

3

MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS E O PROGRAMA PFC

3.1

Introdução

Na engenharia, os modelos matemáticos constituem-se em ferramentas utilizadas para descrever e prever o comportamento de fenômenos físicos regidos pelas leis da natureza. Devido às complexidades envolvidas, na maioria dos casos, não é possível a obtenção de soluções exatas sendo necessário o uso de técnicas de aproximação. Os métodos numéricos são atualmente bastante utilizados pelas comunidades acadêmicas e de engenharia para a solução de problemas cada vez mais complexos, devido, em parte, à maior disponibilidade de *softwares* específicos, e de outra, à grande disponibilidade de equipamentos computacionais cada vez mais poderosos e de baixo custo de aquisição e manutenção.

Existe uma variedade de técnicas disponíveis na literatura para o cálculo de soluções aproximadas. O Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método dos Elementos de Contorno (MEC) estão atualmente em um estágio de desenvolvimento bastante avançado, podendo ser considerados métodos tradicionais para solução de problemas de valor de contorno.

O Método dos Elementos Discretos (MED) encontra-se em um estágio de desenvolvimento um pouco anterior. A sua formulação está ainda em franco desenvolvimento. Mantém-se as características básicas, inicialmente propostas por Cundall e Strack (1979) mas novidades nas formulações são freqüentemente apresentadas e publicadas em periódicos e congressos da área.

Para o uso eficiente de uma ferramenta numérica como o MED é preciso, no entanto, identificar para quais tipos de problemas o seu uso é mais recomendado. O método é mais adequado para lidar com problemas de natureza descontínua e ao mesmo tempo com grandes níveis de deformação. Devido a essas características o MED tem sido utilizado em problemas de diversas áreas como em aplicações industriais de grande escala (Cleary, 2004). Mais especificamente na engenharia

geotécnica, suas funcionalidades têm sido utilizadas em problemas de mecânica das rochas (Cundall, 1971; Tannant e Wang, 2004). No campo da mecânica dos solos, o seu uso é bastante variado, como por exemplo, na localização de gradientes de deformação em meios granulares (Kuhn, 2005), comportamento de argilas (Yao; Anandarajah, 2003), interação fluido-partículas (Preece et al., 1999; Cook et al., 2004), etc.

No caso específico do refluxo de materiais de sustentação de fraturas hidráulicas, a literatura registra as seguintes contribuições:

Canon (2003) utilizou um programa computacional com base em elementos discretos para estudar a influência da largura relativa da fratura e observar a distribuição da tensão de fechamento da fratura sobre os grãos do material de sustentação. O modelo utilizado foi 2D sem consideração de fluxo no interior da fratura.

Em todos os casos analisados a tensão de fechamento foi fixada em 2000 psia e foi utilizado um propante comum (malha 20/40). Considerando que os grãos não são perfeitamente esféricos como assumido no MED, uma variação de granulometria foi considerada com diâmetros normalizados (em relação ao diâmetro médio) variando de 0,75 a 1,25, média 1 e desvio padrão 0,6. A largura relativa da fratura foi variada entre 3 a 20.

A Figura 3.1 mostra a representação hipotética de fraturas com diferentes razões largura/diâmetro, onde as linhas sólidas representam as forças de contato entre os grãos. As espessuras das linhas são proporcionais à magnitude destas forças. As cores dos grãos representam a tensão compressiva média atuante, com as tonalidades mais escuras representando partículas sob maiores níveis de tensão.

A Figura 3.2 apresenta a distribuição da força de contato média normalizada (em relação à tensão de fechamento) com a largura normalizada da fratura, enquanto que a Figura 3.3 se refere à distribuição das forças de contato máximas normalizadas entre grãos de propante.

Da análise das Figuras 3.2 e 3.3, Canon (2003) observou que as forças de contato média ou máximas são muito maiores para fraturas com largura relativa (W_r) variando de 3 a 6, decaindo rapidamente à medida que W_r aumenta. Para as fraturas mais largas ($7 < W_r < 20$) as forças de contato tendem a estabilizar e tornarem-se independentes da largura da fratura.

Observa-se da Figura 3.1 (topo) que para a fratura mais estreita ($W_r = 3$) a distribuição das tensões de compressão nos grãos é bastante heterogênea, com os maiores valores concentrados em poucos grãos. A maioria deles (tonalidade mais clara) é pouco afetada pela tensão de fechamento, explicando porque para fraturas estreitas as forças de contato médias e máximas são muito altas. À medida que a fratura torna-se mais larga, as tensões no pacote granular tendem a ser mais homogeneamente distribuídas, ao longo de certas trajetórias marcadas com linhas mais escuras.

De maneira geral, parece haver um ponto entre $5 < W_r < 7$ onde a distribuição de tensões compressivas nos grãos muda de uma distribuição heterogênea para uma mais uniforme, indicando que em fraturas estreitas há formação de poucas trajetórias de tensão que são mais difíceis de serem desestabilizados. Ainda que haja um grande número de grãos sob valores relativamente baixos de tensão, a resistência do sistema é mantida por algumas, mas muito fortes, trajetórias de tensão (arcos).

Por contraste, para fraturas largas há muitas trajetórias de tensão que suportam uma pequena fração do carregamento (tensão de fechamento da fratura). Logo, os contatos ao longo de arcos menos comprimidos são mais suscetíveis ao movimento de partículas, criando um pacote granular numa situação instável.

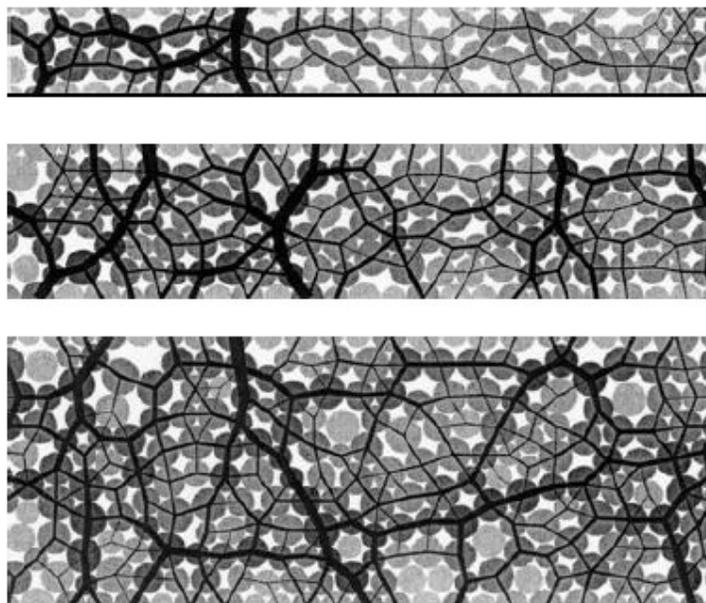


Figura 3.1 - Resultados gráficos de simulações do DEM para três larguras de fratura (Canon, 2003).

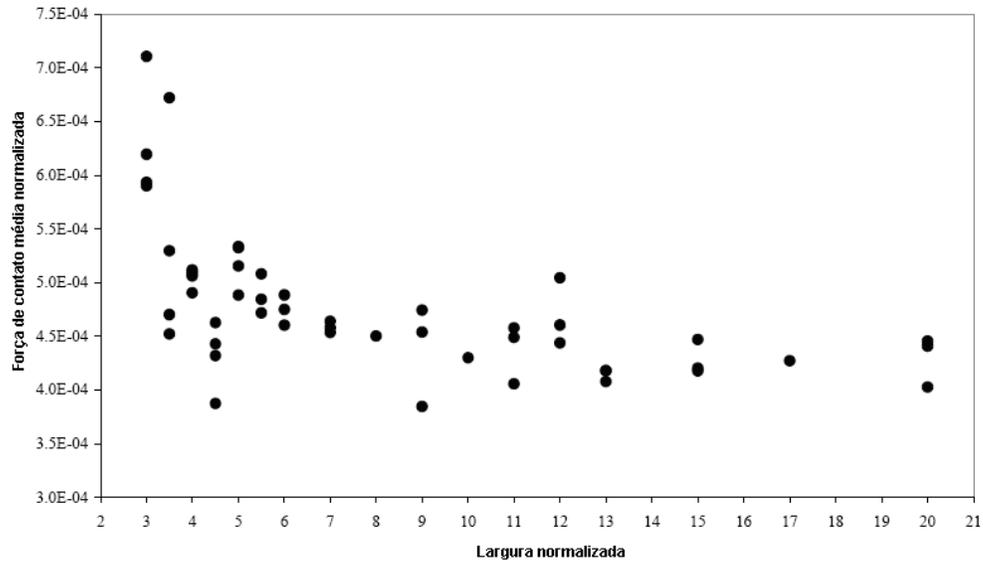


Figura 3.2 – Variação da força de contato normalizada média com a largura normalizada da fratura.

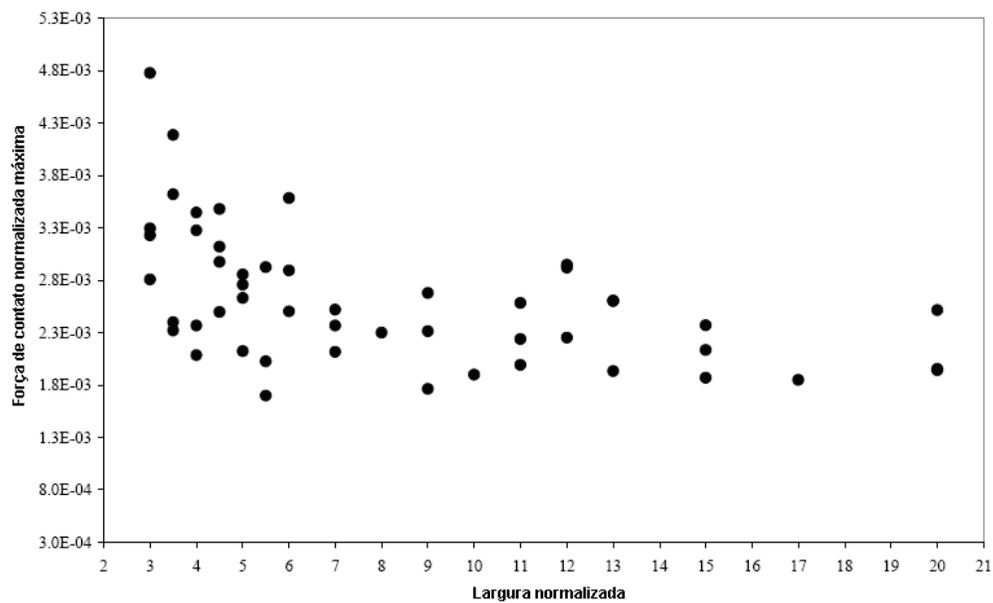


Figura 3.3 – Variação da força de contato normalizada máxima com a largura normalizada da fratura.

