



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza

Instituto de Geociências

Departamento de Geologia

**ANÁLISE DE ESTRUTURAS SEDIMENTARES E
DUNAS BARCANAS EM SIMULAÇÕES
COMPUTACIONAIS**

Jéssica Zaroubin

Rio de Janeiro

Agosto de 2018

ANÁLISE DE ESTRUTURAS SEDIMENTARES E DUNAS BARCANAS EM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Jéssica Zaroubin

Trabalho de conclusão de curso
submetido ao departamento de graduação
em Geologia, Instituto de Geociências, da
Universidade Federal do Rio de Janeiro –
UFRJ, como requisito necessário à
obtenção do grau de Geólogo.

Orientadores:

Andrea Ferreira Borges

Eurípedes do Amaral Vargas Júnior

Renato Almeida de Oliveira

Rio de Janeiro

Agosto de 2018

ANÁLISE DE ESTRUTURAS SEDIMENTARES E DUNAS BARCANAS EM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Jéssica Zaroubin

Orientadora: Andrea Ferreira Borges
Coorientadores: Eurípedes do Amaral Vargas Júnior
 Renato Almeida de Oliveira

Trabalho de conclusão de curso submetido ao departamento de graduação em Geologia, Instituto de Geociências, da Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Bacharel em Geologia.

Aprovado em 09/08/2018, por:

Presidente: Dra. Andrea Ferreira Borges (UFRJ)

Dr. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior (PUC-Rio)

Renato Almeida de Oliveira (CITEEx)

Dr. Armando Prestes de Menezes Filho (UERJ)

Dr. Emílio Velloso Barroso (UFRJ)

Rio de Janeiro

Agosto de 2018

Dedico este trabalho à minha avó Maria da Annunciação Rocha Correia (*in memoriam*), ao meu marido Renato Almeida de Oliveira e aos professores orientadores que tive durante a jornada acadêmica, Andrea Ferreira Borges e Marcos de Castro Carvalho.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Fátima Rocha e Davis Zaroubin, que me deram condições de chegar até a Universidade, especialmente ao meu pai que trouxe palavras de força e estabilidade financeira durante esta jornada.

À minha avó Maria (*in memoriam*) que me criou, deu amor, cuidados, atenção e amizade durante meu crescimento.

Ao meu marido Renato Almeida de Oliveira, que todo amor, suporte e apoio foram mais que essenciais para que este trabalho existisse. Que me deu a mão em momentos difíceis e nunca deixou de acreditar em mim, estando sempre ao meu lado fazendo o possível para que eu superasse quaisquer desafios.

Ao meu amigo de Brasília, Henrique Lima, que ao perceber minha necessidade por um computador para realizar meu trabalho, ofereceu o seu único e pessoal para que eu pudesse terminar. Sou muito grata pelo seu gesto de gentileza e desprendimento.

À professora Andrea Borges, por ser, além de excelente orientadora, uma excelente pessoa, que nunca deixou de acreditar em mim, me apoiou e me deu as condições necessárias para superar meus desafios e crescer.

Ao professor Eurípedes Vargas, que, em um momento crucial, nos apresentou o programa SediFoam, utilizado neste trabalho, dando a possibilidade de continuar o tema.

À Fátima de Kwant, amiga e conselheira, e ao Ronivaldo, que me deram conselhos valiosos de organização, de vida e de fortalecimento.

Aos meus amigos de faculdade, Carlos, Mariana, Carolina e Allan, que tornaram essa jornada mais agradável.

À UFRJ pela formação de qualidade, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento em Pesquisa (CNPQ) pelas bolsas de iniciação e aos professores que, de alguma forma, sempre cuidaram, mesmo que veladamente, de mim.

Agradeço à todas as pessoas envolvidas no processo deste trabalho, professores e amigos, que foram facilitadoras e inspiradoras para que o trabalho fosse executado com êxito e grande qualidade.

*“om śrī gurubhyo namah / hariḥ om
sadāśivasamārambhāṁ ṣaṅkaracārymad�amāṁ |
asmadācāryaparyantāṁ vande guruparamparām ||
śrījaganmātaram devīṁ sthitadhīpadmakāsanāṁ |
hṛdayasāgarātītāṁ gomatiṁ praṇato’smyaham ||”*

“Saudações aos professores. Harih Om.

Eu saúdo a linhagem de professores que começa no eterno *Shiva*, passa por *Shankara* e termina no meu professor.

Eu permaneço em constante saudação à Deusa, mãe do universo, cujo conhecimento é pleno como a lótus, cujo coração ultrapassa os oceanos, que é a fonte dos *Vedas*”

RESUMO

Através do software recém-criado SediFoam, busca-se a visualização e compreensão de dunas, especialmente a barcana, que são unidades geomorfológicas cujo desenvolvimento ainda é pouco compreendido pois envolve diversas variáveis e não são uma estrutura estática. A simulação computacional permite que diversos cenários sejam criados e observados fora do campo e além do laboratório, dando flexibilidade, controle, melhor visualização do fenômeno e, por trabalhar em outra escala, o tempo de observação é menor.

Dunas barcanas são cristas de areia em forma de crescente, geradas em ambientes de fluxo unidirecional e de pouco aporte sedimentar, que possuem alta taxa de movimentação, por isso são objetos de estudos científicos e ambientais. Elas possuem dois chifres que apontam na direção do vento, que as diferem das demais formas de dunas existentes. Foram aplicadas às simulações regimes de vento, direção e intensidade, e granulometria compatíveis aos ecossistemas das dunas barcanas.

SediFoam é um software livre que realiza o acoplamento entre dois outros softwares: LAMMPS e OpenFOAM, que são responsáveis, respectivamente, pelo cálculo de interação entre partículas, através do método dos elementos discretos (DEM), e pelo cálculo da dinâmica de fluidos, através do CFD que resolve as equações de Navier-Stokes.

Foram geradas simulações tridimensionais a partir da evolução de uma camada irregular e de um cone inicial, em meio subaquático e eólico, submetidos a um fluxo uniforme. Assim, foi possível observar os mecanismos de transporte sedimentar envolvidos na criação de pequenas dunas.

Serão apresentados neste trabalho os resultados das simulações, a associação e interpretação das estruturas com as condições criadas e a influência dos parâmetros iniciais no desenvolvimento da simulação. Também serão abordadas as dificuldades da instalação e as limitações computacionais experienciadas.

ABSTRACT

Through the newly created software SediFoam, the visualization and understanding of dunes, especially the barchan, which are geomorphological units whose development is still little understood because it involves several variables and they are not a static structure. The computational simulation allows several scenarios to be created and observed outside the field and beyond the laboratory, giving flexibility, control, and better visualization of the phenomenon, by working on another scale, the observation time is shorter.

Barchan dunes are crescent-shaped sand ridges, generated in unidirectional flow environments with little sedimentation, which have a high rate of movement, so they are objects of scientific and environmental studies. They have two horns that point in the direction of the wind, which differ from the other forms of existing dunes. Wind regimes, direction and intensity, and granulometry compatible with the ecosystems of the Barchan dunes were applied to the simulations.

SediFoam is a free software that performs the coupling between two other software: LAMMPS and OpenFOAM, which are responsible, respectively, for the calculation of particle interaction, through the discrete element method (DEM), and for calculating the fluid dynamics through CFD that solves the Navier-Stokes equations.

Three - dimensional simulations were generated from the evolution of an irregular layer and of an initial cone, in an underwater and aeolian environment, submitted to a uniform flow. Thus, it was possible to observe the sedimentary transport mechanisms involved in the creation of small dunes.

The results of the simulations, the association and interpretation of the structures with the conditions created and the influence of the initial parameters in the simulation development will be presented in this work. Also discussed are the installation difficulties and the computational limitations experienced.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Escalas granulométricas [4].....	3
Figura 2.2 Curva granulométrica [5].	4
Figura 2.3 Exemplos dos tipos de seleção [6].	4
Figura 2.4 Exemplos de graduação em solos [7].....	5
Figura 2.5 Escala de arredondamento x esfericidade [8].....	5
Figura 2.6 Amostra de grãos de areia de praia à esquerda e de dunas próximas à essa praia, à direita [9].....	6
Figura 2.7 Alguns estágios sedimentares num cenário natural [4].....	7
Figura 2.8 Exemplos de tipos de erosão [11].	9
Figura 2.9 Foto do monumento da taça no Parque Estadual de Vila Velha, Ponta Grossa- PR....	9
Figura 2.10 Estrutura vertical da atmosfera. (a) A atmosfera é dividida em troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera. (b) A troposfera pode ser dividida em camada limite atmosférica e atmosfera livre. (c) A camada limite atmosférica pode ser dividida em camada superficial, camada de mistura e zona de entranhamento. (d) A camada superficial pode ser dividida em camada viscosa, rugosa e de fluxo constante [4].....	10
Figura 2.11 Aspectos básicos da circulação geral da atmosfera [4].....	12
Figura 2.12 Principais áreas desérticas do mundo (excluindo os desertos polares) [10]	13
Figura 3.1 Gráfico da tensão de cisalhamento x deformação.....	15
Figura 3.2 Exemplificação da difusão [12].....	16
Figura 3.3 Visão microscópica da tensão cisalhante [12].....	17
Figura 3.4 Transição do fluxo laminar para o turbulento [13]	18
Figura 3.5 Experimento de Reynolds, editado de [12].....	19
Figura 3.6 Esquema de amplificação ou amortecimento da turbulência em fluxos laminares [12].....	20
Figura 3.7 Diagrama do intercâmbio de uma propriedade P [12]	21
Figura 3.8 Distribuição da tensão total, turbulenta e viscosa [4]	22
Figura 3.9 Camada Limite [14]	23
Figura 3.10 Evolução da camada limite em uma lâmina [15]	24
Figura 3.11 Ponto de separação [12]	25
Figura 3.12 Esteira em um canal [12].....	25
Figura 3.13 Esteira em uma esfera [12]	26
Figura 3.14 Fluxo ao redor da esfera [12]	26
Figura 3.15 Forças de pressão e de cisalhamento em uma esfera a baixos valores de Reynolds [12]	27
Figura 3.16 Forças atuantes em uma esfera [4].....	28
Figura 3.17 Transições de fluxo através de um cilindro [13]	28
Figura 3.18 Fluxo a $Re \ll 1$ [12]	29
Figura 3.19 Fluxo a Re entre 10 e 150 [12]	29
Figura 3.20 Fluxo a Re entre 150 e milhares [12]	30
Figura 3.21 Fluxo a Re entre milhares e 2.10^5 [12]	30
Figura 3.22 Fluxo a Re maiores que 2.10^5 [12].....	30
Figura 3.23 Efeito da inércia relativa [12]	31
Figura 3.24 Efeito do tamanho relativo da partícula em relação aos vórtices [12]	31
Figura 3.25 Efeito da turbulência na velocidade de assentamento [12]	32
Figura 3.26 Principais tipos de canais [12].....	33

Figura 3.27 Perfis de velocidade em fluxos laminares e turbulentos em canal aberto e fechado [12].....	34
Figura 3.28 Divisão da camada limite em fluxos turbulentos em canal aberto [12].....	35
Figura 3.29 Influência da rugosidade na estrutura do fluxo [12].....	35
Figura 3.30 Esquema das forças junto à camada em superfícies rugosas [12].....	37
Figura 3.31 Influência do número de Re^* na classificação da superfície.	38
Figura 3.32 Esquema para análise dimensional da resistência do fluxo num cano [12].....	39
Figura 3.33 Diagrama de resistência [12].....	39
Figura 3.34 Forças em uma partícula numa camada sedimentar [12].....	40
Figura 3.35 Distribuição de tensões em uma camada sedimentar [12].....	41
Figura 3.36 Descrição das variáveis [12].....	42
Figura 4.1 Tipos de movimento em meio eólico [18].....	44
Figura 4.2 Tipos de movimentos sedimentares em meios aquosos [19].....	45
Figura 4.3 Trajetória típica da saltação [12].....	46
Figura 4.4 Distribuição de frequências de ângulos de ejeção e impacto de partículas em saltação de 0,5mm de vidro em túnel de vento [12].....	47
Figura 4.5 Modos de transporte de grãos de quartzo em Marte e na Terra [25].....	50
Figura 4.6 Formas de camadas sob fluxo unidirecional em canal aberto [27].....	51
Figura 4.7 Relação entre os tipos de dunas e as direções principais do fluxo [4].....	53
Figura 4.8 Esquema dos diferentes tipos de dunas [10].....	55
Figura 4.9 Vetores de velocidade em um fluxo através de uma duna barcana, simulado com CFD [24].....	56
Figura 4.10 Dunas barcanas no litoral do Pacífico, Peru (Foto: George Steinmetz).....	57
Figura 4.11 Esboço de uma duna barcana 3D [31].....	58
Figura 4.12 Esboço do perfil da duna barcana [22].....	58
Figura 5.1 Comparaçao entre os métodos numéricos [13].....	62
Figura 5.2 Exemplificação de malhas não-uniformes	63
Figura 5.3 Arquitetura OpenFOAM	65
Figura 5.4 Demonstração do processo de integração numérico [40].....	66
Figura 5.5 Fluxograma do DEM.....	66
Figura 5.6 Metodologia de detecção de contatos.....	67
Figura 5.7 Modelo mola-amortecedor.....	67
Figura 5.8 Cluster Beowulf [36].....	68
Figura 5.9 Fluxograma SediFoam.....	70
Figura 6.1 Interface do OVITO.....	76
Figura 7.1 Estrutura de arquivos.....	76
Figura 7.2 Posição inicial da camada matriz.....	78
Figura 7.3 Posição final da camada matriz.....	79
Figura 7.4 Camada matriz em perspectiva.....	79
Figura 7.5 Malha de simulação no eixo XZ.....	82
Figura 7.6 Malha de simulação no eixo XY.....	82
Figura 7.7 Gráfico da altura da célula versus posição do centro no eixo y.....	83
Figura 7.8 Fluxograma da criação do cone de partículas.....	86
Figura 7.9 Primeiro cone adicionado sobre a camada matriz reduzida.....	86
Figura 7.10 Cone de partículas resultante após 10 iterações.....	86
Figura 8.1 Foto da saída do blockMesh.....	89
Figura 8.2 Foto da saída do decomposePar.....	89
Figura 8.3 Foto dos logs de execução do SediFoam.....	90

Figura 8.4 Caso 1 para t =0 s	91
Figura 8.5 Caso 1 para t =4,22s.	92
Figura 8.6 Comparação das posições iniciais e finais para o Caso 1	92
Figura 8.7 Trajetória das partículas no Caso 1	92
Figura 8.8 Caso 2 para t =0 s.	94
Figura 8.9 Caso 2 para t = 4,29s.	94
Figura 8.10 Comparação das posições iniciais e finais para o Caso 2	95
Figura 8.11 Trajetória das partículas no Caso 2.	95
Figura 8.12 t = 0 para o caso 3.	96
Figura 8.13 t = 13,7 s para o Caso 3.	97
Figura 8.14 Trajetória das partículas no Caso 3.	97
Figura 8.15 Superfície da duna no Caso 3.	98
Figura 8.16 t = 0 para o Caso 4A.....	99
Figura 8.17 t = 2s para o Caso 4A.	100
Figura 8.18 t = 8,34s para o Caso 4A.	100
Figura 8.19 t = 12,18 s para o Caso 4A.	101
Figura 8.20 t = 0 para o Caso 4B.....	101
Figura 8.21 t = 3s para o Caso 4B.	102
Figura 8.22 t = 20 s para o Caso 4B.	102
Figura 8.23 t = 27s para o Caso 4B.	103
Figura 8.24 t = 37 s para o Caso 4B.	103
Figura 8.25 t = 46s para o Caso 4B.	104
Figura 8.26 t = 0,1 s para a Caso 5.....	105
Figura 8.27 t = 1 s para o Caso 5.	106
Figura 8.28 Trajetória das partículas para o Caso 5.	106
Figura 8.29 Histograma da velocidade das partículas à U = 0.10m/s.	107
Figura 8.30 Histograma da velocidade das partículas à U = 0.15m/s.	108
Figura 8.31 Histograma da velocidade das partículas à U = 0.20m/s.	108
Figura 8.32 Histograma da velocidade das partículas à U = 0.34m/s.	108
Figura 8.33 Variação da moda de velocidade com a velocidade do fluxo.	109
Figura 8.34 Envoltória de perfil vertical da duna.	109
Figura 8.35 Método de identificação de partículas aterrissando.	110
Figura 8.36 Histograma dos ângulos de ejeção.....	111
Figura 8.37 Distribuição dos ângulos de impacto.	111

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1 Dependências SediFoam.	72
Tabela 6.2 Dependências LAMMPS.....	72
Tabela 6.3 Dependências OpenFOAM	73
Tabela 8.1 Dados de entrada da simulação no Caso 1.....	90
Tabela 8.2 Dados de entrada da simulação no Caso 2.....	93
Tabela 8.3 Dados de entrada da simulação no Caso 3.....	95
Tabela 8.4 Dados de entrada da simulação no Caso 4A.	98
Tabela 8.5 Dados de entrada da simulação no Caso 4B.....	98
Tabela 8.6 Dados de entrada da simulação no Caso 5.....	104
Tabela 8.7 Tempo de execução e volumetria.	107

LISTA DE CÓDIGOS

Código 6.1 Script para instalação do OpenFOAM.....	73
Código 6.2 Script para instalação do LAMMPS.....	74
Código 6.3 Script para instalação do SediFoam.....	74
Código 6.4 Exemplo da saída do SediFoam.....	75
Código 7.1 Script em Perl para seleção das partículas iniciais.....	79
Código 7.2 Definição dos vértices da simulação.....	80
Código 7.3 Definição das células computacionais.....	81
Código 7.4 Arquivo <i>in.lammps</i> utilizado para criar o cilindro.....	83
Código 7.5 Script em Perl para tratar a saída do LAMMPS.....	84
Código 7.6 Script em Perl para processar a saída do SediFoam	85
Código 7.7 Transcrição do arquivo <i>transportProperties</i>	87

LISTA DE ABREVIATURAS

LES	Large Eddy Simulation
DEM	Discret Element Method
LAAMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
MIT	Massachusetts Institute of Technology
OpenFOAM.....	Open Field Operation and Manipulation
ITCZ.....	Intertropical Convergence Zone
CPU.....	Central Processing Unit
MPI	Message Passing Interface
Ghz.....	Gigahertz
Fr	número de Froude
NaCl	Cloreto de sódio
C_D	Coeficiente de arraste
KCl.....	Cloreto de potássio
Gb	Gigabyte
GPL	General Public License
RANS.....	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
FVM	Finite Volume Method
DNS.....	Direct Numerical Simulation
Re.....	número de Reynolds
β_c	parâmetro de Shields

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS.....	v
RESUMO.....	vii
ABSTRACT.....	viii
LISTA DE FIGURAS.....	ix
LISTA DE TABELAS.....	xii
LISTA DE CÓDIGOS.....	xiii
LISTA DE ABREVIATURAS.....	xiv
SUMÁRIO	xv
1. INTRODUÇÃO	1
2. GRÃOS, EROSÃO, ATMOSFERA E LOCALIZAÇÃO	3
2.1 Grãos	3
2.1.1 Diâmetro	3
2.1.2 Forma	5
2.1.3 Composição	6
2.2 Erosão.....	7
2.3 Atmosfera.....	10
2.4 Localização.....	11
3. FLUIDOS E FLUXOS	14
3.1 Fluidos	14
3.1.1 Pressão	14
3.1.2 Viscosidade.....	15
3.1.3 Difusão.....	16
3.2 Fluxo.....	17
3.2.1 Número de Reynolds.....	19
3.2.2 Turbulência.....	19
3.2.3 Fluxo Sobre Superfícies	23
3.2.4 Fluxo Através da Esfera	26
3.2.5 Fluxos em Canais	32
3.2.6 Limiar do Movimento Sedimentar	40
4. CONFIGURAÇÃO DE CAMADAS SEDIMENTARES GERADAS POR FLUXOS AQUOSOS OU POR VENTO	43
4.1 Tipos de Transporte Sedimentar	44
4.1.1 Rolamento e Rastejo	45
4.1.2 Saltação	45
4.1.3 Transição de Saltação para Suspensão	48

4.1.4 Suspensão.....	48
4.1.5 Movimento Sedimentar por Fluxo Aquático.....	49
4.2 Regimes de fluxo	50
4.2.1 Tipos de formas de leito.....	51
4.3 Dunas	52
4.3.1 Definição e Morfologia.....	52
4.3.2 Como as dunas se formam.....	55
4.3.3 Estudo das dunas de areia.....	56
4.3.4 Dunas Barcanas	57
4.4 Deposição	59
5. MÉTODOS COMPUTACIONAIS E PROGRAMAS	60
5.1 CFD	61
5.1.1 Discretização local das equações de Navier-Stokes para fluidos.....	63
5.1.2 OpenFOAM.....	63
5.2 DEM.....	65
5.2.1 Modelo matemático do movimento particular	67
5.2.2 LAMMPS	68
5.3 SediFoam- um solucionador de CFD-DEM.....	69
5.3.1 Interações Fluido-Partícula	71
6. INSTALAÇÃO	72
6.1. Instalação do OpenFOAM.....	73
6.2. Instalação do LAMMPS	74
6.3. Instalação do SediFoam	74
6.4. Instalação do OVITO	75
7. UTILIZAÇÃO DO SEDIFOAM	76
7.1. Arquivos do SediFoam	76
7.2. Arquivos do LAMMPS	77
7.3 Arquivos do OpenFOAM.....	77
7.4 Preparação das simulações	78
7.4.1 Criação da Camada Sedimentar	78
7.4.2 Criação da Malha de Simulação	80
7.4.3 Manipulação da camada sedimentar.....	83
7.4.4 Manipulação das condições ambientais.	87
8. SIMULAÇÕES	88
8.1 Simulações em meio aquoso.....	90
8.1.1 Camada Sedimentar com cone de Partículas à 0.10 m/s (Caso 1)	90

8.1.2 Camada Sedimentar com cone de Partículas à 0.15 m/s (Caso 2)	93
8.1.3 Camada Sedimentar com cone de Partículas à 0.20 m/s (Caso 3)	95
8.1.4 Camada Sedimentar à 0.34 m/s (Caso 4A e 4B)	98
8.2 Simulações em meio eólico.....	104
8.2.1 Camada sedimentar à 5 m/s (Caso 5)	104
8.3 ANÁLISE DOS RESULTADOS.....	106
8.3.1 Análise das simulações em meio aquoso	107
8.3.2 Análise das simulações em meios eólicos.....	110
9. CONCLUSÃO	111
BIBLIOGRAFIA.....	113

1. INTRODUÇÃO

As dunas barcas atraem pesquisadores pela sua forma excepcional e suas propriedades de estabilidade, desencadeando estudos para compreender sua formação, migração e comportamento. Elas podem ser encontradas em desertos, regiões costeiras, em regiões subaquáticas, porém, em menor tamanho, e em outros planetas.

Estudos sobre fluxos erodindo e moldando uma camada sedimentar são muito comuns de serem observados em áreas como geologia, engenharia, oceanografia, meteorologia, física e etc. A pesquisa da relação entre o fluxo e a evolução de uma camada é enriquecedora em diversos aspectos: deve-se existir conhecimento sobre os grãos, sobre o tipo de fluido, sobre as condições do local de estudo, sobre o fluxo em si, sobre os tipos de transporte sedimentar e as formas de camadas conhecidas, abordados durante a revisão bibliográfica nos Capítulo 2 ao 4.

A ciência sempre se dedicou a entender o comportamento dos fluxos fluidais sobre uma camada sedimentar através de estudos de campo, teoria e experimentos laboratoriais. Porém muito tem se alcançado, em termos de resultados, com a união entre modelagem matemática e simulações computacionais.

A pesquisa dá saltos de qualidade quando existe associação entre modelagem matemática, teoria, observação, dados experimentais e simulações computacionais. Através de simulações, é possível fazer a adaptação das mesmas condições ambientais e criar-se novos cenários, em ambientes moldáveis que requerem menos tempo e trabalho, em comparação aos estudos de campo desses fenômenos, menos custo que reproduções em laboratório, mais confiabilidade e controle das variáveis.

Para atender a necessidade de um programa que resolvesse não só a parte particular ou fluidal, mas ambas em conjunto, o SediFoam foi desenvolvido e criado por Heng Xiao, disponibilizado em 2014, que acopla dois programas, LAMMPS e OpenFOAM, e é responsável pela interação entre as partículas e estruturas turbulentas. É uma ferramenta robusta, de código livre, com ênfase em transporte sedimentar.

Neste programa, os métodos numéricos utilizados são DEM (método dos elementos discretos) e LES (simulação de grandes vórtices), o primeiro é feito pelo LAAMPS (simulador massivamente paralelo de átomos e moléculas em grande escala), responsável pelo cálculo da segunda lei de Newton para as partículas, e o segundo é feito pelo OpenFOAM (manipulador e operador de campos em código aberto), que é responsável pelo LES, que calcula as equações de Navier-Stokes para o fluxo. Uma

vantagem única da abordagem LES-DEM é a possibilidade de capturar as trajetórias individuais dos sedimentos.

O trabalho contém a compreensão dos modelos computacionais, e seus métodos numéricos, utilizados por cada uma das aplicações, no Capítulo 5, encerrando a revisão bibliográfica. A metodologia contém o passo a passo da instalação, a compreensão dos programas e a preparação das simulações, que é abordada no Capítulo 6 e 7. No capítulo 8 se encontram os resultados.

Este trabalho foi inspirado em 3 artigos do mesmo grupo de pesquisadores: “*Particle dynamics in self-generated dunes over a range of hydraulic and sediment transport conditions using LES-DEM*”, publicado em 2016 por Rui Sun, Heng Xiao e Kely Strom [1]; “*CFD-DEM simulations of current-induced dune formation and morphological evolution*”, publicado em 2016 por Rui Sun e Heng Xiao [2]; e “*SediFoam: A general-purpose, open -source CFD-DEM solver for particle-laden flow with emphasis on sediment transport*”, de 2016 por Rui Sun e Heng Xiao [3]. Todos utilizam o programa SediFoam e criaram base para a pesquisa aqui realizada.

O objetivo deste trabalho é explorar o funcionamento do programa SediFoam e tentar criar as condições para gerar uma duna barcana, bem como analisar as diferenças de transportes sedimentares em meios distintos e criar conteúdo inovador sobre a evolução de camadas sedimentares.

São feitas investigações em meios onde o fluido é água ou ar, variando-se as velocidades e as formas iniciais da camada. As formas iniciais podem ser um cone sobre uma camada irregular ou uma camada irregular (chamada aqui de camada matriz). As velocidades utilizadas são 0,10 m/s, 0,15 m/s, 0,20 m/s, 0,34 m/s e 5 m/s.

As dificuldades encontradas neste trabalho foram a compreensão de como funciona a comunicação entre os programas a partir do SediFoam, a instalação, as modificações na estrutura geral das condições iniciais da camada, o volume extremamente grande de dados, alguns *bugs* e a baixa capacidade de processamento do computador utilizado.

2. GRÃOS, EROSÃO, ATMOSFERA E LOCALIZAÇÃO

2.1 Grãos

Os processos dinâmicos entre grãos, do transporte à deposição, envolvem uma série de interações: partícula-fluxo, partícula-partícula e partícula-superfícies. Os grãos postos em movimento dependem muito da intensidade do fluxo e das características dos grãos e do fluido. A principais características dos grãos são o diâmetro, a forma e a composição:

2.1.1 Diâmetro

Classificação física referente à dimensão, no caso, o diâmetro ou diâmetro equivalente. Existem algumas escalas, a *Udden-Wertworth*, utilizada em sedimentologia pois é mais detalhada, a da Agência Brasileira de Normas Técnicas (ABNT), a *Attemberg*, a do Departamento de Agricultura dos Estados Unidos (USDA), do Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT), e dentre outras. Em partículas irregulares é utilizado o diâmetro nominal: o diâmetro de uma partícula esférica equivalente em volume (Figura 2.1) [4].

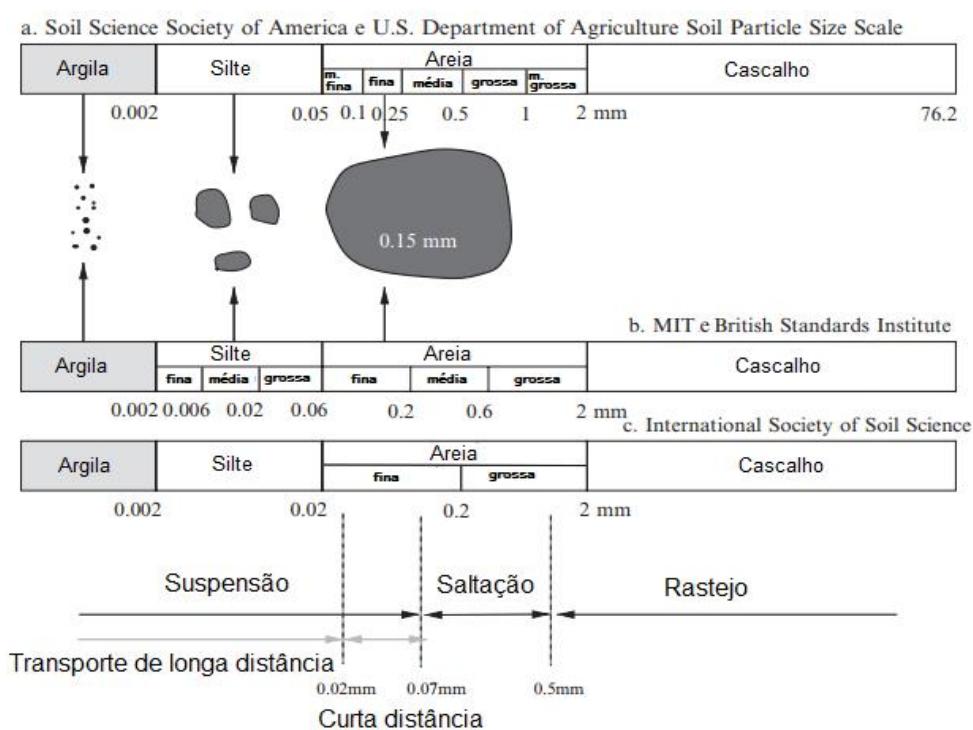


Figura 2.1 Escalas granulométricas [4].

Em uma amostra de sedimentos, são realizadas análises granulométricas, gerando gráficos de porcentagem do peso que passa em cada peneira (e também a porcentagem retida) por diâmetro da partícula, cuja leitura informará a frequência de determinadas faixas de tamanho e, assim, sobre a seleção desta amostra, por exemplo, se for bem selecionada, a curva vai possuir pontos mais próximos, e possuirá um perfil mais abrupto, se for mal selecionada, ela terá uma maior variação de tamanhos e, então, a curva será mais suave (Figura 2.2).

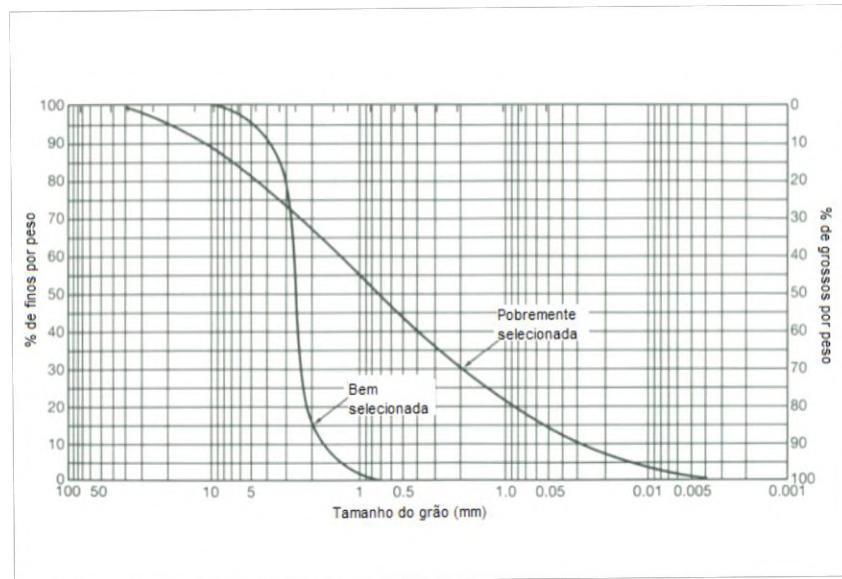


Figura 2.2 Curva granulométrica [5].

A Figura 2.3 mostra um exemplo de como são reconhecidos os tipos de seleção. Por outro lado, também pode-se olhar a graduação: uma amostra bem graduada possui uma distribuição contínua em ampla faixa de tamanhos de partículas, uma amostra de graduação uniforme apresenta, basicamente, um tipo de tamanho, não representando bem os outros tipos e uma amostra com graduação aberta apresenta alguns tamanhos, porém, verifica-se ausência de uma região granulométrica (Figura 2.4).

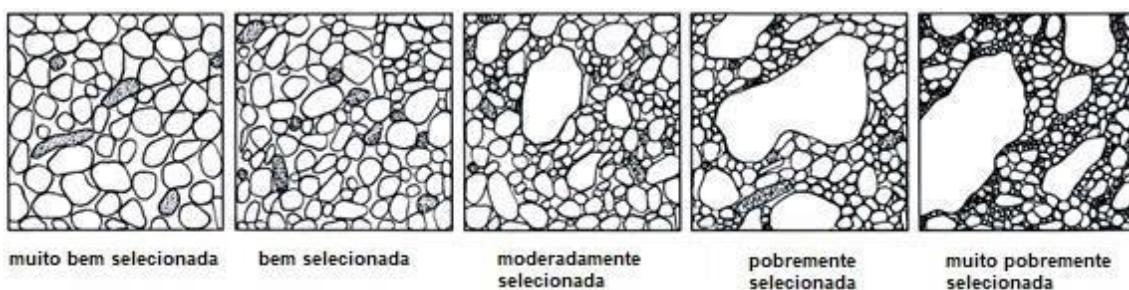


Figura 2.3 Exemplos dos tipos de seleção [6].



Figura 2.4 Exemplos de graduação em solos [7].

2.1.2 Forma

Baseando-se nas morfologias externas, as formas podem ser classificadas segundo a esfericidade (alta, média ou baixa) e segundo o arredondamento: muito angular, angular, subangular, subarredondada, arredondada e bem arredondada (Figura 2.5). Os grãos de areia postos em movimento, em geral, são bem arredondados. Mesmo considerando neste trabalho esferas perfeitamente redondas, vale lembrar que as formas arredondadas são a aproximação triaxial de três elipsoides, o de maior eixo, de eixo intermediário e o menor, e as partículas naturais podem ser mais complexas de definir, necessitando de várias variáveis independentes para descrever sua forma.



Figura 2.5 Escala de arredondamento x esfericidade [8].

A Figura 2.6, obtida de [9], mostra exemplares de grãos em ambiente de praia, à esquerda, e de duna, à direita. Os grãos da duna são melhores selecionados, bem arredondados e mais esféricos que os oriundos da praia. Estranhamente, os de duna, neste caso, são mais grossos, mesmo a amostra tendo sido proveniente de uma duna próxima, isso indica que as origens desses sedimentos são distintas. Essa diferença na forma afeta a rolabilidade e serve de indicador para a biografia do grão e o tempo exposto à erosão.

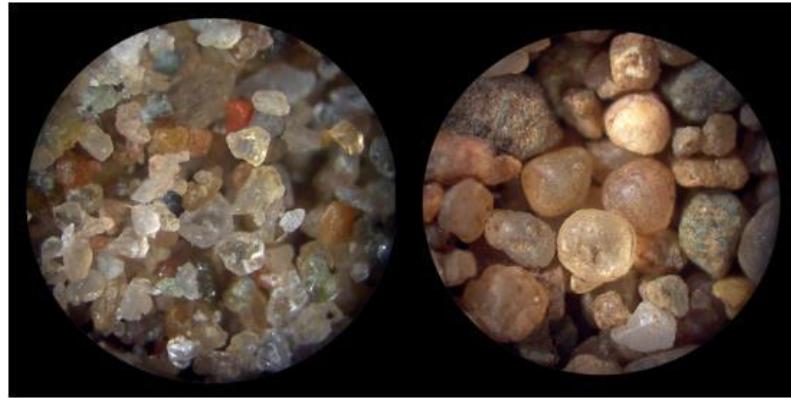


Figura 2.6 Amostra de grãos de areia de praia à esquerda e de dunas próximas à essa praia, à direita [9].

A forma afeta o tipo de movimento realizado, por exemplo, partículas achatadas tendem a se arrastar enquanto esféricas rolam e/ou saltam com mais facilidade. A velocidade das partículas tende a aumentar quanto maior sua esfericidade: o efeito da forma é mais relevante quanto mais baixas forem a velocidade de fluxo e do grão, mas se torna menos importante assim que as partículas são postas em suspensão.

É observado, na progressão de fluxos, que há uma diferenciação dinâmica de partículas com formas diferentes, as que se movem com mais facilidade vão mais à frente enquanto as outras tendem a ficarem mais estáveis ou presas, podendo até estarem imbricadas na direção do fluxo, porém, estes comportamentos dependerão do regime de fluxo e do tipo de transporte dominante, podendo ser observados, na camada, padrões erráticos.

2.1.3 Composição

A composição do grão está geneticamente relacionada à fonte que forneceu o sedimento e aos seus minerais mais abundantes. As dunas são majoritariamente compostas por grãos de quartzo, que são os minerais mais abundantes na crosta terrestre, além de grãos feldspáticos e sedimentos carbonáticos em geral, como restos de

conchas e corais. Mas existem algumas dunas com características marcantes ditadas pela composição, como: a Duna 45 em Sossusvlei, na Namíbia, o óxido de ferro intemperizado a colore de vermelho e, quanto mais antiga é a areia, mais intensa é a cor; a duna White Sand, no Novo México, EUA, onde os grãos de areia de gipsita são responsáveis pela cor branca das dunas; e as dunas Shifting Sand, em Ngorongoro, na Tanzânia, são escuras, magnéticas e compostas por sedimentos vulcanoclásticos, ainda são um mistério (sua forma é barcana).

A densidade também é importante, e é a medida da razão entre a massa e o volume da partícula. É o motivo de existirem grãos pequenos, porém densos, na mesma região que partículas maiores, pois possuem dinâmica similar.

2.2 Erosão

Segundo [10], a erosão é o conjunto de processos que desagregam e transportam solo e rochas, seja no sentido do fluxo ou da gravidade. O intemperismo e erosão são processos inseparáveis, muito importantes no ciclo das rochas e nos sistemas da Terra, assim como o vulcanismo e a tectônica. A Figura 2.7 ilustra alguns dos estágios sedimentares, como o intemperismo físico e químico das rochas, sua erosão, transporte de sedimentos por água, vento e geleira, e deposição.

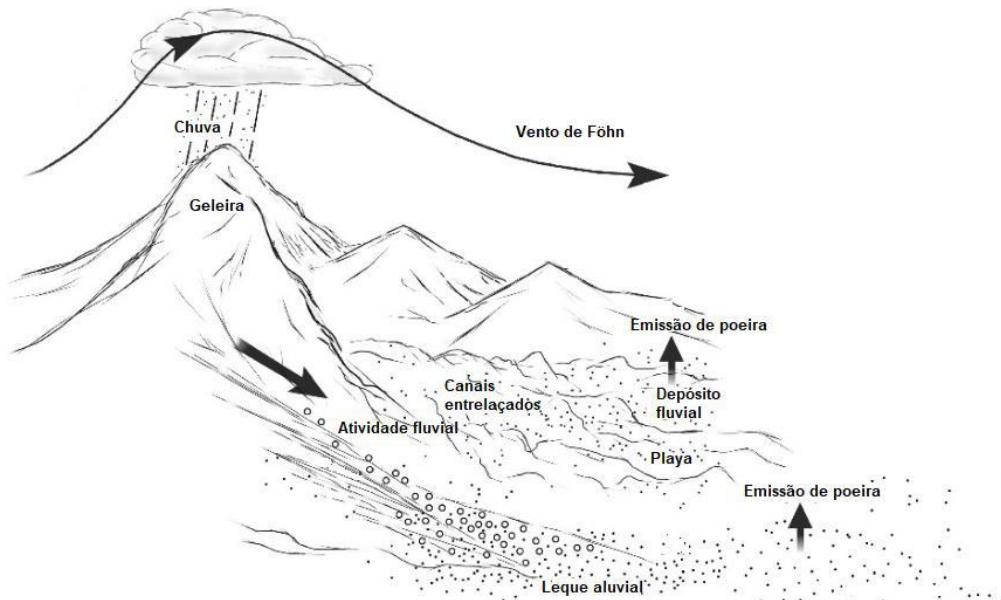


Figura 2.7 Alguns estágios sedimentares num cenário natural [4].

Na escala de tempo geológica, a erosão, um fenômeno geológico e climático, contribui para a circulação mineral, circulação de nutrientes, para o clima e para

formação da topografia. É o mecanismo principal para formação e evolução dos desertos e para o transporte de longo alcance de sedimentos do continente para o oceano. Os sedimentos em suspensão, os aerossóis, também podem contribuir com o sistema climático, uma vez que afetam a quantidade de radiação que chega ao local.

Quando os sedimentos são depositados e litificados, poderão vir a ser interpretados pelos cientistas, que correlacionarão estratificação, texturas e padrões com o clima vigente na época e com o tipo de paleoambiente [4].

Na história recente, as atividades humanas também criaram profundas perturbações no meio ambiente. Excesso de devastação da vegetação, muitos pastos e práticas agrícolas inadequadas, resultaram num aumento de frequência e intensidade da erosão em algumas partes do mundo. São solos mais expostos e com material mais solto, resultando em terras mais erodidas e menos férteis, já que o vento leva preferencialmente materiais mais finos, deixando material mais graúdo, menos retentor de água e pouco fértil, para trás.

Existem diversas fases durante o movimento de uma partícula, desde o arraste à sua deposição, e é muito complexo pois é afetado por diversos fatores, segundo [4], que incluem condições atmosféricas (como vento, chuva e temperatura), propriedades do solo (como textura, coesão e composição), características da superfície (como topografia, vegetação, elementos não erodíveis e umidade) e as práticas de uso do solo (pastoreio, agricultura, mineração e habitação).

