s. As curvas de espessura *versus* tempo e porosidade *versus* tempo, geradas pelo programa são apresentadas na Figura 73 e na Figura 74, respectivamente.

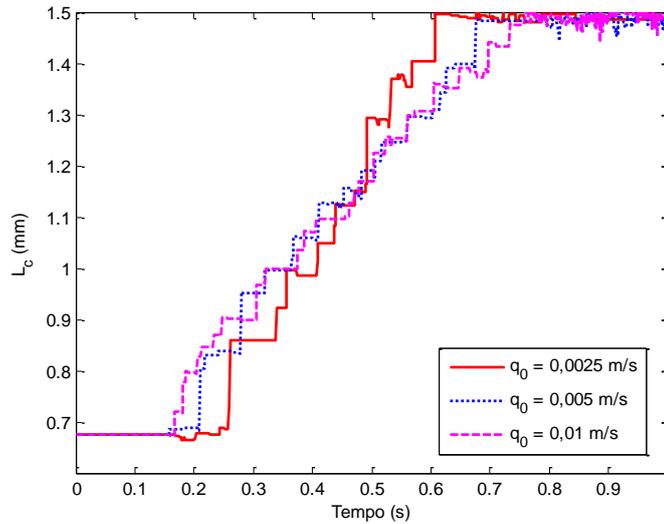


Figura 73. Efeito do fluxo inicial sobre a espessura da torta, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.

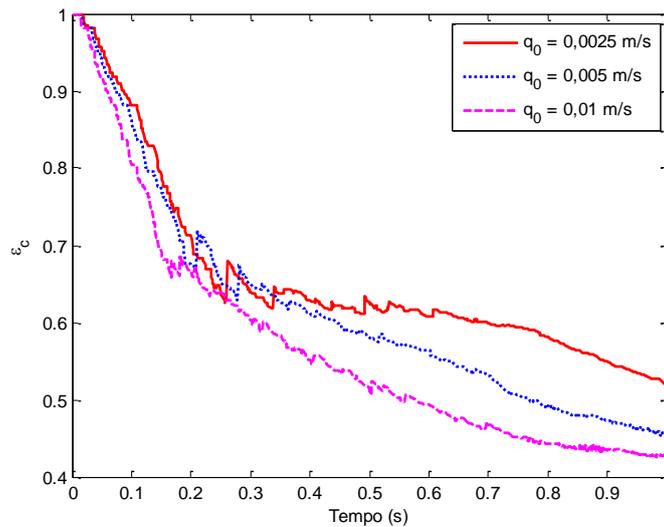


Figura 74. Efeito do fluxo inicial sobre a porosidade da torta, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.

A partir desses gráficos é possível observar que na operação com valores menores de fluxo de filtrado, tanto a taxa de crescimento da espessura quanto porosidade média da torta tendem a ser maiores, ou seja, diminuindo-se o fluxo de filtrado, diminui-se também a intensidade da força de arraste que age sobre as partículas, o que dá origem a tortas menos compactas.

Empregando novamente as equações de Kozeny-Carman e Darcy, foram calculadas a permeabilidade da torta e a diferença de pressão na célula ao longo do tempo. Os resultados são apresentados na Figura 75 e na Figura 76, respectivamente.

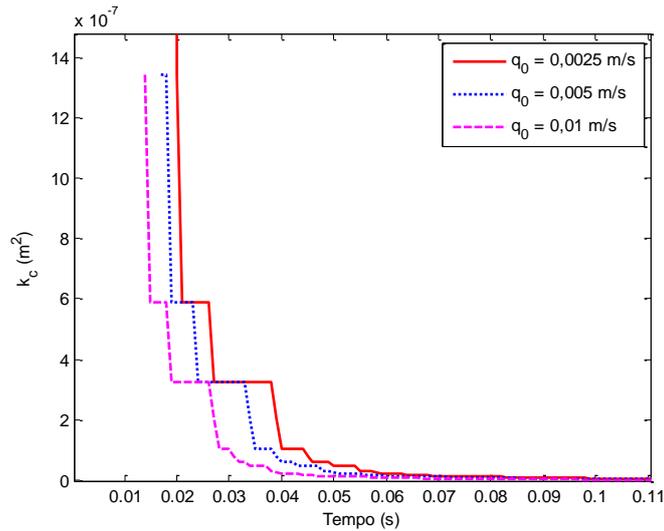


Figura 75. Efeito do fluxo do filtrado sobre a permeabilidade da torta, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.

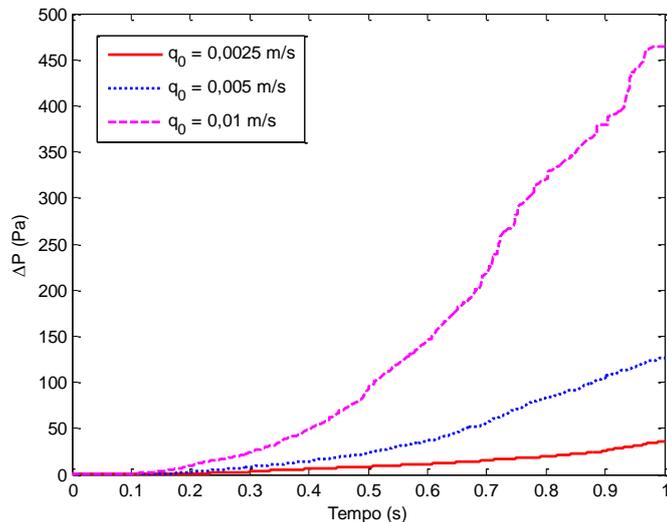


Figura 76. Efeito do fluxo de filtrado sobre a queda de pressão na célula, obtida durante a simulação da operação a q constante usando o modelo de filtração plana 3D.