Asgian et al (1995) aplicaram o método dos elementos discretos (programa TRUBAL) ao problema de refluxo de propante, considerando uma interação mecânica elástica entre partículas esféricas e um comportamento puramente friccional, adotando os seguintes parâmetros ($E_p = 3,5 \times 10^6$ psi, $\nu = 0,2$, $\phi = 35^\circ$ e coesão $c = 0$).

A partir de uma série de ensaios preliminares para estimar a influência de vários parâmetros nos resultados calculados, os autores concluíram que o comprimento normalizado do modelo igual a $L/d_p = 50$ como satisfatório para representar o comportamento de toda a fratura.

Oito simulações numéricas foram realizadas, considerando os parâmetros da tabela 3.1. Uma comparação dos resultados aponta que fraturas mais largas do que 5,5 diâmetros de partícula são instáveis (o que confirma observações experimentais de laboratório) sob tensão de fechamento de 940 psi e 2150 psi. Considerando os casos 3a a 3c, observa-se que um gradiente de pressão de 75 psi/ft é suficiente para tornar o pacote granular instável sob tensão de fechamento de 940 psi. Para o caso 3c a força de contato médio entre grãos é 0,478 lbf enquanto que a força de arraste é igual a $7,9 \times 10^{-5}$ lbf (0,016% da força radial de contato médio entre grãos). A figura 3.4 mostra que um arco geometricamente irregular é formado atrás da face do pacote granular, como resultado da tensão de fechamento ($t = 0$). As partículas em frente ao arco colapsaram e virtualmente não suportam carregamento. Quando a produção de óleo inicia ($t > 0$) as partículas em frente ao arco são então transportadas para o poço. Para gradiente de pressão 75 psi/ft o efeito da força de arraste é ainda pequeno, e a fratura mantém-se estável.

Todavia, resultados de campo mostram que fraturas são ainda estáveis para larguras normalizadas acima de 5,5, valor crítico indicado pelos resultados numéricos e ensaios de laboratório. Uma possível explicação, segundo Asgian et al (1995), é que o refluxo ocorra apenas em uma fração do comprimento e que a fratura possa permanecer aberta pela sustentação de uma única camada de grãos, largamente espaçados entre si, nas proximidades do poço. Como a condutividade da fratura seria ainda bastante alta, mesmo para uma largura equivalente a um grão de propante, a produtividade do poço não seria significativamente afetada. Outra explicação é que a aderência entre grãos poderia ser maior em campo pela utilização de tratamento (gel) ou pela ação de forças capilares.

Outra diferença de comportamento é que os resultados numéricos prevêm um colapso súbito e catastrófico, enquanto que em campo ocorre ao longo de um período que pode durar vários meses. A diferença pode ser devido a fatores não considerados na análise numérica como resíduos de gel (tratamento de propantes) que degradam com o tempo.

Resultados numéricos mostram que gradientes de pressão inferiores a 75 psi/ft não são grandes o suficiente para afetar a estabilidade do pacote granular (propante 20 /40) mas são grandes o suficiente para transportar partículas soltas, em frente ao arco de compressão. No campo, gradientes de pressão operacionais estão tipicamente no intervalo 10 a 30 psi/ft, portanto bastante abaixo do valor crítico de 75 psi/ft estabelecido na análise numérica. É possível que flutuações transitórias do gradiente de pressão acima deste limite crítico aconteçam, explicando então o refluxo do material de sustentação de fraturas hidráulicas em campo e porque o fenômeno é gradual e não instantâneo.

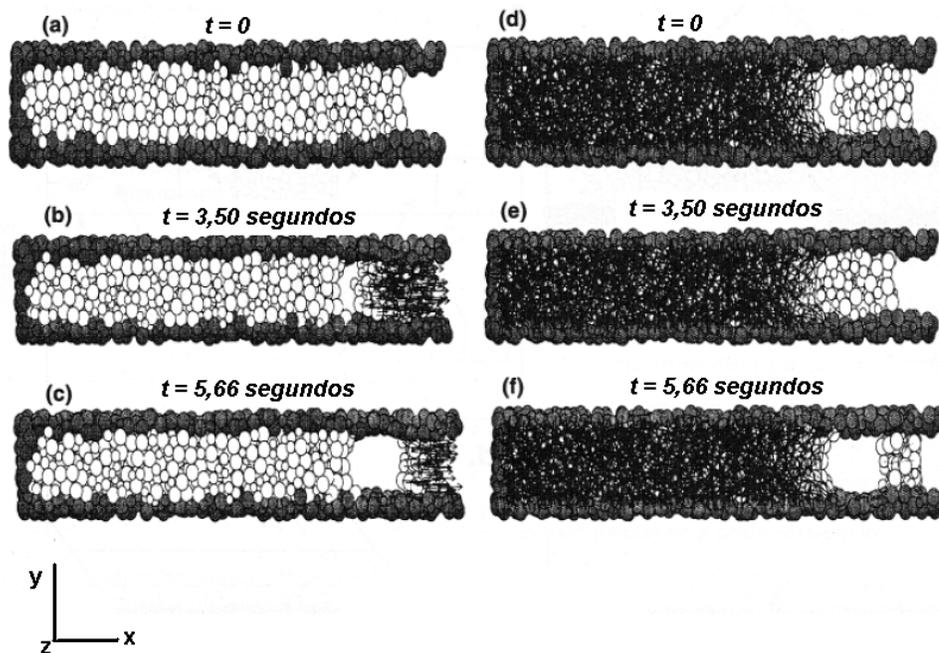


Figura 3.4 Comportamento do material de sustentação para o caso 3c. À esquerda, velocidades dos grãos; à direita, forças compressivas de contato, com a tonalidade clara representando grãos sem carregamento - (Asgian et al, 1995).

Tabela 3.1 – Características das simulações numéricas de Asgian et al (1995)

CASO	Numero de grãos de propantes modelados *	Largura Normalizada wf/dp	Diâmetro de grão médio dp (in)	Ef/Ep (psi/psi)	Tensão de Fechamento Neta (psi)	Gradiente de Pressão (psi/ft)	Estabilidade
1	2.647	7,5	0,023	0,6	940	-	instável
2	2.268	6,5	0,023	0,6	940	-	instável
3	1.826	5,5	0,023	0,6	940	-	estável
3a	1.826	5,5	0,023	0,6	940	150	instável
3b	1.826	5,5	0,023	0,6	940	100	instável
3c	1.826	5,5	0,023	0,6	940	75	estável
4	2.762	5,6	0,028	0,6	2150	-	instável
5	2.761	5,6	0,028	1	2150	-	instável

* O número de grãos de propante que representa a fratura está na faixa entre 917 a 948.

3.2

Método dos elementos discretos

No Método dos Elementos Discretos, identifica-se um ciclo de cálculo básico, apresentado na Figura 3.5, onde são executadas as principais etapas do método. Para o desenvolvimento de sua formulação e de sua implementação é interessante abordar e desenvolver cada etapa de cálculo individualmente, o que será feito a seguir:

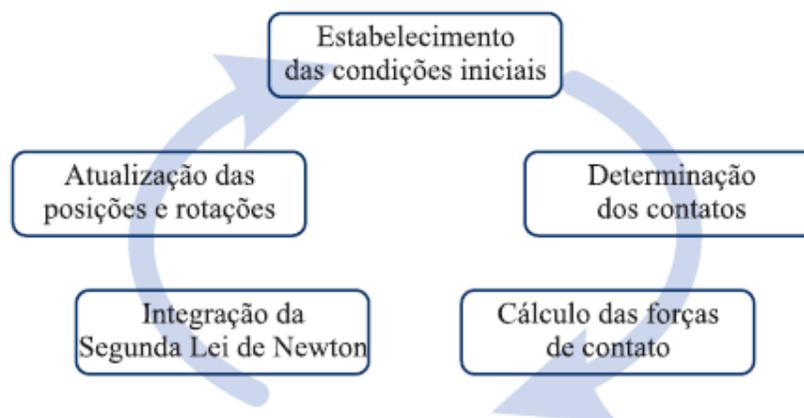


Figura.3.5 - Etapas básicas do ciclo de cálculo do Método dos Elementos Discretos

3.2.1 Equação do movimento

Para uma análise baseada no Método do Elementos Discretos, estabelece-se um sistema de coordenadas global, fixo (inercial) e um sistema de coordenadas local, associado a cada partícula e que acompanha os seus deslocamentos e rotações (Figura 3.6).

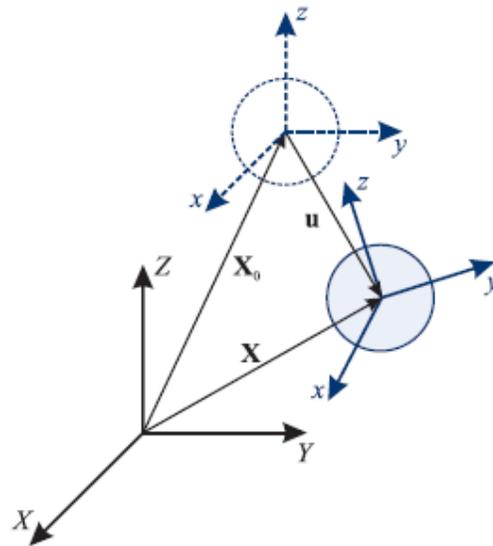


Figura 3.6 - Representação do sistema de coordenadas global e local.