A erosão pode ocorrer em diversas situações, as principais são: A erosão costeira, que ocorre ao longo da linha de costa, provocada pelas águas do mar através da forte ação do intemperismo químico e mecânico; a erosão fluvial, que é causada pelas águas dos rios nas suas margens e na camada sedimentar encontrada em seu fundo; a erosão pluvial, que gera a remoção de materiais da superfície, e tem seu poder aumentado em solos desmatados, ocorrendo devido aos respingos, ao escoamento de chuva e à sua infiltração; erosão glacial, causada pelo escorregamento de blocos de gelo que desgastam as rochas por onde passam; erosão gravitacional, que consiste no movimento de massas devido à força da gravidade; e a erosão eólica, que receberá especial atenção, responsável pelo movimento de sedimentos através do vento (Figura 2.8).

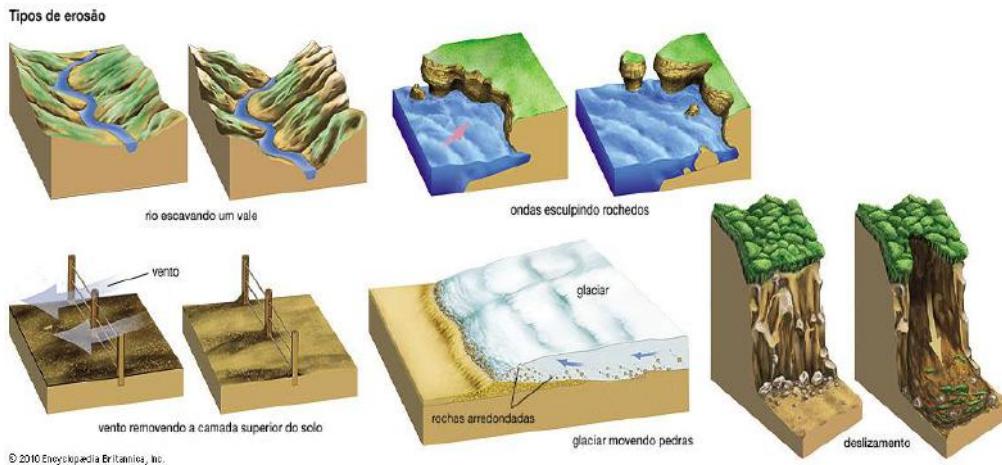


Figura 2.8 Exemplos de tipos de erosão [11].

A erosão eólica, cujo exemplo é mostrado através do monumento da taça na Figura 2.9, é consequência de dois tipos de forças segundo [4]: as forças que tendem a pôr as partículas em movimento, aerodinâmicas, e as forças que tendem a resistir ao movimento, de coesão entre partículas e gravidade, que serão amplamente abordadas nos próximos capítulos.

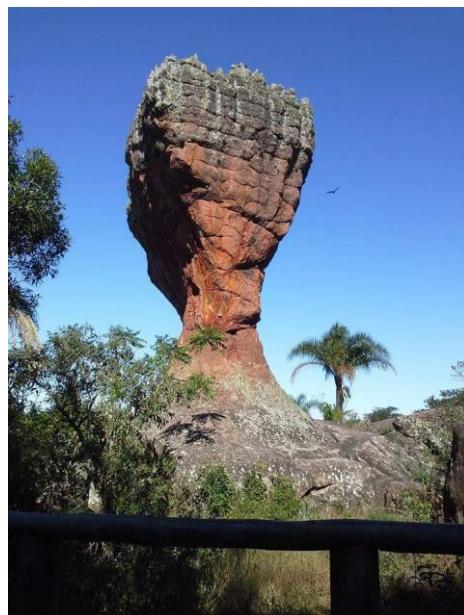


Figura 2.9 Foto do monumento da taça no Parque Estadual de Vila Velha, Ponta Grossa- PR.

A erosão possui diversas vertentes multidisciplinares, como: ciências atmosféricas, dinâmica de fluidos, física dos solos, geologia, hidrologia, ciências coloidais e ecologia, como também ciência da agricultura e administração do uso dos solos. E é retroalimentada pela sua própria ação, ou seja, além de afetar uma diversidade de fatores, é afetada por alguns deles, intensificando-se.

2.3 Atmosfera

Segundo [4], a atmosfera é dividida em troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera, cujas divisões são definidas pelo perfil de temperatura (Figura 2.10a). A troposfera tem por volta de 10 a 15 km, e é composta pela camada limite atmosférica e a atmosfera livre. A camada limite atmosférica possui entre 1 e 2 km acima da superfície, e é fortemente afetada pelas trocas de momento, energia e massa entre a atmosfera e a superfície, em escalas de tempo menores que um dia, tendo as seguintes características:

- Os fluxos são predominantemente turbulentos e o transporte de momento, energia e massa são realizados por vórtices de escala similar ou menor ao comprimento desta região;
- A sua estrutura varia no tempo e espaço;

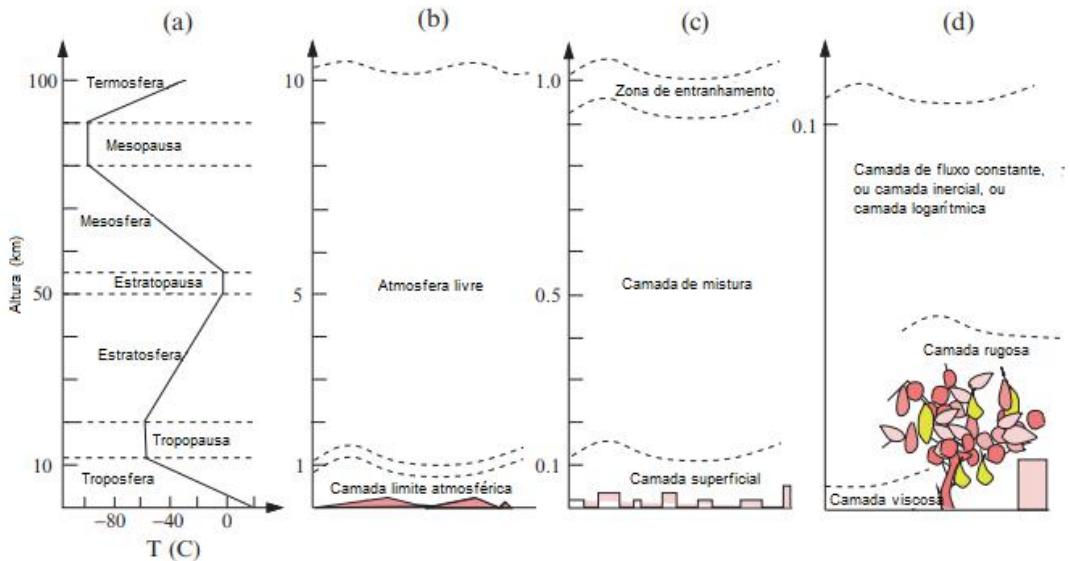


Figura 2.10 Estrutura vertical da atmosfera. (a) A atmosfera é dividida em troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera. (b) A troposfera pode ser dividida em camada limite atmosférica e atmosfera livre. (c) A camada limite atmosférica pode ser dividida em camada superficial, camada de mistura e zona de entranhamento. (d) A camada superficial pode ser dividida em camada viscosa, rugosa e de fluxo constante [4].

Na camada de superfície, algumas características atmosféricas, como temperatura, velocidade do vento e concentração de aerossol variam rapidamente com a altura, e a turbulência é gerada, predominantemente, pelo cisalhamento do vento, e os efeitos do empuxo são secundários. A compreensão desta camada é importante para os estudos de erosão eólica, pois: o arraste das partículas do solo é determinado pela transferência de momento, entre esta camada e a superfície, e porque os grãos em movimento estão confinados nela [4].

A camada de superfície é compreendida através da divisão segundo as características dominantes, listadas a seguir [4]:

- Camada inercial: A energia cinética turbulenta é gerada principalmente pelo cisalhamento do vento e dissipada através do efeito em cascata dos vórtices maiores até os menores.
- Camada de fluxo constante: A transferência vertical das características atmosféricas é dominada pela difusão turbulenta e o fluxo é praticamente uniforme com a altura.
- Camada logarítmica: o perfil vertical das características atmosféricas é, aproximadamente, logarítmico.

A superfície é considerada rugosa, devido a existência de elementos como plantas, edifícios e montanhas e pode ser determinada pelo número de Reynolds rugoso. Esses elementos rugosos podem alterar significativamente o fluxo próximo à superfície e a distribuição da tensão cisalhante na superfície, que pode ser erodível.

Para fluxos na camada limite atmosférica, a velocidade média é de, aproximadamente, 5 m/s e a altura =100 m, o que gera um número de $Re = 3 \times 10^7$, valor muito alto, sendo, praticamente sempre, turbulenta. Com isso, o termo da tensão cisalhante viscosa é quase sempre desprezado das equações de movimento do fluido. Já em camadas muito próximas à superfície, o número de Reynolds diminui e o fluxo se torna laminar, e a camada é chamada de viscosa, possuindo apenas alguns milímetros de espessura [4].

A transferência de momento da atmosfera para a superfície é o principal agente na erosão do vento. Na camada superficial da atmosfera, o vento sempre aumenta com a altura, a transferência de momento é sempre para baixo e a força de arraste é na direção do fluxo. A transferência de momento é realizada através dos movimentos moleculares e dos vórtices de turbulência, portanto, a tensão cisalhante total é composta pelo cisalhamento viscoso e turbulento [4].

2.4 Localização

A localização de dunas está conectada ao padrão de erosão terrestre que, por sua vez, está interligado à circulação da atmosfera. A distribuição de energia solar e do albedo é irregular: baixas latitudes recebem bastante energia enquanto as altas latitudes possuem déficit, o que gera uma circulação geral na atmosfera.

Conforme a Terra roda em torno do eixo, uma força inercial chamada de Coriolis atua continuamente nos fluxos atmosféricos. Junto ao gradiente de pressão, dominam o comportamento dos fluxos.

A circulação é caracterizada por três células, a Polar, Ferrel e Hadley, conforme Figura 2.11. Próximo ao equador, o ar quente sobe e segue em direção aos polos na alta atmosfera. Sobre influência da força de Coriolis, este fluxo obtém um momento direcionado para oeste, formando a corrente ocidental em torno de 30° N e 30° S. Nestas latitudes, o ar converge em altos níveis e desce, levando ao desenvolvimento a crista subtropical, que são regiões de alta pressão. A alta pressão na região subtropical, gera fluxos na baixa atmosfera em direção ao equador, o que completa a célula de Hadley. Novamente, devido à força de Coriolis, o fluxo de ar em direção ao equador adquire uma componente em direção ao leste, chamado de ventos alísios. A crista subtropical também gera fluxos em direção aos polos na baixa atmosfera. Na região polar, a situação é oposta, as gélidas superfícies fazem com o ar desça e flua em direção ao equador na baixa atmosfera. O ar movendo em direção ao equador converge em torno de 50° N e 50° S, com o ar originado da crista subtropical, formando a região de frente polar.

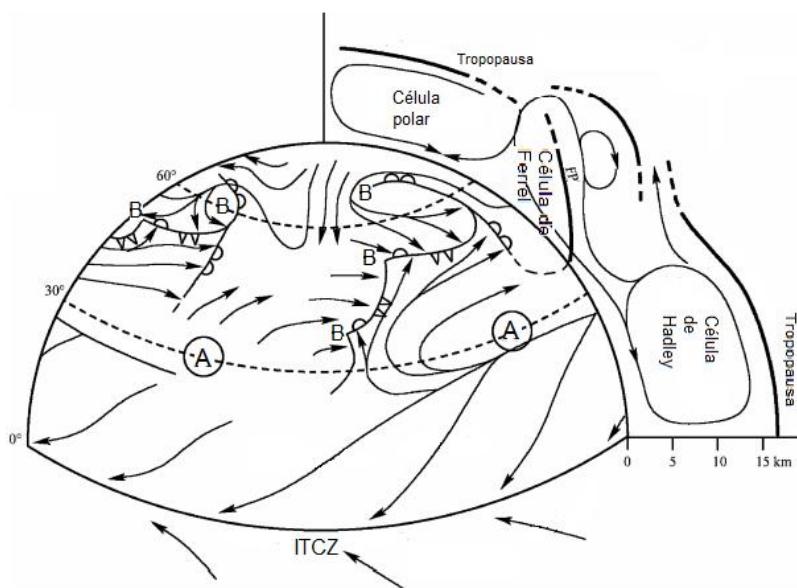


Figura 2.11 Aspectos básicos da circulação geral da atmosfera [4].

As três células de circulação meridional dão origem a três regimes de vento em cada hemisfério: os ventos alísios de baixas latitudes, os ventos ocidentais de média latitude e os ventos polares orientais. Esse padrão de circulação tem grandes implicações na distribuição do vento, precipitação, temperatura e na erosão do vento. Os

ventos alísios vindos dos hemisférios convergem próximo ao equador, formando a zona de convergência intertropical (ITCZ).

A distribuição irregular dos continentes, os oceanos e as montanhas também afetam as propriedades climáticas. As diferenças entre as temperaturas entre continentes e oceanos geram monções, que tem profundo efeito nas distribuições de vento e de chuva. As montanhas podem bloquear a entrada de massas de ar, por exemplo, as monções de verão na China não conseguem penetrar no interior do país, o que resulta em baixíssima precipitação e grande erosão.

A predominância das cristas subtropicais próximas às latitudes de 20°-30° N e S resultam na deficiência de chuvas, onde o ar descendente aumenta a instabilidade da atmosfera e previne a formação de nuvens, por causa disso as regiões mais áridas do mundo são encontradas nesta região, como o deserto do Saara, do Kalahari, da Namíbia, do Oriente Médio, de Thar, os desertos costeiros do norte do Chile, Peru, do sul da Califórnia e grandes áreas do centro e do oeste da Austrália. E podem ser encontradas em latitudes entre 30°-50° N e S, em regiões de bloqueios montanhosos ou muito distantes da sua fonte de umidade.

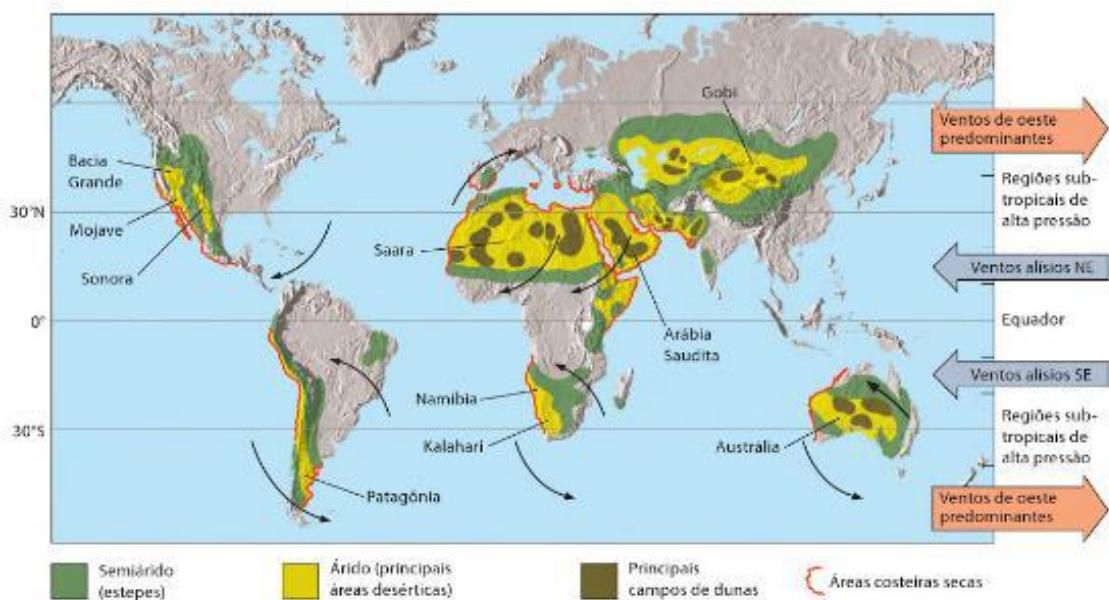


Figura 2.12 Principais áreas desérticas do mundo (excluindo os desertos polares) [10].

As dunas podem ser encontradas nestes ambientes: costeiros, desérticos, semiáridos e em ambientes subaquosos (porém, em menor escala e mais difíceis de serem observadas, em geral, são reproduzidas em canais em laboratório). Dunas também podem aparecer em outros planetas, como em Marte.

3. FLUIDOS E FLUXOS

3.1 Fluidos

Fluidos são substâncias que se deformam continuamente quando são submetidos à forças que variam espacialmente em termos de magnitude ou direção. A relação entre as forças deformadoras e a geometria da deformação depende do tipo de fluido, para o ar e água essa relação é simples e linear (pois são tratados como fluidos newtonianos). O fluido pode ser classificado como líquido, que é relativamente denso e mantém o volume definido, com a presença de uma superfície livre, e gases, que são menos densos e se expandem livremente se não forem confinados, e não formam uma superfície livre. Ambos diferem de sólidos rígidos, pois sólidos conseguem suportar a deformação, enquanto fluidos se deformam enquanto houver forças aplicadas.

Líquidos e gases diferem muito na sua estrutura em escala atômica: líquidos são mais densos, pois possuem maior empacotamento molecular, e o movimento afeta muito as moléculas vizinhas, pois estão muito próximas, enquanto gases, não comprimidos, consistem de átomos e moléculas dispersos que seguem um caminho livre, se esbarrando entre si e contra as superfícies ocasionalmente. Porém gases podem ser considerados como contínuos na escala macroscópica e se movem como um fluido.

3.1.1 Pressão

Pressão do fluido é uma força compressiva sobre área, que age igualmente em todas as direções em um determinado ponto do fluido, tendo ou não uma superfície sólida neste ponto. Em um fluido em movimento o conceito de pressão ainda é válido, porém, é introduzido o conceito de pressão dinâmica, obtido pela a diferença entre a pressão total, num ponto, e a pressão estática, que é ocasionada pelo peso do fluido acima deste ponto.

Em fluidos estáveis e incompressíveis, a pressão é regida pela equação de Bernoulli, que correlaciona a pressão (p) com a velocidade (v) e a densidade do fluido (ρ), conforme equação abaixo:

$$p_0 + \frac{\rho v_0^2}{2} = Cte \quad (3.1)$$

3.1.2 Viscosidade

A propriedade do fluido que caracteriza sua resistência à deformação, é intrínseca e não depende do movimento. Pode ser pensada como um “ atrito” que dificulta o escoamento. A viscosidade dinâmica (ou absoluta) é dada em termos de força necessária para mover uma unidade de área a uma unidade de distância, ou seja, ela associa a tensão de cisalhamento com o movimento do fluido. A tensão de cisalhamento é diretamente proporcional ao gradiente de velocidade, tendo como constante de proporcionalidade a viscosidade dinâmica, conforme a segunda Lei de Newton para a viscosidade (Equação 3.2), onde τ representa a tensão cisalhante, μ a viscosidade, V a velocidade, e y é a distância até base.

$$\tau = \mu \frac{dV}{dy} \quad (3.2)$$

A viscosidade cinemática é a relação entre viscosidade dinâmica e a densidade do fluido (Equação 3.3), que torna possível ser tratada sem a massa. A viscosidade cinemática do ar é maior que da água doce, já a viscosidade dinâmica é maior a da água que do ar, pois a densidade da água é muito maior.

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (3.3)$$

$$[\nu] = \frac{m^2}{s}; [\mu] = \frac{N.s}{m^2}$$

Em fluidos não newtonianos, a viscosidade é função da tensão cisalhante podendo não ter uma viscosidade bem definida, já em fluidos newtonianos, independe da tensão cisalhante, porém, varia com a temperatura, e a tensão cisalhante é proporcional à taxa de deformação do fluido (Figura 3.1).

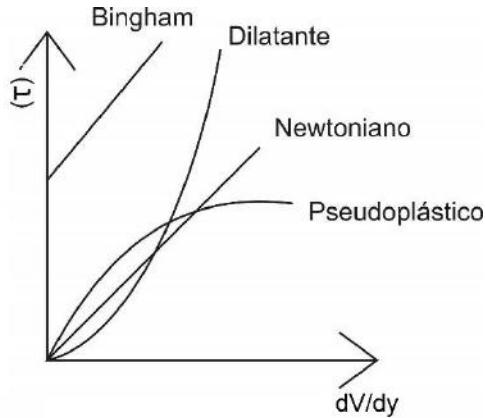


Figura 3.1 Gráfico da tensão de cisalhamento x deformação.

Em líquidos, quanto maior a temperatura, menor a viscosidade cinemática, já em fluidos gasosos, quanto maior a temperatura, maior a viscosidade cinemática. Isso ocorre pois em gases, as forças intermoleculares não são muito efetivas, a viscosidade vem da transferência de momento, então se a velocidade média das partículas aumenta, por causa da temperatura, aumenta a viscosidade. Já em líquidos, a elevada temperatura, afeta a energia cinética e o tempo que as moléculas passam próximas se torna menor, assim as forças intermoleculares se tornam menos efetivas e a viscosidade diminui [12].

3.1.3 Difusão

Difusão é um processo que carrega propriedades da matéria, como calor, momento, solutos, sedimentos de um meio para outro, através de movimentos randômicos (Figura 3.2), na presença de variações dessas propriedades, no sentido de tentar equilibrá-las.

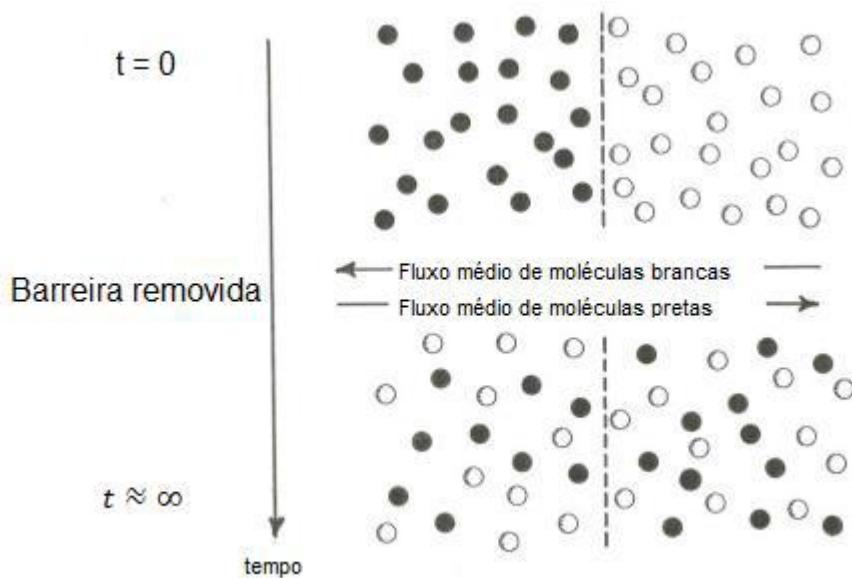


Figura 3.2 Exemplificação da difusão [12].

A viscosidade pode ser interpretada como um coeficiente de difusão para o momento molecular. Ao observar uma pequena região próxima ao plano de cisalhamento, pode-se perceber que as moléculas da vizinhança estão continuamente transitando de um lado para o outro do plano e, com isso, se chocam e transferem momento entre si, homogeneizando o momento local (Figura 3.3).

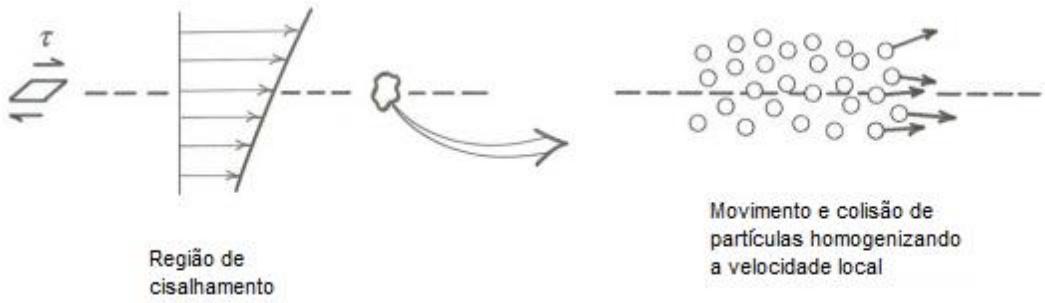


Figura 3.3 Visão microscópica da tensão cisalhante [12].

3.2 Fluxo

O fluxo representa a quantidade de fluido que atravessa uma superfície. Podendo ser tanto estáveis como não-estáveis, ou seja, os estáveis não mudam com o tempo e os não-estáveis mudam. E, analisando as linhas de fluxo de um fluido em escoamento, é possível identificar dois comportamentos distintos de grande relevância, laminar e turbulento.

Os fluxos laminares apresentam as linhas de fluxo paralelas, onde existem poucas agitações entre as camadas do fluido, enquanto o fluxo turbulento apresenta linhas de fluxo sinuosas. Apesar de ambos poderem transportar partículas, os fluxos turbulentos transportadores de partículas são bem mais importantes que os laminares, e representam um dos problemas mais difíceis da mecânica dos fluidos, parcialmente porque as partículas misturadas no fluido alteram a estrutura da turbulência e, em parte, pois as partículas alteram forma do meio por onde o fluxo transita. A força do fluxo sobre camadas sedimentares é melhor compreendida através da tensão cisalhante, que será amplamente abordada ao longo deste trabalho [12].

Além das características citadas, os fluxos podem ser classificados como: uniformes, aqueles que não mudam geometria ou características ao longo das secções transversais dos canais, e não-uniformes, nos quais a forma e área da secção transversal do fluxo podem variar ao longo do curso. Isso vale para canais abertos e fechados. Os fluxos produzidos em laboratório podem ser bem próximos da uniformidade, porém, este conceito é uma abstração, fluxos reais nunca são perfeitamente uniformes.

Os fluxos turbulentos e laminares apresentam características físicas muito diferentes, conforme pode ser visualizado na Figura 3.4, porém, o mesmo fluxo pode transitar de comportamento, podendo ser laminar ou turbulento.

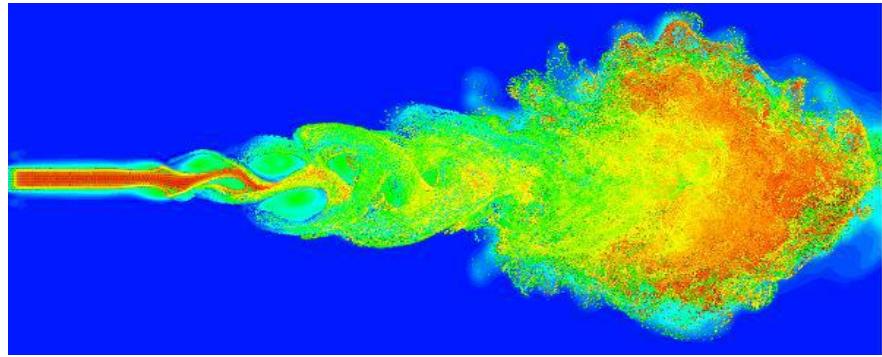


Figura 3.4 Transição do fluxo laminar para o turbulento [13].

Osborne Reynolds fez um trabalho pioneiro em 1883, um estudo experimental de fluxos através de canos que elucidam a transição entre um fluxo laminar e turbulento. Neste estudo, ele relacionou a densidade, que afeta as trocas de momento do fluido, a viscosidade, por afetar as tensões cisalhantes, a velocidade do fluxo, porque governa a inércia do fluido e as taxas de cisalhamento, e o diâmetro do tubo circular, que afeta a taxa de cisalhamento e a escala da turbulência. Estas variáveis podem ser combinadas na forma adimensional (Equação 3.4), chamada de número de Reynolds, que será detalhado neste capítulo [12].

$$Re = \frac{\rho U D}{\mu} \quad (3.4)$$

Em seu estudo, Reynolds aplicou um filete de tinta num cano em escoamento como mostra a (Figura 3.5 a e b), e variou a velocidade do fluido U , o diâmetro D e a viscosidade μ , calculando, para cada combinação, o número de Reynolds. Neste experimento ele percebeu que, ao variar D e U , existe um número de Reynolds fixo no qual o fluxo passa de laminar para turbulento. Assim, este número está associado ao modo de escoamento do fluido.

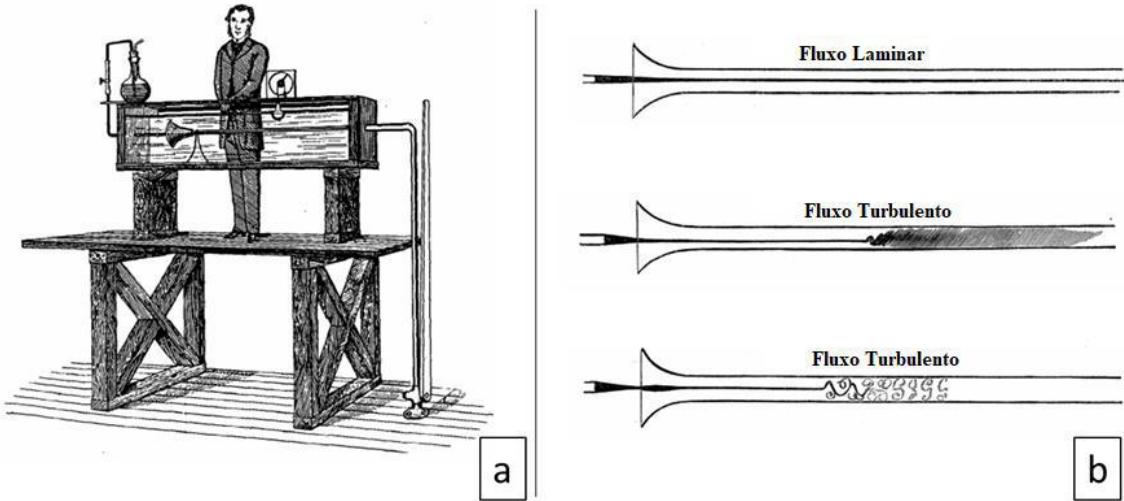


Figura 3.5 Experimento de Reynolds, editado de [12].

3.2.1 Número de Reynolds

É uma forma adimensional da relação entre as forças inerciais e as forças viscosas, é uma forma produtiva de simplificar a equação de movimento e ganhar algumas informações acerca da física do movimento, sendo conveniente para determinar se um fluido é laminar ou turbulento.

Formas variadas baseadas na Equação 3.4 são chamadas de números de Reynolds. Onde houver viscosidade e densidade envolvidas, assim como velocidade e comprimento característico, um número de Reynolds pode ser formado. Existem diversas formas possíveis de número de Reynolds, com diferentes velocidade e comprimentos, que dependem da escala do problema.

O número de Reynolds é extremamente interessante pois com ele é possível ajustar suas variáveis a ponto de conseguir que situações reais, ou difíceis de replicar em laboratório, sejam reproduzidas em escalas diferentes, porém, com real proporção entre as variáveis. Então, mantém-se o número de Reynolds igual, ajustando suas variáveis, para simular as mesmas forças e movimentos em escalas diferentes.

3.2.2 Turbulência

De forma genérica, a turbulência pode ser definida como uma componente de um movimento irregular aleatório ou estatístico que, em certas condições, se sobrepõe ao movimento médio do fluido quando ele passa por uma superfície sólida ou a uma corrente adjacente do mesmo fluido com velocidade diferente. Podendo ser vista como

uma assembleia de parcelas fluidais turbulentas, chamadas vórtices, que podem assumir diversos tamanhos e possuem movimento rotacional.

O principal efeito da turbulência é a adição de flutuações na velocidade, que passa a ter como característica marcante a incerteza, porém, existe a possibilidade de se obter um valor médio. A intensidade da turbulência pode ser medida através das variações da velocidade em relação à média, sendo, neste estudo, uma área rica para o tratamento estatístico. Tal análise pode ser feita através de dois métodos: pelo método Lagrangiano, que observa e mede as propriedades ao longo da trajetória de uma partícula; e o método Euleriano, que grava as medidas de um ponto fixo.

As dificuldades em se medir a turbulência experimentalmente são duas: a presença de um dispositivo distorce ou altera o fluxo e o volume efetivamente medido não é suficientemente pequeno para ser considerado pontual.

3.2.2.1 Origem da Turbulência

Uma análise matemática para a origem da turbulência consiste em introduzir pequenas flutuações em forma de onda na equação de movimento do fluido e observar se esta flutuação será amortecida ou amplificada, se sua amplitude crescer, eventualmente ocorrerá o desenvolvimento da turbulência.

A Figura 3.6 mostra distorção introduzida em um fluxo. Nela, pode-se observar, regiões de maior velocidade e de menor velocidade, o que, pela equação de Bernoulli, leva a regiões de baixa e alta pressão, respectivamente, o que gera um desbalanceamento nas forças de pressão e tende a acentuar esta distorção, acelerando o fluxo na direção da convexidade. Por outro lado, as forças viscosas tendem a aumentar com o aumento das diferenças de velocidade, amortecendo este cenário.

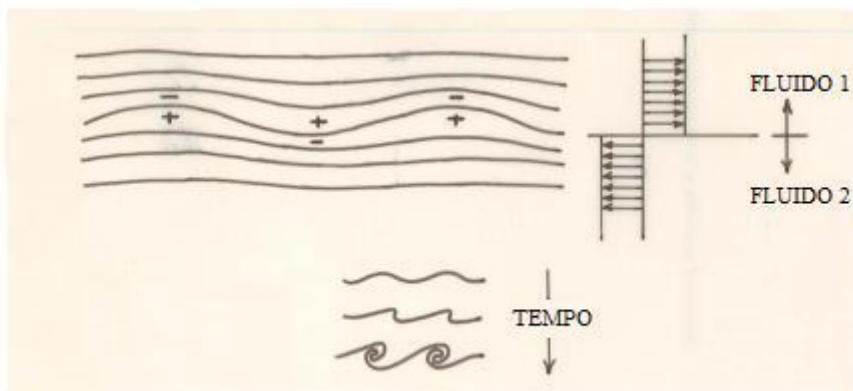


Figura 3.6 Esquema de amplificação ou amortecimento da turbulência em fluxos laminares [12].

3.2.2.2 Tensão de Cisalhamento em Fluxos Turbulentos

Devido à natureza probabilística da turbulência e ao fato dos vórtices atuarem como transportadores de massa, momento, calor, solutos e algumas propriedades (Figura 3.7), é natural concluir que a turbulência atua como um agente homogeneizador do fluido através de um processo chamado de difusão turbulenta.

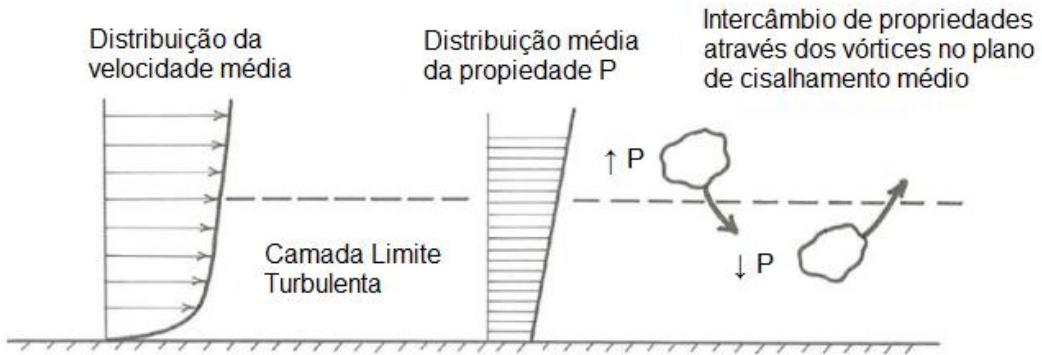


Figura 3.7 Diagrama do intercâmbio de uma propriedade P [12].

Em fluidos laminares não existem os redemoinhos para realizarem as trocas entre os planos de cisalhamento paralelos à base, mas moléculas se chocam e entrelaçam randomicamente entre os planos. E, em média, as moléculas em regiões acima do plano de cisalhamento possuem uma velocidade maior que as abaixo, e a troca de moléculas tende a igualar a distribuição de momento e, por consequência, a velocidade do fluido (Figura 3.3) [12].

Essa tendência dos movimentos moleculares em equilibrar a distribuição da velocidade em um fluido em cisalhamento é, em parte, uma causa física da resistência do fluido ao cisalhamento. Em líquidos, o efeito transitório da atração entre as moléculas é mais importante, porém, em gases, este efeito difusivo é o dominante. A viscosidade de um fluido é a simples medida da efetividade do movimento molecular e/ou de atrações moleculares em suavizar uma distribuição de velocidade não uniforme ou em manter a distribuição de velocidade contra a tendência do fluido em se acelerar.

Por outro lado, em fluxos turbulentos, existe um mecanismo de difusão adicional de transporte de momento: a troca de momento através dos planos gerada pelos vórtices, que tendem a equilibrar a distribuição de velocidade (Figura 3.3). Pela segunda lei de Newton, esta taxa de transporte de momento é equivalente à tensão cisalhante através do plano, o que é chamado de tensão cisalhante turbulenta ou tensão de Reynolds. E tem

exatamente o mesmo efeito que uma força de atrito exercida entre as camadas do fluido sob cisalhamento.

A tensão cisalhante em um plano de cisalhamento, em um dado fluxo, é a soma da tensão cisalhante turbulenta, causada pela difusão macroscópica dos momentos do fluido, com a tensão cisalhante viscosa, que é causada em parte pela difusão de momentos do fluido e em parte pelas forças atrativas entre as moléculas no plano cisalhante.

Segundo [12], assumindo que o fluxo é estável e uniforme na sua média, a distribuição da tensão cisalhante é linear, sendo zero na superfície e máxima na base, para fluxos turbulentos ou laminares. Excetuando as regiões muito próximas da base, onde a componente normal da velocidade de turbulência deve ser zero, a tensão cisalhante turbulenta é muito maior que a viscosa pois a troca de massas pelos vórtices atua numa escala muito maior que os movimentos moleculares, tornando, assim, a troca de momento muito mais eficiente. O que pode ser visualizado na Figura 3.8.

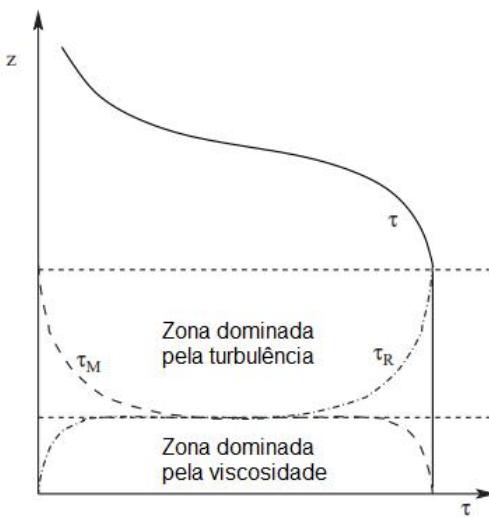


Figura 3.8 Distribuição da tensão total, turbulenta e viscosa [4].

Resumindo, a turbulência atua como um agente homogeneizador das propriedades do fluxo, o que torna o gradiente de velocidade de fluxos turbulentos muito mais suave que o laminar. Porém, próximo aos limites, este gradiente se torna muito mais abrupto por causa da tensão cisalhante viscosa ser maior que a turbulenta, nessas regiões, e, pela condição de não-escorregamento nos limites, a velocidade deve ir à zero.

3.2.3 Fluxo Sobre Superfícies

Ao entrar em contato com uma superfície sólida, o fluido se adere a ela de forma muito intensa, onde as forças de adesão superam as de coesão, o que leva a velocidade relativa, entre a superfície e fluido, ser nula, este fenômeno é conhecido como condição de não-escorregamento.

Este fenômeno é utilizado como condição de contorno, na resolução dos problemas em mecânica de fluidos, e de fundamental importância na compreensão dos fenômenos que serão descritos a seguir.

3.2.3.1 Camada Limite

A camada limite é a região do fluxo na vizinhança imediata de uma superfície sólida na qual o movimento do fluido é afetado pela força de fricção exercida pela superfície (Figura 3.9). Devido à condição de não-escorregamento, será criado um forte gradiente de velocidade entre o fluxo e a superfície, o que causará um forte cisalhamento que será transmitido dentro da região definida como camada limite.

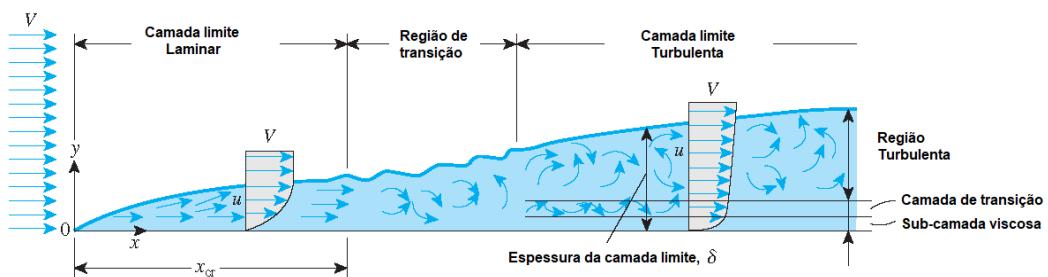


Figura 3.9 Camada Limite [14].

A Figura 3.10 mostra a evolução da camada limita em torno de uma lâmina, onde o fluxo sofrerá uma forte desaceleração, devido à condição de não escorregamento, gerando uma forte tensão cisalhante que, conforme o fluxo varre a lâmina, é transmitida às camadas superiores, homogeneizando o perfil de velocidade. A velocidade do fluxo livre é representada por v_e e u é a velocidade local, R é a força de fricção, τ_w é tensão cisalhante na superfície da lâmina e τ é a tensão cisalhante local, δ é a altura da camada limite e L é a distância do começo da perturbação, causada pelo objeto laminar, até um ponto de análise [15].

O fluxo nas camadas limites podem ser tanto laminar como turbulento. Uma camada desenvolvida a partir de um objeto imerso ou no início de um canal ou de um cano, se inicia como laminar, porém, se a camada limite tiver a chance de se

desenvolver por longas distâncias, ela, abruptamente, se tornará turbulenta. Ao se tornar turbulenta, a espessura da camada limite aumenta mais rápido porque os vórtices atuam incorporando o fluido da corrente livre.