Nota-se que a permeabilidade, acompanhando o comportamento da porosidade, assume valores menores para as tortas formadas durante a operação com fluxo de filtrado maior. Isto se reflete, conseqüentemente, em uma maior resistência ao escoamento e faz com que a diferença de pressão se eleve para manter o fluxo de filtrado.

4.2.3 Filtração Cruzada

Neste tópico são apresentados os resultados obtidos através da simulação da filtração cruzada com 1000 partículas esféricas, cujas propriedades físicas são as mesmas utilizadas nos estudos de casos anteriores e se encontram listadas na Tabela 6.

Assim como na filtração plana, as partículas foram geradas gradualmente e sem sobreposição ao longo do tempo de simulação, a uma taxa constante de 0,00125 partículas/passos de tempo.

A unidade de filtração foi modelada a partir de duas placas planas e paralelas, sendo a de baixo permeável ao fluido, conforme representado na Figura 27 do Item 3.1.2.

A distribuição de velocidades na direção do fluxo cruzado foi considerada previamente conhecida, com o perfil parabólico dado pela equação (88). Já o perfil na direção de filtração foi admitido como uniforme e equivalente ao fluxo de filtrado, q .

Na Figura 77 e na Figura 78 estão representadas as posições ocupadas pelas partículas em instantes iniciais e finais do processo ao longo de um segundo de simulação.

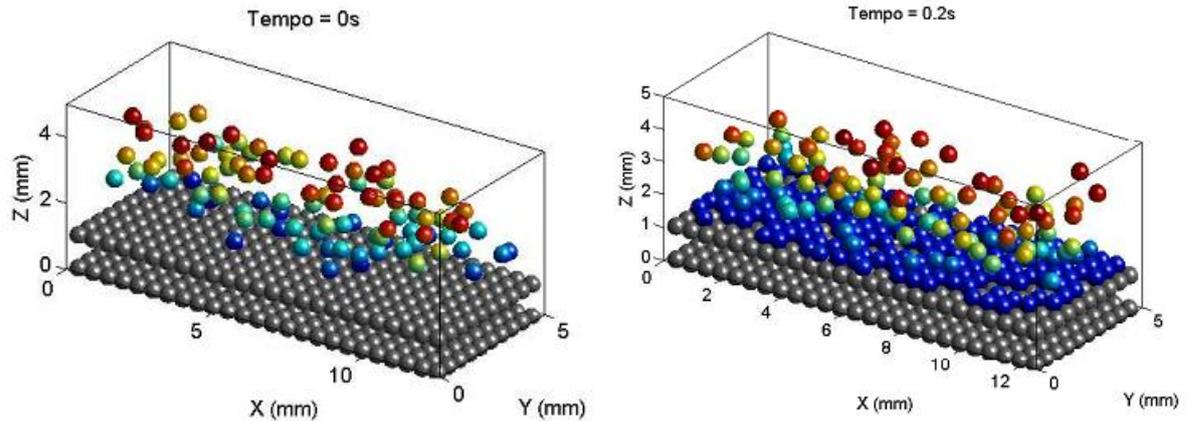


Figura 77. Instantes iniciais da filtração cruzada com 1000 partículas monodispersas.

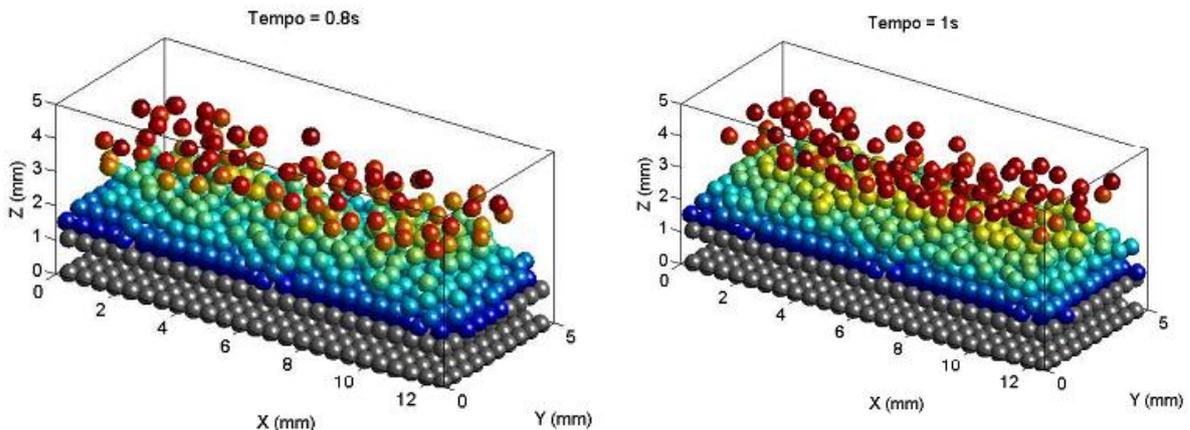


Figura 78. Instantes finais da filtração cruzada com 1000 partículas monodispersas.

Como pode ser observado, o meio filtrante (partículas em cinza) foi modelado através de uma camada de partículas fixas, com as mesmas propriedades físicas e o mesmo diâmetro das partículas livres ($500\mu\text{m}$).