As respostas são dadas em termos das grandezas cinemáticas do centróide de cada partícula, que apresenta um histórico de deslocamentos, velocidades e acelerações. Na Figura 3.6, \mathbf{u} é o vetor deslocamento para uma dada partícula em um tempo t qualquer, sendo obtido a partir dos vetores posição X_0 e X , respectivamente, inicial e final para um dado intervalo de tempo.

Os termos inerciais são definidos pela massa e pelos momentos de inércia de cada partícula. No caso de partículas esféricas, e considerando que o sistema de coordenadas local de cada partícula é coincidente com os eixos principais de inércia, os três momentos principais de inércia são iguais.

O movimento translacional e rotacional das partículas é governado pela equação de movimento para corpos rígidos, expressa de acordo com a Segunda Lei de Newton para rotação e translação como apresentado na equação 3.1 para a partícula i .

$$m^i \ddot{u}^i = f^i \quad (3.1)$$

onde o vetor \mathbf{f}^i representa as forças (F_x , F_y e F_z) e momentos (T_x , T_y e T_z) resultantes no centróide da partícula. Esse vetor é o somatório de todas as ações atuantes na partícula i , como expresso na equação 3.2

$$f^i = f_{ext} - f_{int} - f_{dam} \quad (3.2)$$

Onde f_{ext} representa as forças e momentos aplicados devido a cargas externas, f_{int} representa as forças e momentos resultantes das interações com outras partículas ou obstáculos e f_{dam} representa a parcela originária das forças de amortecimento do sistema, ou amortecimento global.

As forças externas são geralmente aplicadas diretamente ao centróide de cada partícula. Os valores dessas forças podem ser variáveis com o tempo ou, como no caso da força peso, serem permanentes. As outras parcelas da resultante de forças e momentos, forças internas (de interação ou de contato) e de amortecimento, possuem particularidades em seus cálculos que são abordadas nos itens seguintes.

3.2.2. Forças de contato

Essa parcela de força é originária da interação durante a análise entre as partículas e os obstáculos. A intensidade e direção dessa força é definida por relações força-deslocamento e pelas relações de interação geométrica entre as partículas. Muitos autores têm se dedicado ao cálculo das relações de interação no

contato entre partículas de formas variáveis onde é necessário definir, entre outros elementos, planos, zonas, pontos de contato. Alguns trabalhos relacionados a esse tema são os artigos de Cundall (1988), Williams e O'Connor (1995), Williams e O'Connor (1999) e outros mais recentes como Zhao et al. (2006).

Considerando-se um contato em particular, formulam-se as relações força-deslocamento separadamente para as componentes normal e tangencial ao plano de contato (Figura 3.7a), facilitando seu cálculo. Nesta pesquisa as partículas serão consideradas esféricas ou circulares. Define-se o plano de contato como sendo o plano tangente às duas partículas no ponto de contato. Na Figura 3.7b apresentam-se as variáveis que são utilizadas para definir a interação entre as duas partículas em um determinado ponto de contato. Nessa figura rc^i e rc^j representam os vetores que unem o centro de cada partícula (C^i e C^j) ao ponto de contato C e n é o vetor normal ao plano de contato π .

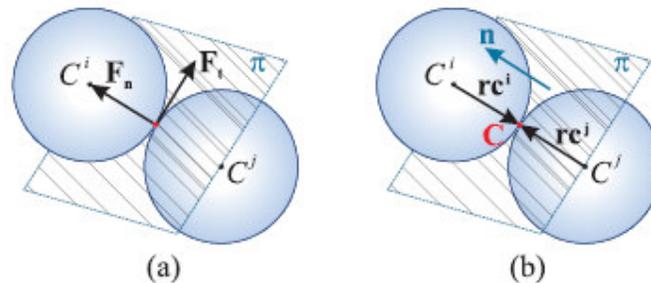


Figura 3.7 – Variáveis que definem um contato

As relações força-deslocamento são definidas em função das componentes normais e tangenciais dos deslocamento e das velocidades relativas.

A componente normal do deslocamento relativo (u_m) é dada pela penetração da superfície de uma partícula sobre a outra

$$u_m = R^i + R^j - D_{C^i C^j} \quad (3.3)$$

onde $D_{C^i C^j}$ é a distância entre os centros dos círculos (esferas), R^i é o raio da partícula i e R^j o raio da partícula j .

A componente normal da velocidade relativa normal (v_m) é obtida projetando-se a velocidade relativa (v_r) na direção do vetor normal (n). A equação 3.4 apresenta o cálculo da velocidade relativa e a equação 3.5 o cálculo da velocidade relativa normal.

$$v_r = v^i - v^j \quad (3.4)$$

$$v_m = (v_r \cdot n)n \quad (3.5)$$

onde v^i e v^j correspondem aos vetores das velocidades translacionais das partículas i e j .

Para o cálculo das componentes tangenciais dos vetores o deslocamento relativo e da velocidade relativa, será necessária a inclusão da influência da parcela rotacional nos vetores de deslocamento e de velocidade translacionais de cada partícula i (u^i e v^i respectivamente).

Denomina-se u_{θ}^i a parcela do vetor deslocamento translacional devida à rotação θ^i e v_{θ}^i é a parcela do vetor de velocidade translacional devida à velocidade rotacional ω^i da partícula i .

Desta forma tem-se que:

$$u_{\theta}^i = u^i + u_{\theta}^i \quad (3.6)$$

$$v_{\theta}^i = v^i + v_{\theta}^i \quad (3.7)$$

Os vetores de deslocamento e de velocidade relativas translacionais são redefinidos em termos do novo deslocamento u_{θ}^i e velocidade v_{θ}^i translacionais, como segue

$$u_{r\theta} = u_{\theta}^j - u_{\theta}^i \quad (3.8)$$

$$v_{r\theta} = v_{\theta}^j - v_{\theta}^i \quad (3.9)$$

Também redefine-se as parcelas das componentes normal dos vetores de deslocamento relativo e de velocidade relativa devidos ao movimento de rotação, dados por:

$$u_{m\theta} = (u_{r\theta} \cdot n)n \quad (3.10)$$

$$v_{m\theta} = (v_{r\theta} \cdot n)n \quad (3.11)$$

Como as parcelas normais dos vetores de deslocamento relativo e velocidade relativa já foram calculadas acima, então obtém-se finalmente a componente tangencial de deslocamento relativo e a velocidade relativa

$$u_{rt} = u_{r\theta} - u_{m\theta} \quad (3.12)$$

$$v_{rt} = v_{r\theta} - v_{m\theta} \quad (3.13)$$

3.2.3. Amortecimento global

No cálculo da resultante de forças e momentos, pode-se incluir uma parcela de amortecimento do sistema como um todo, denominada de amortecimento global. Nesse caso, as forças são calculadas em função da velocidade instantânea das partículas e não em termos da velocidade relativa entre elas. Assim, mesmo as partículas que não estão em contato com nenhum outro objeto, sofrem dissipação de sua energia. Oñate e Rojek (2004) e Shiu e Donzé (2005) apresentam em seus trabalhos dois tipos de amortecimento globais. Um está relacionado à magnitude da velocidade de cada partícula, denominado de amortecimento global viscoso, enquanto que o segundo está relacionado à magnitude das forças e momentos resultantes, denominado de amortecimento global não-viscoso.

Para a interpretação física do amortecimento global viscoso faz-se uma analogia com o problema de partículas imersas em um fluido. A força de amortecimento viscosa seria análoga à força de arraste causada por uma velocidade relativa entre a partícula e o fluido. No caso do amortecimento não-viscoso, a interpretação física não é tão direta. Shiu e Donzé (2005) a interpretam

como sendo uma remoção direta de uma parcela da força global aplicada na partícula. Assim, se o coeficiente de amortecimento não-viscoso é de 0,3, significa que a força global aplicada nas partículas é reduzida em 30%. Esses mesmos autores recomendam os valores entre 0,3 e 0,4 para representar o comportamento de solos.

3.2.4. Integração numérica

Para solucionar as equações diferenciais de equilíbrio resultantes da formulação do Método dos Elementos Discretos é necessário definir qual tipo de técnica deve ser usada. Considerando os vários métodos disponíveis, convém agrupá-los em analíticos e numéricos. Os analíticos são, em geral, mais restritos devido às hipóteses necessárias para a viabilidade da sua solução. Os numéricos são mais versáteis e, portanto, mais utilizados nos problemas de engenharia. Estes apresentam, na maioria dos casos, respostas aproximadas, mas necessitam de menos hipóteses restritivas e seus resultados são bem satisfatórios.

Métodos explícitos são bastante usados em associação com o método dos elementos discretos. Sua principal característica é o fato da solução no tempo $t + \Delta t$ ser obtida considerando-se as condições de equilíbrio do tempo t . Outras características importantes dessa formulação foram apresentadas por Cook et al. (1989), Bathe (1996) e, para o caso da associação com MED, O'Sullivan e Bray (2004).

Tradicionalmente, os algoritmos explícitos apresentam baixo custo computacional por intervalo de tempo, pois o sistema de equações gerado pela formulação é desacoplado. Não há portanto a necessidade de processos iterativos para obtenção da solução no passo de tempo $t + \Delta t$. Quanto à estabilidade, os algoritmos explícitos apresentam uma restrição ao valor do incremento de tempo máximo usado para cada análise. Essa estabilidade condicional, garantida para problemas lineares, pode levar a valores bastante pequenos para o intervalo de tempo Δt . O valor crítico para Δt é inversamente proporcional à máxima frequência natural do sistema discreto, independente do tipo de solicitação aplicada ao sistema. Portanto, em problemas quase estáticos ou de baixas frequências, os métodos explícitos tornam-se pouco eficazes já que o Δt crítico é

bem menor que o necessário para uma integração razoavelmente precisa dos modos solicitados.