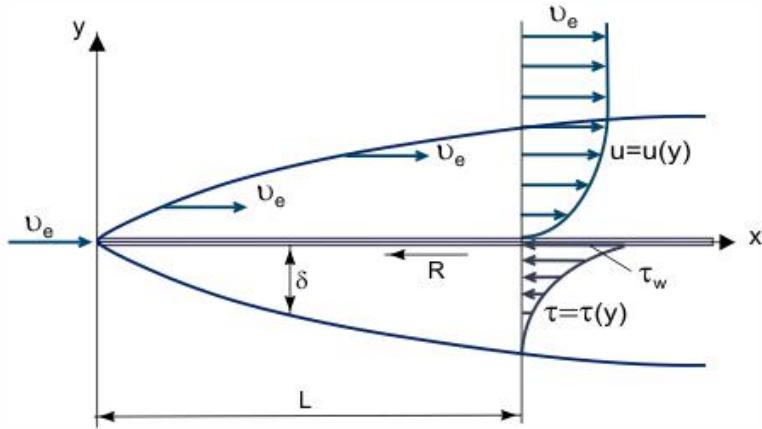


Figura 3.10 Evolução da camada limite em uma lâmina [15].

A espessura da camada limite é determinada pela magnitude relativa destes dois efeitos: a influência do retardamento do fluido causado pela fricção, conforme ele avança sobre a superfície do sólido, e pela transferência de momento do fluido. De forma que, quanto maior a influência do segundo efeito, mais fina será a camada limite, e quanto maior a ação do primeiro, maior será a camada.

A taxa de espessamento da camada limite pode ser grosseiramente representada pela razão entre a eficiência de propagação da tensão cisalhante e o transporte de momento do fluido na direção do fluxo (Equação 3.5). Assim, a taxa de espessamento varia inversamente ao número de Reynolds (Re_δ) referente à espessura da camada limite.

$$\frac{\text{Propagação da tensão cisalhante}}{\text{Transporte de momento}} = \frac{\frac{\mu U}{\delta}}{\rho U^2} = \frac{\mu}{\rho U \delta} = \frac{1}{Re_\delta} \quad 3.5$$

3.2.3.2 Separação do Fluxo

Sob números de Reynolds altos, o padrão do fluxo através de corpos ou canais com expansão se diferem radicalmente da teoria do fluido invíscido. Próximo ao ponto onde a superfície começa a divergir (ponto separação), a camada limite rompe. Esse fenômeno se chama separação de fluxo, que ocorre no começo da abertura.

A região após o ponto de separação é ocupada por um fluido estagnado, com, aproximadamente, a mesma velocidade da superfície. Nesta região, existe um padrão

instável de vorticidades apenas com uma pequena circulação, como exibido na Figura 3.11.

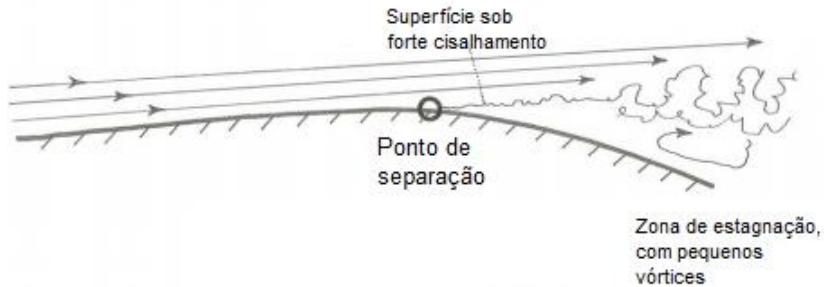


Figura 3.11 Ponto de separação [12].

Assim que a camada limite deixa de ter influência direta da superfície, o fluxo entra em contato com um fluido muito mais lento, o que causa fortes tensões cisalhantes. A superfície de cisalhamento é instável e, a uma pequena distância do ponto de separação, ela se torna ondulada e então quebra de forma a produzir turbulência.

A turbulência se difunde no fluxo livre, podendo ser, eventualmente, amortecida pelo cisalhamento viscoso, porém, seu efeito é percebido por uma longa distância no sentido do fluxo.

Esta região de estagnação do fluido dentro da superfície de separação, junto com a região de forte turbulência desenvolvida nesta superfície, é chamada de esteira (Figura 3.12). Olhando mais à frente no fluxo, a turbulência é mais fraca e a média da velocidade do fluido é ligeiramente menor.

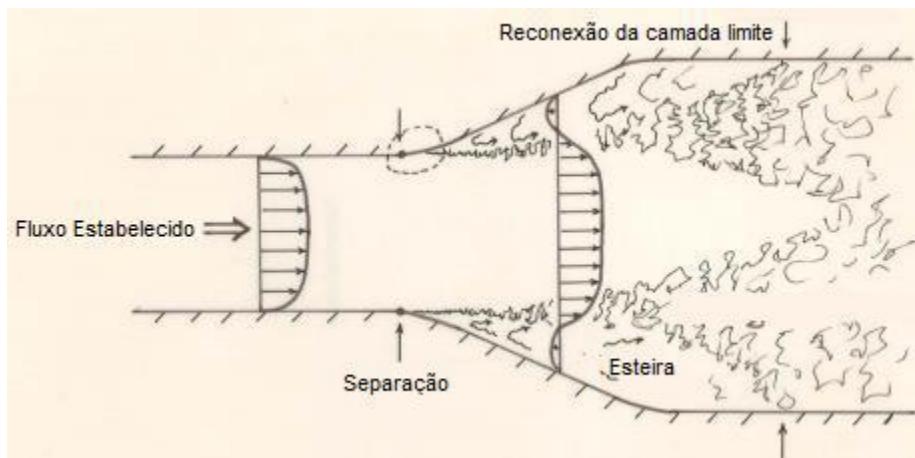


Figura 3.12 Esteira em um canal [12].

Em situações em que o fluxo passa por um objeto de tamanho finito envolvido pelo fluido, a camada limite não tem chance de se desenvolver além da vizinhança deste

corpo. Após o fluxo varrer objeto, ele sofre um retardamento, esta zona retardada e turbulenta também é chamada de esteira (Figura 3.13).

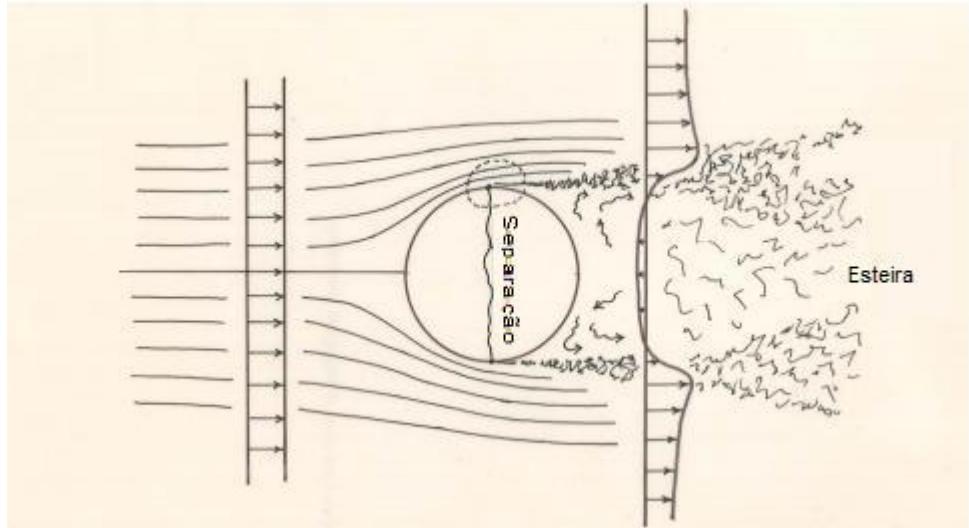


Figura 3.13 Esteira em uma esfera [12]

3.2.4 Fluxo Através da Esfera

O fluxo através de um sólido obedece a condição de não-escorregamento, o que implica que haja um gradiente de velocidade na superfície e proximidades. Esse gradiente de velocidade gera uma tensão cisalhante.

Sob baixos números de Reynolds, $Re \ll 1$, não ocorre a separação do fluxo e as linhas de fluxo são simétricas a frente e atrás da esfera (Figura 3.14), sendo retas e uniformes distante da partícula, mas são defletidas ao passar por ela. A uma certa distância à frente no fluxo, as linhas se tornam ligeiramente mais espaçadas, indicando que houve uma perda de velocidade, esse comportamento é oposto sob números de Reynolds elevados, que será explicado à frente.

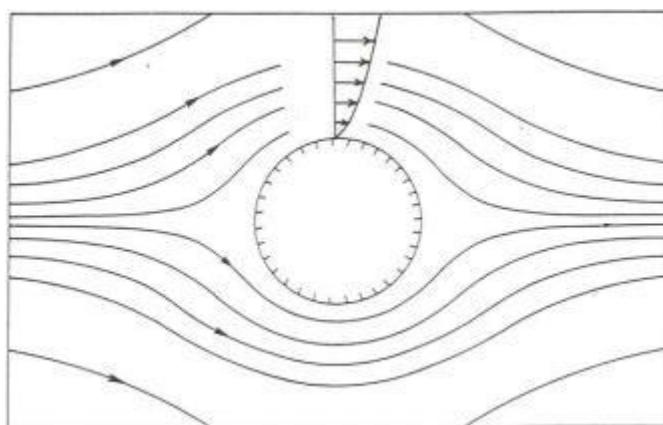


Figura 3.14 Fluxo ao redor da esfera [12].

Ao se mover em relação ao fluido, a partícula sofrerá a ação de uma força de arraste, que se origina pela diferença de pressão entre as regiões frontal e traseira, e pela ação da tensão cisalhante viscosa (Figura 3.15) [4].

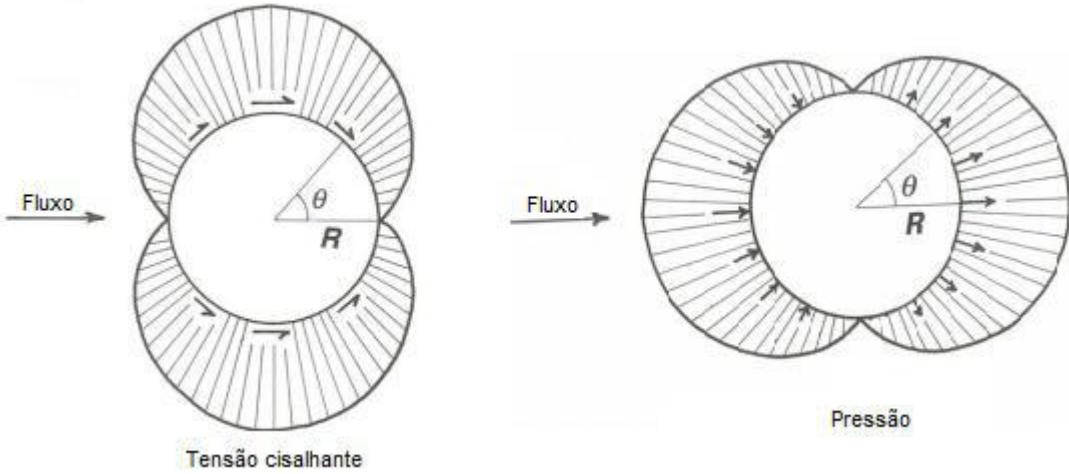


Figura 3.15 Forças de pressão e de cisalhamento em uma esfera a baixos valores de Reynolds [12].

Em cada ponto da superfície da partícula é aplicado uma pressão do fluido (normal à superfície) e uma tensão cisalhante viscosa (tangencial à superfície), a Figura 3.15 dá uma ideia da distribuição dessas forças. A tensão cisalhante viscosa deve ser maior nas regiões acima e abaixo da esfera e menor à frente e atrás, pois são nesses locais em que a velocidade próxima à superfície da esfera é maior. A distribuição da pressão tem comportamento oposto, alta na frente e atrás da esfera e baixa em cima e embaixo.

Ao somar ambas, pressões e tensão cisalhante viscosa sobre a superfície, levando em consideração a característica vetorial e a simetria do fluxo, se obtém uma resultante direcionada no sentido do fluxo que é chamada de força de arraste.

A Figura 3.16 ilustra a força de arraste, de suspensão e do efeito Magnus atuando sobre uma partícula esférica. O item a, apresenta o arraste devido ao efeito viscoso, à separação do fluxo e à turbulência na região de esteira. As pressões mais altas na esfera estão representadas pelo sinal de positivo e as mais baixas pelo sinal de negativo. O item b apresenta a suspensão devido ao efeito de Bernoulli. O item c representa a força de Magnus devido à combinação do efeito de Bernoulli e as forças viscósas em uma esfera rotacionando.

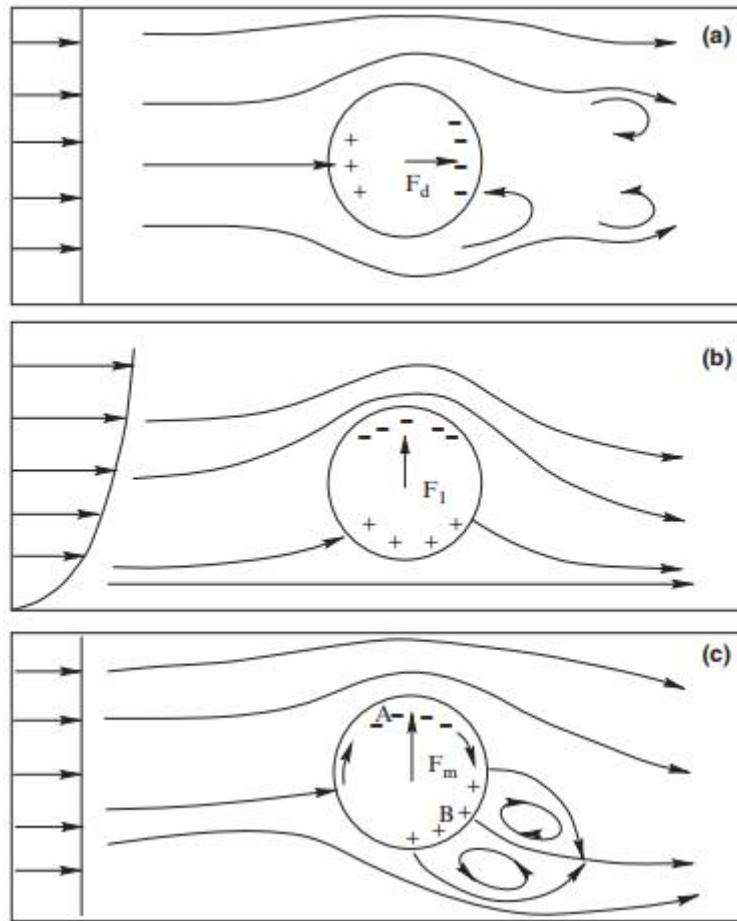


Figura 3.16 Forças atuantes em uma esfera [4].

Conforme o número de Reynolds aumenta, a separação do fluxo se desenvolve gradualmente e corresponde a uma mudança no regime do fluxo, antes dominado pelos efeitos da tensão cisalhante, para um regime dominado pelos efeitos da separação, com as forças da pressão muito mais influentes. Esta mudança é refletida diretamente na força arraste. A Figura 3.17 exemplifica o comportamento do fluxo para alguns números de Reynolds.

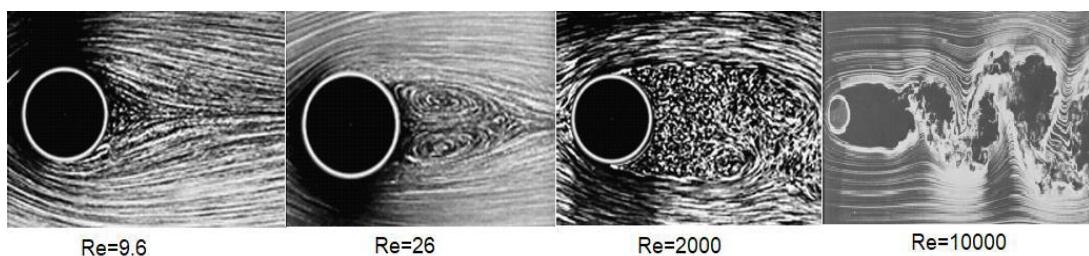


Figura 3.17 Transições de fluxo através de um cilindro [13].

A seguir, serão mostrados diversos fluxos com diferentes números de Reynolds e a correspondente posição da força de arraste em um gráfico de coeficiente de arraste versus Reynolds [12]:

Re<<1: Representado pela Figura 3.18, que mostra um fluxo laminar, típico de velocidades muito baixas e alta viscosidade, suas linhas de fluxo são simétricas na frente e atrás. Este caso não possui uma camada limite bem definida, a lei de Stokes é válida neste regime, e o coeficiente de arraste é inversamente proporcional ao número de Reynolds. As forças viscósas são predominantes e a inércia do fluido é negligenciável. Embora não mostrado na figura, a velocidade do fluxo aumenta somente gradativamente longe da superfície da esfera.

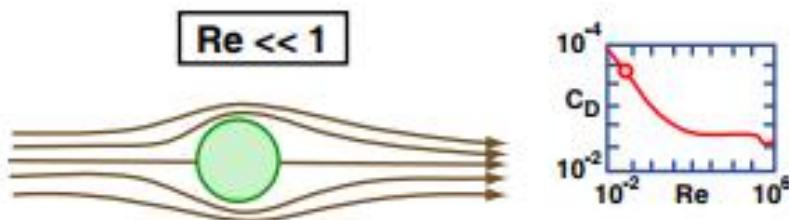


Figura 3.18 Fluxo a $\text{Re} \ll 1$ [12].

Re~ 10-150: A partir deste ponto, a lei de Stokes passa a falhar. A separação começa a ocorrer com o número de Reynolds em torno de 24, o ponto de separação é na parte de trás da esfera e resulta na formação de vórtices anelares. O fluxo nestes vórtices é ligeiramente regular e previsível. Com o aumento do número de Re, o ponto de separação aparece mais à frente, e os seus vórtices se tornam menos estáveis, passando a oscilar no sentido do fluxo (Figura 3.19).

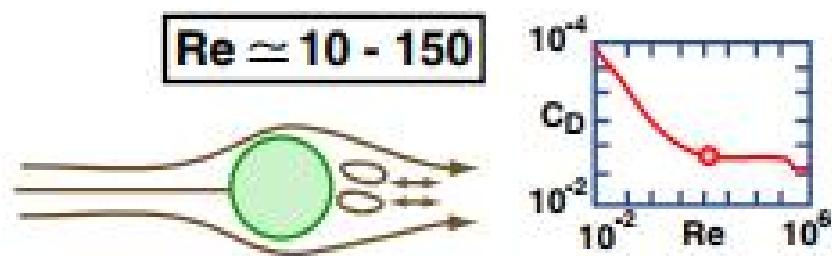


Figura 3.19 Fluxo a Re entre 10 e 150 [12].

Re entre 150 e milhares: Nesta faixa, a turbulência começa a se desenvolver na região de esteira, à princípio, se desenvolve principalmente na fina camada de forte cisalhamento produzida pela separação do fluxo e então se espalha à jusante (Figura 3.20).



Figura 3.20 Fluxo a Re entre 150 e milhares [12].

Re de milhares a $2 \cdot 10^5$ Neste regime, a força de pressão é dominante sobre as forças viscosas e o coeficiente de arraste é, aproximadamente, 0.5, e independe do número de Reynolds. Possui uma região de esteira plenamente desenvolvida (Figura 3.21).

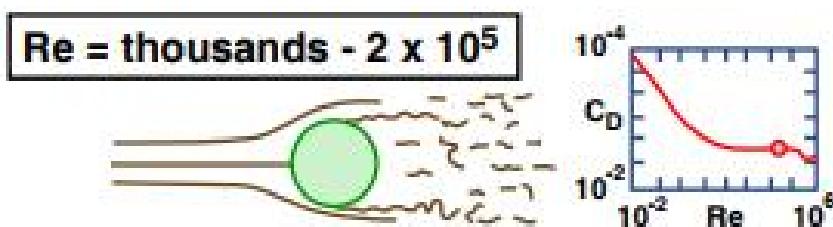


Figura 3.21 Fluxo a Re entre milhares e $2 \cdot 10^5$ [12].

Re $> 2 \cdot 10^5$: Para estes valores de número de Reynolds, a camada limite sobre a esfera transita de um fluxo laminar para turbulento, e a distribuição de pressão em torno da esfera é drasticamente alterada, resultando em uma queda brusca no coeficiente de arraste, de 0.5 para 0.1 (Figura 3.22).

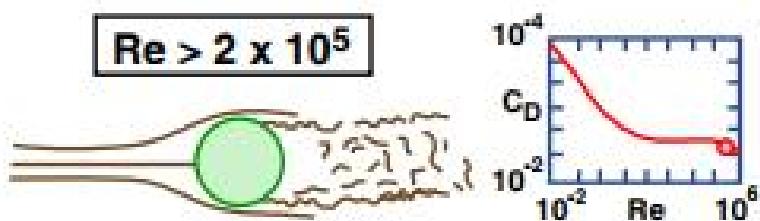


Figura 3.22 Fluxo a Re maiores que $2 \cdot 10^5$ [12].

Ao se mover em fluido turbulento a partícula sofrerá a ação de forças que variam localmente e temporalmente, tendo uma trajetória sinuosa e com velocidade irregular, cujo os principais efeitos físicos atuantes no seu movimento estão listados abaixo, segundo [12]:

Inércia Relativa: É expressa pela razão da densidade do sedimento pela densidade do fluido, ρ_s/ρ , onde, para valores muito maiores que 1, o efeito da turbulência praticamente não afeta a trajetória da partícula (Figura 3.23 A), entretanto,

para valores próximos a 1, a turbulência afeta fortemente o movimento dela (Figura 3.23 B).

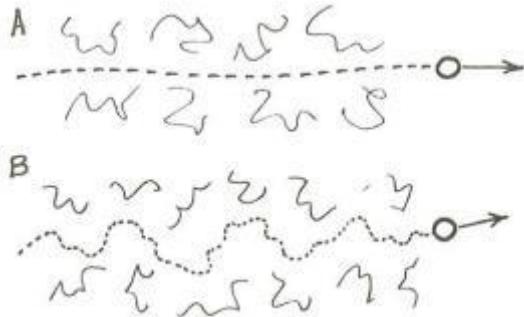


Figura 3.23 Efeito da inércia relativa [12].

Tamanho da partícula x tamanho do vórtice: Se a partícula for muito maior que os vórtices turbulentos, ela terá a sua trajetória pouco afetada, porém, sua velocidade sofrerá pequenas flutuações causadas pela influência dos vórtices na força de arraste (Figura 3.24 A). Em contrapartida, se a partícula for menor que os vórtices que a cercam, a sua trajetória, influenciada pela circulação deles, será sinuosa, com maiores flutuações na velocidade (Figura 3.24 B);

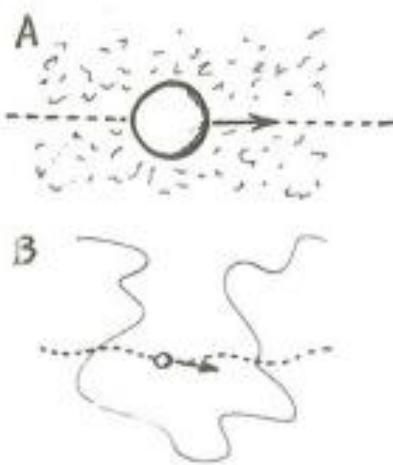


Figura 3.24 Efeito do tamanho relativo da partícula em relação aos vórtices [12].

Flutuações na velocidade de turbulência relativa à velocidade da partícula: Este efeito é especialmente relevante para o assentamento das partículas. Se as flutuações da componente vertical da velocidade de turbulência forem muito maiores que as velocidades de assentamento, então, a partícula terá uma trajetória altamente sinuosa, com frequentes inversões da componente da velocidade vertical. Por outro lado, se essas flutuações forem muito menores que a velocidade de assentamento, ela será pouco afetada pela turbulência;

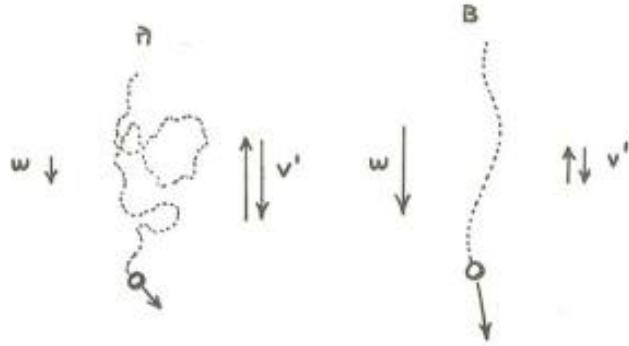


Figura 3.25 Efeito da turbulência na velocidade de assentamento [12].

3.2.5 Fluxos em Canais

Os canais podem ser classificados em abertos, onde o fluido não está totalmente dentro de limites rígidos, ou seja, uma parte do fluido está em contato diretamente com o vácuo, e fechados onde o fluido está totalmente dentro de limites rígidos.

Neste contexto, o termo região livre é dado à região do fluido livremente deformável, possuindo pressão e tensão cisalhante nulas em toda a superfície. Mesmo que apresente uma superfície livre, o fluxo pode não ser de canal aberto, por exemplo: dois fluidos imiscíveis de densidades diferentes delimitados por uma superfície fechada, possuem uma superfície livre entre eles, mas não estão em contato com vácuo. Esse tipo de fluxo pode ser chamado de estratificado, pois a diferença de densidade entre os fluidos dá origem à efeitos gravitacionais no fluxo. Por outro lado, todo fluxo considerado de canal aberto é um fluxo de superfície livre.

Em casos naturais, como oceanos e rios, que possuem o contato com a atmosfera não seriam considerados fluxos de canais abertos, porém, a diferença entre as densidades da água e do ar são tão elevadas, que os estudos normalmente ignoram a presença dela e os consideram como fluxos de canal aberto.

3.2.5.1 Tipos de Canais

A Figura 3.26 exemplifica alguns tipos de canais que, devido às suas características, apresentam fluxos de comportamentos muito distintos, tendo suas principais diferenças apresentadas abaixo [12]:

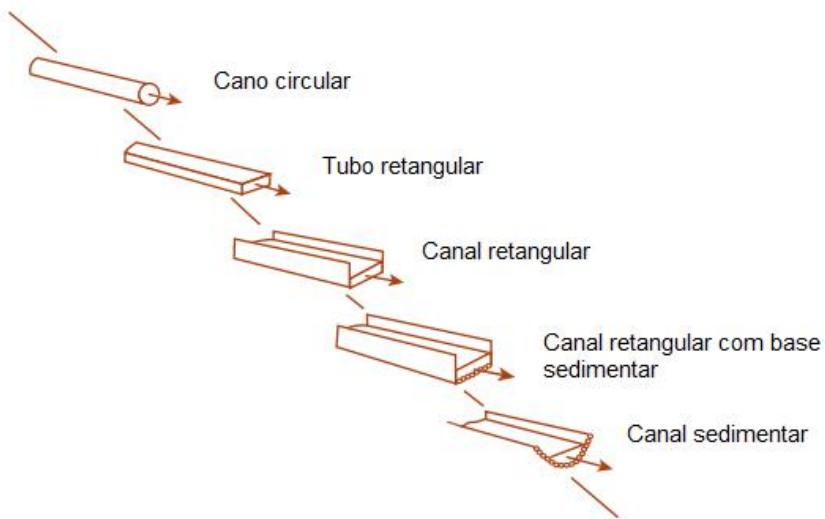


Figure by MIT OpenCourseWare.

Figura 3.26 Principais tipos de canais [12].

Do cano para o tubo retangular, adiciona-se a presença de fracas circulações secundárias, enquanto que a estrutura do cisalhamento ao longo do fluxo não muda muito.

No canal retangular aberto, a estrutura de turbulência se difere apenas um pouco, assim como as circulações secundárias, porém, a superfície livre deformável faz grande impacto em fluxos instáveis.

No canal retangular com uma fina camada de sedimento, o fluxo pode moldar a camada e a camada tem uma influência forte no fluxo, e, além disso, o cisalhamento turbulento do fluxo e a geometria da superfície livre são consideravelmente diferentes em certas regiões deste fluxo.

O último é um canal sedimentar, onde há significativas mudanças na camada, pois suas superfícies podem ser erodidas e moldadas pelo fluxo, apresentando também diferenças significativas nas circulações secundárias.

3.2.5.2 Perfis de Velocidade

Perfil de velocidade é a representação gráfica da relação entre a média temporal da velocidade local do fluido com a distância de um ponto do fluido à base, que permite uma melhor compreensão do comportamento do fluxo.

A lei de Newton da viscosidade pode ser reescrita considerando o termo da viscosidade como sendo a soma da viscosidade molecular, μ , com a viscosidade turbulenta, que varia pontualmente, η , segundo a Equação 3.6. E, devido à variação

pontual da viscosidade turbulenta, o cálculo do perfil de velocidade depende de métodos experimentais, pois não é possível resolver analiticamente.

$$\tau = (\mu + \eta(x, y, z, t)) \frac{du}{dy} \quad (3.6)$$

A média temporal da velocidade local do fluido para produção do perfil de velocidade é função de algumas de variáveis, como: τ_0 (tensão cisalhante da superfície), μ (viscosidade), ρ (densidade do fluido), d (profundidade do fluxo), D (altura da rugosidade), y (altura a partir da base). Porém existem diferenças, segundo [12], o perfil de velocidade, de um canal aberto, por exemplo, na região próxima à base, não depende da profundidade do fluxo, e na região próxima à superfície, não depende de D e de μ .

A Figura 3.27 mostra a comparação dos perfis de velocidade média, tanto em canais abertos e fechados, entre fluxo laminar e turbulento. Pode-se observar que o perfil do fluxo turbulento está muito mais próximo da uniformidade, exceto próximo aos limites, onde há uma queda abrupta da velocidade devido à condição de não-escorregamento. Isso ocorre porque as trocas que os redemoinhos promovem são melhores em “homogeneizar” a velocidade do que só as trocas moleculares em pequenas distâncias dos fluxos laminares. Outra análise é que a velocidade é máxima na superfície livre, a velocidade cresce como uma função monótona da base à superfície livre.

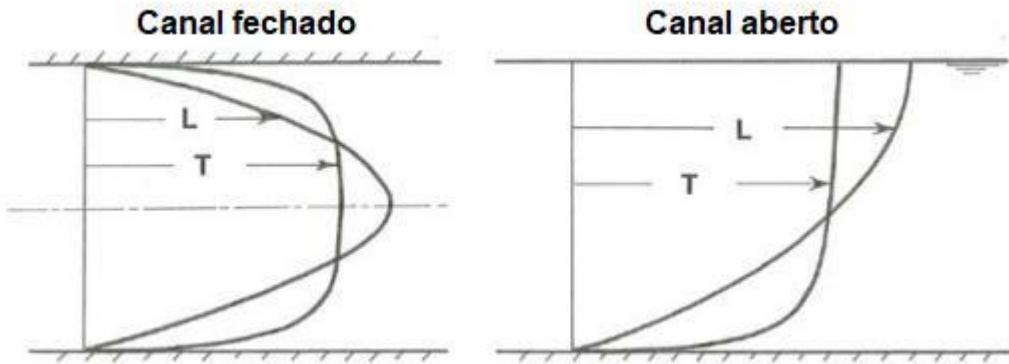


Figura 3.27 Perfil de velocidade em fluxos laminares e turbulentos em canal aberto e fechado [12].

3.2.5.3 Estrutura da Camada Limite Turbulenta

A natureza da turbulência varia fortemente entre a base e a superfície do fluxo, pois, devido à condição de não-escorregamento, as flutuações turbulentas devem ir a zero na superfície de contato. O que muda drasticamente a contribuição da tensão cisalhante na vizinhança deste contato.

Se a superfície da base for lisa, ou com rugosidades pequenas, poderão ser observadas três diferentes zonas na camada limite, conforme Figura 3.28: uma fina subcamada viscosa próxima à superfície, uma camada de transição e uma camada turbulenta, porém, se a superfície da base tiver rugosidades grandes, a subcamada viscosa tornar-se-á inexistente (Figura 3.29).

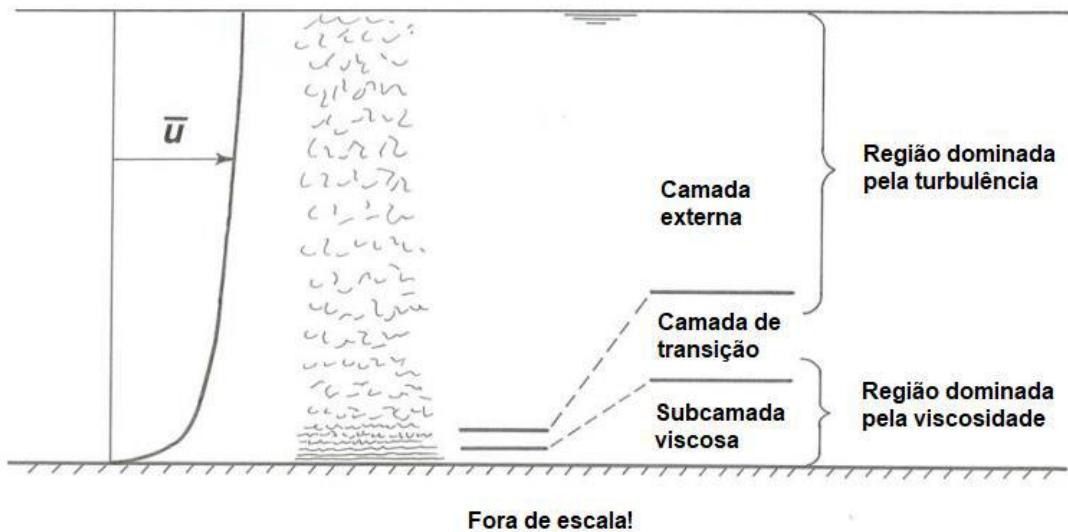


Figura 3.28 Divisão da camada limite em fluxos turbulentos em canal aberto [12].

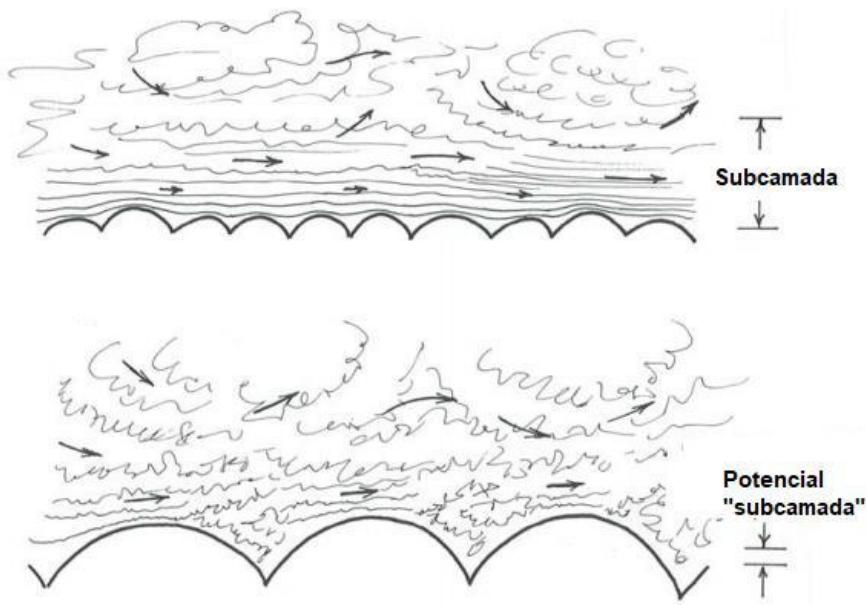


Figura 3.29 Influência da rugosidade na estrutura do fluxo [12].

Como a subcamada viscosa experimenta flutuações randômicas na velocidade, o fluxo não é estritamente laminar. Entretanto, por causa das flutuações verticais da

velocidade irem a zero na superfície, o transporte molecular de momentos é maior que o transporte turbulento de momentos.

Portanto, na subcamada viscosa, as tensões cisalhantes viscosas são predominantes às turbulentas. O cisalhamento nesta subcamada é muito alto pois fluidos, à altas velocidades, são misturados em seu topo por difusão turbulenta. Um outro efeito das camadas superiores é a entrada de vórtices, causando flutuações turbulentas da velocidade, que serão amortecidos pela tensão cisalhante viscosa.

A espessura desta subcamada depende das características do fluido, mas varia entre frações milimétricas até muitos milímetros. Em superfícies mais lisas, a espessura pode ser facilmente definida, porém, quando a superfície apresenta grandes rugosidades, como partículas sedimentares, a subcamada viscosa se torna ausente e a turbulência se estende por toda a superfície.

A camada de transição, que fica logo acima da subcamada viscosa, apresenta uma espessura um pouco maior e um gradiente de velocidade ainda muito alto, apesar do fluxo ser bastante turbulento. A principal característica desta camada é que as tensões cisalhantes viscosas e turbulentas possuem a mesma importância. Nesta camada são gerados pequenos vórtices com alta energia devido à instabilidade gerada pelo fluxo muito cisalhado, por isso, essa camada também é chamada de geradora de turbulência.

A maior camada é a externa, que fica no topo, e é dominada pela turbulência com predominância da tensão cisalhante turbulenta, a tensão cisalhante viscosa pode ser desprezada. Os vórtices aqui são muito maiores, transportando o momento de forma mais eficiente que os pequenos vórtices das camadas mais abaixo, tornando o perfil de velocidade mais homogêneo.

3.2.5.4 Resistência do Fluxo

As forças exercidas pelo fluxo na superfície do canal são compostas pela soma das forças de pressão e de cisalhamento. Em superfícies lisas, as forças de pressão não possuem componentes paralelas ao fluxo, desta forma não contribuem para a resistência, porém, conforme a superfície se torna rugosa, estas componentes passam a existir.

A pressão em elementos rugosos não depende somente de um número de Reynolds e da velocidade do fluxo em torno dos elementos, mas também da forma, disposição e espaçamento deles. Entretanto, a baixos valores de Reynolds, as forças de pressão são da mesma ordem de grandeza que as forças viscosas, enquanto, a altos

números de Reynolds, as forças de pressão são muito maiores devido à existência de pontos de separação (Figura 3.30).

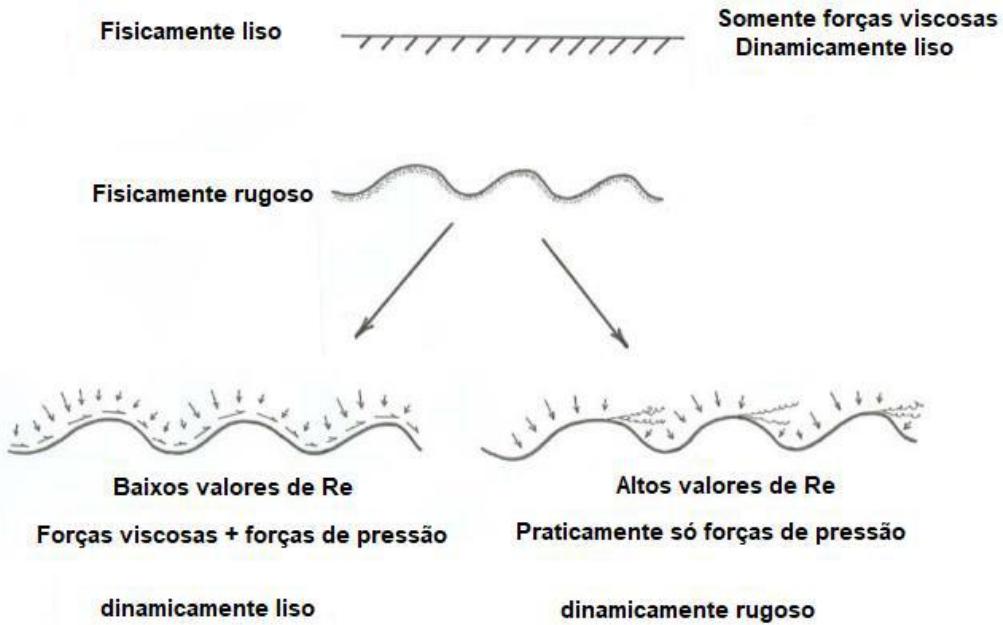


Figura 3.30 Esquema das forças junto à camada em superfícies rugosas [12].

A soma de todas as forças em cada elemento de rugosidade na camada constitui a média da resistência no fluido que, quando expressada como força por unidade de área é denotada como tensão cisalhante da camada (τ_0).

Para análise das camadas de um fluxo, é conveniente criar uma variável adimensional para se medir a distância da superfície. Para este propósito, pode-se dizer que a dinâmica do fluido junto à superfície é definida apenas pela tensão cisalhante de camada (τ_0) e pelas propriedades do fluido, pressão p e viscosidade μ , com as quais é possível se definir uma medida adimensional para distância da superfície (Equação 3.7), e, substituindo y , desta equação, pela altura da rugosidade D , temos o número de Reynolds rugoso (ou de camada) (Equação 3.8).

$$y^+(y) = \frac{p^{\frac{1}{2}} \tau_0^{\frac{1}{2}} y}{\mu} \quad 3.7$$

$$Re_* = y^+(D) = \frac{p^{\frac{1}{2}} \tau_0^{\frac{1}{2}} D}{\mu} \quad 3.8$$

As expressões definidas acima podem ser rescritas a partir da introdução de duas novas variáveis, a velocidade de fricção $u_* = \sqrt{\tau_0/\rho}$, que é em relação à tensão de cisalhamento da camada que, convenientemente, tem dimensões de velocidade, e a

viscosidade cinemática $\nu = \mu/\rho$, desta forma as equações podem ser reescritas como $y^+(y) = u_*y/\nu$ e $Re_* = u_*D/\nu$.

O valor da variável y^+ na transição da subcamada viscosa para a camada de transição está em torno de 5 e, quando há transição desta camada para a de turbulência, está em torno de 30, sendo que estes valores se mantêm para qualquer que seja a tensão cisalhante na superfície e as propriedades do fluido [12].