Nota-se através da análise da Figura 77 que apesar da ação erosiva provocada pela componente adicional da força de arraste sobre a superfície da torta, as partículas começam a se depositar em aproximadamente 0,2s e, ao final do tempo de simulação, Figura 78, já formaram um leito estável, apesar da pouca espessura.

Na Figura 79 e na Figura 80 são apresentadas a evolução da espessura e da porosidade da torta como funções do tempo, respectivamente.

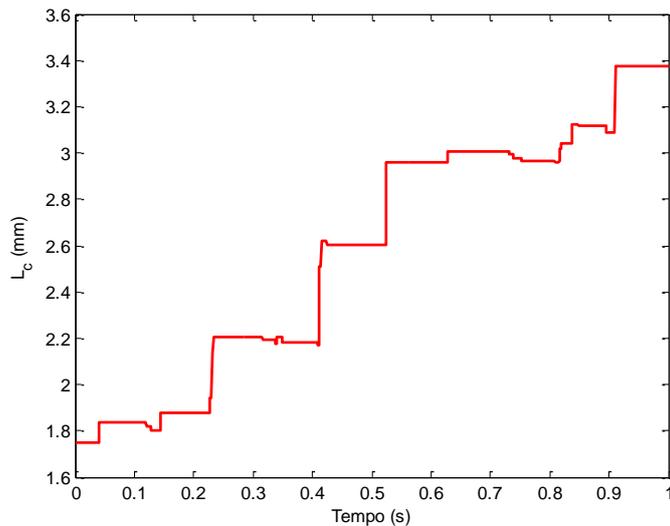


Figura 79. Evolução da espessura da torta formada durante 1s de filtração cruzada.

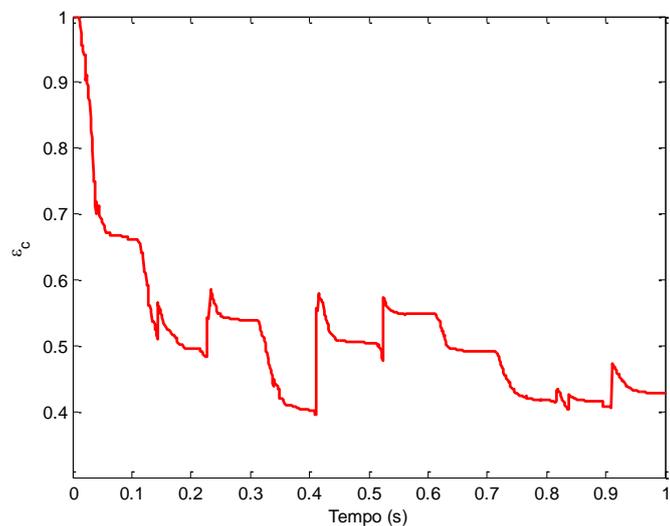


Figura 80. Evolução da porosidade da torta formada durante 1s de filtração cruzada.

Para estimar o comportamento da permeabilidade da torta e do fluxo de filtrado ao longo do tempo, foram utilizadas as equações de Kozeny-Carman e de Darcy, equações (93) e (94), respectivamente, da mesma forma como procedido na filtração plana. Os resultados obtidos foram resumidos nos gráficos da Figura 81 e da Figura 82, admitindo-se uma diferença de pressão na direção de filtração de 2kPa.

Verifica-se também na filtração cruzada que a permeabilidade prevista pela modelo de Kozeny-Carman sofre uma queda acentuada logo no começo da simulação, quando as primeiras partículas começam a se depositar sobre o meio filtrante e, em seguida, permanece estável no valor final de $1,175 \times 10^{-13} \text{ m}^2$.

Já o fluxo de filtrado só começar a cair após um tempo maior de filtração, na medida em que o leito de partículas atinge uma espessura razoável, de forma a manter a diferença de pressão constante ao longo da direção de filtração.

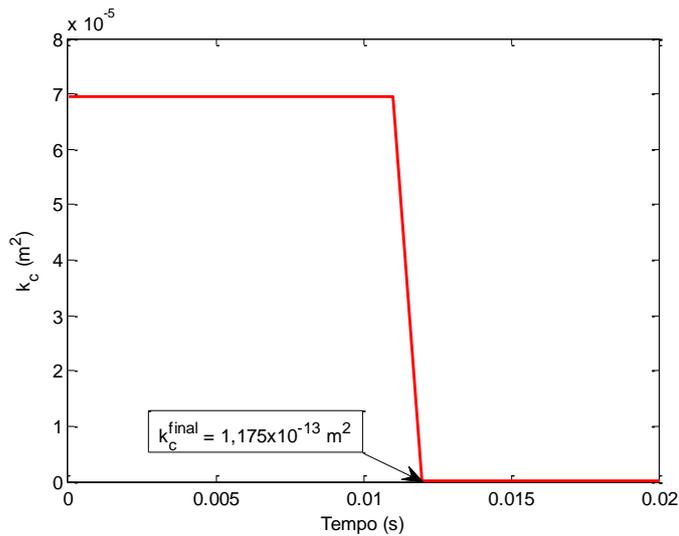


Figura 81. Evolução da permeabilidade da torta formada durante 1s de filtração cruzada.