Em problemas de impacto, propagação de onda, ou que envolvam altas frequências, $\rho \Delta t$ necessário para a integração das frequências existentes na resposta do sistema é equivalente (ou menor) ao necessário para a garantia da estabilidade. Nesses casos os algoritmos explícitos tornam-se mais adequados.

No caso do MED, Cundall e Strack (1979) salientam que o incremento de tempo escolhido deve ser pequeno o suficiente para que, durante um único passo de tempo, as perturbações não possam se propagar além da vizinhança de cada partícula. Por esse motivo, os incrementos de tempo utilizados na solução do MED tem pequena ordem de grandeza, favorecendo o uso de métodos explícitos.

Em problemas não lineares, o valor crítico para o intervalo de tempo é variável com o tempo, já que é atrelado às frequências naturais do sistema que se modificam ao longo da análise (Zienkiewicz; Morgan, 1983). Outros fatores também podem interferir nesse valor, o que torna a detecção das instabilidades mais complexa do que nos casos de dinâmica linear.

3.2.5. Algoritmos de busca por contatos

No Método dos Elementos Discretos várias partículas independentes interagem durante a análise. Para que os resultados dessas interações sejam coerentes é necessário garantir que dois corpos não ocupem o mesmo ponto do espaço em um dado instante de tempo. O tratamento do contato é, portanto, um dos principais aspectos do método. Munjiza (2004) segmenta essa questão em duas etapas: *a detecção do contato* e *a interação no contato*. A detecção do contato é a etapa na qual se pesquisa quais os pares de partículas que estão próximas o suficiente para estarem em contato.

O conjunto de instruções definidas com o objetivo de detectar que elementos estão em contato é geralmente denominado de Algoritmo de Busca por Contatos. Uma vez detectado um contato entre duas partículas torna-se necessário avaliar a força de contato mobilizada em cada caso, momento em que executa-se a segunda etapa do tratamento do contato, a quantificação da interação entre os corpos.

Uma das principais desvantagens do uso do MED é o rápido aumento do tempo de computação para modestos aumentos no número de partículas, considerando-se análises mais realistas. A tarefa de se detectar os contatos tem-se apresentado como uma das mais custosas computacionalmente, chegando a representar mais de 60% do tempo de computação (Munjiza, 2004; Hustrulid e Mustoe, 1997), e no caso de partículas tridimensionais e irregulares, facilmente ultrapassa os 80% (Nezami et al., 2004). Por esse motivo, esse aspecto tornou-se foco de vários desenvolvimentos que objetivam a melhoria da eficiência computacional do método. Cundall e Strack (1979) ao apresentar o MED não enfocou que método foi utilizado para detecção dos contatos, mas já alertou para o alto custo computacional inserido na tarefa de se atualizar a matriz que representa a rigidez dos contatos, uma vez que esta deveria ser atualizada sempre que contatos fossem criados ou destruídos. Assim, a eficiência na execução desta busca se tornou vital para a viabilidade do método.

Pesquisar os contatos considerando todas as N possibilidades em N partículas envolve operações proporcionais a N^2 . Esse tipo de pesquisa torna o método limitado para solução de problemas que envolvam mais de poucos milhares de partículas. Para reduzir o tempo de análise, procura-se eliminar cálculos redundantes e evitar a pesquisa em elementos que estejam muito distantes.

Munjiza (2004) apresenta quatro aspectos importantes que devem ser considerados ao se desenvolver, ou mesmo ao se escolher, um algoritmo de busca por contatos. Esses aspectos são: a robustez, a eficiência computacional (tempo de processamento), a eficiência no uso de memória e a facilidade de implementação.

Vários autores vêm formulando métodos cada vez mais eficientes para a detecção de contatos, reduzindo a ordem de complexidade, mesmo para casos tridimensionais ou de partículas irregulares, de mesma dimensão ou não. Han et al. (2007) apresenta uma revisão sobre os principais algoritmos de busca, fazendo comparações de performance. As seguintes referências representam uma amostra dos desenvolvimentos nessa área, apresentando informações mais detalhadas sobre as formulações e implementações de algoritmos, tanto para detecção dos pares de partículas possivelmente em contato como para avaliar os pontos (ou planos) de contato necessários para o cálculo das forças de interação: Cundall (1988), Williams e Pentland (1992), Cundall e Hart (1992), Williams e O'Connor

(1995), Hogue (1998), Munjiza e Andrews (1998), Williams e O'Connor (1999), Ouadfel e Rothenburg (1999), Perkins e Williams (2001), Liu e Lemos (2001), Nezami et al. (2004), Feng e Owen (2004), Williams et al. (2004), Johnson et al. (2004), Hopkins (2004), Zhao et al. (2006).

3.2.6. Relações força-deslocamento

O tratamento do contato é realizado em duas etapas: detecção do contato e quantificação do contato. Neste ponto, o foco é dado à segunda etapa onde a interação entre os corpos é quantificada.

Quando dois corpos sólidos colidem, as suas superfícies (geralmente irregulares) entram em contato por meio de uma série de pontos, através dos quais as forças são transmitidas. A medida que a pressão aumenta, mais pontos entram em contato. Em vários deles, deformações elásticas e plásticas ocorrem, alterando a geometria da superfície o que leva a um aumento da área real de contato (Munjiza, 2004).

A representação desse fenômeno é bastante complexa e geralmente envolve modelos micro-mecânicos ou teóricos. No caso do Método dos Elementos Discretos, pode-se adotar abordagens alternativas que visam representar de forma satisfatória os efeitos causados pela colisão.

O método que tem sido bastante usado é o Método da Penalidade, no qual a interpenetração é evitada utilizando-se um parâmetro de penalidade que gera uma força repulsiva suficientemente alta para evitar a superposição dos corpos. Outros métodos também podem ser usados, como o Método dos Multiplicadores de Lagrange, onde inclui-se na formulação equações de restrições que garantam a impenetrabilidade. Nesses dois casos, as forças resultantes dos métodos podem ser interpretadas fisicamente como sendo as forças de contato. Portanto, na medida em que se utiliza uma representação aproximada do fenômeno do contato, há uma dificuldade em se isolar as forças decorrentes das restrições e as decorrentes das propriedades mecânicas do material. Surgem então dificuldades em se correlacionar os parâmetros micro-mecânicos com os parâmetros macro-mecânicos do material.

Algumas alternativas têm sido estudadas para vencer essa dificuldade. Munjiza (2004) adota o uso de elementos finitos para discretizar os elementos discretos, permitindo a deformação dos mesmos. Essa estratégia permite uma representação mais fiel do fenômeno no nível local, mas o custo computacional torna-se bastante elevado. Nesta pesquisa será utilizada a formulação mais simplificada, onde as partículas são rígidas e o método da penalidade é adotado para garantia de impenetrabilidade. Esse método é associado a modelos reológicos, aqui denominados de relações força-deslocamento, que representam o comportamento físico do meio granular no nível de escala do grão. Essas relações são unidimensionais uma vez que o cálculo de cada componente normal e tangencial da força de contato é tratada separadamente. Os modelos reológicos que serão implementados nesta pesquisa serão os seguintes:

3.2.6.1. Modelo de Hooke

O modelo de Hooke possui a formulação mais simples por se tratar de uma relação elástica linear. Neste caso tanto a força normal quanto a força tangencial são calculadas diretamente a partir dos respectivos valores de rigidez, que são constantes e dependem dos valores de rigidez intrínsecos das duas entidades em contato (esfera-esfera, esfera-parede).

3.2.6.2. Modelo simplificado de Hertz-Mindlin

No modelo simplificado de Hertz-Mindlin (Mindlin e Deresiewicz, 1953) as forças e deslocamentos relativos são não-linearmente relacionadas por valores de rigidez variáveis, função da geometria e das propriedades dos materiais no contato entre as entidades, como também do valor atual da força normal.

Considere o contato entre duas partículas esféricas de raio r , conforme figura 3.8. Este modelo considera a formação de uma superfície de contato circular plana de raio a_0 definida como:

$$a_0 = \left[\frac{3(1-\nu)}{8G} r f_n \right]^{1/3} \quad (3.14)$$

onde ν e G representam o coeficiente de Poisson e o módulo de elasticidade transversal das partículas em contato e f_n a força normal no contato.

Os pontos situados fora da região circular têm deslocamento igual a 2 vezes o valor de w_0 dado pela seguinte equação:

$$w_0 = 2 \left[\frac{3f_n(1-\nu)}{8G r^{1/2}} \right]^{2/3} = \frac{2a_0^2}{r} \quad (3.15)$$

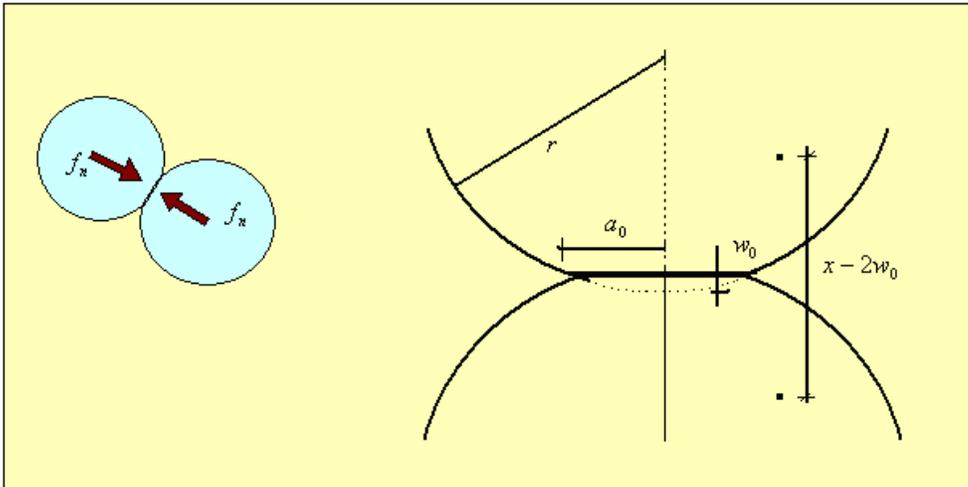


Figura 3.8 - Deformação de dois grãos em contato de acordo com a teoria clássica de Hertz- Mindlin (Shweiger, 2006).