Outro fato útil é que, através do número de Reynolds rugoso, pode-se obter os limites para que uma superfície seja considerada rugosa ou lisa: o limite superior do Re_* para uma superfície lisa está associado à altura da rugosidade ser equivalente à espessura da subcamada viscosa, ou seja, $Re_* = 5$. Para valores de Re_* entre 5 e 70, a superfície é considerada transitoriamente rugosa e, acima de 70, rugosa, conforme Figura 3.31 [12].

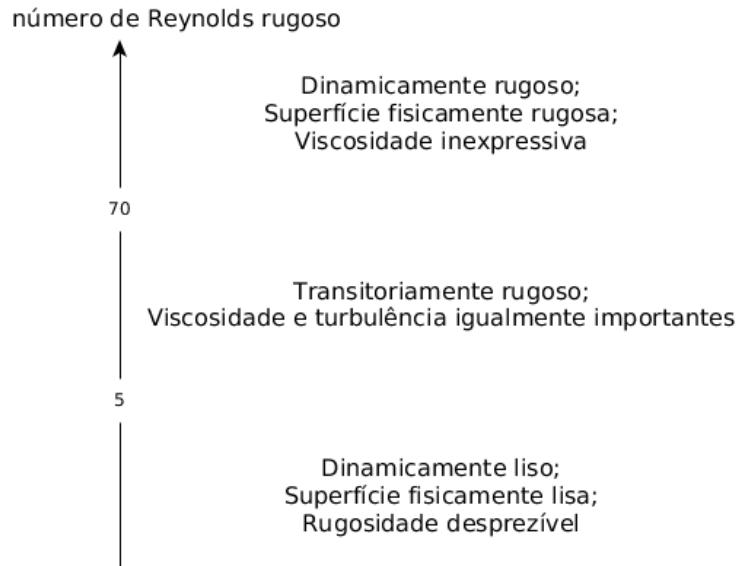


Figura 3.31 Influência do número de Re_* na classificação da superfície.

A tensão cisalhante próxima à superfície τ_0 , pode ser vista como uma função de cinco variáveis, U , d , D , ρ e μ , representadas na Figura 3.32. Uma das variáveis independentes adimensionais pode ser o número de Reynolds e a outra é a razão entre o diâmetro do canal e a altura da rugosidade da superfície (d/D). Uma das possíveis variáveis adimensionais, convencionalmente utilizada, envolvendo τ_0 é $8\tau_0/\rho U^2$. Essa tensão cisalhante, em específico, é chamada de fator de fricção (f), que é um tipo de coeficiente de resistência do fluxo.

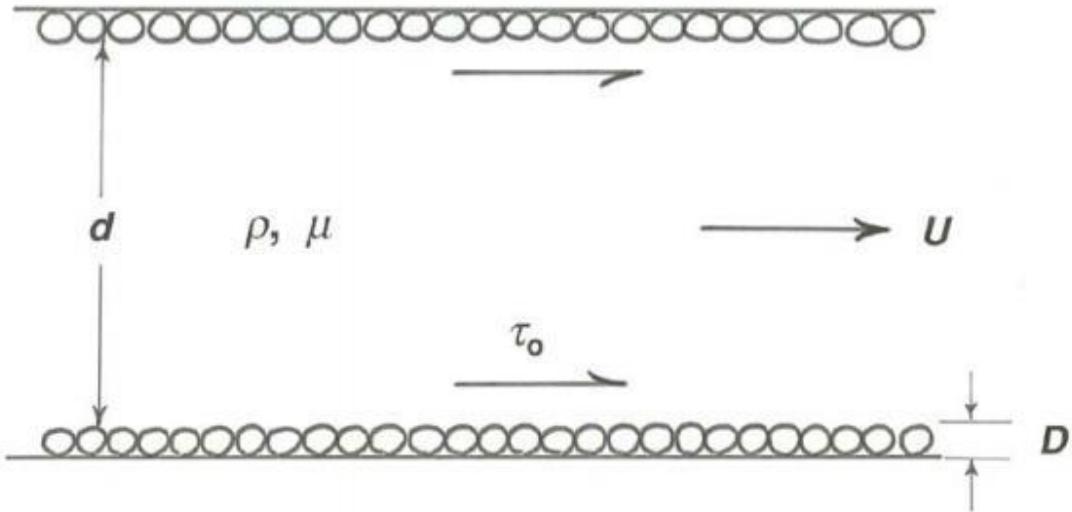


Figura 3.32 Esquema para análise dimensional da resistência do fluxo num cano [12].

O relacionamento expresso entre o fator de atrito (f) e o número de Reynolds, para diversos valores de d/D , pode ser representado por um gráfico chamado de diagrama de resistência (Figura 3.33), para fluxos em canos circulares forrados com uma camada de grãos de areia de tamanho uniforme [12].

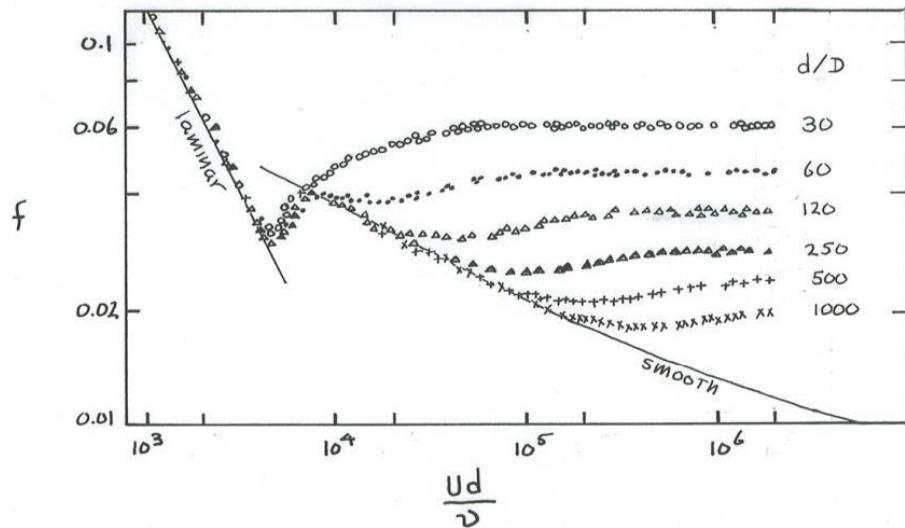


Figura 3.33 Diagrama de resistência [12].

Duas questões podem ser levantadas: Como os resultados da Figura 3.33 mudam para grãos com tamanhos e disposição geométrica diferentes? E como esses resultados mudariam para canais ou tubos com geometria diferente de um cano circular? Desde que as características de rugosidade não sejam muito diferentes e os tamanhos dos grãos ainda sejam uma pequena fração do tamanho do conduto ou canal, as curvas são meramente um pouco deslocadas ou sua forma difere minimamente. Para adaptar os

resultados dos grãos uniformes para outros tipos de rugosidade, uma variável chamada k_s é usada para obter a rugosidade equivalente fictícia que permitirá o uso deste gráfico. E, quanto às formas diferentes de canais ou condutos, é costume utilizar o raio hidráulico, mas os resultados não serão exatamente os mesmos [12].

3.2.6 Limiar do Movimento Sedimentar

Quando a partícula está em repouso em uma camada sedimentar, sobre a influência de um fluxo, as forças atuantes nela estão equilibradas: o seu peso, a força de contato entre partículas e as forças do fluido (no caso em que os sedimentos não possuem forças de coesão). O peso atua no centro de massa da partícula, direcionado para baixo; as forças de contato são normais à superfície de contato desta partícula, exercidas pelas outras nas quais se encontra apoiada; e a força do fluido é a resultante das forças viscossas e de pressão que atuam na partícula (Figura 3.34).

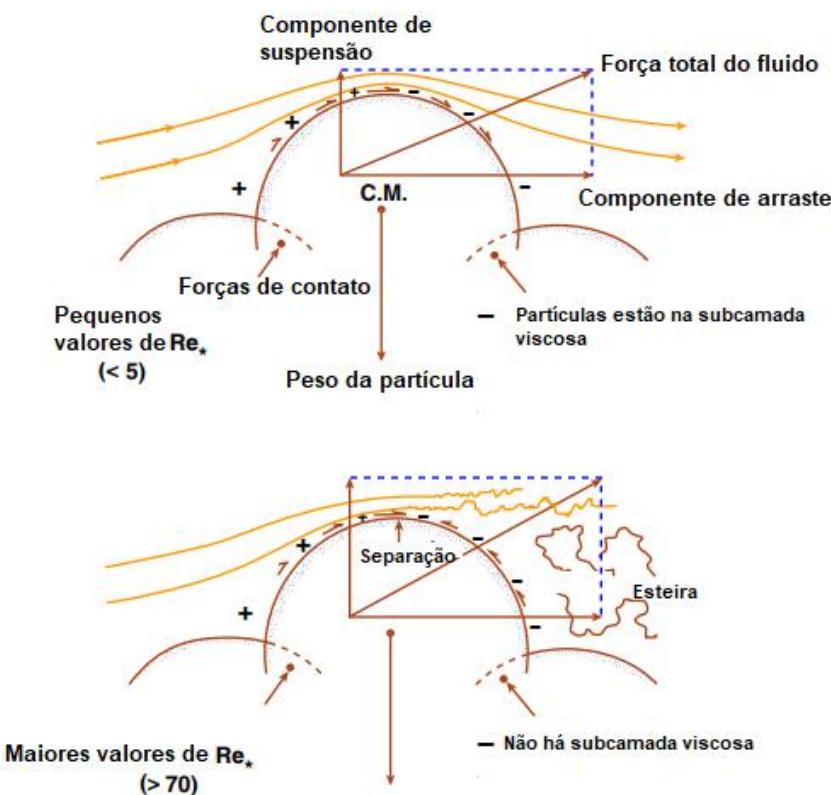


Figura 3.34 Forças em uma partícula numa camada sedimentar [12].

A condição para que os sedimentos começem a se mover é o equilíbrio de momento entre as forças de arraste e a gravidade. No limiar do movimento, as forças de

arraste podem ser descritas pela tensão cisalhante limite da camada (τ_c), desde que a camada seja plana em sua maioria e larga o suficiente para que as forças possam ser aproximadas localmente.

Devido ao posicionamento aleatório das partículas na camada sedimentar, elas terão diferentes exposições ao fluxo e, desta forma, a tensão cisalhante aplicada pelo fluido é melhor representada por uma variável aleatória.

Tornando a determinação da velocidade limite de fricção uma tarefa difícil pois cada partícula está imersa em um cenário único, com forças coesivas e de atrito entre si, e possuem diferentes influências do fluido, de forma que, para se iniciar o movimento, a força do fluxo recebida pela partícula deve ser superior às forças retardantes (Figura 3.35).

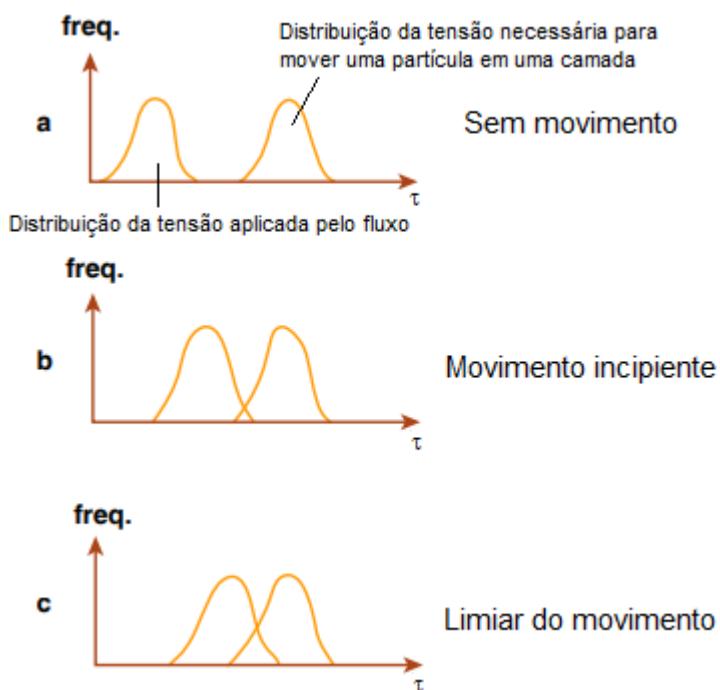


Figura 3.35 Distribuição de tensões em uma camada sedimentar [12].

Outra forma de se estudar o limiar de movimento é pelas tensões médias na partícula, considerando-as perfeitamente esféricas e aplicando o balanço de forças (Equação 3.9) que, após algumas manipulações, nos leva a uma variável adimensional β_c , chamada de número de Shields, que representa a relação da tensão cisalhante limite da camada (τ_c) com o peso relativo da partícula (γ) e diâmetro do grão (D), e é utilizada para mensurar a iniciação do movimento dos sedimentos [12].

$$a_1 F_G \sin(\alpha) = a_2 F_D \cos(\alpha) \quad 3.9$$

$$F_G = c_1 D^3 \gamma \quad 3.10$$

$$F_D = c_2 D^2 \tau_c \quad 3.11$$

$$a_1 c_1 D^3 \gamma \operatorname{sen}(\alpha) = a_2 c_2 D^2 \tau_c \cos(\alpha) \quad 3.12$$

$$\beta_c = \frac{\tau_c}{\gamma D} = \frac{a_1 c_1}{a_2 c_2} \tan(\alpha) \quad 3.13$$

Onde, a_1 e c_1 são constantes de proporcionalidade que dependem apenas da geometria do grão, como empacotamento e forma. As constantes a_2 e c_2 dependem apenas parcialmente da geometria dos grãos, pois também dependem de características do fluxo nas proximidades deles e da distribuição resultante das forças de arraste e de pressão. As forças e ângulo estão apresentados na Figura 3.36.

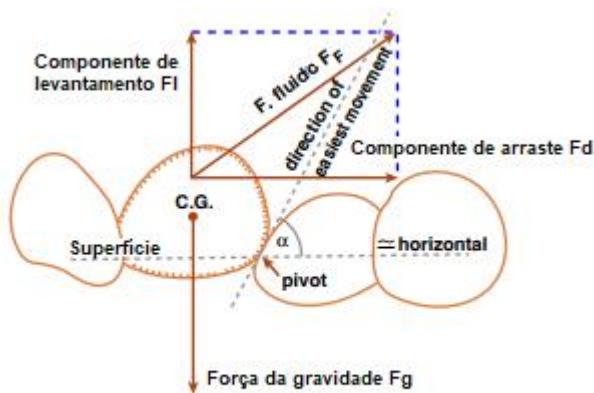


Figura 3.36 Descrição das variáveis [12].

3.2.6.1 Forças Coesivas

Além da gravidade e das forças de contato, as partículas também sofrem a ação de forças coesivas. Que consistem nas forças de Van der Waals, eletrostáticas, capilares e as forças de ligação química, e nenhuma delas pode ser previda precisamente, porém, a análise qualitativa pode ser feita [4] [16].

Força de Van der Waals: É a força de atração entre duas partículas micrométricas não carregadas, fraca e de curto alcance.

Forças capilares: Causadas pela umidade que se condensa nas superfícies, formam pontes entre as partículas vizinhas. A tensão superficial nestas pontes aumenta a coesão entre as partículas.

Forças eletrostáticas: Tem atuações distintas dependendo do tamanho da partícula, sendo mais atuante em argilas, lamas e poeiras. Em partículas de areia em saltação, são gerados campos elétricos devido aos movimentos assimétricos entre elas, sendo carregadas negativamente, em geral.

Outras forças: Por exemplo, a presença de sal pode interagir com a umidade e formar ligações químicas.

Até pequenas quantidades de sais solúveis aumentam significativamente a tensão cisalhante limite. Os efeitos, em geral, do NaCl e KCl são semelhantes, ou seja, quanto maior a concentração deles maior a tensão do fluxo necessária para as forças coesivas serem superadas. Entretanto, isso vale para grãos de areia sem argila, tratados com cloretos possuidores de cátions monovalentes, mas se houver argila, o comportamento do potássio será diferente, sendo mais rapidamente absorvido pela superfície, causando floculação da argila, então o KCl, neste solo, exigirá maiores tensões do fluxo.

Se a precipitação de sal ocorre devido à evaporação da água de capilaridade, os cristais continuam a se conectar e a preencher o poro. Porém, se a precipitação ocorrer em grande quantidade, pode gerar grupos agregados e grupos separados na superfície do solo, gerando irregularidades. Daí a tensão necessária para movê-los não será mais função da concentração do sal, devido à mudança na natureza morfológica da superfície, onde protuberâncias podem facilitar sua exposição ao fluxo ou agregados possuírem conexões ainda mais fortes de se superar [16].

4. CONFIGURAÇÃO DE CAMADAS SEDIMENTARES GERADAS POR FLUXOS AQUOSOS OU POR VENTO

O conceito de camada é dado ao conjunto de partículas em contato com o substrato. A parte superior da camada sedimentar é chamada de camada ativa pois é dela que os sedimentos terão mais chances de serem postos em movimento. Os fluxos gerarão as instabilidades necessárias para criar formas distintas de camada, processo semelhante em ambiente subaquoso e eólico.

O vento e o fluxo de água possuem modos de transporte parecidos, porém possuem diferenças. O fluxo na baixa atmosfera é igual em todos os aspectos essenciais ao fluxo acima do solo na água, a diferença está na proporção muito distinta entre a razão da densidade do sedimento com a densidade do fluido, que é oitocentas vezes maior no ar do que na água. Esse alto valor da razão das densidades no ar significa que as trajetórias das partículas transportadas pelo vento são largamente independentes da turbulência, exceto para partículas finas, na escala de silte e argila, por isso a saltação é o modo de transporte mais observado em fluxos eólicos. Outra diferença é que o vento é um bom selecionador de tamanho de grãos [12].

Segundo [4], os fluxos também podem ser caracterizados segundo a sua direção principal. Quando a variação na direção do fluxo é menor que 45° é chamado de unimodal, se o fluxo varia em mais de duas direções principais, é bimodal (bimodal agudo, se o ângulo for menor que 90° , e bimodal obtuso, se for maior) e os regimes podem ser complexos se houver mais que duas direções principais. Esses tipos de fluxo moldarão diferentes tipos de formas de camada.

O estudo do movimento da areia pelo ar foi iniciado por R. A. Bagnold no deserto, em 1930, e culminou na publicação do seu livro: “*The Physics of Blown Sand and Desert Dunes*”, em 1941 [17]. A pesquisa no campo do transporte sedimentar eólico, através das últimas décadas, se dividiu em três áreas: erosão do solo, transporte de areia por saltação e a natureza e dinâmica das formas de camada eólicas [12].

4.1 Tipos de Transporte Sedimentar

Neste capítulo serão abordados os transportes sedimentares: rolamento e rastejo, saltação e suspensão, passando pelas diferenças entre fluxos eólicos e aquáticos. A Figura 4.1 e Figura 4.2 ilustram, para o ar e para a água, os tipos de movimentos existentes nas camadas sedimentares sob ação de fluxos fluidais.

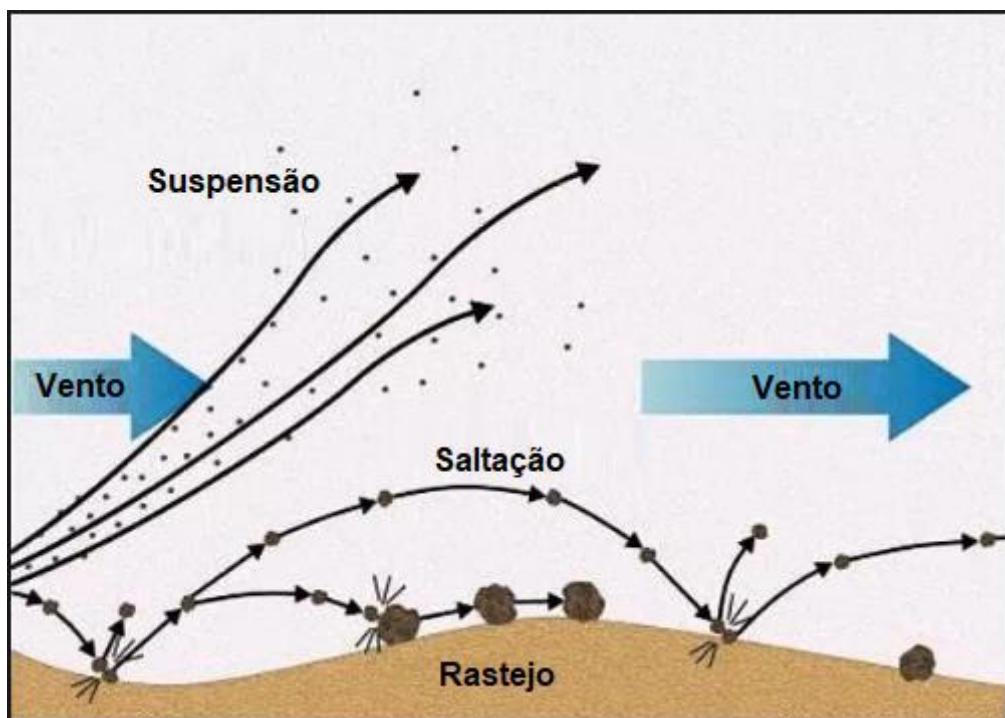


Figura 4.1 Tipos de movimento em meio eólico [18].

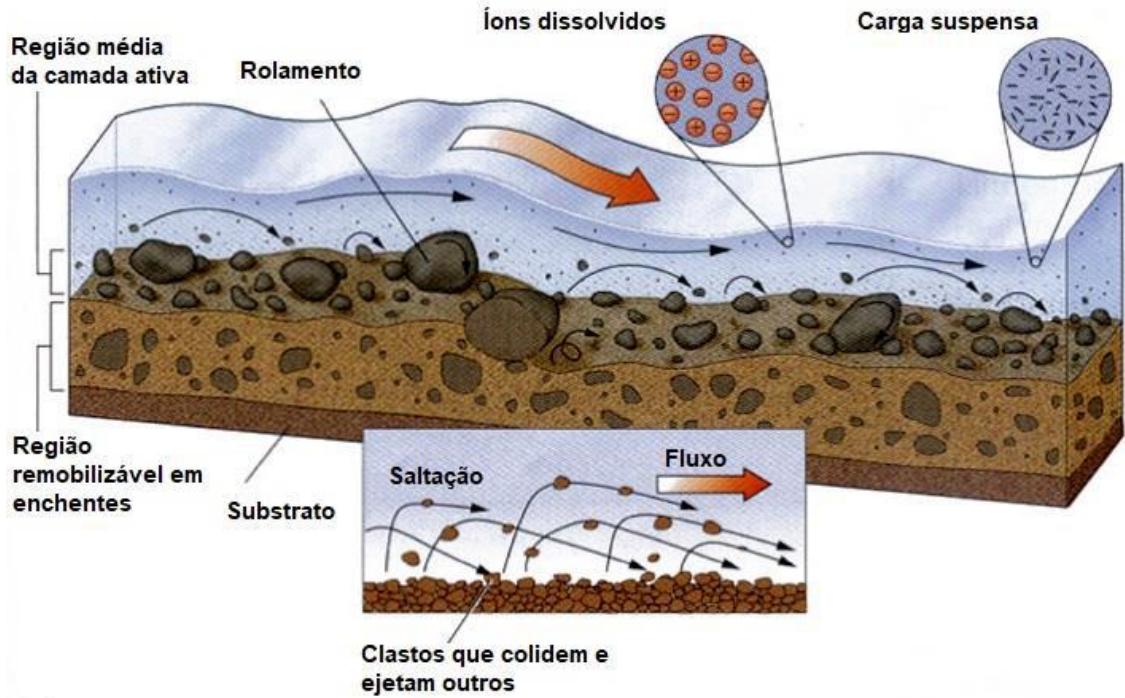


Figura 4.2 Tipos de movimentos sedimentares em meios aquosos [19].

4.1.1 Rolamento e Rastejo

As forças de suspensão de um dado fluxo podem não ser suficientes para colocar algumas partículas em movimento fora da camada, mas estas podem girar ou se arrastar ao longo dela. Em ambientes subaquáticos, as partículas com este movimento são consideradas carga de fundo sob tração.

4.1.2 Saltação

Neste tipo de transporte, as partículas são lançadas da camada, e colocadas em movimento com trajetórias balísticas de comprimentos e alturas variadas, porém, limitadas. Sua diferença em relação à suspensão é que, durante toda a trajetória da partícula, a componente vertical da aceleração está orientada para baixo.

Os grãos são acelerados na direção do fluxo e voltam a impactar a camada, depois de uma certa distância, em ângulos baixos. Após colidir com a camada de grãos, outros podem ser ejetados e acelerados pela força de arraste antes de retornar à camada, o que leva a um efeito em cascata.

O comprimento da saltação é maior que sua altura alcançada pois, quando a partícula é ejetada, sua velocidade de saída é a de fricção, que é da ordem de dezenas de centímetros por segundo, e encontra, logo acima, o vento a uma velocidade na ordem de

metros por segundos, e passa então a ser levada mais para frente do que para cima. Então sua trajetória costuma ser assimétrica, com ângulo de partida maior que o ângulo de impacto (Figura 4.3) [12].

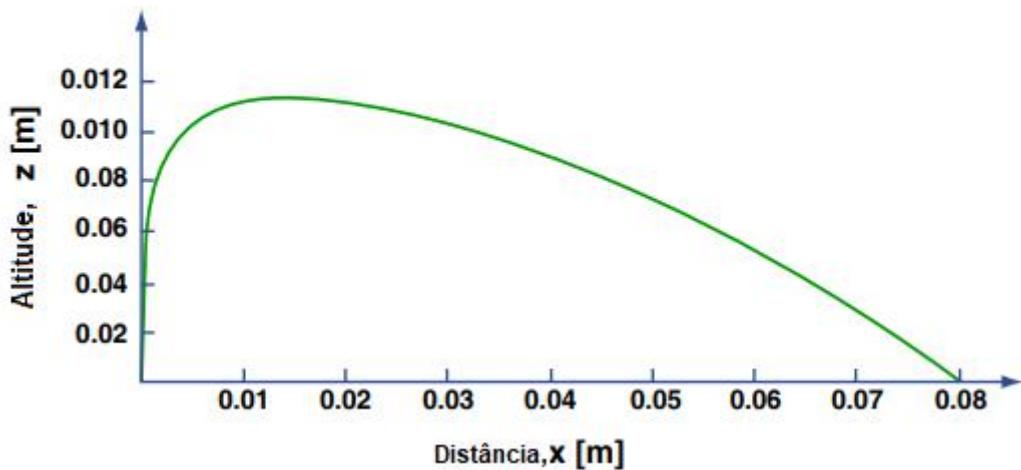


Figura 4.3 Trajetória típica da saltação [12].

No ar, o ângulo de saída da trajetória é, em média, 50° encontrado por [20] utilizando esferas de vidro, e o de impacto é de 14° (Figura 4.4), mas ângulos por volta de 52° e 54° também já foram encontrados com areia natural e o de impacto entre 21° e 33° . Outros autores encontraram ângulos bem menores que 50° em diversos trabalhos com grãos distintos, um deles foi [21], que encontrou, para areia natural, ângulos de saída entre 35° e 41° [12].

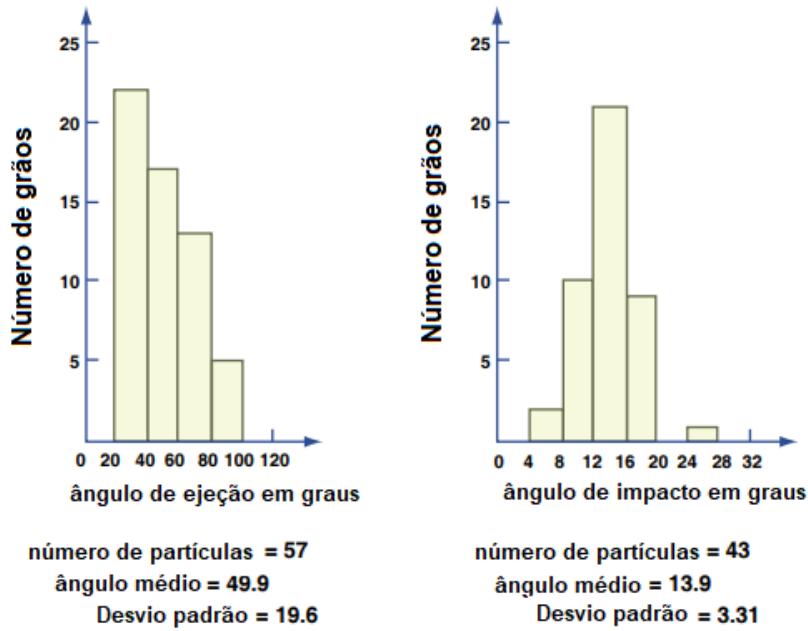


Figura 4.4 Distribuição de frequências de ângulos de ejeção e impacto de partículas em saltação de 0,5mm de vidro em túnel de vento [12].

O impacto na camada sedimentar afeta os grãos na vizinhança do impacto, que podem ser movidos na camada ou serem ejetados. O jeito principal de se descrever o processo de impacto é estocástico e pode resultar em três diferentes resultados: a partícula que colide distribui seu momento na camada e nenhum grão é ejetado; a partícula ricocheteia perdendo um pouco da sua energia; e a partícula distribui sua energia e, um ou mais grãos, deixam a camada [22].

Devido à transferência de momento do ar para os grãos em saltação próximo à camada, quanto mais grãos viajando no fluxo, menor será a tensão cisalhante do ar, o que significa que o sistema atinge uma estabilidade, sendo o número de grãos que o ar consegue carregar limitado [22] [23].

Com isso, existe uma medida chamada comprimento de saturação (l_s), que é a distância que o fluxo percorre até atingir a estabilidade na quantidade de grãos que transporta. Ela é proporcional ao comprimento de saltação e define uma escala de comprimento para análise morfológica da duna [22] [23].

O fenômeno da saltação pode deflagrar diversos estudos, como: dos limites de movimento; das forças que causam a ejeção; da geometria e dinâmica de trajetórias, incluindo a distribuição das alturas e distâncias dos saltos; dos efeitos da velocidade do fluido e do tamanho do sedimento, incluindo sua seleção e forma, nas taxas transportadas pela saltação e no modo em que ela ocorre; do efeito de fluxos não-

estáveis na saltação; e do efeito da nuvem de saltação na estrutura da camada próxima à superfície.

4.1.3 Transição de Saltação para Suspensão

Como a turbulência se manifesta como flutuações na velocidade do fluido, é razoável dizer que, com o aumento da velocidade média, ocorrerá um aumento na velocidade dos vórtices. Caso as velocidades verticais forem suficientemente altas, elas irão afetar inclusive as trajetórias das partículas em saltação, que ficarão cada vez mais irregulares até ocorrer a transição para suspensão. Vale ressaltar que não é necessário ocorrer transição da saltação para uma partícula entrar em suspensão, partículas finas podem ser levantadas pelo fluxo diretamente ou indiretamente pelo impacto de partículas maiores em saltação, indo direto para suspensão mesmo em fluxos com velocidades verticais baixas [12].

4.1.4 Suspensão

Partículas suspensas são mantidas acima da camada por movimentos turbulentos no fluido. Difere da saltação com suas trajetórias mais sinuosas, maiores distâncias percorridas acima da camada, maiores alturas e retornando bem menos vezes à superfície. A suspensão pode ser dividida em suspensão curta e longa, em geral, só partículas muito finas podem ser carregadas e serem mantidas suspensas por um longo período.

O critério para suspensão é que a componente vertical da velocidade do vórtice turbulento ultrapasse a velocidade de assentamento para as partículas começarem a entrar em suspensão. Contanto que ao menos algumas flutuações verticais da velocidade sejam superiores à velocidade de assentamento das partículas, algumas destas experimentarão entrar em suspensão, mesmo que essa frequência de distribuição das flutuações seja assimétrica [12].

Conforme o tamanho das partículas diminui, o efeito da turbulência na trajetória da partícula se torna maior. A velocidade imposta ao fluido também é um fator importante, pois a velocidade característica dos vórtices aumenta na medida em que a velocidade geral aumentar. E, para partículas suficientemente pequenas e ventos fortes, por exemplo, as partículas serão transportadas preferencialmente em suspensão.

A concentração de partículas suspensas em fluxos de canais abertos é influenciada diretamente pela viscosidade e pela fricção. Com o aumento da viscosidade, a velocidade de decantação diminui, o que leva a uma maior concentração de partículas suspensas. Quanto maior a fricção, maior será a tensão cisalhante próxima à camada e, desta forma, maior será a velocidade de cisalhamento, diminuindo a concentração de partículas suspensas [12].

O peso da partícula é transmitido diretamente para o fluido, na forma de força de arraste, e, conforme as partículas viajarem através do fluido, exerçerão uma força indireta na camada.

4.1.5 Movimento Sedimentar por Fluxo Aquático

As partículas podem ser movidas por um fluxo como agregado de partículas sedimentares, chamado de carga, estando ou não em contato com a camada sedimentar. Os movimentos podem ser como carga de fundo, carga suspensa ou em solução [12].

O movimento da carga de fundo pode ser rolando, saltitando ou se arrastando, chamado por alguns de movimento trátilo. O movimento não é nem contínuo nem uniforme acima da camada, pequenos pulsos de movimento afetam grupos de partículas localmente, que alternam entre paradas e pequenos movimentos. Inclusive, quando se movem, geralmente a velocidade não supera a do fluido próximo à superfície.

Em meio aquoso também há saltação, mas não é tão clara como no ar, pois nele suas alturas são bem menores. Isso ocorre porque, em água, o efeito do arraste do fluido é muito maior e o efeito da inércia da partícula é menor [12].

Conforme o fluxo fica mais forte, as partículas próximas à superfície são carregadas para cima por redemoinhos em forma de carga de suspensão. E quanto mais forte o fluxo e/ou mais finas as partículas, maior a quantidade de sedimento suspenso, mais alto e mais longe podem ir. Partículas muito finas, porém, podem viajar no fluxo sem encostarem na camada, seu movimento é considerado browniano e são chamadas de carga em solução.

A distinção entre a transição de carga de fundo para carga suspensa pode ser realizada de forma prática ou teórica, mas não há uma mudança brusca. O critério básico teórico é se a turbulência do fluido é ou não substancial naquele movimento, pois a carga em suspensão é suportada inteiramente pela turbulência e a carga de fundo é suportada, pelo menos em parte, direta ou indiretamente, pela camada, podendo desprezar as forças de suspensão.

Devido às grandes densidades atmosféricas de Vênus e Titã, o transporte de sedimentos nesses corpos planetários é mais parecido com o transporte subaquático do que com o transporte eólico de areia. A Figura 4.5 mostra a variação da velocidade de fricção necessária para mover cada tipo de tamanho de grão, em ambientes subaquosos, e compara este fenômeno entre Terra e Marte. Pode-se reparar que, devido à menor gravidade em Marte e sua atmosfera mais rarefeita, menores velocidades são necessárias para mover os grãos de cada tipo, segundo [24] e [13].

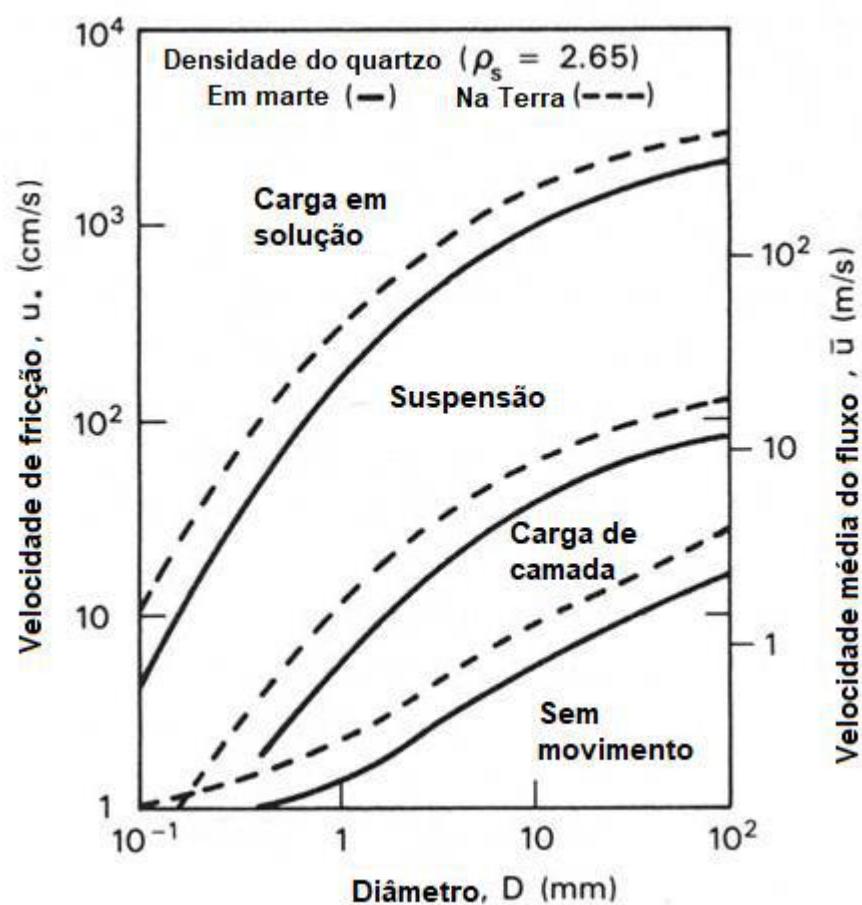


Figura 4.5 Modos de transporte de grãos de quartzo em Marte e na Terra [25]

4.2 Regimes de fluxo

Em um experimento num canal aberto com fluxo de água unidirecional sobre uma camada de areia, é possível observar, variando a velocidade do fluxo, a evolução de formas de leito. Segundo [26], as camadas poderiam ser classificadas em regimes de fluxo superior ou inferior com base na transição de formas de camada rugosas, como *ripples* e dunas, formadas a fluxos de baixa intensidade, para formas de camadas menos rugosas, como leitos planos e antidunas.

O número de Froude (dado pela Equação 4.1) é a relação entre a velocidade do fluxo (U) e a velocidade que uma onda é capaz de se mover em água, dada por \sqrt{gD} , onde g é a gravidade e D é a profundidade do fluido, que fornece a relação de criticidade do fluxo. Se for menor que 1, indica um fluxo subcrítico, ou seja, de regime inferior, se o número de Froude é maior que 1, indica fluxo supercrítico, ou seja, de regime superior.

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gD}} \quad 4.1$$

4.2.1 Tipos de formas de leito

A figura exemplifica os tipos de formas de leito geradas em um experimento com fluxo de água sobre uma camada de areia conforme aumenta a velocidade deste fluxo. As formas conhecidas como: *ripples*, dunas, leito plano e antiduna, serão descritas abaixo.

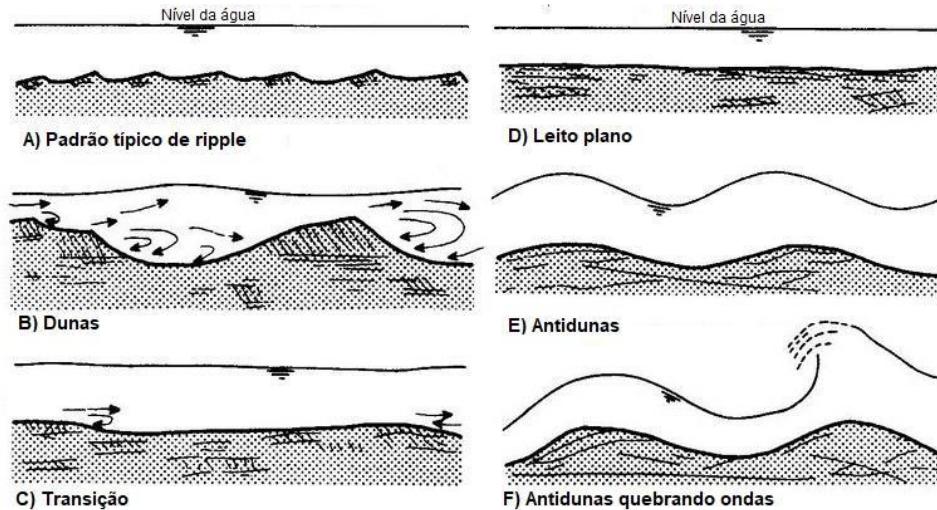


Figura 4.6 Formas de camadas sob fluxo unidirecional em canal aberto [27].

4.2.1.1 Ripples

Após exceder as condições limites de movimento, o fluxo começará a construir pequenas irregularidades em pontos aleatórios sobre a camada, não mais que alguns diâmetros de grãos de altura, e pequenas ondulações serão geradas espontaneamente. Essas ondulações passam por estágios complexos até virarem, finalmente, uma forma de camada bem definida.

As superfícies à barlavento das *ripples* são pouco inclinadas (aproximadamente 10°), em relação ao plano médio da camada, e as superfícies à sotavento são mais

íngremes; as cristas e calhas são perpendiculares ao fluxo; o espaçamento médio entre as ondulações é entre 10 e 20 cm, e altura média é de poucos centímetros; e essas ondulações se movem no sentido do fluxo, através da erosão à barlavento e deposição à sotavento [12].

4.2.1.2 Dunas

Com os fluxos entre 40 cm/s e 100 cm/s, as ondulações, neste experimento, são substituídas por formas de maior escala, chamadas de dunas, formada de partículas finas a grossas, o comprimento de onda é de 60 cm até centenas de metros. Possuem similaridades no movimento e na geometria com as *ripples*, mas são, pelo menos, uma ordem de grandeza maiores [12].

4.2.1.3 Leito plano

Com um aumento ainda maior na velocidade do fluxo, as dunas se tornam mais arredondadas e mais baixas até desaparecerem, essa superfície planar, com muito sedimento sendo transportado em suspensão e como carga de camada, é chamada de leito plano [12].

4.2.1.4 Antidunas

Aumentando ainda mais a velocidade do fluxo (supercrítico), a deposição e erosão são invertidas em relação às dunas, agora à barlavento e à sotavento, respectivamente. E, assim, elas migram contra o sentido do fluxo. Esse padrão ocorre quando a ondulação da camada está em fase com as ondas da água na superfície. Antidunas são geralmente simétricas e se desenvolvem rápido até se tornarem instáveis e quebrarem abruptamente, fornecendo sedimento para suspensão, resultando em uma camada planar novamente, ou quase planar, e o ciclo se repetir. Antidunas não se formam em condutos fechados, ao contrário de dunas e ripples, já que elas dependem de uma superfície aberta e da presença de lâmina d'água [12].