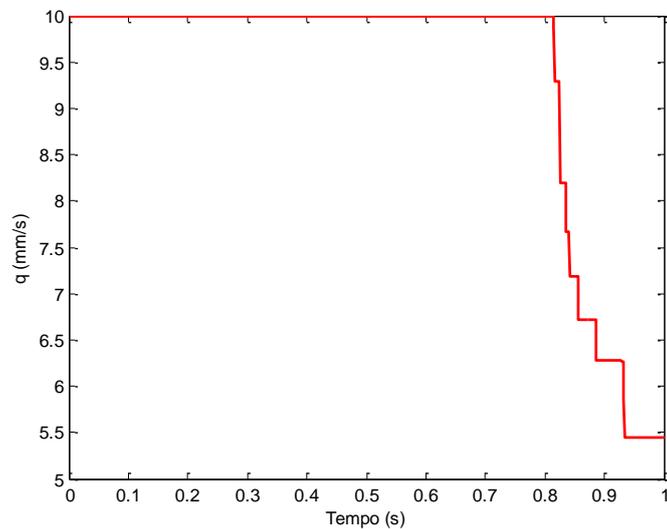


Figura 82. Evolução do fluxo de filtrado ao longo de 1s de filtração cruzada.

Objetivando analisar o comportamento do modelo de filtração cruzada 3D frente a variações nas condições operacionais do processo, foram realizadas mais simulações com valores diferentes de fluxo de filtrado inicial, q_0 , e de velocidade média axial, u_s . Os resultados obtidos são apresentados a seguir.

4.2.3.1 Efeito do fluxo de filtrado inicial

Mantendo-se o valor constante da velocidade média do fluxo cruzado, u_s , igual a 0,01m/s, foram simulados quatro valores diferentes de fluxo de filtrado inicial, q_0 : 0,0001m/s, 0,005m/s, 0,0075m/s e 0,01m/s. Os resultados obtidos em termos de espessura e porosidade de torta *versus* tempo se encontram dispostos na Figura 83 e na Figura 84, respectivamente.

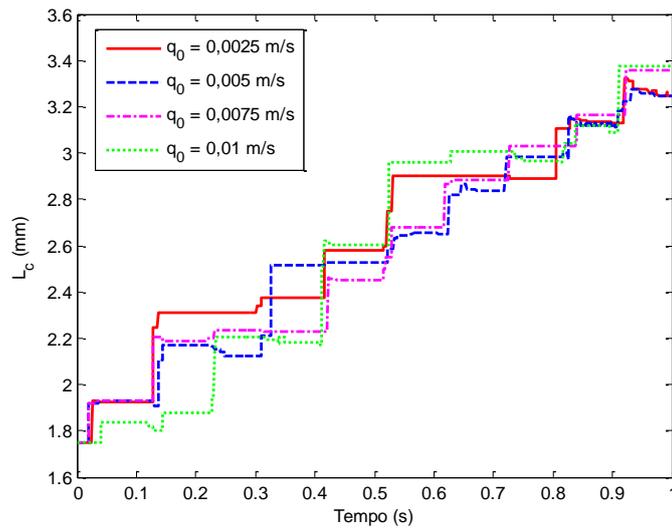


Figura 83. Efeito do fluxo de filtrado inicial na espessura da torta de filtração cruzada.

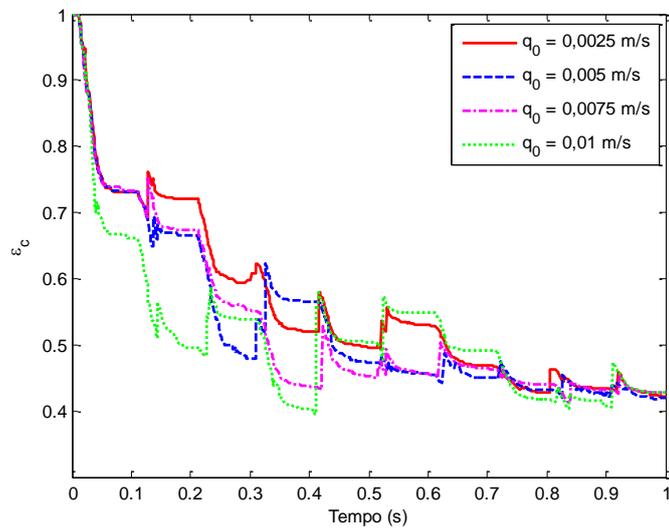


Figura 84. Efeito do fluxo de filtrado inicial na porosidade da torta de filtração cruzada.

Analisando-se esses gráficos é possível notar que, mesmo com a modificação do fluxo de filtrado inicial dentro da faixa de valores proposta, os valores finais obtidos para espessura e porosidade foram aproximadamente os mesmos. Isto é, em uma análise preliminar, observa-se que a estrutura final das tortas foi pouco afetada pelas variações propostas em q_0 .

A permeabilidade e o fluxo de filtrado também foram determinados e seus comportamentos ao longo do tempo se encontram resumidos nos gráficos da Figura 85 e da Figura 86, respectivamente.

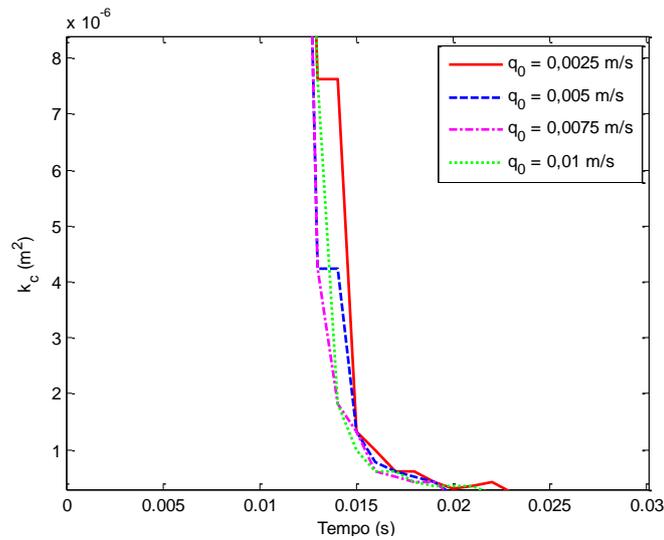


Figura 85. Efeito do fluxo de filtrado inicial na permeabilidade da torta de filtração.