A rigidez de contato na direção normal à superfície de contato k_n é então definida de acordo com Mindlin e Deresiewicz (1953) por:

$$k_n = \left(2 \frac{\partial w_0}{\partial f_n} \right)^{-1} = \left[\frac{3r G^2}{(1-\nu)^2} f_n \right]^{1/3} \quad (3.16)$$

enquanto que a rigidez de contato na direção tangencial k_t pode ser expressa por (Bowden e Tabor, 1964; Johnson, 1985),

$$k_t = \frac{2(1-\nu)}{(2-\nu)} \left(1 - \frac{f_t}{f_n \tan \phi} \right)^{1/3} k_n \quad (3.17)$$

onde φ é o ângulo de atrito da superfície da partícula e f_t a força tangencial aplicada no contato.

A relação entre k_n e f_n é ilustrada na figura 3.9 para um conjunto de valores listados na tabela 3.2, correspondentes a valores típicos de uma areia média. Nesta figura, também é mostrada a influência da rigidez normal do contato em função da rigidez da partícula representada pelo seu módulo de elasticidade transversal (G).

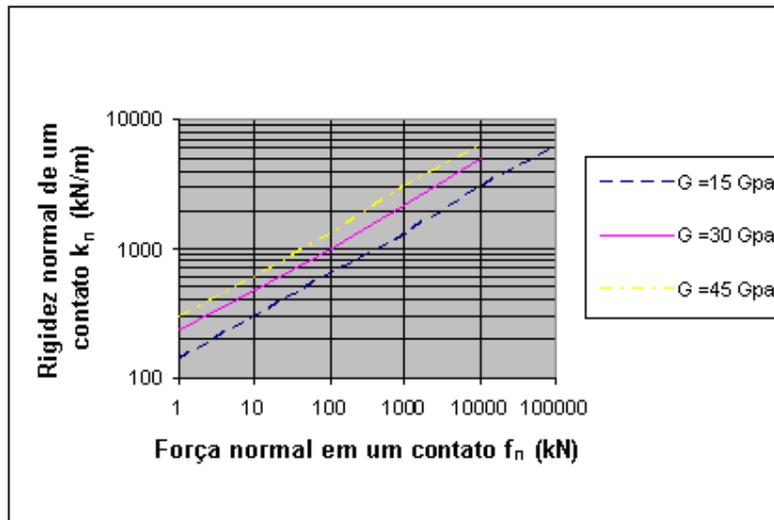


Figura 3.9 – Rigidez normal k_n vs força normal f_n no contato entre grãos de areia média (Shweiger, 2006).

Tabela 3.2 – Propriedades geotécnicas de uma areia média (Shweiger, 2006).

Parâmetros	Valor	Unidade
G	15/30/45	[GPa]
ν	0,2	
r	0,25	[mm]
ϕ	35	[°]

O expoente nas equações 3.16 e 3.17 foi considerado constante e igual a $1/3$, porém pesquisas experimentais têm demonstrado que o mesmo pode variar com o tamanho do grão.

O modelo simplificado de Hertz-Mindlin é adequado para modelar pacotes granulares sem ligação (coesão ou aderência) entre partículas e sob tensões de compressão, principalmente.

3.2.6.3. Modelo de Hooke-Coulomb

O modelo de Hooke-Coulomb é idêntico ao modelo de Hooke em relação à força normal. Porém, no cálculo da força tangencial, é incluído um elemento de atrito de Coulomb, limitando-se a força tangencial a um valor máximo f_u .

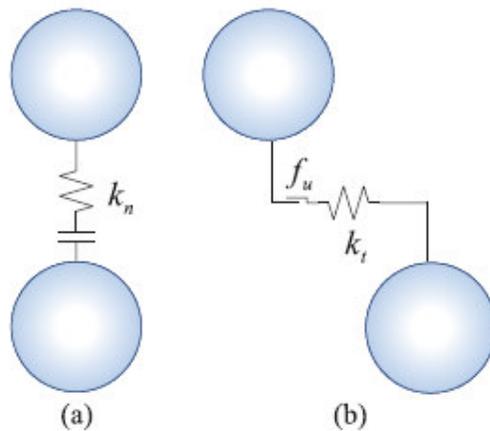


Figura 3.10 – Modelo de Hooke-Coulomb para as direções normal e tangencial.

3.2.6.4. Modelo frágil

Denomina-se modelo frágil um modelo de contato que considera coesão entre as partículas, sendo desativada ao se atingir um dado limite. Este modelo foi apresentado por Oñate e Rojek (2004) e é caracterizado por um comportamento elástico linear enquanto houver coesão. Esta é eliminada no caso da sua resistência ter sido ultrapassada (apenas para forças de tração). Para forças compressivas não há limite de resistência.

A coesão é ativada no início da análise para todas as partículas que estiverem em contato. No caso da coesão ser rompida, esta não é novamente ativada se houver outros contatos ao longo do tempo de simulação, passando a ter comportamento igual ao modelo Hooke.

3.2.6.5. Modelo não-linear elástico

O modelo não-linear elástico foi apresentado por Fuente e Felippa (1991) como uma alternativa para o cálculo da força de contato durante o impacto. A função de penalidade utilizada pelo modelo é uma aproximação da função delta de Dirac, mantendo o balanço de momento e energia do sistema. A equação utilizada para o cálculo da força normal considera que à medida em que uma partícula se aproxima de outra, a partir de uma distância d_T , a força de contato começa a agir, contrariando o movimento. Ela é máxima no instante do contato e tem valor p_0 . A relação está apresentada na equação 3.18.

$$f_n(d) = \begin{cases} 0 & \text{se } d > d_T \\ \frac{p_0}{1+(d/d_0)^2} & \text{se } 0 \leq d \leq d_T \\ p_0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.18)$$

A relação força deslocamento do modelo não-linear elástico é controlada através dos valores de p_0 e de d_0 adotados. O valor p_0 representa o máximo valor que a força de contato irá assumir. O valor d_0 controla a velocidade com que essa força aumenta. A distância d_0 corresponde ao ponto no qual 50% da força máxima (p_0) é atingida.

Enquanto que a componente normal da força de contato é calculada segundo a função de penalidade apresentada, a componente tangencial é calculada segundo uma relação elástica linear limitada pelo atrito de Coulomb.

3.2.7. Acoplamento sólido-fluido

Em várias áreas da engenharia, o problema investigado consiste de um sistema formado por uma fase sólida e um (ou mais) fluidos. Exemplos na geomecânica são a percolação de água em solos e rochas, erosão fluvial, liquefação de solos, *piping*, transporte de sedimentos, refluxo do material de sustentação de fraturas, fluxo de gases em rochas fraturadas por explosão, produção de areia em poços de petróleo, etc.

Ao longo dos anos, várias estratégias e formulações foram desenvolvidas para tratar com este sistema formado por partículas sólidas e fluido, com o objetivo de estabelecer algum nível de acoplamento capaz de representar a influência de uma fase sobre a outra. As interações envolvidas no sistema acoplado apresentam grandes complexidades, difíceis de serem completamente modeladas. Assim, tanto uma modelagem física quanto uma modelagem numérica apresentam várias imprecisões, decorrentes das hipóteses simplificadoras adotadas para tornar possível a solução do problema bem como a interpretação de seus resultados.

Em geral pode-se classificar as estratégias adotadas para as formulações de acoplamento sólido-fluido de acordo com um nível de escala, assim definido por Shamy (2004):

3.2.7.1. Abordagem em macro-escala

Na abordagem em macro-escala, a formulação é contínua e as interações fluido-partícula em micro-escala não são diretamente consideradas, optando-se por utilizar propriedades macroscópicas do sistema para o desenvolvimento de relações constitutivas. Exemplos de formulações elaboradas sob essa abordagem são a teoria de Biot para fluxo em meios porosos e a teoria das misturas.

3.2.7.2. Abordagem em meso-escala

Uma segunda opção é adotar uma escala média (meso-escala) onde as variáveis de estado da fase fluida, em cada ponto do domínio, correspondem aos seus valores médios homogeneizados sobre um domínio espacial suficientemente grande para conter várias partículas sólidas, mas ainda assim pequeno em relação ao domínio total ocupado pela mistura. Dessa forma as variáveis de estado do fluido em cada ponto são decorrentes de uma homogeneização nesta região do domínio. Esta descrição do sistema com base em variáveis homogeneizadas localmente foi inicialmente apresentada por Anderson e Jackson (1967) com o modelo TFM - *Two-Fluid Model*.

Tsuji et al. (1993) apresentam uma formulação acoplando o método TFM com o método dos elementos discretos, calculando o movimento do fluido simultaneamente com o movimento das partículas. As forças de arraste, aplicadas em todas as partículas, são determinadas com base nas velocidades locais do fluido e das partículas. Esta mesma estratégia tem sido usada por vários outros autores para a solução de problemas acoplados (Kawaguchi et al., 1998; Gera et al., 1998; Limtrakul et al., 2003; Shamy, 2004; ICG, 2004; Chaikittisilp et al., 2006).

3.2.7.3. Abordagem em micro-escala

A abordagem em micro-escala consiste em analisar o sistema no nível de escala dos poros e das partículas sólidas individualmente. A descrição do movimento é obtida pela solução das equações da conservação do momento para as partículas e das equações de Navier-Stokes para o fluido intersticial. O fluido nesse caso é considerado Newtoniano e o sistema saturado. Várias formulações foram desenvolvidas considerando esta abordagem.