4.3 Dunas

4.3.1 Definição e Morfologia

A definição de duna é crista de areia alongada formada por fluxos de ar ou água. Dunas de areia ocorrem em ambiente costeiros, desérticos, em planícies subaquáticas e em outros planetas, como Marte, por exemplo.

As dunas se desenvolvem lenta e gradativamente e são formadas por sedimentos que são obtidos, por sua vez, através dos processos erosivos das rochas intemperizadas. Os sedimentos das dunas são majoritariamente areia, grãos de quartzo na fração areia, que são postos em movimento pelos fluxos fluidais após estarem disponíveis para remobilização.

Diferentes configurações de dunas podem ser geradas por fluxos unidirecionais, combinados ou oscilatórios. Se o fluxo muda com o tempo as camadas se ajustam, então, em locais com mais de um regime de fluxo, existem alterações nos padrões de organização das camadas sedimentares. A grande diversidade geométrica das camadas agrada sedimentologistas porque provém riqueza na hora da interpretação do ambiente (Figura 4.7).

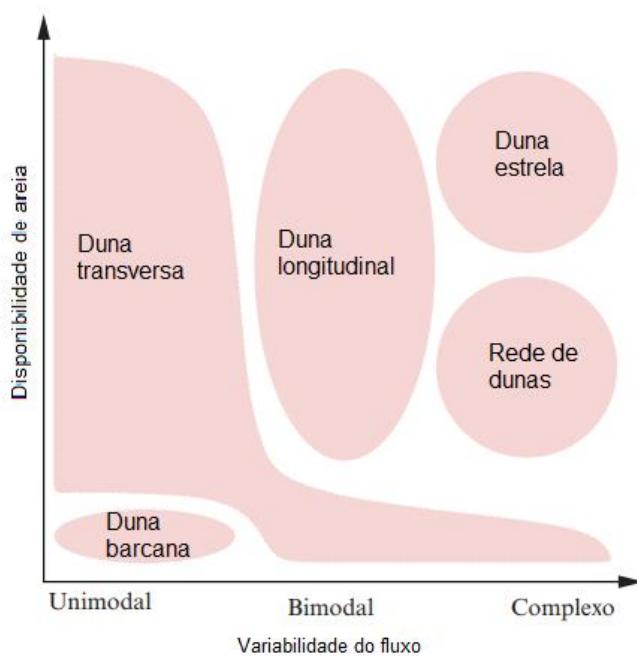


Figura 4.7 Relação entre os tipos de dunas e as direções principais do fluxo [4].

Podem ser classificadas adicionalmente como dunas livres ou dunas ancoradas. Este último grupo não se move por causa da vegetação ou por causas topográficas, já dunas livres podem se mover livremente e seu formato depende da velocidade e direção do vento no momento. Há também paleodunas (ou dunas fósseis), dunas antigas que passaram por litificação, preservando sua forma e/ou estruturas.

Segundo [28] e [22], dunas livres podem ser classificadas segundo a orientação do fluxo de areia e o alinhamento de sua crista:

- 1 Dunas transversais: São dunas eólicas cujo eixo mais longo faz um ângulo reto com a direção do vento predominante. Forma-se em regiões áridas com alta disponibilidade de areia, a vegetação está ausente e o regime de ventos são unidireccionais. Sua velocidade é diretamente proporcional à velocidade do vento e inversamente à sua altura.
 - a. Dunas Domo: Pequenas dunas isoladas sem a face de avalanche;
 - b. Dunas Barcanas: Situadas em áreas de pouco aporte de areia, com forma de meia lua, será amplamente descrita na seção 4.3.4.
 - c. Dunas transversas ou crescentes: Diferem das dunas barcanas pela grande oferta e disponibilidade de areia. A crista é alinhada por completo com a direção perpendicular do fluxo de vento.
 - d. Barcanoides: Ocorrem em áreas onde o suprimento de areia não é suficiente para construir uma duna transversal, mas possui areia demais para formar dunas barcanas isoladas e desconectadas, então as dunas se conectam, gerando formas híbridas.
 - e. Dunas reversas: São tipos combinados de dunas, devido à mudança no regime principal de vento, para direção oposta, invertendo-as.
- 2 Dunas longitudinais ou lineares: São dunas eólicas alongadas cuja orientação da crista é paralela à direção média dos ventos predominantes. Muitas das áreas cobertas por dunas lineares têm suprimento moderado de areia, um pavimento irregular e ventos cuja direção varia, em geral, com duas direções principais. Domina os principais desertos da Terra e apresentam grande regularidade geométrica e continuidade marcante.
- 3 Dunas estrelas: Ocorrem sob complexas condições de fluxo e abundância de suprimento de sedimentos.
 - a. Dunas Estrela: São dunas grandes piramidais com alguns braços se estendendo radialmente, que poderão apresentar face de avalanche ou não. Crescem mais na altura do que migram lateralmente.
 - b. Rede de dunas: Consiste na superposição de dunas transversas com movimento em diferentes direções.

Essas formas de dunas podem ser: simples, formas básicas com número mínimo de faces de avalanche que define sua geometria; compostas, que são dunas maiores com menores de forma similar e faces de avalanches sobrepostas; e complexas, que são a combinação de duas ou mais formas de dunas. As compostas e complexas sugerem

variação de intensidade e direção do vento, enquanto as simples se formam sob condições estáveis (Figura 4.8).

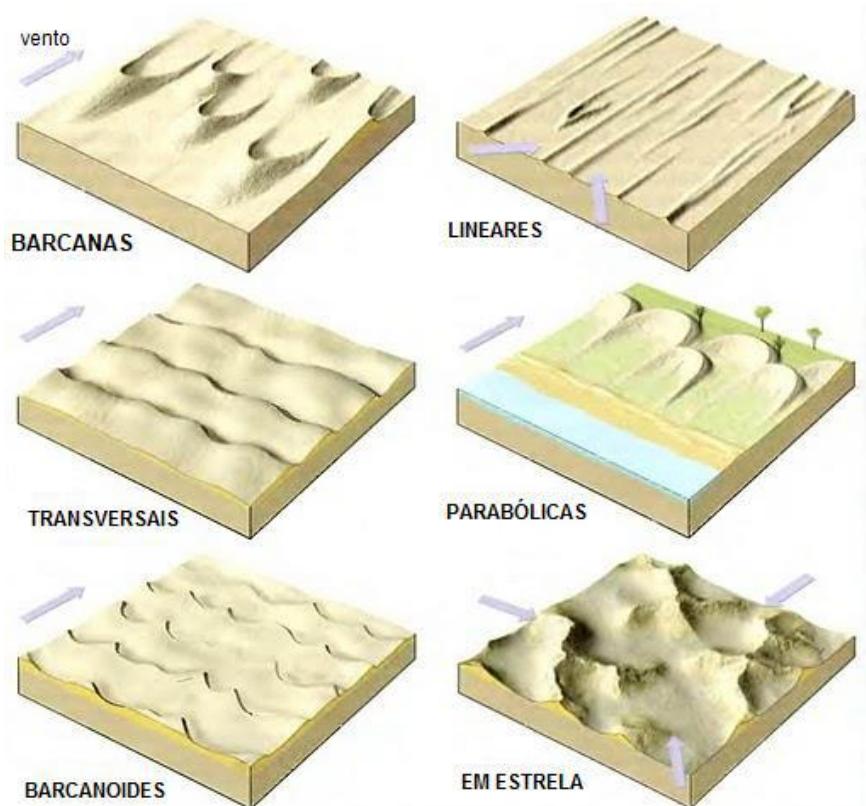


Figura 4.8 Esquema dos diferentes tipos de dunas [10].

Apresentam extensões variadas, desde pequenos campos de dunas, como em Jericoacoara, Ceará, até grandes campos, como no Saara. A maioria ocorre em regiões desérticas com muitos sedimentos disponíveis. A região do entorno é importante para definir como será o campo de dunas. A disponibilidade sedimentar, o clima, assim como a topografia e o espaço disponível, são fatores importantes que ditam e contextualizam um campo de dunas.

Os campos de dunas possuem classificação hierárquica quanto à escala espacial de suas estruturas, *ripples*, dunas e draas, respectivamente na ordem de 10^{-2} a 10^{-1} , 10 a 10^2 e 10^2 a 10^3 metros. É comum encontrar *ripples* na superfície de dunas e dunas e draas coexistem em quase-equilíbrio.

4.3.2 Como as dunas se formam

Os fluxos movem os sedimentos através dos tipos de transporte, já descritos, como arraste (e/ou rolamento), saltação e suspensão. As ondulações desses sedimentos são produzidas, com areia e fluxo suficientes, e qualquer irregularidade na camada pode

iniciar uma duna. Através da diferenciação que as linhas de fluxos assumem em torno de um obstáculo, geram regiões de sombras, e esses montículos iniciais evoluem até se coalescerem numa forma dunar. A duna se desenvolve e começa a migrar de acordo com fluxo [24].

O fluxo acelera na face à barlavento até o topo, aumentando a tensão de cisalhamento e, na face à sotavento, quando a superfície diverge, próximo à face de escorregamento, o fluxo se separa, criando uma zona de esteira. Na região de esteira, existe a presença de circulações secundárias, com vórtices rotacionando contra a face de escorregamento e com baixa velocidade, gerando uma zona de deposição. Esta região é chamada de bolha de separação [4].

As linhas de fluxo voltarão a se encontrar com a superfície após uma distância aproximadamente seis vezes maior que a altura da crista [22]. A Figura 4.9 mostra os vetores velocidade coloridos segundo a magnitude (aumentando do vermelho ao azul) e exemplifica bem o ponto de separação e o vórtice na região de esteira.

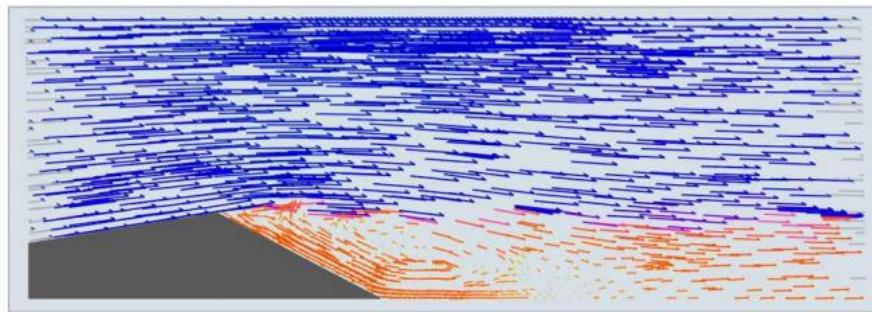


Figura 4.9 Vetores de velocidade em um fluxo através de uma duna barcana, simulado com CFD [24].

4.3.3 Estudo das dunas de areia

Dunas de areia tem sido estudadas em laboratório, através de experimentos de túneis de vento ou em canais, experimentos em campo, análises teóricas e simulação computacional. Porém os experimentos em laboratório não são adequados para estudar as dinâmicas de campos de dunas de grande escala, devida à baixa similaridade dinâmica. Os experimentos de campo são caros e por curtos períodos em relação ao tempo de evolução das dunas. Assim, a construção de modelos numéricos para simular o desenvolvimento de dunas é desejável.

4.3.4 Dunas Barcanas

A palavra “*barchan*” vem da língua turca e significa “duna ativa” (Figura 4.10). Menos de 1% das dunas do mundo são desta forma, como dito anteriormente, existem principalmente em locais de ventos unidirecionais e pouca disponibilidade de areia e seu formato é de lua crescente. A altura mínima da duna barcana eólica é entre 1 a 2 metros [29] e chega até 50 metros [22]. E, segundo [17], a velocidade de migração da duna barcana em ambiente eólico é inversamente proporcional à sua altura, segundo [30], essa relação também vale para dunas subaquosas.



Figura 4.10 Dunas barcanas no litoral do Pacífico, Peru (Foto: George Steinmetz).

As dunas barcanas geradas em meios aquosos, em laboratório, levam menos tempo e possuem tamanhos menores, de 1 a 10 cm de comprimento e 1 a 10 mm de altura, sendo mais fáceis de serem estudadas [28].

A morfologia da duna barcana é composta por dois chifres, uma face à barlavento, uma face de escorregamento, crista e beirada. A Figura 4.11 e Figura 4.12, mostram um esboço desta descrição.

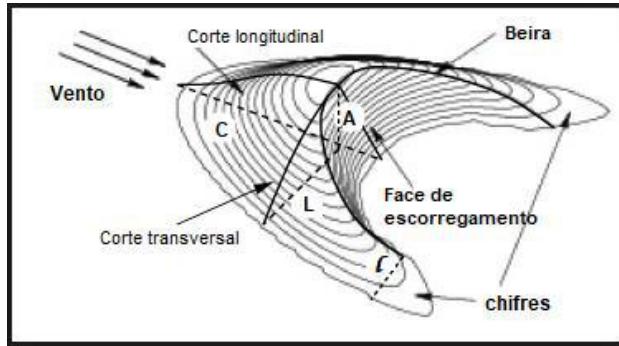


Figura 4.11 Esboço de uma duna barcana 3D [31].

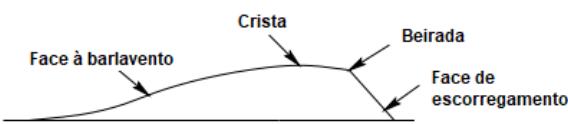


Figura 4.12 Esboço do perfil da duna barcana [22].

Quando o fluxo do vento supera as condições limites de movimento, a areia à barlavento é erodida e depositada à sotavento. A crista não coincide com a beirada, que define a face de avalanche, a crista é o ponto mais alto, que gerará pequenas avalanches de areia e a separação do fluxo.

A face à barlavento tem entre 5° e 15° e a face à sotavento varia entre 30° e 34° , dependendo das características do grão, porém, mais comumente, a face de escorregamento será formada, aproximadamente, em 34° , mantida pelas avalanches [4].

As formas dessas dunas parecem estar ligadas ao comprimento de saturação, a distância que o fluxo percorre para estar saturado acima de uma camada arenosa. Este comprimento (l_s) parece ter uma complexa dependência da tensão cisalhante.

A formação de um fluxo de retorno na região de deslizamento, mantém a inclinação da face de escorregamento. Este processo, acompanhado de um fluxo em volta da duna, e um aumento da erosão em ambos os seus lados, resulta na formação de dois chifres. Ao passo que a areia é presa na região para qual escorregou, onde a tensão cisalhante do vento não é forte o suficiente, enquanto a ausência de face de escorregamento nos chifres permite que a areia seja erodida deles.

A bolha de separação preenche quase exatamente a região entre os chifres e a altura da duna barcana. De acordo com [23], a velocidade da duna diminui inversamente proporcional ao tamanho do envelope da duna junto com a bolha de separação.

4.4 Deposição

O sedimento é derivado de uma fonte, é mobilizado, transportado e depositado. Algumas vezes a deposição pode ser abrupta, mas é mais comum ser gradual. As estruturas sedimentares hoje observadas foram depositadas permanentemente e preservadas. Mas por que os grãos foram depositados? Pode-se pensar que, naquele ponto, as condições foram tais que o fluxo ficou sobrecarregado e assim o sedimento foi depositado. Porém há muito mais envolvido na deposição da partícula do que simplesmente o assentamento dela, a análise da origem do sedimento, como chegou até ali e por que mais sedimento estava caindo da suspensão do que sendo recolocado em movimento.

De acordo com os estudos de [12], existem alguns modos de deposição, relatados abaixo (classificação não oficial):

- Queda sem tração: é o mais simples de todos, os sedimentos, que antes estavam suspensos por um fluxo, agora estão assentados e não serão mais transportados. A velocidade do fluxo vigente durante a deposição possui velocidade inferior ao limiar para o transporte ou é inexistente. Lembrando que essa velocidade limiar depende do tamanho da partícula e da profundidade do fluxo. As partículas depositadas por esse modo raramente serão maiores que areia muito fina já que fluxos mais fortes, necessários para colocar tais tamanhos em suspensão, suspenderiam a camada depositada depois que esse sedimento maior aterrissasse.

- Queda com tração: As partículas assentadas após a suspensão podem ser movidas ao longo da camada ou serem temporariamente ressuspensas, para, posteriormente, ficarem paradas e serem enterradas por outras partículas à medida que a camada se acumula. Os fluxos podem ter uma variedade de velocidades e o tamanho dos grãos pode ir de silte a cascalho, a única condição é que o fluxo não esteja tão sobrecarregado com sedimentos a ponto que não haja uma explícita separação entre fluxo e camada sedimentar.

- Transporte diferencial: considere um volume em uma camada de sedimento, se o fluxo de partículas que entra for superior ao que sai, logo há deposição de sedimento neste volume, e este fenômeno se chama transporte diferencial. A velocidade do fluxo pode variar bastante neste tipo e o tamanho das partículas pode ir de silte a cascalho, lembrando que quanto mais grosso for o sedimento outros modos de deposição podem estar envolvidos.

- Deposição de massa: Quando a concentração sedimentar é tão alta, que é difícil distinguir o fluxo da camada, há uma deposição quase que instantânea de uma grande quantidade de sedimento, e o fluxo passa a ocorrer acima deste novo assentamento. É típico de fluxos gravitacionais, como avalanches e fluxos turbidíticos, especialmente nas suas fases iniciais. As condições durante este tipo de deposição são complicadas de serem observadas e a velocidade de deposição é rápida, inclusive os fluxos envolvidos são mais poderosos e em maiores escalas do que nos casos anteriores. Envolve grande variedade de tamanhos de partículas.

Dependendo do fluxo, do ambiente e das partículas envolvidas, diversos tipos de depósito podem ser formados, com gradações de tamanhos de grãos variados em diversos arranjos espaciais, com formas, texturas e acamamentos distintos, compondo a assinatura de um paleoambiente.

5. MÉTODOS COMPUTACIONAIS E PROGRAMAS

A compreensão dos mecanismos fundamentais do transporte sedimentar, particularmente aqueles durante a formação e evolução das formas da camada, é de grande importância para ciência e tem relevância para engenharia. Abordagens tradicionais de simulações do transporte sedimentar dependem fortemente do modelo empírico, que não são hábeis de capturar a riqueza física do sistema em desenvolvimento.

Com o aumento da disponibilidade de ferramentas computacionais na última década, CFD-DEM emergiu como um método viável, de alta fidelidade, para o estudo do transporte sedimentar. Entretanto, ainda há falta de estudos sobre a geração e migração de diferentes padrões de camadas sedimentares, o que é compreensível.

Diversos modelos de alta fidelidade foram propostos, entre eles, o modelo de dois fluidos, o modelo de partículas e o modelo de interface. O modelo de dois fluidos descreve as partículas como um contínuo e, desta forma, necessita de relações de acoplamento para levar em consideração as interações entre partículas e entre fluido-partícula. O modelo de partículas acompanha explicitamente o movimento de cada uma das partículas e suas colisões, o que é computacionalmente mais custoso que o modelo anterior. No modelo de interface, não somente as partículas são resolvidas, como as linhas de fluxo do fluido também são, consequentemente, este método é ainda mais custoso que o anterior e requer ainda menos cálculos empíricos [32].

Neste contexto, simuladores de propósito geral baseados no modelo de partículas passaram a ser utilizados no estudo do transporte sedimentar. Estes simuladores são baseados no acoplamento de dois modelos, o CFD, responsável pela simulação da dinâmica do fluido, e o DEM, responsável pela simulação da interação entre as partículas.

As simulações são executadas usando o SediFoam, um resovedor de código aberto, tridimensional e massivamente paralelo de CFD-DEM. É um solucionador para vários propósitos onde existe fluxo carregado com partículas acompanhado de questões sobre o transporte particular. Foi implementado a partir da criação da interface para acoplar dois solucionadores, de ampla aceitação na comunidade, também de código aberto, OpenFOAM e LAMMPS [3].

5.1 CFD

Dinâmica de fluido computacional (*Computational fluid dynamics*) é a ciência que prevê o fluxo do fluido, a transferência de calor e de massa, as reações químicas e outros fenômenos relacionados, resolvendo equações matemáticas através de métodos numéricos.

A análise do CFD se inicia com a modelagem matemática e física do problema, onde deve haver a conservação da matéria, momento e energia, e as propriedades do fluido são modeladas empiricamente [13].

Para a solução das simulações, utilizam-se métodos numéricos para calcular aproximações das equações que regem a mecânica do fluido na região de interesse, para tanto, a região simulada deverá ser subdividida em células, e as equações são resolvidas numericamente dentro de cada célula [33].

Um dos principais métodos utilizados em CFD é o método do volume finito (FVM), que representa e resolve as equações diferenciais parciais na forma algébrica dentro das células de uma malha geométrica. Os valores das variáveis nas faces dos volumes são determinados por interpolação e os resultados do método são dados por um conjunto de equações algébricas lineares, uma para cada célula, que são resolvidas iterativamente e simultaneamente. As principais vantagens do método do volume finito são que propriedades como massa, momento e energia são conservadas mesmo em malhas irregulares e mais grossas [13].

Com a introdução dos efeitos da turbulência nas equações de Navier-Stokes diversas incógnitas são introduzidas, o que levou a criação de diversos modelos para a sua resolução, vide Figura 5.1, sendo eles:

1. DNS (*Direct Numerical Simulation*) cria uma malha extremamente fina com o intuito de separar todos os vórtices em células e realizar o cálculo diretamente, desta forma não há necessidade de se criar modelos matemáticos, entretanto requer um número muito alto de interações, na ordem de Re^3 [33].
2. LES (*Large Eddy Simulations*) cria uma malha de tamanho intermediário que desconsidera os vórtices pequenos, o que obriga a criação de modelagens matemáticas para compensar as aproximações decorrentes da malha, este método apresenta uma eficiência computacional maior, necessitando de um número menor de interações na ordem de Re^2 [33].
3. RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) cria uma malha cuja célula é tão grande a ponto de englobar a maior parte dos vórtices, e desta forma requer o desenvolvimento de uma extensa modelagem matemática, porém, apresenta menor gasto computacional, necessitando de um número de interações na ordem de Re [33].

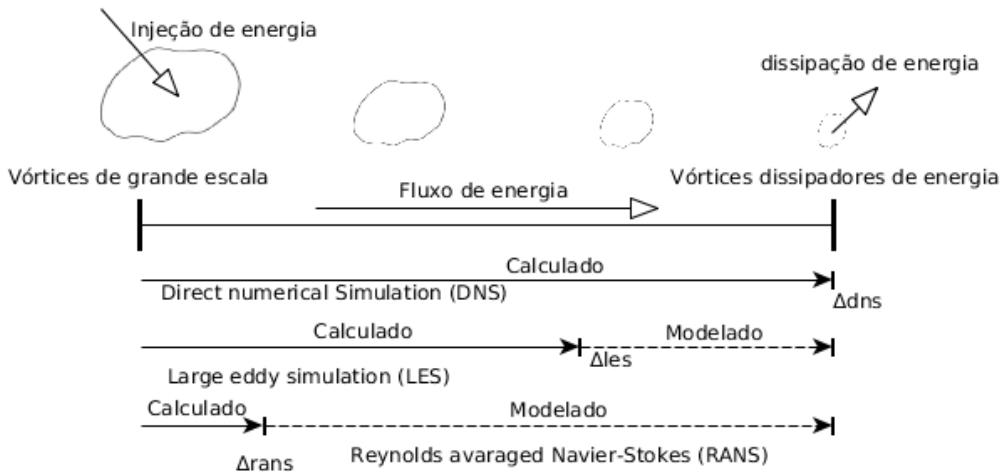


Figura 5.1 Comparaçāo entre os mētodos numéricos [13].

O modelo estrutural e os procedimentos numéricos dos mētodos LES e RANS sāo similares podendo ser utilizados pelo mesmo código numérico. Entretanto, LES é arquitetado para mētados de vórtices portadores de energia e requer uma resolução espacial e temporal maior que RANS, porém, conforme o tamanho da malha e o passo temporal aumentam, os resultados dos mētodos se tornam similares [4].

CFD pode ser aplicado em inúmeras situações, tem baixo custo, simula situações reais e ideais, permite grande controle sobre a modelagem do fenômeno físico e gera uma gama de informações muito maior que testes experimentais. Porém, também, possui limitações como, o tempo de simulação, a precisão das condições de contorno, erros numéricos e de aproximações.

5.1.1 Discretização local das equações de Navier-Stokes para fluidos

O fluido será descrito pelas equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis, discretizadas localmente. Ao assumir a densidade do fluido constante p_f , as equações que governam a dinâmica do fluido são:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_s U_s + \varepsilon_f U_f) = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_f U_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_f U_f U_f) = \frac{1}{p_f} (-\nabla p + \nabla \cdot \mathcal{R} + \varepsilon_f p_f g + F^{fp}) \quad (5.2)$$

Onde ε_s representa a fração sólida do volume, ε_f a fração do fluido no volume ($\varepsilon_s + \varepsilon_f = 1$), U_f é a velocidade do fluido e U_s é a velocidade da fração sólida. Os termos do lado direito da Equação 5.2 são: o gradiente de pressão ∇p , o divergente do tensor de tensão ($\nabla \cdot \mathcal{R}$), a força da gravidade e as forças fluido-partícula (F^{fp}) [3].

Para o cálculo computacional, foi utilizado o método dos grandes vórtices (LES) para a solução da turbulência do fluxo no domínio computacional. E os campos Eulerianos foram obtidos a partir da média dos Lagrangianos das partículas.

5.1.2 OpenFOAM

OpenFOAM é software de código aberto voltado para simulações e soluções de problemas que envolvam mecânica de meios contínuos, como fluidos. Seu nome vem de “Open source Field Operation And Manipulation” e significa que seu status é livre, sua fonte aberta e que atua na área de operação e simulação. É uma ferramenta de CFD que opera simulações de fluxos fluidais 3-D em malhas não-uniformes, conforme exemplificado na Figura 5.2.

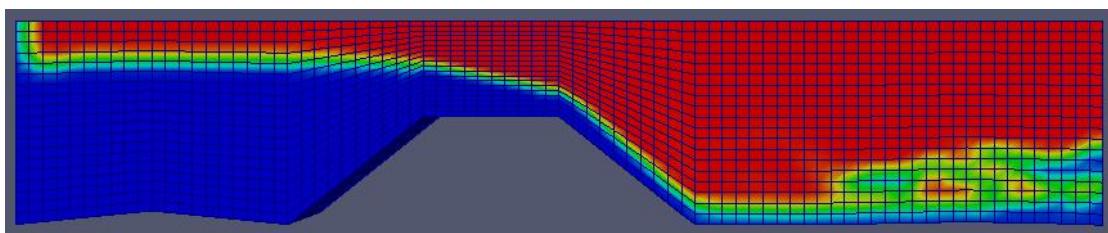


Figura 5.2 Exemplificação de malhas não-uniformes

O OpenFOAM é originalmente uma biblioteca desenvolvida numa linguagem orientada a objetos, C++, que permite criar solucionadores padronizados com relativa facilidade, devido à sua sintaxe para operações com tensores e equações diferenciais parciais. A biblioteca é utilizada, principalmente, para a criação de executáveis, conhecidos como aplicativos, que se enquadram em duas características: os solucionadores, que são projetados para a solução de problemas específicos, e utilitários, que executam tarefas relativas à manipulação de dados. Esta biblioteca base dispõe de estruturas essenciais dos códigos [34]:

1. Operações tensoriais e de campo;
2. Discretização de equações diferenciais parciais usando uma sintaxe legível;
3. Solução de sistemas lineares;
4. Solução de equações diferenciais ordinárias;
5. Paralelização automática de operações de alto-nível;
6. Malha dinâmica;
7. Modelos físicos gerais:
 - a. Modelos reológicos;
 - b. Modelos termodinâmicos e base de dados;
 - c. Modelos de turbulência;
 - d. Reações químicas e modelos cinéticos;
 - e. Métodos de rastreamento Lagrangiano de partículas;
 - f. Modelos de transmissão de calor por radiação;
 - g. Metodologias de estrutura multirreferenciada e simples-referenciada.

Devido a esta característica, o OpenFOAM permite ao usuário criar novos solucionadores e utilitários conforme suas demandas específicas, o que traz uma grande flexibilidade e possibilidades para as soluções de diversos cenários reais, conforme estrutura da Figura 5.3.

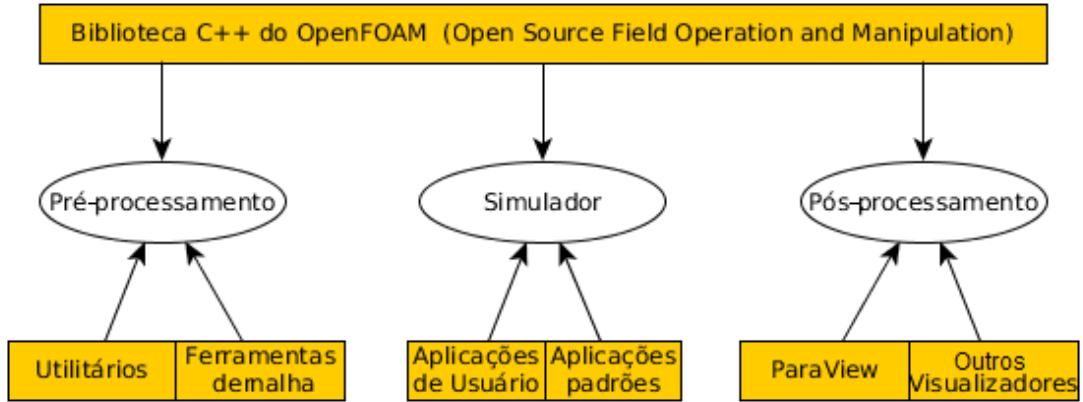


Figura 5.3 Arquitetura OpenFOAM

O usuário pode então criar diversos arquivos de entrada personalizados, com condições de contorno e modelos de turbulência que irão funcionar nos aplicativos existentes sem a necessidade de modificar ou recompilar o código existente. Isso se deve pela combinação entre construtores virtuais com o uso de classes de base simplificadas, como interfaces.

5.2 DEM

É um método numérico criado para simular matérias discretas, na escala de partícula, e modelar o comportamento médio de compostos granulares, obtido através do conjunto de interações de cada uma das partículas. É capaz de capturar a natureza dual do meio granular, que se comporta ora como fluido e ora como sólido.

Compreende o estudo de materiais granulares, mecânica das rochas, análises de estruturas, mecânica dos solos e outros. É um dos métodos mais populares que usa abordagem de modelagem discreta, e foi criado em 1979 por [35].

Diferente de modelos contínuos, como o FEM (método dos elementos finitos), em modelos discretos, a matéria é descontínua, onde cada partícula é um elemento único, e é possível a modelagem da micromecânica granular, sendo muito mais simples.

O ciclo de processamento ocorre a partir da análise dos contatos entre as partículas, dos quais são calculadas as forças atuantes nelas, que fornecerão as suas acelerações pela segunda lei de Newton. As velocidades e posições serão obtidas por integração numérica a cada intervalo de tempo, (Figura 5.4). Depois que as novas posições são atualizadas, novos contatos são gerados e recomeça o ciclo (Figura 5.5).

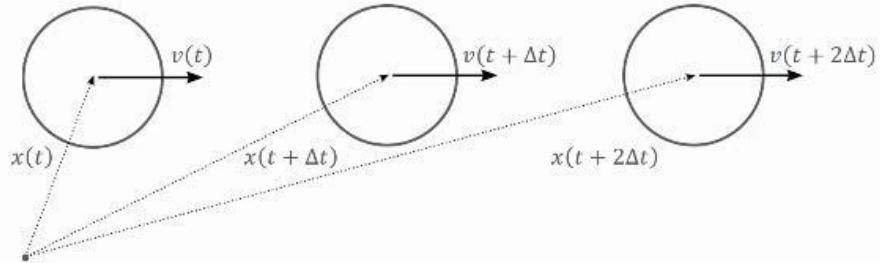


Figura 5.4 Demonstração do processo de integração numérico [40].

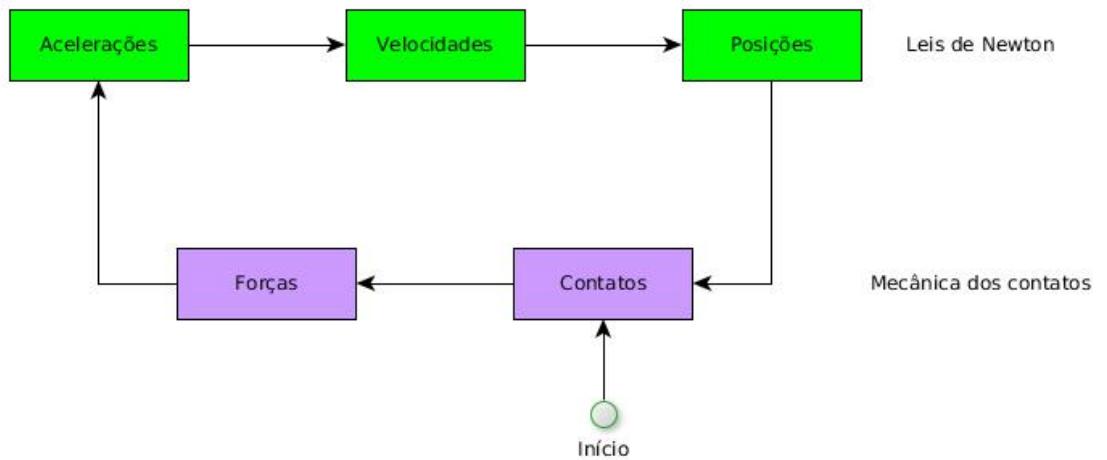


Figura 5.5 Fluxograma do DEM.

Dentro do ciclo de processamento, a fase de detecção de contatos é a que mais requer processamento. Para isso, o domínio é dividido em células, identificam-se as células que contêm partículas, chamadas de ativas, verifica-se quais destas possuem contatos e realiza-se os cálculos das forças. Então as partículas são reposicionadas e as células ativas recalculadas (Figura 5.6).

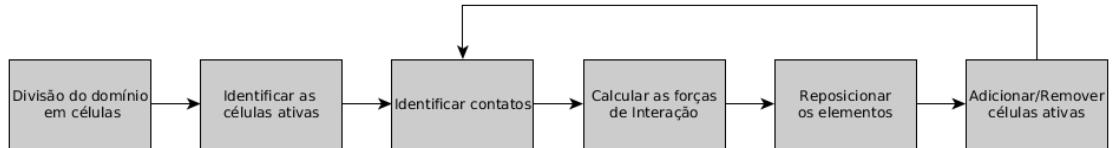


Figura 5.6 Metodologia de detecção de contatos.

Para representar as forças de interação entre partículas, foi desenvolvido o modelo mola-amortecedor (Figura 5.7), que representa as forças elásticas como uma mola e as forças viscosas como um amortecedor. Onde a força normal elástica é linearmente proporcional à distância de sobreposição. No LAMMPS é utilizado o modelo *Gran/Hooke/History*, que utiliza esta abstração para o cálculo das interações entre as partículas.

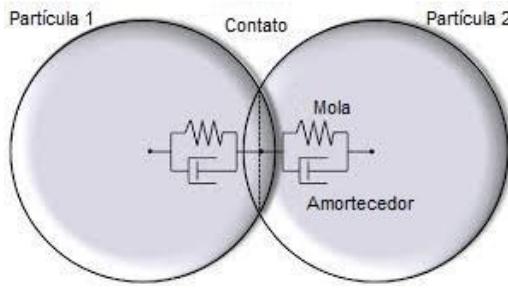


Figura 5.7 Modelo mola-amortecedor.

5.2.1 Modelo matemático do movimento particular

Na técnica CFD-DEM, o movimento translacional e rotacional da partícula são calculados a partir da segunda lei de Newton, conforme as equações abaixo:

$$m \frac{du}{dt} = f^{cont} + F^{fp} + mg \quad (5.3)$$

$$I \frac{d\psi}{dt} = T^{cont} + T^{fp} \quad (5.4)$$

Onde u representa a velocidade da partícula, t o tempo, f^{cont} e T^{cont} as forças e o torque de contato, respectivamente, F^{fp} e T^{fp} as forças e o torque das interações fluido-partícula, g a gravidade, m a massa, I e ψ o momento de inércia e a velocidade angular, respectivamente.

Para o cálculo das interações entre partículas, serão consideradas partículas esféricas e o modelo de mola-amortecedor, para o cálculo das forças de contato.

5.2.2 LAMMPS

LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) é um código livre, licenciado pela GPL (*GNU Public License*), de dinâmica molecular que modela conjuntos de partículas em estado líquido, sólido ou gasoso, podendo modelar sistemas atômicos, poliméricos, biológicos, granulares e metálicos utilizando uma variedade de campos de força e condições de contorno.

Foi desenvolvido pela *Sandia National Laboratories*, para computação paralela, rodando em qualquer máquina que compile C++, com suporte à MPI (*message-passing interface*). O que inclui distribuição ou compartilhamento de memória em máquinas paralelas e clusters Beowulf (Figura 5.8), podendo simular sistemas com poucas partículas até bilhões.



Figura 5.8 Cluster Beowulf [36].

De modo geral, LAMMPS integra as equações de Newton do movimento para grupos de átomos, moléculas ou partículas macroscópicas, que interagem entre si através de forças de curto e longo alcance, sobre uma grande variedade de condições iniciais e de contorno. Com o intuito de obter uma maior eficiência computacional, são utilizadas listas das vizinhanças das partículas, que são otimizadas para partículas com forças repulsivas a curta distância, de forma que a densidade local das partículas nunca fique muito grande.

Em ambientes paralelizados, o LAMMPS realiza a decomposição espacial do domínio em pequenos subdomínios tridimensionais e delega o processamento deles para cada um dos processadores disponíveis, que mantém as informações das partículas nas bordas dos subdomínios na forma de “fantasmas” e se comunicam entre si através do MPI.

É utilizado pelo SediFoam, no cálculo das interações entre partículas, como DEM, onde requer, como entrada, um arquivo de texto contendo uma lista das coordenadas das posições iniciais, dos tipos de partículas, suas forças e velocidades iniciais e quaisquer coeficientes relevantes na interação entre partículas.

5.3 SediFoam- um solucionador de CFD-DEM.

Com seu trabalho pioneiro, Schmeeckle [37] usou o CFD-DEM para estudar o transporte sedimentar em suspensão, porém, a limitação do seu trabalho foi desconsiderar a influência da fração de volume da partícula no fluxo. Muito provavelmente, essa escolha foi feita para evitar os efeitos desestabilização nas equações de LES. Além disso, a lei de arraste adotada também não contabiliza a fração volumar, não sendo hábil em representar os efeitos da variação das partículas no fluido em diferentes condições de carga sedimentar, focando somente na suspensão em camadas inexpressivas [37].

Resultados melhores são obtidos quando os efeitos da fração de volume da partícula na dinâmica de fluidos e das forças de interação fluido-partícula são apropriadamente considerados. Então, quando usado apropriadamente, CFD-DEM pode ser uma ferramenta prática e poderosa para aprofundar o conhecimento dos fundamentos da dinâmica do transporte sedimentar sob diversos regimes [32].

CFD-DEM é capaz de capturar as características essenciais do transporte sedimentar sob diferentes regimes com uma pequena fração de custo computacional em relação ao modelo resolvidor de interface. E, ainda assim, características detalhadas da dinâmica de camadas em fluxos turbulentos são reproduzidas corretamente, o que é além do que o modelo de dois fluidos consegue obter.

SediFoam foi desenvolvido originalmente por Heng Xiao para o estudo da segregação de partículas, sendo posteriormente aperfeiçoado com a adição de capacidades de processamento paralelo e a implementação de algoritmos para cálculo de transporte sedimentar, tendo o seu código fonte disponível desde 2014 em: <https://github.com/iurnus/SediFoam.git> [3].

O SediFoam inclui: as forças de lubrificação e a adição de massa na partícula; o algoritmo para mapear propriedades Lagrangianas em Eulerianas; o algoritmo paralelo e testes de performance.

O diagrama da Figura 5.9 mostra o funcionamento do programa. As equações das partículas e dos fluidos são resolvidas individualmente pelos módulos de CFD e

DEM, a cada passo. Adicionalmente aos módulos, as informações sedimentares das partículas são atualizadas, antes do módulo CFD começar a resolver as equações dos fluidos, e as informações das interações entre as partículas são atualizadas antes do módulo de DEM começar a executar. Esses procedimentos são devido ao acoplamento dos dois programas OpenFOAM e LAMMPS, que foram implementados através de algoritmos paralelos, o que permite a simulação de problemas de grande escala.

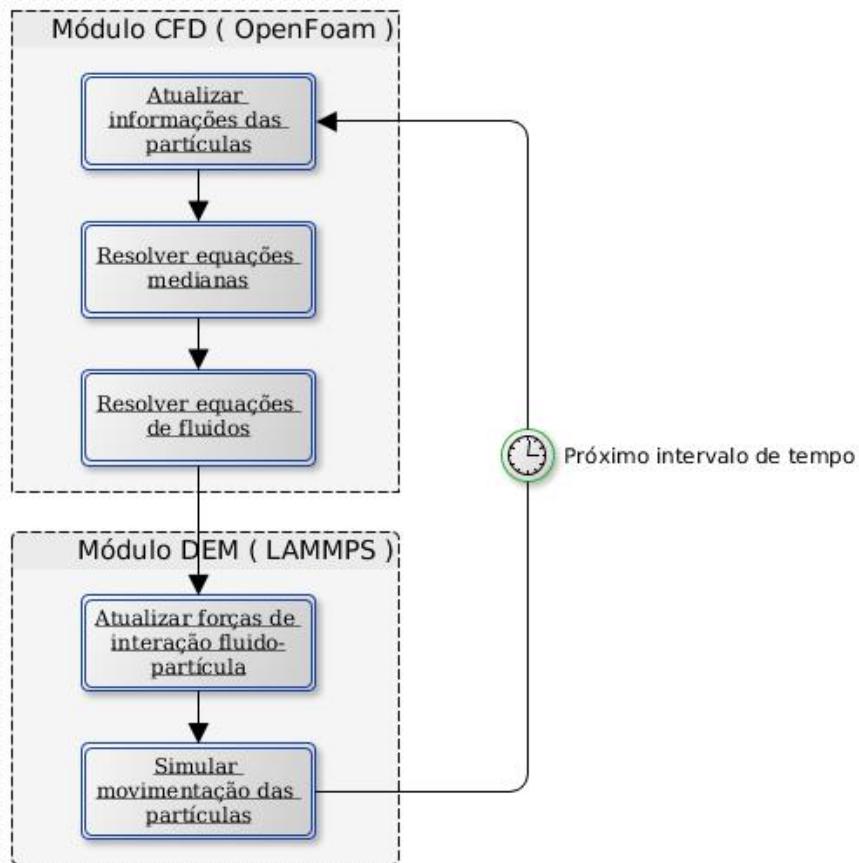


Figura 5.9 Fluxograma SediFoam.

