

André Victor Sacone Gomes

Estudo do Acoplamento do Método dos Elementos Finitos e do Método dos Elementos Discretos na Análise de Interação Solo-Estrutura

75/2014

CAMPINAS 2014



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

André Victor Sacone Gomes

Estudo do Acoplamento do Método dos Elementos Finitos e do Método dos Elementos Discretos na Análise de Interação Solo-Estrutura

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, na Área de Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico

Orientador: Prof. Dr. Renato Pavanello

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO André Victor Sacone Gomes, E ORIEN-TADO PELO PROF. DR. Renato Pavanello.

> <u>Z</u>/cuicuello ASSINATURA DO ORIENTADOR

> > CAMPINAS 2014

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

 Gomes, André Victor Sacone, 1989-Estudo do acoplamento do método dos elementos finitos e do método dos elementos discretos na análise de interação solo-estrututa / André Victor Sacone Gomes. – Campinas, SP : [s.n.], 2014.
 Orientador: Renato Pavanello. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.
 1. Métodos numéricos. 2. Acoplamento. 3. Interação solo-estrutura. 4. Método dos elementos finitos. I. Pavanello, Renato,1959-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: A method for coupling the finite element method with the discrete element method for soil-structure interaction analysis Palavras-chave em inglês: Numerical methods Coupling Soil-Structure interaction Finite element method Área de concentração: Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico Titulação: Mestre em Engenharia Mecânica Banca examinadora: Renato Pavanello [Orientador] Euclides de Mesquita Neto Clóvis de Arruda Martins Data de defesa: 27-08-2014 Programa de Pós-Graduação: Engenharia Mecânica

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA DEPARTAMENTO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO

Estudo do Acoplamento do Método dos Elementos Finitos e do Método dos Elementos Discretos na Análise de Interação Solo-Estrutura

v

Autor: André Victor Sacone Gomes Orientador: Renato Pavanello

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação:

Klaucullo

Prof. Dr. Renato Pavanello, Presidente DMC/FEM/UNICAMP

Legon'

Prof. Dr. Euclides de Mesquita Neto DMC/FEM/UNICAMP

Ca Martin

Prof. Dr. Clóvis de Arruda Martins POLI/USP

Campinas, 27 de Agosto de 2014.

Dedicatória

Aos meus queridos pais, Francisco e Cristina, os quais sinto muito orgulho e agradeço por todo carinho e o apoio de sempre.

Agradecimentos

À Deus, minha fonte de força, fé e determinação. E como em todos os dias, agradeço pelo dom da vida.

Aos meus queridos pais, Francisco e Cristina, pelo apoio e carinho em todos os momentos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Renato Pavanello, pela orientação e apoio durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos membros das bancas de qualificação e defesa.

Aos amigos e companheiros de laboratório, pelo apoio e amizade.

À Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP, que me concedeu a oportunidade de realizar este trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, pelo suporte financeiro.

A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu, mas pensar o que ninguém ainda pensou sobre aquilo que todo mundo vê.

Arthur Schopenhauer

Resumo

SACONE GOMES, André Victor. Estudo do Acoplamento do Método dos Elementos Finitos e do Método dos Elementos Discretos na Análise de Interação Solo-Estrutura. 2014. 186p. Dissertação (Mestrado). Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

O presente trabalho trata do estudo e implementação de um modelo de acoplamento do método dos elementos finitos (Finite Element Method - FEM) com o método dos elementos discretos (Discrete Element Method - DEM) a fim de analisar problemas de interação entre uma estrutura com o solo. O DEM é reconhecido atualmente como um modelo numérico eficaz para análise de solos e outros materiais granulares, tanto sob carregamento estático como dinâmico. A característica dessa abordagem é que ela considera explicitamente as partículas em um material granular e suas interações, possibilitado um tratamento direto das descontinuidades e da resposta não linear desses materiais, sendo assim uma alternativa viável à abordagem tradicional baseada na mecânica do contínuo. O FEM é um modelo amplamente conhecido para a modelagem de meios contínuos, permitindo a determinação do campo de tensões e deformações atuando na estrutura. Dessa forma, o acoplamento dos dois métodos é uma solução eficaz para tratar problema de interação de meios estruturais contínuos com domínios particulados com comportamento não linear. Para que a associação dos dois métodos possa ocorrer foi proposto um modelo de contato entre o meio contínuo e o discreto, que além de garantir a transferência do carregamento mecânico gerado pelo solo na estrutura, seja de implementação direta. Além disso, nesse trabalho é proposto um algoritmo sequencial de integração no tempo, que acopla o método de Verlet explícito, usado no DEM, com o método de Newmark implícito, usado no FEM. São apresentados resultados indicando a representatividade dos modelos de acoplamento propostos. A motivação da presente pesquisa é a simulação do processo de interação estática e dinâmica entre uma estrutura com o solo a sustentando. Tais processos são de grande interesse na exploração de petróleo em águas profundas.

Palavras-chave: Métodos numéricos, Acoplamento, Interação solo-estrutura, Método dos elementos finitos.

Abstract

SACONE GOMES, André Victor. A Method for Coupling the Finite Element Method Wtih the Discrete Element Method for Soil-Structure Interaction Analysis. 2014. 186p. Dissertação (Mestrado). Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

This work presents the study and implementation of a model for coupling the finite element method (FEM) with the discrete element method (DEM) in order to analyze interaction problems of structures with granular media. The DEM is recognized nowadays as an effective numerical model for analysis of soils and other granular materials, both under static and dynamic loads. The unique feature of this approach is that it explicitly considers the particles in a granular material and their interactions, making possible a direct treatment of the discontinuities and the nonlinear behavior of these materials, becoming then a viable alternative to the traditional approach based on continuum mechanics. The FEM is widely known for modeling continuous media, allowing the determination of the stress and strain fields acting in the structure. Thus, the coupling of the two methods is an effective solution to treat the interaction of a continuous structural media with a particulate domain with nonlinear behavior. To make possible the combination of the two methods it's proposed a contact model between the discrete and continuous medium, which will guarantee the transfer of the mechanical loading generated in the structure by the soil; and its implementation should be direct. Beyond that, this paper proposes a time integration algorithm, which couples the explicit Verlet method, used in DEM, with the implicit Newmark method, used in FEM. The simulations presented indicates a good representativeness of the coupling model proposed. The motivation of this research is to simulate the static and dynamic interaction between structures with the soil. Such processes are of great interest in oil exploration in deep waters.

Keywords: Numerical methods, Coupling, Soil-Structure interaction, Finite element method.

Lista de llustrações

1.1	(a) Risers de produção; (b) Formação de trincheiras	2
1.2	Número de publicações anuais utilizando o DEM (O'SULLIVAN, 2011a)	9
2.1	Movimento de um corpo rígido.	16
2.2	Divisão do domínio espacial em um grid	24
2.3	Busca por contatos entre elementos vizinhos da grade	26
2.4	Forças e momento de contato	27
2.5	Forças e momentos equivalentes no centroide	28
2.6	Modelos constitutivo adotado no DEM	29
2.7	Contato de uma partícula com a fronteira do domínio espacial	31
2.8	Força relativa versus deslocamento relativo tangencial. (a) lei de Coulomb; (b) lei	
	de Coulomb regularizada	37
2.9	(a) Mecanismo de resistência ao rolamento; (b) Ângulo de resistência ao rolamento.	40
2.10	Cinemática de duas partículas em contato	41
2.11	Sistema massa-mola-amortecedor.	50
2.12	Contato entre o domínio discreto e o contínuo	66
2.13	Contato entre uma partícula e a face de um elemento	67
2.14	Elementos discretos fixos à malha de elementos finitos. (a) malha retangular; (b)	
	malha circular	69
2.15	Abordagem proposta para o contato entre uma partícula e a face de um elemento	70
2.16	Determinação da velocidade das partículas do contorno	71
2.17	Interface de contato DEM-FEM	72
2.18	Contato DEM-FEM	73
2.19	Transferência de carga DEM-FEM	74
3.1	Diagrama da sequência de cálculos.	84
3.2	Posicionamento inicial das partículas.	85
3.3	Posição final das partículas	86
3.4	Colisão elástica de duas partículas	87
3.5	Trajetória da colisão de duas partículas.	88
3.6	Tacada em bola de bilhar	90
3.7	Comparação da solução numérica e teórica para a velocidade de translação	91

3.8	Comparação da solução numérica e teórica para a velocidade angular	92
3.9	Influência do coeficiente de rolamento na distância de rolamento da partícula	94
3.10	Influência do coeficiente de amortecimento viscoso no momento em função do tempo.	95
3.11	Influência da rigidez de rolamento.	95
3.12	Conjunto de discos em uma superfície plana	97
3.13	Condição final simulação de empilhamento livre obtido por Ai et al. (2011)	98
3.14	Condição final da simulação de empilhamento livre	99
3.15	Dimensões do dispositivo usado por Li et al. (2005)	100
3.16	Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 5 s; (c) 10 s; (d) 17 s para o teste com barreira	
	móvel	102
3.17	Resultado do experimento realizado por Li et al. (2005)	103
3.18	Ângulo de empilhamento obtido no teste com barreira móvel	104
3.19	Configuração final com 15000 partículas	106
3.20	Configuração do teste de verificação do acoplamento DEM-FEM	107
3.21	Centroide da malha em função de tempo	109
3.22	Condição final teste verificação do do acoplamento DEM-FEM	110
3.23	Deflexão da viga.	111
3.24	Força vertical resultante nas partículas da barreira fixa	112
3.25	Força vertical nos nós inferiores da malha.	112
4.1	Configurações de contato DEM-estrutura rígida. (a) viga - corte longitudinal; (b)	
	estrutura tubular - corte transversal	114
4.2	Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 6,7 s; (c) 13,4 s; (d) 20 s	116
4.3	Força vertical resultante no tubo em função do tempo	117
4.4	Penetração vertical do tubo em função da força de reação vertical.	118
4.5	Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 10 s; (c) 20 s; (d) 30 s	119
4.6	Força resultante horizontal em função do tempo	120
4.7	Força resultante vertical em função do tempo.	120
4.8	Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 6,7 s; (c) 13,4 s; (d) 20 s	122
4.9	Tempo de simulação versus força de reação vertical na viga	123
4.10	Penetração vertical da viga versus força de reação vertical	124
4.11	Configurações de contato DEM-estrutura deformável. (a) viga; (b) estrutura tubular	125
4.12	Posição vertical do centroide do tubo em função do tempo	127
4.13	Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 2,5 s	128
4.14	Condição final simulação DEM-tubo deformável.	128
4.15	Tensões de von Mises atuando na estrutura.	129