No método LB (*Lattice Boltzmann*) o fluido é representado por porções de massa que se movem sobre uma malha ou grade regular, definida de acordo com as condições do problema. Originalmente proposta por McNamara e Zannetti (1988), trata-se de uma técnica para solução das equações de Navier-Stokes com precisão de segunda ordem. As colisões e os movimentos das porções de fluido ocorrem nos nós da grade de acordo com relações específicas que garantem a conservação da massa e do momento, possibilitando a solução das equações de Navier-Stokes no tempo e no espaço. Cook et al. (2004) desenvolvem uma formulação acoplada da técnica LB com o métodos dos elementos discretos.

Outra formulação simplificada foi proposta por Cundall (1999), na qual os poros são tratados como domínios de fluido, conectados por tubos representando os contatos entre as partículas. Uma formulação semelhante foi apresentada por Velloso et al. (2003), na qual as ligações em poros interconectados são representadas por meio de tubos cilíndricos.

3.3 PROGRAMA PFC

3.3.1 Introdução

O programa PFC (*Particle Flow Code*), versão 3.10, modela a interação e o movimento de discos (versão 2D) ou esferas (versão 3D) pelo método dos elementos discretos. É também possível criar partículas de outras formas agrupando duas ou mais partículas esféricas, de tal maneira que cada grupo (super-partícula) atue como um objeto autônomo. Um gerador de partículas permite a criação automática de partículas com raios uniformes ou especificados de acordo com uma distribuição Gaussiana, podendo ser modificados a qualquer estágio de cálculo para simularem estados compactados com determinada porosidade. Diferentes distribuições de partículas podem ser geradas, o que é conveniente para análises baseadas no método do Monte-Carlo, onde vários modelos do mesmo conjunto de dados (com variações estatísticas) podem ser processados.

O método de cálculo (MED) utiliza um esquema explícito no tempo. Há vantagens na utilização deste esquema, principalmente no caso de sistemas que exibem instabilidade física. Mesmo para um grande número de partículas (tabela 3.3), quantidades modestas de memória são necessárias, porque matrizes não são nunca armazenadas no método de solução explícito. O programa pode modelar problemas estáticos ou dinâmicos, mas em qualquer caso a equação do movimento é totalmente resolvida de modo a acompanhar, de forma mais realista, problemas próximos da ruptura ou que exibam fluxo de material. A modelagem de problemas com o PFC envolve a execução de milhares de passos de tempo, integrando-se a segunda lei de Newton duas vezes para cada partícula, de modo a fornecerem estimativas atualizadas de velocidades e deslocamentos. Forças de contato entre partículas são então obtidas a partir do deslocamento relativo entre pares de partículas e uma lei constitutiva força x deslocamento, linear ou não, é utilizada.

O programa também possui uma opção de processamento em paralelo, de modo a permitir que a simulação possa ser compartilhada em um "cluster" de micro-computadores, para diminuir o tempo total de processamento.

Outra vantagem do PFC é a linguagem de programação FISH que permite ao usuário definir novas variáveis e funções específicas para o problema particular sendo analisado, o que expande o potencial de aplicabilidade do programa. Por exemplo, com instruções FISH novas variáveis podem ser plotadas, geradores especiais de partículas implementados, estudos paramétricos realizados, servo-controladores aplicados em ensaios numéricos, etc. sem contar as subrotinas já escritas em FISH e presentes na biblioteca de subrotinas do PFC.

Tabela 3.3 – Número máximo de partículas no PFC3D em função de memória RAM disponível.

RAM disponível (MB)	Número aproximado de partículas*
17	10000
80	50000
160	100000
* Estado compactado (contactos requerem mais memória do que partículas)	

3.3.2 PFC2D e PFC3D

Nesta pesquisa, a análise do refluxo de material de sustentação de fraturas hidráulicas foi inicialmente feita com a versão bi-dimensional do programa, chamada de PFC2D. No entanto, algumas características da modelagem 2D não permitem uma simulação numérica mais próxima da resposta do fenômeno, razão pela qual o estudo prosseguiu então com a versão 3D do programa, gentilmente oferecida pela empresa *Itasca Consulting Group*, fabricante do *software*, para o desenvolvimento desta dissertação. Dentre estas características, podem ser citadas:

- i) as partículas são modeladas no PFC2D como discos com todos os seus centros situados no mesmo plano (ou hipoteticamente esferas com centros no mesmo plano), o que não corresponde a um caso real de partículas em um pacote granular;
- ii) a força fora-do-plano e os momentos-no-plano não são considerados na modelagem bidimensional. Em aplicações 2D da mecânica do contínuo as respostas (força, tensão, deformação) fora

do plano podem ser obtidas pela imposição de restrições de estados plano de tensão ou de deformação. No PFC2D a restrição necessária para impor um estado plano de deformação não existe.

- iii) a porosidade calculada no PFC2D é baseada numa razão de área de vazios em relação à área total ocupada pelos discos e não definida como a razão de volume de vazios pelo volume total, empregada usualmente na definição de porosidade. Não há uma relação clara entre porosidades 2D e 3D para um conjunto arbitrário de partículas esféricas. Deresiewicz (1958) mostrou que para esferas uniformes a porosidade mínima atinge o valor 0,2595 enquanto que para um conjunto de discos esta pode chegar ao valor 0,0931. Em geral, há mais espaços vazios num conjunto 3D do que em um 2D porque o movimento das partículas é bloqueado (*locked-up*) antes de atingir uma porosidade baixa;
- iv) com relação à percolação em pacotes granulares densos, pequenas partículas podem então mais facilmente se movimentar através de um conjunto 3D de partículas maiores do que em um conjunto de discos 2D.

3.3.3

Características principais do PFC3D

- a) as partículas são tratadas como corpos rígidos. A hipótese é satisfatória para pacotes granulares onde a maioria dos movimentos ocorre devido a rotações e deslizamentos entre partículas e não devido à deformação individual de partículas;
- b) os contatos ocorrem em um ponto;
- c) partículas podem se superpor uma sobre as outras nos pontos de contato, sendo as superposições pequenas em relação ao tamanho das partículas;
- d) o valor da superposição está relacionado com a força de contato através de uma lei força x deslocamento;
- e) ligações podem existir no contato entre partículas;
- f) super-partículas (agrupamento de partículas esféricas) podem funcionar como um corpo rígido com um contorno deformável;

- g) além de aplicações envolvendo movimento de partículas, o programa pode ser aplicado para a análise de sólidos sujeitos a condições iniciais e de contorno prescritas. Em tais modelos, o comportamento do contínuo pode ser aproximado tratando o corpo como um pacote denso de partículas muito pequenas. Medidas de tensão e de deformação podem ser definidas como quantidades médias em um volume representativo do sistema;
- h) além de partículas, o modelo PFC inclui também paredes, que permitem aplicar uma condição em termos de velocidade (translacionais ou rotacionais) com o objetivo de compactar ou confinar o material. Em geral o carregamento do pacote granular é por gravidade ou movimento de paredes;
- i) as equações de movimento são integradas no PFC usando um esquema baseado em diferenças finitas centrais, assumindo que as velocidades e acelerações são constantes dentro de cada passo de tempo. O passo de tempo deve ser suficientemente pequeno, de modo que o movimento não possa se propagar além de qualquer outra partícula que não esteja na vizinhança imediata. Então, em qualquer tempo, as forças atuantes em qualquer partícula são determinadas exclusivamente pelas suas interações com as partículas em contato. O algoritmo explícito permite assim interações não-lineares envolvendo um grande número de partículas sem a necessidade de grandes áreas de memória como no caso de métodos implícitos. Como o movimento se propaga em função das propriedades físicas do sistema discreto, o maior passo de tempo ou tempo crítico (t_{crit}) para satisfazer a condição mencionada, deve ser igual a

$$t_{crit} = \begin{cases} \sqrt{m / k^{tran}}, & \text{(movimento translacional)} \\ \sqrt{I / k^{rot}}, & \text{(movimento rotacional)} \end{cases} \quad (3.19)$$

- j) onde k^{tran} e k^{rot} representam a rigidez translacional e rotacional da mola de contato, respectivamente, m é a massa da partícula e I é o seu momento de inércia.

- k) O passo de tempo crítico é calculado para cada partícula aplicando-se a equação acima separadamente para cada grau de liberdade, assumindo-se que estes são desacoplados;
- l) a energia fornecida ao sistema é dissipada através de deslizamentos com atrito entre partículas e com as paredes. Entretanto, este tipo de amortecimento pode não estar ativo no modelo constitutivo ou, caso afirmativo, não ser suficiente para atingir a solução em regime permanente após um razoável número de interações. O programa PFC utiliza um amortecimento não-viscoso local para amortecer as equações de movimento, acrescentando-se uma força de amortecimento correspondente a uma parcela (o programa recomenda 70%) de todas as forças externas aplicadas na partícula, incluindo a gravitacional. As vantagens deste tipo de amortecimento local é que somente a aceleração é amortecida (logo o movimento permanente não é afetado por este tipo de amortecimento) e o amortecimento é independente da velocidade com que o ciclo é executado (amortecimento histerético);
- m) o comportamento mecânico do material é simulado pelo PFC associando um modelo constitutivo simples no contato, consistindo de 3 parcelas: modelo de rigidez, modelo de deslizamento e modelo de ligação (*bond model*). O modelo de rigidez relaciona a força de contato com os deslocamentos relativos da partícula nas direções normal e tangencial, sendo disponíveis o modelo linear (Hooke) e o modelo simplificado de Hertz-Mindlin, descritos nos itens 3.2.4.1 e 3.2.4.2., respectivamente, e pela figura 3.11. O modelo de deslizamento está sempre ativo (exceto se um modelo de ligação for selecionado) e incorpora uma propriedade intrínseca de duas entidades (partícula-partícula, partícula-parede) no contato. Admite resistência nula à tração e permite deslizamento entre as entidades, limitando a resistência ao cisalhamento a um valor máximo (modelo de Hooke-Coulomb). O programa PFC permite que duas partículas estejam ligadas, através de um modelo de ligação (coesão ou aderência) no contato (*contact-bond model*) ou um modelo de ligação paralela (*parallel-bond model*) – figura 3.12. Ambos os modelos podem ser vistos como uma espécie de “cola” que adere duas partículas entre si. No modelo de ligação no contato a “cola” encontra-se apenas no ponto de

contato, enquanto que no modelo de ligação paralela esta se encontra distribuída sobre uma superfície de seção circular entre as partículas. O primeiro dos modelos pode apenas transmitir uma força, enquanto que o segundo força e momento. O modelo de ligação paralela pode descrever o comportamento constitutivo de um material de cimentação conectando as partículas.