Ao se definir o intervalo de tempo, é importante levar em consideração dois fatores que compõem uma solução de compromisso: o tempo de execução da simulação e a precisão. Ao se definir um intervalo de tempo muito pequeno, o programa irá realizar mais ciclos, que demoram em média o mesmo tempo, e o tempo total de simulação será muito grande, porém, a escolha de um intervalo de tempo muito grande causa dois problemas, uma grande imprecisão na medida e a possibilidade do deslocamento das partículas a ponto de ocuparem o mesmo local no espaço, o que leva a falha da simulação.

Nas simulações com 500 partículas, as propriedades do fluido e da partícula obtidas foram consistentes com os resultados obtidos pelo método de interface, indicando que o SediFoam possui uma acurácia desejável. As simulações que utilizam $O(10^5)$ demonstraram a capacidade do SediFoam em simular diversos regimes de transporte sedimentar. Testes de eficiência em paralelismo foram executados, para verificar a escalabilidade SediFoam, e geraram resultados satisfatórios quando comparados com outros softwares de CFD-DEM [3].

Testes validadores foram realizados para demonstrar a capacidade do CFD-DEM em múltiplos cenários de regime de transporte sedimentar. A comparação dos resultados das simulações com os dados de referência experimentais e numéricos, demonstraram o mérito do CFD-DEM. Este resovedor traz mais acurácia na predição da taxa de transporte sedimentar por contabilizar apropriadamente a influência da fração de volume da partícula no fluxo fluidal. E, assim, demonstra que CFD-DEM é o futuro da abordagem dos programas que resolvem estes tipos de problemas por aprofundar a física do transporte sedimentar induzido por corrente [32].

5.3.1 Interações Fluido-Partícula

A força de interação partícula fluido (F^{fp}) consiste no somatório das seguintes forças: força de empuxo (F^{buoy}), arraste (F^{drag}), sustentação (F^{lift}), e adição de massa (F^{add}). Usualmente as forças F^{lift} e F^{add} são desprezadas em simuladores CFD-DEM, porém, no contexto do transporte sedimentar, elas não podem ser desprezadas. A força da arraste para uma partícula i pode ser obtida através da Equação 5.5:

$$F_i^{drag} = \frac{V_{p,i}}{\varepsilon_{f,i}\varepsilon_{s,i}}\beta_i(u_{p,i} - U_{f,i}) \quad (5.5)$$

Onde $V_{p,i}$ e $u_{p,i}$ representam o volume e a velocidade da partícula i , respectivamente, $U_{f,i}$ a velocidade do fluido interpolada para o centro da partícula e β_i o coeficiente de correlação do arraste. A força de sustentação será dada pela seguinte fórmula:

$$F_i^{lift} = C_l p_f v^{0.5} d_p^2 (u_{p,i} - U_{f,i}) \times \nabla U_{f,i} \quad (5.6)$$

Onde d_p representa o diâmetro da partícula e $C_l = 1.6$ o coeficiente de sustentação. A força de adição de massa é dada pela Equação 5.7:

$$F_i^{add} = C_{add} p_f V_{p,i} \left(\frac{du_{p,i}}{dt} - \frac{dU_{f,i}}{dt} \right) \quad (5.7)$$

E $C_{add} = 0.5$ representa o coeficiente de adição de massa.

6. INSTALAÇÃO

Segundo a wiki, presente no repositório do SediFoam, a versão atual suporta apenas as versões 2.3.0, 2.3.x e 2.4.0 do OpenFOAM e a versão lamps-1Feb14 do LAMMPS, caso utilizada outra versão do LAMMPS, erros de compilação podem ocorrer [38].

Diante deste cenário, foi optado por manter a versão recomendada do LAMMPS, utilizar a versão 2.4.0 do OpenFOAM e ainda utilizar uma versão do sistema operacional compatível com as versões citadas e contemporânea a elas, sendo escolhido o Ubuntu 14.04.

Para realizar a instalação com sucesso é necessário instalar todos os pré-requisitos dos programas, listados na tabela abaixo, sendo interessante ressaltar que as instalações por pacotes utilizam um gerenciador que lida com as dependências de forma automatizada.

Tabela 6.1 Dependências SediFoam.

SediFoam	OpenFOAM 2.40
	LAMMPS lamps-1Fev14

Tabela 6.2 Dependências LAMMPS

LAMMPS	libcr-dev
	mpich2
	mpich2-doc
	libmpich-dev
	fft2
	fftw-dev
	libxaw7-dev

Tabela 6.3 Dependências OpenFOAM

OpenFOAM 240	csh
	g++
	libreadline-dev
	libboost-thread1.54.0
	libc6
	libcgal10
	libgcc1
	libgmp10
	libhwloc5
	libmpfr4
	libopenmpi1.6
	libptscotch-5.1
	libreadline6
	libschotch-5.1
	zlib1g
	binutils-dev
	flex
	libschotch-dev
	libopenmpi-dev
	libxt-dev
	openmpi-bin
	libcgal-dev
	libvtk5-dev
	paraview-dev
	cmake

6.1. Instalação do OpenFOAM

Para a instalação do OpenFOAM não foi necessário compilar o código, pois já existia o pacote em um repositório, bastando adicioná-lo e realizar a instalação pelo gerenciador de pacotes, o que foi realizado com os seguintes comandos:

Código 6.1 Script para instalação do OpenFOAM.

```

apt-get update
apt-get -y install software-properties-common
add-apt-repository http://dl.openfoam.org/ubuntu
apt-get -y install wget
sh -c "wget -O - http://dl.openfoam.org/gpg.key | apt-key add -"
apt-get update
apt-get -y install openfoam240
apt-get -y install paraviewopenfoam410

```

6.2.Instalação do LAMMPS

Diferente do OpenFOAM, a versão necessária do LAMMPS não possui pacotes em repositórios, sendo, desta forma, necessário localizar a versão desejada no repositório do LAMMPS e compilá-la, o que foi feito com o seguinte script:

Código 6.2 Script para instalação do LAMMPS.

```
apt-get -y install libcr-dev mpich2 mpich2-doc
apt-get -y install build-essential git libmpich-dev fftw2 fftw-dev
libxaw7-dev
apt-get -y install python-matplotlib
cd /tmp/
wget https://github.com/lammps/lammps/archive/r11423.tar.gz
git clone https://github.com/xiaoh/sediFoam.git
gunzip r11423.tar.gz
tar xvf r11423.tar
mv lammps-r11423 /opt/lammps-1Feb14
make clean -C /opt/lammps-1Feb14/src/STUBS
make -C /opt/lammps-1Feb14/src/STUBS
make clean-all -C /opt/lammps-1Feb14/src
make serial -C /opt/lammps-1Feb14/src
```

6.3.Instalação do SediFoam

Após a instalação das dependências, OpenFOAM e LAMMPS, o pacote foi baixado do repositório e os passos indicados na wiki foram seguidos, conforme script abaixo:

Código 6.3 Script para instalação do SediFoam.

```
git clone https://github.com/xiaoh/sediFoam.git /tmp/sediFoam
cp /tmp/sediFoam/interfaceToLammps/MAKE/* /opt/lammps-
1Feb14/src/MAKE/
find /tmp/sediFoam/interfaceToLammps/ -maxdepth 1 -type f -exec cp
-t /opt/lammps-1Feb14/src/ {} +
make yes-granular -C /opt/lammps-1Feb14/src
make yes-manybody -C /opt/lammps-1Feb14/src
make yes-molecule -C /opt/lammps-1Feb14/src
make yes-fld -C /opt/lammps-1Feb14/src
make yes-rigid -C /opt/lammps-1Feb14/src
make yes-misc -C /opt/lammps-1Feb14/src
make yes-kspace -C /opt/lammps-1Feb14/src
make shanghailinux -C /opt/lammps-1Feb14/src
make makeshlib -C /opt/lammps-1Feb14/src
```

```

make -f Makefile.shlib shanghailinx -C /opt/lammps-1Feb14/src
mkdir -p $FOAM_RUN
mkdir -p $FOAM_USER_LIBBIN
ln -s /opt/lammps-1Feb14/src/liblammps_shanghailinx.so
$FOAM_USER_LIBBIN
cd /tmp/sediFoam/lammpsFoam/
wmake libso dragModels
wmake libso chPressureGrad
wmake libso lammpsFoamTurbulenceModels
var="LAMMPS_DIR = /opt/lammps-1Feb14/src/" && sed -i
"1c\\$var" /tmp/sediFoam/lammpsFoam/Make/options-ubuntu-
openmpi
mv /tmp/sediFoam/lammpsFoam/Make/options-ubuntu-openmpi
/tmp/sediFoam/lammpsFoam/Make/options
cd /tmp/sediFoam/lammpsFoam/Make/
wmake
mv /tmp/sediFoam /opt/SediFoam

```

6.4.Instalação do OVITO

Para a visualização dos resultados, foi necessário a utilização de um software, pois as saídas do SediFoam são pouco amigáveis e muito grandes (ordem de dezenas de Gigabytes por simulação), conforme exemplo abaixo.

Código 6.4 Exemplo da saída do SediFoam.

```

ITEM: Timestep
0
ITEM: Number of Atoms
216
ITEM: Box Bounds ppffpp
0 8
0 2
0 4
ITEM: Atoms id type diameter x y z
1 3 0.05 2.9381 0.915771 1.94601
2 3 0.05 2.97626 0.915771 1.90786
3 3 0.05 3.01441 0.953929 1.90786

```

Desta forma, a utilização de um programa para a visualização dos dados se faz imprescindível. Para cumprir com este propósito, o OVITO [39] foi escolhido devido à simplicidade do uso com uma interface amigável (Figura 6.1) e facilidade de instalação, pois basta realizar o download dos binários para utilizá-lo.

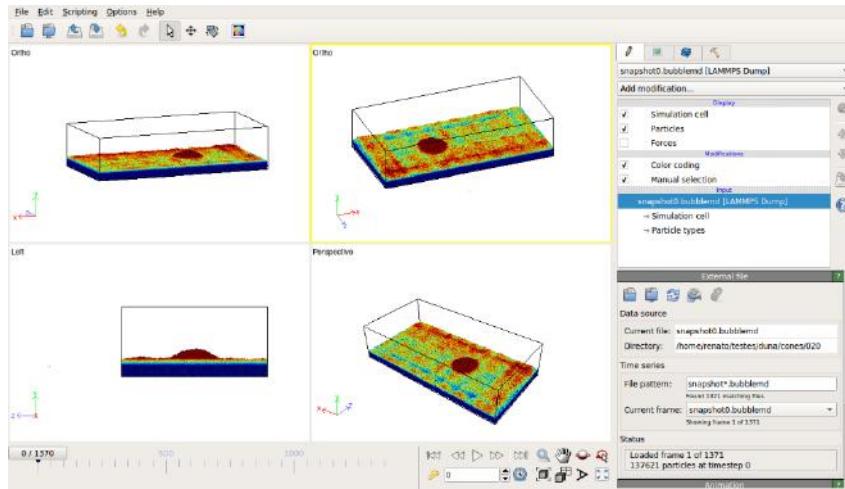


Figura 6.1 Interface do OVITO.

7. UTILIZAÇÃO DO SEDIFOAM

A utilização do SediFoam é baseada na criação de uma série de arquivos que servirão de entrada para o LAMMPS e para o OpenFOAM, e estes arquivos seguem a mesma arquitetura dos programas originais (Figura 7.1), ou seja, para utilizar o SediFoam é necessário saber utilizar o LAMMPS e o OpenFOAM.

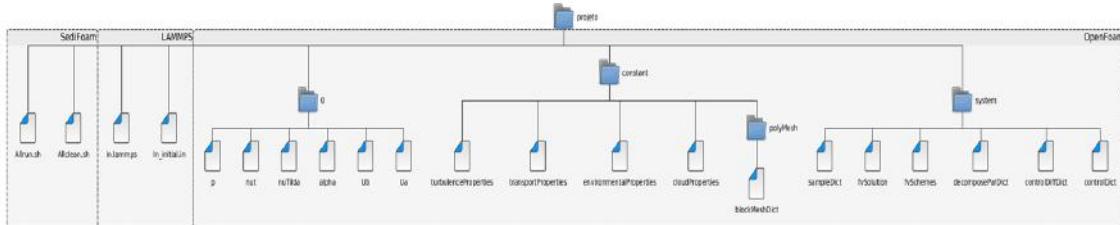


Figura 7.1 Estrutura de arquivos.

7.1. Arquivos do SediFoam

Estes arquivos são responsáveis por iniciar e limpar o ambiente de simulação, através de dois *shell* scripts, cuja finalidade está descrita abaixo:

- Allrun.sh: Script responsável por executar os comandos do OpenFOAM para preparar a malha de simulação e utilizar o MPI como interface de comunicação de dados, que irá controlar o processamento em paralelo da simulação. Através deste script é possível realizar a simulação em um único dispositivo, utilizando seus processadores, ou em um cluster com diversos dispositivos;

- b. Allclean.sh: Este script simplesmente remove as saídas da simulação que, por ventura, estejam no ambiente de simulação, sendo necessário rodá-lo sempre que uma nova simulação for executada.

7.2. Arquivos do LAMMPS

Os arquivos do LAMMPS são responsáveis por definir as forças de interação entre as partículas, a relações delas com as paredes da simulação, as forças de campo que influenciam a partícula e as posições iniciais.

- a. *in.lammps*: Este arquivo utiliza uma linguagem de notação onde cada linha contém um comando e seus respectivos argumentos. Nele são definidas todas as características da simulação entre partículas.
- b. *IN.INITIAL*: Este arquivo é opcional, e define a posição inicial de todas as partículas, assim como seus tipos, porém, em simulações com um grande número de elementos, seu uso se torna mandatório devido ao elevado consumo de memória necessária para posicionar todas as partículas.

Neste trabalho, foi tomado como base os arquivos do exemplo *vortex-dune* presente no artigo [32], sendo modificado: o arquivo *In_Initial*, que estabelece a posição inicial das partículas e o arquivo *in.lammps*, para alterar o passo da simulação, para as simulações no ar, e o formato do arquivo de saída da simulação, que gerará diversos arquivos em vez de apenas um.

7.3 Arquivos do OpenFOAM

O OpenFOAM recebe como entrada diversos arquivos que são divididos em uma estrutura de diretórios, onde cada diretório é destinado aos propósitos listados abaixo:

- a. 0: Neste diretório se encontram os arquivos responsáveis pela definição das condições iniciais do fluxo e, para este trabalho, foram mantidos os arquivos do exemplo;
- b. *constant*: Neste diretório encontram-se arquivos responsáveis pelas constantes de ambiente, como a densidade da partícula, a densidade do fluido, a velocidade média do fluido e outras.
- c. *constant/polyMesh*: Este diretório possui apenas um arquivo, o *blockMeshDict*, que é um dos principais arquivos do OpenFOAM, nele é

- definido todo o ambiente de simulação, ou seja, as dimensões do meio, as características das paredes e a divisão do meio em células.
- d. *system*: Neste diretório estão os arquivos que definem o funcionamento do programa como, por exemplo, o passo da simulação, o tempo de execução, o número de ambientes de processamento paralelo, e outros.

7.4 Preparação das simulações

Conforme apresentado anteriormente, as simulações realizadas neste trabalho utilizaram a simulação *vortex-dune* como base, realizando uma série de alterações nos arquivos de entrada de modo a adaptá-los ao cenário desejado.

As simulações foram executadas em um notebook com processador Intel® Core™ i5-4210U CPU @ 1.70GHz × 4, que possui apenas 4 núcleos de processamento disponíveis, sendo muito inferior ao ambiente utilizado nos artigos de referência, onde as simulações são executadas com 80 núcleos de processamento [38].

7.4.1 Criação da Camada Sedimentar

Para a criação da camada sedimentar, que será manipulada neste trabalho, foi utilizado o arquivo de entrada IN.INITIAL, disponível no repositório em */cases/example-cases/transport-suspended*. Este arquivo foi gerado a partir de uma simulação, na qual um bloco de bolinhas cai sobre uma superfície rígida uniforme, conforme Figura 7.2, Figura 7.3 e Figura 7.4.

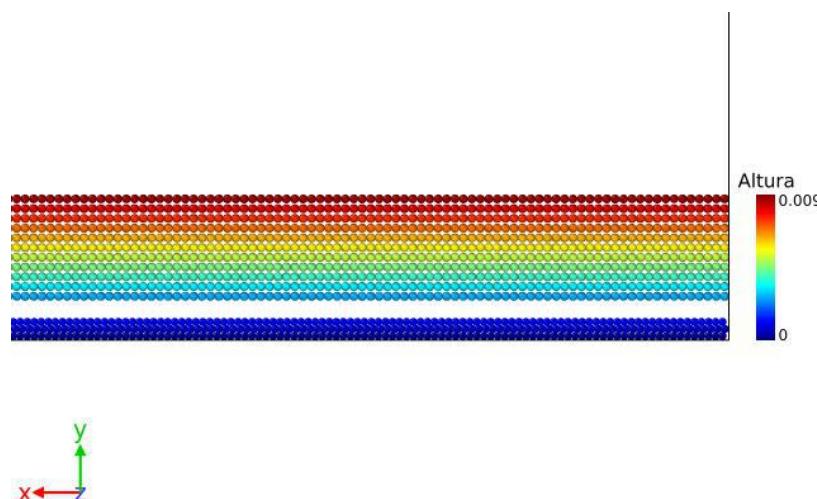


Figura 7.2 Posição inicial da camada matriz.

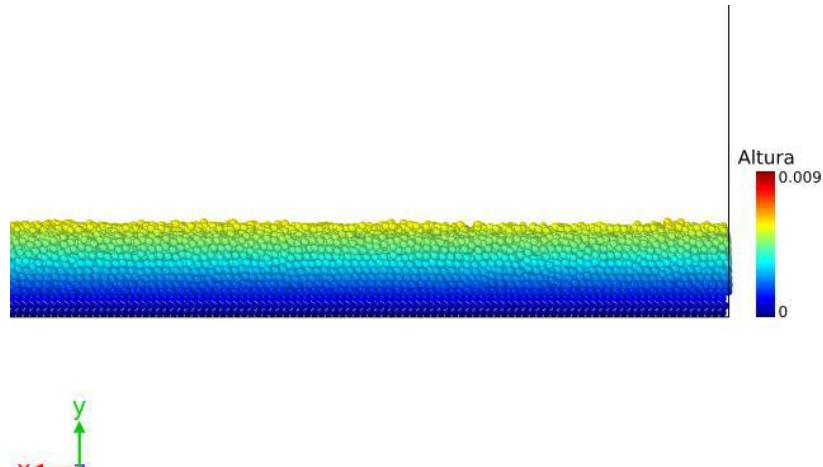


Figura 7.3 Posição final da camada matriz.

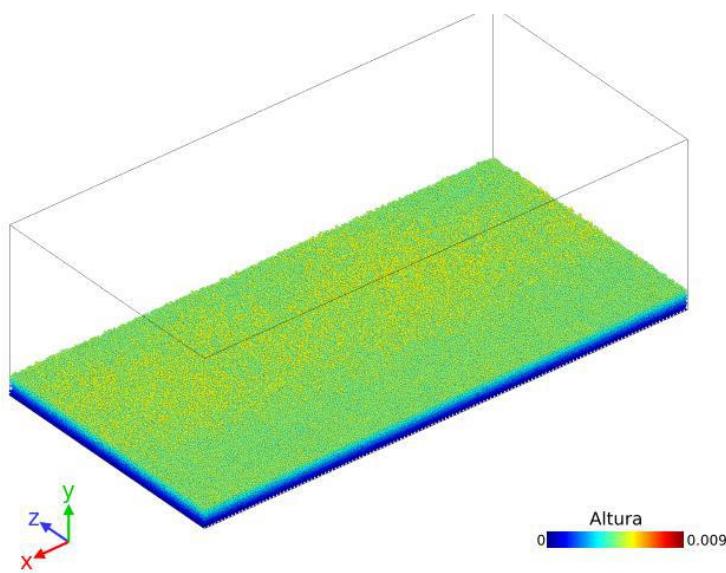


Figura 7.4 Camada matriz em perspectiva.

Foi utilizada, inicialmente, a camada sedimentar original do repositório, porém, o tempo necessário para a simulação estava muito alto, o que motivou a redução da área de simulação. Para isso foi necessário criar um script em Perl (Código 7.1), que restringiu a simulação apenas às partículas dentro desta nova área, já que as tentativas ao se criar uma camada menor geraram falhas na execução do programa.

Código 7.1 Script em Perl para seleção das partículas iniciais.

```

my $filename = "In_initial.in";
open(my $fh, '<', $filename) or die "Could not open file '$filename'
$!";
open(my $out, '>', "parsed") or die "Could not open file '$filename'
$!";

```

```

my $inside = 0;
my $index = 1;
while(my $line = <$fh> ){
    if($inside<10){
        $inside++;
        next;
    }
    chomp $line;
    my @fields = split(//, $line);
    my $diameter = $fields[3];
    my $density = $fields[4];
    my $type = $fields[2];
    my $x = $fields[5];
    my $y = $fields[6];
    my $z = $fields[7];
    if($x <= 0.08){
        print {$out} " $index $type $diameter $density $x $y $z\n";
        $index++;
    }
}

```

7.4.2 Criação da Malha de Simulação

Com a redução da camada sedimentar, foi necessário definir uma nova malha computacional, o que é realizado a partir da criação de um arquivo chamado BlockMeshDict, onde é ditado todo o ambiente de simulação no qual o OpenFOAM irá trabalhar.

A configuração deste arquivo é dividida em três etapas, a configuração dos vértices, a configuração das células e a configuração das faces.

Para a definição dos vértices, é preciso criar um vetor de vetores, conforme Código 7.2, onde cada vértice será posteriormente chamado a partir de sua posição no vetor de vértices.

Código 7.2 Definição dos vértices da simulação.

```

vertices
(
    (0.00 0.00 0.00)
    (0.08 0.00 0.00)
    (0.08 0.0015 0.00)
    (0.00 0.0015 0.00)
    (0.00 0.00 0.04)
    (0.08 0.00 0.04)
    (0.08 0.0015 0.04)
    (0.00 0.0015 0.04)

```

```

(0.00 0.02 0.00)
(0.08 0.02 0.00)
(0.08 0.02 0.04)
(0.00 0.02 0.04)
);

```

Após a criação e identificação dos vértices, as células são definidas através da seleção dos vértices que as limitam, onde os algoritmos de solução irão realizar suas aproximações. Para tanto, é necessário ter em mente que, quanto menor o tamanho das células, melhor será a precisão do cálculo, porém, a custo de tempo computacional.

Nas simulações executadas neste trabalho, foi utilizado o seguinte critério para a divisão das células:

- A altura da célula deve aumentar conforme se afasta da superfície da camada, visando reduzir custo computacional às custas das regiões mais distantes da base, pois prioriza-se uma maior precisão na proximidade da camada ativa;
- Na superfície da camada, a célula deve possuir a mesma altura das células da simulação de referência a *vortex-dune*, para se ter uma acurácia semelhante à da bibliografia.

Para atingir este critério, foi necessário dividir os vértices em dois blocos, um do ponto $y = 0$ até a superfície da camada e outro da superfície da camada até topo da área de simulação, para, então, subdividir esses blocos, o que foi feito através do Código 7.3.

Código 7.3 Definição das células computacionais.

```

blocks
(
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (60 10 40) simpleGrading (1 0.3 1)
    hex (3 2 9 8 7 6 10 11) (60 75 40) simpleGrading (1 5.4 1)
);

```

Desta forma, a malha de simulação terá uma distribuição uniforme no eixo XZ, e não uniforme no eixo XY, conforme Figura 7.5, Figura 7.6 e Figura 7.7.

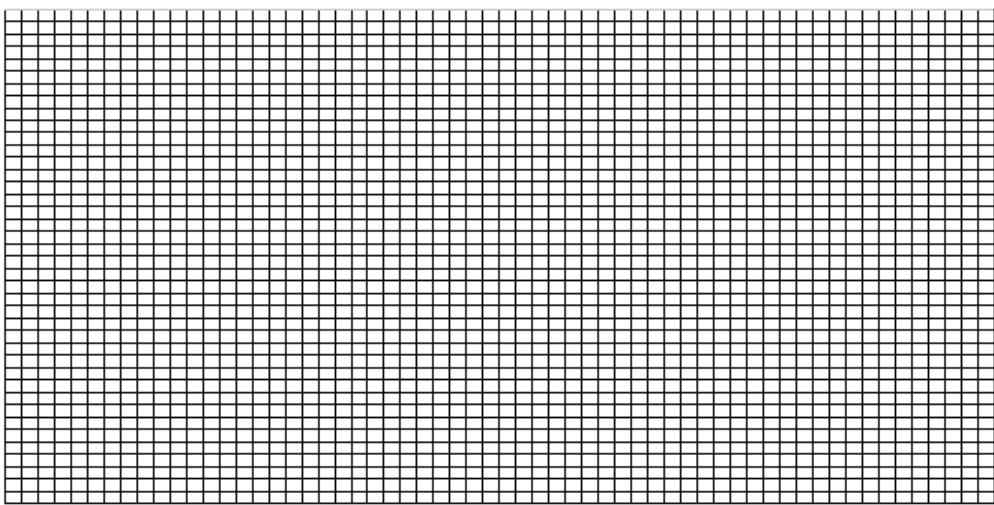


Figura 7.5 Malha de simulação no eixo XZ.

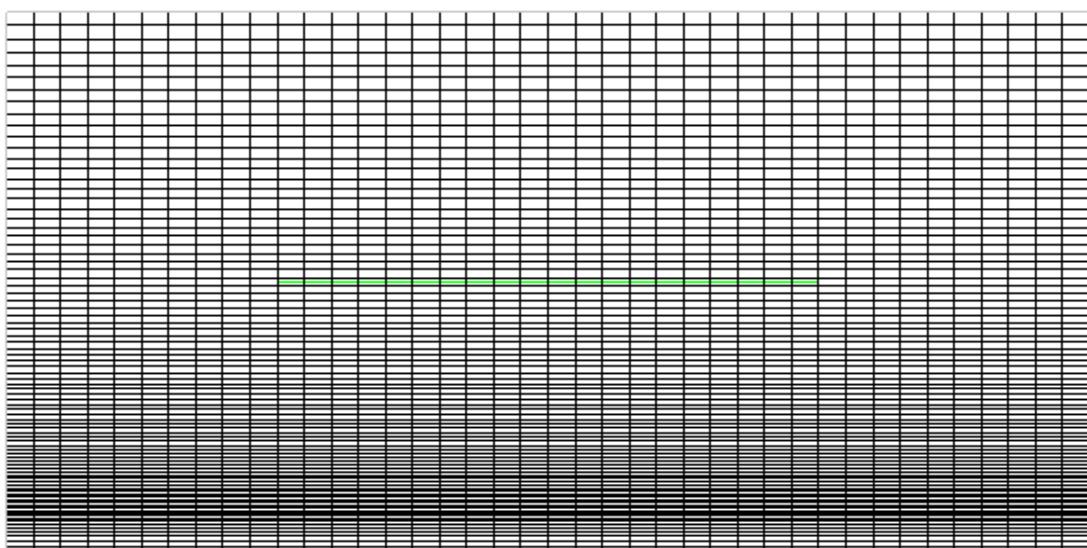


Figura 7.6 Malha de simulação no eixo XY.

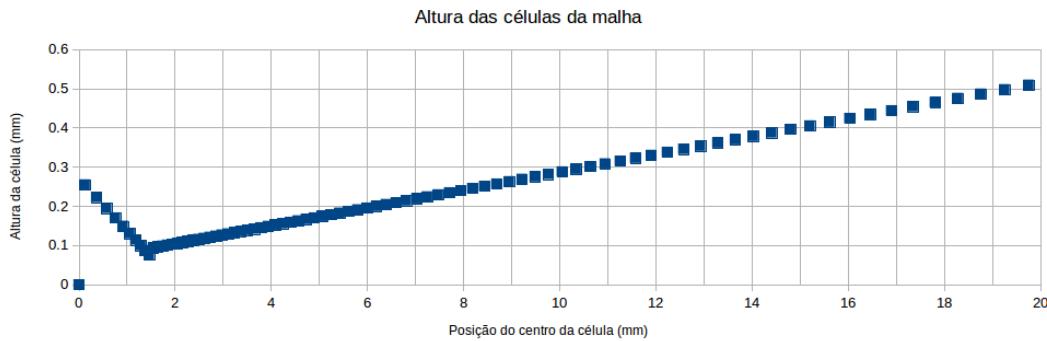


Figura 7.7 Gráfico da altura da célula versus posição do centro no eixo y.

7.4.3 Manipulação da camada sedimentar.

Além da redução da camada, foi adicionado, em algumas das simulações, um pequeno cone de partículas, que foi obtido utilizando uma técnica semelhante à criação da camada matriz (definida aqui como a camada irregular inicial). Para isso, foi gerado um pequeno cilindro de partículas, em uma posição conveniente, pelo LAMMPS, através do Código 7.4.

Código 7.4 Arquivo in.lammps utilizado para criar o cilindro.

```

# Criacao do dominio de simulacao
boundary      pp ff pp
atom_style    sphere
atom_modify   map array
lattice       none 1
newton        off
region        box block 0 8 0 2 0 4
create_box    3 box
communicate single vel yes

lattice fcc 9000
#fator de escala 262.07408048

region      cilindro cylinder y      39.311112072  26.207408048
           1.4414074426  11.7933336216  19.655556036

create_atoms 3 region cilindro

pair_style  gran/hooke/history 20.0 NULL 7910 NULL 0.4 0
pair_coeff * *

set atom * diameter 0.05

group active type 2 3

```

```
fix 2 active gravity 9.8 vector 0 -1 0
dump location all custom 1 dump.location id type diameter x y z
```

A saída dessa simulação, que criou o cilindro, foi tratada utilizando o script do Código 7.5, que extrai o cilindro da simulação e gera uma lista de coordenadas das partículas. A lista será concatenada com o arquivo IN.INITIAL da camada matriz, para ser utilizado como entrada de uma nova simulação.

Código 7.5 Script em Perl para tratar a saída do LAMMPS

```
my $filename = "dump.location";
open(my $fh, '<', $filename) or die "Could not open file '$filename'
$!";
open(my $out, '>', "parsed") or die "Could not open file '$filename'
$!";
my $inside = 0;
my $offset = 0;
while(my $line = <$fh> ){
    if($inside<9){
        $inside++;
        next;
    }
    chomp $line;
    my @fields = split(//, $line);
    my $diameter = $fields[2]/100;
    my $density = "2500";
    my $id = 137405 + $fields[0];
    my $type = 3;

    my $x = $fields[3]/100;
    my $y = $fields[4]/100;
    my $z = $fields[5]/100;
    print $out "$id $type $diameter $density $x $y $z\n";
}
```

Nesta nova simulação, ocorre a queda do cilindro apenas sob ação da gravidade, sobre uma camada sedimentar, e o seu arquivo de saída deve ser processado pelo Código 7.6, para gerar um IN.INITIAL, ao qual será concatenado mais um cilindro. Este processo, ilustrado pela Figura 7.8, repetiu-se 10 vezes, até ser obtido um cone de tamanho satisfatório, com aproximadamente a mesma altura da camada sedimentar.

Código 7.6 Script em Perl para processar a saída do SediFoam

```
my $filename = "In_initial.in";
open(my $fh, '<', $filename) or die "Could not open file '$filename'
$!";
open(my $out, '>', "parsed") or die "Could not open file '$filename'
$!";
my $inside = 0;
my $index = 1;
while(my $line = <$fh> ){
    if($inside<10){
        $inside++;
        next;
    }
    chomp $line;
    my @fields = split(//, $line);
    my $diameter = $fields[3];
    my $density = $fields[4];
    my $type = $fields[2];

    my $x = $fields[5];
    my $y = $fields[6];
    my $z = $fields[7];
    print {$out} " $index $type $diameter $density $x $y $z\n";
    $index++;
}
```

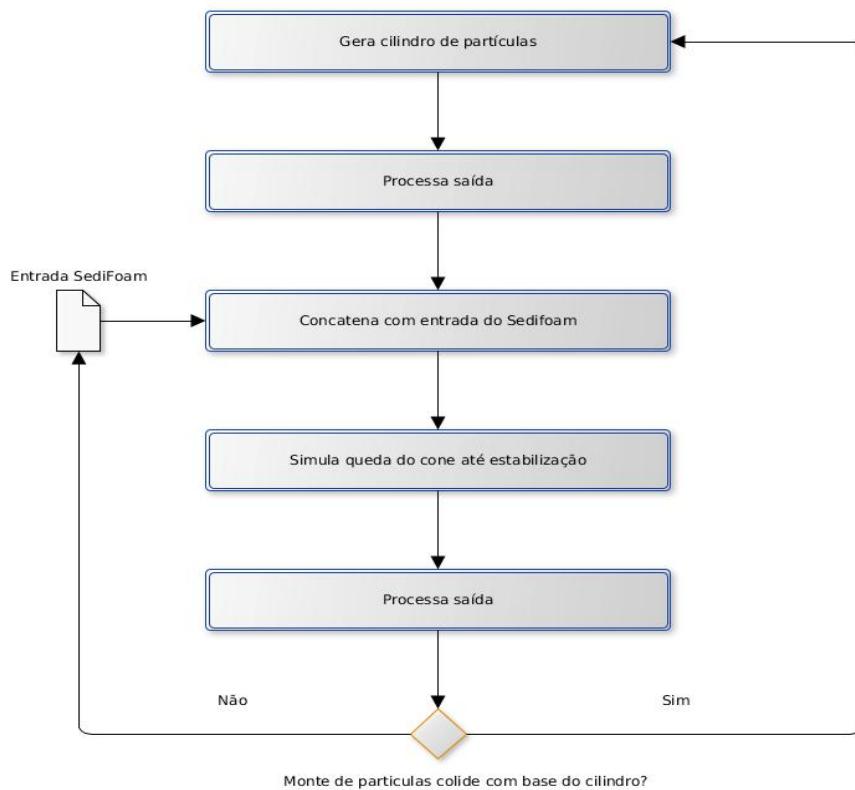


Figura 7.8 Fluxograma da criação do cone de partículas.

As Figura 7.9 e Figura 7.10, ilustram este processo de queda do cilindro, exibindo a primeira simulação e o cone pronto.

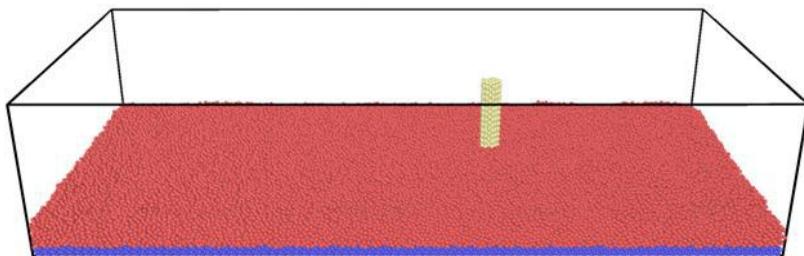


Figura 7.9 Primeiro cone adicionado sobre a camada matriz reduzida.

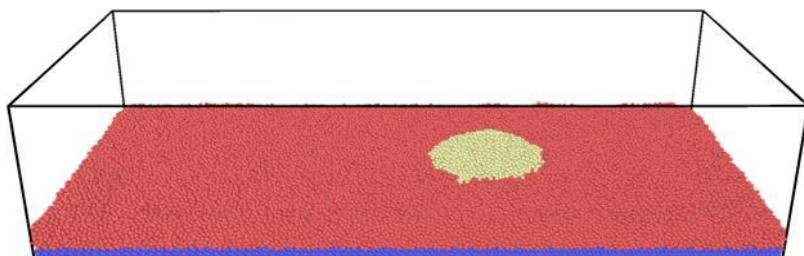


Figura 7.10 Cone de partículas resultante após 10 iterações.

7.4.4 Manipulação das condições ambientais.

Após a configuração da camada sedimentar e da malha de simulação, foram ajustadas as características ambientais da simulação, como a velocidade, a viscosidade e densidade do fluido.

Estas configurações foram executadas no arquivo *transportProperties*, descritas no Código 7.7:

Código 7.7 Transcrição do arquivo *transportProperties*

```
/*
=====
/\ \  / Field      / OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
/
/\ \ / Operation   / Version: 1.4
/\ \ \ / And        / Web:    http://www.openfoam.org
/\ \ \ \ M anipulation /
\*-----*/



FoamFile
{
    version     2.0;
    format      ascii;

    root        "";
    case        "";
    instance    "";
    local       "";

    class       dictionary;
    object      transportProperties;
}

// * * * * *
*//



rhoa      rhoa [1 -3 0 0 0 0] 2500; // density of the particle

rhob      rhob [1 -3 0 0 0 0] 1.2041; // density of the carrier
//rhob      rhob [1 -3 0 0 0 0] 1000; // density of the carrier

nua      nua [0 2 -1 0 0 0] 1.5e-6; // viscosity of the particle
(defined but not used)

//nub      nub [0 2 -1 0 0 0] 1.5e-6; // viscosity of the carrier
nub      nub [0 2 -1 0 0 0] 1.5e-5; // viscosity of the carrier
```

```

da      da [0 1 0 0 0 0] 0.0005; // diameter of the particle

// db      db [0 1 0 0 0 0] 0.1; // not using

Cvm      Cvm [0 0 0 0 0 0] 0.0; // some coefficient for UEqn
(taken as zero)

Cl      Cl [0 0 0 0 0 0] 0; // lift coefficient (taken as zero)

Ct      Ct [0 0 0 0 0 0] 1; // some coefficient used in the
turbulence (defined but not used)

Ubar     Ubar [0 1 -1 0 0 0] (5.0 0 0); // average velocity in the
channel

// gradPbar    gradPbar [0 1 -2 0 0 0] (0.11 0 0); // average
pressure grad in the channel

transportModel Newtonian;

//nu      nu [0 2 -1 0 0 0] 1.5e-6; // viscosity of the carrier
nu      nu [0 2 -1 0 0 0] 1.5e-5; // viscosity of the carrier

Retau   Retau [0 0 0 0 0 0] 185; //for initialization of velocity

//*****
***** //
```

8. SIMULAÇÕES

Com a camada sedimentar, a malha computacional e as características de ambiente prontas, foram executadas uma série de simulações que serão descritas neste capítulo.

A execução do SediFoam ocorre segundo as seguintes etapas: criação da malha computacional com a execução do programa *blockMesh* do OpenFOAM (Figura 8.1), divisão da simulação em domínios computacionais, que serão delegados aos processadores (Figura 8.2), e a execução da simulação (Figura 8.3).

```

renato@Blue:~/testes/duna/transport-vortex-dune$ cat log.blockMesh
/*
=====
| \ \ / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / O peration | Version: 2.4.0
| \ \ / A nd | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / M anipulation |
\*-
Build : 2.4.0-f0842aea0e77
Exec : blockMesh
Date : Sep 26 2017
Time : 22:45:09
Host : "Blue"
PID : 20076
Case : /home/renato/testes/duna/transport-vortex-dune
nProcs : 1
sigFpe : Enabling floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).
fileModificationChecking : Monitoring run-time modified files using timeStampMaster
allowSystemOperations : Allowing user-supplied system call operations
// * * * * *
Create time

creating block mesh from
    "/home/renato/testes/duna/transport-vortex-dune/constant/polyMesh/blockMeshDict"
Creating curved edges
Creating topology blocks
Creating topology patches

Creating block mesh topology

Check topology

Basic statistics
    Number of internal faces : 1
    Number of boundary faces : 10
    Number of defined boundary faces : 10
    Number of undefined boundary faces : 0
    Checking patch -> block consistency

```

Figura 8.1 Foto da saída do *blockMesh*.

```

renato@Blue:~/testes/duna/transport-vortex-dune$ cat log.decomposePar
/*
=====
| \ \ / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / O peration | Version: 2.4.0
| \ \ / A nd | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / M anipulation |
\*-
Build : 2.4.0-f0842aea0e77
Exec : decomposePar
Date : Sep 26 2017
Time : 22:45:11
Host : "Blue"
PID : 20077
Case : /home/renato/testes/duna/transport-vortex-dune
nProcs : 1
sigFpe : Enabling floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).
fileModificationChecking : Monitoring run-time modified files using timeStampMaster
allowSystemOperations : Allowing user-supplied system call operations
// * * * * *
Create time

Decomposing mesh region0
Create mesh
Calculating distribution of cells
Selecting decompositionMethod simple
Finished decomposition in 0.07 s
Calculating original mesh data
Distributing cells to processors
Distributing faces to processors
Distributing points to processors

```

Figura 8.2 Foto da saída do *decomposePar*.

```

the number of particles in LAMMPS now is: 135112
data transformed into each processor!
LAMMPS evolving finished! ..
Adding/deleting statistics: adding: 0 deleting: 0 deleting before add: 0
total volume of particles is: 8.84306e-06
total (velocity x volume) of particles is: (4.02668e-08 4.93269e-10 -1.13672e-10)
average velocity of all particles is: (0.00455281 5.57804e-05 -1.28544e-05)
Warning: Unphysical large solid volume fraction 0.977051
A cap of 0.8 is applied.
smoothing A_Source
DICPCG: Solving for tempDifffVectorx, Initial residual = 0.389721, Final residual = 1.88168e-11, No Iterations 7
DICPCG: Solving for tempDifffVectory, Initial residual = 0.536966, Final residual = 2.24736e-11, No Iterations 7
DICPCG: Solving for tempDifffVectorz, Initial residual = 0.548716, Final residual = 2.14475e-11, No Iterations 7
DICPCG: Solving for tempDifffVectorx, Initial residual = 0.0742613, Final residual = 1.6218e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectory, Initial residual = 0.0892914, Final residual = 2.10141e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorz, Initial residual = 0.0988623, Final residual = 2.0996e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorx, Initial residual = 0.254026, Final residual = 4.59417e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectory, Initial residual = 0.315139, Final residual = 5.18015e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorz, Initial residual = 0.127004, Final residual = 3.81255e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorx, Initial residual = 0.110477, Final residual = 3.79849e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectory, Initial residual = 0.152922, Final residual = 4.58796e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorz, Initial residual = 0.0799293, Final residual = 2.96693e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorx, Initial residual = 0.0738291, Final residual = 3.14707e-11, No Iterations 6
DICPCG: Solving for tempDifffVectorz, Initial residual = 0.113275, Final residual = 3.98939e-11, No Iterations 6
total F before: (-0.00189268 -5.58208e-05 3.22737e-06)
total F after: (-0.00188268 -5.58208e-05 3.22737e-06)
ExecutionTime = 7.85425e+06 s Clocktime = 7852596 s OpenFOAM/evolve/calcTcField/diffusion/particle move = (2.15376e+06, 4.37534e+06, 1.30429e+06, 7330.38, 3.16564e+06, 64874.5) s
assemble/transpose/flatten/foam->lammps/lammps/lammps->foam = (22164.5, 8885.82, 48445.7, 22664, 2.04826e+06, 0) s
fieldAverage fieldAverage1 output:
    Calculating averages
Time = 1.009894
Courant Number mean: 0.00848355 max: 0.0261956
Max Ur Courant Number = 0.017825
Dispersed phase volume fraction = 0.138096 Min(alpha) = 1.48561e-25 Max(alpha) = 0.8
renato@Blue:~/testes/duna/transport-vortex-dune5

```

Figura 8.3 Foto dos logs de execução do SediFoam.

