**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA**

KAMILA RODRIGUES CASSARES SEKO

**Proposta de um modelo de resistência ao movimento rotacional e de um
método de geração de amostras de partículas para a modelagem
computacional de materiais granulares com o método dos elementos discretos**

**SÃO PAULO
2021**

KAMILA RODRIGUES CASSARES SEKO

**PROPOSTA DE UM MODELO DE RESISTÊNCIA AO MOVIMENTO ROTACIONAL
E DE UM MÉTODO DE GERAÇÃO DE AMOSTRAS DE PARTÍCULAS PARA A
MODELAGEM COMPUTACIONAL DE MATERIAIS GRANULARES COM O
MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS**

Versão corrigida

(Versão original encontra-se na unidade que aloja
o Programa de Pós-graduação)

**Tese apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para a
obtenção do título de Doutor em
Ciências**

**Área de Concentração:
Engenharia de Estruturas**

**Orientador:
Prof. Dr. Eduardo de M. B. Campello**

**SÃO PAULO
2021**

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 26 de julho de 2021

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Seko, Kamila Rodrigues Cassares

Proposta de um modelo de resistência ao movimento rotacional e de um método de geração de amostras de partículas para a modelagem computacional de materiais granulares com o método dos elementos discretos / K. R. C. Seko -- versão corr. -- São Paulo, 2021.

182 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica.

1.Materiais granulares 2.Partículas 3.Método dos Elementos Discretos 4.Método de geração de amostras 5.Resistência ao twisting e ao rolamento I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica II.t.

SEKO, KAMILA RODRIGUES CASSARES. **Proposta de um modelo de resistência ao movimento rotacional e de um método de geração de amostras de partículas para a modelagem computacional de materiais granulares com o método dos elementos discretos.** 2021. 182p. Tese (Doutorado em Ciências) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2021.

Aprovado em: 11 de junho de 2021

Banca Examinadora

Prof. Dr. Eduardo de Moraes Barreto Campello

Instituição: Escola Politécnica – PEF – Universidade de São Paulo

Julgamento: _____

Prof. Dra. Maria Eugênia Gimenez Boscov

Instituição: Escola Politécnica – PEF – Universidade de São Paulo

Julgamento: _____

Prof. Dr. Alex Alves Bandeira

Instituição: Universidade Federal da Bahia

Julgamento: _____

Prof. Dr. Marcos Aurélio Marques Noronha

Instituição: Universidade Federal de Santa Catarina

Julgamento: _____

Prof. Dra. Rosângela dos Santos Motta

Instituição: Escola Politécnica – PTR – Universidade de São Paulo

Julgamento: _____

Dedico este trabalho ao meu amado pai
Duverney Rodrigues Cassares (*in
memoriam*) que me permitiu estar sempre
sobre seus ombros e assim, poder ver
mais longe.

AGRADECIMENTOS

À Deus que me deu a vida, ilumina-me todos os dias e guia meus passos.

Ao meu orientador, Eduardo de Moraes Barreto Campello, por todos os conselhos, orientações e discussões durante este período de trabalho.

Aos meus amados pais Duverney Rodrigues Cassares (*in memoriam*) e Eliana Croques Silva Cassares por todo carinho, empenho, esforço e incentivo realizados durante a minha vida.

Ao meu amado esposo Daniel Seko, por estar presente ao meu lado sempre me estendendo sua mão, incentivando-me e me apoiando nesta jornada.

À minha irmã Karolina Rodrigues Cassares pelo seu carinho, compreensão e incentivo.

À Professora Patrícia Barboza da Silva da Universidade Presbiteriana Mackenzie pelo carinho, companheirismo e apoio.

Ao Professor Alfredo Gay Neto e ao Sílvia Tumelero de Moraes, que gentilmente, auxiliaram na geração de amostras com o emprego do programa computacional Rocky DEM.

RESUMO

SEKO, KAMILA RODRIGUES CASSARES. **Proposta de um modelo de resistência ao movimento rotacional e de um método de geração de amostras de partículas para a modelagem computacional de materiais granulares com o método dos elementos discretos**. 2021. 182p. Tese (Doutorado em Ciências) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2021.

Com o avanço computacional, o Método dos Elementos Discretos (MED) tem se constituído uma ferramenta útil para o estudo de materiais granulares, oferecendo uma alternativa à abordagem (muitas vezes conveniente) de se idealizá-los como meios contínuos. Para que o método seja empregado e o material representado adequadamente, é necessário gerar previamente uma amostra de partículas, que de preferência respeite uma distribuição granulométrica dada e uma porosidade imposta. A maior parte dos métodos de geração de amostras disponíveis atualmente não considera a distribuição granulométrica, e os poucos que a consideram não proporcionam amostras com distribuição e porosidade que sejam satisfatórias para todos os tipos de granulometria possíveis. Diante disso, um dos objetivos deste trabalho foi desenvolver um método de geração de amostras de partículas com vistas à simulação computacional de materiais granulares por meio do MED, com a particularidade de que seja levada em consideração a curva de distribuição granulométrica e a porosidade do material de interesse. O método foi implementado no programa SGen, que está sendo desenvolvido no Laboratório de Mecânica Computacional do PEF/EPUSP. Sua validação foi realizada, observando-se excelente aderência entre os dados impostos e os resultados obtidos, com superioridade quando comparados a amostras geradas com métodos existentes e com programas comerciais de MED. O método considera partículas com formato esférico, objetivando eficiência computacional. Para que essas partículas tenham comportamento adequado em uma simulação com o MED, sem apresentar rotação indefinida em amostras estáticas, a consideração da resistência ao movimento rotacional é extremamente importante. Nesse sentido, outro objetivo deste trabalho foi desenvolver um modelo de resistência ao giro de torção relativa (ou *twisting*) combinado à resistência ao rolamento para contato entre partículas, e implementá-lo no programa de elementos discretos PSY (também em desenvolvimento no

Laboratório de Mecânica Computacional do PEF/EPUSP). Observou-se um comportamento mecânico adequado e compatível com o encontrado nos modelos mais avançados da literatura.

Palavras-chave: Materiais granulares. Partículas. Método dos Elementos Discretos. Método de geração de amostras. Resistência ao *twisting* e ao rolamento.

ABSTRACT

SEKO, KAMILA RODRIGUES CASSARES. **Proposal of a rotational resistance model and of a particle pack generation method for the numerical analysis of granular materials using the discrete element method.** 2021. 182p. Thesis (Doctor in Science) – Polytechnic School, University of São Paulo, São Paulo, 2021.

Advancements in computational hardware allowed the Discrete Element Method (DEM) to become a useful tool for the study of granular materials, offering an alternative to the approach (at times suitable) of idealizing them as a continuum. For the method to be used and the material to be represented appropriately, it is necessary to previously generate a particle pack or sample, preferably following a given particle size distribution and an imposed porosity. Most of the particle sample generation methods currently available do not consider the particle size distribution, and the few that consider do not provide samples with fully satisfactory distribution and porosity for all types of possible granulometries. In this context, one of the purposes of this work was to develop a particle sample generation method that accurately allows for a predefined grain size distribution and porosity for discrete element simulations of granular materials. The method was implemented into SGen, a computer program that is being developed at the Computational Mechanics Laboratory of PEF/EPUSP. Its validation was performed, observing excellent agreement between the imposed data and the results obtained, with superiority when compared to samples generated either with existing methods or commercial DEM programs. The method considers particles with spherical shapes only, aiming at computational efficiency. For such particles to behave appropriately in DEM simulations, such that they do not have indefinite rotation when in static samples or particle piles, consideration of the resistance to the rotational motion is critical. In this sense, another objective of this work was to develop a twisting resistance model combined with a rolling resistance model for contact between particles, and to implement it into the discrete element program PSY (also under development in the Computational Mechanics Laboratory of PEF/EPUSP). An appropriate mechanical behavior was observed, in agreement with that found in most of the advanced models in the literature.

Keywords: Granular materials. Particles. Discrete element method. Particle generation

method. Twisting resistance and rolling resistance.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Cinemática de uma partícula	39
Figura 2 – Esquema do sistema composto por várias partículas	44
Figura 3 – Esquema da relação de proximidade entre partículas	49
Figura 4 – Contato/colisão entre partículas	52
Figura 5 – Atrito entre duas partículas	56
Figura 6 – Esquemático do movimento de rolamento entre duas partículas	61
Figura 7 – Tipos de rotação decorrentes do contato entre partículas	62
Figura 8 – Vista de uma esfera sobre um plano inclinado	63
Figura 9 – Modelo de contato para 2D proposto por Iwashita e Oda (1998) e (2000)	64
Figura 10 – Modelo de contato para 2D proposto por Jiang, Yu e Harris (2005)	66
Figura 11 – Curva momento elástico de rolamento x rotação proposto por Ai (2010)	67
Figura 12 – Modelo de contato para 3D proposto por Belheine et al. (2009)	69
Figura 13 – Modelo de contato para 3D proposto por Jiang et al. (2015)	73
Figura 14 – Modelo de contato para 3D proposto por Huang et al. (2017)	75
Figura 15 – Partícula em contato com uma superfície	85
Figura 16 – Área de contato entre duas partículas no formato circular	87
Figura 17 – Partículas em contato	88
Figura 18 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro sobre superfície rígida	97
Figura 19 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 1 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo.	99
Figura 20 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 1 - Evolução da velocidade angular com o tempo	100
Figura 21 – Uma partícula submetida a <i>twisting</i> puro. Simulação 1 - Momento resistente ao <i>twisting</i> em relação ao tempo	100
Figura 22 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 1 - Energia cinética rotacional em função do tempo	101
Figura 23 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 2 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo	102

Figura 24 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 2 - Evolução da velocidade angular com o tempo.....	103
Figura 25 – Uma partícula submetida a <i>twisting</i> puro. Simulação 2 - Momento resistente ao <i>twisting</i> em relação ao tempo.....	103
Figura 26 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 2 - Energia cinética rotacional em função do tempo	104
Figura 27 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 3 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo.....	105
Figura 28 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 3 - Evolução da velocidade angular com o tempo.....	106
Figura 29 – Uma partícula submetida a <i>twisting</i> puro. Simulação 3 - Momento resistente ao <i>twisting</i> em relação ao tempo.....	106
Figura 30 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 3 - Energia cinética rotacional em função do tempo	107
Figura 31 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 4 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo.....	108
Figura 32 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 4 - Evolução da velocidade angular com o tempo.....	109
Figura 33 – Uma partícula submetida a <i>twisting</i> puro. Simulação 4 - Momento resistente ao <i>twisting</i> em relação ao tempo.....	109
Figura 34 – Uma partícula submetida ao <i>twisting</i> puro. Simulação 4 - Energia cinética rotacional em função do tempo	110
Figura 35 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> em contato com superfície rígida	111
Figura 36 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Momento resistente ao <i>twisting</i> em função do tempo.....	112
Figura 37 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Momento resistente ao rolamento em função do tempo.....	113
Figura 38 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Rotação em torno do eixo x em função do tempo	113
Figura 39 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Rotação em torno do eixo y em função do tempo	114
Figura 40 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Velocidade angular em torno do eixo x em função do tempo	115

Figura 41 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Velocidade angular em torno do eixo y em função do tempo.....	116
Figura 42 – Uma partícula sob rolamento e <i>twisting</i> . Energia cinética rotacional em função do tempo.....	117
Figura 43 – Partícula sob velocidades angular e translacional sobre uma superfície rígida	118
Figura 44 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução do momento resistente ao <i>twisting</i> com o tempo.....	119
Figura 45 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução da velocidade angular normalizada em relação ao valor inicial com o tempo.	120
Figura 46 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução do momento resistente ao <i>twisting</i> em relação a rotação.	120
Figura 47 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução do momento resistente ao <i>twisting</i> em relação ao força de contato.....	121
Figura 48 – Partícula sob <i>twisting</i> em contato com uma partícula estática	123
Figura 49 – Partícula sob <i>twisting</i> em contato com uma partícula estática. Velocidade angular em torno do eixo y em função do tempo	124
Figura 50 – Partícula sob <i>twisting</i> em contato com uma partícula estática. Rotação em torno do eixo y da partícula 1 em função do tempo	125
Figura 51 – Partícula sob <i>twisting</i> em contato com uma partícula estática. Rotação em torno do eixo y da partícula 2 em função do tempo	125
Figura 52 – Partícula sob <i>twisting</i> em contato com uma partícula estática. Momento resistente ao <i>twisting</i> em função do tempo	126
Figura 53 – Partícula sob <i>twisting</i> em contato com uma partícula estática. Energia cinética rotacional em função do tempo.....	126
Figura 54 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Configuração inicial	128
Figura 55 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Energia cinética normalizada em função do tempo.....	129
Figura 56 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Retratos da configuração do sistema em diferentes instantes de tempo	130
Figura 57 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Medida média das inclinações das faces da pilha após desmoronamento	131
Figura 58 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Configuração final da pilha para cada modelo de resistência ao movimento rotacional.....	131

Figura 59 – Algoritmo <i>Advancing front-closed form</i> .	134
Figura 60 – Algoritmo <i>Advancing front-open form</i>	134
Figura 61 - Algoritmo <i>hopper to mix</i> .	135
Figura 62 – Método da triangulação para casos bidimensionais:	135
Figura 63 – Método da triangulação para casos tridimensionais:	136
Figura 64 – Esquemático da metodologia proposta	142
Figura 65 – Esquemático do peneiramento com massa total do domínio da amostra	144
Figura 66 – Esquemático sobre a metodologia de compactação	147
Figura 67 – Curva granulométrica imposta 1 proposta por Dang e Meguid(2010)..	151
Figura 68 – Curvas granulométricas numérica <i>versus</i> imposta	154
Figura 69 – Amostras geradas com curva granulométrica proposta por Dang & Meguid (2010).....	155
Figura 70 – Classificação quanto a distribuição granulométrica da amostra	157
Figura 71 – Curva granulométrica imposta 2.....	159
Figura 72 – Curva granulométrica imposta 2 <i>versus</i> numérica.....	161
Figura 73 – Amostras geradas com curva granulométrica imposta 2 - Pinto (2006)	163
Figura 74 – Curva granulométrica imposta 3.....	164
Figura 75 – Curva granulométrica imposta 3 <i>versus</i> numérica.....	165
Figura 76 – Amostra gerada com curva granulométrica imposta 3 - Pinto (2006) ..	167
Figura 77 – Curva granulométrica imposta 4.....	168
Figura 78 – Curva granulométrica imposta 4 <i>versus</i> numérica.....	170
Figura 79 – Amostra gerada com curva granulométrica imposta 4 - Pinto (2006) ..	171
Figura 80 – Curva granulométrica imposta 5.....	173
Figura 81 – Curva granulométrica imposta 5 <i>versus</i> numérica.....	174
Figura 82 – Amostras geradas com curva granulométrica imposta 5	175

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tipos de materiais granulares	25
Tabela 2 – Dados da curva granulométrica imposta 1 proposta por Dang e Meguid(2010)	151
Tabela 3 – Curva imposta 1: dados de entrada para o algoritmo proposto	153
Tabela 4 – Curva Imposta 1: comparativo com resultados numéricos	154
Tabela 5 – Curva imposta 2: dados de entrada para o algoritmo proposto	160
Tabela 6 – Curva Imposta 2: comparativo com resultados numéricos	162
Tabela 7 – Curva imposta 3: dados de entrada para o algoritmo proposto	164
Tabela 8 – Curva imposta 3: comparativo com resultados numéricos	166
Tabela 9 – Curva imposta 4: dados de entrada para o algoritmo proposto	168
Tabela 10 – Curva imposta 4: dados de entrada para programas comerciais	169
Tabela 11 – Curva imposta 4: comparativo com resultados numéricos	171
Tabela 12 – Curva imposta 5: dados de entrada para o algoritmo proposto	173
Tabela 13 – Curva imposta 5: comparativo com resultados numéricos	175

LISTA DE SÍMBOLOS

r	raio da partícula
ρ	massa específica do material
t	instante de tempo
$\mathbf{x}_C^r$	vetor posição do centro da partícula na configuração de referência
$\boldsymbol{\alpha}^r$	vetor rotação de Rodrigues da partícula na configuração de referência
$\boldsymbol{\alpha}^\Delta$	vetor rotação incremental de Rodrigues
$\boldsymbol{\alpha}_{total}$	vetor rotação total
$\mathbf{x}^r$	vetor posição de um ponto material genérico da partícula na configuração de referência
$\mathbf{r}^r$	vetor que liga o centro da partícula ao ponto material genérico da partícula na configuração de referência
$\mathbf{x}$	vetor posição de um ponto material genérico da partícula
$\mathbf{r}$	vetor que liga o centro da partícula ao ponto material genérico da partícula
$\mathbf{Q}_\Delta$	tensor rotação
$\mathbf{A}_\Delta$	tensor antissimétrico do vetor rotação incremental de Rodrigues
$\mathbf{v}$	vetor velocidade de um ponto material genérico da partícula
$\mathbf{v}_C, \mathbf{v}_i$	vetor velocidade do centro da partícula
$\boldsymbol{\Omega}$	tensor velocidade angular da partícula
$\boldsymbol{\omega}$	vetor velocidade angular de um ponto material genérico da partícula
$\mathbf{a}$	vetor aceleração de um ponto material genérico da partícula
$\mathbf{a}_C, \mathbf{a}_i$	vetor aceleração do centro da partícula
$\dot{\boldsymbol{\Omega}}$	tensor aceleração angular da partícula
V	volume da partícula
m	massa da partícula
$\boldsymbol{\lambda}$	momento linear da partícula
$\boldsymbol{\mu}_C$	momento angular da partícula em relação ao seu centro

J_C	tensor de inércia da partícula em relação ao seu centro
j	momento de inércia
f_i^{tot}	vetor das forças totais em relação ao centro da partícula
m_i^{tot}	vetor momentos totais em relação ao centro da partícula
x_i	vetor posição do centro da partícula
α_i^Δ	vetor rotação incremental
ω_i	vetor velocidade angular em relação ao centro da partícula
$\dot{\omega}_i$	vetor aceleração angular em relação ao centro da partícula
N_p	número total de partículas
r_i	raio constante da partícula
ρ_i	massa específica da partícula
q_i	carga elétrica da partícula
f_i^{ce}	vetor força de campos externos sobre a partícula
f_i^{arr}	vetor força de arrasto sobre a partícula
f_i^{at-rep}	vetor forças de atração e repulsão sobre a partícula
f_i^{ad}	vetor forças de adesão sobre a partícula
f_i^{con}	vetor forças normais de contato sobre a partícula
f_i^{atr}	vetor forças de atrito sobre a partícula
g	vetor aceleração da gravidade
ρ_F	densidade do fluido
C_A	coeficiente de arrasto
A_i	área frontal da partícula em relação ao escoamento
v_F	vetor velocidade local do fluido
Re	número de Reynolds
η_F	viscosidade do fluido

$\mathbf{f}_{ij}^{at-rep}$	vetor força que atua na partícula i devido à atração e repulsão pela partícula j
$\mathbf{n}_{ij}$	vetor unitário que aponta do centro da partícula i para o centro da partícula j
δ_{ij}	distância entre as superfícies das partículas i e j (interpenetração)
ε_{ij}	deformação local entre partículas
$\mathbf{f}_{ij}^{ad}$	vetor força que atua na partícula i devido à adesão com a partícula j
$\mathbf{f}_{ij}^{con}$	vetor força normal de contato que atua sobre a partícula i devido ao contato com a partícula j
N_c	número de partículas que estão em contato com a partícula i
r^*	raio efetivo
E^*	módulo de elasticidade efetivo
E_i	módulo de elasticidade da partícula
ν_i	coeficiente de Poisson da partícula
$\dot{\delta}_{ij}$	taxa de variação do encurtamento em relação ao tempo
m^*	massa efetiva
k_{ij}^{con}	coeficiente de rigidez da mola do modelo de contato mecânico
d_{ij}^{con}	coeficiente de amortecimento do modelo de contato mecânico
$d_{ij}^{con,crit}$	coeficiente de amortecimento crítico do modelo de contato mecânico
ξ^{con}	taxa de amortecimento do modelo de contato mecânico
ω_0^*	frequência natural não amortecida
e	coeficiente de restituição
μ_S	coeficiente de atrito estático
μ_D	coeficiente de atrito dinâmico
$\mathbf{f}_{ij}^{atr}$	vetor força de atrito que atua na partícula i decorrente do contato com a partícula j

$\mathbf{f}_{ij}^{atr,trial}$	vetor força de atrito tentativa
k_{ij}^{atr}	coeficiente de rigidez da mola (modelo de resistência ao atrito)
d_{ij}^{atr}	coeficiente de amortecimento (modelo de resistência ao atrito)
$\Delta \mathbf{x}_{ij}^{trial}$	vetor alongamento tentativa (modelo de resistência ao atrito)
$\mathbf{v}_{ij}$	vetor velocidade de alongamento (modelo de resistência ao atrito)
$\Delta \mathbf{x}_{ij}^{acum}$	vetor alongamento acumulado (modelo de resistência ao atrito)
$\delta \mathbf{x}_{ij}^{trial}$	vetor alongamento incremental tentativa (modelo de resistência ao atrito)
$\mathbf{v}_{rel,t}^P$	vetor velocidade relativa entre as superfícies das partículas no ponto P de contato na direção tangente
$\mathbf{v}_{rel}^P$	vetor velocidade relativa no ponto de contato P
$\mathbf{v}_i^P$	vetor velocidade do ponto de contato P da partícula
$\mathbf{r}_i^P$	vetor que liga o centro da partícula ao ponto de contato P
δ_i	encurtamento local do raio da partícula
$\mathbf{t}_{ij}^{trial}$	vetor indicador da direção do vetor força de atrito tentativa
$\mathbf{t}_{ij}$	vetor indicador da direção do vetor força de atrito
$\Delta \mathbf{x}_{ij}$	vetor alongamento (modelo de resistência ao atrito)
G^*	módulo de elasticidade transversal efetivo para o par de partículas
G_i	módulo de elasticidade transversal da partícula
ξ_t	taxa de amortecimento (modelo de resistência ao atrito)
$\mathbf{m}_{ij}^{atr}$	vetor momento induzido em uma partícula devido o atrito
μ_R	coeficiente de resistência ao rolamento
m_{ij}^{rol}	momento resistente ao rolamento
k_{ij}^{rol}	coeficiente de rigidez da mola (modelo de resistência ao rolamento)
d_{ij}^{rol}	coeficiente de amortecimento (modelo de resistência ao rolamento)

θ_{ij}^{rol}	rotação da mola do modelo de resistência ao rolamento
ω_{ij}	velocidade angular do amortecedor do modelo de resistência ao rolamento
$\bar{r}$	valor médio dos raios das partículas em contato
B	extensão em que as partículas estão em contato
$m_{ij}^{rol,máx}$	momento máximo resistente ao rolamento
$m_{ij}^{rol,k}$	momento elástico resistente ao rolamento
$m_{ij}^{rol,d}$	momento viscoso resistente ao rolamento
$\Delta m_{ij,\Delta t}^{rol,k}$	momento elástico resistente ao rolamento incremental
$\Delta m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k}$	momento elástico resistente ao rolamento total
$\Delta m_{ij,t}^{rol,k}$	momento elástico resistente ao rolamento armazenado entre instantes de tempo consecutivos
$\Delta \theta_{ij}^r$	variação da rotação de rolamento entre as duas partículas
ξ^{rol}	taxa de amortecimento (modelo de resistência ao rolamento)
$d_{ij}^{rol,crit}$	amortecimento crítico (modelo de resistência ao rolamento)
j^*	momento de inércia efetivo rotacional do par de partículas
$\mathbf{m}_{ij}^{rol}$	vetor momento resistente ao rolamento
$\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}$	vetor momento de resistência ao rolamento tentativa
$\Delta \theta_{ij}^{trial}$	vetor rotação tentativa da mola de rolamento
$\Delta \theta_{ij}^r$	vetor rotação da configuração de referência para o par de partículas
$\Delta \theta_{ij}^{\Delta,trial}$	vetor incremento de rotação tentativa para o par de partículas
$\mathbf{s}_{ij}^{trial}$	vetor indicador da direção do vetor momento de resistência ao rolamento tentativa
$\mathbf{s}_{ij}$	vetor indicador da direção do vetor momento de resistência ao rolamento
$\Delta \theta_{ij}$	vetor rotação relativa entre par de partículas em contato

r_{ij}^{con}	raio da área de contato entre duas partículas
$\mathbf{m}_{ij}^{tw}$	vetor momento resistente ao <i>twisting</i>
k_{ij}^{tw}	coeficiente de rigidez da mola (modelo de resistência ao <i>twisting</i>)
δ_{iw}	interpenetração entre partícula e parede
d_{iw}	distância entre o centro da partícula e a face da parede
ε_{iw}	deformação na região de contato entre partícula e parede
t_0	instante de tempo inicial de um estado conhecido
t_f	instante de tempo final de um estado que é desconhecido
Δt	intervalo de tempo entre dois instantes consecutivos ou passo de integração
t^r	instante de tempo na configuração de referência
$\Delta \mathbf{x}_i$	vetor deslocamento do centro da partícula entre as configurações de referência e atual
Δr	vetor resultante do movimento de rolamento
ω_{ij}^{rol}	vetor velocidade angular relativa relacionado ao rolamento
ω_{ij}^{tw}	vetor velocidade angular relativa relacionado ao <i>twisting</i>
$\Delta \theta_{ij}^{rol,trial}$	vetor rotação tentativa da mola de rolamento do modelo de resistência ao movimento rotacional
$\Delta \theta_{ij}^{rol,r}$	vetor rotação quanto ao rolamento da configuração de referência para o par de partículas no modelo de resistência ao movimento rotacional
$\Delta \theta_{ij}^{\Delta rol,trial}$	vetor incremento de rotação tentativa quanto ao rolamento para o par de partículas no modelo de resistência ao movimento rotacional
$\mathbf{s}_{ij}^{rol,trial}$	vetor indicador da direção do vetor momento de resistência ao rolamento tentativa no modelo de resistência ao movimento rotacional
$\mathbf{s}_{ij}^{rol}$	vetor indicador da direção do vetor momento de resistência ao rolamento no modelo de resistência ao movimento rotacional

$\Delta\theta_{ij}^{rol}$	vetor rotação de rolamento no modelo de resistência ao movimento rotacional
q_0	valor máximo de esforço aplicado
r	distância entre o ponto de contato e o ponto a ser estudado
M^{tw}	momento resistente ao <i>twisting</i>
θ^{tw}	rotação de corpo rígido quanto ao <i>twisting</i>
G_{tw}^*	módulo de elasticidade transversal equivalente quanto ao <i>twisting</i>
$m_{ij}^{tw,trial}$	vetor momento resistente ao <i>twisting</i> tentativa
k_{ij}^{tw}	coeficiente de rigidez de uma mola linear para o modelo de resistência quanto ao <i>twisting</i>
$\Delta\theta_{ij}^{tw,trial}$	vetor rotação tentativa da mola para o modelo de resistência quanto ao <i>twisting</i>
d_{ij}^{tw}	parâmetro de amortecimento para o modelo de resistência quanto ao <i>twisting</i>
$\Delta\theta_{ij}^{tw,r}$	vetor rotação quanto ao <i>twisting</i> da configuração de referência para o par de partículas no modelo de resistência ao movimento rotacional
$\Delta\theta_{ij}^{\Delta tw,trial}$	vetor incremento de rotação tentativa quanto ao <i>twisting</i> para o par de partículas no modelo de resistência ao movimento rotacional
$\Delta\theta_{ij}^{tw}$	vetor rotação quanto ao <i>twisting</i> no modelo de resistência ao movimento rotacional
$d_{ij}^{tw,crit}$	parâmetro de amortecimento crítico quanto ao <i>twisting</i> no modelo de resistência ao movimento rotacional
ξ^{tw}	taxa de amortecimento quanto ao <i>twisting</i> no modelo de resistência ao movimento rotacional
J_{tw}^*	momento de inércia equivalente quanto ao <i>twisting</i> no modelo de resistência ao movimento rotacional
n	porosidade da amostra de partículas

V_V	volume de vazios
V_p	volume de partículas
m_p	massa das partículas
ρ_p	massa específica das partículas
$n_{peneiras}^{total}$	número total de peneiras do conjunto
$\%Q_m^k$	porcentagem de massa de partículas que passa em uma peneira
$m_p^{ret-accum,k}$	massa retida de partículas de forma acumulada em uma peneira
$m_p^{ret,k}$	massa retida de partículas em uma peneira
$N_p^{ret,k}$	número de partículas retido em uma peneira
$V_p^{padrão}$	volume de uma partícula considerada padrão
$N_p^{ret-accum,k}$	número acumulado de partículas retidas em uma peneira
$\%Q_p^k$	porcentagem quanto ao número de partículas que passam por uma peneira
D_k	diâmetro correspondente às aberturas de uma peneira
ϕ_0	fração sólida desejada
Z	número de coordenação da amostra de partículas
N_c^{total}	número total de contatos entre partículas
CNU	coeficiente de não uniformidade
CC	coeficiente de curvatura
d_{10}	valor de diâmetro abaixo do qual se tem 10% de massa da amostra
d_{30}	valor de diâmetro abaixo do qual se tem 30% de massa da amostra
d_{60}	valor de diâmetro abaixo do qual se tem 60% de massa da amostra

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	25
1.1 OBJETIVOS	28
1.1.1 <i>Objetivo geral</i>	28
1.1.2 <i>Objetivos específicos</i>	29
1.2 JUSTIFICATIVA	29
1.3 METODOLOGIA	32
1.4 ESTRUTURA DO TEXTO	33
2 UMA FORMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS	35
2.1 BREVE HISTÓRICO	36
2.2 CINEMÁTICA E DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA	38
2.3 DINÂMICA DE UM SISTEMA DE PARTÍCULAS	43
2.3.1 <i>Força de contato</i>	50
2.3.2 <i>Força de atrito</i>	55
2.3.3 <i>Resistência ao rolamento e ao twisting</i>	60
2.3.4 <i>Interação com paredes e superfícies rígidas</i>	80
2.4 SOLUÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DO SISTEMA	80
3 PROPOSTA DE UM MODELO DE RESISTÊNCIA AO MOVIMENTO ROTACIONAL	85
3.1 FORMULAÇÃO PROPOSTA DE UM MODELO DE RESISTÊNCIA AO ROLAMENTO E AO TWISTING	87
3.2 VALIDAÇÃO E APLICAÇÃO DO MODELO PROPOSTO	96
3.2.1 <i>Uma partícula submetida ao twisting puro sobre uma superfície rígida</i>	96
3.2.2 <i>Partícula sob rolamento e twisting em contato com superfície rígida</i>	110
3.2.3 <i>Partícula sob velocidades angular e translacional sobre uma superfície rígida</i>	117
3.2.4 <i>Partícula sob twisting em contato com uma partícula estática</i>	122
3.2.5 <i>Desmoronamento de uma pilha de partículas</i>	127
4 PROPOSTA DE UM MÉTODO PARA GERAÇÃO DE AMOSTRAS DE PARTÍCULAS	132
4.1 BREVE HISTÓRICO DOS MÉTODOS DE GERAÇÃO DE AMOSTRAS	133

4.2 METODOLOGIA PROPOSTA PARA OBTENÇÃO DE AMOSTRAS DENSAS COM CURVA GRANULOMÉTRICA E POROSIDADE IMPOSTAS	138
4.3 VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA	150
5 CONCLUSÕES	177
REFERÊNCIAS.....	179

1 INTRODUÇÃO

Os materiais granulares são formados por um conjunto de grãos que estão em contato quase permanente entre si, podendo apresentar duas ou três fases (sólida e gasosa ou sólida, líquida e gasosa) (CAMBOU; MAGOARIEC; NGUYEN, 2016). São considerados uma das classes de materiais mais presentes nas atividades do ser humano. A escala em que são observados cobre um espectro bastante amplo, indo por exemplo desde pós industriais e poeira atmosférica até a pilhas de blocos de rocha, como em barragens de enrocamento.

Segundo Brown e Richards (1970), os materiais granulares podem ser classificados a partir do tamanho de seus grãos ou partículas, como é apresentado na Tabela 1. Neste trabalho, não será realizada a distinção quanto a essa classificação. Além disso, os elementos da fase sólida serão chamados indistintamente de grãos ou partículas.

Tabela 1 – Tipos de materiais granulares

Intervalo de tamanho do grão ou partícula	Tipo de material
0,0001mm a 0,001mm	Pó ultrafino
0,001mm a 0,01mm	Pó fino/superfino
0,01mm a 0,1mm	Pó granular
0,1mm a 3,0mm	Sólido granular
Superior a 3,0mm	Sólido fragmentado

Fonte: Adaptado de Brown e Richards (1970).

Os materiais granulares apresentam um comportamento que o distingue dos sólidos e fluidos. Contudo, há situações em que se comportam como sólidos e outras em que se comportam como fluidos, ou até mesmo como algo completamente diferente de sólidos e fluidos (CAMPELLO, 2016). Isso evidencia o comportamento peculiar desses materiais.

O estudo dos materiais granulares pode ser realizado na escala microscópica (ou local) ou na macroscópica (ou global), a depender do objetivo pretendido. Segundo Cambou, Magoariec e Nguyen (2016), a escala microscópica se refere à escala das partículas e dos contatos entre estas. Nesta escala, as variáveis consideradas e determinadas durante a análise são os vetores de posição e de velocidade das partículas em relação ao seus centros, os vetores de rotação e

velocidade angular das mesmas, a localização dos pontos de contato e os vetores das forças de contato. Já para analisar o material sob a ótica da escala macroscópica, equações constitutivas são empregadas no contexto de um meio contínuo, sendo o tensor das tensões e tensor das deformações determinados a partir das condições de contorno definidas no estudo do problema. Ressalta-se que o tipo de análise a ser aplicado está relacionado ao objetivo do estudo e à escala do problema. Quando a escala do fenômeno físico é grande em comparação ao tamanho das suas partículas, podem-se empregar modelos baseados na mecânica do contínuo. Caso contrário, é preciso considerar o meio como discreto.

Neste trabalho, está-se interessado na escala microscópica e, assim, o material granular será definido como um aglomerado de sólidos discretos, com a particularidade de que há um grande número desses. As interações entre esses sólidos e também com o meio ao seu redor serão representadas por meio de forças, especialmente as de contato físico, considerando dissipação de energia por compressão normal e atrito. O comportamento do material será governado pelo movimento de seus grãos. Este tipo de abordagem é possibilitado pelo emprego de métodos computacionais, sendo neste trabalho adotado o Método dos Elementos Discretos.

O Método dos Elementos Discretos (*Discrete Element Method* - DEM) permite estudar o comportamento de um material granular através do conhecimento do movimento individual de suas partículas. O MED consiste em resolver as Leis de Euler para cada partícula, com o intuito de assim representar o comportamento do material como um todo. A partir da mecânica do contato (aqui o livro clássico de Johnson de 1985 deve ser destacado como de grande contribuição), podem-se determinar as forças de contato entre as partículas decorrentes de seus deslocamentos e deformações localizadas nos pontos de contato.

Na forma clássica do MED, os grãos são tipicamente idealizados como esferas, visando a otimizar o esforço computacional para a realização das simulações. Em contrapartida, há a necessidade de se considerar um modelo de resistência ao movimento rotacional que se apresente capaz de reproduzir um comportamento condizente com o do real grão de uma amostra – que, como se sabe, não é esférico. Caso contrário, a partícula esférica poderá apresentar um movimento de rotação indefinido ou infinito em relação ao seu centro em determinadas situações. Pilhas estáticas de grãos, por exemplo, não conseguem ser representadas apropriadamente

se não houver alguma resistência ao movimento rotacional de suas partículas.