4.16	Força de reação vertical das partículas em função do tempo
4.17	Força resultante vertical das partículas fixas ao contorno da metade inferior da malha.131
4.18	Força vertical atuando nos nós do contorno da metade inferior da malha 132
4.19	Distribuição do carregamento no meio discreto devido ao contato solo-estrutura 133
4.20	Posição vertical do centroide da viga em função do tempo
4.21	Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 2,5 s
4.22	Condição final simulação DEM-viga deformável
4.23	Tensões na direção x atuando na estrutura
4.24	Força de reação vertical das partículas em função do tempo
4.25	Força resultante vertical das partículas fixas ao contorno da metade inferior da malha.139
4.26	Força vertical atuando nos nós da metade inferior da malha
4.27	Distribuição do carregamento no meio discreto devido ao contato solo-estrutura 141
4.28	Deflexão da viga
A.1	(a) Colisão bidimensional; (b) Momentos inicial e finais
A.2	Tacada em bola de bilhar

Lista de Tabelas

3.1	Velocidades e ângulos de trajetória após o impacto
3.2	Parâmetros usados no teste de validação analítico 2
3.3	Parâmetros usados no teste de validação analítico 3
3.4	Parâmetros usados no teste de validação experimental 1
3.5	Distribuição de tamanho das partículas do teste de validação experimental 2 101
3.6	Parâmetros usadas no teste de validação experimental 2
3.7	Distribuição de tamanho das partículas
3.8	Parâmetros usados no teste de verificação do acoplamento DEM-FEM 108
4.1	Parâmetros do DEM usados no acoplamento com a estrutura rígida
4.2	Distribuição de tamanho das partículas do acoplamento do DEM com estrutura rígida. 115
4.3	Parâmetros do DEM usados no acoplamento do DEM com estrutura deformável 125
4.4	Distribuição de tamanho das partículas usados no acoplamento do DEM com estru-
	tura deformável
4.5	Propriedades do FEM usadas no acoplamento do DEM com estrutura deformável 126

SUMÁRIO

Li	ista de Ilustrações x		xvii	
Li	sta de	e Tabela	as	xxi
SI	SUMÁRIO xx		xxiii	
1	Intro	odução		1
	1.1	Motiva	ação	1
	1.2	Posiçã	o do Problema	3
		1.2.1	Breve Histórico do DEM	3
		1.2.2	Aplicação do DEM na Modelagem de Materiais Granulares	4
		1.2.3	DEM e Dinâmica Molecular	6
		1.2.4	Visão Global do DEM	6
	1.3	Revisã	io Bibliográfica	8
		1.3.1	Formulação	8
		1.3.2	Penetração de Corpos Rígidos	11
		1.3.3	Contato Solo-Estrutura	11
		1.3.4	Acoplamento DEM-FEM	12
	1.4	Objeti	vos e Contribuições	13
	1.5	Descri	ção do Trabalho	14
2	Mod	lelagem	n do Problema	15
	2.1	Formu	ılação do DEM	15
		2.1.1	Equações de Movimento	15
		2.1.2	Integração Numérica	18
		2.1.3	Algoritmo de Detecção de Contato	23
		2.1.4	Cálculo da Força de Contato Entre as Partículas	26
		2.1.5	Cálculo da Força de Contato Entre as Partículas e os Limites do Domínio	
			Espacial	31
		2.1.6	Cálculo da Força de Contato Normal	32
		2.1.7	Cálculo da Força de Contato Tangencial	35

		2.1.8	Cálculo do Momento de Rolamento	40		
		2.1.9	Amortecimento Global	46		
		2.1.10	Determinação dos Parâmetros de Contato	49		
	2.2	Formul	lação do FEM	54		
		2.2.1	Aproximação por Elementos Finitos da Fase Estrutural	58		
		2.2.2	Estado Plano de Deformação	62		
		2.2.3	Integração Numérica de Newmark	63		
	2.3	Acopla	mento DEM-FEM	66		
		2.3.1	Contato Partícula-Elemento	67		
		2.3.2	Abordagem Proposta	68		
		2.3.3	Posicionamento das Partículas do Contorno na Malha do FEM	71		
		2.3.4	Cálculo das Forças de Contato DEM-FEM	72		
	2.4	Conver	gência e Estabilidade Numérica	76		
3	Imp	lementa	ição e Validação	79		
	3.1	Implen	nentação do Algoritmo DEM-FEM	80		
	3.2	3.2 Validação Analítica DEM				
		3.2.1	Colisão Elástica de Duas Partículas	87		
		3.2.2	Rolamento com Deslizamento no Plano	89		
		3.2.3	Partícula com Atrito de Rolamento	92		
	3.3	Validaç	ção Experimental DEM	96		
		3.3.1	Empilhamento Livre	96		
		3.3.2	Teste com Barreiras	99		
	3.4	Verifica	ação do Algoritmo Acoplado DEM-FEM	106		
4	Resi	ıltados		113		
	4.1	Acopla	umento DEM-Estrutura Rígida	113		
		4.1.1	Tubo Rígido	114		
		4.1.2	Viga Rígida	121		
	4.2	Acopla	mento DEM-Estrutura Deformável	124		
		4.2.1	Tubo Deformável	125		
		4.2.2	Viga Deformável	133		
5	Con	sideraçõ	ões Finais	145		
	5.1	Conclu	ısões	145		
	5.2	Sugest	ões para Trabalhos Futuros	147		

Referências		8
APÊNDICES	5 15	;5
A – Formu	lação dos Testes de Validação 15	;5
A.1 Colis	são Elástica de Dois Corpos Rígidos	;5
A.2 Rola	mento com Deslizamento no Plano	;7

1 Introdução

A análise de problemas de interação solo-estrutura é de grande interesse na engenharia, em especial na área de mecânica computacional. Classicamente, a formulação desse problema é feita com uma abordagem baseada na mecânica do contínuo, usando o método dos elementos finitos (*Fi-nite Element Method* - FEM) ou o métodos dos elementos de contorno (*Boundary Element Method* - BEM), tanto para o domínio contínuo (estrutura) quanto para o domínio discreto (solo). No entanto, o comportamento tipicamente não linear aliado a natureza descontínua dos solos gera uma grande dificuldade em sua modelagem através das formulações clássicas de mecânica do contínuo.

O método dos elementos discretos (*Discrete Element Method* - DEM) é atualmente reconhecido por ser um método eficaz para a análise de materiais granulares e solos, tanto sob carregamento estático quanto dinâmico. O acoplamento do FEM com o DEM é uma abordagem atrativa para problemas onde o FEM é adequado para modelar domínios estruturais contínuos, e o DEM é mais adequado para tratar domínios particulados com comportamento mecânico geralmente não linear. Exemplos de tais problemas podem ser vistos na interação de estruturas com um solo ou meio granular.

Neste contexto, o presente trabalho aborda os aspectos teóricos e práticos da formulação, implementação e validação de um algoritmo bidimensional DEM-FEM acoplado. O objetivo é a simulação do contato solo-estrutura em diferentes configurações de contato, a fim de avaliar o carregamento mecânico gerado pelo solo na estrutura. Para a modelagem do solo foi implementado o DEM com partículas circulares, sendo a estrutura modelada pelo FEM, adotando-se um comportamento linear elástico, com pequenas deformações e assumindo-se as hipóteses simplificadoras do estado plano de deformações. Para o acoplamento dos dois métodos é proposto um modelo de interface entre o domínio discreto e o domínio contínuo.

1.1 Motivação

A motivação do presente trabalho é a simulação do processo de interação estático e dinâmico entre uma estrutura com o solo a sustentando. Esse tipo de interação entre uma estrutura e o solo ocorre em diversas aplicações reais, sendo também alvo de estudos recentes na área de exploração de petróleo em águas profundas.

Atualmente para efetuar as operações necessárias no processo de produção de petróleo em águas profundas utiliza-se tubulações chamadas de risers que conectam a plataforma ou o navio de produção aos equipamentos de controle instalados na cabeça do poço no leito marinho, conforme ilustrado na Figura 1.1(a). Essas tubulações são responsáveis por transportar o petróleo extraído da cabeça do poço até a plataforma ou navio de produção, onde geralmente é processada a produção proveniente de vários poços de petróleo localizados na mesma região. Devido a grande profundidade e ao distanciamento horizontal entre a cabeça do poço e a plataforma, ao longo do comprimento dos risers ocorre o contato com o solo do leito marinho.

O uso de risers para a produção de petróleo em águas profundas pode levar a situações em que essas estruturas flexíveis são submetidas a carregamentos dinâmicos de grande importância devido à ação do solo marinho sobre a estrutura. Nesses casos, o nível de solicitação dinâmica é alto devido à ação das correntezas e das altas pressões hidrostáticas. Além disso, devido ao contínuo movimento da plataforma em virtude das correntes marinhas e das ondas na superfície, o riser provoca a escavação do solo na região do contato formando as chamadas trincheiras, conforme ilustrado na Figura 1.1(b). Essa escavação provoca o enterramento da tubulação (podendo chegar a cobrir-la completamente), que aliado a continuidade dos movimentos da plataforma pode provocar elevadas cargas cíclicas na estrutura e consequentemente falhas por fadiga podem surgir, diminuindo assim a vida útil do riser a aumentando a possibilidade de ocorrer vazamentos de petróleo.