8.1 Simulações em meio aquoso.

Neste conjunto de simulações, as características fluidais foram tomadas equivalentes às da água.

8.1.1 Camada Sedimentar com cone de Partículas à 0.10 m/s (Caso 1)

Esta simulação foi executada conforme os dados da Tabela 8.1.

Tabela 8.1 Dados de entrada da simulação no Caso 1.

Camada utilizada	Matriz com cone
Intervalo do passo	$2 \cdot 10^{-6}$
Intervalo de impressão	50.000 passos
Passos executados	2.111.000
Tempo total da simulação	4.22 s
Velocidade média do fluxo	0,10 m/s
Diâmetro da partícula	0.0005 m
Densidade da partícula	2.500,00 Kg/m ³
Densidade do fluido	1.000,00 Kg/m ³
Viscosidade do fluido	$1,5 \cdot 10^{-6}$
Tempo de execução	3 dias, 22 horas, 5 minutos e 49 segundos

Tamanho do arquivo de saída	6.5 GB
-----------------------------	--------

8.1.1.1 Resultados

Foi observado a formação de um padrão semelhante ao de uma duna barcana, com dimensões reduzidas, conforme as Figura 8.4, Figura 8.5 e Figura 8.6. Foi realizado o mapeamento da trajetória de algumas partículas (Figura 8.7), e observou-se que, nessa velocidade de fluxo, pouquíssimas partículas se moveram durante a simulação, além do movimento inicial, o tipo transporte majoritário é o de carga de fundo, chegando a um ponto de estabilidade onde as partículas encontram-se paradas.

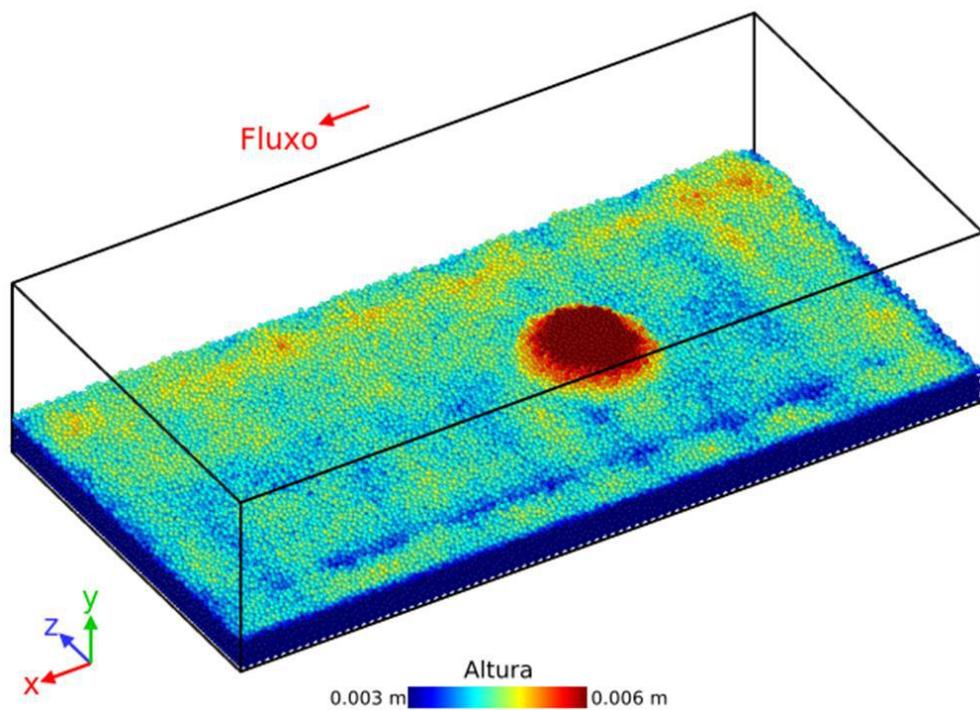


Figura 8.4 Caso 1 para $t = 0$ s.

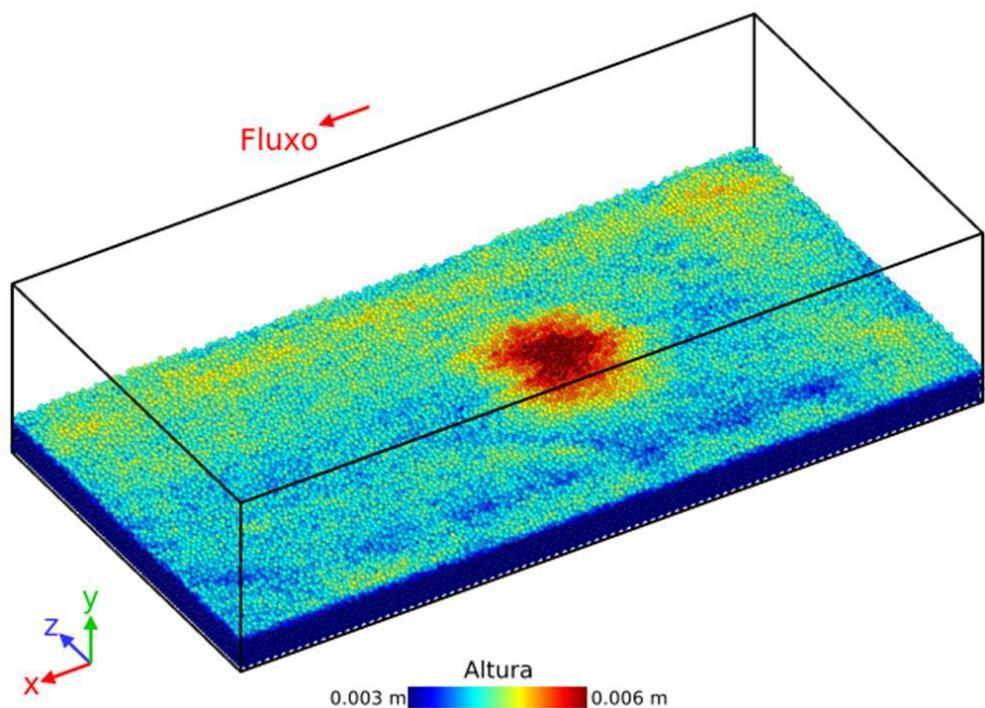


Figura 8.5 Caso 1 para $t = 4,22\text{s}$.

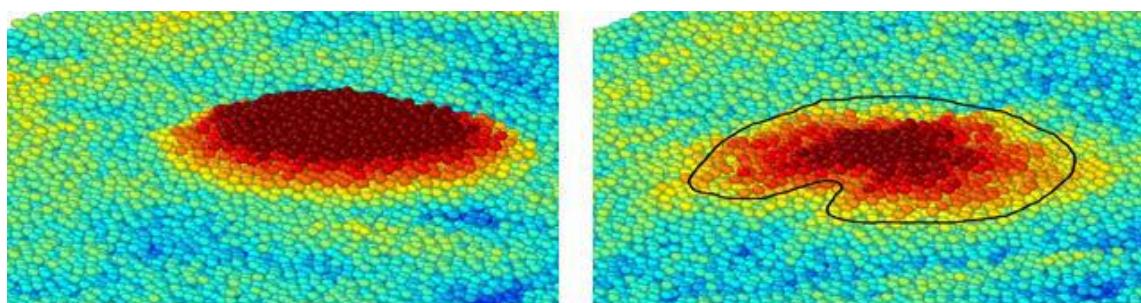


Figura 8.6 Comparação das posições iniciais e finais para o Caso 1.

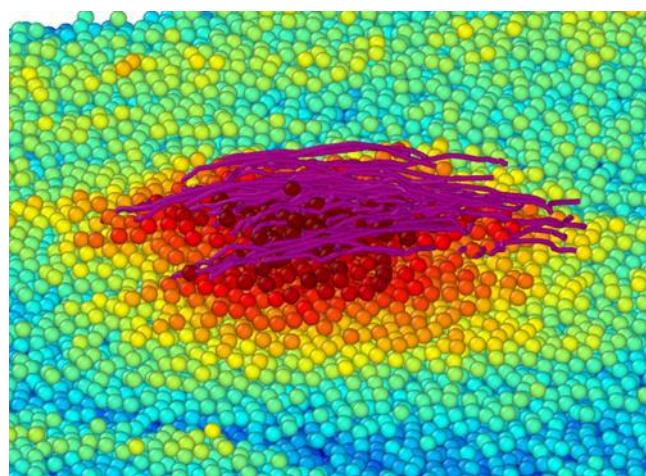


Figura 8.7 Trajetória das partículas no Caso 1.

8.1.2 Camada Sedimentar com cone de Partículas à 0,15 m/s (Caso 2)

Esta simulação foi executada conforme os dados da Tabela 8.2.

Tabela 8.2 Dados de entrada da simulação no Caso 2.

Camada utilizada	Matriz com cone
Intervalo do passo	$2 \cdot 10^{-6}$
Intervalo de impressão	5.000 passos
Passos executados	2.145.000
Tempo total da simulação	4,29 s
Velocidade média do fluxo	0,15 m/s
Diâmetro da partícula	0,0005 m
Densidade da partícula	2.500,00 Kg/m ³
Densidade do fluido	1.000,00 Kg/m ³
Viscosidade do fluido	$1,5 \cdot 10^{-6}$
Tempo de execução	3 dias, 23 horas, 41 minutos e 29 segundos
Tamanho do arquivo de saída	6.6 GB

8.1.2.1 Resultados

Foi também observada a formação de um padrão semelhante ao de uma duna barcana, com dimensões reduzidas, conforme as Figura 8.8, Figura 8.9 e Figura 8.10. Foi realizado o mapeamento da trajetória de algumas partículas (Figura 8.11), e observou-se que, nessa velocidade de fluxo, pouquíssimas partículas se moveram durante a simulação, além do movimento inicial, o tipo transporte majoritário é o de carga de fundo, chegando a um ponto de estabilidade, aonde são observados movimentos esporádicos de algumas partículas.

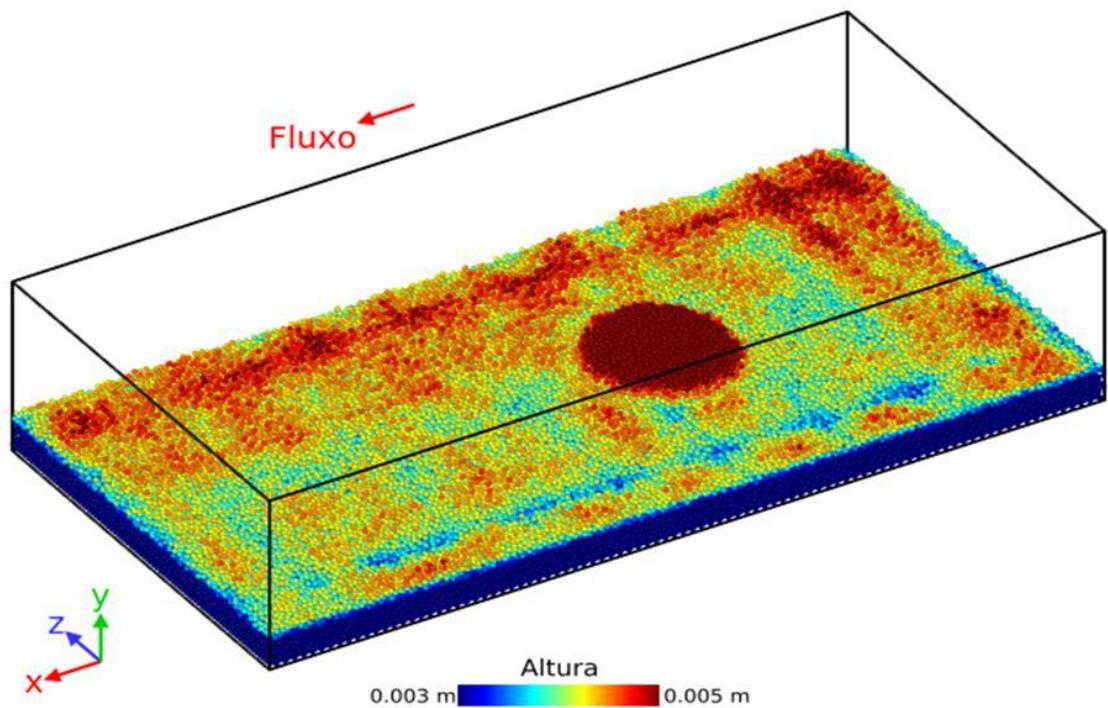


Figura 8.8 Caso 2 para $t = 0$ s.

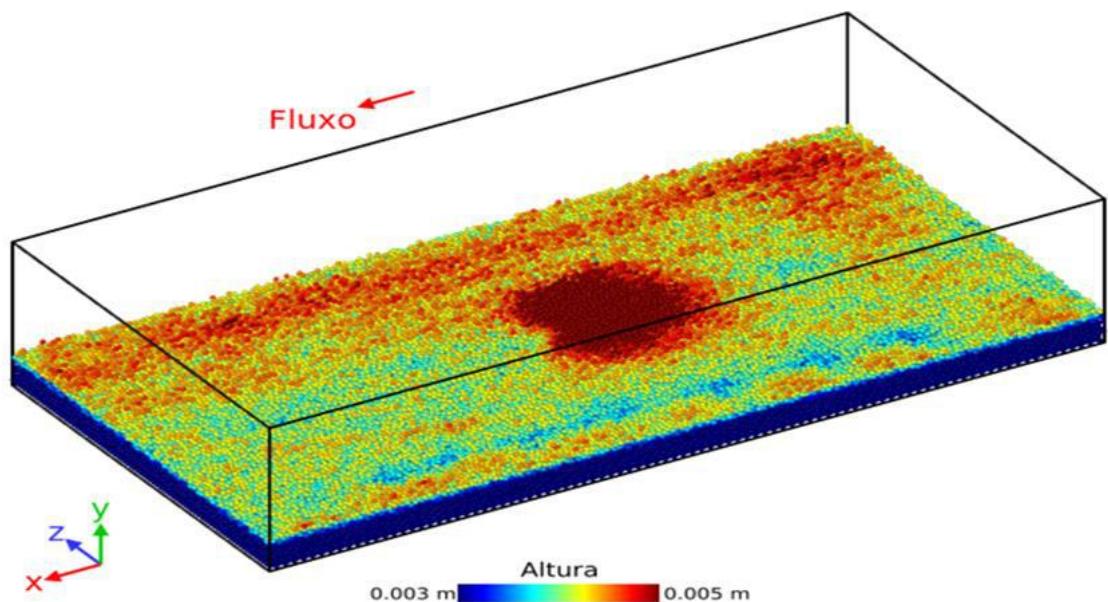


Figura 8.9 Caso 2 para $t = 4,29$ s.

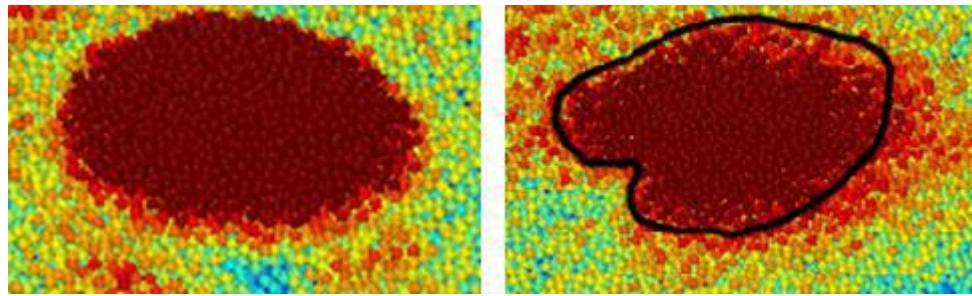


Figura 8.10 Comparação das posições iniciais e finais para o Caso 2.

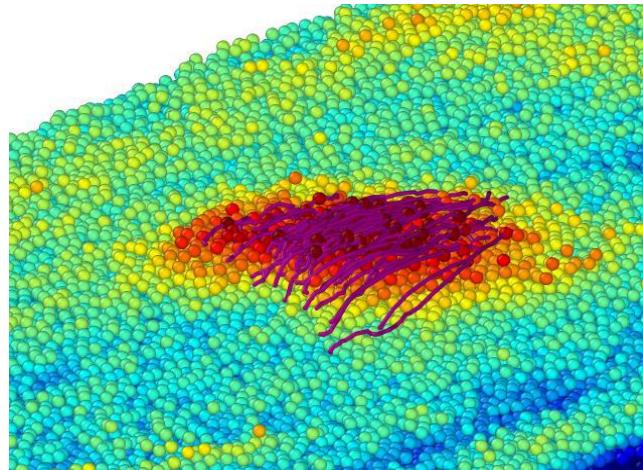


Figura 8.11 Trajetória das partículas no Caso 2.

8.1.3 Camada Sedimentar com cone de Partículas à 0,20 m/s (Caso 3)

Esta simulação foi executada conforme os dados da Tabela 8.3.

Tabela 8.3 Dados de entrada da simulação no Caso 3.

Camada utilizada	Matriz com cone
Intervalo do passo	$2 \cdot 10^{-6}$
Intervalo de impressão	5.000 passos
Passos executados	6.850.000
Tempo total da simulação	13,7 s
Velocidade média do fluxo	0,20 m/s
Diâmetro da partícula	0,0005 m
Densidade da partícula	2.500,00 Kg/m ³
Densidade do fluido	1.000,00 Kg/m ³
Viscosidade do fluido	$1,5 \cdot 10^{-6}$
Tempo de execução	11 dias, 5 horas, 12 minutos e 10 segundos

Tamanho do arquivo de saída	18.9 GB
-----------------------------	---------

8.1.3.1 Resultados

Foi observada a formação de um padrão semelhante ao de uma duna barcana, com dimensões reduzidas, conforme as Figura 8.15, Figura 8.13 e Figura 8.12. Foi realizado o mapeamento da trajetória de algumas partículas (Figura 8.14), e observou-se que, nessa velocidade de fluxo, o movimento das partículas se torna mais frequente, porém, ainda é insuficiente para se considerar que o limiar do movimento foi atingido.

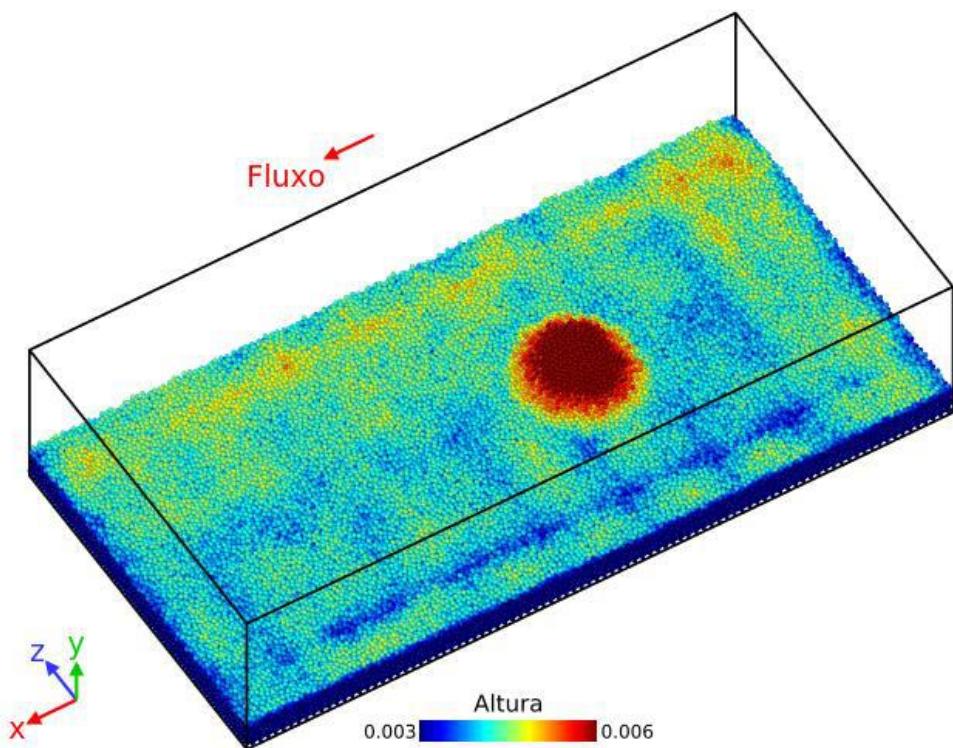


Figura 8.12 $t = 0$ para o caso 3.

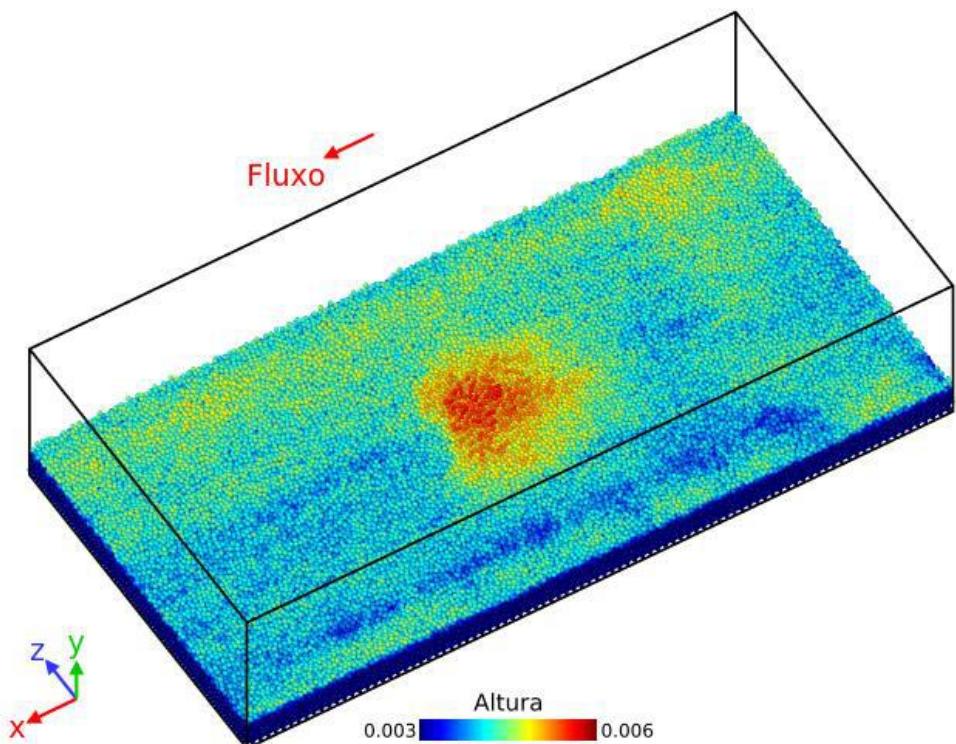


Figura 8.13 $t = 13,7$ s para o Caso 3.

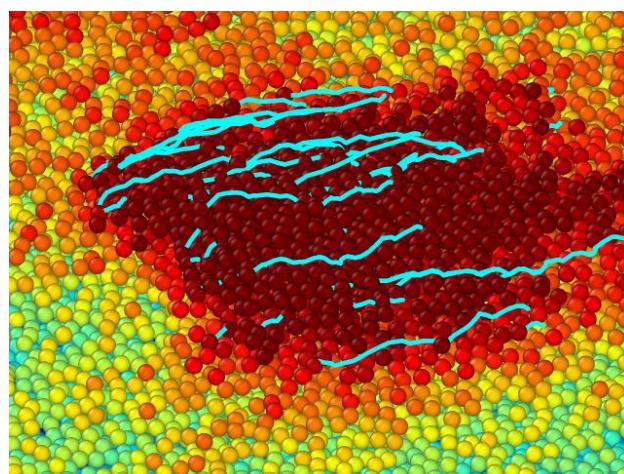


Figura 8.14 Trajetória das partículas no Caso 3.

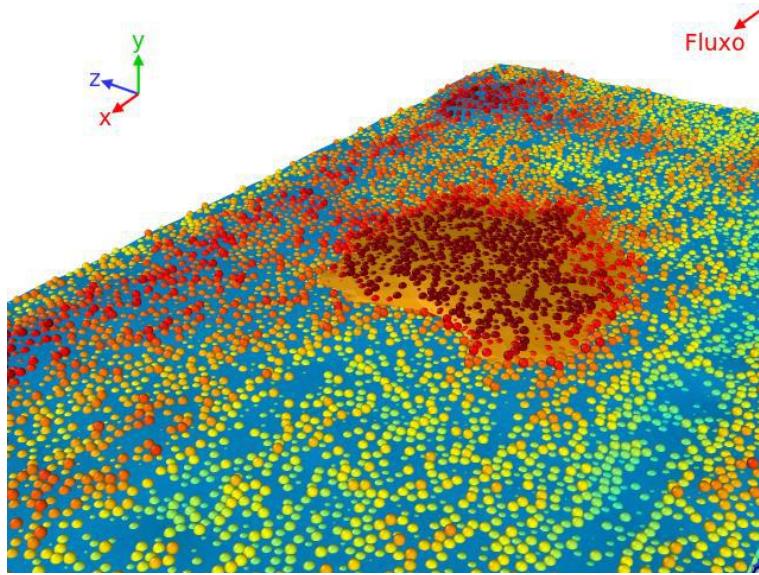


Figura 8.15 Superfície da duna no Caso 3.

8.1.4 Camada Sedimentar à 0,34 m/s (Caso 4A e 4B)

Esta simulação foi executada com duas formas de camadas iniciais distintas, conforme Tabela 8.4 e Tabela 8.5.

Tabela 8.4 Dados de entrada da simulação no Caso 4A.

Camada utilizada	Matriz com cone
Intervalo do passo	$2 \cdot 10^{-6}$
Intervalo de impressão	5.000 passos
Passos executados	6.090.000
Tempo total da simulação	12,18 s
Velocidade média do fluxo	0,34 m/s
Diâmetro da partícula	0,0005 m
Densidade da partícula	2.500,00 Kg/m ³
Densidade do fluido	1.000,00 Kg/m ³
Viscosidade do fluido	$1,5 \cdot 10^{-6}$
Tempo de execução	13 dias, 1 horas, 11 minutos e 38 segundos
Tamanho do arquivo de saída	18,9 GB

Tabela 8.5 Dados de entrada da simulação no Caso 4B.

Camada utilizada	Matriz
Intervalo do passo	$2 \cdot 10^{-6}$

Intervalo de impressão	500.000 passos
Passos executados	25.000.000
Tempo total da simulação	50 s
Velocidade média do fluxo	0,34 m/s
Densidade da partícula	2.500,00 Kg/m ³
Densidade do fluido	1.000,00 Kg/m ³
Viscosidade do fluido	1,5.10 ⁻⁶
Tempo de execução	56 dias, 1 horas, 6 minutos e 6 segundos
Tamanho do arquivo de saída	768.3 MB

8.1.3.1 Resultados

Os casos A e B apresentaram resultados análogos, onde o movimento das partículas ocorre continuamente durante todo a simulação, indicando que o limiar de movimento foi atingido, conforme Figura 8.16, Figura 8.17, Figura 8.18, Figura 8.19, Figura 8.20, Figura 8.21, Figura 8.22, Figura 8.23, Figura 8.24 e Figura 8.25.

Outro ponto a se ressaltar é que o cone do caso A, foi rapidamente varrido da camada, não tendo influência sobre a configuração da camada.

CASO A:

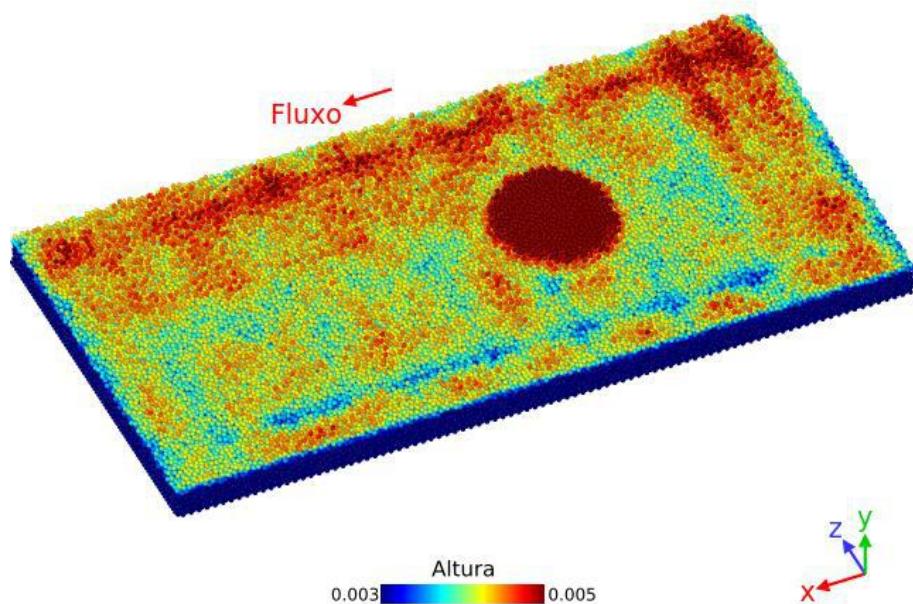


Figura 8.16 t = 0 para o Caso 4A.

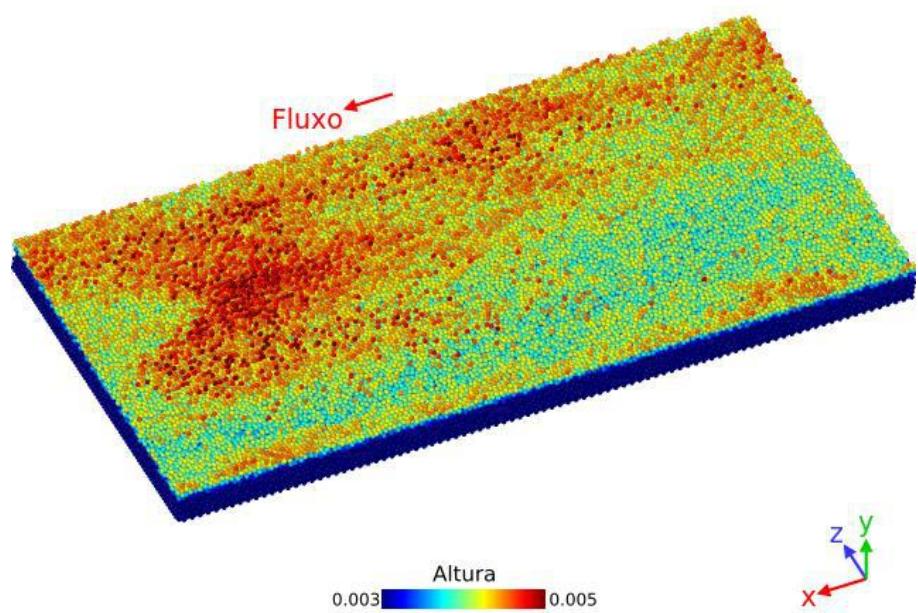


Figura 8.17 $t = 2\text{s}$ para o Caso 4A.

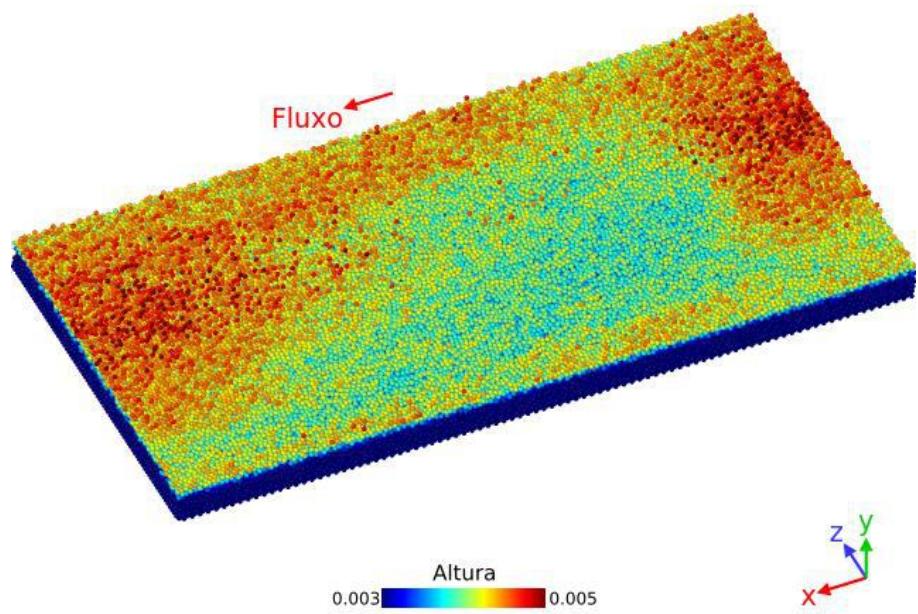


Figura 8.18 $t = 8,34\text{s}$ para o Caso 4A.

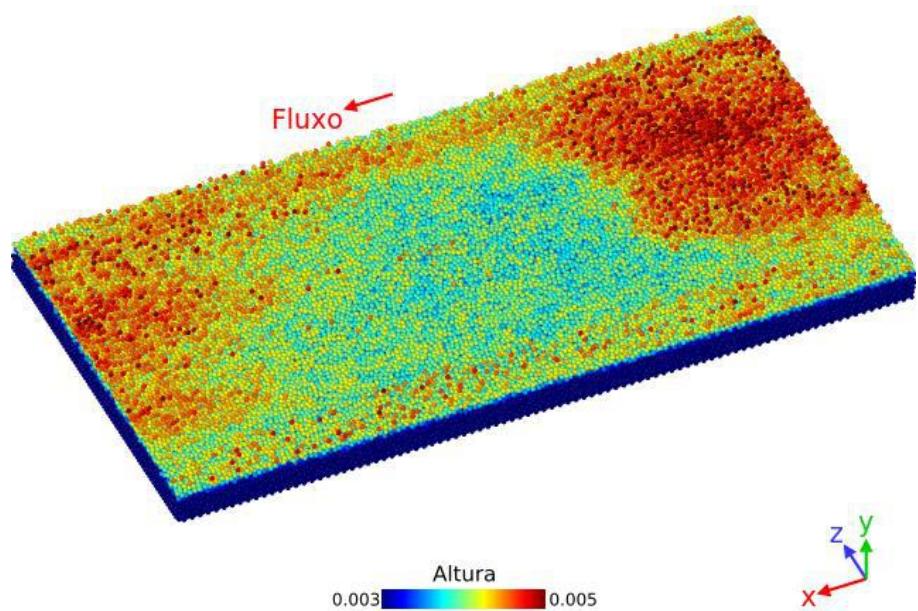


Figura 8.19 $t = 12,18$ s para o Caso 4A.

CASO B:

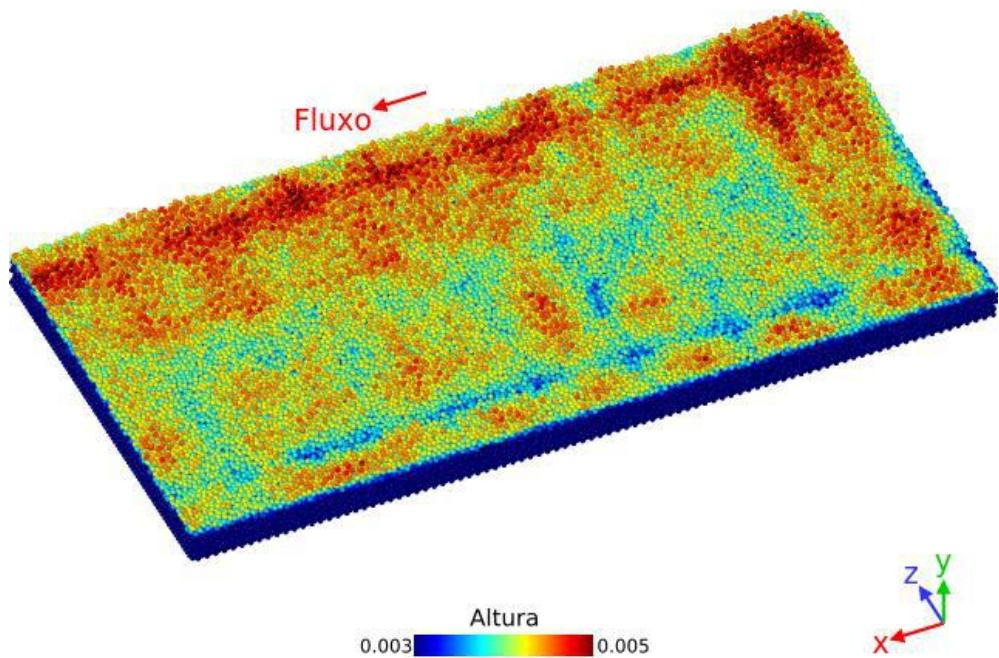


Figura 8.20 $t = 0$ para o Caso 4B.

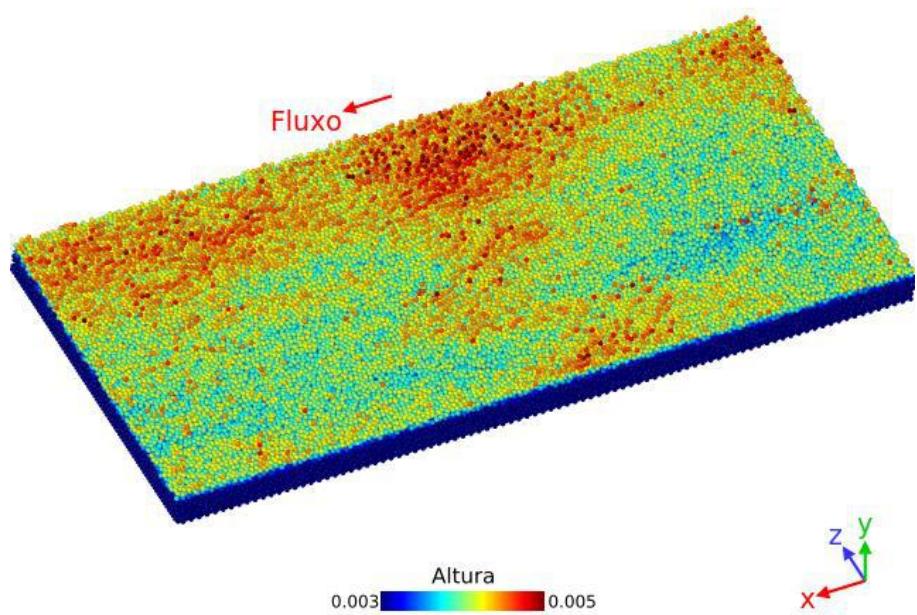


Figura 8.21 $t = 3\text{ s}$ para o Caso 4B.

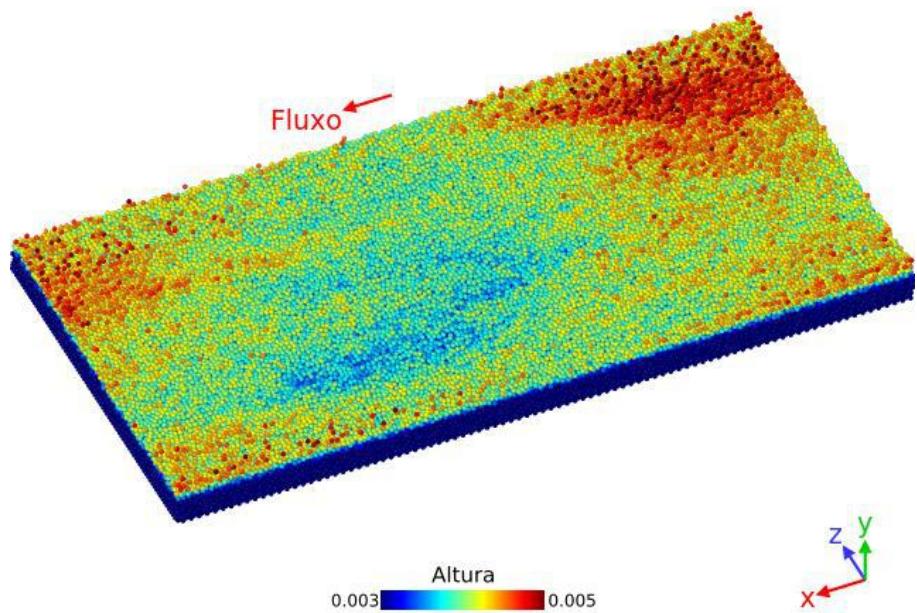


Figura 8.22 $t = 20\text{ s}$ para o Caso 4B.