Quando duas partículas entram em contato, elas podem apresentar movimento relativo de rotação. É usual separar essa rotação relativa em duas parcelas ou componentes, quais sejam, o rolamento e a torção relativa. O rolamento corresponde ao movimento angular em torno do eixo paralelo ou tangente ao plano de contato. Já a torção relativa, ou *twisting*, consiste no movimento angular em torno do eixo perpendicular ao plano de contato. Neste trabalho, o termo *twisting* será preferido e adotado para se referir a este segundo tipo de movimento rotacional. A autora reconhece que esta designação não é a ideal, por fazer uso da língua inglesa, mas é preferida por conduzir a uma terminologia mais concisa.

Em geral, a resistência ao movimento rotacional das partículas é representada por algum modelo fenomenológico ou, de forma mais rigorosa, por alguma equação constitutiva. Johnson (1985) apresentou, em seu livro, a base da mecânica do contato. Na visão da autora, destacam-se os trabalhos publicados por Iwashita e Oda (1998), Jiang, Yu e Harris (2005), Belheine et al. (2009), Ai (2010), Jiang, Shen e Wang (2015), Otsubo (2016), Huang et al. (2017) e Campello (2018) que apresentam um modelo de resistência ao rolamento e/ou *twisting*. Ressalta-se que nem todos os modelos propostos na literatura fazem a distinção em relação aos dois movimentos angulares descritos anteriormente, tratando-o como um só e denominando como rolamento. Isso causa uma certa confusão (ou até mesmo inconsistência) nas resistências propostas.

Neste trabalho, a autora propõe um modelo de resistência ao movimento rotacional considerando a separação desses movimentos angulares em suas componentes, de forma a ser mais consistente com a representação física do problema (vide Capítulo 3), e tal que seja possível adotar uma equação constitutiva diferente para cada parcela. Cada parcela pode assim ser tratada com um modelo próprio de resistência, diferentemente de boa parte dos modelos da literatura.

Para a realização do estudo dos materiais granulares via Método dos Elementos Discretos, há a necessidade da geração prévia de uma amostra de partículas. Na literatura, inúmeros métodos para geração de amostras estão disponíveis. Há métodos que determinam a posição inicial de cada partícula por meio de procedimentos puramente geométricos, proporcionando amostras menos densas, e outros que o fazem de forma aleatória com deposição gravitacional como etapa subsequente, propiciando amostras um pouco mais densas. Na literatura, a primeira

contribuição encontrada sobre o assunto foi feita por Bernal (1959), e as seguintes publicações se destacam como relevantes (todas serão detalhadas mais adiante neste trabalho): Lubachesvsky e Stillinger (1990); Feng, Han e Owen (2003); Cui e O'Sullivan (2003); Han, Feng e Owen (2005); Bagi (2005) e Jerier et al. (2009). Deve-se salientar, contudo, que as partículas de uma amostra gerada deverão estar não só contidas no interior de um domínio que possui certo formato e dimensões, como também apresentar tamanhos condizentes com a distribuição granulométrica do material real a ser simulado. Alguns trabalhos buscaram contribuir nessa direção, como por exemplo Fu e Dekelbab (2003) e Dang e Meguid (2010). Alguns programas computacionais comerciais de MED também apresentam a possibilidade de se impor uma curva granulométrica durante o processo de geração de amostras, como por exemplo o PFC3D da Itasca *Consulting Group* e o Rocky DEM da empresa ESSS. Entretanto, essas metodologias não apresentam comportamento plenamente satisfatório para todos os tipos de distribuição granulométrica, como será apresentado mais adiante no Capítulo 4.

Este trabalho propõe uma metodologia de geração de amostras considerando uma curva granulométrica e porosidade impostas. Busca, pois, contribuir, ainda que timidamente, em dois pontos distintos para o aprimoramento da modelagem computacional de materiais granulares com o método dos elementos discretos.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

Este trabalho tem como objetivo geral contribuir para o estudo de materiais granulares secos por meio do emprego de modelos computacionais baseados no método dos elementos discretos, com foco na resistência ao movimento rotacional e nos métodos de geração de amostras de partículas.

1.1.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos são:

- Formulação de um método de geração de amostra de partículas que considere uma curva de distribuição granulométrica fornecida e uma porosidade desejada, e sua implementação computacional na plataforma SGen (programa computacional de geração de partículas desenvolvido no grupo de pesquisa do prof. Eduardo M. B. Campello);
- Formulação de um modelo para resistência ao movimento rotacional considerando a separação entre as parcelas de resistência ao *twisting* e ao rolamento, com respectivas equações constitutivas baseadas em resultados da mecânica do contato e teoria da elasticidade, e sua implementação computacional na plataforma PSY (programa computacional de partículas e elementos discretos desenvolvido no grupo de pesquisa do prof. Eduardo M. B. Campello);
- Validação dos desenvolvimentos empreendidos por meio da comparação dos resultados obtidos nas simulações com soluções analíticas ou numéricas de referência, e resultados correlatos da literatura, sempre que disponíveis;
- Integração com os outros trabalhos de pesquisa do grupo coordenado pelo Prof. Dr. Eduardo M. B. Campello sobre métodos numéricos de partículas e materiais granulares, que podem se beneficiar dos desenvolvimentos empreendidos.

1.2 JUSTIFICATIVA

Como mencionado anteriormente, os materiais granulares estão presentes em inúmeras atividades desenvolvidas pelo homem e em diversas escalas do comprimento, como por exemplo: na deposição de pedras de mão na execução de muros de gabião; na deposição de grãos de argila em camadas impermeabilizantes; em grãos da indústria alimentícia que são armazenados em silos e transportados em

navios graneleiros; em montes de areia ou brita utilizados na construção civil; em aglomerados compactados de grãos finos e alto valor agregado das indústrias química, farmacêutica e microeletrônica, dentre outros. Este vasto campo de aplicações torna relevante a concentração de esforços para o estudo dos materiais granulares.

Para realizar um estudo sobre materiais granulares, pode-se recorrer à simulação através de métodos numéricos, devido ao avanço tecnológico da área bem como das ferramentas de processamento. Como informado anteriormente, a escolha da forma de tratamento do problema como meio contínuo ou discreto é determinada pela escala do mesmo. No caso de meios contínuos, a aplicação de métodos computacionais como Método de Diferenças Finitas e Método dos Elementos Finitos é possível, e segundo Cundall e Hart (1992), é bem-sucedida quando o foco do estudo está voltado para a macro escala do material. Entretanto, neste trabalho, está-se interessado na análise microscópica deste tipo de material, que é possibilitada pela simulação numérica via Método dos Elementos Discretos.

Sob essa ótica, o contato entre duas partículas em meio seco (i.e., com vazios preenchidos apenas por ar) contempla movimentos translacionais e rotacionais. O rolamento e o deslizamento (com eventual aderência) experimentados pelas partículas são os dois principais micro mecanismos locais que controlam a dissipação de energia neste tipo de material, onde o deslizamento provê dissipação de energia por meio de atrito dinâmico e o rolamento, em contrapartida, tende em geral a diminuir tal dissipação (WANG; ALONSO-MARROQUIN; GUO, 2015). Garantir essa dissipação de forma consistente é uma das funções importantes dos modelos de resistência ao movimento rotacional sempre que se busca viabilizar o emprego de partículas com forma de discos (nos casos bidimensionais) e de esferas (nos casos tridimensionais).

Pode-se afirmar que o emprego desses formatos de partículas é frequente em simulações numéricas sobretudo por propiciarem menor esforço computacional, pois a consideração da irregularidade da forma dos grãos em uma simulação numérica de partículas tem alto custo computacional devido à complexidade dos algoritmos correspondentes para cômputo dos contatos (ZHU; NIE; GONG, 2020). Entretanto, ao realizar a simplificação com a adoção do formato de discos ou esferas, seu movimento angular pode só atingir o equilíbrio estático quando são considerados os modelos de resistência ao rolamento (nos casos bidimensionais)

ou de resistência ao movimento rotacional (nos casos tridimensionais) na descrição do contato entre as partículas. Para corroborar esta afirmação, pode-se destacar que segundo Huang et al. (2017), a aplicação de modelos de resistência ao movimento rotacional provê uma melhor representatividade do comportamento dos grãos reais do solo por meio do emprego de esferas, uma vez que proporcionam maior resistência ao cisalhamento e dilatância adequada da amostra estudada via MED. Observa-se, portanto, a importância da consideração desses tipos de modelos para compreensão e representação adequada do comportamento em simulações numéricas dos materiais granulares quando esses têm os seus grãos idealizados como esferas.

Considerando tais informações, esta pesquisa tem por um dos objetivos contribuir na modelagem da cinética rotacional dos materiais granulares, propondo um modelo alternativo de resistência rotacional que considere tanto a resistência ao rolamento quanto ao *twisting*, com base em resultados simples da mecânica do contato e da teoria da elasticidade.

Uma outra etapa importante para a simulação numérica de materiais granulares é a possibilidade de geração de amostras com distribuição granulométrica e porosidade impostas. O comportamento dos materiais granulares é influenciado por sua curva granulométrica e por isso, a geração de partículas com dimensões condizentes com tal característica é relevante.

No caso de solos, por exemplo, uma das possíveis classificações é pautada na granulometria: solos grosseiros e solos finos. Nos solos denominados grosseiros, de acordo com a faixa de dimensões que este material apresentar, tem-se a classificação como bem graduado (grãos com diâmetros que variam dentro de uma faixa de valores extensa) ou mal graduado (dimensões dos grãos com predominância de certo diâmetro). Pode-se dizer que os solos grosseiros bem graduados apresentam grãos com variedade de dimensões e que desempenham melhor comportamento sob a ótica da Engenharia, pois as partículas menores preenchem os vazios deixados entre as maiores, proporcionando um maior entrosamento, que por sua vez gera uma menor compressibilidade e, portanto, maior resistência (PINTO, 2006).

No contexto de materiais granulares com coesão, i.e., não soltos; Nguyen et al. (2019) apresentou que a consideração da curva granulométrica real do *cement-treated base* (CTB, que pode ser considerado como a brita graduada tratada com cimento, BGTC) juntamente com a aplicação de um modelo de contato apropriado foram os responsáveis pela reprodução dos resultados do ensaio de resistência à

flexão obtidos no laboratório com simulação numérica via MED. Esses exemplos demonstram a importância e, ao mesmo tempo, a necessidade de se considerar a curva granulométrica e a porosidade na geração da amostra a ser estudada via métodos dos elementos discretos, para melhor representatividade do material.

Compreendendo a relevância deste assunto, este trabalho também tem por objetivo propor uma metodologia de geração de amostras com curva granulométrica e porosidade impostas.

Os objetivos propostos buscam contribuir, ainda que de maneira modesta, na modelagem computacional dos materiais granulares por meio do método dos elementos discretos.

1.3 METODOLOGIA

Para atingir os objetivos traçados, foi realizada inicialmente uma ampla pesquisa qualitativa e exploratória a respeito do tema para embasamento teórico, com posterior desenvolvimento das formulações pretendidas. As implementações computacionais das mesmas foram efetuadas nas plataformas SGEN e PSY, seguidas de suas validações. O SGen e o PSY são programas de simulação computacional de meios discretos e particulados, e de materiais multifásicos em geral que envolvem partículas, baseado no método dos elementos discretos. Ambos tiveram seu desenvolvimento iniciado no âmbito do projeto FAPESP intitulado *Formulações multiescalas para a modelagem computacional de membranas* (Proc. No. 2012/04009-0, Universidade de São Paulo, USP; Universidade da Califórnia em Berkeley, EUA, 2012-2014), coordenado pelo professor Eduardo M. B. Campello. Desde então, vêm servindo de plataforma para todas as implementações computacionais do respectivo grupo de pesquisa. Os códigos estão escritos em linguagem FORTRAN 95/2003, e incorporam conceitos modernos de programação baseados no paradigma da orientação a objetos, com encapsulamento de dados, polimorfismo, herança e carga de operadores. Essas características permitem a utilização de forma concomitante por diferentes programadores, o que facilita a sua extensão continuada na medida em que novos desenvolvimentos teóricos são conduzidos. Uma interface para visualização gráfica (pré- e pós-processamento) também foi concebida, de modo que os modelos podem ser criados em um ambiente

do tipo CAD e os resultados facilmente visualizados, sendo possível a criação de animações, traçado de gráficos, etc. O programa auxiliar GiD[®] (de uso intenso por parte da comunidade científica de mecânica e física computacionais) é utilizado para esse fim.

Deve-se destacar a dificuldade de validação dos resultados obtidos neste trabalho pela escassez de resultados de referência na literatura (tanto analíticos quanto numéricos). Isso aconteceu tanto para o modelo de resistência ao movimento rotacional quanto para o método de geração de amostras. Para o primeiro, houve dificuldade em validar o modelo em exemplos simples, envolvendo apenas uma ou duas partículas (a literatura praticamente não reporta resultados dessa natureza); já em relação ao segundo, houve dificuldade em validar o método com os poucos trabalhos de referência disponíveis, uma vez que esses revelaram algumas inconsistências na descrição de seus métodos.

As atividades deste trabalho foram realizadas no Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) do PEF/EPUSP, que é dotado de infraestrutura e equipamentos adequados ao desenvolvimento desta pesquisa. Os resultados obtidos com as simulações numéricas foram analisados qualitativa e quantitativamente, e comparados com resultados analíticos ou numéricos da literatura, sempre que disponíveis.

1.4 ESTRUTURA DO TEXTO

A estrutura do trabalho é composta por cinco capítulos.

Apresentou-se neste capítulo 1, a Introdução composta por Objetivos geral e específicos, Justificativa e Metodologia.

No capítulo 2, será apresentada a formulação adotada para o Método dos Elementos Discretos, juntamente com um breve histórico sobre seu desenvolvimento, revisão da literatura, cinemática e dinâmica de uma partícula, de um sistema de partículas, e a solução numérica para as equações oriundas.

No capítulo 3, faz-se a apresentação da formulação da resistência ao movimento rotacional proposta e sua validação por meio de exemplos numéricos.

O capítulo 4 é composto pela apresentação de um breve histórico dos principais métodos de geração de amostras propostos pela comunidade científica,

pela descrição da metodologia de geração de amostras com curva granulométrica imposta formulada e implementada neste trabalho, e por exemplos numéricos de validação.

Já no capítulo 5, são apresentadas as conclusões finais do trabalho com algumas breves propostas para trabalhos futuros.

2 UMA FORMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

A simulação de um material granular como uma amostra composta por partículas rígidas empregando Método dos Elementos Discretos (MED ou, *Discrete Element Method - DEM*) utiliza como base a formulação da dinâmica de um sistema de partículas. Destaca-se que na aplicação do método segundo a formulação adotada neste capítulo, a sobreposição de pontos na região de contato pode ocorrer e um modelo reológico é empregado no ponto de contato com o intuito de calcular as forças geradas por este contato.

O MED não deve ser considerado propriamente um “método” por não possuir um conjunto de hipóteses, equações e procedimentos que lhe sejam próprios ou particulares, como possui, por exemplo, o método dos elementos finitos. O método dos elementos discretos deve ser considerado um *modelo*, com o objetivo de representar e estudar os meios discretos, propondo-se a resolver de forma numérica as equações diferenciais da dinâmica dos sólidos rígidos para sistemas constituídos por um enorme número desses sólidos. Essas equações são complementadas por modelos fenomenológicos (por vezes criados estritamente para este fim) com o intuito de caracterizar as diversas forças que representam as interações entre eles. (CAMPELLO, 2016). Ao longo deste texto, os sólidos rígidos serão chamados de partículas ou elementos discretos, pois uma das hipóteses considera que estes dois podem ser admitidos como sólidos rígidos.

O Método dos Elementos Discretos, neste trabalho, será subdividido em quatro etapas para sua apresentação neste texto, porém ressalta-se que esta não é a única subdivisão possível. A primeira etapa consiste na escolha da geometria da partícula, onde as geometrias mais utilizadas são os discos para casos bidimensionais e as esferas nos estudos tridimensionais. Isto é consequência de se ter como objetivo a redução dos custos computacionais (tal que permita a simulação de sistemas com um grande número de partículas), a facilidade de identificação dos contatos entre as partículas e o cálculo das forças de contato.

A segunda etapa consiste na geração de uma amostra composta por partículas. A comunidade científica desenvolveu uma enorme gama de metodologias para geração de amostras. Este trabalho tem por um dos objetivos formular e implementar um método de geração de amostra de partículas que considere uma

dada curva de distribuição granulométrica. Algumas metodologias serão apresentadas brevemente no Capítulo 4.

A terceira etapa é caracterizada pela escolha do tipo de modelo de contato. Há diversos modelos de contato na literatura que podem ser empregados. Os modelos de elementos discretos são classificados em *soft sphere* ou *hard sphere*. No caso da consideração de *soft sphere*, sobreposições das partículas são permitidas e interpretadas como deformações que ocorrem no contato entre as partículas. Já no caso da consideração de *hard sphere*, a sobreposição de partículas não é permitida. Já a quarta etapa consiste na solução das equações do movimento através do emprego de um método numérico de integração no tempo.

A Teoria da Elasticidade pode ser aplicada no contato entre duas esferas elásticas e gerará uma resposta (linear ou não) entre força e deformação no ponto de contato. Esta relação constitutiva entre força e deslocamento pode ser resolvida, por exemplo, a partir da teoria de contato de Hertz (uma breve apresentação das equações é feita no item 2.3).

A seguir, será apresentado neste capítulo um breve histórico sobre o Método dos Elementos Discretos e posteriormente, serão expostos os conceitos e a formulação da dinâmica de um sistema de partículas, conforme adotado neste trabalho.

2.1 BREVE HISTÓRICO

O estudo dos materiais granulares pode ser considerado relativamente recente e pertencente à era moderna ao considerar trabalhos como os realizados por C.A. Coulomb (1736-1806), M. Faraday (1791-1867), W.J.M. Rankine (1820-1872), O. Reynolds (1842-1912), Lord Rayleigh (1842-1919) e K. Terzaghi (1883-1963). Pode-se destacar que a primeira obra composta por observações sobre a física dos materiais granulares foi publicada apenas em meados do século XX. O livro *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes* de R.A. Bagnold (1896-1990) é considerado um clássico nesta área e inaugura a era contemporânea desse campo da mecânica (CAMPELLO, 2016). Duran (1999) apresenta a física para materiais granulares em seu livro *Sands, Powders, and Grains*. Neste, o autor mostra a interação entre uma simples partícula e o meio ao seu redor como também a interação entre partículas,

debate sobre a mistura e segregação de materiais heterogêneos e faz uma introdução aos modelos numéricos. Ressalta-se que o estudo pode ser desenvolvido por meio do emprego de experimentos físicos e/ou numéricos. No caso dos experimentos numéricos, tem-se a opção de utilizar o MED, por exemplo. Considera-se este método a opção mais adequada tendo como foco os propósitos deste trabalho. Assim, a seguir, serão elencadas algumas das principais pesquisas sobre o estudo dos materiais granulares com o emprego do Método dos Elementos Discretos.

Alder e Wainwright, em 1957, realizaram uma abordagem discreta de sistemas particulados através do Método da Dinâmica Molecular com o intuito de estudar o comportamento macroscópico de partículas.

Em 1979, Cundall e Strack publicaram sobre uma metodologia e análise numérica de amostras de partículas. Este trabalho pode ser considerado como o “nascimento” do MED. Os autores retrataram com detalhes o modelo proposto por Cundall em 1971, dando enfoque a representação das interações de contato e atrito entre partículas por meio de forças. Segundo Cintra et al. (2006), este método é geralmente empregado na análise de materiais granulares e rochosos. Porém, os mesmos autores afirmam que a aplicação para representar materiais sólidos e estudar problema de fluxo tem se tornado comum. Este fato se deve a ascensão da capacidade de processamento de dados originada dos avanços da tecnologia da computação.

Em 1992, Thornton simulou exemplos de deposição de partículas empregando o MED. Onde considerou esferas elásticas como partículas, forças de campo gravitacional e teoria da mecânica do contato na simulação computacional.

Em 2006, Cintra et al. estudaram o comportamento mecânico de um duto enterrado em uma vala, na qual o duto era submetido ao peso próprio do aterro de solo que o recobre e carregamentos externos estavam aplicados sobre a superfície. Também foi estudada a influência da largura da vala em relação à deformação do duto. Tanto o solo ao redor do duto como o próprio duto foram discretizados com partículas, porém no caso do duto estas são solidarizadas entre si por elementos lineares viscoelásticos para preservar sua forma geométrica.

Zhu et al. (2007) apresentaram um pequeno histórico do número de publicações realizadas e revisaram conceitos e formulações que envolvem o Método dos Elementos Discretos, onde abrangeu os modelos para interação entre partículas, forças de interação entre partícula e fluido, acoplamento entre dinâmica dos fluidos

computacional e método dos elementos discretos.

O'Sullivan (2011) publicou sobre o uso do Método dos Elementos Discretos na Geotecnia com o objetivo de apresentação de uma introdução sobre o método, visão geral a respeito da evolução do seu uso e suas aplicações objetivando guiar pesquisadores em seus trabalhos. A autora destaca o crescimento vertiginoso do número de publicações de artigos sobre o assunto na área correlata a partir de 1996 (cerca de um aumento de, aproximadamente, 900% em catorze anos).

Campello (2016) apresentou um modelo computacional para o estudo de materiais granulares secos e alguns exemplos de aplicação com vistas à ilustração da potencialidade da metodologia desenvolvida pelo autor. Em Campello (2018), a formulação foi apresentada contemplando um modelo de resistência ao rolamento mais consistente. A autora destaca que a formulação a ser apresentada neste capítulo e adotada subsequentemente nesta tese é baseada nestes dois últimos trabalhos citados.

2.2 CINEMÁTICA E DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA

Este item apresenta a descrição do movimento de uma partícula individual no espaço tridimensional do tipo Lagrangiana generalizada e as forças envolvidas. Destaca-se que a configuração de referência nem sempre será coincidente com a configuração inicial, motivo pelo qual a descrição do movimento é considerada deste tipo.

Considere que a partícula a ser estudada (Figura 1) é esférica, apresenta um raio r e massa específica ρ conhecidos. O sistema de referência fixo apresenta sua origem em O , uma base ortonormal e_1, e_2, e_3 e é dado por O, e_1, e_2, e_3 . Este sistema de referência fixo pode ser chamado de sistema global. Já o sistema de referência móvel vinculado à partícula, ou o denominado sistema local da partícula, tem origem no centro C da partícula, possui uma base ortonormal e_1^l, e_2^l, e_3^l e é dado por C, e_1^l, e_2^l, e_3^l .

O observador contém o sistema global e x_1, x_2, x_3 são as coordenadas em cada uma das direções deste sistema. Na escala do tempo, o instante t_R

corresponde ao instante que a partícula ocupa uma determinada região no espaço denominada de configuração de referência. Já t_0 é o instante correspondente à configuração inicial e t_f corresponde à configuração final, sendo que $t_0 \leq t_R < t_f$. No caso de um instante t posterior à t_R , $t_R < t \leq t_f$, a partícula ocupa uma região no espaço chamada de configuração atual.

Figura 1 - Cinemática de uma partícula

Fonte: Produção da própria autora.

As grandezas na configuração de referência são apresentadas com a notação $\cdot^r$. A Figura 1 apresenta vetores da cinemática de uma partícula na configuração de referência e na configuração atual. Define-se o vetor x_C^r como o vetor posição do centro da partícula e α^r como o vetor rotação de Rodrigues da partícula na configuração de referência. O vetor rotação de Rodrigues α^r da partícula é responsável por descrever a orientação espacial da partícula em relação à configuração inicial. Destaca-se que a rotação entre duas configurações é dada pelo vetor rotação incremental de Rodrigues, α^Δ , e a rotação total em relação a configuração inicial é dada por uma composição entre α^r e α^Δ . A determinação do

vetor rotação total α_{total} é realizada através da equação apresentada a seguir resultante da parametrização utilizando o chamado vetor de rotação de Rodrigues:

$$\alpha_{total} = \frac{4}{4 - \alpha^r \cdot \alpha^\Delta} \left(\alpha^r + \alpha^\Delta - \frac{1}{2} \alpha^r \times \alpha^\Delta \right). \quad (1)$$

Pode-se definir o vetor posição x^r de um ponto material genérico da partícula na configuração de referência da seguinte forma:

$$x^r = x_C^r + r^r, \quad (2)$$

onde r^r é o vetor que liga o centro C da partícula ao ponto genérico. Já o vetor posição x desse mesmo ponto genérico da partícula na configuração atual é dada por:

$$x = x_C + r, \quad (3)$$

onde x_C é o vetor posição do centro da partícula na configuração atual e r é o vetor que liga o centro C da partícula ao ponto genérico nesta configuração.

O vetor r pode ser escrito em função do tensor rotação Q_Δ , como é apresentado a seguir:

$$r = Q_\Delta r^r. \quad (4)$$

O tensor rotação Q_Δ descreve a rotação da partícula entre as duas configurações e pode ser determinado da seguinte forma:

$$Q_\Delta = I + \frac{4}{4 + \alpha_\Delta^2} \left(A_\Delta + \frac{1}{2} A_\Delta^2 \right), \quad (5)$$

onde α_Δ é igual ao módulo do vetor α^Δ , isto é, $\|\alpha^\Delta\|$. O tensor A_Δ é o tensor antissimétrico de α^Δ , ou seja, $A_\Delta = \text{Skew } \alpha^\Delta$.

O vetor velocidade v do ponto genérico na configuração atual é determinada através da derivada no tempo do vetor posição x deste mesmo ponto:

$$v = \dot{x} = \dot{x}_C + \dot{r}, \quad (6)$$

sendo $\dot{x}_C$, a derivada do vetor posição do centro da partícula em relação ao tempo e $\dot{r}$, a derivada do vetor posição que liga o centro C da partícula ao ponto genérico em relação ao tempo. Ressalta-se que o vetor $\dot{x}_C$ é o vetor velocidade do centro da partícula, denominado v_C . A partir da Equação 4, pode-se definir $\dot{r}$ igual a $\dot{Q}_\Delta Q_\Delta^T r$.

Sendo $\dot{\mathbf{Q}}_{\Delta}\mathbf{Q}_{\Delta}^T$, o tensor velocidade angular da partícula $\mathbf{\Omega}$, pode-se reescrever a equação anterior da seguinte forma:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_C + \mathbf{\Omega}\mathbf{r}. \quad (7)$$

O tensor velocidade angular da partícula $\mathbf{\Omega}$ possui um vetor axial $\boldsymbol{\omega}$ por ser um tensor antissimétrico. Este vetor axial $\boldsymbol{\omega}$ é denominado vetor velocidade angular da partícula e pode ser escrito, a partir da Equação 5, da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\omega} = \text{axial } \dot{\mathbf{Q}}_{\Delta}\mathbf{Q}_{\Delta}^T = \frac{4}{4 + \alpha_{\Delta}^2} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} \mathbf{A}_{\Delta} \right) \dot{\alpha}^{\Delta} = \boldsymbol{\Xi}_{\Delta} \dot{\alpha}^{\Delta}. \quad (8)$$

Após esta definição, a Equação 7 pode ser escrita como:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_C + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (9)$$

A aceleração do ponto genérico na configuração atual, vetor $\mathbf{a}$, é dada pela derivada da velocidade do mesmo ponto genérico em relação ao tempo:

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}}_C + \dot{\mathbf{\Omega}}\mathbf{r} + \mathbf{\Omega}\dot{\mathbf{r}}, \quad (10)$$

onde $\dot{\mathbf{v}}_C$ é a aceleração do centro da partícula ($\mathbf{a}_C$), $\mathbf{\Omega}$ é o tensor velocidade angular da partícula e $\dot{\mathbf{\Omega}}$ é denominado o tensor aceleração angular da partícula. Novamente, utilizando a Equação 4, pode-se escrever o vetor aceleração da seguinte forma:

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_C + \dot{\mathbf{\Omega}}\mathbf{r} + \mathbf{\Omega}^2\mathbf{r}. \quad (11)$$

Assim como o tensor velocidade angular $\mathbf{\Omega}$ da partícula, o tensor $\dot{\mathbf{\Omega}}$ também é antissimétrico e possui um vetor axial $\dot{\boldsymbol{\omega}} = \text{axial } \dot{\mathbf{\Omega}}$. Este vetor axial é denominado vetor aceleração angular da partícula. Desta forma, a equação anterior pode ser reescrita como:

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_C + \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (12)$$

O volume da partícula é definido como V e sua massa é m . Sabe-se que ambos os parâmetros são constantes no tempo, pois há a hipótese de a partícula ser um sólido rígido.

O momento linear da partícula na configuração atual, $\boldsymbol{\lambda}$, é definido como:

$$\boldsymbol{\lambda} = \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_V \rho \mathbf{v}_C dV + \int_V \rho \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} dV. \quad (13)$$

Ressalta-se que a segunda parcela do lado direito da igualdade é correspondente a um vetor nulo, pois o vetor $\mathbf{r}$ é definido em relação ao centro da partícula que coincide com o seu centro de massa. Lembra-se que a massa m

consiste em:

$$m = \int_V \rho dV. \quad (14)$$

Por consequência a equação 13 pode ser novamente escrita da seguinte forma:

$$\lambda = mv_C. \quad (15)$$

O momento angular μ_C da partícula em relação ao seu centro C na configuração atual é definido como:

$$\mu_C = \int_V \mathbf{x} \times \rho \mathbf{v} dV = \mathbf{x}_C \times \int_V \rho \mathbf{v}_C + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} dV + \int_V \mathbf{r} \times \rho \mathbf{v}_C + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} dV \quad (16)$$

A expressão do momento angular pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\mu_C = \mathbf{x}_C \times m\mathbf{v}_C + \mathbf{J}_C \boldsymbol{\omega}, \quad (17)$$

onde $\mathbf{J}_C$ é o tensor de inércia da partícula em relação ao seu centro C . Por este trabalho tratar apenas de partículas esféricas, o tensor de inércia é constante no tempo e pode ser definido como:

$$\mathbf{J}_C = j\mathbf{I}, \quad (18)$$

onde j é igual a $2mr^2/5$.

As derivadas no tempo dos momentos linear e angular podem ser escritas da seguinte forma:

$$\dot{\lambda} = m\mathbf{a}_C \text{ e} \quad (19)$$

$$\dot{\mu} = j\dot{\boldsymbol{\omega}}. \quad (20)$$

Pode-se considerar que as forças e as resultantes das forças que atuam sobre a partícula na configuração atual podem ser agrupadas em um vetor $\mathbf{f}^{tot}$ denominado vetor das forças totais onde o centro da partícula é o ponto de atuação. Já os momentos e as resultantes dos momentos que atuam sobre a partícula em relação ao seu centro na configuração atual também podem ser agrupados em um vetor $\mathbf{m}_C^{tot}$ que recebe o nome de vetor momentos totais e também apresenta o centro da partícula como ponto de atuação.

As relações apresentadas a seguir deverão ser satisfeitas na configuração atual segundo as Leis de Euler:

$$\dot{\lambda} = \mathbf{f}^{tot} \text{ e } \dot{\mu}_C = \mathbf{m}_C^{tot}. \quad (21)$$

A partir da Equação 19 e da Equação 20, as seguintes equações do movimento da dinâmica da partícula podem ser escritas da seguinte forma:

$$m\mathbf{a}_C = \mathbf{f}^{tot} \text{ e } j\dot{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{m}_C^{tot}. \quad (22)$$

2.3 DINÂMICA DE UM SISTEMA DE PARTÍCULAS

A formulação e conceitos apresentados a seguir estão baseados em Campello e Zohdi (2014), Campello (2016), Cundall e Strack (1979), Zhu et al. (2007), Zohdi (2012), Wassgren e Sarkar (2008).

As partículas no caso geral desenvolvem um movimento translacional e rotacional. Durante esse movimento, as partículas podem interagir com o ambiente ao redor, por exemplo, com o fluido que as envolve ou com partículas vizinhas ou obstáculos e barreiras eventualmente existentes no ambiente em que se movem, como por exemplo paredes rígidas e contenções.

Destaca-se que o movimento da partícula é influenciado não somente pelas forças e torques decorrentes da interação com outras partículas em contato, ou entre a partícula e o fluido que a envolve, mas também é afetado pelas partículas distantes da própria partícula em estudo, pelas interações de campo (forças que dependem da distância entre as partículas, como por exemplo, as forças eletrostáticas). Portanto, a complexidade da consideração dessas influências afasta a tentativa de resolver o movimento da partícula de forma analítica.

A formulação apresentada a seguir aborda o estudo da interação entre partículas ou entre partículas e paredes. A interação com fluido será realizada de uma forma muito simplificada através da consideração da força de arrasto.

As hipóteses adotadas para a formulação apresentada a seguir são: as partículas são tratadas como corpos rígidos; contatos entre partículas ocorrem em pequenas superfícies (em um ponto); a sobreposição entre partículas é permitida e considerada pequena se comparada ao tamanho das mesmas; deformações permanentes devido contato e/ou colisão são consideradas pequenas e ignoradas; partículas são esferas no estudo tridimensional ou discos no estudo bidimensional, e se mantém com raio constante em todos os instantes.

Para apresentar a formulação de um sistema composto por partículas, alterações na notação devem ser realizadas em relação ao item apresentado

anteriormente. O índice alfabético (utilizado para designar o ponto central C) deverá ser substituído por um índice numérico que fará referência ao número da partícula. Portanto, x_i $i = 1, 2, 3, \dots, N_p$ passa a ser o vetor posição do centro da partícula i na configuração atual. Já os vetores v_i e a_i serão os vetores velocidade e aceleração do seu centro na configuração atual, respectivamente. O vetor rotação incremental α_i^Δ , o vetor velocidade angular ω_i e vetor aceleração angular $\dot{\omega}_i$ são vetores em relação à partícula i na configuração atual.

O sistema de partículas esféricas é composto por N_p partículas. Cada partícula apresenta um raio constante r_i , uma massa específica ρ_i e uma carga elétrica q_i $i = 1, 2, 3, \dots, N_p$ conhecidos. Já o centro de cada partícula é representado por C_i . Será admitido para esta formulação que o meio é fluido e inerte. Além disso, adota-se que este meio apresenta densidade e viscosidade conhecidas. Na Figura 2 é possível observar um esquema representativo de um sistema de inúmeras partículas, com ampliação das vizinhanças da partícula i e dela própria. Ressalta-se que os vetores posição, rotação, velocidade angular e aceleração não foram representados para simplificação da figura.

Figura 2 – Esquema do sistema composto por várias partículas

Fonte: Produção da própria autora.

O vetor de força total f_i^{tot} é constituído pela soma dos seguintes vetores

$$\mathbf{f}_i^{tot} = \mathbf{f}_i^{ce} + \mathbf{f}_i^{arr} + \mathbf{f}_i^{at-rep} + \mathbf{f}_i^{ad} + \mathbf{f}_i^{con} + \mathbf{f}_i^{atr}, \quad (23)$$

onde $\mathbf{f}_i^{ce}$ é decorrente das ações de campos externos exercidos sobre a partícula i , $\mathbf{f}_i^{arr}$ é resultado da força de arrasto exercida pelo meio sobre a partícula i , $\mathbf{f}_i^{at-rep}$ é a resultante das forças de atração e repulsão que atuam sobre a partícula i , $\mathbf{f}_i^{ad}$ é consequência das forças de adesão sobre a partícula i , $\mathbf{f}_i^{con}$ é resultado das forças normais de contato mecânico sobre a partícula i e, por último, $\mathbf{f}_i^{atr}$ é decorrente das forças de atrito sobre a partícula i .