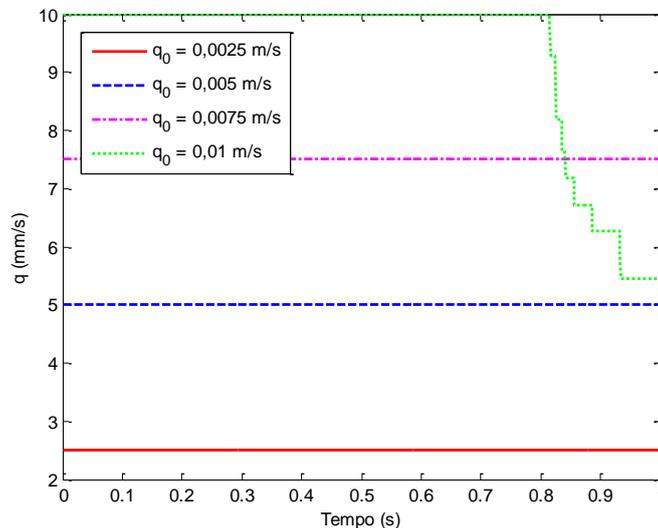


Figura 86. Efeito do fluxo de filtrado inicial sobre o fluxo de filtrado na filtração cruzada.

Apesar da pouca diferença observada nos valores finais de espessura e porosidade média da torta nesse primeiro momento de filtração, para operações com valores suficientemente altos de q_0 , o fluxo de filtrado começará a cair após algum tempo de simulação, na medida em que a torta de partículas for se formando sobre o meio poroso (vide Figura 86).

4.2.3.2 Efeito da velocidade média axial

A sensibilidade do modelo de filtração cruzada à velocidade média da distribuição de velocidades axial, u_s , foi analisada para valores dentro da faixa 10^{-4} - 10^{-1} m/s . Em todos os casos o fluxo de filtrado inicial foi mantido no valor constante de $0,01 \text{ m/s}$. Os gráficos de espessura *versus* tempo e porosidade *versus* tempo se encontram na Figura 87 e na Figura 88, respectivamente.

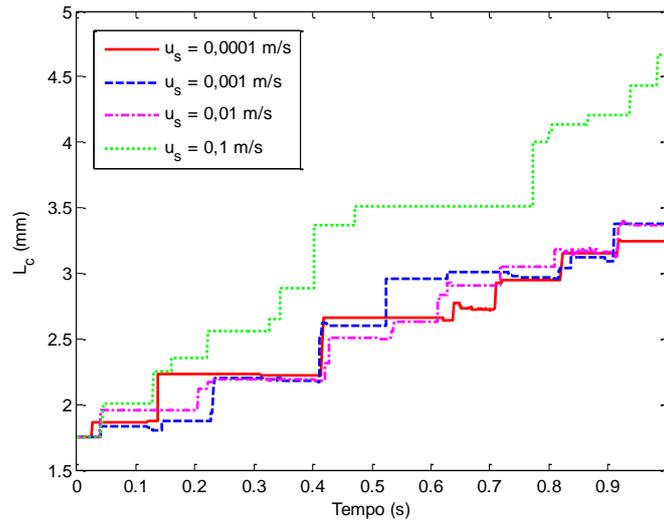


Figura 87. Efeito da velocidade axial média na espessura de torta na filtração cruzada.

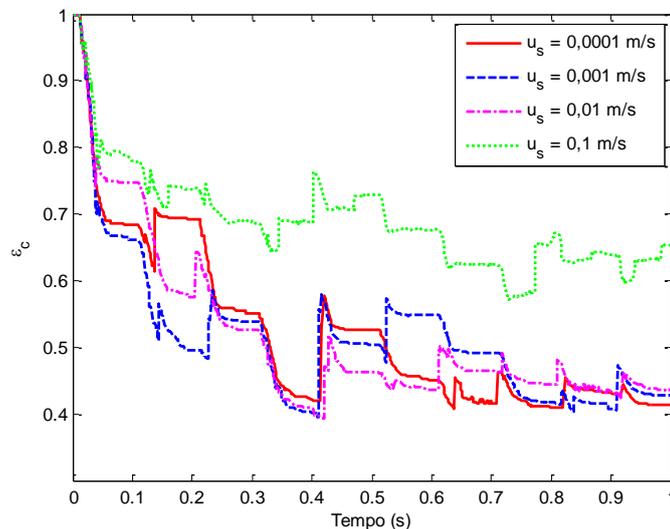


Figura 88. Efeito da velocidade média axial sobre a porosidade na filtração cruzada.

Verifica-se, analisando-se esses gráficos, que a velocidade média axial promoveu maiores modificações sobre o processo crescimento da torta de filtração em comparação ao fluxo de filtrado inicial. Quando a velocidade do fluido na direção x atinge um valor suficiente alto, como 0,1m/s, por exemplo, a ação erosiva provocada pela intensificação da força de arraste nessa mesma direção limita o crescimento da torta e aumenta a sua porosidade (vide Figura 88).

O reflexo desse efeito também pode ser observado nos gráficos de permeabilidade e fluxo de filtrado *versus* tempo, apresentados na Figura 89 e na Figura 90, respectivamente.