Figura 1.1: (a) Risers de produção; (b) Formação de trincheiras.

Dessa forma, um dos pontos críticos no projeto de dutos e risers para águas ultra profundas refere-se à complexa interação da estrutura com o solo do leito marinho. Devido aos grandes deslocamentos sofridos pelo solo e ao seu comportamento não linear, a modelagem desse domínio usando-se os modelos clássicos de FEM torna-se complexo. Nesse sentido, a motivação do presente trabalho é aplicar o algoritmo acoplado DEM-FEM para simular o contato solo-estrutura a exemplo do contato riser-solo.

1.2 Posição do Problema

Nesta seção é apresentado um breve histórico sobre o desenvolvimento do DEM com ênfase em sua aplicação na modelagem de solos e materiais granulares. São mencionadas as diferentes variações do método e suas principais características e aplicações. Apresenta-se de forma sucinta o DEM e as principais hipóteses assumidas na modelagem do problema.

1.2.1 Breve Histórico do DEM

O DEM é um método numérico capaz de simular solos e outros materiais granulares. A característica única dessa abordagem é que ela considera explicitamente as partículas de um meio granular de maneira individual assim como suas interações umas com as outras. O DEM se apresenta como uma alternativa à abordagem tradicional adotada para simular o comportamento mecânico de materiais granulares (solos em particular), baseada na mecânica do contínuo. Em um modelo contínuo assume-se que o solo se comporta como um material contínuo e os movimentos e rotações relativos entre as partículas no material não são considerados. Faz-se então necessário o uso de sofisticadas equações constitutivas para capturar a complexidade do comportamento do material que surge devido à sua natureza particulada. No DEM, mesmo que sejam usados modelos simples para simular o contato entre as partículas, além de partículas com geometrias idealizadas, muitas características da resposta mecânica associadas ao solo conseguem ser obtidas. Simplificar a geometria das partículas e adotar modelos de contato simplificados reduzem o custo computacional da simulaçõe e permitem simulações envolvendo um grande número de partículas, e ainda permitem a obtenção de características importantes da resposta mecânica do solo ou material granular.

Existe um grande número de métodos numéricos estabelecidos e novos que podem ser usados para simular materiais granulares, portanto, é importante posicionar o que o termo "método dos elementos discretos" significa neste texto. Em uma simulação com elementos discretos um modelo numérico envolvendo um grande número de partículas ou corpos é criado. O método dos elementos discretos é um método de simulação onde os deslocamentos e rotações finitos das partículas é simulado (CUNDALL E HART, 1992). Segundo definição proposta por O'Sullivan (2011a), é possível, dentro desse sistema, que as partículas entrem em contato umas com as outras assim como podem perder o contato também, sendo que essas mudanças de contato são detectadas automaticamente durante a simulação. Essa definição exclui dessa consideração os métodos contínuos sem malha (*meshless* ou *meshfree*) incluindo o método *smoothed particle hidrodynamics* (SPH). As partículas usadas nesses métodos não são corpos físicos, mas pontos de interpolação, portanto, muito similares aos nós usados no método dos elementos finitos.

O método DEM é usado através de uma variedade de disciplinas, desde tecnologia de alimentos até engenharia de mineração, no entanto, a primeira publicação na área foi feita por Cundall e Strack (1979). Desde essa publicação o interesse de geotécnicos por esse método tem crescido muito nos últimos anos, ajudado pelo aumento da capacidade dos computadores. Existem duas principais motivações para o uso do DEM na simulação de solos e materiais granulares. No primeiro caso, o DEM permite que carregamentos e deformações possam ser aplicados a amostras virtuais para simular testes laboratoriais, sendo possível monitorar e analisar a resposta mecânica. Portanto, o DEM se apresenta como uma ferramenta valiosa para a compreensão científica rigorosa do comportamento de solos e materiais granulares. A segunda motivação para o uso do DEM é que ele permite a análise da mecânica envolvida em problemas com grandes deslocamentos. Esses problemas não podem ser facilmente modelados usando as tradicionais abordagens baseadas na mecânica do contínuo.

1.2.2 Aplicação do DEM na Modelagem de Materiais Granulares

Tanto Duran (2012) como Zhu *et al.* (2007) dividem as técnicas numéricas usadas no DEM em duas categorias, chamadas de *soft sphere* e *hard sphere*. A diferença básica dos métodos de cada categoria é se as partículas são aproximadas como sendo deformáveis (*soft sphere*), no qual a penetração entre as partículas é permitida no contato, ou se são consideradas rígidas (*hard sphere*), no qual nenhuma deformação ou penetração é considerada. Ambas abordagens são transientes e dependentes do tempo, significando que a evolução do sistema em um período de tempo é considerada pelo exame do estado de arranjo das partículas em intervalos distintos de tempo.

O termo *hard* se refere a ausência de penetração ou deformação durante o impacto das partículas. A colisão das partículas não é necessariamente de interesse podendo ser considerada instantânea. Esses métodos partem das equações envolvendo a transferência de energia, sendo que a força de contato não é considerada explicitamente. Esse tipo de modelo reconhece que, quando partículas colidem, a energia é dissipada por deformação plástica e calor. A perda de energia quando uma colisão ocorre é caracterizada somente pelo coeficiente de restituição elástico, sendo que são adotados valores diferentes para o coeficiente de restituição normal e tangencial.

Os algoritmos baseados no método *hard sphere* analisam eventos sequencialmente na ordem em que eles ocorrem. Isso significa que a qualquer instante de tempo durante a simulação apenas uma colisão pode ocorrer. O passo de tempo usado nessas simulações é igual ao tempo entre uma colisão e a próxima. Entre duas colisões as partículas se movem ao longo de uma trajetória uniforme. Aplicações desse método podem ser encontradas em problemas que envolvem escoamento granular rápido, nos quais o material está parcialmente ou completamente fluidizado, como em avalanches ou simulações de gases industrias. Como a abordagem por *hard sphere* não se aplica ao domínio que se deseja modelar neste trabalho, os métodos baseados nessa abordagem não são considerados aqui.

O princípio que envolve a abordagem por soft sphere é resolver, em incrementos de tempo discretos, as equações que governam o equilíbrio dinâmico das partículas em contato. Isso contrasta com a abordagem anterior, baseada nas equações de conservação de energia. O termo soft, no entanto, conduz a uma interpretação inadequada, uma vez que as partículas em uma simulação com soft sphere são na verdade rígidas, no entanto, elas permitem penetração nos pontos de contato. Nessa abordagem a componente normal da força de contato entre partículas é calculada considerando a penetração entre as partículas, nas quais assume-se geralmente que a penetração da partículas será pequena. A força tangencial é calculada a partir do deslocamento relativo tangencial entre as partículas em contato, e possui direção ortogonal a força normal. Em contraste com a abordagem por hard sphere, onde apenas uma colisão pode ser considerada a cada passo de tempo, a abordagem por soft sphere possibilita múltiplos contatos simultâneos, de acordo com o que geralmente ocorre em simulações estáticas ou quase-estáticas de materiais granulares. Conforme apontado por O'Sullivan et al. (2002), vários algoritmos se enquadram na abordagem por soft sphere, no entanto, o método mais usado é o método dos elementos distintos, originalmente descrito por Cundall e Strack (1979). Dada a importância e a larga aplicação do método proposto por Cundall, os termos método dos elementos discretos e método dos elementos distintos são essencialmente usados para designar o mesmo método. No entanto, em uma análise criteriosa, o método dos elementos distintos é um dos tipos de métodos de elementos discretos soft sphere. Por ser o método mais usado nas atuais publicações de geomecânica, neste trabalho será abordado o método dos elementos distintos que será chamado de método dos elementos discretos, por ser amplamente nomeado dessa forma.

1.2.3 DEM e Dinâmica Molecular

É importante salientar as semelhanças entre o DEM e dinâmica molecular (*Molecular Dynamics* - MD). Conforme descrito por O'Sullivan (2011a), dinâmica Molecular é uma ferramenta de análise amplamente utilizada em química, bioquímica e ciência dos materiais. Utilizando esse método os materiais são estudados no nível mais fundamental pela simulação da interação entre moléculas e átomos. O objetivo desses estudos é relacionar as propriedades macroscópicas do material (seja um líquido, sólido ou gás) à interações atômicas fundamentais. Essas partículas são modeladas como centros pontuais e interagem por potenciais de contato. A escala de tempo de interesse em dinâmica molecular é da ordem de 1 μ s, e as dimensões analisadas então entre 10 e 100 angströms (LUBICH, 2008).

Líquidos tendem a ser os materiais mais comumente considerados em simulações de dinâmica molecular, geralmente aplicados na análise de transformação de fase. De fato o método foi inicialmente proposto por Alder e Wainwright (1959) que descreveu a transformação de fase de um sistema constituído por um conjunto de esferas rígidas.

Conforme mencionado acima, os métodos sem malha, incluindo o SPH, são outros tipos de métodos baseados em partículas que possuem ampla utilização em uma variedade de aplicações, incluindo também aplicações em geotécnica. A base dos métodos sem malha é que as partículas são usadas como pontos de interpolação no qual o deslocamento do material é acompanhado sendo que o material é contínuo entre esses pontos. Esses métodos diferem muito do DEM, uma vez que formulação do método não vem da mecânica do contínuo, e as partículas representam grãos reais do material que se deseja simular.