As forças de campos externos correspondem às forças de campos gravitacionais, elétricos e magnéticos exteriores ao sistema de partículas a ser estudado e estão presentes no local que contém o sistema. Como o foco deste trabalho é o estudo de materiais granulares secos, não há a necessidade de considerar as forças de campos elétricos e magnéticos externos. O vetor $\mathbf{f}_i^{ce}$, resultante das forças de campo gravitacional externo que atuam sobre a partícula i , é dado por

$$\mathbf{f}_i^{ce} = m_i \mathbf{g}, \quad (24)$$

onde m_i é a massa da partícula i (esta massa é obtida através da massa específica conhecida) e $\mathbf{g}$ é o vetor aceleração da gravidade.

A força de arrasto $\mathbf{f}_i^{arr}$ exercida pelo meio em relação a partícula i decorre da densidade e da viscosidade do meio, ou seja, são originadas a partir do atrito e da pressão que o meio fluido exerce sobre a partícula i quando essa se movimenta em relação a ele. Neste trabalho, as forças de arrasto são consideradas desprezíveis por se tratar de pilhas estáticas de material granular. Ou seja, o material não está apresentando grandes movimentos como por exemplo em jatos de partículas ou escoamentos a alta velocidade. Esta força pode ser apresentada através de uma expressão considerada clássica e devida a Lord Rayleigh, conhecida também como a equação do arrasto:

$$\mathbf{f}_i^{arr} = -\frac{1}{2} \rho_F C_A A_i \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_F\| \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_F, \quad (25)$$

onde ρ_F é a densidade do fluido, C_A é o coeficiente de arrasto, A_i é a “área frontal” da partícula em relação ao escoamento (para o estudo a ser realizado com partículas

esféricas, $A_i = \pi r_i^2$), $\mathbf{v}_i$ é o vetor velocidade da partícula i e $\mathbf{v}_F$ é o vetor velocidade local do fluido (velocidade média do escoamento na região que a partícula i se encontra). Destaca-se que o coeficiente de arrasto C_A depende da forma geométrica da partícula e das características do escoamento. Será adotada a hipótese de que se trata de fluidos incompressíveis (velocidade relativa entre a partícula e o fluido é inferior à velocidade de propagação do som no fluido), pois essa hipótese foi verificada em um grande número de fenômenos que envolvem o movimento de materiais granulares. A partir desta consideração, segundo Biringen e Chow (2011 apud CAMPELLO, 2016), pode-se determinar o coeficiente de arrasto C_A em função do número de Reynolds, R_e , conforme apresentado a seguir:

$$\text{para } 0 < R_e \leq 1, \quad C_A = 24 R_e^{-1}; \quad (26)$$

$$\text{para } 1 < R_e \leq 400, \quad C_A = 24 R_e^{-0,646}; \quad (27)$$

$$\text{para } 400 < R_e \leq 3 \times 10^5, \quad C_A = 0,50; \quad (28)$$

$$\text{para } 3 \times 10^5 < R_e \leq 2 \times 10^6, \quad C_A = 0,000366 R_e^{0,4275}; \quad (29)$$

$$\text{para } R_e > 2 \times 10^6, \quad C_A = 0,18; \quad (30)$$

onde o número de Reynolds R_e na região que a partícula se encontra. Este é calculado da seguinte forma:

$$R_e = \frac{2r_i \rho_F \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_F\|}{\eta_F}, \quad (31)$$

Sendo que η_F é a viscosidade do fluido.

O vetor $\mathbf{f}_i^{at-rep}$ é resultado das forças de atração e repulsão que atuam sobre a partícula i . As forças de atração e repulsão podem ser definidas como forças que atuam entre duas partículas que geralmente não estão em contato físico entre si. A natureza destas forças pode ser nuclear, eletromagnética e gravitacional. Esta formulação tratará apenas de forças de atração e repulsão de natureza eletromagnética, pois não se trata de um estudo com natureza nuclear e as partículas não apresentam massas e dimensões relativamente grandes para se considerar um estudo com natureza gravitacional, como é o caso de asteroides e corpos celestes. Portanto, as forças de atração e repulsão de natureza eletromagnética serão

nomeadas apenas por forças de atração e repulsão.

A origem das forças de atração e repulsão está nas interações que acontecem entre as nuvens de elétrons dos átomos de dois corpos quando estes são colocados a uma distância considerada suficientemente próxima entre si. Para a determinação destas forças é necessária a determinação dos campos elétrico e magnético que são originados pela nuvem de elétrons, ou seja, é necessária a solução das equações de Schrödinger e de Maxwell na escala atômica dos corpos. Esta solução é considerada muito complexa mesmo que seja realizada computacionalmente. Expressões semiempíricas podem ser empregadas para a determinação do vetor $\mathbf{f}_i^{at-rep}$ que atua na partícula i devido à atração e repulsão pela partícula j . Assim, o vetor $\mathbf{f}_i^{at-rep}$ pode ser definido como:

$$\mathbf{f}_{ij}^{at-rep} = k_{ij}^{at} \left(\frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^{\alpha_{at}} \mathbf{n}_{ij} - k_{ij}^{rep} \left(\frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^{\alpha_{rep}} \mathbf{n}_{ij}, \quad (32)$$

onde k_{ij}^{at} , α_{at} , k_{ij}^{rep} e α_{rep} são parâmetros materiais a serem determinados de forma empírica com valores iguais ou superiores a zero. Já $\mathbf{n}_{ij}$ é o vetor unitário que aponta do centro da partícula i para o centro da partícula j e é calculado da seguinte forma:

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|}. \quad (33)$$

Em relação a Equação 32, destaca-se que a primeira parcela do lado direito da igualdade se trata da parcela atrativa da força e a segunda parcela representa a parcela repulsiva da força em questão. Observa-se que a força que atua na partícula j é dada por $\mathbf{f}_{ji}^{at-rep} = -\mathbf{f}_{ij}^{at-rep}$.

A resultante $\mathbf{f}_i^{at-rep}$ das forças de atração e repulsão que atuam sobre uma partícula i é consequência da interação da partícula i com todas as demais partículas do sistema e pode ser determinada conforme a seguir:

$$\mathbf{f}_i^{at-rep} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_p} \mathbf{f}_{ij}^{at-rep}. \quad (34)$$

A adesão entre duas partículas pode ocorrer quando essas estão em contato físico ou a uma distância suficientemente próxima entre si. Esta adesão pode ser induzida por fatores internos ou externos. No caso de fatores internos, trata-se de

forças atrativas e repulsivas de natureza eletromagnética e podem ter sua parcela atrativa significativamente aumentada devido à proximidade ou ao próprio contato entre as partículas. Se ocorrer o contato, as deformações terão suas áreas de contato aumentadas, também terão por consequência um maior número de moléculas expostas e, assim, poderão gerar o aumento das forças atrativas de van der Waals. Caso as partículas encontrem um equilíbrio mecânico em que fiquem aderidas, o acréscimo das forças de atração é nomeado forças de adesão. Já no caso de fatores externos, a adesão pode ser gerada pela atuação de elementos ligantes que estão presentes no meio fluido em que as partículas também se encontram ou podem estar aplicados sobre as superfícies das partículas. Este último poderá gerar forças atrativas ao ocorrer o contato entre partículas ou quando a distância entre estas for suficientemente pequena e formar eventualmente uma ligação. Os meios geradores deste segundo caso são: reações químicas, efeitos de temperatura, combinação dos dois meios anteriormente citados e efeito da capilaridade. Esta força de ligação também recebe o nome de força de adesão.

Campello (2016) adotou um modelo semiempírico para caracterização das forças de adesão induzidas pelo contato mecânico e para as geradas por elementos ligantes. Este modelo consiste na consideração da deformação local ocorrida entre as superfícies das partículas e na rigidez da ligação. Para tal, define-se δ_{ij} como uma distância entre as superfícies das partículas envolvidas (vide Figura 3). Considerando as partículas i e j , o cálculo do comprimento é definido através da seguinte equação:

$$\delta_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - r_i - r_j , \quad (35)$$

onde $\mathbf{x}_i$ é o vetor posição do centro da partícula i , $\mathbf{x}_j$ é o vetor posição do centro da partícula j , r_i é o raio da partícula i e r_j é o raio da partícula j .

Em relação ao encurtamento, duas situações são possíveis e estão ilustradas na Figura 3. A situação 1 apresentada se refere ao caso de δ_{ij} ser positivo, onde se trata de um afastamento entre as superfícies das duas partículas. Já a situação 2 retratada na figura citada, tem-se o caso de δ_{ij} ser negativo. Este cenário é caracterizado por uma interpenetração na região de contato, ou seja, há a ocorrência de uma sobreposição das partículas i e j envolvidas.

Figura 3 – Esquema da relação de proximidade entre partículas

Situação 1: Partículas afastadas entre si $\delta_{ij} > 0$

Situação 2: Partículas em contato entre si $\delta_{ij} < 0$

Fonte: Produção da própria autora.

Uma medida de deformação local entre as partículas ε_{ij} é dado por:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{|\delta_{ij}|}{r_i + r_j}, \quad (36)$$

sendo que esta medida de deformação local só é válida quando δ_{ij} for negativo (isto é, ocorrência do caso de interpenetração). Ao considerar que ε_c é um valor crítico de deformação e é conhecido, a força de adesão entre as partículas i e j é definida como:

$$\mathbf{f}_{ij}^{ad} = k_{ij}^{ad} \varepsilon_{ij}^\beta \mathbf{n}_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} \geq \varepsilon_c, \quad (37)$$

sendo que k_{ij}^{ad} é um parâmetro relacionado à rigidez de adesão, β é um parâmetro do material a ser ajustado de forma empírica e $\mathbf{n}_{ij}$ é a direção central entre as partículas no sentido da partícula i para a partícula j (verificar Equação 33). A força de adesão que atua na partícula j é dada por $\mathbf{f}_{ji}^{ad} = -\mathbf{f}_{ij}^{ad}$. Já a resultante das forças de adesão que atuam sobre a partícula i é consequência da sua adesão a n_i^{ad} outras partículas do sistema e é expressa da seguinte forma:

$$\mathbf{f}_i^{ad} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{ad}} \mathbf{f}_{ij}^{ad}. \quad (38)$$

A elasticidade e a troca de momentos linear e angular entre partículas quando estas se tocam ou colidem geram as forças normais de contato $\mathbf{f}_{ij}^{con}$. No caso de o contato ou colisão ser perfeitamente elástico, há a troca de quantidade de movimento entre as partículas, havendo uma conservação da energia do sistema. Caso o contato ou colisão seja parcialmente elástico, parte dos momentos é perdida e uma parcela de energia cinética é dissipada.

A seguir, serão apresentadas de forma mais detalhada as forças de contato e forças de atrito pelo seu grau de importância ao trabalho.

2.3.1 Força de contato

As forças de contato entre duas partículas não estão aplicadas em um ponto único, mas em uma área finita que corresponde à região da superfície das partículas que sofreu deformação.

Este tipo de força pode ser expresso por dois modelos: *soft-sphere model* ou *hard-sphere model*. A adoção de um dos modelos dependerá do tipo de contato/colisão que se espera entre as partículas. O *soft-sphere model* apresenta um modelo baseado em forças de contato que serão função da magnitude da deformação (interpenetração) das partículas em contato. Ou seja, a força decorrente do contato entre partículas deverá ser calculada através do emprego de uma equação constitutiva. Já o *hard-sphere model* é um modelo adequado a problemas que envolvem contatos entre partículas extremamente rígidas. Este tipo de problema é

caracterizado pela colisão entre as partículas em que o contato é tratado como um evento instantâneo, isto é, sem duração. Ou seja, a colisão pode ser considerada um evento instantâneo.

O *soft-sphere model* será adotado neste trabalho e juntamente com a consideração de que deformações permanentes originadas durante contato/colisão serão ignoradas. Assim, esta hipótese permite o emprego da Teoria do Contato de Hertz.

A primeira análise consistente de tensões decorrentes do contato entre dois corpos elásticos foi realizada por Hertz em 1882, onde as hipóteses realizadas para a concepção da Teoria do Contato de Hertz são: superfície contínua e deformável, deformações de pequena magnitude, área de contato entre partículas ou entre a partícula e uma parede é muito inferior a magnitude da(s) partícula(s), e a não ocorrência de atrito. A área de contato apresentar formato circular e a tensão de contato ocorrer com distribuição axissimétrica são outras considerações realizadas por Hertz (JOHNSON, 1985).

Sendo assim, baseado na Teoria de Contato de Hertz, as seguintes equações podem ser escritas:

$$\mathbf{f}_i^{con} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_c} \mathbf{f}_{ij}^{con} \mathbf{e} \quad (39)$$

$$\mathbf{f}_{ij}^{con} = -\frac{4}{3}\sqrt{r^*}E^*|\delta_{ij}|^{3/2}\mathbf{n}_{ij} - d^{con}\dot{\delta}_{ij}\mathbf{n}_{ij}, \quad (40)$$

onde $\mathbf{f}_i^{con}$ é o vetor resultante das forças normais de contato que atuam sobre a partícula i , $\mathbf{f}_{ij}^{con}$ é o vetor força normal de contato que atua sobre a partícula i devido ao contato com a partícula j , N_c é o número de partículas que estão em contato com a partícula i . O raio efetivo r^* e módulo de elasticidade efetivo E^* do contato entre as partículas podem ser definidos como

$$r^* = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \mathbf{e} \quad (41)$$

$$E^* = \frac{E_i E_j}{E_j (1 - \nu_i^2) + E_i (1 - \nu_j^2)}, \quad (42)$$

onde E_i , E_j e ν_i , ν_j são módulo de elasticidade e coeficiente de Poisson das

partículas i e j , respectivamente. Novamente, será empregado o conceito de encurtamento δ_{ij} dependente de seus raios no ponto de contato e vetores de posição (apresentado na Equação 35). Este está reapresentado na Figura 4, a seguir, juntamente com a força de contato. Tem-se $\dot{\delta}_{ij}$ como a taxa de variação do encurtamento em relação ao tempo. Destaca-se que a Equação 40 apresenta um modelo baseado na Teoria de Hertz com a adição de uma força de amortecimento (modelo constitutivo viscoelástico – vide Figura 4), onde se tem d_{ij}^{con} , o parâmetro de amortecimento, que possui a função de introduzir o conceito de dissipação de energia na direção central durante o contato.

Figura 4 – Contato/colisão entre partículas

Fonte Produção do próprio autor.

Com o intuito de adotar um valor para o parâmetro de amortecimento e tendo como partida as considerações realizadas por Wellmann e Wriggers (2012), Campello (2016) propõe uma analogia entre o movimento das partículas na direção central e a vibração livre de um sistema massa-mola-amortecedor de um grau de liberdade nessa direção. Esse sistema possui uma massa m^* , mola de rigidez k_{ij}^{con} e um amortecedor que apresenta coeficiente d_{ij}^{con} .

Ao aplicar a Segunda Lei de Newton, estabelece-se que a aceleração

imposta ao movimento deve ser igual ao quociente entre força resultante e a massa do sistema em questão (MAZZILLI et al., 2016). Considerando que o movimento do sistema é descrito por $\delta_{ij}(t)$, pode-se escrever que:

$$m^* \ddot{\delta}_{ij}(t) + d_{ij}^{con} \dot{\delta}_{ij}(t) + k_{ij}^{con} \delta_{ij}(t) = 0. \quad (43)$$

A Equação 43 se trata de uma equação diferencial ordinária linear e homogênea para qual se pode admitir como solução Ce^{st} , onde C e s são constantes indeterminadas. A partir desta consideração, chega-se na seguinte equação:

$$Ce^{st} \times \left(s^2 + \frac{d_{ij}^{con}}{m^*} s + \frac{k_{ij}^{con}}{m^*} \right) = 0. \quad (44)$$

É possível determinar as duas raízes e estas são:

$$s = -\frac{d_{ij}^{con}}{2m^*} \pm \sqrt{\left(\frac{d_{ij}^{con}}{2m^*} \right)^2 - \frac{k_{ij}^{con}}{m^*}}. \quad (45)$$

A solução geral da equação pode ser escrita da seguinte forma:

$$\delta_{ij}(t) = C_1 e^{\left[-\frac{d_{ij}^{con}}{2m^*} + \sqrt{\left(\frac{d_{ij}^{con}}{2m^*} \right)^2 - \frac{k_{ij}^{con}}{m^*}} \right] t} + C_2 e^{\left[-\frac{d_{ij}^{con}}{2m^*} - \sqrt{\left(\frac{d_{ij}^{con}}{2m^*} \right)^2 - \frac{k_{ij}^{con}}{m^*}} \right] t}, \quad (46)$$

onde C_1 e C_2 são constantes a serem determinadas por meio da imposição das condições iniciais do sistema.

Segundo Rao (2008), o parâmetro de amortecimento crítico $d_{ij}^{con,crit}$ consiste no valor constante de amortecimento d_{ij}^{con} que conduz o radical da Equação 45 a ser nulo. Assim, pode-se escrever que:

$$d_{ij}^{con,crit} = 2\sqrt{k_{ij}^{con} m^*}. \quad (47)$$

Já a taxa de amortecimento ξ^{con} pode ser definida como o quociente entre a constante de amortecimento d^{con} e a constante de amortecimento crítico d_c^{con} (RAO, 2008).

Considerando o decorrido, a Equação 43, pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\ddot{\delta}_{ij}(t) + 2\xi^{con} \omega_0^* \dot{\delta}_{ij}(t) + \omega_0^{*2} \delta_{ij}(t) = 0, \quad (48)$$

sendo que a taxa de amortecimento do sistema ξ^{con} é dada por:

$$\xi^{con} = \frac{d_{ij}^{con}}{2\sqrt{m^* k_{ij}^{con}}} e \quad (49)$$

a frequência natural não amortecida é definida como:

$$\omega_0^* = \sqrt{\frac{k_{ij}^{con}}{m^*}}. \quad (50)$$

Desta forma, o parâmetro de amortecimento pode ser escrito da seguinte maneira:

$$d_{ij}^{con} = 2\xi^{con} \sqrt{m^* k_{ij}^{con}}, \quad (51)$$

considerando que m^* , k_{ij}^{con} e ξ^{con} sejam conhecidos.

A massa m^* pode ser definida como a massa equivalente das duas partículas i e j :

$$m^* = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}. \quad (52)$$

A partir da teoria de Hertz, pode-se definir a rigidez k_{ij}^{con} como sendo o resultado da derivada da parcela elástica da força de contato em relação a interpenetração δ_{ij} (JOHNSON, 1985). Como consequência, tem-se que a rigidez equivalente pode ser calculada da seguinte forma:

$$k_{ij}^{con} = 2E^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{1/2}. \quad (53)$$

O parâmetro de amortecimento pode ser reescrito como:

$$d_{ij}^{con} = 2\xi^{con} \sqrt{2m^* E^* \sqrt{r^*}} |\delta_{ij}|^{1/4}. \quad (54)$$

A taxa de amortecimento ξ^{con} não é um parâmetro facilmente obtível em laboratório, mas o coeficiente de restituição e é. Assim, por conveniência, a taxa de amortecimento pode ser escrita como a que decorre da definição do coeficiente de restituição e do contato ou colisão. Nesse contexto, a taxa de amortecimento é dada por:

$$\xi^{con} = -\frac{\ln e}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e}}, \text{ sendo } e = -\frac{\dot{\delta}_{ij} t_f^{con}}{\dot{\delta}_{ij} t_i^{con}}. \quad (55)$$

A velocidade de afastamento das partículas no instante t_f^{con} que ocorre a finalização do contato é denominada $\dot{\delta}_{ij}(t_f^{con})$, já a velocidade de aproximação das mesmas partículas no instante t_i^{con} em que o contato é iniciado é chamada de $\dot{\delta}_{ij}(t_i^{con})$. O cálculo das velocidades apresentadas anteriormente se dá através da seguinte equação:

$$\dot{\delta}_{ij}(t) = \frac{\dot{\delta}_{ij}(0)}{\omega_0^* \sqrt{1 - \xi^{con\ 2}}} \exp[-\xi^{con} \omega_0^* t] \cdot \left[\omega_0^* \sqrt{1 - \xi^{con\ 2}} \cos\left(\sqrt{1 - \xi^{con\ 2}} t\right) - \xi^{con} \omega_0^* \sin\left(\omega_0^* \sqrt{1 - \xi^{con\ 2}} t\right) \right] \quad (56)$$

Destaca-se que a Equação 55 é válida para o instante $t_i^{con} = 0$ e para o instante t_f^{con} correspondente à:

$$t_f^{con} = \frac{\pi}{\omega_0^* \sqrt{1 - \xi^{con\ 2}}}. \quad (57)$$

Pode-se escrever que força de contato que atua na partícula j é

$$\mathbf{f}_{ji}^{con} = -\mathbf{f}_{ij}^{con}.$$

Campello (2016) ressalta que a teoria de Hertz considera as superfícies das partículas como sendo lisas e que o vetor normal é bem definido em todos os pontos. O autor também destaca que a hipótese de que as deformações sejam pequenas e restritas à região de contato é feita. Sendo assim, as equações da teoria da elasticidade são válidas.

2.3.2 Força de atrito

O atrito surge de pontos de aderência que se formam a partir do contato entre suas superfícies. Estes pontos de aderência são consequência da rugosidade das superfícies em questão, pois quanto mais rugosa a superfície, maior será a força de atrito. Essas forças de atrito que ocorrem na superfície de contato entre as partículas estão ilustradas na Figura 5 a seguir. O atrito entre as partículas i e j é totalmente influenciado pelas forças normais decorrente do contato, sendo estas

ações normais externas, forças normais de inércia, forças normais de adesão espontânea ou a combinação de todas as citadas anteriormente. Campello (2016) destaca que a adesão espontânea exerce contribuição significativa na força normal em partículas de dimensões muito pequenas; já em partículas maiores, a contribuição das forças de inércia e forças externas são muito mais significativas. Nesta formulação, os efeitos da adesão espontânea sobre o atrito não serão considerados.

Figura 5 – Atrito entre duas partículas

Fonte: Produção pelo próprio autor.

Quando não há força de adesão entre as partículas em contato, pode-se considerar que a força de atrito independe da área de contato entre as duas partículas, porém depende da natureza das superfícies de contato (como dito anteriormente) e é diretamente proporcional à força normal externa aplicada. No caso de a adesão existir, uma parcela adicional passa a ser contabilizada na força de atrito, sendo esta função da área de contato. A partir do instante em que a força de atrito excede o valor da força de atrito estático há o movimento relativo entre os dois corpos.

Neste trabalho, será adotado um modelo de atrito semiempírico baseado na solução de Mindlin da teoria da elasticidade para contato aderente entre esferas e complementado pelo modelo de Coulomb para os casos em que ocorre deslizamento, apresentado por Campello (2016). Neste modelo, quando há aderência entre partículas, a força de atrito é dada por um dispositivo mola-amortecedor tangencial, onde mola e amortecedor estão em paralelo e a rigidez da mola decorre da solução

de Mindlin. O alongamento deste dispositivo representa a deformação tangente de aderência entre as partículas. Tem-se neste cenário que a magnitude da força de atrito está entre zero e $\mu_S f^{con}$. A magnitude da força de atrito neste cenário será obtida por meio de tentativas com o emprego da equação constitutiva do dispositivo. Desta forma, inicialmente se conjectura que há aderência, onde calcula-se o alongamento da mola e a força no dispositivo. Em seguida, faz-se a verificação se tal valor de força supera o limite de atrito estático. Caso não exceda o limite imposto, tem-se a ocorrência de aderência, onde a força de atrito é igual ao oposto decorrente do dispositivo mola-amortecedor. Caso contrário, ou seja, ultrapasse o limite estático, há deslizamento e a força de atrito é dada por $f^{atr} = \mu_D f^{con}$.

Tem-se que a força de atrito f_{ij}^{atr} é o vetor força de atrito que atua na partícula i decorrente do contato com a partícula j . Já o vetor força de atrito que atua na partícula j é $f_{ji}^{atr} = -f_{ij}^{atr}$. Para o cálculo do vetor força de atrito nomeada tentativa $f_{ij}^{atr,trial}$, há a consideração da hipótese de que há aderência no início do contato; assim, calcula-se o vetor força de atrito tentativa da seguinte forma:

$$f_{ij}^{atr,trial} = -k_{ij}^{atr} \Delta x_{ij}^{trial} + d_{ij}^{atr} v_{ij}, \quad (58)$$

onde a rigidez da mola e a constante de amortecimento do dispositivo tangencial fictício são respectivamente k_{ij}^{atr} e d_{ij}^{atr} , Δx_{ij}^{trial} é o vetor alongamento tentativa e v_{ij} é o vetor velocidade do alongamento.

O alongamento tentativa é dado por:

$$\Delta x_{ij}^{trial} = \Delta x_{ij}^{acum} + \delta x_{ij}^{trial}, \quad (59)$$

onde Δx_{ij}^{acum} se trata do alongamento acumulado em instantes anteriores (ou seja, alongamentos que foram adquiridos durante ocorrência de aderência em configurações anteriores), e δx_{ij}^{trial} é o alongamento incremental tentativa (ou seja, acréscimo de alongamento em relação à configuração de referência decorrente da hipótese de que continuará ocorrendo aderência na configuração atual).

A velocidade do alongamento é considerada como a velocidade relativa entre as superfícies das partículas no ponto P de contato na direção tangente, $v_{rel,t}^P$.

(o índice t que compõe $\mathbf{v}_{rel,t}^P$ indica se tratar da direção tangencial). A velocidade $\mathbf{v}_{rel,t}^P$ é expressa por:

$$\mathbf{v}_{rel,t}^P = \mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_{rel}^P - \mathbf{v}_{rel}^P \cdot \mathbf{n}_{ij} \mathbf{n}_{ij}, \quad (60)$$

onde $\mathbf{v}_{rel}^P$ se trata da velocidade relativa no ponto de contato. Esta velocidade $\mathbf{v}_{rel}^P$ pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_{rel}^P = \mathbf{v}_i^P - \mathbf{v}_j^P, \quad (61)$$

onde $\mathbf{v}_i^P$ e $\mathbf{v}_j^P$ são as velocidades do ponto de contato das partículas i e j , respectivamente. Estas velocidades $\mathbf{v}_i^P$ e $\mathbf{v}_j^P$ podem ser definidas da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_i^P = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_i^P \text{ e} \quad (62)$$

$$\mathbf{v}_j^P = \mathbf{v}_j + \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{r}_j^P, \quad (63)$$

onde $\mathbf{r}_i^P$ é um vetor que liga o centro da partícula i ao ponto P e $\mathbf{r}_j^P$ é um vetor que liga o centro da partícula j ao ponto P . Estes vetores são obtidos através das seguintes expressões:

$$\mathbf{r}_i^P = \mathbf{r}_i - \delta_i \mathbf{n}_{ij} \text{ e} \quad (64)$$

$$\mathbf{r}_j^P = -\mathbf{r}_j - \delta_j \mathbf{n}_{ij}. \quad (65)$$

Já δ_i e δ_j são denominados encurtamento local dos raios das partículas i e j , respectivamente. A partir da Teoria de Hertz, os encurtamentos dos raios das partículas são considerados cada um como uma fração da interpenetração δ_{ij} total entre as partículas, pode-se escrevê-los da seguinte forma:

$$\delta_i = \frac{E_j}{E^*} |\delta_{ij}| \text{ e } \delta_j = \frac{E_i}{E^*} |\delta_{ij}|. \quad (66)$$

A direção da força de atrito tentativa, $\mathbf{t}_{ij}^{trial}$, é dada por:

$$\mathbf{t}_{ij}^{trial} = \frac{\mathbf{f}_{ij}^{atr,trial}}{\|\mathbf{f}_{ij}^{atr,trial}\|}. \quad (67)$$

Com estes valores, deve-se verificar se a tentativa inicial é admissível.

Para isso, o critério de deslizamento deve ser verificado e este apresenta a seguinte função:

$$F \mathbf{f}_{ij}^{atr} = \left\| \mathbf{f}_{ij}^{atr} \right\| - \mu_S \left\| \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\|, \quad (68)$$

onde se $F \mathbf{f}_{ij}^{atr,trial} \leq 0$, a tentativa é considerada admissível, pois não ocorreu deslizamento; já se $F \mathbf{f}_{ij}^{atr,trial} > 0$, a tentativa é considerada inadmissível, pois ocorreu deslizamento. No caso de a tentativa ser admissível, então $\mathbf{f}_{ij}^{atr}$ é considerada igual à $\mathbf{f}_{ij}^{atr,trial}$ e para o valor do alongamento $\Delta \mathbf{x}_{ij}$ é adotado o valor do alongamento tentativa $\Delta \mathbf{x}_{ij}^{trial}$. Para o caso de que a tentativa foi considerada inadmissível, a força de atrito é calculada da seguinte forma:

$$\mathbf{f}_{ij}^{atr} = \mu_D \left\| \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\| \mathbf{t}_{ij}, \text{ onde } \mathbf{t}_{ij} = \mathbf{t}_{ij}^{trial}. \quad (69)$$

Consequentemente, o alongamento não pode ser considerado igual ao alongamento tentativa. Pode-se corrigir o alongamento tentativa e assim obter o alongamento da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mu_D \left\| \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\| \mathbf{t}_{ij} &= k_{ij}^{atr} \Delta \mathbf{x}_{ij} + d_{ij}^{atr} \mathbf{v}_{ij} \rightarrow \\ \Delta \mathbf{x}_{ij} &= \frac{1}{k_{ij}^{atr}} \mu_D \left\| \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\| \mathbf{t}_{ij} - d_{ij}^{atr} \mathbf{v}_{ij}. \end{aligned} \quad (70)$$

A rigidez k_{ij}^{atr} é obtida a partir da solução de Mindlin para a deformação tangencial experimentada pelas duas superfícies de dois corpos elásticos esféricos em aderência e pode ser calculada da seguinte forma:

$$k_{ij}^{atr} = 8G^* \sqrt{r^*} \left| \delta_{ij} \right|^{1/2} \mathbf{e} \quad (71)$$

$$G^* = \frac{G_i G_j}{G_i (2 - \nu_j) + G_j (2 - \nu_i)}, \quad (72)$$

sendo que G^* , G_i e G_j são respectivamente o módulo de elasticidade transversal equivalente do par de partículas, o módulo de elasticidade transversal da partícula i e o módulo de elasticidade transversal da partícula j ; e ν_i e ν_j são os valores do coeficiente de Poisson de cada partícula.

A constante de amortecimento d_{ij}^{atr} é determinada a partir de uma taxa

de amortecimento ξ_t desejada para o dispositivo tangencial fictício e dada por:

$$d_{ij}^{atr} = 2\xi_t \sqrt{m^* k_{ij}^{atr}}. \quad (73)$$

Pode-se escrever que a resultante das forças de atrito que atuam sobre a partícula i devido os contatos com outras partículas do sistema é igual a:

$$\mathbf{f}_i^{atr} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_c} \mathbf{f}_{ij}^{atr}. \quad (74)$$

As forças de atrito não são forças centrais e, devido à excentricidade em relação aos centros de massa das partículas em que atuam, tendem a girar as partículas em relação aos mesmos centros exercendo influência sobre o movimento rotacional. Nesse contexto, o movimento induzido em uma partícula i devido o atrito com outra partícula j é dado por:

$$\mathbf{m}_{ij}^{atr} = \mathbf{r}_i^P \times \mathbf{f}_{ij}^{atr}, \quad (75)$$

sendo que $\mathbf{r}_i^P$ é o vetor que liga o centro de massa da partícula i ao ponto de contato P com a partícula j , definido nas equações Equação 64 e 65.

A resultante dos momentos oriundos das forças de atrito que atuam sobre a partícula i é decorrente dos contatos com N_c outras partículas do sistema. Essa resultante é dada por:

$$\mathbf{m}_i^{atr} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_c} \mathbf{m}_{ij}^{atr}. \quad (76)$$

2.3.3 Resistência ao rolamento e ao twisting

A partir do instante em que existe um movimento de rolamento entre duas partículas i e j conforme ilustrado na Figura 6, e que estas apresentam velocidade angular não nula e velocidade translacional relativa nula no ponto de contato, pode ocorrer a resistência ao rolamento. Esta ocorrência é devido à histerese no contato e ao fato de que as partículas envolvidas possuem uma área finita de contato, e não um ponto de contato. Ressalta-se que o fenômeno histerese gera uma pressão de contato um pouco maior na região dita como anterior ou da “frente” da área de contato, tornando-a mais comprimida do que a região posterior. Como

consequência dessa diferença de pressões, tem-se uma excentricidade e (ainda que de pequena magnitude) da força resultante de contato em relação ao centro de massa de cada partícula, que por fim, gera um momento que se opõe ao rolamento, denominado *resistência ao rolamento* (CAMPELLO, 2016).

Figura 6 – Esquemático do movimento de rolamento entre duas partículas

Fonte: Produção da própria autora.

É importante não confundir rolamento com rotação. O termo rolamento, ou *rolling*, no sentido amplo se refere ao movimento de rotação entre dois objetos sobre o plano tangente de contato entre eles, envolvendo um micromecanismo de deformação por contato (em que pode haver aderência local entre as áreas de contato), conforme descrito em mais detalhes logo a seguir. Já o termo rotação se refere ao movimento genérico de rotação propriamente dito, i.e., giro em relação a um eixo qualquer.

Quando duas partículas entram em contato, três tipos de movimento podem ocorrer: translação sem rotação (pura translação), rotação sem translação (pura rotação), e rotação e translação simultaneamente. Havendo rotação, a literatura do método dos elementos discretos costuma diferenciar dois tipos de movimentos rotacionais possíveis. O primeiro deles, chamado generalizadamente de rolamento (*rolling*), consiste no movimento angular em torno de um eixo paralelo ao plano tangente de contato, conforme indicado na Figura 7a. Já o segundo, denominado de torção relativa ou *twisting*, é o movimento angular em torno do eixo perpendicular ao plano tangente (JOHNSON, 1985), conforme indicado na Figura 7b. No meio técnico

ligado à mecânica do contato, é usual fazer uma caracterização um pouco mais estrita do rolamento: diz-se que este só ocorre quando há *aderência entre os pontos de contato* dos objetos envolvidos, i.e., quando a velocidade relativa entre esses pontos é nula, tal como dito no início desta seção. Não havendo tal aderência, existe deslizamento entre os pontos de contato, e o movimento não se denomina propriamente um rolamento. Independentemente da definição generalizada ou estrita, como a pressão de contato é maior na parte anterior da área de contato, surge uma excentricidade na força de contato resultante, conforme já mencionado, e consequentemente um momento em relação ao centro das partículas, cujo sentido se opõe à rotação de rolamento da partícula.

Figura 7 – Tipos de rotação decorrentes do contato entre partículas

(a) Rolamento entre duas partículas (b) *Twisting* entre duas partículas

Fonte: Produção da própria autora.

Deseja-se ressaltar que os termos resistência ao rolamento (*rolling resistance*) e atrito de rolamento (*rolling friction*) não podem ser considerados como sinônimos. O termo resistência ao rolamento é mais amplo e pode ser empregado em tanto em situações estáticas ou pseudoestáticas quanto em situações dinâmicas envolvendo o rolamento entre partículas. Já o termo atrito de rolamento é restrito a situações dinâmicas, como em fluxos de partículas (como por exemplo em avalanches, descarga de material granular de um container e rotação de partículas no interior de um tambor). Pode-se dizer que o termo resistência ao rolamento engloba o conceito de atrito de rolamento (Al, 2010), mas não o oposto. Neste trabalho, os termos resistência ao rolamento, coeficiente de resistência ao rolamento e torque ou momento resistente ao rolamento serão adotados.

Como dito anteriormente, a resistência ao rolamento pode ocorrer a partir da existência do movimento de rolamento entre uma partícula i e uma partícula j . Essa resistência ao rolamento desempenha duas funções extremamente importantes em sistemas de partículas: a dissipação de energia durante o movimento de rotação, e o provimento da capacidade de “empacotamento” ou empilhamento a um conjunto de partículas, tal que uma pilha estática de partículas consiga preservar a sua forma e geometria com estabilidade (Ai et al., 2011), evitando que desmorone.