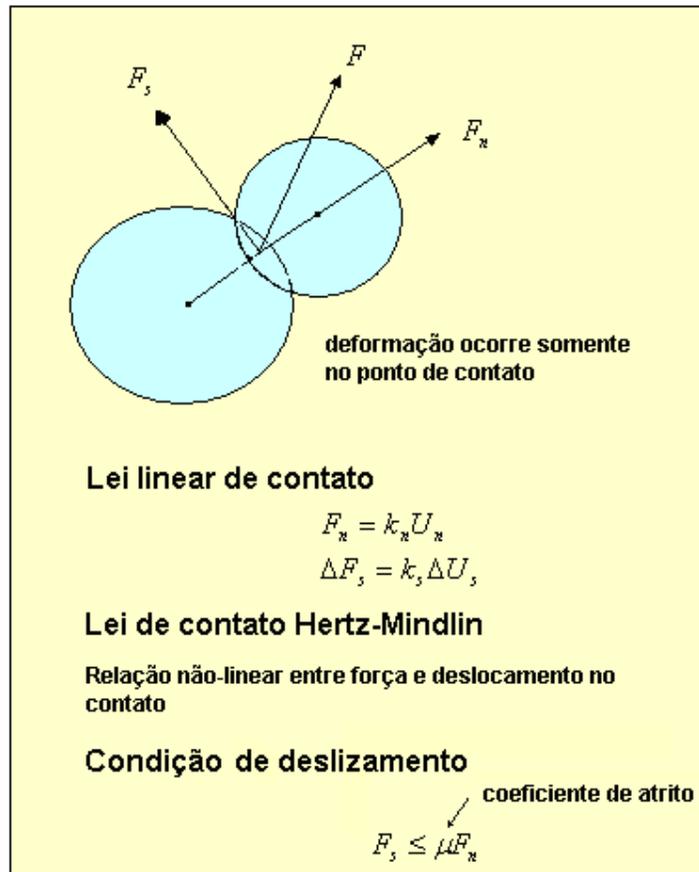


Figura 3.11– Modelos de rigidez e de deslizamento no contato (manual do PFC3D)

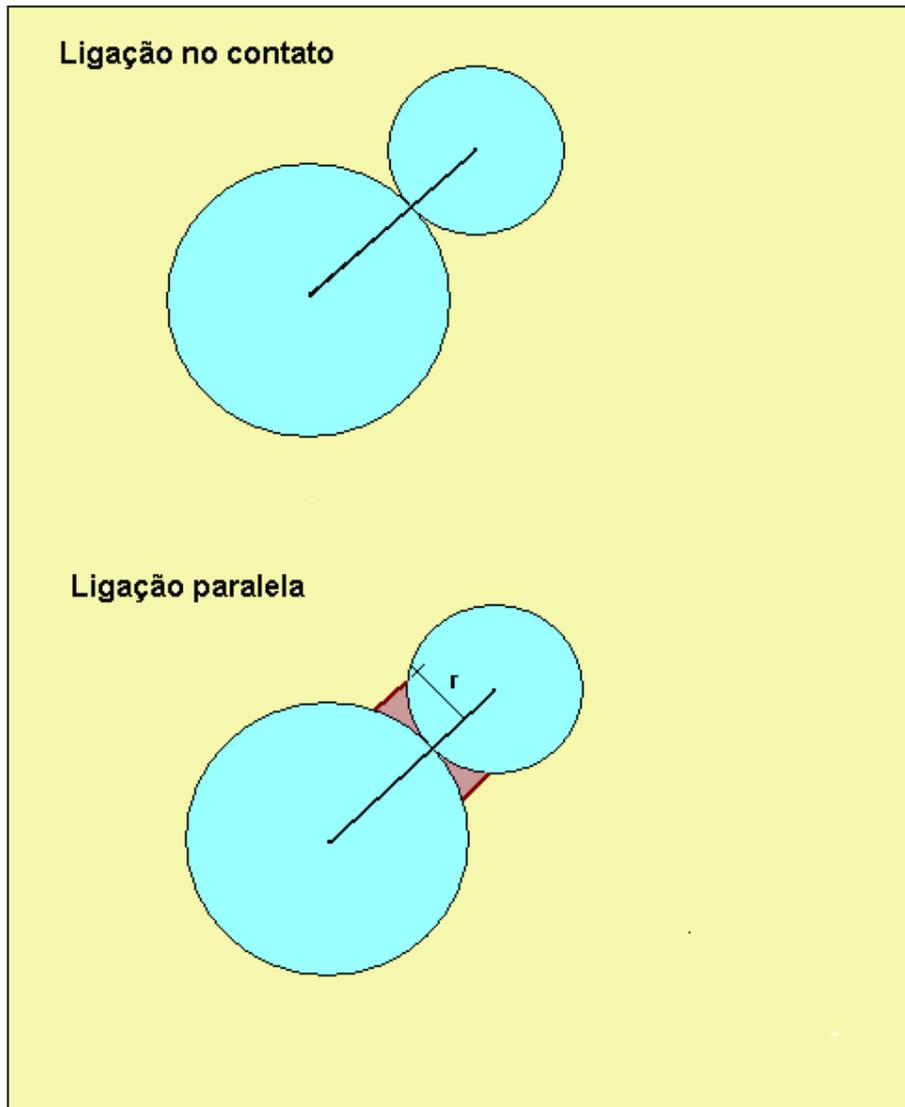


Figura 3.12 – Modelos de ligação (manual do PFC3D)

3.3.4 Modelagem do fluido

Este esquema é implementado para simulações do acoplamento do fluido às partículas, soluciona numericamente a equação de Navier Stokes para fluxo de fluido incompressível, em sistema de coordenadas Cartesianas Eulerianas, e logo deriva a pressão e velocidade do fluido para cada célula fixa, por inclusão da influência das partículas, e a correspondente porosidade, dentro da célula. As forças de arraste do fluxo do fluido são aplicadas às partículas como forças de corpo externas. Estas forças são também adicionadas às equações de fluido e

causam mudanças nos momentos, como reflexo pela mudança no gradiente de pressão na direção do fluxo.

O trabalho original nesta área foi apresentado pelo professor Tsuji e seu grupo da Universidade de Osaka em 1992.

3.3.4.1 Equação de interação fluido partícula

A Figura 3.13 mostra um volume de controle fixo, $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$, no interior do domínio de fluxo contendo n_p partículas esféricas sólidas.

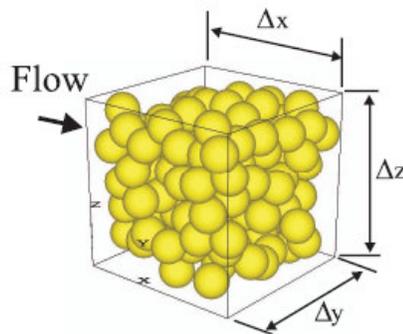


Figura 3.13 - Fluxo através do pacote de partículas (manual PFC3D).

Assume-se que um gradiente de pressão dP/dx cause fluxo na direção x . Considerando-se o equilíbrio das partículas nesta direção no interior deste volume, a soma das forças de arraste f_{dsum} pode ser obtida fazendo.

$$f_{dsum} = \sum_{i=1}^{n_p} f_{d_{i_x}} = -f_{int_x} \Delta V - \frac{dP}{dx} \frac{\Pi}{6} \sum_{i=1}^{n_p} d_{p_i}^3 \quad (3.20)$$

onde f_{int_x} é a componente da força de interação por unidade de volume entre as partículas na direção x e o fluido e d_{p_i} ($i = 1, n_p$) o diâmetro das n_p partículas no interior do volume ΔV . O sinal negativo da primeira parcela significa que a força aplicada pela partícula ao fluido é positiva (convenção de sinais) enquanto que na segunda parcela indica que a pressão decresce com o fluxo na direção $+x$.

Definindo a porosidade (n) como,

$$n = 1 - \frac{1}{\Delta V} \frac{\Pi}{6} \sum_{i=1}^{n_p} d_{p_i}^3 \quad (3.21)$$

e substituindo na eq. (3.20), vem

$$f_{dsum} = \sum_{i=1}^{n_p} f_{d_{ix}} = - \left(\frac{f_{int_x}}{1-n} + \frac{dP}{dx} \right) \frac{\Pi}{6} \sum_{i=1}^{n_p} d_{p_i}^3 \quad (3.22)$$

A força de arraste aplicada à partícula i ($i = 1, n_p$) é dada então por:

$$f_{d_{ix}} = - \left(\frac{f_{int_x}}{1-n} + \frac{dP}{dx} \right) \frac{\Pi}{6} d_{p_i}^3 \quad (3.23)$$

Considerando condições de fluxo 3D para $j = x, y, z$, a equação (3.23) pode ser escrita como:

$$f_{d_{ij}} = - \left(\frac{f_{int_j}}{1-n} + \nabla p_j \right) \frac{\Pi}{6} d_{p_i}^3 \quad (3.24)$$

Se o gradiente de pressão ∇p surge somente da interação entre as partículas e o fluido (por exemplo, para fluxo permanente):

$$f_{int_j} = n \nabla p_j \quad (3.25)$$

Substituindo-se a eq. (3.25) na eq. (3.24), obtém-se então:

$$f_{d_{ij}} = - \frac{\nabla p_j \Pi}{1-n} \frac{\Pi}{6} d_{p_i}^3 \quad (3.26)$$

A qual define a expressão da força de arraste utilizada por Asgian et al (1995) para modelar o refluxo do propante. Com auxílio do programa TRUBAL e considerando uma porosidade de 50%. puderam observar a variação desta força de

arraste com o gradiente de pressão para alguns diâmetros de partícula (ver figura 3.14).