1.2.4 Visão Global do DEM

A sequência de etapas envolvidas em uma simulação do DEM são muito parecidas com outros métodos numéricos, como o FEM por exemplo. Pode-se dividir uma simulação do DEM em

3 etapas:

- Dados iniciais e pré-processamento: Inicialmente é necessário definir os dados de entrada do problema, incluindo a geometria do domínio espacial, número e dimensão das partículas, propriedades e parâmetros de contato. Esses dados são pré-processados de forma a gerar a condição inicial do sistema.
- Processamento: A cada incremento de tempo são detectadas quais partículas estão em contato e calculadas as respectivas forças de contato de acordo com o modelo constitutivo adotado. A magnitude das forças de contato é relacionada com a penetração das partículas e com as velocidades relativas no ponto de contato. Calculadas as forças de contato é possível determinar a força e o momento resultantes atuando no centroide de cada partícula. Então, sabendo-se a massa e momento de inércia de cada partícula, as equações de equilíbrio são resolvidas e determinam-se suas acelerações. Usando um esquema de integração explícito no tempo determina-se os incrementos de translação e rotação das partículas, e consequentemente suas novas posições no domínio espacial. No próximo incremento de tempo repete-se os cálculos usando-se as posições e velocidades atualizadas, até atingir o tempo de simulação desejado.
- Pós-processamento: Após o término da simulação é realizado o pós-processamento dos resultados obtidos de acordo com os objetivos desejados.

Neste trabalho são assumidas as seguintes hipóteses na formulação do DEM:

- O solo ou material granular é aproximado por um conjunto de partículas rígidas, com massa e momento de inércia finitos, podendo ser descritas analiticamente.
- O domínio espacial é bidimensional. As partículas podem ser mover de forma independente umas das outras, podendo transladar e rotacionar.
- O Algoritmo detecta automaticamente os contatos entre as partículas.
- Os contatos entre as partículas ocorrem em uma área infinitesimal, sendo que cada contato envolve apenas duas partículas.
- É permitido que as partículas se sobreponham ligeiramente nos pontos de contato, sendo essa penetração análoga a deformação que ocorre no contato de partículas reais.

- As forças de contato são calculadas a partir de penetração sofrida pelo par de partículas em contato.
- O incremento de tempo escolhido no DEM deve ser pequeno o suficiente para permitir que o deslocamento das partículas em um dado passo de tempo seja suficientemente pequeno para influenciar apenas as partículas vizinhas.

1.3 Revisão Bibliográfica

Uma breve revisão bibliográfica sobre os temas relacionados ao trabalho é apresentada nessa seção. A revisão se concentra nos trabalhos mais relevantes na aplicação do DEM para a simulação de solos e materiais granulares, além da simulação do processo de interação solo-estrutura. Também são apresentados os trabalhos mais recentes envolvendo o acoplamento DEM-FEM.

1.3.1 Formulação

Pode-se considerar que o primeiro passo no desenvolvimento do DEM aplicado na simulação de materiais granulares ocorreu no final da década de 70 com o trabalho de Cundall e Strack (1979). A formulação inicial do método era bidimensional e considerava apenas a existência de contatos normais e tangenciais entre as partículas circulares. A implementação numérica do método suportava a simulação de um número muito reduzido de partículas devido as limitações computacionais da época, mas permitiu a execução de alguns testes de verificação que mostraram o potencial do método para a simulação do comportamento de materiais granulares. Este trabalho é até hoje considerado a referência básica do DEM, principalmente para sua aplicação na simulação de materiais granulares.

Nos primeiros anos após sua introdução, a capacidade computacional disponível na época foi um dos fatores limitantes para a utilização do DEM. No levantamento realizado por O'Sullivan (2011a), e reproduzido na Figura 1.2, é possível observar o número de publicações utilizando o DEM de 1975 até 2010.

Observa-se na Figura 1.2 que somente no final da década de 80, com o desenvolvimento da capacidade computacional disponível, houve um aumento do número de publicações utilizando o



Figura 1.2: Número de publicações anuais utilizando o DEM (O'SULLIVAN, 2011a).

DEM. Tiang *et al.* (1989) realizou testes de validação numéricos em um modelo DEM bidimensional, semelhante ao proposto por Cundall e Strack (1979), com até 8500 partículas. Para a validação numérica do algoritmo foram realizadas simulações semelhantes aos testes laboratoriais típicos empregados em geotécnica como o ensaios de cisalhamento e o triaxial. Com o resultado dos testes os autores concluíram que o DEM é uma ferramenta numérica eficaz para simular o comportamento estático e dinâmico de solos.

A partir desse ponto, derivações do algoritmo original começaram a ser empregados em diversas outras aplicações. No trabalho de (CUNDALL E HART, 1992) é apresentado um resumo dos principais aspectos físicos e teóricos envolvidos na modelagem de um sistema com partículas discretas, indicando a diversidade de possíveis aplicações do DEM. Neste trabalho são apresentadas as duas principais formulações para o contato das partículas, *soft sphere* e *hard sphere*. Essa divisão ainda é amplamente empregada nas técnicas numéricas do DEM, conforme descrito por Duran (2012) e Zhu *et al.* (2007). São abordadas também as técnicas de detecção de contato e aspectos práticos da implementação numérica do DEM.

Com o surgimento de aplicações do DEM nos mais diversos ramos das ciências, como em mineração, armazenamento de grãos, escoamentos de fluidos viscosos, mecânica da fratura, engenharia civil, além de geomecânica, surgiram também várias modificações e implementações na formulação original do DEM. Especificamente na simulação de materiais granulares como solos e areias, a incorporação do contato de rolamento foi de grande importância para o desenvolvimento do método. Com a formulação clássica do DEM proposta por Cundall e Strack (1979) não é possível capturar uma das características típicas desse tipo de material, a formação de pilhas. Portanto, nesse contexto o trabalho de Iwashita e Oda (1998) foi um dos primeiros a incorporar o contato de rolamento na formulação original do DEM, de forma a capturar a resposta real de materiais granulares.

Os modelos de contato de rolamento foram estudados por outros autores. Zhou *et al.* (1999) realizou a comparação dos resultados da simulação com experimentos reais utilizando partículas com tamanho e propriedades controlados. Os resultados demostraram que a incorporação do atrito de rolamento no modelo de contato possibilita capturar o comportamento real de materiais granulares. Jiang *et al.* (2005) também propôs um modelo DEM bidimensional com a incorporação de resistência de rolamento para a simulação de materiais granulares.

Mais recentemente, Ai *et al.* (2011) fez uma revisão dos modelos de atrito de rolamento mais usuais no DEM. Analisaram-se quatro modelos e através de testes numéricos foi avaliado o desempenho de cada um e suas principais vantagens e desvantagens. Ao final o autor propôs um modelo de atrito de rolamento mais genérico e robusto, apropriado para a modelagem de materiais granulares tanto em regime dinâmico quanto pseudo-estático. O algoritmo proposto é usado na simulação da formação de pilhas com partículas bidimensionais.

O emprego do DEM para simular materiais granulares reais implica no emprego de um número realístico de partículas na simulação. Como a detecção dos contatos é um dos processos de maior esforço computacional no DEM, muitos métodos foram desenvolvidos a fim de tornar esse processo mais eficiente. Em Munjiza (2004) é feito uma listagem dos principais algoritmos de detecção de contato disponíveis, e suas vantagens e desvantagens para cada tipo de partícula. Em Munjiza e Andrews (1998) é proposto um algoritmo de detecção de contato para partículas de dimensão similar. Já Peters *et al.* (2009) propõe um algoritmo de detecção de contato para partículas de tamanhos muitos diferentes.

A determinação dos parâmetros de contato usados no DEM também tem sido alvo de estudos importantes. Nessa área é importante destacar o trabalho de Malone e Xu (2008), onde é apresentada uma metodologia de determinação dos parâmetros de contato baseando-se nas propriedades físicas das partículas. Também é feita uma revisão dos principais métodos de determinação do passo de tempo crítico do DEM.

1.3.2 Penetração de Corpos Rígidos

O potencial do DEM para simular a penetração de corpos rígidos no solo também é reconhecido há bastante tempo. O primeiro estudo de impacto nessa área foi feito por Huang e Ma (1994), onde foi simulado a penetração de cone em um sistema de partículas bidimensionais. Mais recentemente Jiang *et al.* (2006) também realizou simulações de penetração de um cone em um domínio bidimensional.

Tanaka *et al.* (2000) analisou a força de resistência à penetração em conjunto de partículas bidimensionais. Com uma implementação clássica de DEM com atrito de rolamento, os resultados obtidos da simulação numérica se mostraram coerentes com os resultados experimentais, apesar do valor da força de resistência ser ligeiramente menor na simulação numérica.

1.3.3 Contato Solo-Estrutura

Diferentemente do problema de penetração descrito acima, tem-se poucas publicações do DEM aplicado na simulação do contato solo-estrutura (O'SULLIVAN, 2011a). Calvetti *et al.* (2004a) considerou o problema com grandes deslocamentos de um tubo sendo movido em uma caixa de areia. O objetivo era estudar o impacto causado por deslizamentos de areia em tubulações. As partículas foram modeladas como esferas onde a rotação não era permitida. Foi observado que os resultados numéricos estavam qualitativamente de acordo com os resultados experimentais.

Em outro estudo, Calvetti *et al.* (2004b) utilizou partículas bidimensionais para simular a interação de muros de contenção com as rochas de minas abandonadas. A degradação das rochas devido ao contato com a estrutura foi simulada com uma abordagem baseada no DEM e no FEM. Os resultados apontaram para a boa representatividade do DEM para simular o comportamento de rochas em contato com as estruturas de contenção nas minas.