Neste trabalho, a excentricidade será o resultado do produto entre dois termos, um deles é o raio da partícula e o outro é um adimensional denominado por coeficiente de resistência ao rolamento. Isso foi adotado anteriormente por Iwashita e Oda (2000), Li, Chu e Feng (2005), e Ai et al. (2011), onde o coeficiente de resistência ao rolamento é definido como:

$$\mu_R = \tan \beta , \quad (77)$$

onde μ_R é o coeficiente de resistência ao rolamento e β é o ângulo de resistência ao rolamento. Este último consiste na máxima inclinação da superfície em contato com a partícula caracterizando o equilíbrio entre torque de resistência ao rolamento e torque gerado pela força gravitacional que age na partícula (vide Figura 8).

Figura 8 – Vista de uma esfera sobre um plano inclinado

Fonte: Adaptado de Ai et al. (2011, p.272)

Modelos para representar a resistência ao rolamento têm sido propostos, onde são destacados neste trabalho: Iwashita e Oda (1998), Jiang, Yu e Harris (2005), Ai (2010), Belheine et al. (2009), e Jiang, Shen e Wang (2015). Salienta-se que os três primeiros modelos a serem apresentados são bidimensionais, onde a rotação relativa entre as partículas é sempre uma rotação de rolamento e, portanto, não há *twisting*

por se tratar de discos.

Iwashita e Oda (1998) desenvolveram seu modelo de resistência ao rolamento para contato entre discos (casos bidimensionais). Os autores propuseram o emprego de um modelo viscoelástico do tipo Kelvin-Voigt para o deslocamento normal (i.e., penetração local de contato), deslocamento tangencial (i.e., deformação de atrito) e rotação de rolamento, conforme apresentado na Figura 9. Complementa-se que o modelo constitutivo tipo Kelvin-Voigt é constituído pela associação em paralelo entre uma mola puramente elástica e um amortecedor viscoso.

Figura 9 – Modelo de contato para 2D proposto por Iwashita e Oda (1998) e (2000)

Fonte: Adaptado de Iwashita e Oda (1998, p.286).

Com base no modelo viscoelástico proposto, Iwashita e Oda (1998) escreveram que o momento resistente ao rolamento deve ser calculado da seguinte forma geral:

$$m_{ij}^{rol} = -k_{ij}^{rol}\theta_{ij}^{rol} - d_{ij}^{rol}\omega_{ij}, \quad (78)$$

onde k_{ij}^{rol} e d_{ij}^{rol} são o coeficiente de rigidez da mola de rotação e o coeficiente de

amortecimento, respectivamente, θ_{ij}^{rol} é a rotação da mola e ω_{ij} é a velocidade angular do amortecedor. Destaca-se que a rotação da mola é determinada de forma incremental, ou seja, mantém-se o histórico de rotação ao longo do tempo entre os instantes t e $t + \Delta t$ e a cada novo instante de tempo, agrega-se um incremento no valor da rotação. Ainda segundo Iwashita e Oda (1998), o coeficiente de rigidez da mola do modelo de resistência ao rolamento pode ser escrito como:

$$k_{ij}^{rol} = k_{ij}^{atr} \bar{r}^2, \quad (79)$$

onde $\bar{r}$ consiste no valor médio dos raios das partículas em contato.

Análogo ao que foi imposto para o atrito no modelo aderência-deslizamento, quando m_{ij}^{rol} é superior a um certo momento máximo, tem-se o início do rolamento. Desta forma, e considerando complementarmente Iwashita e Oda (2000), o rolamento ocorre quando:

$$m_{ij}^{rol} > \mu_R \ B/2 \ f_{ij}^{con}, \quad (80)$$

onde B corresponde à extensão do contato (vide Figura 9).

Jiang, Yu e Harris (2005) propuseram um modelo de resistência ao rolamento elasto-perfeitamente plástico para casos bidimensionais a partir do modelo proposto por Iwashita e Oda (1998) apresentado. Os autores introduziram o emprego do modelo Kelvin-Voigt em série com elemento *divider* ou *slider* para a componente normal e tangencial do contato, respectivamente, e repetições deste conjunto foram dispostas em paralelo e distribuídas pela região de contato. Esta composição quanto ao componente normal pode ser vista na Figura 10 apresentada a seguir.

Figura 10 – Modelo de contato para 2D proposto por Jiang, Yu e Harris (2005)

Fonte: Adaptado de Jiang et al. (2005, p.346).

O momento de resistência ao rolamento é dado por:

$$\begin{cases} m_{ij}^{rol} = k_{ij}^{rol} \theta_{ij}^{rol} = \frac{\theta_{ij}^{rol} K_n B^2}{12}, \text{ para } m_{ij}^{rol} \leq m_{ij}^{rol, \text{máx}}, \\ m_{ij}^{rol, \text{máx}} = f^{con} B / 6 \end{cases} \quad (81)$$

onde B é a extensão em que as partículas estão em contato e vale $\delta \cdot 2r^*$, sendo que δ é um parâmetro adimensional relacionado ao material e geometria da partícula denominado por parâmetro de forma e r^* é o raio efetivo apresentado na Equação 41, e o momento de resistência ao rolamento é calculado de forma incremental. Ressalta-se que o parâmetro de forma não tem uma determinação trivial o que dificulta sua adoção com confiabilidade. Observou-se no artigo que pode se tratar de um parâmetro a ser calibrado ou ajustado conforme o problema a ser resolvido e não totalmente dependente da forma do grão a ser simulado como esfera.

Ainda sobre o modelo proposto pelos autores, o elemento *divider* tem a função de garantir que nenhuma força seja transmitida quando as partículas não estiverem em contato. Já o elemento *slider* possibilita a introdução de um critério análogo ao de Mohr-Coulomb para o atrito, onde restringe-se o momento de

resistência ao rolamento a um valor máximo, ou *limite estático* de rolamento.

O terceiro e último modelo de resistência ao rolamento para casos bidimensionais a ser apresentado é o proposto por Ai (2010). O autor propõe o emprego de um modelo viscoelástico do tipo Kelvin-Voigt com uma implementação que leva em conta uma forma incremental no cálculo do vetor momento de resistência ao rolamento. O momento de resistência ao rolamento total m_{ij}^{rol} é dado por:

$$m_{ij}^{rol} = m_{ij}^{rol,k} + m_{ij}^{rol,d}, \quad (82)$$

onde $m_{ij}^{rol,k}$ e $m_{ij}^{rol,d}$ são os momentos elástico e viscoso, respectivamente.

O modelo proposto em questão apresenta-se como adequado para amostras submetidas a rolamentos cíclicos, pois, segundo os autores, a relação entre momento elástico de resistência ao rolamento e a rotação entre as partículas em contato é similar a uma curva tensão x deformação de um material elástico perfeitamente plástico para carregamento (linha contínua apresentada na Figura 11) e descarregamento (linha tracejada vide Figura 11). Esta consideração consiste na principal diferença em relação ao modelo proposto por Iwashita e Oda (1998), e provou-se capaz de modelar adequadamente pilhas estáticas de partículas (sem apresentar o indesejado desmoronamento lenta da pilha, conforme os outros modelos).

Figura 11 – Curva momento elástico de rolamento x rotação proposto por Ai (2010)

Fonte: Adaptado de Ai (2010, p.125).

Para um certo instante t , tem-se que o vetor momento elástico de resistência ao rolamento é $m_{ij,t}^{rol,k}$ e que um incremento deste vetor momento $\Delta m_{ij,\Delta t}^{rol,k}$

para o instante $t + \Delta t$ pode ser calculado a partir da variação da rotação de rolamento entre as duas partículas $\Delta\theta_{ij}^r$. Assim, tem-se que:

$$\Delta m_{ij,\Delta t}^{rol,k} = -k_{ij}^{rol} \Delta\theta_{ij}^r \text{ e} \quad (83)$$

$$m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} = m_{ij,t}^{rol,k} + \Delta m_{ij,\Delta t}^{rol,k}, \text{ sendo } m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} \leq m_{ij}^{rol,máx}. \quad (84)$$

A Equação 84 apresenta claramente o histórico de momentos de resistência ao rolamento na forma do termo $m_{ij,t}^{rol,k}$, este deve ser guardado entre os instantes t e Δt . Tem-se que k_{ij}^{rol} consiste no coeficiente de rigidez da componente elástica e o vetor momento elástico máximo pode ser escrito da seguinte forma:

$$m_{ij}^{rol,máx} = \mu_R r^* f_{ij}^{con}, \quad (85)$$

onde μ_R está definido na Equação 77. Já o coeficiente de rigidez do modelo de resistência ao rolamento pode ser obtido por meio de:

$$k_{ij}^{rol} = \frac{\mu_R r^* f_{ij}^{con}}{\theta_{ij}^{rol,máx}}, \text{ onde} \quad (86)$$

$$\theta_{ij}^{rol,máx} = \mu_R / 2J_n. \quad (87)$$

Sendo que J_n é um parâmetro adimensional que vale entre 0,25 e 0,50.

Em relação ao momento viscoso da Equação 81, define-se que para um certo instante $t + \Delta t$, o momento viscoso pode ser calculado a partir da seguinte expressão:

$$m_{ij,t+\Delta t}^{rol,d} = \begin{cases} -d_{ij}^{rol} \omega_{ij}, & \text{se } m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} < m_{ij}^{rol,máx} \\ 0, & \text{se } m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} = m_{ij}^{rol,máx} \end{cases}, \quad (88)$$

onde o coeficiente de amortecimento do modelo é dado por:

$$d_{ij}^{rol} = \eta_r d_{ij}^{rol,crit} = 2\eta_r \sqrt{j^* k_{ij}^{rol}}. \quad (89)$$

Especifica-se que ω_{ij} equivale a velocidade angular relativa entre duas partículas, η_r consiste em um taxa de amortecimento, $d_{ij}^{rol,crit}$ é o amortecimento crítico do modelo, e j^* corresponde ao momento de inércia do modo de vibração rotacional do modelo (i.e., rotação em torno do ponto de contato) e igual a:

$$j^* = \left(\frac{1}{j_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{j_j + m_j r_j^2} \right)^{-1}, \quad (90)$$

onde j_i e j_j são os momentos de inércia em relação ao centroide de cada partícula, m_i e m_j são as massas, e r_i e r_j são os raios das partículas i e j que estão em contato.

Ai (2010) destaca que se trata de um modelo mais versátil do que os modelos apresentados por Iwashita e Oda (1998) e Jiang, Yu e Harris (2005), pois apresenta bom desempenho em simulações que envolvem rolamento cíclico.

Em relação à problemas tridimensionais, até onde a autora tem conhecimento, o primeiro estudo sistemático de modelo de resistência ao rolamento que surgiu na literatura do método dos elementos discretos foi proposto por Belheine et al. (2009). Uma versão preliminar do mesmo foi publicada por Plassiard, Belheine e Donzé (2007). Sienta-se que em 2007, não foi mencionado o cálculo de forma incremental para vetor rotação nem para o vetor momento de resistência ao rolamento. Já na publicação realizada em 2009, os autores explicitaram que o vetor rotação é determinado de forma incremental. Os autores em questão propuseram uma versão de modelo de resistência ao rolamento com base no modelo bidimensional proposto por Iwashita e Oda (1998). Contudo, os autores simplificaram o modelo aplicado para o contato ao adotar apenas uma mola puramente elástica para a força de contato mecânico, força de atrito e resistência ao rolamento ao invés do modelo viscoelástico Kelvin-Voigt (vide Figura 9). Os modelos adotados por Belheine et al. (2009) estão ilustrados na Figura 12 apresentada a seguir.

Figura 12 – Modelo de contato para 3D proposto por Belheine et al. (2009)

Fonte: Adaptado de Belheine et al. (2009, p.323)

Com base no modelo de resistência ao rolamento ilustrado na Figura 12, o vetor momento resistente ao rolamento é dado por:

$$\mathbf{m}_{ij}^{rol} = -k_{ij}^{rol} \boldsymbol{\theta}_{ij}^{rol}, \quad (91)$$

onde k_{ij}^{rol} se trata do coeficiente de rigidez da mola e $\boldsymbol{\theta}_{ij}^{rol}$ é o vetor rotação da mola. Destaca-se que os autores não fazem qualquer distinção entre o rolamento propriamente dito e o *twisting*, pois o vetor rotação da mola é o vetor rotação relativa total neste modelo. Ou seja, este vetor rotação engloba tanto a rotação relacionada ao rolamento como a do *twisting*. Acrescenta-se que o uso do termo rolamento para este vetor rotação relativa total não é conceitualmente adequado. Os mesmos autores propõem que o coeficiente de rigidez da mola do modelo de resistência ao rolamento seja igual a:

$$k_{ij}^{rol} = \varphi k_{ij}^{atr} \bar{r}^2, \quad (92)$$

onde $\bar{r}$ consiste no valor médio dos valores dos raios das partículas e φ é um coeficiente adimensional.

Da mesma forma que no modelo de Iwashita e Oda (1998), Belheine et al. (2009) impuseram que o rolamento se inicia quando $\|\mathbf{m}_{ij}^{rol}\|$ é superior à um momento máximo dado pela equação apresentada a seguir.

$$m_{ij}^{rol,máx} = \eta r \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\|, \quad (93)$$

onde $m_{ij}^{rol,máx}$ é limite estático do rolamento, η é um coeficiente adimensional, $\bar{r}$ é o raio médio das partículas e $\|\mathbf{f}_{ij}^{con}\|$ é o módulo do vetor da força de contato.

Belheine et al. (2009) destacam que o modelo de resistência ao rolamento apresenta a consideração de algo análogo a um critério de ruptura para um material com comportamento elastoplástico, sendo este critério similar ao Critério de Mohr-Coulomb da força de atrito, e que os resultados obtidos com o emprego do modelo apresentaram boa correlação com os obtidos no ensaio triaxial com areia Labenne.

Campello (2018) propôs uma extensão do modelo de resistência ao rolamento proposto por Ai (2010) para problemas tridimensionais, incorporando o cálculo incremental da rotação de rolamento (salvando o respectivo histórico do rolamento). Inicialmente, supõe-se que há aderência sem rolamento entre as partículas, e que o correspondente momento de resistência ao rolamento, ou vetor

momento de resistência ao rolamento *tentativa* pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial} = -k_{ij}^{rol} \Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^{trial} - d_{ij}^{rol} \boldsymbol{\omega}_{ij}, \quad (94)$$

onde k_{ij}^{rol} é o coeficiente de rigidez da mola de rolamento, d_{ij}^{rol} consiste na constante viscosa do elemento amortecedor do modelo, $\Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^{trial}$ é o vetor rotação tentativa da mola de rolamento e $\boldsymbol{\omega}_{ij}$ é o vetor velocidade angular do amortecedor. Ressalta-se que Campello (2018), assim como Belheine et al. (2009), não fez distinção entre o rolamento propriamente dito e o *twisting*, i.e., o vetor rotação mencionado é o vetor rotação relativa total e não propriamente o correspondente ao movimento de rolamento.

O coeficiente de rigidez k_{ij}^{rol} adotado na metodologia tem como base a equação 79 proposta por Iwashita e Oda (1998), tal, que, em conjunto com a expressão (71) para a rigidez do atrito, é dado por:

$$k_{ij}^{rol} = 8G^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{1/2} r^{*2}, \quad (95)$$

sendo que o módulo de elasticidade transversal equivalente foi definido na Eq. 72. Já o coeficiente do amortecedor pode ser obtido da seguinte maneira:

$$d_{ij}^{rol} = 2\xi^{rol} \sqrt{j^* k^{rol}}, \quad (96)$$

onde ξ^{rol} é uma taxa de amortecimento quanto ao rolamento e j^* a inércia efetiva rotacional do par de partículas em relação ao ponto de contato:

$$j^* = \left(\frac{1}{j_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{j_j + m_j r_j^2} \right)^{-1}. \quad (97)$$

Em relação ao vetor rotação *tentativa* (movimento total de rotação do par de partículas, sem distinção entre rolamento e *twisting*), este é dado por:

$$\Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^{trial} = \Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^r + \Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^{\Delta,trial}, \quad (98)$$

sendo que $\Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^r$ consiste no vetor rotação da configuração de referência do par de partículas i, j em contato e $\Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^{\Delta,trial}$ é o vetor incremento de rotação tentativa para este mesmo par na configuração atual, dado pela equação a seguir.

$$\Delta \boldsymbol{\theta}_{ij}^{trial} = \int_{t^r}^t \boldsymbol{\omega}_{ij} \tau d\tau. \quad (99)$$

Considera-se que t^r e t são os instantes de tempo na configuração de referência e

atual, respectivamente.

O vetor velocidade angular pode ser obtido da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\omega}_{ij} = \boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_j. \quad (100)$$

A direção do vetor do momento resistente ao rolamento tentativa, chamada de $\mathbf{s}_{ij}^{trial}$, consiste em:

$$\mathbf{s}_{ij}^{trial} = \frac{\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}}{\|\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}\|}. \quad (101)$$

Segundo Campello (2018), a maneira com que se pode verificar se a hipótese de aderência sem rolamento realizada inicialmente é válida, é dada por:

$$G \mathbf{m}_{ij}^{rol} = \|\mathbf{m}_{ij}^{rol}\| - \mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\|, \quad (102)$$

onde se tem que se $G \mathbf{m}_{ij}^{rol} \leq 0$, a hipótese é válida; já se $G \mathbf{m}_{ij}^{rol} > 0$, a hipótese não é válida e o rolamento ocorre. O parâmetro μ_R é um parâmetro adimensional como definido anteriormente que proporciona a excentricidade da força de contato em relação ao centro de massa da partícula como sendo uma fração do raio equivalente.

No caso de a hipótese ser válida, pode-se considerar que $\mathbf{m}_{ij}^{rol} = \mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}$, $\Delta\theta_{ij} = \Delta\theta_{ij}^{trial}$ e $\mathbf{s}_{ij} = \mathbf{s}_{ij}^{trial}$. Já para a situação em que não for válida, tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{ij} &= \mathbf{s}_{ij}^{trial}, \\ \mathbf{m}_{ij}^{rol} &= \mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \mathbf{s}_{ij}, \\ \Delta\theta_{ij} &= \frac{1}{k_{ij}^{rol}} \mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \mathbf{s}_{ij} - d^{rol} \boldsymbol{\omega}_{ij}. \end{aligned} \quad (103)$$

É importante destacar que modelo proposto por Campello (2018) apresentou excelente desempenho quando aplicado na simulação de pilhas estáticas (por exemplo, quando pilhas de partículas são desconfiadas repentinamente e estas sofrem um desmoronamento). O emprego de um modelo de resistência ao rolamento como este (mas não apenas) proposto pelo autor (i.e., com cálculo incremental da rotação ou do momento, guardando seu histórico) possibilita a pilha adquirir uma forma de um cone abatido sem que se desfaça por completo com o tempo.

O terceiro modelo de resistência ao movimento rotacional para aplicação em problemas tridimensionais a ser apresentado foi proposto por Jiang et al. (2015). Até onde a autora sabe, este modelo foi o primeiro a considerar separadamente o

rolamento propriamente dito do *twisting*, e tem como base o proposto por Jiang, Yu e Harris (2005) para casos bidimensionais.

O modelo proposto por Jiang et al. (2015) se trata de um modelo constitutivo de contato constituído por uma mola elástica e um amortecedor. No caso da direção da força de contato, tem-se a mola puramente elástica em paralelo ao amortecedor viscoso com a presença do *divider*. Já em relação a direção tangencial, tem-se o modelo composto por mola puramente elástica em paralelo ao amortecedor viscoso com a presença do *slider*. A respeito do modelo de resistência ao rolamento, este assume que a área de contato entre as partículas é circular e apresenta uma infinidade de modelos de contato distribuídos por esta superfície. Isto é, trata-se de uma extensão da metodologia proposta por Jiang, Yu e Harris (2005) para os casos tridimensionais.

Figura 13 – Modelo de contato para 3D proposto por Jiang et al. (2015)

Fonte: Adaptado de Jiang et al. (2015)

A partir da consideração de um comportamento plástico, os autores determinaram que o momento de resistência ao rolamento pode ser dado por:

$$\|m_{ij}^{rol}\| = \begin{cases} k_{ij}^{rol} \theta_r, & \text{se } \theta_r < \theta_r^* \\ 2,1 M_{r0}, & \text{se } \theta_r \geq \theta_r^* \end{cases}, \quad (104)$$

sendo θ_r^* o valor de rotação que conduz ao rolamento, $M_{r0} = \|f_{ij}^{con}\| r_{ij}^{con} / 4$ e k_{ij}^{rol} é a rigidez da mola na direção normal do contato definida como:

$$k_{ij}^{rol} = \frac{k_n \pi r_{ij}^{con^4}}{4} = \frac{K_n r_{ij}^{con^2}}{4} = r^* E r_{ij}^{con^2}. \quad (105)$$

O raio de contato r_{ij}^{con} é definido como o produto entre um parâmetro β (parâmetro adimensional) e o dobro do raio equivalente estabelecido neste trabalho (r^*). É importante destacar que apesar de os autores empregarem um modelo viscoelástico para o contato, equações com componentes elásticas e viscosas para o momento resistente ao rolamento e ao *twisting* serem determinadas, seu modelo foi reduzido ao apresentado na Equação 104, sendo válido para problemas em que a viscosidade é nula.

O modelo de resistência ao *twisting* pode ser considerado conceitualmente similar ao modelo de resistência ao rolamento, pois são adotados os modelos constitutivos para a direção tangencial (dispositivo mola-amortecedor em paralelo em série com *slider*) e estão distribuídos por toda a área de contato. Segundo os autores, o momento resistente ao *twisting* é igual a:

$$\|m_{ij}^{tw}\| = \begin{cases} k_{ij}^{tw} \theta_t, & \text{se } \theta_t < \theta_t^* \\ 0,65\mu \|f_{ij}^{con}\| r_{ij}^{con}, & \text{se } \theta_t \geq \theta_t^* \end{cases}, \quad (106)$$

sendo θ_t^* o valor de rotação que conduz ao *twisting* e r_{ij}^{con} consiste no raio da área de contato como definido anteriormente. A rigidez da mola k_{ij}^{tw} é dada por:

$$k_{ij}^{tw} = \frac{k_s \pi r_{ij}^{con 4}}{2} = \frac{K_s r_{ij}^{con 2}}{2} = \frac{K_n r_{ij}^{con 2}}{2} = \frac{2r^* E r_{ij}^{con 2}}{\xi}, \quad (107)$$

onde ξ é a taxa entre a rigidez na direção normal e a rigidez na direção tangencial do contato.

A metodologia proposta por Jiang et al. (2015) determina a rotação de forma incremental. A publicação em questão não apresenta validação em exemplos simples de puro rolamento e puro *twisting*, por exemplo. Os autores destacaram a eficiência do modelo em representar o comportamento numérico de um solo submetido ao ensaio triaxial.

Um outro modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting* foi proposto por Huang et al. (2017) e teve como base o modelo proposto por Jiang et al. (2015). A proposta considera que o contato entre duas partículas tem uma área finita circular e que a resistência ao movimento rotacional pode ser decomposta em duas partes, uma correspondente a resistência ao rolamento e a outra ao *twisting*. O modelo é constituído por elemento puramente elástico. Desta forma, considerando um sistema

de coordenadas cartesianas local x, y, z e sendo z coincidente com a direção normal do contato (ver Figura 14), o momento de resistência ao rolamento é dado por:

$$\|\mathbf{m}_{ij,k}^{rol}\| = k_{ij}^{rol} \|\boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{rol}\| = \bar{k}_n I_k \|\boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{rol}\|, \text{ para } k = x, y, \quad (108)$$

onde k_{ij}^{rol} é o coeficiente de rigidez da mola do modelo de resistência ao rolamento ($k_{ij}^{rol} = \bar{k}_n I_k$), $\bar{k}_n$ consiste na rigidez média das molas empregadas na componente normal do contato e I_k é o momento de inércia do círculo definido como:

$$I_k = \frac{\pi}{4} \delta B^4. \quad (109)$$

A rigidez média das molas empregadas na direção normal pode ser determinada da seguinte forma:

$$\bar{k}_n = \frac{k_n}{A'} = \frac{k_n}{\pi \delta r_{ij}^{con2}}. \quad (110)$$

Os parâmetros A' e r_{ij}^{con} correspondem à área de contato entre as partículas e seu raio, δ é uma constante adimensional a ser adotada e está relacionada à irregularidade da geometria da partícula, e k_n é a rigidez das molas que estão uniformemente distribuídas na direção normal do contato.

Figura 14 – Modelo de contato para 3D proposto por Huang et al. (2017)

Fonte: Adaptado de Huang et al. (2017).

O valor máximo de momento de resistência ao rolamento a ser considerado neste modelo elastoplástico pode ser determinado com a equação a seguir.

$$\| \mathbf{m}_{ij,k}^{rol,máx} \| = \kappa \| \mathbf{f}_{ij}^{con} \| r^*, \quad (111)$$

sendo κ , um parâmetro que relaciona a resistência à compressão oferecida pela irregularidade da partícula com a força normal ($\kappa < 1$).

Em relação ao momento de resistência ao *twisting*, têm-se que:

$$\begin{cases} \| \mathbf{m}_{ij,k}^{tw} \| = k_{ij}^{tw} \| \boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{tw} \| = \bar{k}_s J_z \| \boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{tw} \|, \text{ para } k = z \\ \| \mathbf{m}_{ij,k}^{tw,máx} \| = \mu \kappa \| \mathbf{f}_{ij}^{con} \| r^* \end{cases} \quad (112)$$

onde k_{ij}^{tw} consiste no coeficiente de rigidez da mola do modelo de resistência ao *twisting* ($k_{ij}^{tw} = \bar{k}_s J_z$), $\bar{k}_s$ é rigidez média das molas empregadas na componente tangencial do contato (vide Figura 14) e pode ser determinada pela seguinte equação:

$$\bar{k}_s = \frac{k_s}{A'}, \quad (113)$$

onde A' é a área de contato entre as partículas e J_z é o momento polar de inércia dado por:

$$J_z = \frac{\pi}{2} \delta r_{ij}^{con^4}. \quad (114)$$

O modelo proposto por Huang et al. (2017) emprega a determinação do vetor rotação de forma incremental e apresenta parâmetros κ e δ que não possuem uma determinação trivial. O modelo foi validado para um exemplo de rolamento puro e um segundo sobre derrapagem e rolamento de uma partícula sobre superfície rígida. Não sendo realizada a aplicação do modelo em um caso simples de *twisting* puro em uma esfera, por exemplo. Os autores destacaram que o modelo ao ser considerado em um ensaio triaxial de uma amostra com 20.164 partículas não foi capaz de representar o estado crítico da amostra em relação ao índice de vazios x tensão média efetiva, e em relação a tensão desviadora x tensão média efetiva. Destaca-se que o modelo proposto apresenta, portanto, dois parâmetros que devem ser ajustados conforme o problema e ainda sim, não simulam o comportamento do material granular de forma satisfatória.

Por último será apresentado um modelo de resistência ao *twisting*

proposto por Otsubo (2016). Este modelo se diferencia dos demais por considerar pequenos deslizamentos durante o movimento rotacional em questão.

O modelo apresenta uma mola puramente elástica comandando o comportamento da partícula com rigidez dada por:

$$k_{ij}^{tw} = \frac{16}{3} G^* \theta_{ij}^{tw} r_{ij}^{con} \pm \frac{3}{16} \pi \mu r_{ij}^{con} \left(1 - \theta_{ij}^{tw} \frac{\Delta N}{\Delta \varphi_{tw}} \right), \quad (115)$$

onde se tem como relação entre torção e *twisting*:

$$\Delta \varphi_{tw} = \frac{3}{16 G^* r_{ij}^{con}} \left(\pm \frac{3}{16} \pi \mu \Delta N r_{ij}^{con} + \frac{\Delta M_{tw} \mp \frac{3}{16} \pi \mu \Delta N r_{ij}^{con}}{\theta_{ij}^{tw}} \right). \quad (116)$$

Sendo que $\Delta \varphi_{tw}$ é a variação do ângulo fruto do *twisting*, M_{tw} é o momento que gera o movimento, ΔN é a variação do esforço normal de contato, r_{ij}^{con} é o raio da área de contato e o parâmetro θ_{ij}^{tw} é definido como o grau de deslizamento parcial do contato. O autor destaca que se os resultados da aplicação das duas equações imediatamente superiores, for positivo, tem-se um caso de carregamento ou recarregamento gerado pelo momento. Caso contrário, tem-se um caso de descarregamento. Valores para o grau de deslizamento parcial do contato são calculados em função desse diagnóstico e são dependentes dos momentos máximos e mínimos já experimentados durante o contato de estudo vigente.

A seguir, são apresentados o Quadro 1 (problema bidimensional) e o Quadro 2 (problema tridimensional) com o resumo dos modelos de resistência ao rolamento e/ou *twisting* retratados durante esta revisão da literatura.

Destaca-se que o Capítulo 3 apresenta uma proposta de formulação de modelo de resistência ao rolamento (baseado no modelo proposto por Campello (2018)) e ao *twisting*.

Quadro 1 – Resumo de propostas de modelos de resistência ao rolamento para problemas bidimensionais

Modelo Proposto	Resistência ao rolamento		Resistência ao <i>twisting</i>	
	Equação constitutiva	Parâmetros	Equação constitutiva	Parâmetros
Iwashita e Oda (1998) e (2000)	$m_{ij}^{rol} = -k_{ij}^{rol} \theta_{ij}^{rol} - d_{ij}^{rol} \omega_{ij}$ $m_{ij}^{rol,máx} = \mu_R B/2 f_{ij}^{con}$	$k_{ij}^{rol} = k_{ij}^{adi} r^{-2}$	-	-
Jiang, Yu e Harris (2005)	$m_{ij}^{rol} = k_{ij}^{rol} \theta_{ij}^{rol}, \text{ se } m_{ij}^{rol} \leq m_{ij}^{rol,máx}$ $m_{ij}^{rol,máx} = f^{con} B / 6$	$k_{ij}^{rol} = \frac{K B^2}{12}$ $B = \delta \ 2r^*$	-	-
Ai (2010)	$m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} = m_{ij,t}^{rol,k} + \Delta m_{ij,\Delta t}^{rol,k}$ $\text{se } m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} \leq m_{ij}^{rol,máx}$ $\Delta m_{ij,\Delta t}^{rol,k} = -k_{ij}^{rol} \Delta \theta_{ij}^r$ $m_{ij,t+\Delta t}^{rol,d} = \begin{cases} -d_{ij}^{rol} \omega_{ij}, \text{ se } m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} < m_{ij}^{rol,máx} \\ 0, \text{ se } m_{ij,t+\Delta t}^{rol,k} = m_{ij}^{rol,máx} \end{cases}$ $m_{ij}^{rol,máx} = \mu_R r^* f_{ij}^{con}$	$k_{ij}^{rol} = \frac{\mu_R r^* f_{ij}^{con}}{\theta_{ij}^{rol,máx}}$ $\theta_{ij}^{rol,máx} = \mu_R / 2J_n$ $d_{ij}^{rol} = \xi^{rol} d_{ij}^{rol,crit} = 2\xi^{rol} \sqrt{j k_{ij}^{*,rol}}$ $j^* = \left(\frac{1}{j_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{j_j + m_j r_j^2} \right)^{-1}$	-	-

Fonte: Produção da própria autora.

Quadro 2 - Resumo de propostas de modelos de resistência ao rolamento e/ou twisting para problemas tridimensionais

Modelo Proposto	Resistência ao rolamento		Resistência ao twisting	
	Equação constitutiva	Parâmetros	Equação constitutiva	Parâmetros
Belheine et al. (2009)	$m_{ij}^{rol} = -k_{ij}^{rol} \theta_{ij}^{rol}$ $m_{ij}^{rol,máx} = \eta \bar{r} \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ $	$k_{ij}^{rol} = \varphi k_{ij}^{atr} \bar{r}^{-2}$	-	-
Campello (2018)	$m_{ij}^{rol,trial} = -k_{ij}^{rol} \Delta \theta_{ij}^{trial} - d_{ij}^{rol} \omega_{ij},$ se $m_{ij}^{rol,trial} \leq m_{ij}^{rol,máx}$ $m_{ij}^{rol,máx} = \mu_R r^* \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ s_{ij}$	$k_{ij}^{rol} = 8G^* \sqrt{r^*} \left \delta_{ij} \right ^{1/2} r^{*2}$ $d_{ij}^{rol} = 2\xi^{rol} \sqrt{J k_{ij}^{rol}}$ $j^* = \left(\frac{1}{j_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{j_j + m_j r_j^2} \right)^{-1}$	-	-
Jiang et al. (2015)	$\left\ \mathbf{m}_{ij}^{rol} \right\ = \begin{cases} k_{ij}^{rol} \theta_r, & \text{se } \theta_r < \theta_r^* \\ 2,1 M_{r,0}, & \text{se } \theta_r \geq \theta_r^* \end{cases}$ $m_{ij}^{rol,k,máx} = 2,1 \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ r_{ij}^{con} / 4$	$k_{ij}^{rol} = r^* E \frac{r_{ij}^{con2}}{r_{ij}}$	$\left\ \mathbf{m}_{ij}^{tw} \right\ = \begin{cases} k_{ij}^{tw} \theta_t, & \text{se } \theta_t < \theta_t^* \\ 0,65 \mu \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ r_{ij}^{con}, & \text{se } \theta_t \geq \theta_t^* \end{cases}$ $m_{ij}^{tw,máx} = 0,65 \mu \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ r_{ij}^{con}$	$k_{ij}^{tw} = \frac{2r^* E r_{ij}^{con2}}{\xi}$
Huang et al. (2017)	$\left\ \mathbf{m}_{ij,k}^{rol} \right\ = k_{ij}^{rol} \left\ \boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{rol} \right\ = \bar{k}_n I_k \left\ \boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{rol} \right\ ,$ para $k = x, y$ $\left\ \mathbf{m}_{ij,k}^{rol,máx} \right\ = \kappa \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ r^*$	$k_{ij}^{rol} = \bar{k}_n I_k$ $I_k = \frac{\pi}{4} \delta r_{ij}^{con4}$ $\frac{k_n}{A'} = \frac{k_n}{\pi \delta r_{ij}^{con2}}$	$\left\{ \left\ \mathbf{m}_{ij,k}^{tw} \right\ = k_{ij}^{tw} \left\ \boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{tw} \right\ = \bar{k}_s J_z \left\ \boldsymbol{\theta}_{ij,k}^{tw} \right\ \right\}$ $\left\{ \left\ \mathbf{m}_{ij,k}^{tw,máx} \right\ = \mu \kappa \left\ \mathbf{f}_{ij}^{con} \right\ r^* \right\}$ para $k = z$	$k_{ij}^{tw} = \bar{k}_s J_z$ $\bar{k}_s = \frac{k_s}{A'}$ $J_z = \frac{\pi}{2} \delta r_{ij}^{con4}$
Otsubo (2016)	-	-	$k_{ij}^{tw} = \frac{16}{3} G^* \theta_{ij}^{tw} \frac{r_{ij}^{con3}}{r_{ij}} \pm \frac{3}{16} \pi \mu r_{ij}^{con} \frac{1 - \theta_{ij}^{tw}}{\Delta \varphi_{tw}}$ $\Delta \varphi_{tw} = \frac{3}{16 G^* r_{ij}^{con3}} \pm \frac{3}{16} \pi \mu \Delta N r_{ij}^{con} + \frac{\Delta M_{tw} \mp \frac{3}{16} \pi \mu \Delta N r_{ij}^{con}}{\theta_{ij}^{tw}}$	

Fonte: Produção da própria autora.

2.3.4 Interação com paredes e superfícies rígidas

As formulações anteriormente apresentadas foram descritas considerando apenas o caso de contato entre partículas. Entretanto, pode haver situações em que partículas interagem com paredes ou superfícies ditas rígidas.