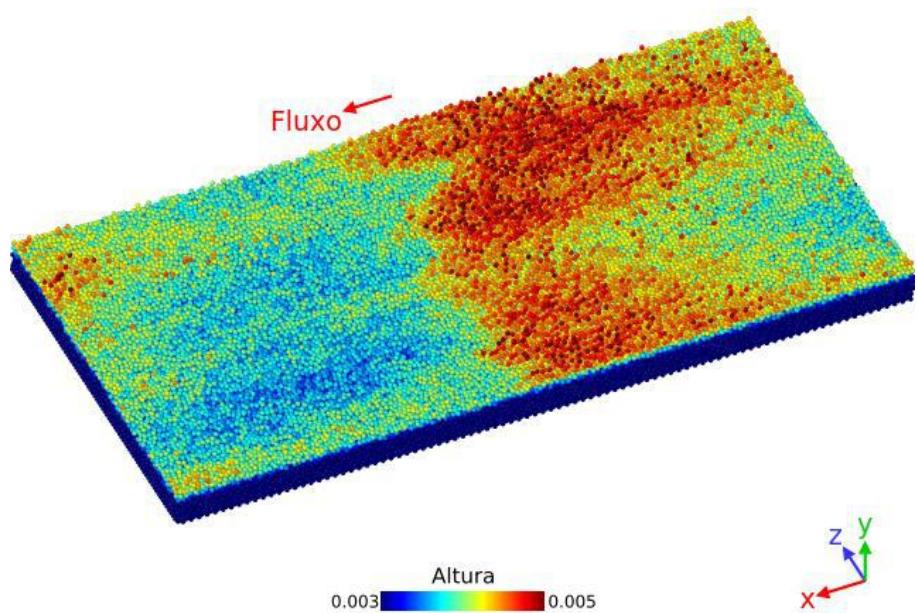


Figura 8.23 $t = 27\text{s}$ para o Caso 4B.

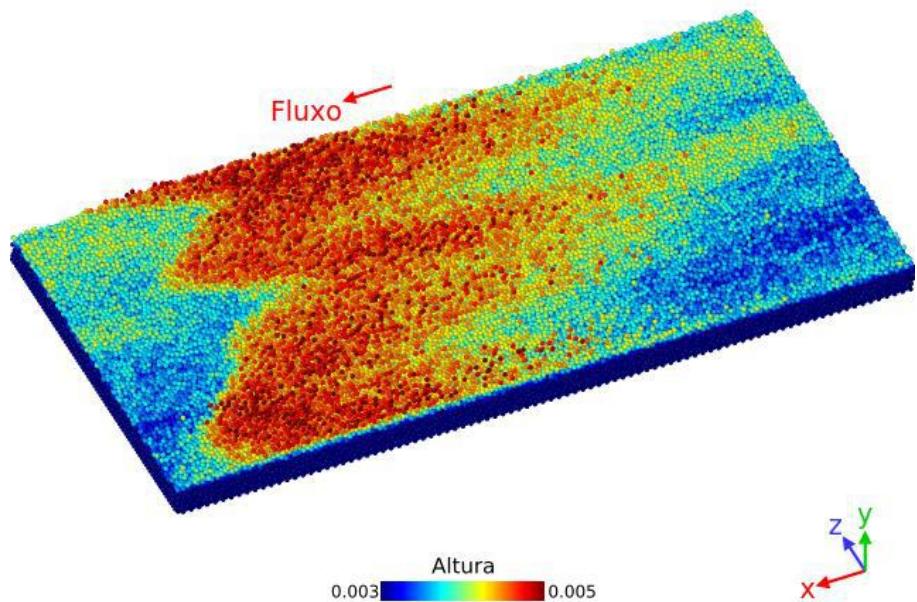


Figura 8.24 $t = 37\text{ s}$ para o Caso 4B.

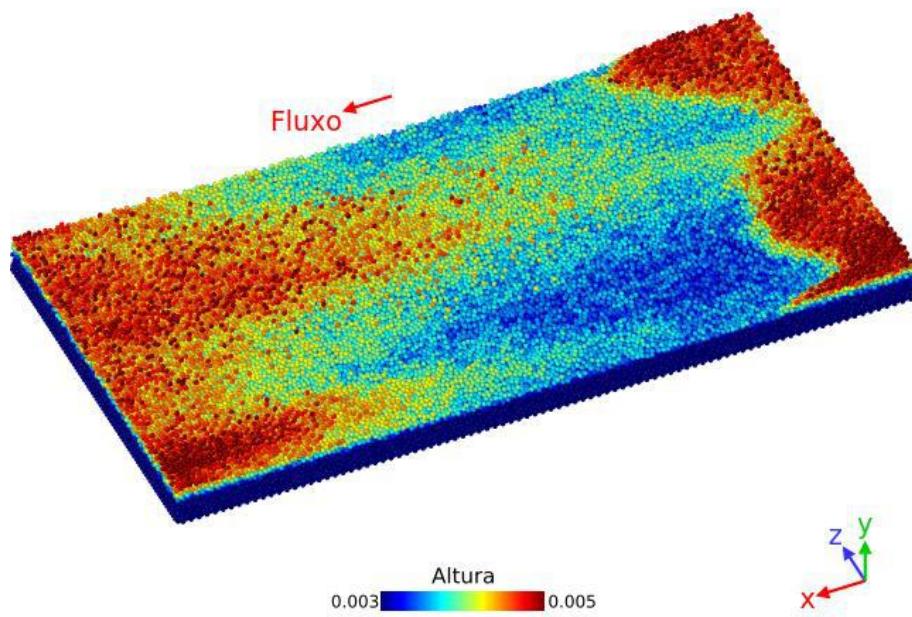


Figura 8.25 $t = 46\text{s}$ para o Caso 4B.

8.2 Simulações em meio eólico.

Neste meio, foram executadas três simulações sobre a camada matriz com velocidades do fluido de $0,34 \text{ m/s}$, 1 m/s e 5 m/s , porém, as velocidades de $0,34 \text{ m/s}$ e 1 m/s não apresentaram movimentos significativos das partículas e não serão apresentados. Não foram realizadas simulações com o cone nas definições iniciais, pois, neste meio, o tempo computacional necessário é muito alto, não havendo oportunidade para mais simulações.

8.2.1 Camada sedimentar à 5 m/s (Caso 5)

Esta simulação foi executada conforme os dados da Tabela 8.6.

Tabela 8.6 Dados de entrada da simulação no Caso 5.

Camada utilizada	Matriz
Intervalo do passo	$2 \cdot 10^{-8}$
Intervalo de impressão	50.000 passos
Passos executados	50.450.000
Tempo total da simulação	1,009 s

Velocidade média do fluxo	5 m/s
Diâmetro da partícula	0.0005 m
Densidade da partícula	$2.500,00 \text{ Kg/m}^3$
Densidade do fluido	$1,2041 \text{ Kg/m}^3$
Viscosidade do fluido	$1,5 \cdot 10^{-5}$
Tempo de execução	90 dias, 20 horas, 2 minutos e 5 segundos
Tamanho do arquivo de saída	15,2 GB

8.2.1.1 Resultados

Nesta simulação não foi possível observar a formação de nenhuma forma relevante, provavelmente devido ao pouco tempo real de simulação, apenas 1s, porém, a simulação apresentou significativos dados a respeito dos tipos de movimentos sedimentares, sendo estes resultados ilustrados nas Figura 8.26, Figura 8.27 e Figura 8.28.

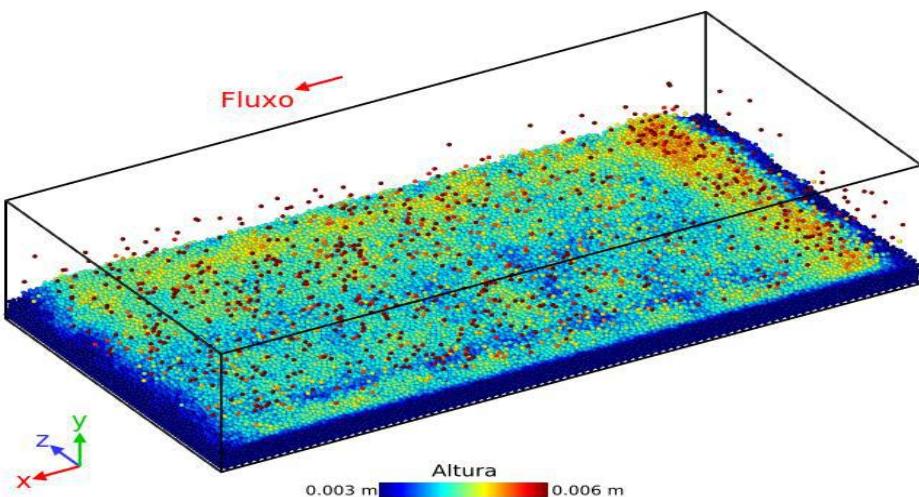


Figura 8.26 $t = 0,1 \text{ s}$ para a Caso 5.

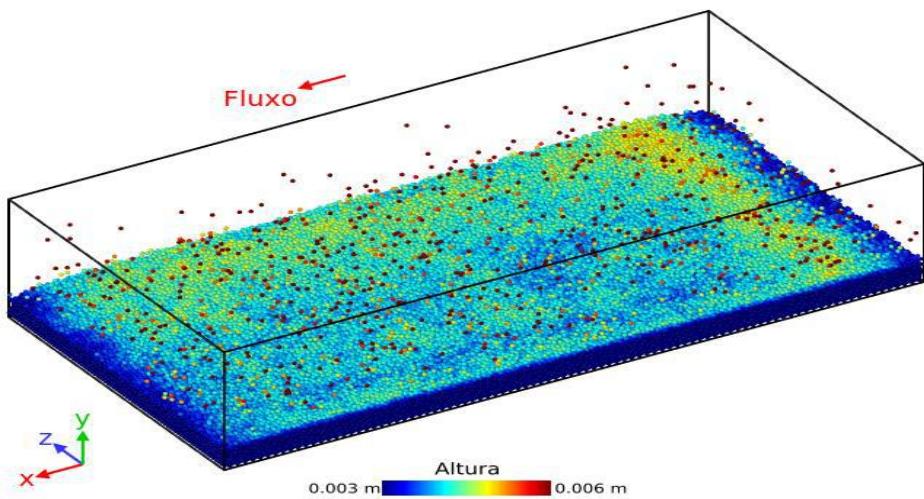


Figura 8.27 $t = 1$ s para o Caso 5.

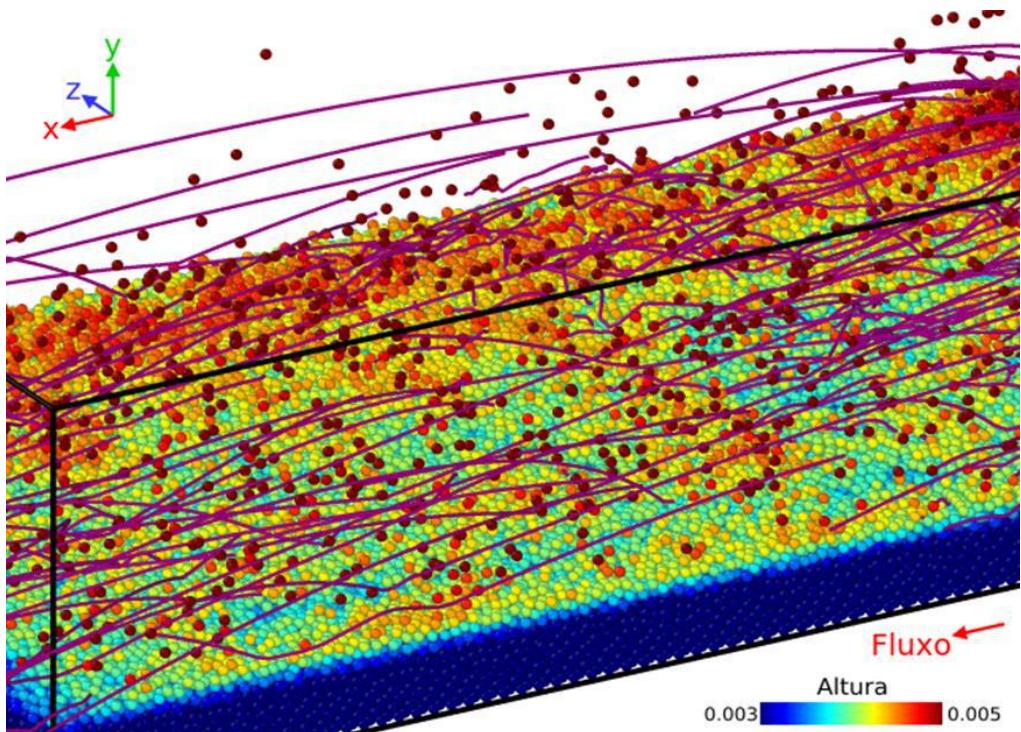


Figura 8.28 Trajetória das partículas para o Caso 5.

8.3 ANÁLISE DOS RESULTADOS.

O primeiro resultado que será apresentado neste tópico será o tempo de simulação e a volumetria dos dados gerados pelas saídas. Tais dados são de grande importância para trabalhos futuros (Tabela 8.7), pois mostram a necessidade de melhores recursos computacionais para executar as simulações e dá uma leve noção da necessidade de espaço em disco para executá-las.

Tabela 8.7 Tempo de execução e volumetria.

Tempo total de execução	177 dias, 13 horas, 19 minutos e 12 segundos \approx 6 meses
Tamanho total das saídas	51,6 GB

8.3.1 Análise das simulações em meio aquoso

8.3.1.1 Análise da velocidade média das partículas

Nestas simulações a velocidade do fluido foi gradualmente aumentada, de 0,10 m/s a 0,34 m/s, sendo possível observar a mudança no regime de movimento das partículas, desde o momento onde praticamente todas estão paradas, até o momento onde o limiar de movimento é rompido e as partículas começam a se mover com mais notoriedade como carga de fundo. Tal comportamento pode ser quantificado quando se compara o histograma da distribuição de velocidades das partículas nesses casos.

Para a criação do histograma, foi tomado o tempo de 0.2s, e a velocidade de todas as partículas com coordenada y superior a 0.004 m, ou seja, a partir da camada ativa, que foi normalizada pelo diâmetro da partícula.

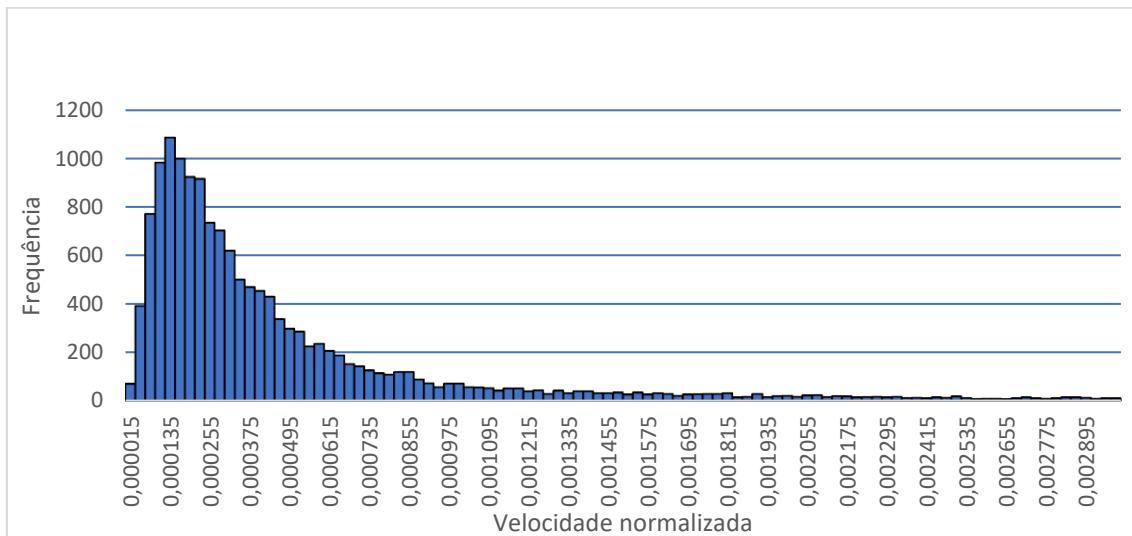


Figura 8.29 Histograma da velocidade das partículas à $U = 0.10\text{m/s}$.

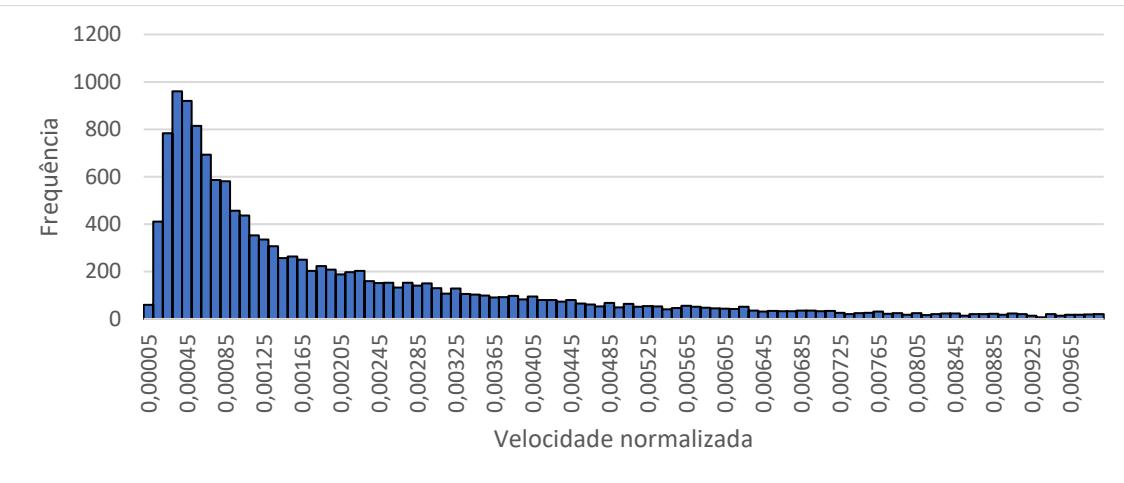


Figura 8.30 Histograma da velocidade das partículas à $U = 0.15\text{m/s}$.

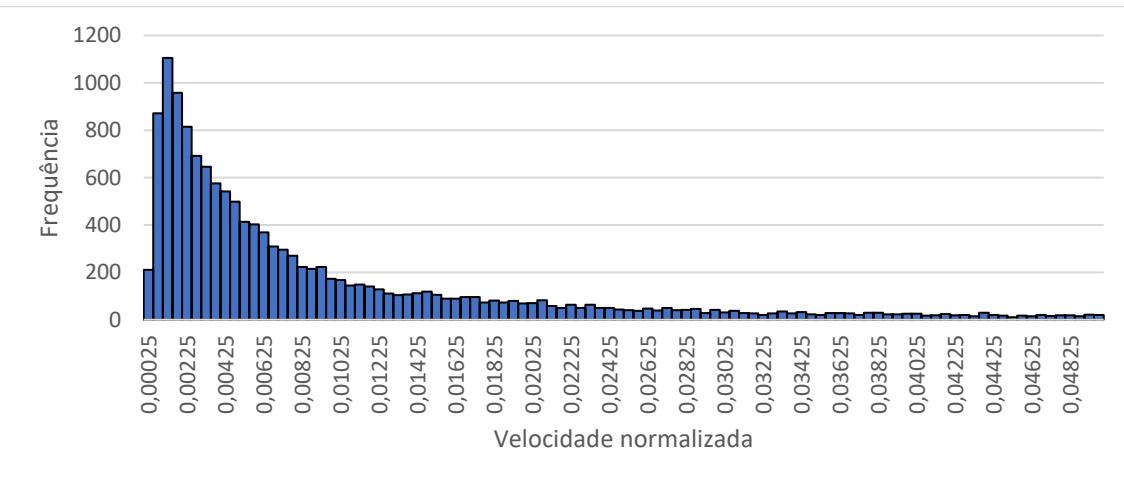


Figura 8.31 Histograma da velocidade das partículas à $U = 0.20\text{m/s}$.

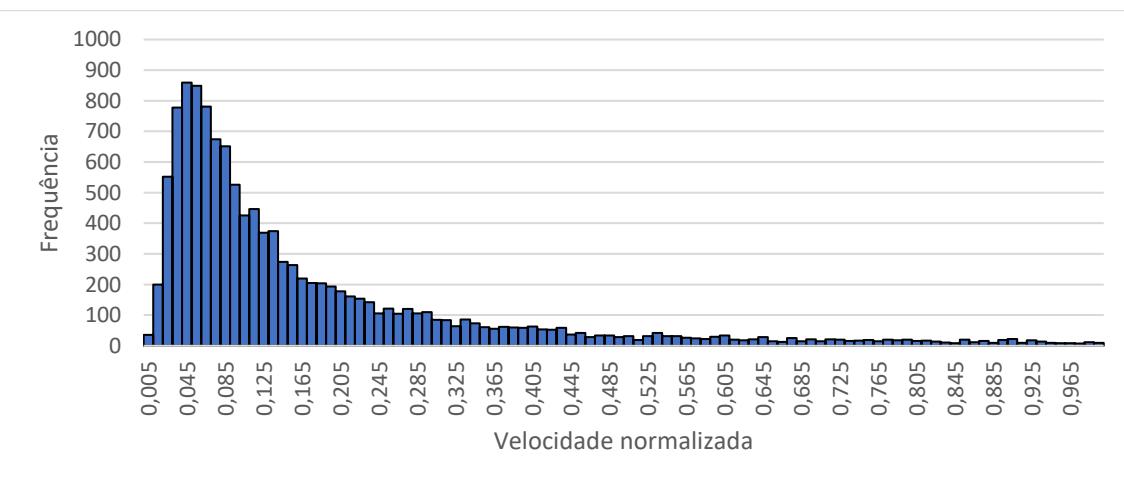


Figura 8.32 Histograma da velocidade das partículas à $U = 0.34\text{m/s}$.

A partir dos histogramas apresentados nas Figura 8.29, Figura 8.30, Figura 8.31 e Figura 8.32, é possível calcular a moda da distribuição de velocidades, que é plotada

na Figura 8.33, onde fica evidente um aumento abrupto na velocidade das partículas quando a velocidade do fluido é 0,34m/s, demonstrando que o limiar do movimento foi superado, e ainda evidencia que a maior parte das partículas movimenta-se apenas após a superação do limiar.

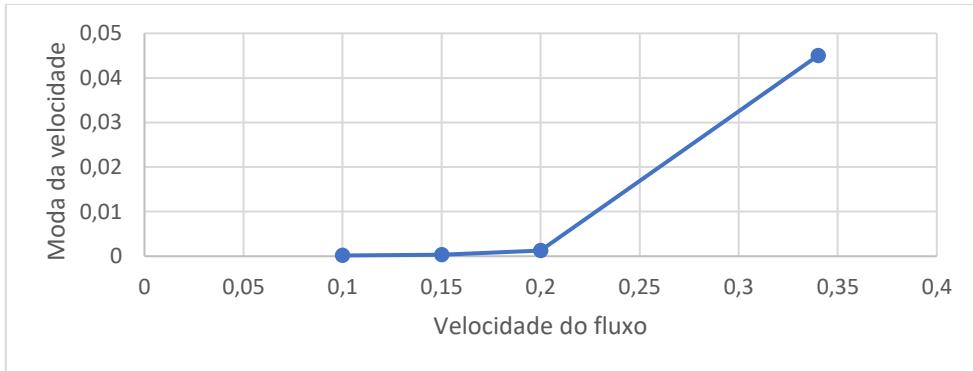


Figura 8.33 Variação da moda de velocidade com a velocidade do fluxo.

8.3.1.2 Análise dos ângulos da duna formada.

A partir dos dados da simulação do Caso 3, que gerou uma estrutura sedimentar mais parecida com uma duna, foi feita a análise da envoltória de um perfil vertical da duna, onde pode-se analisar e calcular o ângulo das faces à barlavento e de escorregamento, conforme Figura 8.34.

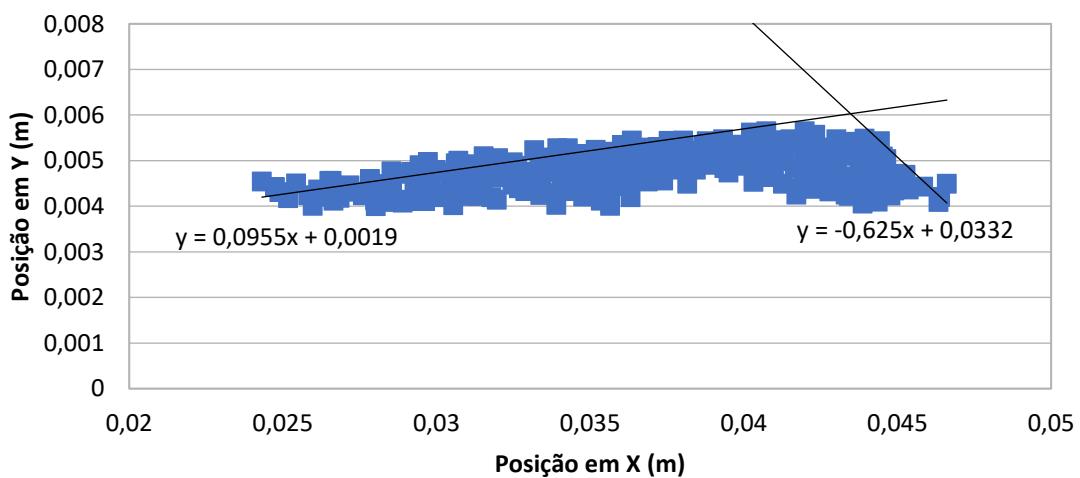


Figura 8.34 Envoltória de perfil vertical da duna.

Com os dados das linhas de tendência, plotadas na envoltória, é possível calcular os ângulos das faces à barlavento e de escorregamento que resultaram em aproximadamente $5,45^\circ$ e 32° , respectivamente, estando em total acordo com a literatura.

8.3.2 Análise das simulações em meios eólicos.

Conforme explicitado neste capítulo, as simulações em meio eólico forneceram uma grande quantidade de dados para o estudo dos tipos de transporte sedimentar, nesta seção será analisado o ângulo de saltação das partículas, tanto no momento de ejeção quanto no momento de aterrissagem.

Para a criação do histograma, foram selecionadas 1.442 partículas, em quatorze instantes de tempo diferentes, em sete deles para acompanhar a ejeção e em outros sete instantes para a aterrissagem, e, assim, quantificar os ângulos.

A Figura 8.35 foi feita para exemplificar um instante analisado, no qual, as partículas marcadas em branco, foram selecionadas a partir do critério de que suas velocidades em y fossem negativas, condição para aterrissagem, e que estivessem acima da camada, então, foi gerada a trajetória delas, em verde, pelo OVITO, e identificadas todas as que atingiram a camada para calcular o ângulo. O mesmo foi feito para ejeção, porém, o critério de seleção mudou para marcar as partículas com velocidade em y positiva e que partissem da camada.

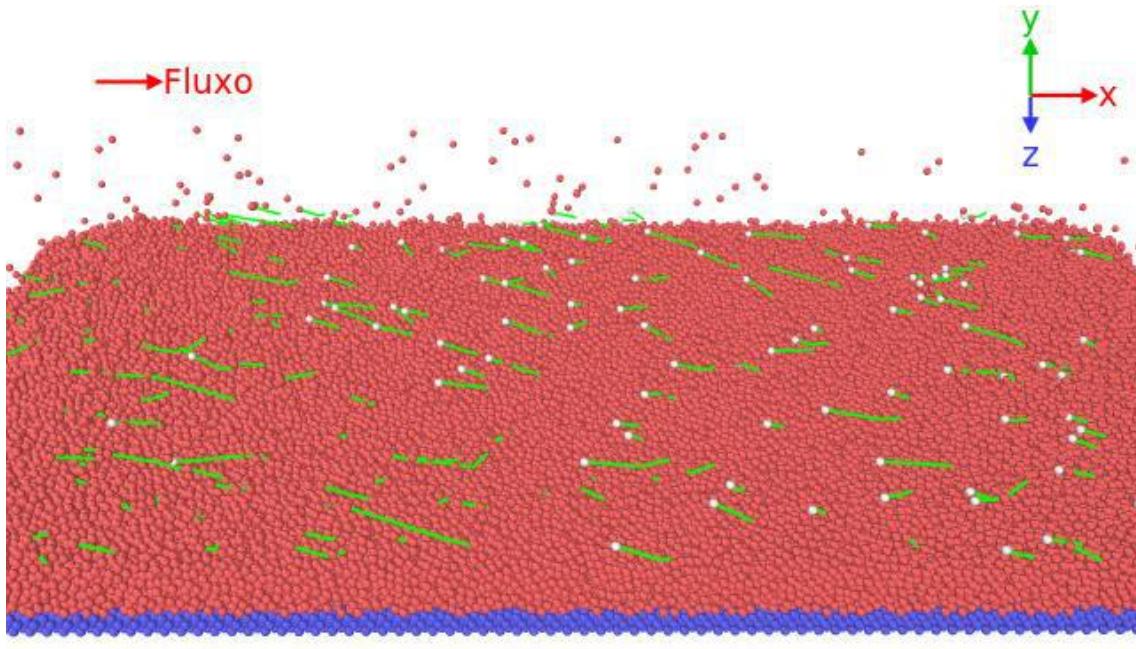


Figura 8.35 Método de identificação de partículas aterrissando.

De posse dos ângulos de aterrissagem e ejeção, foram criados os histogramas representados nas Figura 8.36 e Figura 8.37.

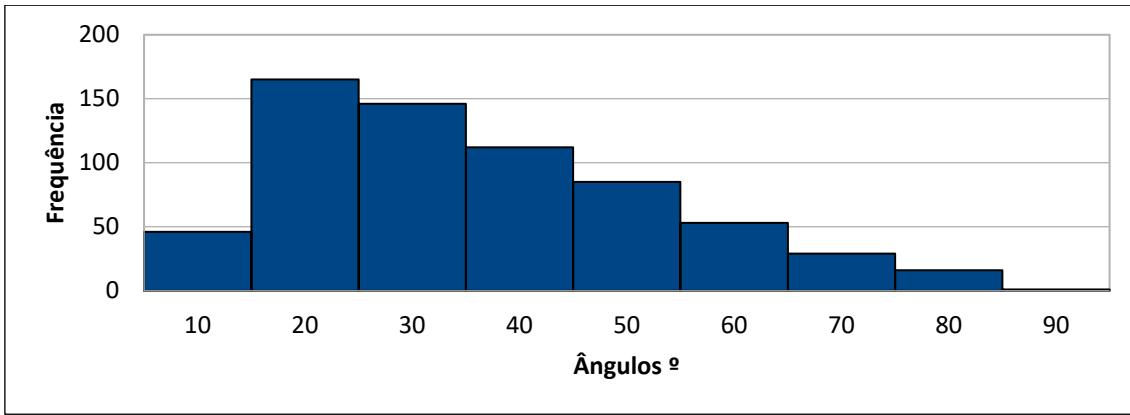


Figura 8.36 Histograma dos ângulos de ejeção.

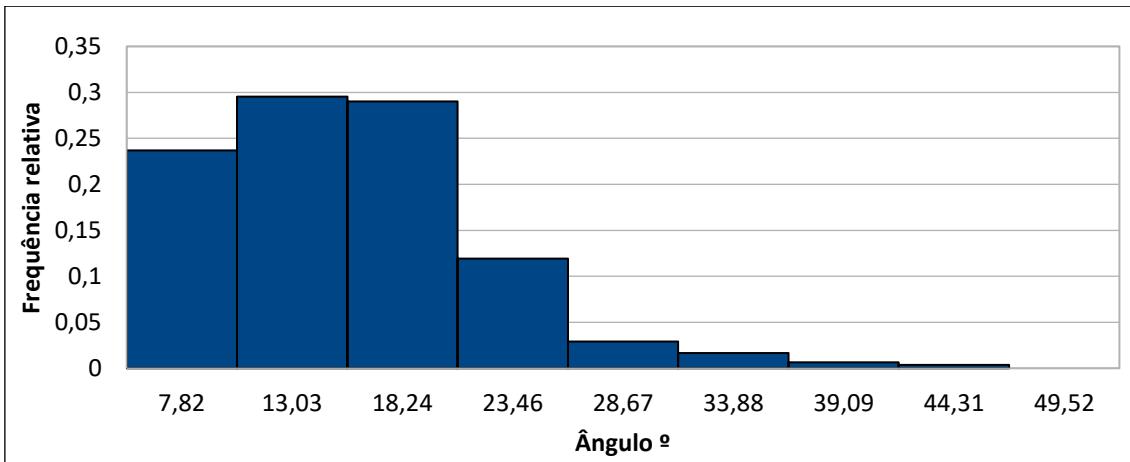


Figura 8.37 Distribuição dos ângulos de impacto.

9. CONCLUSÃO

Neste trabalho, foram executadas diversas simulações computacionais que apresentaram resultados condizentes com os modelos experimentais e teóricos. Confirmado que o SediFoam apresenta confiabilidade no estudo de camadas sedimentares expostas a fluxos.

Uma vantagem única da abordagem LES-DEM é a possibilidade se observar o movimento individual das partículas, que nos forneceu velocidades, ângulos e trajetórias em uma população muito maior que as obtidas experimentalmente.

Dos casos 1 ao 4, foi possível observar a movimentação das partículas conforme a velocidade do fluxo no meio aquoso era aumentada. Dos casos 1 ao 3, o cone atingiu uma forma semelhante a uma duna barcana, porém, cessaram-se os movimentos particulares após algum tempo de simulação. No caso 4, aparentemente, o limiar de movimento foi superado, tendo movimento generalizado ao longo de toda simulação. No caso 4A, o cone foi rapidamente varrido, tendo influência quase desprezível na

evolução da camada. No caso 4B, que partiu somente da camada irregular inicial, foi possível verificar a formação de formas efêmeras na camada, assim como o caso 4A.

É interessante observar que o caso 4B utilizou um espaço de armazenamento muito menor que as demais simulações, devido à utilização de maiores intervalos entre as impressões das saídas dos dados.

O caso 5 elucida os principais tipos de transporte sedimentar, porém, não é verificada a formação de nenhuma duna. Tal fato pode ser associado ao pequeno tempo real de simulação. As simulações realizadas no ambiente eólico, requerem maior velocidade do fluxo para se observar movimento, o que gera uma maior velocidade das partículas, levando à forte diminuição no passo das simulações, e, assim, aumentando o tempo total de execução. Devido ao longo tempo de simulação, os recursos computacionais disponíveis tornam proibitiva a execução de novas simulações.

Foram encontradas algumas dificuldades na execução deste trabalho, envolvendo: o tempo de simulação, o volume de dados, a criação da camada sedimentar, a ausência de *logs* semânticos na ocasião de falhas de execução do programa, ausência de literatura relativa ao programa, além da do próprio criador, limitação do computador doméstico utilizado e o fato do programa ainda estar em desenvolvimento.

O trabalho cria oportunidades para futuras investigações sobre influência da velocidade média do fluxo na velocidade das partículas, a análise de diferentes condições de ambientes, a evolução das formas de camada, o acompanhamento do transporte sedimentar e a variação das forças entre as partículas. E se mostra promissor e satisfatório nos objetivos propostos.

BIBLIOGRAFIA

- [1] R. Sun, H. Xiao e K. Strom, "Particle dynamics in self-generated dunes over a range of hydraulic and sediment transport conditions using LES--DEM," *arXiv: Geophysics*, 2016.
- [2] R. Sun e H. Xiao, "CFD-DEM Simulations of Current-Induced Dune Formation and Morphological Evolution," *Elsevier*, 2016.
- [3] R. Sun e H. Xiao, "SediFoam: A general-purpose, open-source CFD-DEM solver for particle-laden flow with emphasis on sediment transport," *Computers & Geosciences*, vol. 89, pp. 207-219, 2016.
- [4] Y. Shao, Physics and modelling of wind erosion, 2^a ed., vol. 37, Springer, 2008.
- [5] K. Shiksha, fevereiro 2014. [Online]. Available: <https://ecoursesonline.icar.gov.in/mod/page/view.php?id=124677>. [Acesso em outubro 2017].
- [6] K. A. Bevis, 2013. [Online]. Available: <http://intheplaygroundofgiants.com/geology-of-the-grand-canyon-region/the-geology-of-sedimentary-rocks/>. [Acesso em fevereiro 2018].
- [7] M. Varela. [Online]. Available: <https://docente.ifrn.edu.br/marciovarela/disciplinas/materiais-de-construcao/granulometria-1/granulometria>. [Acesso em fevereiro 2018].
- [8] A. M. G. d. Carvalho, 23 outubro 2011. [Online]. Available: <http://sopasdepedra.blogspot.com.br/2011/10/das-rochas-sedimentares-7-quantificacao.html>. [Acesso em dezembro 2017].
- [9] M. Weeland, 08 janeiro 2010. [Online]. Available: http://throughthesandglass.typepad.com/through_the_sandglass/2010/01/08/. [Acesso em abril 2017].
- [10] F. R. S. J. G. & T. H. J. Press, Understanding Earth, W. H. Freeman and Company, 2003.
- [11] Encyclopædia Britannica.
- [12] J. Southard, "12.090 Introduction to Fluid Motions, Sediment Transport, and Current-Generated Sedimentary Structures," Fall 2006.
- [13] A. Bakker, "CFD Class," 2008 Fevereiro 3. [Online]. Available: <http://www.bakker.org/dartmouth06/engs150/>.
- [14] Desconhecido, University of Delaware, 20 setembro 2016. [Online]. Available: <https://physics.stackexchange.com/questions/281281/about-the-definition-of-boundary-layer>. [Acesso em março 2018].
- [15] V. M. Epifanov, "Thermopedia," 16 março 2011. [Online]. Available: <http://www.thermopedia.com/content/595/>. [Acesso em janeiro 2018].

- [16] W. G. Nickling e M. Ecclestone, "The effects of soluble salts on the threshold shear velocity of fine sand," *Sedimentology*, vol. 28, nº 4, pp. 505-510, 1981.
- [17] R. A. Bagnold, *The physics of blown sand and desert dunes*, ed., Methuen, 1941.
- [18] G. Dzoma, 13 06 2015. [Online]. Available: <https://www.revision.co.zw/wind-action-in-deserts-wind-transport-and-deposition/#>. [Acesso em 06 2017].
- [19] J. Merck, 04 dezembro 2017. [Online]. Available: <https://www.geol.umd.edu/~jmerck/geol342/lectures/04.html>. [Acesso em fevereiro 2018].
- [20] B. R. White e J. C. Schulz, "Magnus effect in saltation," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 81, nº 03, pp. 497-512, 1977.
- [21] P. Nalpanis, J. C. R. Hunt e C. F. Barrett, "Saltating particles over flat beds," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 251, nº -1, pp. 661-685, 1993.
- [22] V. Schwämmle, *Modeling of Dune Morphology*, Estugarda: Institut für Computeranwendungen, 2002.
- [23] G. . Sauermann, K. Kroy e H. J. Herrmann, "Continuum saltation model for sand dunes.," *Physical Review E*, vol. 64, nº 3, p. 031305, 2001.
- [24] J. F. Kok, E. J. R. Parteli, T. I. Michaels e D. B. Karam, "The physics of wind-blown sand and dust," *Reports on Progress in Physics*, vol. 75, nº 10, p. 106901, 2012.
- [25] V. Baker e D. Nummedal, Planetary Geology Working Group, 1981-1982. [Online]. Available: <https://history.nasa.gov/SP-467/ch2.htm>. [Acesso em 2018].
- [26] D. B. Simons, E. V. Richardson e C. F. Nordin Jr., "Bedload equation for ripples and dunes," 1965.
- [27] L. v. Rijn, " Bedforms and roughness.," 05 junho 2017. [Online]. Available: http://www.coastalwiki.org/wiki/Bedforms_and_roughness. [Acesso em março 2018].
- [28] B. Horvat, *Barchan Dunes*, Ljubljana, 2015.
- [29] E. J. R. Parteli, O. Durán e H. J. Herrmann, "Minimal size of a barchan dune," *Physical Review E*, vol. 75, nº 1, p. 011301, 2007.
- [30] M. Franklin e F. Charru, "Subaqueous barchan dunes in turbulent shear flow. Part 1. Dune motion," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 675, pp. 199-222, 2011.
- [31] K. Kroy, S. Fischer e B. Obermayer, "The shape of barchan dunes," *Journal of Physics: Condensed Matter*, p. S1229, 2005.
- [32] R. Sun e H. Xiao, "CFD-DEM Simulations of Current-Induced Dune Formation and Morphological Evolution," *Advances in Water Resources*, vol. 92, nº 92, pp. 228-239, 2016.
- [33] J. M. McDonough, "Introductory Lectures on Turbulence – Physics, Mathematics, and Modeling". [Online]. Available: <http://www.engr.uky.edu/~acfd/lctr-notes634.pdf>.

[Acesso em 5 3 2018].

- [34] O. L. (ESI Group), “OpenFOAM - Official home of The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox,” [Online]. Available: <https://www.openfoam.com/>.
- [35] P. A. Cundall e O. D. L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies,” *Géotechnique*, vol. 29, nº 1, p. 47–65, .
- [36] D. C. Zacharias, 28 02 2004. [Online]. Available: <https://www.vivaolinux.com.br/artigo/Funcionamento-de-um-cluster-Linux>. [Acesso em janeiro 2018].
- [37] M. W. Schmeeckle, “Numerical simulation of turbulence and sediment transport of medium sand,” *Journal of Geophysical Research*, vol. 119, nº 6, pp. 1240-1262, 2014.
- [38] H. Xiao, “Home · xiaoh/sediFoam Wiki · GitHub,” 12 Fevereiro 2018. [Online]. Available: <https://github.com/xiaoh/sediFoam/wiki>.
- [39] A. Stukowski, “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, pp. 12-15.
- [40] E. E. Dr. Marina Sousani, “What is DEM – an Introduction to the Discrete Element Method,” 25 Janeiro 2018. [Online]. Available: <https://www.edemsimulation.com/webinar/dem-introduction-discrete-element-method/>.