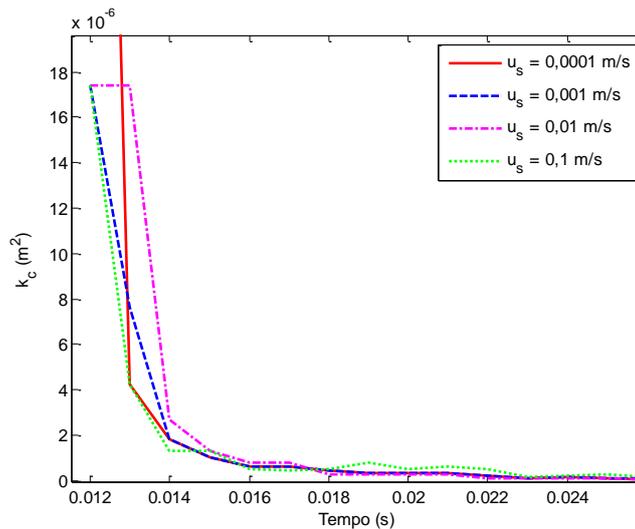


Figura 89. Efeito velocidade axial média na permeabilidade da torta de filtração.

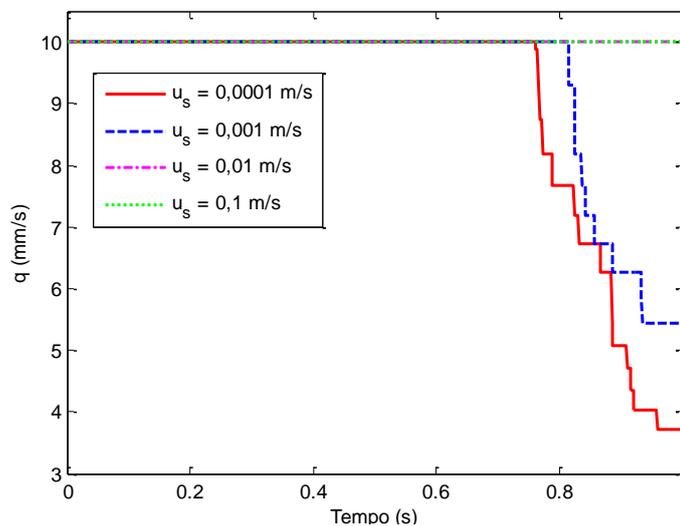


Figura 90. Efeito da velocidade axial média no fluxo de filtrado.

Conforme seria de se esperar, quanto menor o valor da velocidade média, u_s , menor o valor final do fluxo de filtrado e mais cedo ele começa a cair ao longo do processo de filtração. Isto acontece porque as partículas têm maior estabilidade para migrar e se acumular sobre a superfície do meio filtrante, formando, portanto, uma torta melhor consolidada. Estes resultados estão de acordo com dados obtidos no trabalho de Hwang & Wang (2001).

5 CONCLUSÕES

A metodologia de simulação discreta proposta neste trabalho foi empregada com êxito, através do desenvolvimento de um simulador computacional baseado no método de elementos discretos (DEM) e no algoritmo de Gear, sendo possível estudar e descrever a formação e o crescimento de um leito de partículas durante os processos de sedimentação e filtração sob um ponto de vista discreto.

Partindo-se das informações microdinâmicas geradas pelo programa, também foi possível quantificar diretamente propriedades como espessura, porosidade, permeabilidade de torta, fluxo de filtrado e queda de pressão ao longo do tempo, as quais apresentaram comportamento qualitativamente compatível com resultados anteriormente reportados na literatura (HWANG & WANG, 2001; DONG *et al.*, 2003; 2006; 2009).

Os dados de concentração de sólidos obtidos na simulação da sedimentação 3D, para diferentes valores de massa específica do líquido base, foram comparados aos valores encontrados por Dong *et al.* (2006) em condições de simulação similares e apresentaram uma concordância satisfatória, com desvios menores que 12% para todos os pontos avaliados.

Além disso, foram realizados diversos estudos de sensibilidade alterando-se os valores de propriedades do fluido e dos sólidos, tais como viscosidade, massa específica e constante de Hamaker, e de parâmetros operacionais da filtração, como fluxo de filtrado inicial e queda de pressão máxima. Tanto nos casos bidimensionais como nos tridimensionais, as repostas do modelo a essas variações apresentaram-se qualitativamente de acordo com dados reportados na literatura, permitindo a verificação preliminar do funcionamento do simulador desenvolvido neste trabalho (NI *et al.*, 2006; DONG *et al.*, 2003; 2009).

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestões para realização de trabalhos futuros, os seguintes itens podem ser elencados:

- Realizar a análise estatística dos resultados obtidos nos estudos de caso do Capítulo 4, de modo a respaldar de forma mais concreta as hipóteses e conclusões preliminares, levantadas anteriormente;
- Realizar a validação do modelo proposto utilizando dados experimentais;
- Realizar a paralelização dos códigos desenvolvidos neste trabalho para que simulações com maior número de partículas possam ser realizadas com tempos de computação factíveis.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABREU, C.R.A.; TAVARES, F.W.; CASTIER, M. Influence of particle shape on the packing and on the segregation of spherocylinders via Monte Carlo simulations. *Powder Technology*, vol.134, pp. 167-180, 2003.
- ALLEN, M.P., TILDESLEY, D.J. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- ARAÚJO, C.A.O. Estudo da Filtração Cruzada em Geometria Cilíndrica. Dissertação de Mestrado, PPGEQ/UFRRJ, Seropédica, Brasil, 2010.
- AROUCA, F.O. Uma Contribuição ao Estudo da Sedimentação Gravitacional em Batelada. Tese de Doutorado, FEQUI/UFU, Uberlândia, Brasil, 2007.
- BELL, N.; YU, Y.; MUCHA, P.J. Particle-Based Simulation of Granular Materials. *Eurographics/ACM SIGGRAPH Symposium on Computer Animation*, 2005.
- BIRD, R.B.; STEWART, W.E.; LIGHTFOOT, E.N. *Fenômenos de Transporte*. 2ª Edição. LTC, 2004.
- BRILLIANTOV, N.V.; POSCHEL, T. Rolling friction of a viscous sphere on a hard plane. *Europhysics Letters*, vol. 42, pp. 511-516, 1998.
- CALABREZ, N.D. Filtração e Invasão de Fluidos de Perfuração: Estudo Comparativo, Caracterização da Torta e Modelagem. Dissertação de Mestrado, PPGEQ/UFRRJ, Seropédica, Brasil, 2013.
- CLEARY, P.W.; SAWLEY, M.L. DEM modeling of industrial granular flows: 3D case studies and the effects of particle shape on hopper discharge. *Applied Mathematical Modeling*, vol. 26, pp. 89-111, 2002.
- COE, H.S.; CLEVINGER, G.H. Methods of Determining the Capacities of Slime-Settling Tanks. *Am. Inst. Engrs.*, vol. 55, pp. 356-384, 1916.
- COULSON, J.M.; RICHARDSON, J.F. *Chemical Engineering: Particle Technology and Separation Processes*. 5th Edition. Oxford: Butterworth Heinemann, 2002. Vol. 2.
- CREMASCO, M.A. *Operações Unitárias em Sistemas Particulados e Fluidomecânicos*. 2ª Edição. Blucher, 2012.
- CROWE, C.T.; SCHSCHWARZKOPF, J.D.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 2nd Edition. CRC Press, 2012.
- CUNDALL, P.A.; STRACK, O.D.L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, vol. 29, pp. 47-65, 1979.
- DAMASCENO, J.J.R. Uma Contribuição ao Estudo do Espessamento Contínuo. Tese de Doutorado, COPPE/UFRRJ, Rio de Janeiro, Brasil, 1992.

- DAMASCENO, J.J.R.; MASSARANI, G. Cálculo da Capacidade de Sedimentadores Através da Determinação da Permeabilidade do Sedimento. Anais do XXI Encontro sobre Escoamentos em Meios Porosos, pp. 233-242, Ouro Preto, Brasil, 1993.
- DEWAN, J.T.; CHENEVERT, M.E. A Model for filtration of water-base mud during drilling: determination of mud cake parameters. *Petrophysics*, vol. 42, pp. 237-250, 2001.
- DI FELICE, R. The voidage function for fluid-particle interaction systems. *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 20, pp. 153-159, 1994.
- DI RENZO, A.; DI MAIO, F.P. Comparison of the contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes. *Chemical Engineering Science*, vol. 59, pp. 525-541, 2004.
- DONG, K.J.; ZOU, R.P.; YANG, R.Y.; YU, A.B.; ROACH, G. Simulation of cake formation and growth in sedimentation and filtration. 3rd International Conference on CFD in Minerals and Process Industries, Melbourne, Australia, 2003.
- DONG, K.J.; YANG, R.Y.; ZOU, R.P.; YU, A.B. Role of Interparticle Forces in the Formation of Random Loose Packing. *Physical Review Letters* 96, 145505, 2006.
- DONG, K.J.; ZOU, R.P.; YANG, R.Y.; YU, A.B.; ROACH, G. DEM simulation of cake formation in sedimentation and filtration. *Minerals Engineering*, vol. 22, pp. 921-930, 2009.
- FERRAZ, A.S.F.S. Efeito da Distribuição Granulométrica de partículas sólidas e de polímeros aniônicos na formação da torta de filtração e no volume de filtrado. Dissertação de Mestrado, PPGEQ/UFRRJ, Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil, 2014.
- FERREIRA, A.S.; MASSARANI, G. Physical-mathematical modeling of cross flow filtration. *Chemical Engineering Journal*, vol. 111, pp. 199-204, 2005.
- FOX, R.W.; PRITCHARD, P.J.; McDONALD, A.T. Introdução à Mecânica dos Fluidos. 7^a Edição. LTC, 2010.
- HAMAKER, H.C. The London-van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, vol. 4, pp. 1058-1072, 1937.
- HWANG, K.J.; WANG, Y.S. Numerical Simulation of Particle Deposition in Cross-Flow Microfiltration of Binary Particles. *Tamkang Journal of Science and Engineering*, vol. 4, pp. 119-125, 2001.
- IWASHITA, K.; ODA, M. Rolling Resistance at Contacts in Simulation of Shear Band Development by DEM. *Journal of Engineering Mechanics – ASCE*, vol. 124, pp. 285-292, 1998.