Nesta situação, as forças e momentos são escritos como caso particular dos primeiros. Para que isso ocorra é necessário que o tamanho, a rigidez e a massa inercial das paredes sejam muito maiores do que os valores correspondentes aos das partículas a serem estudadas.

Inicia-se pela interpenetração δ_{iw} entre partícula i e parede w decorrente de uma interação, esta é dada por:

$$\delta_{iw} = d_{iw} - r_i, \quad (117)$$

onde d_{iw} é dado pela distância entre o centro da partícula i e a face da parede w . Já a medida de deformação na região deste contato pode ser escrita como:

$$\varepsilon_{iw} = \frac{\delta_{iw}}{r_i}. \quad (118)$$

Considerando que r_w , m_w , E_w e G_w tendem a infinito; as equações correspondentes ao raio equivalente, massa equivalente, módulo de elasticidade equivalente e módulo de elasticidade transversal equivalente do contato entre partícula i e parede w passam a ser iguais a:

$$r^* = r_i, \quad m^* = m_i, \quad E^* = E_i \quad \text{e} \quad G^* = G_i. \quad (119)$$

Dessa forma, todas as expressões derivadas anteriormente para interação entre duas partículas também podem ser utilizadas.

2.4 SOLUÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DO SISTEMA

As forças e momentos totais que atuam em uma partícula i em um determinado instante de tempo t , correspondente à configuração atual do sistema, são dependentes das posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares de todas as outras partículas nesse mesmo instante de tempo (para o caso

geral), e podem ser escritos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i^{tot} &= \hat{\mathbf{f}}_i^{tot}(\mathbf{x}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, 2, 3, \dots, N_p \\ \mathbf{m}_i^{tot} &= \hat{\mathbf{m}}_i^{tot}(\mathbf{x}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, 2, 3, \dots, N_p. \end{aligned} \quad (120)$$

Lembra-se que as equações que governam a dinâmica do sistema são:

$$m_i \mathbf{a}_i = \mathbf{f}_i^{tot} \text{ e } j_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \mathbf{m}_i^{tot}, \quad i = 1, 2, \dots, N_p. \quad (121)$$

Estas formam um sistema de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem fortemente acoplado que geralmente requer uma solução numérica (CAMPELLO, 2016).

A seguir será apresentado brevemente um método para a solução numérica proposto por Campello (2016). Este é uma generalização da metodologia proposta por Zohdi (2012), tratando-se de um método de iteração de ponto fixo com regra do trapézio generalizado (para mais detalhes, consultar Campello (2016)).

Inicialmente, torna-se necessário estabelecer um intervalo de interesse dado pelos instantes t_0 e t_f , onde t_0 é o instante inicial de estado conhecido e t_f consiste no instante final do intervalo em que seu estado é desconhecido. Este intervalo de tempo deve ser discretizado em instantes $t_0, t_1, t_2, t_3, \dots, t_i, t_{i+1}, t_f$, sendo mais interessante e por simplicidade, adotar $t_0 = 0$ s. Define-se que entre dois instantes quaisquer, a configuração correspondente ao instante t_i é a configuração de referência (configuração conhecida) e a configuração correspondente à t_{i+1} consiste na configuração atual. Assim, a partir da consideração de $i = 0$ e do conhecimento sobre a configuração de referência correspondente, determinam-se posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares das partículas na configuração atual com base na configuração de referência. Após suas obtenções, faz-se $i \leftarrow i + 1$, ou seja, a configuração que nesta análise era a atual no próximo intervalo de instantes de tempo passará a ser a configuração de referência e para o novo instante, deve-se determinar a configuração atual. Esta metodologia é repetida até que o instante t_{i+1} seja igual a t_f . Este tipo de abordagem caracteriza a descrição do movimento como sendo do tipo Lagrangiana atualizada.

Com o intuito de que não haja confusão entre notação dos índices de tempo e das partículas, será adotado que $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ consiste no intervalo de tempo

entre dois instantes consecutivos quaisquer, $t = t_i$ corresponde ao instante de tempo da configuração de referência e $t + \Delta t = t_{i+1}$ é o instante que corresponde a configuração atual.

A partir da integração no tempo das Equações 121 entre o instante t e o instante $t + \Delta t$, obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{m_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot} dt, \\ \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{1}{J_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot} dt. \end{aligned} \quad (122)$$

As integrais do lado direito da Equação 122, por não poderem ser obtidas analiticamente devido seus integrandos não serem funções conhecidas, são aproximadas através do emprego do método do trapézio generalizado. A partir disso, pode-se escrever que:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot}(\tau) d\tau &\approx \left[\phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t) + (1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) \right] \Delta t, \\ \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot}(\tau) d\tau &\approx \left[\phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t) + (1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) \right] \Delta t, \end{aligned} \quad (123)$$

onde $0 \leq \phi \leq 1$. Assim, ao considerar o método de Euler explícito, adota-se $\phi = 0$; para método de Euler implícito, adota-se $\phi = 1$; no caso do método do trapézio clássico, adota-se $\phi = 1/2$.

Substituindo Equação 123 em Equação 122, obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \left[\phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t) + (1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) \right], \\ \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{\Delta t}{J_i} \left[\phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t) + (1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) \right]. \end{aligned} \quad (124)$$

Os vetores velocidade $\mathbf{v}_{i,m}$ e velocidade angular $\boldsymbol{\omega}_{i,m}$ de uma partícula i em um instante intermediário t_m entre t e $t + \Delta t$ podem ser aproximados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} v_{i,m} &= \frac{1}{\Delta t} [x_i(t + \Delta t) - x_i(t)], \\ \omega_{i,m} &= \frac{1}{\Delta t} \alpha_i^\Delta(t + \Delta t), \end{aligned} \quad (125)$$

onde é adotado $\alpha_i^\Delta(t) = 0$ de forma implícita. A partir da Equação 125, tem-se:

$$\begin{aligned} x_i(t + \Delta t) &= x_i(t) + v_{i,m} \Delta t \text{ e} \\ \alpha_i^\Delta(t + \Delta t) &= \omega_{i,m} \Delta t. \end{aligned} \quad (126)$$

Utilizando as interpolações na Equação 125, obtém-se:

$$\begin{aligned} v_{i,m} &\cong [1 - \phi] v_i(t) + \phi v_i(t + \Delta t), \\ \omega_{i,m} &\cong [1 - \phi] \omega_i(t) + \phi \omega_i(t + \Delta t), \quad 0 \leq \phi \leq 1. \end{aligned} \quad (127)$$

Substituindo Equação 127 na Equação 126, chega-se a:

$$\begin{aligned} x_i(t + \Delta t) &= x_i(t) + [1 - \phi] v_i(t) \Delta t + \phi v_i(t + \Delta t) \Delta t, \\ \alpha_i^\Delta(t + \Delta t) &= [1 - \phi] \omega_i(t) \Delta t + \phi \omega_i(t + \Delta t) \Delta t. \end{aligned} \quad (128)$$

As expressões apresentadas na Equação 128, com $v_i(t + \Delta t)$ e $\omega_i(t + \Delta t)$ dadas por Equação 124 e com $i = 1, 2, \dots, N_p$, constituem um sistema de equações. Destaca-se que as posições, rotações incrementais, velocidades e velocidades angulares de todas as partículas podem ser obtidas no caso de $x_i(t)$, $v_i(t)$ e $\omega_i(t)$ sejam conhecidos. Porém, sua solução não pode ser realizada de forma direta, pois Equação 124 envolve $f_i^{tot}(t + \Delta t)$ e $m_i^{tot}(t + \Delta t)$, que são funções de todas as posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares no instante $t + \Delta t$. Assim, torna-se necessário recorrer a métodos iterativos. Neste trabalho, adota-se um método de ponto fixo.

O método do ponto fixo envolve um contador de iterações K . Inicialmente tem-se $K = 0$ e realiza-se a seguinte estimativa inicial:

$$\begin{aligned} x_i^K(t + \Delta t) &= x_i(t) + v_i(t) \Delta t, \\ v_i^K(t + \Delta t) &= v_i(t), \\ \alpha_i^{\Delta,K}(t + \Delta t) &= \omega_i(t) \Delta t, \\ \omega_i^K(t + \Delta t) &= \omega_i(t). \end{aligned} \quad (129)$$

Para cada partícula i , sendo que $i = 1, 2, \dots, N_p$, deve-se calcular as

forças e momentos totais no instante $t + \Delta t$ com base nas equações apresentadas nos itens anteriores:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i^{tot,K+1}(t + \Delta t) &= \hat{\mathbf{f}}_i^{tot} \left[\mathbf{x}_j^K(t + \Delta t), \mathbf{v}_j^K(t + \Delta t), \boldsymbol{\alpha}_j^{\Delta,K}(t + \Delta t), \boldsymbol{\omega}_j^K(t + \Delta t) \right] \\ \mathbf{m}_i^{tot,K+1}(t + \Delta t) &= \hat{\mathbf{m}}_i^{tot} \left[\mathbf{x}_j^K(t + \Delta t), \mathbf{v}_j^K(t + \Delta t), \boldsymbol{\alpha}_j^{\Delta,K}(t + \Delta t), \boldsymbol{\omega}_j^K(t + \Delta t) \right]. \end{aligned} \quad (130)$$

Logo após, deve-se atualizar os vetores de velocidades translacionais e velocidades angulares:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \left[\phi \mathbf{f}_i^{tot,K+1}(t + \Delta t) + (1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) \right], \\ \boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{\Delta t}{J_i} \left[\phi \mathbf{m}_i^{tot,K+1}(t + \Delta t) + (1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) \right]. \end{aligned} \quad (131)$$

Posteriormente, atualiza-se as posições e rotações incrementais conforme apresentado:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \left[(1 - \phi) \mathbf{v}_i(t) + \phi \mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) \right] \Delta t, \\ \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K+1}(t + \Delta t) &= \left[(1 - \phi) \boldsymbol{\omega}_i(t) + \phi \boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) \right] \Delta t. \end{aligned} \quad (132)$$

A partir deste ponto, é possível calcular os erros:

$$\begin{aligned} \text{error}(\mathbf{x}) &= \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t) \right\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t) \right\|}, \\ \text{error}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) &= \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K}(t + \Delta t) \right\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \left\| \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K+1}(t + \Delta t) \right\|}. \end{aligned} \quad (133)$$

Tendo-se estabelecidos critérios de convergência, $tolx$ e $tol\alpha^\Delta$, referentes às posições e rotações incrementais, com magnitude pequena (valor típico de 10^{-6} , onde se observa que quanto mais precisa for a solução, menores deverão ser os valores dos critérios citados). No caso de $\text{error}(\mathbf{x}) \leq tolx$ e $\text{error}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) \leq tol\alpha^\Delta$, tem-se que a solução convergiu. E desta forma, deve-se atualizar as rotações totais $\boldsymbol{\alpha}_i(t + \Delta t)$, adotar $t \leftarrow t + \Delta t$ e repetir as etapas apresentadas para o próximo passo de tempo. Entretanto, se $\text{error}(\mathbf{x}) > tolx$ ou $\text{error}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) > tol\alpha^\Delta$, tem-se que a solução não convergiu e se deve fazer $K \leftarrow K + 1$ e repetir os cálculos das equações 130 a 133 juntamente com a verificação da convergência.

3 PROPOSTA DE UM MODELO DE RESISTÊNCIA AO MOVIMENTO ROTACIONAL

A formulação proposta neste trabalho tem como base Johnson (1985), Campello (2015) e Campello (2018). Como dito anteriormente, Campello (2018) propôs um modelo de resistência ao movimento rotacional simplificado, onde o *twisting* é contemplado de maneira indireta e sem rigidez propriamente adequada para a torção.

Serão consideradas duas configurações sucessivas, a configuração de referência (instante t^r) e a configuração atual (instante $t = t^r + \Delta t$), onde os pontos C^r e C correspondem aos pontos de contato da partícula i com a partícula j nas configurações citadas, respectivamente. O plano tangente ao contato na configuração atual receberá a denominação de plano π , onde este é perpendicular ao vetor n_{ij} e tem por base os vetores $e_1^\partial, e_2^\partial, e_3^\partial$. O ponto denominado por P consiste na indicação da localização do ponto C^r na configuração de referência no plano tangente. Essas considerações estão ilustradas na Figura 15.

Figura 15 – Partícula em contato com uma superfície

Fonte: Adaptado de Campello (2015, p.115).

O vetor deslocamento Δx_i do centro da partícula i entre as

configurações de referência e atual pode ser definido como:

$$\Delta \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^r, \quad (134)$$

onde os vetores $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_i^r$ são os vetores posição do centro da partícula nas configurações atual e de referência, respectivamente. Já em decorrência da movimentação da partícula durante contato, pode-se escrever que o vetor $\mathbf{r}_C^r$, correspondente ao vetor entre o centro da partícula e o ponto de contato na configuração de referência, consiste em uma rotação do vetor $\mathbf{r}_C$, vetor entre centro da partícula e ponto de contato na configuração atual, a partir do emprego de um tensor rotação $\mathbf{Q}_\Delta$ (vide Equação 5). Assim, pode-se escrever que:

$$\mathbf{r}_C^r = \mathbf{Q}_\Delta \mathbf{r}_C. \quad (135)$$

Na Figura 15, apresentada anteriormente, pode-se observar que um arco menor liga o ponto de contato C^r da configuração de referência ao ponto de contato C da configuração atual. Este arco menor pode ser entendido como o resultado do rolamento (no sentido estrito) da partícula ocorrido entre os instantes t e $t + \Delta t$. Campello (2015) considera que a aproximação deste arco por um vetor $\Delta \mathbf{r}$ é adequada para pequenos valores de Δt . O vetor $\Delta \mathbf{r}$ pode ser definido da seguinte forma:

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}_C - \mathbf{r}_C^r = \mathbf{r}_C - \mathbf{Q}_\Delta \mathbf{r}_C = (\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Delta) \mathbf{r}_C = r_i (\mathbf{I} - \mathbf{Q}_\Delta) \mathbf{n}_{ij}. \quad (136)$$

As projeções dos vetores $\Delta \mathbf{x}_i$ e $\Delta \mathbf{r}_i$ no plano tangente são dadas por

$$\Delta \mathbf{x}|_\pi = \Delta \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_1^\partial \mathbf{e}_1^\partial + \Delta \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_2^\partial \mathbf{e}_2^\partial \mathbf{e} \quad (137)$$

$$\Delta \mathbf{r}|_\pi = \Delta \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_1^\partial \mathbf{e}_1^\partial + \Delta \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_2^\partial \mathbf{e}_2^\partial. \quad (138)$$

Nesta mesma figura em questão, também é possível constatar que o vetor momento de resistência ao *twisting* terá apenas componente na direção de $\mathbf{n}_{ij}$, enquanto que o vetor momento de resistência ao rolamento terá componentes apenas nas direções $\mathbf{e}_1^\partial$ e $\mathbf{e}_2^\partial$. Destaca-se que a proposta de modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting*, apresentada neste trabalho, tem como princípio não considerar parcela do movimento relacionado ao *twisting* de forma indireta no momento de resistência ao rolamento, como apresentado por Campello (2018) apesar de proporcionar resultados coerentes e até certo ponto adequados aos exemplos

aplicados. Portanto, neste modelo será estimado o momento de resistência ao rolamento e momento de resistência ao *twisting* separadamente sem contribuições indiretas.

3.1 FORMULAÇÃO PROPOSTA DE UM MODELO DE RESISTÊNCIA AO ROLAMENTO E AO *TWISTING*

Este modelo tem como premissa que a área de contato entre as partículas é circular e apresenta um raio denominado por r_{ij}^{con} , como observa-se na Figura 16.

Figura 16 – Área de contato entre duas partículas no formato circular

Fonte: Produção da própria autora.

Com a consideração de tratar-se de um problema geométrico, onde tem-se um triângulo retângulo de hipotenusa r_i e catetos h_i e r_{ij}^{con} (o mesmo é considerado em relação a partícula j), pode-se escrever:

$$\begin{aligned} r_{ij}^{con\ 2} + h_i^2 &= r_i^2 \\ r_{ij}^{con\ 2} + h_j^2 &= r_j^2 \\ h_i + h_j &= \|x_i - x_j\| \end{aligned} \quad (139)$$

Com a solução do sistema de equações apresentado acima, tem-se que:

$$h_i = \frac{1}{2} \left(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - \frac{r_j^2 - r_i^2}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right) \Rightarrow A_{ij}^c = \pi r_{ij}^{con\ 2} = \pi r_i^2 - h_i^2, \quad (140)$$

onde A_{ij}^c é a área de contato. Destaca-se que o equacionamento adotado neste trabalho foi apresentado por Zohdi (2014).

A partir disto, pode-se estender o movimento de uma partícula sobre um plano para um caso geral em que duas partículas quaisquer estão em contato, conforme apresenta a Figura 17 a seguir. O plano tangente ao contato continuará a ser denominado por π , e apresenta-se um versor normal a este, chamado de $\mathbf{n}_{ij}$, coincidente com a direção do versor do vetor $\Delta\mathbf{x}_{ij}$, que é resultante da subtração entre os vetores posição das partículas i e j .

Figura 17 – Partículas em contato

Fonte: Produção da própria autora.

O modelo de resistência ao movimento rotacional proposto neste trabalho consiste na consideração de um modelo viscoelástico Kelvin-Voigt, ou seja, uma mola puramente elástica em paralelo a um amortecedor viscoso tanto para o modelo de resistência ao rolamento como para o de resistência ao *twisting*.

Como definido no modelo proposto por Campello (2018), o vetor de velocidade angular relativa, ω_{ij} , é dado pela Equação 100. O vetor velocidade

angular relativa relacionado ao rolamento pode ser obtido da seguinte maneira:

$$\omega_{ij}^{rol} = \omega_{ij} - \omega_{ij}^{tw} = \omega_{ij} - \omega_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}. \quad (141)$$

Inicialmente, será considerado que há aderência sem ocorrência de rolamento. Para este cenário, o vetor momento de resistência ao rolamento tentativa, $\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}$, pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial} = -k_{ij}^{rol} \Delta \theta_{ij}^{rol,trial} - d_{ij}^{rol} \omega_{ij}^{rol}, \quad (142)$$

onde o coeficiente de rigidez da mola é igual a:

$$k_{ij}^{rol} = k_{ij}^{atr} r^*{}^2 = 8G^* \sqrt{r^* |\delta_{ij}|} r^*{}^2, \quad (143)$$

(módulo de elasticidade transversal está definido na Equação 72) e o parâmetro viscoso do amortecedor é dado por:

$$d_{ij}^{rol} = \xi^r d_{ij}^{rol,crit} = 2\xi^r \sqrt{j^* k_{ij}^{rol}}, \quad (144)$$

sendo:

$$j^* = \left(\frac{1}{j_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{j_j + m_j r_j^2} \right)^{-1}. \quad (145)$$

Em relação ao vetor rotação tentativa da mola de rolamento, este pode ser obtido por meio da seguinte equação:

$$\Delta \theta_{ij}^{rol,trial} = \Delta \theta_{ij}^{rol,r} + \Delta \theta_{ij}^{\Delta rol,trial}, \text{ onde } \Delta \theta_{ij}^{\Delta rol,trial} = \int_{t^r}^t \omega_{ij}^{rol} \tau d\tau. \quad (146)$$

Considerando

$$\int_{t^r}^t \omega_{ij}^{rol} \tau d\tau \cong \omega_{ij}^{rol} \Delta t, \quad (147)$$

tem-se

$$\Delta \theta_{ij}^{rol,trial} \cong \Delta \theta_{ij}^{rol,r} + \omega_{ij}^{rol} \Delta t. \quad (148)$$

Essa aproximação é válida quando o valor de Δt é pequeno como o requerido para o emprego da solução numérica empregada. Com o vetor rotação da configuração de referência $\Delta \theta_{ij}^r$, este deve ser projetado na direção do plano tangente de contato para que resulte no vetor rotação da mola de rolamento:

$$\Delta \theta_{ij}^{rol,r} = \Delta \theta_{ij}^r - \Delta \theta_{ij}^{tw,r} = \Delta \theta_{ij}^r - \Delta \theta_{ij}^r \cdot \mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}. \quad (149)$$

A direção do momento de resistência ao rolamento tentativa, $\mathbf{s}_{ij}^{rol,trial}$, pode ser definida da seguinte forma:

$$\mathbf{s}_{ij}^{rol,trial} = \frac{\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}}{\|\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}\|}. \quad (150)$$

O critério a ser empregado para a determinação da ocorrência ou não do rolamento pode ser escrito da seguinte maneira:

$$G \mathbf{m}_{ij}^{rol} = \|\mathbf{m}_{ij}^{rol}\| - \mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\|, \quad (151)$$

onde se:

$$\begin{cases} G \mathbf{m}_{ij}^{rol} \leq 0, \text{ tem-se que a hipótese é válida (não ocorre rolamento);} \\ G \mathbf{m}_{ij}^{rol} > 0, \text{ tem-se que a hipótese não é válida (ocorrência de rolamento).} \end{cases} \quad (152)$$

Pode-se destacar que na segunda parcela da subtração do lado direito da igualdade da Equação 151, tem-se o momento máximo de resistência ao rolamento, ou limite estático de rolamento, dado por:

$$\|\mathbf{m}_{ij}^{rol,máx}\| = \mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\|, \quad (153)$$

onde acima do qual ocorre o rolamento entre as partículas. Este conceito é totalmente análogo ao empregado na determinação das forças de atrito, vide item 2.3.2.

No caso de a hipótese formulada ser inválida, há a ocorrência do rolamento e o vetor rotação da mola de rolamento não será igual ao vetor de rotação tentativa. O vetor rotação pode ser calculado a partir da condição de equilíbrio, onde o momento no conjunto mola-amortecedor deve ser igual ao momento total atuante que neste cenário se trata do momento máximo de resistência ao rolamento. Tem-se:

$$\mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \mathbf{s}_{ij}^{rol} = k^{rol} \Delta\theta_{ij}^{rol} + d^{rol} \omega_{ij}, \quad (154)$$

sendo que ao isolar a variável desejada, o vetor rotação de rolamento pode ser escrito da seguinte forma:

$$\Delta\theta_{ij}^{rol} = \frac{1}{k^{rol}} \mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \mathbf{s}_{ij}^{rol} - d^{rol} \omega_{ij}. \quad (155)$$

Em relação ao caso em que a hipótese é válida, adotar-se-á que $\mathbf{m}_{ij}^{rol}$, $\Delta\theta_{ij}^{rol}$ e $\mathbf{s}_{ij}^{rol}$ são iguais a $\mathbf{m}_{ij}^{rol,trial}$, $\Delta\theta_{ij}^{rol,trial}$ e $\mathbf{s}_{ij}^{rol,trial}$, respectivamente.

Em relação ao modelo de resistência ao *twisting*, alguns resultados da teoria da elasticidade apresentados por Johnson (1985) serão empregados como base para estabelecer o modelo.

Segundo Johnson (1985), a tensão de cisalhamento distribuída em uma área de contato com formato circular entre duas esferas elásticas, consiste em:

$$q(r) = q_0 \left[r_{ij}^{con}{}^2 - r^2 \right]^{-1/2} \text{ para } r \leq r_{ij}^{con}, \quad (156)$$

onde r_{ij}^{con} é o raio da área de contato pela qual o esforço está distribuído, r corresponde a distância entre o ponto de contato e ponto a ser estudado, e q_0 é o valor máximo de esforço aplicado. Já o momento resistente ao movimento rotacional em questão pode ser definido como:

$$M^{tw} = \int_0^{r_{ij}^{con}} q(r) \cdot 2\pi r \cdot dr = \frac{4\pi}{3} r_{ij}^{con}{}^3 q_0. \quad (157)$$

Johnson (1985) ainda destaca que esta tensão dada pela Equação 156 gera uma rotação de corpo rígido em uma esfera, e esta rotação correspondente a:

$$\theta^{tw} = \frac{\pi q_0}{4G}. \quad (158)$$

Considerando que a rotação θ^{tw} corresponde a rotação total de duas partículas em contato e que seja igual a soma das rotações de cada uma das partículas envolvidas, substituindo o parâmetro q_0 da Equação 157 em 158, tem-se que:

$$\theta^{tw} = \theta_i^{tw} + \theta_j^{tw} = \frac{3}{16 r_{ij}^{con}{}^3} \left(\frac{1}{G_i} + \frac{1}{G_j} \right) M^{tw}. \quad (159)$$

A partir da Equação 159, pode-se escrever que:

$$M^{tw} = \frac{16}{3} r_{ij}^{con}{}^3 G_{tw}^* \theta^{tw}. \quad (160)$$

Assim, considerando um modelo de mola para descrever a rotação de *twisting*, pode-se dizer que o coeficiente de rigidez de uma mola linear em relação ao *twisting* é dado por:

$$k^{tw} = \frac{16}{3} r_{ij}^{con}{}^3 G_{tw}^*, \quad (161)$$

onde o módulo de elasticidade transversal equivalente a ser calculado da seguinte forma:

$$\frac{1}{G_{tw}^*} = \frac{1}{G_i} + \frac{1}{G_j} = \frac{G_i + G_j}{G_i G_j} \rightarrow G_{tw}^* = \frac{G_i G_j}{G_i + G_j}. \quad (162)$$

Como dito anteriormente, trata-se de um modelo de resistência ao *twisting* com base em um modelo viscoelástico de Kelvin-Voigt. Sendo assim, tem-se

que introduzir a parcela viscosa na equação do momento resistente ao *twisting*.

Como adotado para o modelo de resistência ao rolamento, inicialmente será considerado que ocorre aderência, ou seja, sem deslizamento por torção na área de contato. Dessa forma, o vetor momento de resistência ao *twisting* tentativa, neste trabalho, será estimado por meio da seguinte equação:

$$\mathbf{m}_{ij}^{tw,trial} = -k_{ij}^{tw} \Delta \theta_{ij}^{tw,trial} - d_{ij}^{tw} \dot{\omega}_{ij}^{tw}, \quad (163)$$

onde k_{ij}^{tw} é a constante da mola linear, d_{ij}^{tw} consiste em um parâmetro de amortecimento que está associado à dissipação de energia e o vetor $\dot{\omega}_{ij}^{tw}$ é fruto da projeção de $\dot{\omega}_{ij}$ dada por $\dot{\omega}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij} \mathbf{n}_{ij}$. O vetor de rotação tentativa da mola de *twisting*, $\Delta \theta_{ij}^{tw,trial}$, pode ser obtido como apresentado a seguir:

$$\Delta \theta_{ij}^{tw,trial} = \Delta \theta_{ij}^{tw,r} + \Delta \theta_{ij}^{\Delta tw,trial}, \quad (164)$$

sendo que $\Delta \theta_{ij}^{tw,r}$ é o vetor rotação conhecido na configuração de referência que é dado pela projeção do vetor $\Delta \theta_{ij}^r$ na direção do *twisting* dada por $\Delta \theta_{ij}^r \cdot \mathbf{n}_{ij} \mathbf{n}_{ij}$, $\Delta \theta_{ij}^{\Delta tw,trial}$ consiste no vetor incremento de rotação tentativa estimado para o par de partículas. O vetor incremento de rotação tentativa relacionado ao *twisting* pode ser determinado da seguinte forma:

$$\Delta \theta_{ij}^{\Delta tw,trial} = \int_{t_r}^t \dot{\omega}_{ij}^{tw} \tau d\tau \cong \dot{\omega}_{ij}^{tw} \Delta t. \quad (165)$$

Em relação a direção do momento de resistência ao *twisting*, $\mathbf{s}_{ij}^{tw,trial}$, esta é coincidente com o vetor normal ao plano de contato, definido por $\mathbf{n}_{ij}$.

O critério a ser empregado para a determinação da ocorrência de deslizamento por *twisting* foi baseado em um momento máximo (ou limite estático de *twisting*) conforme determinado em Johnson (1985), e pode ser escrito da seguinte maneira:

$$H \mathbf{m}_{ij}^{tw} = \|\mathbf{m}_{ij}^{tw}\| - \left(\frac{3\pi}{16} \mu_S \right) \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| r_{ij}^{con}, \quad (166)$$

onde se:

$$\begin{cases} H \mathbf{m}_{ij}^{tw,trial} \leq 0, \text{ tem-se que a hipótese é válida (não ocorre deslizamento);} \\ H \mathbf{m}_{ij}^{tw,trial} > 0, \text{ tem-se que a hipótese não é válida (ocorrência de twisting).} \end{cases} \quad (167)$$

Como feito no modelo de resistência ao rolamento, ressalta-se que a segunda parcela da subtração do lado direito da igualdade da Equação 166, consiste no momento máximo de resistência ao deslizamento por *twisting* (ou limite estático de *twisting*):

$$\| \mathbf{m}_{ij}^{tw, \text{máx}} \| = \left(\frac{3\pi}{16} \mu_S \right) \| \mathbf{f}_{ij}^{con} \| r_{ij}^{con}, \quad (168)$$

acima do qual ocorre o movimento rotacional de deslizamento por torção na área de contato entre as partículas, e também é análogo ao empregado na determinação das forças de atrito, vide item 2.3.2.

Para casos em que a hipótese é válida, pode-se considerar que $\mathbf{m}_{ij}^{tw} = \mathbf{m}_{ij}^{tw, \text{trial}}$, $\Delta \theta_{ij}^{tw} = \Delta \theta_{ij}^{tw, \text{trial}}$ e $\mathbf{s}_{ij}^{tw} = \mathbf{s}_{ij}^{tw, \text{trial}}$. Já no caso de a hipótese ser inválida, há a ocorrência do deslizamento por torção e o vetor rotação não será igual ao vetor de rotação tentativa, entretanto, é mantida a direção do momento de resistência ao *twisting* previamente determinada. Assim, o vetor rotação pode ser calculado a partir da condição de equilíbrio apresentada a seguir

$$\left(\frac{3\pi}{16} \mu_S \right) \| \mathbf{f}_{ij}^{con} \| r_{ij}^{con} \mathbf{s}_{ij}^{tw} = k_{ij}^{tw} \Delta \theta_{ij}^{tw} + d_{ij}^{tw} \boldsymbol{\omega}_{ij}^{tw}, \quad (169)$$

sendo que a partir desta, o vetor rotação pode ser escrito da seguinte forma:

$$\Delta \theta_{ij}^{tw} = \frac{1}{k_{ij}^{tw}} \left[\left(\frac{3\pi}{16} \mu_S \right) \| \mathbf{f}_{ij}^{con} \| r_{ij}^{con} \mathbf{s}_{ij}^{tw} - d_{ij}^{tw} \boldsymbol{\omega}_{ij}^{tw} \right]. \quad (170)$$

Com o objetivo de arbitrar o valor do parâmetro de amortecimento, d_{ij}^{tw} , será realizada uma analogia entre a rotação de torção das partículas e a vibração de um sistema massa-mola-amortecedor de um grau de liberdade. Tem-se que o movimento angular pode ser descrito por θ_{ij}^{tw} , e a equação que governa o sistema consiste em:

$$j_{tw}^* \ddot{\theta}_{ij}^{tw} + d_{ij}^{tw} \dot{\theta}_{ij}^{tw} + k_{ij}^{tw} \theta_{ij}^{tw} = 0. \quad (171)$$

onde o momento de inércia é j_{tw}^* , a rigidez da mola linear é k_{ij}^{tw} e coeficiente do amortecedor é d_{ij}^{tw} .

Assume-se que a solução seja do seguinte tipo:

$$\begin{aligned}
\theta_{ij}^{tw} &= C e^{st} \\
\dot{\theta}_{ij}^{tw} &= s C e^{st} \\
\ddot{\theta}_{ij}^{tw} &= s^2 C e^{st}
\end{aligned} \tag{172}$$

Reescrevendo a equação 171, tem-se:

$$j_{tw}^* s^2 C e^{st} + d_{ij}^{tw} s C e^{st} + k_{ij}^{tw} C e^{st} = 0 \text{ e} \tag{173}$$

$$C e^{st} \left(j_{tw}^* s^2 + d_{ij}^{tw} s + k_{ij}^{tw} \right) = 0. \tag{174}$$

Sabe-se que a solução trivial consiste na consideração de que $C = 0$ já que e^{st} não é nulo. Sendo assim, pode-se escrever que:

$$j_{tw}^* s^2 + d_{ij}^{tw} s + k_{ij}^{tw} = 0. \tag{175}$$

$$s^2 + \frac{d_{ij}^{tw}}{j_{tw}^*} s + \frac{k_{ij}^{tw}}{j_{tw}^*} = 0. \tag{176}$$

Ao solucionar a equação de segundo grau apresentada, tem-se como raízes:

$$s_{1,2} = -\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*} \pm \sqrt{\left(\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*}\right)^2 - \frac{k_{ij}^{tw}}{j_{tw}^*}}. \tag{177}$$

Pode-se escrever que:

$$\theta(t) = s_1 e^{\left[-\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*} + \sqrt{\left(\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*}\right)^2 - \frac{k_{ij}^{tw}}{j_{tw}^*}}\right]t} + s_2 e^{\left[-\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*} - \sqrt{\left(\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*}\right)^2 - \frac{k_{ij}^{tw}}{j_{tw}^*}}\right]t}. \tag{178}$$

Pode-se adotar que o parâmetro de amortecimento crítico $d_{ij}^{tw, crit}$ consiste no valor constante de amortecimento d_{ij}^{tw} que conduz o radical da Equação 177 a ser nulo. Assim, tem-se:

$$\left(\frac{d_{ij}^{tw}}{2j_{tw}^*}\right)^2 - \frac{k_{ij}^{tw}}{j_{tw}^*} = 0 \rightarrow d_{ij}^{tw, crit} = 2\sqrt{k_{ij}^{tw} j_{tw}^*}. \tag{179}$$

Definindo-se a taxa de amortecimento como o quociente entre constante de amortecimento e parâmetro de amortecimento crítico, esta constante viscosa pode ser escrita da seguinte forma:

$$d_{ij}^{tw} = 2\xi^{tw} \sqrt{j_{tw}^* k_{ij}^{tw}}, \tag{180}$$

onde ξ^{tw} é a taxa de amortecimento do sistema (valor a ser adotado) e j_{tw}^* , momento de inércia equivalente, consiste em:

$$\dot{j}_{tw}^* = \frac{\dot{j}_i \dot{j}_j}{\dot{j}_i + \dot{j}_j}. \quad (181)$$

Com o objetivo de elucidar a aplicação do modelo proposto, apresenta-se o algoritmo no Quadro 3.