No trabalho de Jenck *et al.* (2009) é analisado o processo de preparo do solo através de estaqueamento, técnica comumente usada na engenharia civil para possibilitar construções em solos originalmente não apropriados para suportar o peso da construção. Em sua simulação o solo foi modelado por partículas bidimensionais e as estacas consideradas como corpos rígidos. A simulação permitiu avaliar o carregamento gerado pelas estacas no solo. Usando formulações baseadas em mecânica do contínuo a bibliografia disponível é muito mais extensa. No problema de contato de dutos com o solo nota-se os trabalhos de Pesce *et al.* (2006). Na aplicação das teorias de fundação elástica no contato solo-estrutura destaca-se o trabalho de Barros *et al.* (2009). Labaki *et al.* (2013) também analisou o problema de contato solo-estrutura aplicado em placas.

1.3.4 Acoplamento DEM-FEM

Vários trabalhos tem sido conduzidos na área do acoplamento DEM-FEM porém poucos se referem à simulações de contato solo-estrutura. O acoplamento DEM-FEM tem sido empregado com sucesso nas áreas de mecânica da fratura, processos de condução de calor e até mesmo na simulação da performance de pneus (NAKASHIMA E OIDA, 2004).

No trabalho de Azevedo e Lemos (2006) é proposto um modelo híbrido DEM-FEM bidimensional para análise de fratura. O meio contínuo é modelado pelo FEM e na região da fratura o material é discretizado em partículas, sendo então modelado pelo DEM.

Especificamente na área de interação solo-estrutura o primeiro trabalho de impacto utilizando modelos acoplados DEM-FEM foi feito por Onate e Rojek (2004). Neste trabalho um modelo DEM bidimensional é acoplado com um modelo FEM quase-incompressível e aplicado na simulação de problemas geomecânicos envolvendo rochas e solos em contato com estruturas. Nas simulações foram analisados ensaios de compressão e corte de rochas, o impacto de uma estrutura metálica contra um material rochoso e o processo de ovalização que ocorre no contato de um tubo com o solo. Conclui-se com o trabalho que o acoplamento DEM-FEM é uma abordagem eficiente para a simulação de problemas de geomecânica envolvendo fratura, penetração e contato solo-estrutura. É importante salientar que no acoplamento dos dois métodos usou-se um esquema semi-explícito de integração no tempo, que acoplava o integrador explícito do DEM com o semi-implícito do FEM.

Han *et al.* (2000) desenvolveu um método de acoplamento DEM-FEM para simular o processo de conformação mecânica conhecido como *shot peening*. As partículas de material que são usados no processo foram modeladas pelo DEM e o peça que recebe o tratamento modelada pelo FEM. Fakhimi (2009) propôs um modelo acoplado DEM-FEM para simular o ensaio triaxial, comumente usado em testes geotécnicos. Neste modelo o FEM é usado para simular uma parede deformável em torno do solo modelado por DEM.

Mais recentemente Dang e Meguid (2013) desenvolveu um algoritmo acoplado DEM-FEM para a análise de problemas de interação solo-estrutura quase-estáticos. Na formulação do FEM adotou-se o algoritmo de relaxação dinâmico adaptativo para materiais elastoplásticos com amortecimento de Rayleigh, enquanto no DEM adotou-se a formulação clássica proposta por Cundall e Strack (1979). O desempenho do algoritmo na solução de problemas práticos de interação soloestrutura foi investigado através da simulação do problema de tunelamento em torno de uma tubulação enterrada no solo.

1.4 Objetivos e Contribuições

O objetivo principal deste trabalho é propor, implementar e validar uma metodologia de acoplamento do DEM com o FEM para simulação de problemas de contato solo-estrutura.

Pode-se mencionar como objetivos específicos deste trabalho:

- Implementação de um algoritmo DEM explícito bidimensional.
- Implementação de uma metodologia sistemática para o cálculo dos parâmetros de contato do DEM.
- Implementação de um algoritmo FEM dinâmico linear.
- Validação do algoritmo DEM.
- Validação do algoritmo acoplado DEM-FEM.

A metodologia proposta foi aplicada na simulação de duas configurações de contato soloestrutura encontradas na área de exploração de petróleo em águas profundas.

A contribuição deste trabalho é o desenvolvimento de uma metodologia integrada de simulação que permitiu a solução de problemas de interação solo-estrutura. Essa metodologia foi implementada em um código Matlab e C++ que ficará disponível para a continuidade de pesquisas na área.

1.5 Descrição do Trabalho

O presente trabalho foi organizado e sistematizado em seis capítulos visando estruturar o conteúdo abordado nesta pesquisa. Neste primeiro capítulo são descritas as linhas gerais desta tese, bem como seus principais objetivos e motivações. O capítulo apresenta ainda uma breve revisão da literatura referente aos temas abordados neste trabalho.

No segundo capítulo é apresentada a formulação do domínio discreto (DEM) e do domínio contínuo (FEM). O capítulo apresenta um estado sobre a determinação dos parâmetros de contato das partículas. É apresentado também o esquema de acoplamento DEM-FEM proposto.

O terceiro capítulo expõe questões relativas a implementação do algoritmo acoplado DEM-FEM. O capítulo apresenta uma sequência de testes visando validar o código computacional implementado.

Os principais resultados obtidos para a simulação do contato solo-estrutura com a utilização do código implementado estão presentes no quarto capítulo. São analisadas duas configurações de contato envolvidas na motivação deste trabalho.

Por último, o quinto capítulo faz considerações sobre o trabalho, comentando os resultados obtidos com a metodologia proposta e propondo sugestões para trabalhos futuros.

2 Modelagem do Problema

Neste trabalho a modelagem do problema do acoplamento dinâmico de meios sólidos e meios granulares é feita usando-se uma estratégia híbrida. O meio granular ou discreto é modelado através do método dos elementos discretos (*Discrete Element Method* - DEM) enquanto a estrutura ou meio sólido é modelada pelo métodos dos elementos finitos (*Finite Element Metohd* - FEM) para a discretização das equações governantes. A seguir são apresentados, de forma resumida, os dois métodos empregados. Por se tratar de um problema acoplado DEM-FEM é apresentado também a solução proposta para o acoplamento dos dois meios.

2.1 Formulação do DEM

Adotou-se neste trabalho a versão do DEM com partículas bidimensionais circulares, que é reconhecido por ser um modelo adequado para tratar materiais geológicos (ONATE E ROJEK, 2004), tais como os solos encontrados nos problemas de iteração solo-riser nas aplicações da área de engenharia de petróleo. Foi implementada uma formulação dinâmica explícita, seguindo os principais pressupostos utilizados por Cundall e Strack (1979). Dentro do DEM é assumido que o material sólido pode ser representado como um conjunto de elementos rígidos (esferas em 3D e discos em 2D) interagindo uns com os outros na direção normal e tangencial que no contexto desse trabalho serão chamadas de partículas. É adotado que a deformação do material é concentrada nos pontos de contato, leis de contato apropriadas permitem obter as propriedades macroscópicas desejadas do material.

2.1.1 Equações de Movimento

Os movimentos de translação e rotação de corpos rígidos, partículas circulares no plano neste caso, mostrados na Figura 2.1, são descritos pela segunda lei de Newton. Neste trabalho definiu-se que o plano é formado a partir do subespaço euclidiano \Re^3 pelos vetores diretores $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ e $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$, formando o chamado plano xy.

Para a i-ésima partícula do sistema tem-se três graus de liberdades, que são descritos pelas



Figura 2.1: Movimento de um corpo rígido.

seguintes equações de movimento em função do tempo t:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = \ddot{x}_i(t) = \frac{F_{xi}(t)}{m_i}$$
(2.1)

$$\frac{d^2 y(t)}{dt^2} = \ddot{y}_i(t) = \frac{F_{yi}(t)}{m_i}$$
(2.2)

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} = \ddot{\theta}_i(t) = \dot{\omega}_i(t) = \frac{T_i(t) + M_i(t)}{I_i}$$
(2.3)

onde $x_i(t)$ e $y_i(t)$ são as posições do centroide da partícula i disposta em um sistema de coorde-

nadas fixo x e y, respectivamente; $\theta_i(t)$ é a posição angular da partícula ao longo da direção z, perpendicular ao plano de translação xy; $\omega_i(t)$ é a velocidade angular da partícula na direção z; m_i é a massa da partícula; I_i é o momento de inércia com relação ao centroide na direção z; $F_{xi}(t)$ e $F_{yi}(t)$ são as componentes das forças resultantes atuando no centroide da partícula ao longo das direções x e y, respectivamente; $T_i(t) e M_i(t)$ são o torque e o momento resultante sobre o eixo central da partícula, direção z. Os valores de $F_{xi}(t)$, $F_{yi}(t)$, $T_i(t) e M_i(t)$ são a soma (resultante) de todas as forças, torques e momentos aplicados a i-ésima partícula devido ao carregamento externo, interações de contato com as partículas vizinhas ou com os limites do domínio espacial e outros obstáculos, assim como forças de amortecimento viscoso atuantes no sistema. A equação do movimento para a rotação, equação 2.3, é válida para cilindros no plano.

Assume-se neste trabalho que as partículas são cilindros no plano com altura unitária, resumindo-se dessa forma a discos no espaço 2D. Dessa forma, para uma partícula *i* constituída de um material com densidade ρ_i , tem-se que a massa e o momento de inércia são dados por,

$$m_i = \pi r_i^2 \rho_i \tag{2.4}$$

$$I_i = \frac{1}{2}m_i r_i^2 \tag{2.5}$$

É importante salientar o motivo da distinção entre torque e momento na equação 2.3. No contexto deste trabalho faz-se a distinção entre torque e momento, conforme será visto nas próximas seções, pois define-se que torque, $(T_i(t))$, é gerado a partir de uma força tangencial proveniente do contato tangencial de atrito e momento, $(M_i(t))$, é gerado pelo contato de rolamento entre duas partículas. Essa distinção tem a finalidade de deixar mais clara a origem das forças envolvidas em cada contato entre as partículas, uma vez que o torque, por ser gerado por uma força tangencial, contribui também para o somatório de forças no plano xy, enquanto o momento não.