- ISRAELACHVILI, J.N. Intermolecular and Surface Forces. Academic Press, 1991.
- JIAO, D.; SHARMA, M.M. Mechanism of cake buildup in cross flow filtration of colloidal suspensions. *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 162, pp. 454-462, 1993.
- JIN, G.; PATZEK, T.W. Physics-base Reconstruction of Sedimentary Rocks. SPE International Symposium on Oilfield Chemistry, SPE 83587, Long Beach, EUA, 2003.
- KYNCH, G.J. A Theory of Sedimentation. *Trans Faraday Society*, vol. 48, pp. 166-177, London, 1952.
- LANGSTON, P.A.; TÜZÜN, U.; HEYES, D.M. Discrete Element Simulation of Granular Flow in 2D and 3D Hoppers: Dependence of Discharge Rate and Wall Stress on Particle Interactions. *Chemical Engineering Science*, vol. 50, pp. 967-987, 1994.
- LI, J.; KUIPERS, J.A.M. Effect of pressure on gas-solid flow behavior in dense gas-fluidized beds, a discrete particle simulation study. *Powder Technology*, vol. 127, pp. 173-184, 2002.
- LIU, X.; CIVAN, F. A Multiphase Mud Fluid Infiltration and Filter Cake Formation Model. SPE International Symposium on Oilfield Chemistry, SPE 25215, Nova Orleans, EUA, 1993.
- LU, W.M.; HWANG, K.J. Cake formation in 2D cross-flow filtration. *AIChE Journal*, vol. 41, pp. 1443-1455, 1993.
- LUDING, S.; LATZEL, M.; VOLK, W.; DIEBELS, S. HERRMANN, H.J. From discrete element simulations to a continuum model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 191, pp. 21-28, 2001.
- MASSARANI, G. Fluidodinâmica em Sistemas Particulados. 2ª Edição. Rio de Janeiro: E-papers, 2002.
- MCCABE, W.L.; SMITH, J.C.; HARRIOT, P. Unit Operations of Chemical Engineering. 5th Edition. McGraw-Hill, 1993.
- MARSHALL, J.S.; LI, S. Adhesive Particle Flow: A Discrete-Element Approach. Cambridge University Press, 2014.
- MATUTTIS, H.G.; CHEN, J. Understanding the Discrete Element Method: Simulation of Non-Spherical Particles for Granular and Multi-Body Systems. John Wiley & Sons, 2014.
- MINDLIN, R.D.; DERESIEWICZ, H. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. *Journal of Applied Mechanics*, vol. 20, pp. 327-344, 1953.

- MUNJIZA, A.; ANDREWS, K.R.F. NBS Contact Detection Algorithm for Bodies of Similar Size. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol 43, pp. 131-149, 1998.
- MUNJIZA, A. *The Combined Finite-Discrete Element Method*. John Wiley & Sons, 2004.
- NI, L.A.; YU, A.B.; LU, G.Q.; HOWES, T. Simulation of the cake formation and growth in cake filtration. *Minerals Engineering*, vol. 19, pp. 1084-1097, 2006.
- ODA, M.; IWASHITA, K. *Mechanics of Granular Materials*. Balkema, 1999.
- O'SULLIVAN, C. *Particulate Discrete Element Modeling*. Spoon Press, 2011. Vol. 4.
- PERRY, R.H.; GREEN, D.W.; MALONEY, J.O. *Perry's Chemical Engineer's Handbook*. 7th Edition. Mc Graw-Hill, 1999.
- PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms*. Springer-Verlag, 2005.
- RUMPF, H. *The Strength of Granules and Agglomerates*. Wiley Interscience, 1962.
- SVAROVSKY, L. *Solid-Liquid Separation*. Butterworth Heinemann, 2000.
- TIEN, C.; BAI, R.; RAMARAO, B.V. Analysis of cake growth in cake filtration: effect of fine particle retention. *AIChE Journal*, vol. 43, pp. 33-44, 1997.
- TILLER, F.M.; CHEN, W. Limiting Operating Conditions for Continuous Thickeners. *Chemical Engineering Science*, vol. 43, pp.1695-1704, 1988.
- TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. *Powder Technology*, vol. 71, pp. 239-250, 1992.
- TILLER, F.M.; COOPER, H. The Role of Porosity in Filtration: Part IV – Constant Pressure Filtration. *AIChE Journal*, vol. 8, pp. 445-449, 1960.
- WAKEMAN, R.J. A Numerical Integration of the Differential Equations Describing the Formation of the Flow in Compressible Filter Cakes. *Trans IChemE*, vol. 56, pp. 258-265, 1978.
- XIAO, L.; PIATTI, C.; GIACCA, D. Studies on the Damage Induced by Drilling Fluids in Limestone Cores. *SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*, SPE 50711, Houston, EUA, 1999.
- XU, B.H.; YU, A.B. Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining the discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, vol. 52, pp. 2785-2809, 1997.
- XU, B.H.; YU, A.B.; CHEW, S.J.; ZULLI, P. Numerical Simulation of the gas-solid flow in a bed with lateral gas blasting. *Powder Technology*, vol. 109, pp. 13-26, 2003.

- YANG, R.Y.; ZOU, R.P.; YU, A.B. Computer simulation of the packing of fine particles. *Physical Review E* 62 (3), 3900-3908, 2000.
- ZHANG, Z.P.; LIU, L.F.; YUAN, Y.D.; YU, A.B. A simulation study of the effects of dynamic variables on the packing of spheres. *Powder Technology*, vol. 116, pp. 23-32, 2001.
- ZHU, H.P.; WU, Y.H.; YU, A.B. Discrete and Continuum Modeling of Granular Flow. *China Particuology*, vol. 6, pp. 354-363, 2005.
- ZHU, H.P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y.; YU, A.B. Discrete Particle Simulation of Particulate Systems: Theoretical Developments. *Chemical Engineering Science*, vol. 62, pp. 3378-3396, 2007.
- ZHU, H.P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y.; YU, A.B. Discrete Particle Simulation of Particulate Systems: A review of major applications and findings. *Chemical Engineering Science*, vol. 63, pp. 5728-5770, 2008.