Quadro 3 – Algoritmo do modelo de resistência ao movimento rotacional proposto

Algoritmo. Modelo de resistência ao movimento rotacional	
1.	Detecção do contato entre partículas ou entre partícula e parede e cálculo da interpenetração
2.	Cálculo do raio da área de contato circular
3.	Especificação da taxa de amortecimento tanto para o rolamento quanto para o <i>twisting</i> , do coeficiente de resistência ao rolamento e do coeficiente de atrito estático
4.	Cálculo do vetor velocidade angular relativa (ω_{ij}) e suas projeções quanto ao rolamento e <i>twisting</i> ω_{ij}^{rol} e ω_{ij}^{tw} .
5.	Determinação do vetor unitário normal ao plano tangente de contato (direção em torno da qual ocorre o <i>twisting</i>)
6.	Realização da projeção do vetor rotação da configuração de referência na direção desse versor normal ao plano tangente de contato ($\Delta\theta_{ij}^{tw,r}$) e determinação da parcela quanto ao rolamento ($\Delta\theta_{ij}^{rol,r}$)
7.	Cálculo do vetor momento de resistência ao rolamento tentativa ($m_{ij}^{rol,trial}$)
8.	IF $G(m_{ij}^{rol}) = \ m_{ij}^{rol,trial}\ - \ m_{ij}^{rol,máx}\ \leq 0$ THEN Adotar $m_{ij}^{rol} = m_{ij}^{rol,trial}$, $\Delta\theta_{ij}^{rol} = \Delta\theta_{ij}^{rol,trial}$ e $s_{ij}^{rol} = s_{ij}^{rol,trial}$ ELSE Desprezar $\Delta\theta_{ij}^{rol,trial}$ Adotar $s_{ij}^{rol} = s_{ij}^{rol,trial}$ e $m_{ij}^{rol} = m_{ij}^{rol,máx}$ Determinar $\Delta\theta_{ij}^{rol}$ END IF
9.	Cálculo do vetor momento de resistência ao <i>twisting</i> tentativa ($m_{ij}^{tw,trial}$)
10.	IF $H(m_{ij}^{tw}) = \ m_{ij}^{tw,trial}\ - \ m_{ij}^{tw,máx}\ \leq 0$ THEN Adotar $m_{ij}^{tw} = m_{ij}^{tw,trial}$, $\Delta\theta_{ij}^{tw} = \Delta\theta_{ij}^{tw,trial}$ e $s_{ij}^{tw} = s_{ij}^{tw,trial}$ ELSE Desprezar $\Delta\theta_{ij}^{tw,trial}$ Adotar $s_{ij}^{tw} = s_{ij}^{tw,trial}$ e $m_{ij}^{tw} = m_{ij}^{tw,máx}$ Determinar $\Delta\theta_{ij}^{tw}$ END IF
11.	Cálculo do vetor momento resistente total
12.	Cálculo do vetor rotação total ($\Delta\theta_{ij}$)

Fonte: Produção pela própria autora.

3.2 VALIDAÇÃO E APLICAÇÃO DO MODELO PROPOSTO

Tem-se por objetivo apresentar exemplos numéricos para ilustrar a validade e/ou aplicação do comportamento da formulação do modelo de resistência ao movimento rotacional proposta neste trabalho. Como foi dito na seção 1.3, houve uma dificuldade em encontrar exemplos simples compostos por uma ou duas partículas com solução analítica ou numérica na literatura para validação do modelo de resistência proposto. Assim, a maior parte dos exemplos analisados a seguir não possui solução de referência. São exemplos propositadamente simples, tal que sua resposta possa ser antecipada (ao menos do ponto de vista qualitativo) e assim o comportamento do modelo avaliado. Espera-se, portanto, contribuir (ainda que de forma tímida) para o preenchimento desta lacuna e que esses exemplos possam servir como soluções de referência para que futuramente pesquisadores os empreguem para testar e validar suas formulações. A seguir, são apresentados os seguintes exemplos: (i) partícula submetida ao *twisting* puro sobre uma superfície rígida; (ii) partícula sob rolamento e *twisting* em contato com superfície rígida; (iii) partícula sob velocidades angular e translacional sobre uma superfície rígida; (iv) partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática; (v) desmoronamento de uma pilha de partículas.

3.2.1 Uma partícula submetida ao *twisting* puro sobre uma superfície rígida

Neste exemplo de validação, tem-se uma esfera i sobre um plano horizontal, apresentando um vetor velocidade $\mathbf{v}$ nulo e uma velocidade angular ω_{y0} de 10 rad/s, como pode ser visto na Figura 18. Pretende-se com este exemplo verificar se o comportamento do modelo proposto corresponde ao de um sistema massa-mola-amortecedor. Por ausência de valores de referência na literatura, o modelo proposto por Campello (2018) será empregado para comparação. A autora reitera que se trata de um modelo de resistência ao movimento rotacional que não faz distinção entre rolamento e *twisting*, e, portanto, este modelo não é consistente com a Física do problema a ser estudado. Destaca-se que a rigidez da mola considerada no modelo de Campello (2018) é proposta para o rolamento propriamente dito. Isto pode ser visto

como uma deficiência do modelo em questão quando aplicado em problemas com partículas submetidas a torção relativa, sendo também apresentada por quase todos os modelos disponíveis na literatura.

Figura 18 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro sobre superfície rígida

Fonte: Produção da própria autora.

Com o intuito de empregar o modelo proposto por Campello (2018) para uma comparação consistente com o modelo proposto neste trabalho, adotou-se que os momentos máximos atingidos em cada modelo (dados pelas equações 103 e 168) fossem aproximadamente iguais e com isso, obteve-se um valor de coeficiente de resistência ao rolamento de 0,01. Esta pequena magnitude para o coeficiente de resistência ao rolamento pode ser explicada, pois se tem o momento máximo de resistência ao *twisting* dependente do raio da área de contato enquanto o momento máximo de resistência ao rolamento é função do raio equivalente (que neste caso, pode ser adotado igual ao raio da partícula por se tratar de um contato entre partícula e parede). Destaca-se que há uma diferença significativa na ordem de grandeza de cada raio que influencia diretamente na magnitude do coeficiente de resistência em questão. Os parâmetros adotados para esta simulação numérica são:

- raio da esfera: $r_i = 0,005 \text{ m}$;
- massa específica da partícula: $\rho = 1.056 \text{ kg/m}^3$;
- coeficiente de Poisson: $\nu = 0,49$;
- módulo de elasticidade: $E = 4,0 \times 10^7 \text{ Pa}$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito:

$$\xi^{con} = \xi_t = 0,25;$$

- coeficiente de resistência ao rolamento: $\mu_R = 0,01$ (coeficiente aplicado no modelo proposto por Campello (2018));
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting*: Simulação 1 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,0$; Simulação 2 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,3$; Simulação 3 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 1,0$; e Simulação 4 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 1,5$.
- coeficientes de atrito estático e o dinâmico (entre partícula e plano horizontal): $\mu_S = \mu_D = 0,8$;
- aceleração da gravidade: $g = 9,81 \text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-5} \text{ s}$ (integração com método explícito).

Para a simulação 1 (taxa de amortecimento nula), sabe-se que o comportamento da partícula deverá ser similar ao sistema de um oscilador massa-mola de um grau de liberdade, sendo a mola do tipo puramente elástica. A equação do movimento deste problema possui uma solução harmônica e se tem um valor de amplitude constante que é dependente das condições de contorno iniciais. Estas considerações são válidas para a rotação em torno do eixo y, a velocidade angular ω_y , momento resistente ao *twisting* e energia cinética rotacional a partir de um certo instante de tempo, e isto pode ser observado nos resultados obtidos com a aplicação dos modelos que estão ilustrados na Figura 19 (rotação em torno do eixo y em função do tempo), Figura 20 (velocidade angular versus tempo), Figura 21 (momento resistente ao *twisting* em função do tempo) e Figura 22 (energia cinética rotacional versus tempo).

Apesar dos resultados obtidos com a formulação de Campello (2018) serem qualitativamente adequados e o modelo proporcionar uma maior dissipação de energia (vide Figura 22) quando comparados com os valores obtidos com o modelo proposto neste trabalho, destaca-se que são quantitativamente diferentes. Ressalta-se que a amplitude e o período resultantes no modelo proposto por Campello (2018) são inferiores aos resultantes do modelo aventado. Isto é consequência de o coeficiente de rigidez da mola no modelo proposto por Campello (2018) ser quatro vezes superior ao coeficiente de rigidez da mola considerada no modelo proposto.

Reitera-se que a rigidez da mola do modelo de Campello (2018) foi concebida para o rolamento propriamente dito e não apresenta conexão com a física do problema de torção. Já a rigidez da mola do modelo apresentado aqui é baseada na solução da Teoria da Elasticidade especificamente para o problema em questão, portanto, apresenta consistência física.

Figura 19 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 1 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo.

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 20 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 1 - Evolução da velocidade angular com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 21 – Uma partícula submetida a *twisting* puro. Simulação 1 - Momento resistente ao *twisting* em relação ao tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 22 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 1 - Energia cinética rotacional em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Ao considerar um valor diferente de zero para taxa de amortecimento do modelo de resistência ao *twisting* proposto, tem-se a contribuição do elemento viscoso no comportamento partícula. O segundo valor considerado para ξ^{tw} foi de 0,3, um valor que representa um amortecimento subcrítico por estar entre 0 e 1, onde tem-se a variação no espaço, momento resistente ou energia cinética rotacional caracterizada por diminuições progressivas com o passar do tempo até que sua magnitude se torne insignificante (desprezível), ou seja, próxima de zero. Os resultados obtidos estão apresentados da Figura 23 à Figura 26. Já o terceiro e quarto valores para taxa de

amortecimento são 1,0 e 1,5, respectivamente. O valor unitário caracteriza o amortecimento crítico e o valor de 1,5 corresponde ao amortecimento supercrítico. Como era esperado, tem-se que após um ponto de máximo, há um decréscimo sem oscilação em função do tempo e o decréscimo no caso do amortecimento crítico ocorre com maior rapidez que no caso do amortecimento supercrítico. Isto pode ser observado nos resultados obtidos da Figura 27 à Figura 34.

Figura 23 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 2 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 24 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 2 - Evolução da velocidade angular com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 25 – Uma partícula submetida a *twisting* puro. Simulação 2 - Momento resistente ao *twisting* em relação ao tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 26 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 2 - Energia cinética rotacional em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 27 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 3 - Evolução da rotação em torno do eixo y e com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 28 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 3 - Evolução da velocidade angular com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 29 – Uma partícula submetida a *twisting* puro. Simulação 3 - Momento resistente ao *twisting* em relação ao tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 30 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 3 - Energia cinética rotacional em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 31 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 4 - Evolução da rotação em torno do eixo y com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 32 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 4 - Evolução da velocidade angular com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 33 – Uma partícula submetida a *twisting* puro. Simulação 4 - Momento resistente ao *twisting* em relação ao tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 34 – Uma partícula submetida ao *twisting* puro. Simulação 4 - Energia cinética rotacional em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

3.2.2 Partícula sob rolamento e *twisting* em contato com superfície rígida

Este exemplo se trata de uma aplicação do método de resistência ao movimento rotacional proposto, onde se tem uma partícula esférica submetida a um vetor velocidade angular inicial $\omega_0 = 1,0; 1,0; 0$ que ocasiona rolamento e *twisting* de forma simultânea (vide Figura 35). Novamente, o modelo proposto por Campello (2018) foi empregado a título de comparação e o coeficiente de resistência ao rolamento foi adequado apresentado na seção 3.2.1. Os parâmetros adotados para

esta simulação numérica são:

- raio da esfera: $r_i = 0,005 \text{ m}$;
- massa específica da partícula: $\rho = 1.056 \text{ kg/m}^3$;
- coeficiente de Poisson: $\nu = 0,49$;
- módulo de elasticidade: $E = 4,0 \times 10^7 \text{ Pa}$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito:
 $\xi^{con} = \xi_t = 0,25$;
- coeficiente de resistência ao rolamento: $\mu_R = 0,01$;
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting*: Simulação 1 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,0$; Simulação 2 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,3$.
- coeficientes de atrito estático e o dinâmico (entre partícula e plano horizontal): $\mu_S = \mu_D = 0,8$;
- aceleração da gravidade: $g = 9,81 \text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-5} \text{ s}$ (integração com método explícito).

Figura 35 – Uma partícula sob rolamento e *twisting* em contato com superfície rígida

Fonte: Produção da própria autora.

As soluções numéricas obtidas neste trabalho estão apresentadas a seguir, onde na Figura 36 e na Figura 37 são ilustradas as evoluções dos momentos resistentes ao *twisting* e ao rolamento, respectivamente; rotação em torno do eixo x

apresentada na Figura 38 e rotação em torno do eixo y na Figura 39; já a velocidade angular – componente w_x ilustrada na Figura 40 e componente w_y na Figura 41; energia cinética rotacional está ilustrada na Figura 42. Destaca-se que os resultados obtidos para ambas as simulações de cada modelo são coincidentes em alguns instantes de tempo e por isso, tem-se uma dificuldade em visualizar separadamente nas figuras a seguir. Observa-se que a velocidade angular ω_x decai com o tempo (vide Figura 40) mesmo na Solução 1 em ambos os modelos, pois estes se propõem a paralisar a partícula e a oscilação é oriunda da ocorrência de aderência da partícula com a superfície rígida.

Figura 36 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Momento resistente ao *twisting* em função do tempo

Simulação 1 - Momento resistente ao *twisting* para o modelo proposto por Campello (2018) (detalhe entre $t=0,03s$ e $t=0,04s$)

Simulação 2 - Momento resistente ao *twisting* para o modelo proposto por Campello (2018) (detalhe entre $t=0,03s$ e $t=0,04s$)

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 37 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Momento resistente ao rolamento em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 38 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Rotação em torno do eixo x em função do tempo

Rotação em torno do eixo x para o modelo proposto (detalhe entre $t=0,015s$ e $t=0,075s$)

Rotação em torno do eixo x para o modelo proposto por Campello (2018) (detalhe entre $t=0,03s$ e $t=0,075s$)

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 39 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Rotação em torno do eixo y em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 40 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Velocidade angular em torno do eixo x em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 41 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Velocidade angular em torno do eixo y em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 42 – Uma partícula sob rolamento e *twisting*. Energia cinética rotacional em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

3.2.3 Partícula sob velocidades angular e translacional sobre uma superfície rígida

Este terceiro exemplo consiste em uma validação, e se trata do único exemplo simples encontrado pela autora na literatura. Ele foi apresentado por Otsubo (2016), onde uma esfera em contato com uma superfície rígida é submetida a uma velocidade v_{y0} constante de $5,0\text{ m/s}$ na direção vertical (na direção do eixo y do sistema de referência apresentado na Figura 43), uma velocidade angular, ω_{y0} , em

torno do eixo perpendicular ao plano de contato nos valores de 10rad/s , 30rad/s , 100rad/s e 200rad/s . Os seguintes parâmetros são utilizados na simulação:

- raio da esfera: $r_i = 0,025\text{m}$;
- massa específica da partícula: $\rho = 1.100\text{kg/m}^3$;
- coeficiente de Poisson: $\nu = 0,5$;
- módulo de elasticidade transversal: $G = 1,0 \times 10^6\text{Pa}$.
Consequentemente, adota-se um módulo de elasticidade de $E = 3,0 \times 10^6\text{Pa}$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito: $\xi^{con} = \xi_t = 0,5$;
- coeficiente de resistência ao rolamento: $\mu_R = 0,2$;
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting*: $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,1$.
- coeficientes de atrito estático e o dinâmico (entre partícula e plano horizontal): $\mu_S = \mu_D = 0,3$;
- aceleração da gravidade: $g = 9,81\text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-5}\text{ s}$ (integração com método explícito).

Figura 43 – Partícula sob velocidades angular e translacional sobre uma superfície rígida

Fonte: Produção da própria autora.

Os resultados obtidos por meio desta formulação são comparados aos

obtidos por Otsubo (2016). Inicia-se com a evolução do momento resistente ao *twisting* em função do tempo apresentada na Figura 44. Em seguida, apresenta-se velocidade angular normalizada em relação ao valor inicial do problema (ω_y/ω_{y0}) em função do tempo na Figura 45. Já na Figura 46, a evolução do momento resistente ao *twisting* em relação à rotação em torno do versor $\mathbf{y}$ é apresentada, e na Figura 47, ilustra-se a relação entre momento resistente ao *twisting* e a força normal de contato na direção de $\mathbf{y}$.

Figura 44 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução do momento resistente ao *twisting* com o tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 45 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução da velocidade angular normalizada em relação ao valor inicial com o tempo.

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 46 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução do momento resistente ao *twisting* em relação a rotação.

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 47 – Partícula sob velocidades angular e translacional. Evolução do momento resistente ao *twisting* em relação ao força de contato.

Fonte: Produção da própria autora.

Observa-se, nas figuras recentemente apresentadas, que há diferença entre os resultados obtidos por meio do emprego da formulação proposta e do modelo de resistência proposto por Otsubo (2016). É importante destacar que o modelo proposto por Otsubo (2016) contempla um deslizamento parcial durante o movimento de *twisting* e há a influência/contribuição da força normal como apresentado no item 2.3.3. A princípio, pode-se considerar que esta contribuição da força normal proporciona um crescimento gradativo do momento de resistência ao *twisting* proporcionando uma forma de um “sino” conforme apresentado na Figura 44. Diferentemente, o modelo aventado neste trabalho não possui uma influência direta da força normal e em decorrência disso, tem-se que um crescimento abrupto no valor de resistência ao momento para os primeiros instantes de tempo.

Independente disso, pode-se ressaltar que características das curvas apresentadas nos resultados de Otsubo (2016) são percebidas nos gráficos obtidos com os resultados da simulação numérica aqui apresentada. Por exemplo, na Figura 44 se têm todos os tramos descendentes das curvas para variadas velocidades angulares obtidas com resultados oriundos da formulação proposta coincidentes como ocorre nos resultados obtidos pelo autor citado. Já na Figura 45, observa-se em todos

os resultados obtidos com a velocidade angular normalizada tendem a um valor constante com o passar do tempo. Destaca-se também o comportamento relatado por Otsubo (2016) para a simulação com velocidade angular de $\omega_{y0} = 10 \text{ rad/s}$, em que esta chega a reduzir de forma a apresentar valores negativos ($\omega_y < 0$). Tanto na Figura 46 como na Figura 47, observa-se uma proximidade no comportamento das curvas. Em decorrências das comparações e observações realizadas, considera-se que qualitativamente, os resultados estão concordantes.

3.2.4 Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática

Este quarto exemplo se trata de uma aplicação que consiste em uma partícula, denominada aqui por 1, sob velocidade angular de 10 rad/s em torno do eixo y e em contato com uma partícula 2 que se encontra estática em contato com um plano rígido conforme pode ser visto na Figura 48. Os parâmetros adotados nesta simulação numérica são:

- raio das esferas: $r_i = 0,005 \text{ m}$;
- massa específica da partícula: $\rho = 1056,0 \text{ kg/m}^3$;
- coeficiente de Poisson: $\nu = 0,49$;
- módulo de elasticidade: $E = 4,0 \times 10^7 \text{ Pa}$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito:
 $\xi^{con} = \xi_t = 0,25$;
- coeficiente de resistência ao rolamento: $\mu_R = 0,2$;
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting*: Simulação 1 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,0$; Simulação 2 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,25$; Simulação 3 - $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,50$;
- coeficientes de atrito estático e o dinâmico (entre partículas):
 $\mu_S = \mu_D = 0,8$;
- aceleração da gravidade: $g = 9,81 \text{ m/s}^2$;

- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ s (integração com método explícito).

Figura 48 – Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática

Fonte: Produção da própria autora.

Inicialmente, pode parecer se tratar de um problema simples, onde se supõe que a energia cinética rotacional do sistema e a velocidade angular de cada partícula com o passar do tempo assumem valores correspondentes à metade dos iniciais. Entretanto, a parede sob a partícula 2 influencia de forma significativa os resultados obtidos, restringindo o seu movimento e introduzindo uma complexidade a mais ao problema. A autora explica que para uma melhor visualização dos resultados, exclusivamente, a rotação em torno do eixo y da partícula 1 será apresentada na Figura 50 e da partícula 2 na Figura 51. Já a velocidade angular em torno do eixo y, momento resistente ao *twisting* e energia cinética rotacional estão ilustradas na Figura 49, Figura 52 e Figura 53, respectivamente.

Como era esperado, a partícula 2 rompe a inércia e inicia sua rotação em decorrência do movimento da partícula 1, a magnitude da rotação será muito inferior ao desenvolvido pela partícula 1 e isso é decorrente da restrição de movimento proporcionada pela superfície rígida. Por consequência, a partícula 1 tem sua velocidade reduzida ao longo do tempo devido a existência deste contato. Observa-se na Figura 52 que o momento resistente ao *twisting* da partícula 1 é negativo indicando sentido oposto ao do movimento como esperado (independente da simulação a ser observada).

Figura 49 – Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática. Velocidade angular em torno do eixo y em função do tempo

Componente wy (detalhe entre t=0,0s e t=0,5s)

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 50 – Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática. Rotação em torno do eixo y da partícula 1 em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 51 – Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática. Rotação em torno do eixo y da partícula 2 em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 52 – Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática. Momento resistente ao *twisting* em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 53 – Partícula sob *twisting* em contato com uma partícula estática. Energia cinética rotacional em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

3.2.5 Desmoronamento de uma pilha de partículas

Este último exemplo é baseado no proposto por Campello (2016) e (2018) que consiste em uma pilha de partículas empilhadas verticalmente sobre um plano rígido e sem contenções laterais que será submetida a ação da aceleração da gravidade. Busca-se, por meio desta aplicação, representar o movimento das partículas durante um desmoronamento e compreender de forma mais adequada a dissipação de energia cinética total da amostra ao longo do tempo ao aplicar o modelo de resistência ao movimento rotacional proposto neste trabalho.

Para isso, gerou-se uma amostra sob a forma de um prisma de base quadrada com dimensões conforme a Figura 54. Esta terá suas paredes laterais retiradas repentinamente, a gravidade atuará na direção vertical (sentido $-y$), e proporcionará um desmoronamento brusco deste material granular até atingir uma configuração estática de equilíbrio. As partículas foram geradas por meio do emprego da metodologia a ser apresentada no Capítulo 4 com formato esférico e raio que segue uma distribuição gaussiana com valor médio de $\bar{r} = 0,02$ m e desvio padrão de $\sigma_r = 0,002$ m. Considerou-se uma variação de três vezes o desvio padrão em relação ao valor médio proporcionando valores de raio entre 0,014 m e 0,026 m. Os parâmetros empregados para a simulação são os mesmos empregados por Campello (2018) e estão apresentados a seguir:

- massa específica da partícula: $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$;
- coeficiente de Poisson: $\nu = 0,25$;
- módulo de elasticidade: $E = 2,0 \times 10^7 \text{ Pa}$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito:
 $\xi^{con} = \xi_t = 0,60$;
- coeficiente de resistência ao rolamento: $\mu_R = 0,30$;
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento e ao *twisting*: $\xi^{rol} = \xi^{tw} = 0,60$;
- coeficientes de atrito estático e o dinâmico (entre partículas):
 $\mu_S = \mu_D = 1,0$;

- aceleração da gravidade: $g = 9,81 \text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ (integração com método explícito).

Figura 54 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Configuração inicial

Fonte: Produção da própria autora.

A resistência ao movimento rotacional foi considerada empregando o modelo aventado neste trabalho e, posteriormente, o modelo proposto por Campello (2016) e (2018). Campello (2016) apresenta um modelo simplificado de resistência ao rolamento que foi adaptado do modelo apresentado por Yan et al. (2015), onde calcula-se apenas o momento de resistência ao rolamento por meio do produto entre coeficiente de resistência ao rolamento (μ_R), raio equivalente (r^*), norma do vetor força de contato ($\|f_{ij}^{con}\|$) e vetor velocidade angular relativa (ω_{ij}) e divide-se pela norma deste último vetor. A Figura 56 apresenta retratos da configuração do sistema de partículas em diferentes instantes de tempo para o modelo de resistência deste trabalho. Ressalta-se que visualmente, a configuração do sistema de partículas considerando o modelo de Campello (2018) é muito semelhante e por este motivo, os retratos não serão apresentados. Como esperado, a pilha de partículas adquire com o tempo uma forma de cone abatido. Isso indica que o modelo de resistência proposto pela autora tem a capacidade de reproduzir pilhas estáticas que é considerada fundamental para simular computacionalmente o comportamento de materiais granulares. A forma de cone abatido pode ser caracterizada por meio do chamado ângulo de repouso do material, neste trabalho, designado como θ . Esta grandeza será determinada conforme apresentado por Yan et al. (2015), onde inclinações

médias das faces de duas seções transversais ortogonais entre si e alinhadas com os eixos de referência (vide Figura 57) serão determinadas ($\theta_1, \theta_2, \theta_3$ e θ_4), para então, ser calculado um valor médio, i.e., o ângulo de repouso da amostra. Os valores dos ângulos de repouso juntamente com a configuração final da amostra no instante de tempo de 30s estão apresentados na Figura 58, onde observa-se a semelhança entre os resultados quanto ao modelo proposto neste trabalho e ao modelo proposto por Campello (2018), e uma ligeira diferença em relação ao modelo Campello (2016). O tempo total de 100s foi considerado para a simulação com o modelo de Campello (2016), onde o retrato para este último instante (Figura 58d) ilustra a tendência de desmoronamento contínuo da pilha com o tempo até a total “dissolução”. Já na Figura 55, a energia cinética normalizada é apresentada considerando a energia padrão de uma partícula de raio 0,02m e velocidade angular de 1°/s. Observa-se que o modelo aventado neste trabalho e o proposto por Campello (2018) apresentam um perfil satisfatório de dissipação. Contudo, o modelo proposto neste trabalho apresenta consistência quanto à Física do problema. Quanto ao modelo proposto por Campello (2016) por apresentar apenas a componente viscosa, este não é capaz de dissipar a energia cinética de forma adequada com o tempo e, dessa forma, entende-se o porquê da tendência ao desmoronamento por completo.

Figura 55 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Energia cinética normalizada em função do tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 56 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Retratos da configuração do sistema em diferentes instantes de tempo

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 57 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Medida média das inclinações das faces da pilha após desmoronamento

Fonte: Produção da própria autora.

Figura 58 – Desmoronamento de uma pilha de partículas. Configuração final da pilha para cada modelo de resistência ao movimento rotacional.

Fonte: Produção da própria autora.

4 PROPOSTA DE UM MÉTODO PARA GERAÇÃO DE AMOSTRAS DE PARTÍCULAS

O estudo do comportamento de materiais granulares com o método dos elementos discretos apresenta a necessidade da geração prévia de uma amostra composta por partículas. As amostras em questão podem ser geradas usando o próprio método dos elementos discretos (MED) ou não. Os métodos disponíveis na literatura podem ser classificados em dinâmicos ou de construção geométrica. Os métodos dinâmicos são os que têm a possibilidade de uso do MED, envolvendo uma pré-simulação das partículas geradas (com vistas, por exemplo, a uma deposição das mesmas no interior de um domínio ou recipiente), e com frequência fazem uso de algum procedimento para aumento gradual do raio das partículas geradas, até que haja o contato entre elas. Também podem envolver alguma movimentação das paredes que contêm a amostra, na direção do interior da mesma, buscando alterar as posições das partículas geradas de forma a aproximá-las e assim compactar a amostra como um todo, ou ainda envolver a deposição gravitacional das partículas. Destaca-se que essas técnicas são aplicadas com o intuito de obter amostras mais densas (isto é, com menos vazios entre as partículas) como resultado, porém em contrapartida, implicam um tempo maior de geração, já que envolvem uma simulação pelo MED. Já os métodos de construção geométrica têm como base a ocupação do domínio da amostra seguindo procedimentos puramente geométricos, e sem contemplar a alteração das posições ou dos raios das partículas geradas. As partículas são geradas com certo valor fixo de diâmetro e posicionadas de maneira a preencher o domínio (em geral tangenciando as suas vizinhas) sem a aplicação de nenhuma rotina que leve à alteração de suas posições previamente estabelecidas (BAGI, 2005).

É sabido que o comportamento de uma amostra composta de material granular é considerado complexo. Para uma simulação numérica mais realista, a geração da amostra deverá proporcionar não apenas o preenchimento de um domínio imposto com partículas por si só, mas também resultar em uma amostra que apresente certo valor de densidade e porosidade, e cujas partículas tenham dimensões condizentes com certa distribuição granulométrica, tais que reproduzam com fidelidade a amostra física do material de interesse.

Um breve histórico dos métodos de geração disponíveis na literatura

será apresentado a seguir, seguido de uma proposta de metodologia de geração de amostras densas com a imposição de uma curva granulométrica.

4.1 BREVE HISTÓRICO DOS MÉTODOS DE GERAÇÃO DE AMOSTRAS

Bernal, em 1959, foi o primeiro a usar recurso computacional para gerar arranjos de esferas de mesmo raio (neste trabalho chamadas de amostras homogêneas) para representar a estrutura de líquidos com modelo geométrico.

Lubachevsky e Stillinger (1990) propuseram um método baseado em adição aleatória para um número superior a 2000 discos. Nesta metodologia, as partículas são geradas com posições e velocidades iniciais aleatórias, e um certo raio inicial. Elas então se movimentam no interior de um domínio dado, e seus raios são progressivamente aumentados até que se atinja uma certa densidade ou fração sólida desejada. O algoritmo gera assim uma amostra relativamente compacta, porém cujas partículas têm dimensões finais que não possuem nenhuma conexão com alguma distribuição desejada.

Em 1998, a empresa Itasca *Consulting Group* usou o aumento do raio das partículas para obter amostras mais densas, onde a sobreposição de partículas (*overlapping*) não era permitida (CUI; O'SULLIVAN, 2003).

Já em 2001, Ferrez propôs a geração de amostras de esferas em um cilindro com o fundo fechado e abertura na parte superior. Inicialmente, são posicionadas esferas de grande diâmetro. Após esta etapa, os vazios são preenchidos com esferas de diâmetro médio. A densidade da amostra é calculada e se não atingido o valor desejado, os vazios presentes são preenchidos com pequenas esferas. Novamente, este método não permite a sobreposição de partículas. Então, a amostra é submetida à ação da gravidade e são aplicadas vibrações. O objetivo desta etapa é aumentar a densidade do arranjo (CUI; O'SULLIVAN, 2003).

Feng, Han e Owen (2003) propuseram três métodos para geração de amostras de partículas com discos de raios diferentes (amostra heterogênea). O primeiro, denominado *closed form algorithm*, é geométrico e consiste na criação de três discos e adição de novos discos sempre em contato com os já existentes. Esta etapa de adição é repetida até que o domínio esteja totalmente preenchido e após sua conclusão, os discos que estejam parcialmente fora do domínio são excluídos (Figura

59). Observa-se na Figura 59, a existência de grandes vazios entre as partículas e entre partículas e paredes. Isto pode ser considerado uma desvantagem apresentada por este algoritmo. Por este motivo, houve o desenvolvimento do próximo algoritmo a ser apresentado.

Figura 59 – Algoritmo *Advancing front-closed form*.

(a)

(b)

(a) situação final do processo de geração de partículas;

(b) arranjo final das partículas

Fonte: Produção pela própria autora.

O método subsequente, denominado por *open form algorithm*, também geométrico, gera partículas na base do domínio e este vai sendo preenchido em camadas (Figura 60). Inicialmente, as partículas são posicionadas na parte inferior do domínio e da esquerda para a direita. Ao final, todas as partículas que excedem o limite superior do domínio são excluídas e o arranjo adquire sua configuração final. Ressalta-se que os discos iniciais e finais de cada camada estão em contato com as paredes limites do domínio.

Figura 60 – Algoritmo *Advancing front-open form*

(a)

(b)

(c)

(a) primeira camada de partículas;

(b) camadas subsequentes e domínio totalmente preenchido;

(c) arranjo final das partículas.

Fonte: Produção pela própria autora.

O terceiro método proposto é dinâmico e foi denominado de *hopper to*

mix (Figura 61). Um arranjo regular de partículas é formado em uma tremonha sobre o domínio. Utilizando o método dos elementos discretos sob a ação da força gravitacional, o arranjo passa pela tremonha e as partículas então se misturam e são assentadas densamente no domínio do problema estabelecido.

Fonte: Produção pela própria autora.

No mesmo ano, Cui e O'Sullivan (2003) propuseram um algoritmo geométrico de geração de amostras bidimensionais (ver Figura 62). As partículas são inscritas em triângulos propostos de forma aleatória e outras partículas são centradas nos vértices dos triângulos. Destaca-se que este método foi estendido ao caso tridimensional com a utilização de tetraedros (observe Figura 63).

Figura 62 – Método da triangulação para casos bidimensionais:

- (a) triangulação dos pontos aleatórios (caso bidimensional)
 (b) círculos inscritos nos triângulos (caso bidimensional);
 (c) círculos centrados nos vértices.

Fonte: Produção pela própria autora.

Figura 63 – Método da triangulação para casos tridimensionais:

- (a) triangulação dos pontos aleatórios (caso tridimensional);
 (b) esferas inscritas nos tetraedros (caso tridimensional);
 (c) esferas centradas nos vértices.

Fonte: Produção pela própria autora.

Han, Feng e Owen (2005) desenvolveram um algoritmo aleatório (dinâmico) para geração de amostras com esferas. Este método propõe a criação de uma amostra inicial que será submetida à compressão. Essa compressão gera o deslocamento das partículas na direção da mesma tomando o cuidado para que não ocorra sobreposição entre estas. Para que isso não ocorra, cálculos geométricos são realizados em relação às posições dos elementos vizinhos de forma a estabelecer a distância máxima possível de ser percorrida. Em seguida, as partículas geradas passam por um processo de agitação. Após a finalização dessas etapas, o espaço acima das partículas é novamente preenchido por esferas (aleatoriamente) e a amostra é submetida à compressão e agitação outra vez. Este procedimento é repetido até que se preencha todo o domínio.

No mesmo ano, Bagi (2005) desenvolveu um método geométrico para geração de amostras bidimensionais, aleatórias e isotrópicas. Neste método, os raios dos discos obedecem a uma distribuição pré-estabelecida. Os discos são gerados e posicionados em contato com todo o domínio e com partículas existentes (*initial front*), tendo como resultado um vazio interno. Este vazio é então preenchido por novos discos gerados sempre em contato com os existentes, e a *initial front* é atualizada. Quando um determinado número de tentativas para preenchimento é realizado usando até pequenos discos e não há a possibilidade de alocá-los sem que ocorra sobreposição, o domínio é considerado preenchido.

Os autores Jerier et al. (2009) propuseram uma otimização do método elaborado por Cui e O'Sullivan (2003), onde há o preenchimento do mesmo tetraedro, porém, com mais esferas otimizando os valores dos raios das partículas em função

da sua localização (como nos vértices ou ponto médio das arestas ou no interior desta pirâmide).

No programa comercial PFC3D 7.00 da empresa Itasca *Consulting Group*, a geração da amostra consiste na criação de partículas de forma a atingir a porosidade desejada respeitando a curva granulométrica informada, entretanto, curiosamente não há a preocupação com a sobreposição de partículas no interior da amostra. As partículas são geradas e separadas em categorias estipuladas pelo usuário (ou os chamados “cestos” pelo programa), estas são definidas com base em um intervalo de valores para o raio e fração de volume. Os dados de entrada são: diâmetros e porcentagem de massa que passa por cada peneira, as dimensões do domínio e porosidade da amostra (ITASCA, 2021). Destaca-se que a possibilidade de posicionar partículas aleatoriamente sem a verificação de sobreposição não é uma adequada premissa para uma metodologia de geração de amostra, pois isto inviabiliza toda a análise dinâmica do sistema de partículas já que o método dos elementos discretos não é aplicável em cenários caracterizados por deformações relevantes das partículas, ou seja, busca-se uma interpenetração pequena em relação aos diâmetros das partículas em questão.

Já em relação ao programa Rocky DEM da empresa ESSS, as amostras podem ser geradas por meio do recurso de injeção contínua (*continuous injection*), onde há a criação conforme curva granulométrica especificada e lançamento das partículas para dentro do domínio da amostra de forma contínua ou sob fluxo periódico por meio de uma área de entrada (*inlet*). Esta área em questão pode ser de qualquer formato e tamanho a ser definido pelo usuário. Inicialmente, as partículas são geradas sobre esta região conforme taxa de fluxo de massa que deve ser estipulada. Quando atingida a quantia determinada de massa correspondente ao fluxo citado, estas são despejadas de uma certa altura e depositadas no interior do domínio sob a ação da aceleração da gravidade. A simulação termina quando os elementos discretos atingem uma posição de equilíbrio. Uma segunda forma de preencher o domínio, trata-se do preenchimento de volume (*volume fill feature*), onde todas as partículas são geradas conforme curva granulométrica desejada e tem sua posição determinada ao redor de um ponto com coordenadas especificadas pelo usuário. Suas posições estão delimitadas por paredes de geometria qualquer que indicam o domínio em que estas podem ser posicionadas.