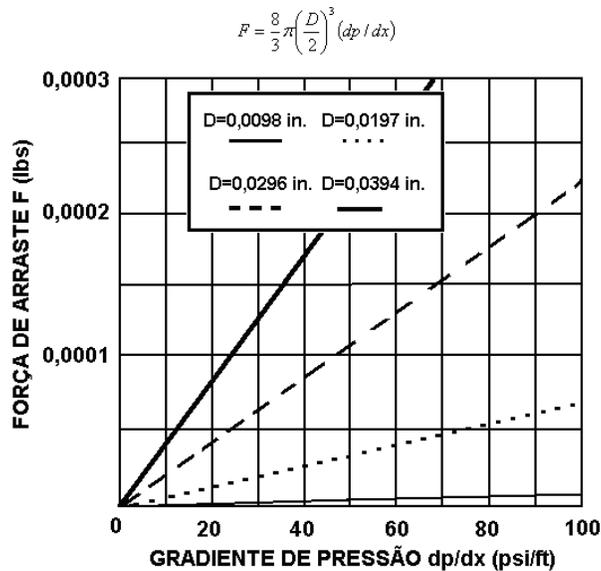


Figura 3.14 - Força de arraste em função do diâmetro do grão e gradiente de pressão. (peneiras n. 16 = 0,047 in., n. 20 = 0,033 in. e n. 40 = 0,016 in) - Asgian et al, (1995).

As forças de interação por unidade de volume entre as partículas e o fluido são expressas por:

$$f_{\text{int}_j} \equiv \beta_{\text{int}_j} (\bar{v}_j - u_j) \quad (3.27)$$

onde \bar{v}_j é a velocidade média das partículas, u_j é a velocidade do fluido e o β_{int_j} ($j = x, y, z$) é coeficiente de atrito fluido-partícula dado por (Bouillard et al., 1989):

$$\beta_{\text{int}_j} = \left(150 \frac{(1-n)^2}{n \bar{d}_p^2} \mu_f + 1.75 \frac{(1-n)}{\bar{d}_p} \rho_f |\bar{v}_j - u_j| \right) \quad n \leq 0.8 \quad (3.28)$$

$$\beta_{\text{int}_j} = \frac{3}{4} \rho_f C_D \frac{(1-n)n^{-1.7}}{\bar{d}_p} |\bar{v}_j - u_j| \quad n \geq 0.8 \quad (3.29)$$

onde μ_f é a viscosidade dinâmica do fluido, ρ_f é a densidade do fluido, \bar{d}_p é o diâmetro médio das partículas, C_D é o coeficiente de arraste para partículas esféricas e é dado pela equação 3.30, como uma função do número de Reynolds:

$$C_D = \frac{24}{R_e} (1 + 0,15 R_e^{0,687}) \quad R_e \leq 1000 \quad (3.30)$$

$$C_D = 0,44 \quad R_e \geq 1000$$

onde:

$$R_e = \frac{n |v_j - u_j| \bar{d}_p}{v_f} \quad (3.31)$$

Substituindo-se a equação (3.27) na equação (3.24), a força de arraste aplicada nas partículas pode ser escrita como

$$f_{d_{ij}} = - \left(\frac{\beta_{int_j}}{1-n} (\bar{v}_j - u_j) + \nabla p_j \right) \frac{\Pi}{6} d_{p_i}^3, \quad i=1, n_p \text{ e } j = x, y, z \quad (3.32)$$

onde o segundo termo é equivalente à metade daquele usado por Asgian et al, Cundall e Brady (1995) para modelagem do refluxo de propante em fraturas hidráulicas.

A presente formulação (equação 3.32) implementada no programa PFC3D só se aplica a domínios de fluxo confinado, totalmente saturados, de forma retangular. A interação ocorre somente entre o fluido e partículas; não sendo contemplada a interação do fluido com as paredes da fratura.

Na figura 3.15 é mostrado o fluxograma do processo geral de cálculo do PFC3D, incluindo o esquema de fluido, e na figura 3.16 o fluxograma específico para o esquema de fluido.

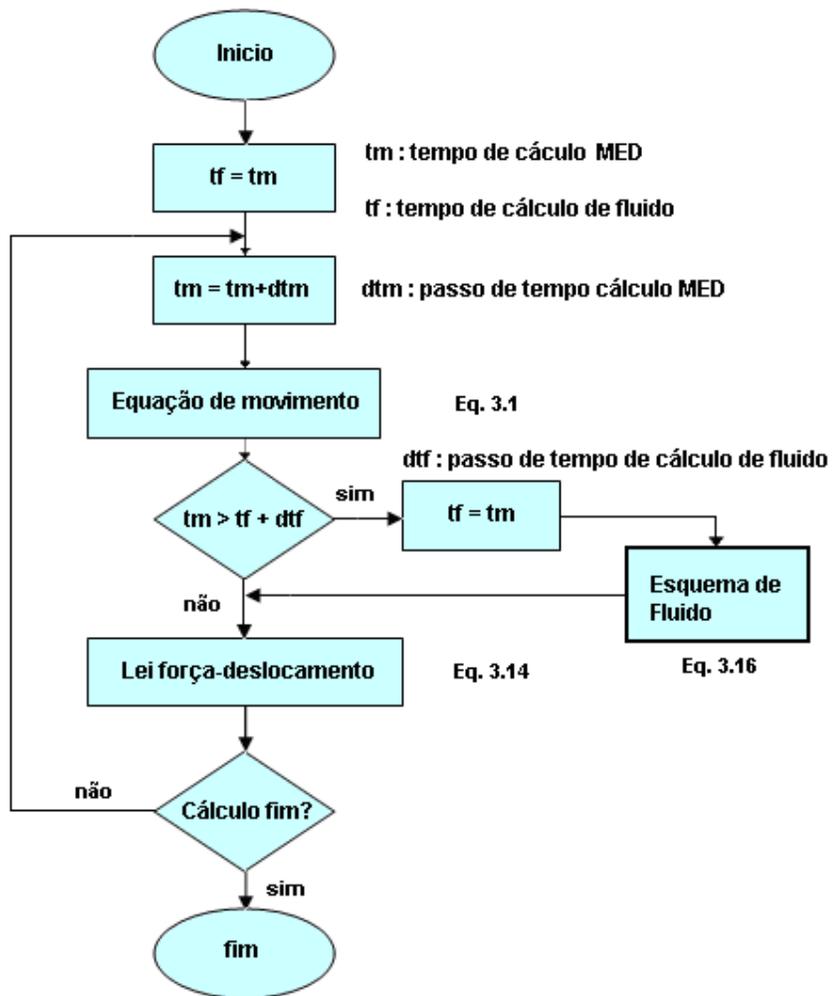


Figura 3.15. – Fluxograma do processo de cálculo no programa PFC3D com o esquema de fluido (manual do PFC3D).

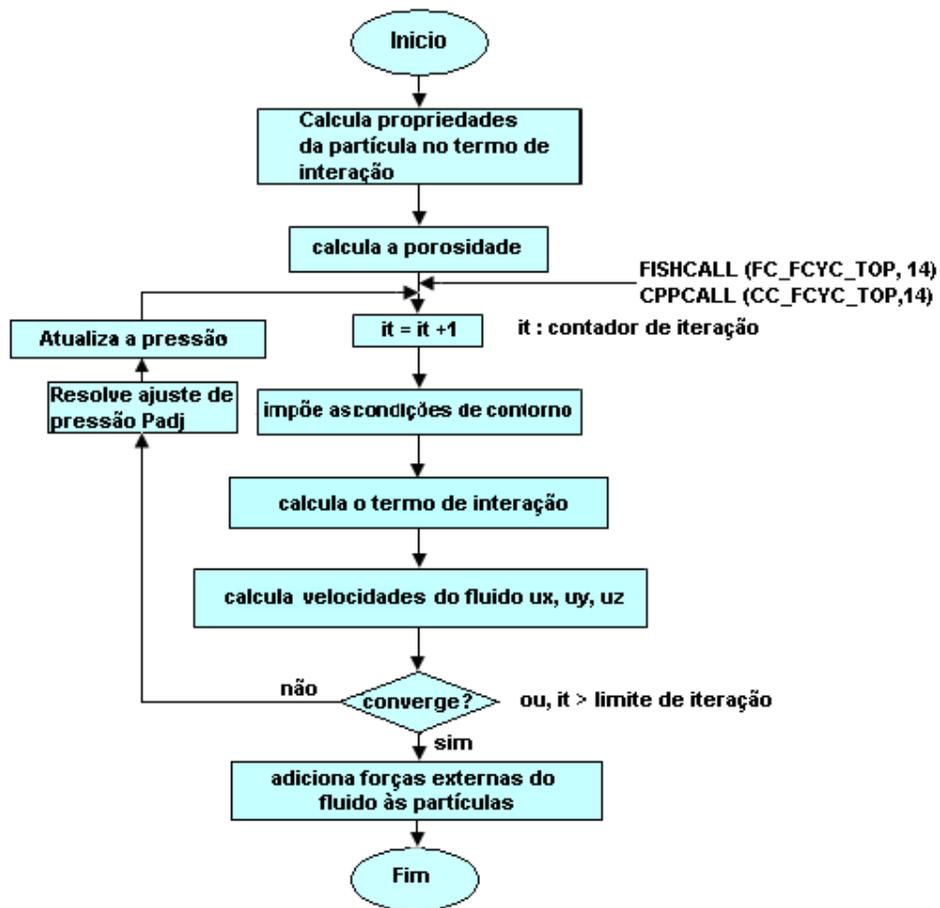


Figura 3.16 - Fluxograma do esquema de fluido (manual do PFC3D).