Assim obtêm-se três equações de movimento unidimensionais, uma para cada grau de liberdade, dadas pelas equações 2.1, 2.2 e 2.3, que governam o movimento das partículas no plano.

2.1.2 Integração Numérica

No DEM, como em outros métodos numéricos, o tempo é discretizado, sendo que em cada iteração (passo de tempo) do método, as equações de movimento de Newton, dadas pelas equações 2.1, 2.2 e 2.3, são resolvidas para cada partícula do sistema. Tomando-se um passo de tempo suficientemente pequeno para cada iteração, é possível aproximar através de um método numérico quais as novas posições e velocidades das partículas no final da iteração. Com as novas posições e velocidades das partículas, as forças, torques e momentos ($F_{xi}(t)$, $F_{yi}(t)$, $T_i(t)$ e $M_i(t)$) resultantes atuando nas partículas são recalculadas e procede-se uma nova iteração. Esse procedimento é repetido várias vezes até se obter o tempo de simulação desejado.

O método numérico usado para avançar uma iteração no tempo é conhecido como método de integração. No DEM é amplamente usada uma derivação do método de integração de Verlet, um algoritmo clássico para integrar numericamente as equações de movimento de Newton.

O método de integração de Verlet foi inicialmente proposto pelo matemático francês Jean Delambre em 1960, mas se popularizou após o físico francês Loup Verlet aplicá-lo nos primeiros cálculos de dinâmica molecular (VERLET, 1967). Atualmente, variações desse método são amplamente aplicadas para integração explícita no tempo em dinâmica molecular e também no DEM.

A integração das equações de movimento de Newton através do método de Verlet é baseada na expansão em séries de Taylor. Tomando como exemplo a equação 2.1 para translação na direção x, a expansão em séries de Taylor da posição x_i da partícula i no instante $t + \Delta t$ e $t - \Delta t$ com relação ao instante t, onde Δt é um incremento de tempo, fornece

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \Delta t x_i'(t) + \frac{\Delta t^2}{2!} x_i''(t) + \frac{\Delta t^3}{3!} x_i'''(t) + O(\Delta t^4)$$
(2.6)

$$x_i(t - \Delta t) = x_i(t) - \Delta t x_i'(t) + \frac{\Delta t^2}{2!} x_i''(t) - \frac{\Delta t^3}{3!} x_i'''(t) + O(\Delta t^4)$$
(2.7)

Adicionando as equações 2.6 e 2.7 obtém-se

$$x_i(t + \Delta t) + x_i(t - \Delta t) = 2x_i(t) + \Delta t^2 x_i''(t) + O(\Delta t^4)$$
(2.8)

Nota-se que a derivada de $x_i(t)$ com relação a $t, x_i'(t)$, é equivalente a velocidade da partícula, $\dot{x}_i(t)$, e a derivada segunda de $x_i(t)$ com relação a $t, x_i''(t)$, é equivalente a aceleração da partícula $\ddot{x}_i(t)$. Fazendo-se essas substituições obtém-se

$$x_i(t + \Delta t) + x_i(t - \Delta t) = 2x_i(t) + \Delta t^2 \ddot{x}_i + O(\Delta t^4)$$
(2.9)

Substituindo a equação 2.1 na equação 2.9 e resolvendo para $x_i(t + \Delta t)$ tem-se

$$x_i(t + \Delta t) = 2x_i(t) - x_i(t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{m_i}F_{xi}(t) + O(\Delta t^4)$$
(2.10)

O tempo é uma variável contínua, mas para realizar a implementação numérica da equação 2.10 é necessário que a solução seja gerada para passos de tempo discretos, de tal forma que

$$t_{n+1} - t_n = \Delta t \tag{2.11}$$

Sendo n o número da iteração. Discretizando o tempo na equação 2.10 leva ao algoritmo de Verlet original

$$x_i(t_{n+1}) = 2x_i(t_n) - x_i(t_{n-1}) + \frac{\Delta t^2}{m_i} F_{xi}(t_n) + O(\Delta t^4)$$
(2.12)

Nota-se que a equação de Verlet necessita de dois passos de tempo anteriores, t_n e t_{n-1} , para avançar a solução no tempo, e é um método com erro de quarta ordem. Observa-se também que a velocidade não é explicitamente descrita no algoritmo de Verlet. Isso é um problema potencial no DEM, pois para o cálculo das forças de contato das partículas é necessário o conhecimento de suas velocidades, conforme será descrito posteriormente. Além disso, a velocidade no instante t_n não pode ser calculada enquanto a posição no instante de tempo t_{n+1} é obtida. Como resultado, a velocidade é geralmente calculada a partir das posições usando uma aproximação baseada na derivada da posição.

$$\dot{x}_i(t_n) = \frac{x_i(t_{n+1}) - x_i(t_{n-1})}{2\Delta t}$$
(2.13)

Também se observa que o algoritmo de Verlet, equação 2.12, requer um procedimento de inicialização, uma vez que utiliza o valor das posições em dois passos de tempo anteriores (instantes t_n e t_{n-1}). Isso normalmente é resolvido usando um integrador menos preciso, que requer as informações apenas do passo de tempo anterior, como o método de Euler, para completar o primeiro passo de tempo. Depois, nos passos de tempo seguintes, a integração é continuada com o método de Verlet. Tal procedimento pode acarretar transientes indesejáveis no início da simulação.

O fato de método de Verlet fornecer as velocidades com um atraso de um passo de tempo com relação as posições das partículas é especialmente crítico para sua aplicação no DEM. Em dinâmica molecular as forças atuando nas partículas são calculadas a partir de potenciais de energia, que necessitam apenas da informação das suas posições, portanto, o conhecimento das velocidade no instante de tempo atual não é um fator crítico. Já no DEM, para o cálculo das forças de contato entre as partículas é necessário o conhecimento das posições e velocidades das partículas no mesmo instante de tempo, o que inviabiliza a aplicação do método de Verlet.

A fim contornar as dificuldades apresentadas acima para aplicar o método de Verlet original no DEM, foi desenvolvido uma variação do método, conhecido como Verlet *leapfrog* (que poderia ser traduzido como o salto de Verlet) (SCHLICK, 2010). Usando o esquema de diferença centrada para aproximar a derivada da posição da partícula *i*, a velocidade no instante central entre os instantes de tempo t_n e t_{n+1} pode ser definida por

$$\dot{x}_i(t_{n+1/2}) = \frac{x_i(t_{n+1}) - x_i(t_n)}{\Delta t}$$
(2.14)

que pode ser resolvido para $x_i(t_{n+1})$, resultando em
$$x_i(t_{n+1}) = x_i(t_n) + \Delta t \, \dot{x}_i(t_{n+1/2})$$
(2.15)

Similarmente, definindo a velocidade no instante central entre os instantes de tempo t_{n-1} e t_n , tem-se

$$\dot{x}_i(t_{n-1/2}) = \frac{x_i(t_n) - x_i(t_{n-1})}{\Delta t}$$
(2.16)

A aceleração no instante de tempo t_n pode ser definida, de maneira equivalente, usando-se o esquema de diferença centrada para aproximar a derivada da velocidade entre os instantes de tempo $t_{n-1/2}$ e $t_{n+1/2}$, o que resulta em

$$\ddot{x}_i(t_n) = \frac{\dot{x}_i(t_{n+1/2}) - \dot{x}_i(t_{n-1/2})}{\Delta t}$$
(2.17)

Substituindo a equação 2.1 na equação 2.17 tem-se

$$\frac{\dot{x}_i(t_{n+1/2}) - \dot{x}_i(t_{n-1/2})}{\Delta t} = \frac{F_{xi}(t_n)}{m_i}$$
(2.18)

que pode ser resolvida para $\dot{x}_i(t_{n+1/2})$,

$$\dot{x}_i(t_{n+1/2}) = \dot{x}_i(t_{n-1/2}) + \frac{\Delta t}{m_i} F_{xi}(t_n)$$
(2.19)

Desta forma, as equações 2.15 e 2.19 constituem o algoritmo de integração explícito de Verlet *leapfrog*, que foi implementado neste trabalho.

O método de Verlet *leapfrog* possui algumas vantagens em relação ao método de Verlet original. Para o DEM ele é especialmente útil uma vez que a velocidade é incluída explicitamente no método, ao contrário do que ocorre no método de Verlet original. Observa-se que as velocidades e posições ainda são fornecidas com uma defasagem de meio passo de tempo, uma vez que as velocidades são obtidas na metade dos instantes de tempo $(t_{n+1/2}, t_{n+3/2}, t_{n+5/2}, ...)$ enquanto as posições são obtidas nos instantes inteiros de tempo $(t_{n+1}, t_{n+2}, t_{n+3}, ...)$. No entanto, no DEM classicamente essa defasagem de meio passo de tempo é ignorada na implementação do método, assumindo-se que a velocidade no instante $t_{n-1/2}$, dada por $\dot{x}_i(t_{n-1/2})$, e a posição no instante t_n , dada por $x_i(t_n)$, ocorrem simultaneamente (no mesmo instante de tempo, t_n). Essa aproximação é utilizada pela grande maioria das implementações de DEM baseadas em *rigid contact* que utilizam o integrador explícito de Verlet *leapfrog* (O'SULLIVAN, 2011a).

Dessa forma, para avançar um passo de tempo, do instante t_n para t_{n+1} , após serem calculadas a forças, torques e momentos resultantes atuando nas partículas do sistema no instante t_n (calculadas a partir das posições no instante t_n e das velocidades no instante $t_{n-1/2}$), resolve-se as equações do método de Verlet *leapfrog* para cada grau de liberdade a fim de determinar as posições e velocidades no instante de tempo t_{n+1} . Abaixo tem-se as equações do integrador de Verlet *leapfrog* expressas para os três graus de liberdade.