As metodologias de geração de amostras disponíveis na literatura e as

implementadas nos *softwares* comerciais de método dos elementos discretos são capazes de criar amostras bastante densas. Entretanto, estas não conseguem propor partículas com dimensões que respeitem satisfatoriamente uma curva granulométrica imposta ou, por vezes, curvas para todos os tipos de granulometria (por exemplo, granulometria aberta, bem graduada ou uniforme).

A seguir, será apresentada uma metodologia para obtenção de amostras densas com imposição de curva granulométrica e porosidade. Ressalta-se que a metodologia proposta quanto a densificação da amostra é semelhante ao método de Han, Feng e Owen (2005), contudo a compressão da amostra não é controlada por cálculos geométricos e a amostra não passa por um processo de agitação.

4.2 METODOLOGIA PROPOSTA PARA OBTENÇÃO DE AMOSTRAS DENSAS COM CURVA GRANULOMÉTRICA E POROSIDADE IMPOSTAS

A metodologia de geração de amostras densas com curva granulométrica e porosidade impostas, apresentada a seguir, consiste no posicionamento aleatório das partículas no interior de um domínio, com o raio das partículas geradas sendo dado com base na equação proposta por Dang e Meguid (2010), seguida da consideração de uma deposição gravitacional no interior do domínio. A equação para determinação do valor do raio de uma partícula teve como origem o trabalho de Fu e Dekelbab (2003), que sofreu adaptação proposta por Dang e Meguid (2010). Sendo assim, a seguir, serão descritas brevemente as metodologias propostas nesses dois trabalhos citados, e destacada a diferença entre as equações propostas para o cálculo do raio das partículas durante a geração da amostra.

Fu e Dekelbab (2003) propuseram uma metodologia para geração de amostras baseada em duas etapas. Para problemas que envolvem grande número de partículas (a autora destaca que Fu e Dekelbab, em 2003, não definiram a magnitude deste parâmetro em questão), a amostra é gerada em camadas e cada uma passa pelas duas fases a serem descritas. A primeira etapa consiste em um algoritmo para simulação de um movimento das partículas geradas. Esta tem início com a geração de uma partícula com raio e posição aleatórios. O raio de cada partícula criada é determinado tendo como referência os parâmetros obtidos com a análise granulométrica experimental (realizada por meio de ensaio de peneiramento) do material a ser simulado numericamente, sendo essas características: as dimensões

das aberturas das malhas que compõem as peneiras e a porcentagem que passa em relação à massa por cada uma delas. Em seguida, esta partícula cai de uma distância correspondente à altura em que foi gerada no domínio, depositando-se no fundo deste. Uma nova partícula será gerada quando a anterior tiver atingido o fundo do domínio ou alguma outra partícula existente já previamente depositada, e sua rotação atingir valor nulo. O processo de geração seguido de deposição de cada partícula é repetido até que a amostra atinja a altura final desejada (que pode ser a espessura da camada ou a altura do próprio domínio, a depender da forma como foi estipulada sua criação). Ressalta-se que neste método, uma partícula apresentará vetor posição constante após sua deposição, mesmo que ocorra um choque com uma outra partícula recém gerada. A segunda etapa é caracterizada por uma segunda simulação dinâmica. Fu e Dekelbab (2003) consideraram que o algoritmo anterior gera amostras pouco densas, e assim este segundo algoritmo tem a função de realizar um empacotamento, ou seja, proporcionar um reajuste no posicionamento das partículas para atingir uma densidade maior. Nesse algoritmo, a equação de equilíbrio do movimento e consequentemente, as forças de campo gravitacional, atrito e contato são computadas na interação entre as partículas, e entre partículas e as paredes do domínio.

Faz-se a ressalva que a imposição de um vetor posição fixo para as partículas previamente depositadas mesmo quando ocorrem interações com as recém geradas não reflete o verdadeiro comportamento dinâmico da amostra. Entende-se que se trata apenas de uma tentativa de diminuição de esforços computacionais relacionados ao tempo que a simulação desta primeira etapa demandaria se estas interações fossem computadas. Entretanto, esta escolha gera a necessidade de aplicação da segunda etapa (a de empacotamento), na tentativa de aumentar a densidade da amostra criada. Alerta-se para o cenário caracterizado pelo limitado movimento das partículas que se encontram “soterradas”. Uma última observação é a não consideração da resistência ao rolamento, o que também implica uma pior representação do comportamento dinâmico da amostra, pois esta pode exercer grande influência no equilíbrio da partícula durante a sua deposição.

Dang e Meguid (2010) propuseram uma metodologia de geração de amostras em duas etapas que são distintas daquelas apresentadas por Fu e Dekelbab (2003). Inicialmente, este método propõe que o domínio desejado seja dividido em um número finito de subdomínios. Então, a primeira etapa do método em questão consiste

em gerar uma “subamostra”, referente a apenas um único dos subdomínios, respeitando uma curva granulométrica e um valor de porosidade desejados. Os raios das partículas são calculados em função dos parâmetros providos pela análise granulométrica experimental do material, onde se depende das dimensões de aberturas das malhas das peneiras empregadas e da porcentagem de partículas que passam por cada peneira em relação ao número total de partículas que se estima para a amostra que está sendo gerada. A criação das partículas é controlada pelo número de partículas geradas e mantida até se atingir o valor total de volume de sólidos. Após a geração das partículas, a subamostra se apresenta pouco densa, conseqüentemente os autores propõem a aplicação de uma tensão vertical de compressão seguida por uma agitação do subdomínio. Esta fase é finalizada quando a subamostra atinge a altura desejada. A partir disso, busca-se alcançar a estabilidade da subamostra. Dang e Meguid (2010) definem a condição de estabilidade como sendo o quociente entre a somatória das forças resultantes em cada elemento discreto e a somatória das forças de contato determinadas; também explicitam que o conjunto de partículas será considerado estável se esse parâmetro de condição de estabilidade for inferior ou no máximo igual a 0,01%. Já a segunda etapa é caracterizada pela criação de novas subamostras por meio do espelhamento da original (clonagem); essas são dispostas de forma a reproduzir a amostra maior com as dimensões finais desejadas, onde distribuição granulométrica e a porosidade continuam sendo respeitadas. Além disso, esta distribuição de conjuntos simétricos de partículas propõe manter o equilíbrio dos elementos discretos que anteriormente estavam em contato com alguma parede do subdomínio (que virá a ser suprimida nesta fase), substituindo a parede pelo contato com outra partícula de mesmo diâmetro (sendo este seu elemento simétrico ou espelhado). Dang e Meguid (2010) informaram que os resultados obtidos foram considerados adequados e que foi possível comprovar que, através do emprego da metodologia proposta por eles, gerou-se uma amostra em menos tempo.

Analisa-se que a metodologia proposta pelos autores em questão apresenta uma primeira fase caracterizada por um método do tipo dinâmico e uma segunda fase com o tipo construção geométrica. O emprego da metodologia dinâmica (caracterizada por aplicação de tensão vertical e movimentação das paredes que delimitam o domínio do problema, consideração da interação entre partículas e entre partícula e parede) possibilita a geração de uma amostra mais densa em relação a

metodologias puramente de construção geométrica. Sobre a forma de cálculo do raio da partícula a ser criada na primeira etapa, reitera-se que Fu e Dekelbab (2003) empregam a porcentagem de material que passa por cada peneira em relação à massa, enquanto Dang e Meguid (2010) adaptam tal equação por meio da consideração da porcentagem em relação ao número de partículas que passam pela peneira.

Outra observação a ser feita é sobre o parâmetro empregado para controlar a geração de amostras na proposta de Dang e Meguid (2010). A consideração do número de partículas e volume total de sólidos não é suficiente para proporcionar boa aderência entre curva granulométrica imposta e curva granulométrica numérica obtida com a geração da amostra, conforme se verá mais adiante. Na metodologia proposta pela autora, o parâmetro limitador para geração de novas partículas, considerando um par de peneiras por vez, é a massa retida na peneira de menor abertura do par correspondente. Esta consideração gera melhores resultados em termos de fidelidade à curva granulométrica, do que o método proposto por Dang e Meguid (2010), como será mostrado a seguir.

Ressalta-se que o objetivo da metodologia apresentada neste capítulo não é desenvolver um método de geração de amostras que tenha menor esforço computacional em relação ao método de Dang e Meguid (2010), mas sim, um método que proporcione uma melhor aderência entre a curva granulométrica imposta (ou desejada) e a curva granulométrica da amostra numérica, para todos os tipos de granulometria possíveis – ao mesmo tempo em que provenha uma condição densa para a amostra gerada.

A seguir, a metodologia para geração de amostras densas com curva granulométrica e porosidade impostas proposta neste trabalho é descrita detalhadamente.

O objetivo desta metodologia proposta é a criação de uma amostra (seja em uma única camada ou em camadas sobre camadas) de partículas depositadas por gravidade até se atingir a altura total desejada para a amostra, tal que suas partículas tenham dimensões que respeitem uma curva granulométrica imposta e ao mesmo tempo a amostra apresente um certo valor desejado de porosidade. A Figura 64 apresenta um esquemático sobre a metodologia a ser apresentada.

Figura 64 – Esquemático da metodologia proposta

Fonte: Produção pela própria autora.

A partir da definição de uma geometria qualquer para o domínio que conterá a amostra (neste trabalho, optou-se por uma caixa prismática de base retangular para as amostras tridimensionais), e das suas dimensões, pode-se determinar o seu volume total. Com o volume total e o valor de porosidade almejado para a amostra, pode-se calcular o volume total de partículas que a amostra deve possuir (reitera-se que aqui serão consideradas apenas partículas de formato esférico). Este cálculo é realizado a partir da porosidade, n , conforme expressões usuais da Física e da Mecânica dos Solos:

$$n = \frac{V_v}{V} = \frac{V - V_p}{V} \rightarrow V_p = V \times 1 - n, \quad (182)$$

onde V , V_v e V_p são os volumes total, de vazios e de partículas, respectivamente. Considerando a massa específica das partículas (quociente entre massa das partículas e volume das partículas), estima-se a massa total das partículas, m_p , que farão parte da amostra, conforme abaixo:

$$m_p = \rho_p \times V_p, \quad (183)$$

onde ρ_p e V_p são a massa específica das partículas e volume total de partículas, respectivamente. Sabe-se que esta massa total, quando submetida ao peneiramento no ensaio de granulometria, será parcialmente retida em cada uma das peneiras que

compõe a série de um total de $n_{peneiras}^{total}$ peneiras.

Tendo o conhecimento da massa total de partículas, juntamente com a porcentagem de massa que passa por cada peneira k , $\%Q_m^k$, sendo $k = 1, 2, \dots, n_{peneiras}^{total}$, e que as peneiras são numeradas da de maior para a de menor abertura de malha (Esquemático pode ser verificado na Figura 65 apresentada a seguir), é possível determinar a massa que ficaria retida de forma acumulada, $m_p^{ret-acum,k}$, em cada peneira por meio da seguinte equação:

$$m_p^{ret-acum,k} = 1 - \%Q_m^k \cdot m_p. \quad (184)$$

Já a massa retida em uma dada peneira, $m_p^{ret,k}$, consiste em:

$$m_p^{ret,k} = m_p^{ret-acum,k-1} - m_p^{ret-acum,k}, \quad (185)$$

onde $m_p^{ret-acum,k-1}$ é a massa retida acumulada na peneira de abertura imediatamente superior e $m_p^{ret-acum,k}$ é a massa retida acumulada na peneira de abertura para a qual se deseja determinar tal parâmetro. Destaca-se que para a peneira de maior abertura de malha do conjunto, o valor da massa retida acumulada é, naturalmente, igual ao da massa retida na peneira (ou seja, $m_p^{ret-acum,k=1} = m_p^{ret,k=1}$).

Figura 65 – Esquemático do peneiramento com massa total do domínio da amostra

Fonte: Produção pela própria autora.

Uma outra consideração importante no método proposto é a porcentagem que passa em relação ao número de partículas por cada peneira. Para isso, propõe-se determinar o diâmetro de uma partícula considerada padrão que fica retida na peneira de menor abertura de malha do respectivo par em estudo. Neste trabalho, o diâmetro da partícula padrão retida entre duas peneiras será estimado considerando o valor médio entre as dimensões das aberturas das malhas das duas peneiras envolvidas (considera-se aqui que o menor diâmetro que a partícula pode apresentar para ficar retida em uma certa peneira é o próprio valor da dimensão de abertura da malha da peneira em questão). Pode-se estimar o número de partículas que ficariam retidas na peneira de menor abertura do par estudado, $N_p^{ret,k}$, da seguinte forma:

$$N_p^{ret,k} = \frac{m_p^{ret,k} / \rho_p}{V_p^{padr\tilde{a}o}}, \quad (186)$$

onde $m_p^{ret,k}$ corresponde à massa retida na peneira k em questão, ρ_p é a massa específica das partículas e $V_p^{padr\tilde{a}o}$ é o volume da partícula padrão.

A partir do cálculo do número de partículas retidas em cada peneira, consegue-se determinar o número acumulado de partículas retidas em cada peneira

k , $N_p^{ret-acum,k}$, por meio da seguinte expressão:

$$N_p^{ret-acum,k} = N_p^{ret-acum,k-1} + N_p^{ret,k}, \quad (187)$$

sendo $N_p^{ret-acum,k-1}$ o número acumulado de partículas retidas na peneira de abertura de malha imediatamente superior e $N_p^{ret,k}$ o número de partículas retidas na peneira em questão. Ressalta-se que para a peneira de maior abertura de malha do conjunto, o valor do número acumulado de partículas retidas coincide, naturalmente, com o número de partículas retidas na peneira ($N_p^{ret-acum,k=1} = N_p^{ret,k=1}$).

A porcentagem em relação ao número de partículas que passam pela peneira é igual a:

$$\%Q_p^k = \frac{N_p - N_p^{ret-acum,k}}{N_p}, \quad (188)$$

onde se tem que $\%Q_p^k$ corresponde à porcentagem que passa em relação ao número de partículas para uma peneira, e N_p e $N_p^{ret-acum,k}$ são o número total de partículas que compõem a amostra e o número acumulado de partículas retidas, respectivamente.

Assim, para esta metodologia, os dados de entrada do algoritmo são: diâmetros correspondentes às aberturas das malhas das peneiras consideradas, porcentagem que passa pela peneira em relação ao número de partículas, e os valores de massa retida em cada uma das peneiras.

Considerando um conjunto de peneiras com uma quantidade total de $n_{peneiras}^{total}$, lembra-se que essas são tomadas aos pares, onde cada par deve ser composto por uma peneira de maior abertura de malha k e peneira $k+1$ correspondente à abertura imediatamente inferior no conjunto. Para cada par de peneiras, conforme ilustrado na Figura 65, a equação proposta por Dang e Meguid (2010) será empregada para a determinação do raio da partícula a ser gerada. Assim, tem-se:

$$r_i = \left[D_{k+1} + \text{Random} - \%Q_p^{k+1} \times D_k - D_{k+1} / \%Q_p^k - \%Q_p^{k+1} \right] / 2, \quad (189)$$

onde r_i corresponde ao raio adotado para a partícula i a ser criada, D_k e D_{k+1} são os diâmetros correspondentes às aberturas das peneiras em questão ($D_k > D_{k+1}$), $\%Q_p^k$ e $\%Q_p^{k+1}$ são os valores de porcentagem que passa em relação ao número de partículas pelas peneiras de aberturas D_k e D_{k+1} , respectivamente, e $Random$ é um número gerado aleatoriamente que deve ser superior a $\%Q_p^{k+1}$ e inferior a $\%Q_p^k$. A criação de partículas para cada par de peneiras ocorre até que se atinja um valor de massa igual ou superior à massa que deve ser retida na peneira de menor abertura de malha, denomina por k , segundo a curva granulométrica imposta.

Após a geração das partículas com valores de raio conforme a distribuição granulométrica atribuída, sua posição no interior do domínio é determinada aleatoriamente pelo algoritmo de acordo com as seguintes especificações:

- definição da altura/espessura h_0 de cada camada de partículas a ser criada (pode ser uma única camada compreendendo todo o domínio, ou várias camadas sequencialmente sobrepostas);
- preenchimento da camada com partículas posicionadas aleatoriamente em seu interior por meio de adição sequencial aleatória (*random sequence addition*, ou RSA) até atingir uma fração sólida desejada ϕ_0 .

O modelo *random sequence addition* consiste na geração de partículas com posição aleatória no interior dos limites definidos para o domínio sem a ocorrência de sobreposição até atingir uma certa densidade proporcionando uma amostra homogênea e isotrópica. No caso de gerar uma partícula que venha a apresentar uma interpenetração com uma existente, esta é descartada e uma nova é criada (TORQUATO; STILINGER, 2006). Destaca-se que a aplicação desse modelo requer o uso das técnicas de detecção de contado do método dos elementos discretos, conforme apresentado no capítulo 2. Em relação a fração sólida ϕ_0 mencionada anteriormente, esta não se trata da fração desejada para a amostra no seu estado final, mas sim de um valor almejado apenas para a camada em questão antes da ocorrência de sua deposição. Geralmente, este valor de fração sólida é inferior ao valor final.

Na sequência, a amostra é submetida à compactação por meio da ação da força de campo gravitacional e a movimentação das partículas é atualizada através do Método dos Elementos Discretos. Tem-se como consequência a acomodação das partículas novas sobre as existentes, a interação entre elas através da mecânica do contato e uma maior densidade da amostra que o valor inicial estabelecido para a camada recém gerada (ρ_0).

Todo este processo de geração e compactação é repetido para novas camadas até que se obtenha a altura total desejada H_d para a amostra. Na Figura 66, pode-se observar a metodologia de compactação da amostra ou de cada camada que comporá a amostra.

Fonte: Produção pela própria autora.

Ressalta-se que esta metodologia de compactação não aplica a técnica de aumento do raio das partículas durante sua operação. Isso que a diferencia do proposto no algoritmo de Lubachevsky e Stillinger (1990) e também de suas derivações. Esclarece-se que qualquer método que adote essa premissa, não consegue gerar uma amostra que tenha partículas com dimensões fiéis a distribuição granulométrica imposta.

Os aspectos que devem ser controlados para a obtenção de amostras com densidade próxima do desejado e eficiência computacional durante o processo são:

- especificação de parâmetros adequados para os materiais - tem-se o intuito de compactar o mais rapidamente possível as partículas que compõem a nova camada sem provocar ricocheteamento de partículas, que, por consequência, exige o estabelecimento de um intervalo de tempo menor para a resolução adequada da simulação;
- para uma melhor eficiência computacional, pode ser empregada uma integração no tempo explícita ao invés da implícita;
- adoção de uma fração sólida inicial média para cada camada (quociente entre volume de partículas por volume total da amostra), por exemplo $\phi_0 = 0,40$ nos casos bidimensionais e $\phi_0 = 0,25$ para casos tridimensionais;
- consideração do movimento rotacional entre partículas e o atrito, pelo menos, durante o processo de deposição. Essas considerações ajudarão a aumentar a magnitude da fração sólida obtida para as amostras.

Sendo assim, pode-se apresentar o algoritmo no Quadro 4 a seguir.

Quadro 4 – Algoritmo da metodologia proposta para geração de amostras densas a partir de uma curva granulométrica e porosidade imposta

Algoritmo. Metodologia proposta para geração de amostras a partir de uma curva granulométrica	
13.	Especificação das características do domínio (formato e dimensões)
14.	Fornecimento da espessura inicial da camada a ser criada
15.	Especificação da altura desejada H_d para o arranjo final de partículas (i.e., amostra final)
16.	Especificação dos diâmetros limites de cada peneira a ser considerada.
17.	Calcular e especificar a porcentagem que passa em relação ao número previsto de partículas e a massa retida na peneira inferior de cada par de peneiras considerado
18.	Fornecimento da força de compactação a ser aplicada
19.	Fornecimento dos dados para integração no tempo
20.	FOR $i = 1, \dots, n_s$ (n_s = número de camadas a serem geradas) DO:
	FOR $j = 1, \dots, n_p$ (n_p = número de partículas em cada camada) DO:
	altura atual = 0
	WHILE (altura atual < H_d) DO:
	Gerar uma nova camada sobre uma camada existentes via RSA
	FOR $k = 1, \dots, n_{peneiras}^{total}$ ($n_{peneiras}^{total}$ = número total de peneiras) DO:
	$l = k + 1$
	WHILE ($m_p^{ret-tot,k} < m_p^{ret,k}$) DO:
	Criar aleatoriamente partículas com diâmetro entre dimensões das aberturas das peneiras k e l
	END DO
	END DO
	Aplicar força de compactação e realizar simulação utilizando MED
	Calcular altura atual da amostra
	END DO
	END DO
	END DO

Fonte: Produção pela própria autora.

Ressalta-se que nas metodologias propostas por Fu e Dekelbab (2003), e Dang e Meguid (2010), a etapa de geração de partículas é finalizada quando o volume total de partículas é igual ao volume total de sólidos. A metodologia proposta pela autora, diferentemente, leva em consideração a massa retida em cada peneira como parâmetro de paralização de geração de elementos discretos no algoritmo. Essa consideração é fundamental e permitirá uma maior aderência entre curva granulométrica imposta (desejada) e curva granulométrica numérica. Esta observação pode ser comprovada por meio da análise das curvas granulométricas das amostras geradas e apresentadas a seguir. Ressalta-se que Dang e Meguid (2010) consideram em seu trabalho que o volume de sólidos é o resultado do produto entre a porosidade e o volume do domínio que conterá a amostra. Essa consideração é uma clara inconsistência, mediante a definição clássica de porosidade. A metodologia proposta aqui não emprega essa consideração, mas sim a Equação 182.

4.3 VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA

O método ora proposto foi implementado no programa SGEN e será validado nesta seção empregando (i) o exemplo de curva granulométrica apresentado por Dang e Meguid (2010), (ii) outras três curvas granulométricas de amostras de areia apresentadas por Pinto (2006) e, por último, (iii) uma curva granulométrica de uma amostra de areia obtida por meio de ensaio de peneiramento no Laboratório de Mecânica dos Solos do Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Todas as curvas mencionadas serão chamadas de “curvas impostas” para posterior comparação com a curva de origem numérica. Esclarece-se a dificuldade de encontrar artigos publicados com a curva granulométrica imposta e a numérica, geralmente os artigos apresentam apenas a curva numérica obtida sem fazer menção aos dados impostos. Em decorrência disso e com o objetivo de complementar a validação, estas mesmas amostras foram geradas também nos *softwares* comerciais PFC3D 7.00 da Itasca *Consulting Group, Inc.* e Rocky DEM da empresa ESSS.

Para geração das amostras no Rocky DEM com o intuito de validação, os parâmetros massa específica das partículas, módulo de elasticidade tanto da partícula como da parede (adotada mesma magnitude), coeficiente de Poisson, coeficiente de atrito estático e dinâmico entre partículas, e entre partícula e parede, coeficiente de restituição do contato normal, relação de abertura da malha da peneira (diâmetro da partícula) e porcentagem de massa que passa por esta foram especificados de acordo com o apresentado para cada exemplo adiante neste trabalho. O valor de massa total das partículas foi estimado conforme apresentado na Equação 183 da metodologia proposta no item 4.2 e recebeu um acréscimo para que houvesse o preenchimento máximo do domínio. Ou seja, partículas excedentes serão geradas em relação a massa total prevista, onde apenas aquelas que apresentam coordenada de posição vertical dentro do domínio permanecerão para compor a amostra final, as demais serão descartadas. Já o tempo de simulação foi de 1s para cada uma das gerações de amostras. Sobre a superfície de entrada de partículas, adotou-se a mesma forma e dimensões da seção transversal do domínio e esta está distante da borda superior do domínio na mesma magnitude da altura do paralelepípedo (formato a ser adotado nos exemplos). Ressalta-se que esta distância

foi adotada com tal valor para inibir o impedimento da entrada de novos elementos devido à proximidade entre partículas depositadas e superfície de entrada, e essa tomada de decisão permitiu que as partículas adentrassem livremente o domínio.

Deve-se destacar que o emprego de qualquer uma das metodologias foi realizado com a mesma quantidade de informações a respeito de cada curva granulométrica.

As informações necessárias, apresentadas por Dang e Meguid (2010), para o cálculo dos dados de entrada do algoritmo para geração da amostra estão resumidas na Tabela 2, apresentada a seguir. Ressalta-se que os diâmetros apresentados na tabela correspondem a abertura da malha das peneiras. Já a Figura 67 apresenta a curva granulométrica imposta para a geração da amostra de partículas.

Tabela 2 – Dados da curva granulométrica imposta 1 proposta por Dang e Meguid(2010)

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)
100	100,0%
80	95,0%
50	50,0%
20	2,0%
10	0,0%

Fonte: Adaptado de Dang e Meguid (2010, p. 88).

Fonte: Produção pela própria autora.

O domínio proposto neste trabalho para geração da amostra e validação do algoritmo consiste em um cubo com dimensões iguais a 0,50 m. Destaca-se que o domínio apresenta dimensões correspondentes a um pack parcial proposto pelos próprios autores, Dang e Meguid (2010), na realização da etapa 1 de seu método.

Ao considerar uma massa específica de $2.600,0 \text{ kg/m}^3$, uma porosidade de 0,38, e parâmetros fornecidos por Dang e Meguid (2010), calculou-se os dados de entrada que estão resumidos na Tabela 3. A quantidade de partículas será estimada tendo como base um volume de partículas determinado por meio da Equação 182 que sendo multiplicado pela massa específica do material, fornecerá a massa total da amostra a ser gerada (vide Equação 183). Os demais parâmetros necessários para o emprego da metodologia proposta neste trabalho são:

- propriedades elásticas das partículas: $E = 1,5 \times 10^7 \text{ N/m}^2$ e $\nu = 0,50$;
- coeficiente de atrito entre partículas e partícula-superfície: $\mu_S = \mu_D = 0,3$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito: $\xi^{con} = \xi_t = 0,20$;
- coeficiente de resistência ao rolamento para contato entre partículas e entre partícula e superfície: $\mu_R = 0,20$ (a resistência ao *twisting* não será considerada nesta etapa de deposição da amostra);
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento: $\xi^{rol} = 0,2$;
- aceleração da gravidade: $g = -9,81 \text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-5} \text{ s}$ (integração com método explícito - $\phi = 0$).

Tabela 3 – Curva imposta 1: dados de entrada para o algoritmo proposto

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)	Massa retida (kg)	Porcentagem que passa em relação ao nº de partículas (%)
100	100,0%	0,000	100,0%
80	95,0%	10,075	99,61%
50	50,0%	90,675	90,90%
20	2,0%	96,720	31,47%
10	0,0%	4,030	0,0%

Fonte: Produção pela própria autora.

A seguir, a Figura 68 apresenta as curvas granulométricas: imposta 1, a curva granulométrica obtida por Dang e Meguid (2010), a curva granulométrica resultante do emprego da metodologia proposta neste trabalho, a curva obtida do *software* PFC3D e pelo emprego do Rocky DEM. Inicialmente, é importante justificar a mudança de escala (de logarítmica para aritmética) efetuada para o eixo correspondente ao diâmetro das partículas. Esta foi feita para que melhor fossem observadas as diferenças entre as curvas obtidas e assim, a análise discorrida a seguir fosse mais bem compreendida. Em relação à figura em questão, constata-se que a curva granulométrica da amostra obtida com a metodologia proposta neste trabalho se apresentou praticamente coincidente com a curva analítica. Isso também pode ser comprovado ao analisar os valores de erro relativo em porcentagem entre o imposto e o resultado numérico obtido com o método proposto pela autora, e estes estão apresentados entre parênteses na Tabela 4. Com base nestas observações, afirma-se que a adoção da massa retida em cada peneira como fator limitador para geração de partículas com diâmetro entre pares de peneiras considerados, ao invés de empregar o volume total de sólidos como proposto pelos autores Dang e Meguid (2010), proporcionou uma amostra com curva granulométrica com grande aderência à curva analítica. Em relação a curva obtida por meio do PFC3D 7.00, atenta-se que o programa não apresentou um desempenho tão bom quanto a metodologia proposta neste trabalho pela autora, indicando que o controle por porosidade apenas não proporciona uma boa aderência a todos os pontos. A curva granulométrica obtida via aplicação do programa Rocky DEM pode ser considerada aderente à curva imposta. Entretanto, apesar do bom desempenho do programa em questão, destaca-se que o resultado obtido com o algoritmo proposto pela autora se aproximou mais dos valores impostos, e novamente, isso pode ser comprovado ao observar os valores de erros

relativos disponíveis na Tabela 4, na qual, a magnitude dos erros relativos determinados em relação a metodologia da autora estão entre 0,62 e 0,69% (em módulo), já para o emprego do Rocky DEM, apresentam-se entre 0,71 e 5,19% (em módulo). Complementarmente, para o PFC3D foram obtidos erros relativos entre 1,16% e 18,25% (em módulo).

Figura 68 – Curvas granulométricas numérica *versus* imposta

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 4 – Curva Imposta 1: comparativo com resultados numéricos

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação a massa				
	Curva imposta 1	Dang e Meguid (2010)	Metodologia proposta	PFC3D 7.00	Rocky DEM 4.4
100	100,0%	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)
80	95,0%	94,46% (-0,57%)	94,41% (-0,62%)	93,90% (-1,16%)	94,25% (-0,78%)
50	50,0%	62,77% (25,54%)	49,66% (-0,68%)	45,63% (-8,73%)	50,35% (0,71%)
20	2,0%	2,72% (36,00%)	1,99% (-0,69%)	1,63% (-18,25%)	2,10% (5,19%)
10	0,0%	0,00% (0,00%)	0,00% (0,00%)	0,00% (0,00%)	0,00% (0,00%)

Fonte: Produção pela própria autora.

A Figura 69 ilustra a amostra gerada por meio da metodologia proposta pela autora antes do processo de compactação e após a ocorrência deste processo, juntamente com a amostra gerada pelo PFC3D 7.00 e Rocky DEM. É imprescindível destacar a grande quantidade de sobreposições entre as esferas e o grande volume de vazios na amostra gerada pelo *software* PFC3D 7.00. Observa-se que este volume de vazios mais perceptível pode ser decorrente da menor quantidade de partículas criadas, que corresponde a um total de 2.405 elementos. É visível que a amostra obtida com o Rocky DEM é mais densa que a resultante do emprego do PFC3D, já que a primeira possui um total de 4.212 esferas (1,75 vezes maior que a do PFC3D). Já a amostra obtida no SGen é composta por 5.649 partículas, um número 2,35 vezes e 1,34 vezes maior de esferas que o obtido no emprego do PFC3D 7.00 e Rocky DEM 4.4, respectivamente.

Figura 69 – Amostras geradas com curva granulométrica proposta por Dang & Meguid (2010)

Fonte: Produção pela própria autora.

Ao analisar a amostra gerada pela metodologia proposta, pode-se determinar que a porosidade da mesma foi de 0,388 e que este valor está muito próximo do estipulado no início da sua geração apresentando um erro relativo em relação a porosidade imposta de -2,11%. Em relação ao Rocky DEM também foi possível a determinação da porosidade, sendo esta de aproximadamente 0,368 com erro relativo de 3,16%. Observa-se que este último valor é ligeiramente superior ao obtido com a metodologia proposta (considerando valores em módulo). Já Dang e Meguid (2010) obtiveram uma amostra com porosidade igual a 0,379 com erro relativo de 0,26%. No PFC3D não foi possível obter informações suficientes para a determinação da porosidade e por isso, este valor não será apresentado.

Uma maneira de avaliar a densidade de contatos da amostra de partículas é através do número de coordenação Z . Este pode ser calculado através da seguinte equação:

$$Z = \frac{2N_c}{N_p}, \quad (190)$$

sendo N_c , o número total de contatos entre partículas e N_p , o número total de partículas da amostra. Ressalta-se que este parâmetro não oferece nenhuma informação sobre a orientação destes contatos, sua localização, magnitude das forças de contato, formato e tamanho das partículas. Desta forma, este pode ser considerado como uma medida “global” da densidade de contatos. Após a finalização da etapa de compactação da amostra gerada, chegou-se à um número de coordenação de 4,597. Dang e Meguid (2010) determinaram um número de coordenação de 5,520 para o conjunto de partículas obtido, o que permite destacar uma diferença de 16,7% em relação ao obtido pelos autores. Ao analisar a curva granulométrica obtida por Dang e Meguid (2010), apresentada anteriormente na Figura 68, observa-se que a amostra apresenta uma maior porcentagem de massa passante pela peneira de abertura de 50mm, portanto um número maior de partículas com pequenas dimensões e esta característica tende a proporcionar maior número de contatos para a amostra e por consequência, um maior número de coordenação.

A autora tem a necessidade de explicar que a metodologia proposta por Dang e Meguid (2010) não foi passível de implementação, pois a aplicação do algoritmo implementado proporcionou resultados divergentes dos apresentados pelos autores em sua publicação tanto com a consideração do volume de sólidos como

sendo o produto da porosidade pelo volume do domínio conforme os autores apresentaram em sua publicação como o apresentado na Equação 182, permitindo concluir que há alguma etapa faltante em sua descrição e por isso, os demais exemplos de validação terão a aplicação apenas dos programas comerciais previamente citados para comparação.

As próximas três curvas granulométricas impostas representam materiais bem graduados, granulação aberta e granulometria uniforme. Com o intuito de ilustrar os três conceitos, apresenta-se a Figura 70. É importante ressaltar antes de introduzir tais definições que se propõem a realização da geração de amostras com tais curvas granulométricas impostas, por estas apresentarem características distintas e a ocorrência da aderência dos resultados obtidos com os analíticos podem indicar a robustez da metodologia proposta.

Figura 70 – Classificação quanto a distribuição granulométrica da amostra

Amostra bem graduada

Amostra com granulação aberta

Amostra com granulometria uniforme

Fonte: Produção pela própria autora.

Conforme pode ser observado na Figura 70, o termo bem graduado ou granulometria bem distribuída é empregado em materiais com dimensões de partículas que vão desde as menores às maiores. Já a granulação aberta caracteriza uma amostra que possui partículas com grande diâmetro e de pequeno diâmetro, ou seja, não há dimensões intermediárias. Já o conceito de granulometria uniforme está relacionado a partículas com dimensões muito parecidas entre si, ou seja, uma amostra que apresenta um pequeno desvio padrão em relação às dimensões de suas

partículas (amostra homogênea). Para se realizar esta classificação, foram empregados os conceitos relacionados a análise granulométrica das areias da Mecânica dos Solos. Destaca-se que os conceitos envolvidos não serão apresentados detalhadamente por não se tratar do foco deste trabalho. Para tal, recomenda-se a leitura de Pinto (2006).

Os dois parâmetros envolvidos nesta análise são coeficiente de não uniformidade (CNU) e coeficiente de curvatura (CC). O coeficiente de não uniformidade pode ser obtido da seguinte forma:

$$CNU = \frac{d_{60}}{d_{10}}, \quad (191)$$

onde, d_{60} e d_{10} correspondem aos valores de diâmetro abaixo dos quais 60% e 10% da massa de amostra se situa, respectivamente. Ressalta-se que quanto maior o valor obtido para o coeficiente de não uniformidade, mais bem graduada é a amostra. Pode-se afirmar, que este coeficiente retrata a amplitude das dimensões das partículas que compõem a amostra. Contudo, este parâmetro por si só não é eficiente.

Em relação ao coeficiente de curvatura, este está relacionado ao formato da curva granulométrica. Também possibilita a identificação de possíveis descontinuidades na distribuição granulométrica ou de concentrações de partículas com mesmas dimensões. O coeficiente em questão é calculado por:

$$CC = \frac{d_{30}^2}{d_{10} \times d_{60}}, \quad (192)$$

onde, d_{60} , d_{30} e d_{10} correspondem aos valores de diâmetro abaixo dos quais 60%, 30% e 10% da massa de amostra se situa, respectivamente. A amostra pode ser considerada bem graduada quando este coeficiente se situa entre 1 e 3. Ao se encontrar abaixo de 1, trata-se de uma curva com tendência a apresentar uma descontinuidade (granulação aberta); e um coeficiente acima de 3, curva granulométrica com tendência a uniformidade na parte central (granulometria uniforme).

Os domínios propostos para a geração das próximas três amostras consistem em um paralelepípedo com dimensões de 0,010 m por 0,010 m por 0,005 m de altura. A proposta destas dimensões teve como intuito a geração de amostras composta por esferas de diâmetro entre 0,057 mm e 5 mm, e com previsão de até 85.000 partículas. Salienta-se que em decorrência da altura imposta para o domínio,

não foi possível criar a amostra em camadas a serem compactadas umas sobre as outras, pois a previsão do número de partículas retidas para as primeiras peneiras era inferior a um neste cenário.

A Figura 71 apresenta a curva granulométrica imposta 2 com dados obtidos de Pinto (2006). Esta apresenta um coeficiente de não uniformidade igual a 6 e um coeficiente de curvatura de 0,5. Estes valores caracterizam a amostra com granulação aberta, isto pode ser observado e constatado entre os diâmetros 0,3 mm e 0,5 mm, aproximadamente, na curva granulométrica em questão.

Figura 71 – Curva granulométrica imposta 2

Fonte: Produção pela própria autora.

Os cálculos para obtenção dos dados de entrada com base na curva granulométrica foram realizados tendo como parâmetros adicionais: a massa específica das partículas de 2.600 kg/m^3 e porosidade de 0,38; e estão apresentados na Tabela 5 exibida em seguida. Destaca-se que a quantidade de pares de valores da curva foi proposta pela autora, onde se prezou por uma quantia suficiente de parâmetros para uma geração consistente de partículas. Os demais parâmetros utilizados são:

- propriedades elásticas das partículas: $E = 2,7 \times 10^7 \text{ N/m}^2$ e $\nu = 0,25$;
- coeficiente de atrito entre partículas e partícula-superfície:

$$\mu_S = \mu_D = 0,25;$$

- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito:

$$\xi^{con} = \xi_t = 0,90;$$

- coeficiente de resistência ao rolamento para contato entre partículas e entre partícula e superfície: $\mu_R = 0,30$ (a resistência ao *twisting* não será considerada nesta etapa de deposição da amostra);

- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento:

$$\xi^{rol} = 0,9;$$

- aceleração da gravidade: $g = -9,81 \text{ m/s}^2$;

- passo de integração: $\Delta t = 1,0 \times 10^{-7} \text{ s}$ (integração com método explícito - $\phi = 0$).

Tabela 5 – Curva imposta 2: dados de entrada para o algoritmo proposto

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)	Massa retida (kg)	Porcentagem que passa em relação ao n° de partículas (%)
10,000	100,0%	0,000000000	100,000%
5,000	100,0%	0,000000000	100,000%
2,184	91,3%	0,000070122	99,999%
1,438	80,6%	0,000086645	99,984%
0,950	60,0%	0,000165633	99,889%
0,612	48,0%	0,000096720	99,691%
0,413	43,6%	0,000035464	99,432%
0,314	40,1%	0,000028210	98,857%
0,260	30,7%	0,000075764	95,717%
0,150	10,6%	0,000162006	77,291%
0,075	1,0%	0,000077376	24,042%
0,063	0,0%	0,000008060	0,000%

Fonte: Produção pela própria autora.

Como resultado da aplicação da metodologia proposta, foi obtida a curva apresentada na Figura 72. É possível constatar que o algoritmo aventado neste trabalho apresenta resultados com muito boa aderência aos dados analíticos obtidos de Pinto (2006). Outro fato importante observado é que a curva obtida da amostra gerada no PFC3D 7.00 ilustra um desempenho inadequado do algoritmo, onde se destaca que nenhuma partícula de diâmetro superior a 3,05 mm, e entre 2,3 e 3,0 mm foi gerada e complementa-se que esta amostra apresenta um total de 60.454

elementos em sua composição. Diferentemente da situação descrita anteriormente, foram criadas duas partículas com diâmetro de 3,286 e 2,736 mm cada no SGen e a amostra possui ao todo 81.573 esferas (número 1,35 vezes maior que o obtido com o programa citado anteriormente). Com o intuito de analisar o desempenho de cada aplicação, os valores de erro relativo, considerando a porcentagem que passa em relação à massa para a curva imposta e os resultados numéricos, foram determinados e estão resumidos na Tabela 6.

Nota-se que há uma maior diferença nos valores de porcentagem de massa que passa pelas peneiras entre os diâmetros de 0,260 e 1,438 mm quando a curva oriunda do PFC3D 7.00 é comparada aos dados impostos. Neste mesmo cenário, a curva obtida no SGen continua a apresentar erros relativos expressivamente mais baixos, tendo valores inferiores a 1,3% (em módulo). Quanto ao desempenho do Rocky DEM, este não gerou uma amostra com características aderentes quanto à porção de diâmetro superior a 1,438 mm e a 2,184 mm, apresentando erros relativos em módulo de 3,57% e 4,53%, respectivamente. Para partículas com dimensão inferior a 0,950 mm, a curva imposta, curva obtida com a metodologia deste trabalho e oriunda do Rocky DEM são visualmente coincidentes, destacando que bons resultados foram obtidos com o programa comercial citado, tendo este trecho em específico o mais aderente ao imposto.

Figura 72 – Curva granulométrica imposta 2 *versus* numérica

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 6 – Curva Imposta 2: comparativo com resultados numéricos

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação a massa			
	Curva imposta 2	Metodologia proposta	PFC3D 7.00	Rocky DEM 4.4
5,000	100,0%	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)
2,184	91,3%	90,67% (-0,69%)	91,51% (-0,23%)	87,17% (-4,53%)
1,438	80,6%	79,58% (-1,21%)	78,65% (2,35%)	77,68% (-3,57%)
0,950	60,0%	59,26% (-1,23%)	56,30% (6,17%)	58,93% (-1,78%)
0,612	48,0%	47,39% (-1,28%)	44,28% (7,76%)	47,69% (-0,65%)
0,413	43,6%	43,04% (-1,29%)	39,85% (8,60%)	43,43% (-0,39%)
0,314	40,1%	39,58% (-1,29%)	36,57% (8,79%)	39,95% (-0,37%)
0,260	30,7%	30,30% (-1,29%)	31,46% (-2,47%)	30,68% (-0,07%)
0,150	10,6%	10,46% (-1,29%)	11,67% (10,07%)	10,67% (0,66%)
0,075	1,0%	0,99% (-1,29%)	-	1,01% (0,96%)
0,063	0,0%	0,00% (0,00%)	0,00% (0,00%)	0,00% (0,00%)

Fonte: Produção pela própria autora.

Na Figura 73, são apresentadas as amostras geradas com todas as metodologias empregadas. As amostras são compostas por 81.573, 60.454 e 108.353 esferas para metodologia proposta neste trabalho, PFC3D 7.00 e Rocky DEM 4.4, respectivamente. Sendo possível, observar que as amostras proporcionadas pela metodologia da autora e do Rocky DEM apresentam visivelmente partículas de maior granulometria na face superior.

A respeito da porosidade obtida para a amostra gerada com a metodologia proposta neste trabalho, determinou-se que esta apresenta 0,382 (um valor de erro relativo de -0,53% em relação ao valor imposto). Já a amostra originada com o emprego do Rocky DEM apresentou porosidade de 0,303 (um erro relativo de 20,3%)

Figura 73 – Amostras geradas com curva granulométrica imposta 2 - Pinto (2006)

Fonte: Produção pela própria autora.

A próxima curva imposta obtida de Pinto (2006), apresentada na Figura 74, é de um material classificado como bem graduado, pois apresenta um coeficiente de não uniformidade de 6 e um coeficiente de curvatura igual a 2. Os dados de entrada foram determinados a partir de parâmetros já estabelecidos para a análise imediatamente anterior (massa específica de 2.600 kg/m^3 e porosidade de 0,38), e estão apresentados na Tabela 7. Os outros parâmetros que se fazem essenciais para a metodologia ser empregada são os mesmos definidos para a curva imposta 2.

Figura 74 – Curva granulométrica imposta 3

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 7 – Curva imposta 3: dados de entrada para o algoritmo proposto

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)	Massa retida (kg)	Porcentagem que passa em relação ao nº de partículas (%)
10,000	100,0%	0,000000000	100,000%
4,766	100,0%	0,000000000	100,000%
2,086	90,7%	0,000075076	99,998%
1,292	76,8%	0,000111917	99,997%
0,955	60,0%	0,000135407	99,885%
0,413	31,6%	0,000228914	99,046%
0,148	10,1%	0,000173094	89,871%
0,075	1,1%	0,000072867	28,366%
0,067	0,0%	0,000008725	0,000%

Fonte: Produção pela própria autora.

As curvas granulométricas das partículas que fazem parte das amostras obtidas com o emprego do método em validação, e programas PFC3D 7.00 e Rocky DEM podem ser observadas na Figura 75. Ao analisar o número previsto de partículas retidas para a peneira de abertura 2,086 mm, observa-se que seriam necessárias apenas duas partículas de diâmetro padrão e este deve ser o motivo da existência de dois patamares para valores de dimensão acima do citado na curva originada no

PFC3D 7.00. Em relação às demais aberturas de malha das peneiras, o desempenho do software em questão pode ser considerado mediano quando é comparado às curvas apresentadas. É perceptível que a curva obtida pela metodologia proposta apresenta maior aderência a curva imposta em relação aos diâmetros fornecidos como dados de entrada. Em relação aos erros relativos apresentados na Tabela 8, observa-se que para metodologia proposta, os valores são inferiores ou iguais à 1,64% (em módulo), em relação aos obtidos com o Rocky DEM, tem-se menor ou igual a 2,89% (em módulo) e para PFC3D, encontrou-se no máximo 10,88% (a maior discrepância identificada dentre tais valores). Com base nesta análise, pode-se afirmar que a metodologia proposta se apresenta com desempenho superior aos demais.

Figura 75 – Curva granulométrica imposta 3 *versus* numérica

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 8 – Curva imposta 3: comparativo com resultados numéricos

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação a massa			
	Curva imposta 3	Metodologia proposta	PFC3D 7.00	Rocky DEM 4.4
4,766	100,0%	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)
2,086	90,7%	90,32% (0,40%)	89,09% (1,76%)	88,81% (2,06%)
1,292	76,8%	75,70% (1,44%)	74,77% (2,64%)	75,89% (1,18%)
0,955	60,0%	59,03% (1,62%)	57,12% (4,80%)	60,74% (-1,23%)
0,413	31,6%	31,08% (1,64%)	28,16% (10,88%)	32,41% (-2,57%)
0,148	10,1%	9,97% (1,51%)	9,10% (10,09%)	10,42% (-2,89%)
0,075	1,1%	1,06% (1,64%)	-	1,11% (-2,58%)
0,067	0,0%	0,00% (0,00%)	-	0,00% (0,00%)

Fonte: Produção pela própria autora.

Para a amostra gerada com a metodologia proposta, após a etapa de compactação, foi possível calcular a porosidade que resultou em 0,382 (erro relativo de -0,53%) e é um valor coincidente com o dado de entrada do algoritmo. Em relação ao Rocky DEM, a porosidade foi estimada em 0,364 com erro relativo de 4,21%.

A Figura 76 apresenta as amostras geradas com todos os programas, onde pode-se observar a densidade das amostras obtidas com o método proposto neste trabalho e pelo Rocky DEM, e que partículas de maiores dimensões proporcionam as irregularidades no topo das amostras. Foram geradas 68.228 partículas com o uso da metodologia proposta, 94.676 com o emprego do Rocky DEM 4.4 (1,388 vezes maior que o anterior) e 58.069 ao aplicar o PFC3D 7.0 (1,175 vezes mais elementos foram gerados na metodologia proposta). Novamente, são perceptíveis as sobreposições de partículas na amostra obtida com o programa computacional PFC3D em decorrência da sua não consideração durante a geração.

Figura 76 – Amostra gerada com curva granulométrica imposta 3 - Pinto (2006)

Fonte: Produção pela própria autora.

A última curva imposta obtida de Pinto (2006) está apresentada na Figura 77. Este material pode ser considerado com granulometria uniforme por possuir um coeficiente de não uniformidade correspondente a 6 e um coeficiente de curvatura igual a 5. Os dados de entrada foram determinados a partir de parâmetros de massa específica e porosidade já estabelecidos anteriormente, e estão apresentados na Tabela 9. Os demais parâmetros necessários para a simulação numérica são os mesmos aplicados para curva desejada 2.

Figura 77 – Curva granulométrica imposta 4

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 9 – Curva imposta 4: dados de entrada para o algoritmo proposto

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)	Massa retida (kg)	Porcentagem que passa em relação ao nº de partículas (%)
10,000	100,00%	0,000000000	100,000%
4,875	100,00%	0,000000000	100,000%
1,578	88,10%	0,000095946	99,987%
1,092	76,33%	0,000094858	99,606%
0,946	60,61%	0,000126711	98,449%
0,759	31,35%	0,000235803	94,770%
0,420	16,12%	0,000122794	88,988%
0,149	8,89%	0,000058234	64,573%
0,057	7,98%	0,000007310	0,000%

Fonte: Produção pela própria autora.

Antes de apresentar os resultados obtidos, é necessário explicar que a metodologia proposta não gera partículas com dimensão inferior à mínima apresentada nos dados de entrada do algoritmo por falta de informação sobre os diâmetros de partículas e demais porcentagem para esta porção. No caso dos programas PFC3D 7.0 e Rocky DEM 4.4, estes geram partículas com dimensões inferior a menor dimensão de abertura de malha da peneira (neste exemplo de 0,057

mm) e com variação ínfima quando comparados entre si com o intuito de atingir os 7,98% de massa passante (dado da curva granulométrica e está apresentado na Tabela 9). Sendo assim, foram convertidos todos os valores de porcentagem que passa em relação a massa para o cenário em que nenhuma partícula é passante pela peneira 0,057mm, ou seja, a porcentagem que passa em relação a massa para esta abertura é nula nesta tratativa. Estes dados de entrada para os dois programas em questão, estão apresentados na Tabela 10. Posteriormente, os resultados são tratados de forma a possibilitar a apresentação de todas as curvas em um mesmo gráfico tendo imposto um valor de 7,98% como passante nesta mesma peneira de menor abertura do conjunto considerado.

Tabela 10 – Curva imposta 4: dados de entrada para programas comerciais

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)
10,000	100,000%
4,875	100,000%
1,578	87,063%
1,092	74,273%
0,946	57,188%
0,759	25,394%
0,420	8,837%
0,149	0,986%
0,057	0,000%

Fonte: Produção pela própria autora.

As distribuições granulométricas da amostra obtidas com o emprego do método em questão e dos conjuntos de elementos extraídos dos demais programas comerciais podem ser observados na Figura 78. Destaca-se que é perceptível uma maior proximidade da curva granulométrica numérica obtida com a metodologia proposta e a imposta e que por vezes são coincidentes, ao comparar com as outras duas curvas numéricas (PFC3D e Rocky DEM, que estão próximas entre si). Este excelente desempenho pode ser constatado por meio da análise da Tabela 11. Esta apresenta as variações entre valores impostos e obtidos numericamente, sendo possível destacar que os erros quanto ao resultado obtido com a metodologia proposta pela autora são inferiores à 0,7% (em módulo), menores que 4,96% e 6,86% (em módulo) no caso do Rocky DEM e PFC3D, respectivamente. Em decorrência da distribuição ser uniforme, houve uma ligeira diferença entre a porosidade imposta de

0,38 e a obtida com a amostra gerada no valor de 0,436 (variação de 14,74%). Esta maior variação de porosidade obtida neste trabalho até aqui é fruto do arranjo de partículas na sua maioria com diâmetros semelhantes (pode-se afirmar que cerca de 45% do material apresenta essa característica) que não proporcionam um melhor preenchimento dos vazios entre os elementos gerados. Independente disso, pode-se declarar o desempenho da metodologia proposta como muito bom. Em relação a porosidade obtida para a amostra gerada com o uso do Rocky DEM, esta foi de 0,395 (erro relativo -3,95%), valor mais elevado do que os determinados para amostras apresentadas anteriormente.

Figura 78 – Curva granulométrica imposta 4 *versus* numérica

Fonte: Produção pela própria autora.

A Fonte: Produção pela própria autora.

Figura 79 apresenta as amostras geradas com a metodologia proposta e emprego dos dois programas comerciais, PFC3D 7.0 e Rocky DEM 4.4. Em decorrência da metodologia de geração implementada no PFC3D, tem-se, novamente, interpenetrações entre partículas como ponto negativo principal. A amostra em questão é composta por 6.964 partículas. Mais uma vez, as amostras obtidas com o algoritmo proposto e com o Rocky DEM se apresentam densas e são compostas por 7.997 e 15.489 partículas, respectivamente.

Tabela 11 – Curva imposta 4: comparativo com resultados numéricos

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação a massa			
	Curva imposta 4	Metodologia proposta	PFC3D 7.00	Rocky DEM 4.4
4,875	100,00%	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)	100,00% (0,00%)
1,578	88,10%	87,65% (0,51%)	86,35% (1,98%)	85,89% (2,51%)
1,092	76,33%	75,94% (0,51%)	74,25% (2,73%)	74,23% (2,75%)
0,946	60,61%	60,19% (0,69%)	59,50% (1,83%)	60,03% (0,95%)
0,759	31,35%	31,15% (0,63%)	33,50% (-6,85%)	32,54% (-3,78%)
0,420	16,12%	16,05% (0,40%)	15,44% (4,17%)	16,91% (-4,95%)
0,149	8,89%	8,88% (0,09%)	8,83% (0,71%)	9,01% (-1,30%)
0,057	7,98%	7,98% (0,00%)	7,98% (0,00%)	7,98% (0,00%)

Fonte: Produção pela própria autora.

Figura 79 – Amostra gerada com curva granulométrica imposta 4 - Pinto (2006)

Fonte: Produção pela própria autora.

A próxima e última curva granulométrica imposta (Figura 80) para

validação da implementação foi obtida por meio do ensaio de peneiramento de uma amostra de areia realizado no Laboratório de Mecânica dos Solos na Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Os dados de entrada do algoritmo foram determinados a partir das seguintes considerações: domínio no formato de um paralelepípedo com dimensões de 0,0074 m por 0,0074 m por 0,0035 m de altura em decorrência de serem partículas com diâmetro entre 0,075 e 2,000 mm, e estão apresentados na Tabela 12. Será empregada massa específica das partículas de 2.600,0 kg/m³; e porosidade de 0,40. Os demais parâmetros necessários para a simulação numérica são:

- propriedades elásticas das partículas: $E = 2,7 \times 10^7 \text{ N/m}^2$ e $\nu = 0,25$;
- coeficiente de atrito entre partículas e partícula-superfície: $\mu_S = \mu_D = 0,25$;
- taxa de amortecimento para modelo de contato e atrito: $\xi^{con} = \xi_t = 0,90$;
- coeficiente de resistência ao rolamento para contato entre partículas e entre partícula e superfície: $\mu_R = 0,30$ (a resistência ao *twisting* não será considerada nesta etapa de deposição da amostra);
- taxa de amortecimento do modelo de resistência ao rolamento: $\xi^{rol} = 0,9$;
- aceleração da gravidade: $g = -9,81 \text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 1,0 \times 10^{-7} \text{ s}$ (integração com método explícito - $\phi = 0$).

Figura 80 – Curva granulométrica imposta 5

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 12 – Curva imposta 5: dados de entrada para o algoritmo proposto

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação à massa (%)	Massa retida (kg)	Porcentagem que passa em relação ao nº de partículas (%)
2,000	99,73%	0,000000468	100,0000%
1,200	91,55%	0,000013973	99,9826%
0,600	69,27%	0,000038056	99,5335%
0,420	44,61%	0,000042137	98,0817%
0,300	28,76%	0,000027072	95,5194%
0,150	6,55%	0,000037961	66,7560%
0,075	0,10%	0,000011013	0,0000%

Fonte: Produção pela própria autora.

Todas as curvas granulométricas obtidas para as amostras geradas podem ser observadas na Figura 81. Novamente, é perceptível a aderência entre resultados numéricos obtidos por meio da metodologia proposta em relação aos valores experimentais (ou também denominados impostos). Tanto os resultados obtidos com o emprego do PFC3D 7.00 como os oriundos do Rocky DEM 4.4 ficaram mais distantes dos valores impostos. Isso pode ser comprovado com a análise da Tabela 13, que apresenta os valores de erro relativo em porcentagem para cada simulação. Onde se ressalta que o módulo do erro relativo máximo para a metodologia

proposta pela autora é de 0,36%, e para PFC3D e Rocky DEM são os valores de 4,15% e 16,67%, respectivamente. Para este exemplo de validação, o Rocky DEM teve pior desempenho que o PFC3D. Na Figura 82, tem-se todas as amostras obtidas apresentadas. A amostra gerada com o emprego da metodologia proposta neste trabalho teve um número total de 28.286 partículas, já no Rocky DEM foram obtidas 27.073 e no PFC3D, um total de 15.001 partículas. A respeito da porosidade, foi determinado 0,362 (erro relativo 4,74%) para a amostra obtida com método próprio e 0,619 (erro relativo de 62,89%) para amostra oriunda do Rocky DEM. E neste último exemplo, tem-se a constatação que mais uma vez a metodologia proposta pela autora apresentou excelente performance e foi validada.

Figura 81 – Curva granulométrica imposta 5 versus numérica

Fonte: Produção pela própria autora.

Tabela 13 – Curva imposta 5: comparativo com resultados numéricos

Diâmetro mm	Porcentagem que passa em relação a massa			
	Curva imposta 5	Metodologia proposta	PFC3D 7.00	Rocky DEM 4.4
2,000	99,7%	100,00% (-0,27%)	100,00% (-0,27%)	100,00% (-0,27%)
1,200	91,5%	91,32% (0,25%)	90,84% (0,77%)	93,17% (-1,78%)
0,600	69,3%	69,04% (0,33%)	66,59% (3,87%)	70,73% (-2,10%)
0,420	44,6%	44,45% (0,35%)	43,06% (3,48%)	46,78% (-4,87%)
0,300	28,8%	28,66% (0,36%)	27,75% (3,54%)	31,04% (-7,90%)
0,150	6,5%	6,52% (0,35%)	6,27% (4,15%)	7,64% (-16,67%)
0,075	0,1%	0,10%	-	0,10%

Fonte: Produção pela própria autora.

Figura 82 – Amostras geradas com curva granulométrica imposta 5

Fonte: Produção pela própria autora.

Lembra-se que o número mais elevado de partículas oriundo do emprego do Rocky DEM, decorre de um maior valor de massa ter sido imposto com o objetivo de gerar uma quantia excedente de partículas e descartar aquelas com coordenada de posição acima do topo do paralelepípedo, de forma a tentar preenchê-lo completamente. Sendo que isso não empobrece ou desmerece em nada a metodologia proposta neste trabalho.

Ao final da apresentação de todos os exemplos de validação e seus resultados, considera-se que houve um excelente desempenho da metodologia proposta pela autora. Destaca-se que todas as amostras foram geradas com partículas esféricas de dimensões que respeitassem as curvas granulométricas impostas. Esta afirmação pode ser comprovada ao analisar os máximos valores de erro relativo obtidos com cada metodologia para cada curva imposta, onde se observa que para a metodologia proposta neste trabalho está entre a 0,69% e 1,64% (em módulo), já o do PFC3D 7.00 é de 4,15% a 18,25% (em módulo), e valores entre 2,89% e 16,67% (em módulo) para o Rocky DEM 4.4. Estas variações de valores demonstram que a metodologia proposta pela autora apresenta um comportamento homogêneo independentemente do tipo de granulometria imposta às partículas na sua geração, pois apresenta erros relativos máximos de baixa magnitude e que divergem pouco entre si, diferente do que é observado para o PFC3D 7.00 e Rocky DEM 4.4. Sobre a porosidade, outro parâmetro imposto, atingiu-se aproximadamente o valor indicado para todas as amostras, exceto para a corresponde a curva imposta 4 que ficou um pouco acima do valor imposto, justificado em momento oportuno.

5 CONCLUSÕES

O Método dos Elementos Discretos pode auxiliar na modelagem, compreensão e previsão do comportamento mecânico dos materiais granulares, que como já dito é uma das classes de materiais mais presentes nas atividades do ser humano – não se restringindo apenas às engenharias. Este modelo possui grande potencial de aplicabilidade quando se considera a evolução tecnológica da capacidade de processamento dos computadores.

Neste trabalho, foi proposto um modelo de resistência ao movimento rotacional que faz a separação do mesmo em suas duas componentes, nomeadamente, rolamento e *twisting*, de forma a representar a rotação relativa que se observa durante um contato de maneira um pouco mais consistente com a física do problema. Percebeu-se que havia a importância de se tratar separadamente esses dois movimentos (ao contrário da maior parte dos modelos disponíveis na literatura) em decorrência da diferença de rigidez entre cada um, o que acarreta, no contexto do modelo proposto, coeficientes de rigidez distintos para suas respectivas molas nos modelos massa-mola ou massa-mola-amortecedor. Observou-se, ainda, a importância de se ter a contribuição da parcela viscosa para um melhor comportamento geral do modelo, levando a menos oscilações (ainda que essas sejam tipicamente muito pequenas) e a uma melhor dissipação da energia cinética no equilíbrio das partículas. Pôde-se observar que o modelo proposto representa adequadamente pilhas estáticas de grãos, o que é muito importante no estudo de materiais granulares.

Uma metodologia de geração de amostras densas com consideração de uma curva granulométrica e porosidade impostas foi apresentada e seus exemplos de validação mostraram excelente aderência entre os dados impostos e os resultados obtidos, e com superioridade quando comparados aos resultados obtidos com programas comerciais consagrados de MED, como PFC3D 7.00 e Rocky DEM. O método proposto apresentou um comportamento homogêneo (no sentido de que foi sempre bastante aderente aos dados impostos, independentemente do tipo de curva granulométrica adotada) e se mostrou capaz de gerar amostras com fidelidade para um amplo espectro de granulometrias, como a bem distribuída, a granulação aberta e a uniforme, e indicando a sua robustez. Os valores resultantes de porosidade também

se mostraram em excelente aderência aos valores impostos.

Com relação a trabalhos futuros, ou desdobramentos do presente trabalho, citam-se: a realização de ensaios numéricos triaxiais e de cisalhamento em amostras obtidas com o método de geração ora desenvolvido, e fazendo uso do modelo de resistência ao movimento rotacional aqui proposto; o estudo da microestrutura das amostras geradas para obtenção de seus parâmetros microestruturais (como por exemplo número de coordenação, tensor “tecido”, grau de anisotropia, dentre outros), e influência do modelo de resistência ao movimento rotacional nos valores desses parâmetros; a generalização da metodologia de geração de amostras densas com curva granulométrica imposta para outros formatos de partículas que não o esférico; e o desenvolvimento de modelos constitutivos que representem a coesão existente entre as partículas para materiais granulares não-secos.

REFERÊNCIAS

- AI, J.; CHEN, J-F.; ROTTER, J. M.; OOI, J. Y. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. **Powder Technol.**, v. 206, p. 269-282, 2011.
- AI, J. **Particle Scale and Bulk Scale Investigation of Granular Piles and Silos**. 2010. 343p. Tese (Doutorado) – The University of Edinburgh. Reino Unido.
- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard sphere system. **J. Chem. Phys.**, v. 27, p. 1208-1209, 1957.
- BAGI, K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations for granular assemblies. **Granular Matter**, v.7, p. 31-43, 2005.
- BELHEINE, N.; PLASSIARD, J.-P.; DONZÉ, F.-V.; DARVE, F.; SERIDI, A. Numerical simulation of drained triaxial test using 3D discrete element modelling. **Computers and Geotechnics**, v.36, p.320-331, 2009.
- BERNAL, J. D. A geometrical approach to the structure of liquids. **Nature**, v.183, p.141-147, 1959.
- BROWN, R. L.; RICHARDS, J. C. **Principles of powder mechanics**. Oxford: Pergamon Press, 1970.
- CAMBOU, B.; MAGOARIEC, H.; NGUYEN, N. **Granular materials at the meso-scale**. Londres: ISTE Press Ltd and Elsevier Ltd., 2016.
- CAMPELLO, E. M. B.; ZOHDI, T. I. A computational framework for simulation of the delivery of substances into cells. **Int J Numer Meth Biomed Engng**, v.30, n.11, p.1132-1152, 2014.
- CAMPELLO, E. M. B. A description of rotations for DEM models of particles systems. **Computational Particles Mechanics**, v. 2, p. 109-125, 2015.
- CAMPELLO, E. M. B. **Um modelo computacional para o estudo de materiais granulares**. 2016. 100p. Tese (Livre-docência) – Universidade de São Paulo. São Paulo.
- CAMPELLO, E. M. B. A computational model for the simulation of dry granular material. **International Journal of Non-Linear Mechanics**, v.106, p.89-107, 2018.
- CINTRA, D. T.; CARVALHO Jr., H.; RAMOS Jr., A. S.; LAGES, E. N.; SILVEIRA, E. S. S.; RAMOS, V. C. L. **Aplicação do método dos elementos discretos no estudo do comportamento mecânico de dutos enterrados**. In: III Congresso Luso-Brasileiro de Geotecnia, 2006, Curitiba. Anais... Curitiba: 2006. p. 489-494.
- CUI, LIANG; O'SULLIVAN, CATHERINE. Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations. **Granular Matter**, v.5, n.3, p.135-145, 2003.

CUNDALL, P. A.; HART, R. D. Numerical modelling of discontinua. **Engineering Computations**, v. 9, p.101-113, 1992.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Geotèchnique** 29, n.1, p.47-65, 1979.

DANG, H. K.; MEGUID, M. A. Algorithm to generate a discrete element specimen with predefined properties. **International Journal of Geomechanics**, v.10, n.2, p.85-91, 2010.

DURAN, J. **Sands, powders, and grains**: an introduction to physics of granular materials. Nova Iorque: Springer, 1999.

FENG, Y. T.; HAN, K.; OWEN, D. R. J. Filling domains with disks: an advancing front approach. **International Journal for numerical methods in engineering**, v. 56, p.699-713, 2003.

FU, G.; DEKELBAB, W. 3-D random packing of polydisperse particles and concrete aggregate grading. **Powder Technology**, v. 133, p.147-155, 2003.

HAN, K; FENG, Y. T.; OWEN, D. R. J. Sphere packing with a geometric based compression algorithm. **Powder Technology**, v. 155, p.33-41, 2005.

HUANG, X.; HANLEY, K. J.; O'SULLIVAN, C.; KWOK, C-Y. Implementation of rotational resistance models: A critical appraisal. **Particuology**, v.34, p.14-23, 2017.

ITASCA, CONSULTING GROUP Inc. Replicating a particle size distribution. In:_____. **Itasca's particle flow Code documentation**. 2021. Disponível em: < <http://docs.itascacg.com/pfc700/pfc/docproject/source/manual/examples/tutorials/granulometry/granulometry.html?highlight=psd#tut-gran-datafiles> >. Acesso em: 13 mar. 2021.

IWASHITA, K.; ODA, M. Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM. **Journal of Engineering Mechanics**, v.124, n.3, p.285-292, 1998.

IWASHITA, K.; ODA, M. Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method. **Powder Technology**, v.109, p.192-205, 2000.

JERIER, J. F.; IMBAULT, D.; DONZÉ, F. V.; DOREMUS, P. A geometric based on tetrahedral meshes to generate a dense polydisperse sphere packing. **Granular Matter**, v.11, p. 43-52, 2009.

JIANG, M. J.; YU, H.-S.; HARRIS, D. A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance. **Computers and Geotechnics**, v.32, p.340-357, 2005.

JIANG, M.; SHEN, Z.; WANG, J. A novel three-dimensional contact model for granulates incorporating rolling and *twisting* resistances. **Computers and**

Geotechnics, v.65, p.147-163, 2015.

JOHNSON, K. L. **Contact mechanics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1985. 452p.

LI, X.; CHU, X.; FENG, Y. T. A discrete particle model and numerical modeling of the failure modes of granular materials. **Engineering Computations**, v. 22, n. 8, p.894-920, 2005.

LUBACHEVSKY, B. D.; STILLINGER, F. H. Geometric properties of random disk packings. **Journal of Statistical Physics**, v.60, n.5/6, p.561-583, 1990.

MAZZILLI, C. E. N.; ANDRÉ, J. C.; BUCALEM, M. L.. **Lições em mecânica das estruturas: dinâmica**. São Paulo: Blucher, 2016. 334p.

NGUYEN, N. H. T. N.; BUI, H. H., AROOAN, S; NGUYEN, G. D.; KODIKARA, J. Discrete element method investigation of particle size distribution effects on the flexural properties of cement-treated base. **Computer and Geotechnics**, v. 113, 103096, 2019.

O'SULLIVAN, CATHERINE. Particle-based discrete element modeling: geomechanics perspective. **International Journal of Geomechanics**, v.11, n.6, p.449-464, 2011.

O'SULLIVAN, C.; CUI, L. Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations. **Granular Matter**, v.5, p. 135-145, 2003.

OTSUBO, M. **Particle scale anysis of soil stiffness and elastic wave propagation**. 2016. 311p. Tese (Doutorado) – Imperial College London. Reino Unido.

PLASSIARD, J.-K.; BELHEINE, N.; DONZÉ, F.-V. Calibration procedure for spherical discrete elements using a local moment law. In: 4th International conference on discrete element method, DEM 07, 2007, Brisbane. **Anais...** Brisbane: 2007. p. 27-29.

PINTO, C. S. **Curso básico de mecânica dos solos – com exercícios resolvidos**. 3ed. São Paulo: Oficina de Textos, 2006.

RAO, S. S. **Vibrações mecânicas**. 4ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2008.
THORNTON, C. Applications of DEM to process engineering problems. **Engineering Computations**, v. 9, p. 289-297, 1992.

TORQUATO, S.; STILLINGER, F. H. Exactly solvable disordered sphere-packing model in arbitrary-dimensional Euclidean spaces. **Physical Review**, E 73, 031106, 2006.

WANG, Y.; ALONSO-MARROQUIN, F.; GUO, W. W. Rolling and sliding in 3-D discrete element models. **Particuology**, v. 205-208, p. 48-58, 2015.

WASSGREN, C; SARKAR, A. Discrete element method (DEM) course module, 2008. Disponível em:

<<http://pharmahub.org/resources/113>>. Acesso em: 01 jun. 2014.

WELLMANN, C.; WRIGGERS, P. A two-scale model of granular materials. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 23, p. 49-55, 2012.

YAN, Z.; WILKINSON, S. K.; STITT, E. H.; MARIGO, M. Discrete element modelling (DEM) input parameters: understanding their impact on model predictions using statistical analysis. **Computational Particle Mechanics**, v. 2, p. 283-299, 2015.

ZOHDI, T. I. **Dynamics of charged particulate systems** – modeling, theory and computation. New York: Springer. 2012. 115 p.

ZOHDI, T. I. A direct particle-based computational framework for electrically enhanced thermo-mechanical sintering of powdered materials. **Mathematicvs and Mechanics of Solids**, v.19, n.1, p.93-113, 2014.

ZHU, Y.; NIE, Z.; GONG, J. Influence of the rolling-resistance-based shape of coarse particles on the shear responses of granular mixtures. **Particuology**, v.52, p.67-82, 2020.

ZHU; H. P.; ZHOU, Z. Y.; YANG, R. Y.; YU, A. B. Discrete particle simulation of particulate systems: theoretical developments. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 13, p.3378-3396, 2007.