Translação na direção x:

$$\dot{x}_i(t_{n+1/2}) = \dot{x}_i(t_{n-1/2}) + \Delta t F_{xi}(t_n)/m_i$$

$$x_i(t_{n+1}) = x_i(t_n) + \Delta t \, \dot{x}_i(t_{n+1/2})$$
(2.20)

Translação na direção y:

$$\dot{y}_i(t_{n+1/2}) = \dot{y}_i(t_{n-1/2}) + \Delta t F_{yi}(t_n)/m_i
y_i(t_{n+1}) = y_i(t_n) + \Delta t \, \dot{y}_i(t_{n+1/2})$$
(2.21)

Rotação na direção z:

$$\omega_i(t_{n+1/2}) = \omega_i(t_{n-1/2}) + \Delta t [T_i(t_n) + M_i(t_n)] / I_i$$

$$\theta_i(t_{n+1}) = \theta_i(t_n) + \Delta t \, \omega_i(t_{n+1/2})$$
(2.22)

O conhecimento da posição angular θ_i das partículas é necessário para calcular as forças de contato tangenciais.

2.1.3 Algoritmo de Detecção de Contato

Conforme mencionado por Peters *et al.* (2009), o maior esforço computacional em uma simulação de DEM é a detecção do contatos entre as partículas, portanto, um algoritmo de detecção eficiente é essencial para atingir o desempenho computacional desejado. Os pares de partículas em contato devem ser automaticamente detectados a cada iteração do DEM, para que a força entre elas possa ser calculada. O procedimento de busca completa por vizinhos é muito ineficiente, uma vez que o tempo computacional é proporcional a i^2 , onde i é o número de partículas presentes na simulação. Na formulação implementada, baseada no algoritmo proposto do Munjiza e Andrews (1998), a detecção de contatos é baseada em um algoritmo que divide o domínio, de dimensão L_x por L_y , em uma grade regular de elementos quadrados. Todos os elementos dessa grade são numerados, contados da esquerda para a direita e de baixo para cima, conforme mostrado na Figura 2.2. A cada iteração n (instante de tempo t_n), o algoritmo determina, a partir das coordenadas do centroide da partícula ($x_i(t_n), y_i(t_n)$) em quais elementos da grade as partículas estão localizadas. A posição espacial do centroide de cada partícula no domínio é armazenada em dois vetores, cada um com dimensão ($i \ge 1$). Esses vetores, chamados de $\mathbf{X}(t_n) \in \mathbf{Y}(t_n)$, são atualizados a cada passo de tempo n.

$$\mathbf{X}(t_n) = [x_1(t_n) \ x_2(t_n) \ x_3(t_n) \ \cdots \ x_n(t_n)]$$

$$\mathbf{Y}(t_n) = [y_1(t_n) \ y_2(t_n) \ y_3(t_n) \ \cdots \ y_n(t_n)]$$

(2.23)

A grande maioria dos elementos que compõe a grade são quadrados iguais e possuem dimensão horizontal igual a divx e dimensão vertical igual a divy, sendo que nesse caso divx = divy. A exceção fica por conta dos elementos da linha superior e da coluna direita da grade, que nesse caso podem ter dimensões diferentes em virtude do tamanho do domínio espacial (L_x e L_y) não necessariamente ser igual a um múltiplo de divx ou divy. Os elementos dessa linha e coluna possuem dimensão ajustada de acordo com o resto da divisão de L_x por divx e de L_y por divy.

A dimensão *divx* e *divy* deve ser igual ao diâmetro da maior partícula presente na simulação, conforme pode ser observado na Figura 2.2. Munjiza (2004) demostrou que quando a dimensão dos elementos da grade é igual ao diâmetro da maior partícula presente na simulação, o algoritmo de detecção de contato implementado neste trabalho atinge o melhor desempenho computacional. Esse valor é também o valor mínimo para a dimensão dos elementos, uma vez que uma dimensão



Figura 2.2: Divisão do domínio espacial em um grid.

menor inviabilizaria a detecção das partículas maiores.

Sobre esse aspecto, conforme descrito por Munjiza e Andrews (1998), o algoritmo de detecção de partículas baseado na divisão do domínio em uma grade regular de elementos, que foi implementado neste trabalho, possui uma forte limitação quanto a dimensão das partículas presentes na simulação. Esse algoritmo é eficiente somente se o diâmetro das partículas da simulação forem próximos, ou seja, com uma variância pequena em torno do valor esperado. Isso ocorre pois, para simulações com partículas de diâmetros muito diferentes, como por exemplo uma razão de diâmetros entre a maior e a menor partícula maior que 2, o tamanho dos elementos da grade deverá ser igual ao diâmetro da maior partícula. Isso torna o algoritmo de detecção de contato ineficiente para as partículas menores, o que aumenta muito o tempo de simulação do DEM. Portanto, uma limitação desse algoritmo é que ele é computacionalmente eficiente apenas se as partículas possuírem diâmetros próximos.

Uma maneira eficiente de determinar em quais divisões da grade se encontram as partículas

é, primeiramente, determinar em qual divisão vertical e horizontal eles se encontram. Para isso, tomando como exemplo a direção horizontal, basta dividir o vetor $\mathbf{X}(t_n)$ por L_x e multiplicar por divx, sendo que divx é o tamanho de uma divisão horizontal da grade. O resultado dessa operação é aproximado para o próximo número inteiro fornecendo em qual divisão horizontal se encontra a partícula. O mesmo procedimento é repetido para a direção vertical, sendo que os resultados são armazenados nos vetores $\mathbf{posx}(t_n)$ e $\mathbf{posy}(t_n)$, ambos com dimensão ($i \ge 1$). Nas equações 2.24 e 2.25 são mostrados os cálculos para as direções $x \in y$:

$$\mathbf{posx}(t_n) = \operatorname{int}\left(\frac{\mathbf{X}(t_n)}{L_x}divx\right)$$
(2.24)

$$\mathbf{posy}(t_n) = \operatorname{int}\left(\frac{\mathbf{Y}(t_n)}{L_y}divy\right)$$
(2.25)

Tendo esses vetores, a determinação da localização das partículas na grade fica facilitada, pois, seguindo a numeração da grade descrita acima, a posição do elemento é dada por

$$\mathbf{pos}(t_n) = \mathbf{posy}(t_n) \left(1 - divx\right) + \mathbf{posx}(t_n)$$
(2.26)

Dessa forma, gera-se um vetor $pos(t_n)$ que informa as partículas pertencentes a cada elemento da grade. É possível, então, calcular a distância apenas entre as partículas contidas no mesmo elemento da grade e nos elementos vizinhos que são as únicas possibilidades de ocorrer contato, reduzindo drasticamente o esforço computacional do algoritmo.

A fim de tornar o cálculo das forças de reação entre as partículas mais eficiente, ao calcular a força exercida em uma determinada partícula devido ao contato com outra partícula aplica-se automaticamente a reação dessa partícula naquela. Dessa forma, o número total de cálculos é reduzido pela metade uma vez que a busca por contatos é feita apenas em metade dos elementos vizinhos da grade, conforme mostrado na Figura 2.3, onde para o elemento 56 da grade é verificado a existência de contatos apenas com os elementos 34, 35, 44. Caso existisse contato entre as partículas 1 e 2, seriam aplicadas as forças de contato em ambas as partículas (ação e reação), evitando dessa forma a necessidade de calcular as forças de contato duas vezes para o mesmo par de partículas.



Figura 2.3: Busca por contatos entre elementos vizinhos da grade.

Na Figura 2.3 observa-se que será checado o contato entre a partícula 1 e 2 apenas uma única vez, quando for verificada a vizinhança do elemento que contém a partícula 2. Caso essas duas partículas estivem em contato as forças que atuam nas duas partículas seriam prontamente aplicadas.

2.1.4 Cálculo da Força de Contato Entre as Partículas

A cada iteração do DEM, o algoritmo de contato detecta quais partículas estão em contato. Uma vez detectado o contato entre um par de partículas na iteração n (instante de tempo t_n), as forças que ocorrem no ponto de contato devem ser calculadas de acordo com a modelagem proposta, de forma a representar a interação entre os dois corpos. Neste trabalho foi adotada a modelagem por *soft sphere* (O'SULLIVAN, 2011a), de forma que as partículas são aproximadas como sendo deformáveis (*soft sphere*), onde a penetração entre as partículas é permitida nos pontos de contato. As forças de contato são proporcionais a essa penetração, sendo calculadas a partir do modelo constitutivo adotado. Foram implementados três modelos de contato, de forma que a interação entre as partículas é representada pelas forças de contato $\mathbf{F}_n(t_n)$ e $\mathbf{F}_T(t_n)$, que atuam no plano xy e pelos momentos $\mathbf{M}(t_n)$ que atuam na direção z, conforme mostrados na Figura 2.4 para o contato entre duas partículas na iteração n.



Figura 2.4: Forças e momento de contato.

 $\mathbf{F}_n(t_n)$ é chamada de força normal e atua na direção normal ao contato $\mathbf{n}(t_n)$, ou seja, se situa ao longo da linha que conecta o centro das partículas. $\mathbf{F}_T(t_n)$ é chamada de força tangencial e atua na direção perpendicular à força normal, ao longo da direção tangencial ao ponto de contato. Ambas as forças são aplicadas no ponto de contato, que corresponde ao ponto central da penetração, ao longo da direção que passa pelo centroide das duas partículas em contato. $\mathbf{M}(t_n)$ é chamado de momento de rolamento e é aplicado no centroide das duas partículas.

Aplicando-se equilíbrio de corpo rígido a cada partícula é possível determinar as forças equivalentes atuando em seus centroides devido ao contato. Na Figura 2.5 são mostradas as forças, o torque e o momento equivalentes atuando no centroide das partículas, no qual assume-se, para fins de exemplificação, que o contato ocorre apenas entre as partículas 1 e 2 e que não existem outras interações ou carregamentos externos. Os subíndices indicam que o carregamento é aplicado na partícula 1 devido ao contato com a partícula 2 ou o contrário.

O torque $\mathbf{T}(t_n)$ é gerado pela transferência da força tangencial $\mathbf{F}_T(t_n)$ para o centroide da partícula, sendo calculado por



Figura 2.5: Forças e momentos equivalentes no centroide.

$$\mathbf{T}(t_n) = \mathbf{F}_T(t_n) \times \mathbf{r}_c \tag{2.27}$$

no qual \mathbf{r}_c é o vetor que liga o centro da partícula até o ponto de aplicação das forças (ponto de contato). O torque $\mathbf{T}(t_n)$ atua na direção z juntamente com o momento $\mathbf{M}(t_n)$.

Pela terceira lei de Newton (lei da ação e reação) tem-se a seguinte relação

$$\mathbf{F}_{n12}(t_n) = -\mathbf{F}_{n21}(t_n)
\mathbf{F}_{T12}(t_n) = -\mathbf{F}_{T21}(t_n)
M_{12}(t_n) = -M_{21}(t_n)$$
(2.28)

As forças, torques e momentos podem ser expressos em termos das componentes nas direções x, y e z, de forma que, para a partícula 1, por exemplo, pode-se escrever para a iteração n

$$\mathbf{F}_{n12}(t_n) = [F_{n12_x}(t_n) \ F_{n12_y}(t_n) \ 0]
\mathbf{F}_{T12}(t_n) = [F_{T12_x}(t_n) \ F_{T12_y}(t_n) \ 0]
\mathbf{T}_{12}(t_n) = [0 \ 0 \ T_{12}(t_n)]
\mathbf{M}_{12}(t_n) = [0 \ 0 \ M_{12}(t_n)]$$
(2.29)

As forças \mathbf{F}_n e \mathbf{F}_T e o momento M de contato são obtidos usando-se um modelo constitutivo formulado para o contato entre dois corpos rígidos, conforme mostrado na Figura 2.6. Nesse modelo constitutivo cada par de partículas em contato é modelado por três modelos distintos, todos baseados na formulação clássica de DEM composta por arranjos de molas e amortecedores.



Figura 2.6: Modelos constitutivo adotado no DEM.

• Modelo de contato normal: Atua na direção normal ao contato, contribuindo para a força normal \mathbf{F}_n na direção n. É caracterizado por uma mola normal com rigidez k_n , um amortecedor normal com coeficiente de amortecimento viscoso c_n , e uma junta anti-tração que garante apenas forças de repulsão entre as partículas. O contato normal entre duas partículas existe apenas se elas estiverem em contato, e nesse caso será uma força de repulsão, dessa forma a junta ati-tração tem a finalidade de incluir esse efeito no modelo. Como a linha de ação da força \mathbf{F}_n passa pelo centroide da partícula, esse modelo não gera torque ou momento nos centroides das partículas.

- Modelo de contato tangencial: Atua na direção tangencial ao contato, contribuindo para a força tangencial, \mathbf{F}_T , e consequentemente para o torque, \mathbf{T} . É caracterizado por uma mola tangencial com rigidez k_t , um amortecedor com coeficiente de amortecimento viscoso c_t , e um cursor deslizante com coeficiente de atrito dinâmico μ_t . Esse modelo não gera força na direção normal ao contato, mas a força \mathbf{F}_T desenvolve torque na direção z, quando é transferida do ponto de contato para o centroide da partícula.
- Modelo de contato de rolamento: É caracterizado por uma mola torcional com rigidez k_r , um amortecedor torcional com coeficiente de amortecimento viscoso c_r , e uma rótula deslizante com coeficiente de resistência ao rolamento (atrito de rolamento) μ_r . Este modelo não transfere forças para as direções normal e tangencial (plano xy), somente o momento M que atua na direção z.

Cada partícula pode fazer contato com várias outras partículas na mesma iteração, de forma que, para todos os pares de partículas em contato são calculadas as forças, torques e momentos equivalentes atuando em seus centroides devido a cada interação. Somando-se a contribuição de todos os pares de contatos das partículas é possível calcular as forças resultantes atuando nas direções x e y, além do torque e momento resultantes atuando na direção z. Tomando como exemplo a partícula 1, tem-se para o caso do contato com três partículas simultâneas (partículas 2, 3 e 4):

$$F_{x1}(t_n) = F_{n12x}(t_n) + F_{n13x}(t_n) + F_{n14x}(t_n)$$

$$F_{y1}(t_n) = F_{n12y}(t_n) + F_{n13y}(t_n) + F_{n14y}(t_n)$$

$$T_1(t_n) = T_{12}(t_n) + T_{13}(t_n) + T_{14}(t_n)$$

$$M_1(t_n) = M_{12}(t_n) + M_{13}(t_n) + M_{14}(t_n)$$
(2.30)

no qual $F_{x1}(t_n)$ é a força resultante atuando no centroide da partícula 1 na direção x; $F_{y1}(t_n)$ é a força resultante atuando no centroide da partícula 1 na direção y; $T_1(t_n)$ e $M_1(t_n)$ e são o torque e o momento resultantes, respectivamente, atuando na partícula 1 na direção z. Todos ocorrem no instante de tempo t_n (iteração n).

As forças, torques e momentos resultantes são então introduzidos no algoritmo de integração

para avançar uma iteração do método para o instante t_{n+1} . Nas próximas seções são mostradas como são calculadas as forças $\mathbf{F}_n(t_n)$ e $\mathbf{F}_T(t_n)$ e o momento $\mathbf{M}(t_n)$ que ocorrem nos pares de partículas em contato.

2.1.5 Cálculo da Força de Contato Entre as Partículas e os Limites do Domínio Espacial

Uma vez detectado que uma partícula entrou em contato com o limite espacial do domínio (fronteira) na iteração n, as forças e momentos que ocorrem no ponto de contato são calculados, sendo essas responsáveis por manter as partículas dentro do domínio espacial considerado na simulação. As forças que ocorrem no contato de uma partícula com a fronteira são as mesmas que ocorrem no contato entre um par de partículas, sendo elas a força normal $\mathbf{F}_n(t_n)$, a força tangencial $\mathbf{F}_T(t_n)$ e o momento de rolamento $\mathbf{M}(t_n)$, conforme mostrado na Figura 2.7.



Figura 2.7: Contato de uma partícula com a fronteira do domínio espacial.

Conforme observado na Figura 2.7, uma partícula, ao interagir com a fronteira de um domí-

nio retangular, está sujeita apenas a forças horizontais e verticais, uma vez que a direção de contato é conhecida. Assim, uma vez identificado com qual limite do domínio ocorreu à interação da partícula, o cálculo da força de reação é facilitado, uma vez que a direção da força é imediatamente conhecida. As forças de contato $\mathbf{F}_n(t_n)$, $\mathbf{F}_T(t_n)$ e $\mathbf{M}(t_n)$ são obtidas usando-se o mesmo modelo constitutivo determinado para o contato entre duas partículas.

Assim como ocorre no contato entre um par de partículas, as forças são transferidas do ponto de contato para o centroide da partícula, resultando na adição de um torque $T(t_n)$. Essas forças, torques e momentos são adicionados ao somatório de forças e momentos, juntamente com as forças de contato entre partículas, para determinar as resultantes atuando nos centroides das partículas nas direções $x, y \in z$.

2.1.6 Cálculo da Força de Contato Normal

A cada iteração n deve-se calcular a força normal existente entre os pares de partículas em contato, e também para os contatos entre as partículas e as fronteiras do domínio espacial. Dessa forma é possível determinar a contribuição desses contatos para a resultante de forças nas direções x e y atuando no centroide das partículas presentes na simulação.

O módulo da força de contato normal, $F_n(t_n)$, é decomposto em uma parte elástica e uma parte de amortecimento, determinados por $F_n^k(t_n)$ e $F_n^d(t_{n-1/2})$, respectivamente.

$$F_n(t_n) = F_n^k(t_n) + F_n^d(t_{n-1/2})$$
(2.31)

A componente de amortecimento é usada para diminuir a oscilação da força de contato normal e para dissipar energia cinética. Para o caso do contato entre um par de partículas, o módulo da componente elástica da força de contato normal, $F_n^k(t_n)$, é proporcional a rigidez normal, k_n , e a penetração das duas partículas, $u_{rn}(t_n)$, isso é

$$F_n^k(t_n) = k_n u_{rn}(t_n) \tag{2.32}$$

Tomando como exemplo o contato entre as partículas 1 e 2, a penetração é calculada por

$$u_{rn}(t_n) = d(t_n) - r_1 - r_2$$
(2.33)

sendo $d(t_n)$ a distância entre os centroides das duas partículas, dada pela equação 2.34, e r_1 e r_2 seus respectivos raios.

$$d(t_n) = \sqrt{\left(x_2(t_n) - x_1(t_n)\right)^2 + \left(y_2(t_n) - y_1(t_n)\right)^2}$$
(2.34)

No caso do contato da partícula com os limites do domínio, o módulo da força de contato normal $F_n^k(t_n)$ será proporcional a rigidez normal, k_n , e a penetração da partícula na fronteira do domínio, $\Delta_x(t_n)$.

$$F_n^k(t_n) = k_n \Delta_x(t_n) \tag{2.35}$$

onde $\Delta_x(t_n)$ é a penetração da partícula *i* na fronteira onde ocorre o contato, dada por

$$\Delta_x(t_n) = d_{fronteira}(t_n) - r_i \tag{2.36}$$

onde r_i é o raio da partícula *i* incidente na fronteira e $d_{fronteira}(t_n)$ é a distância do centroide da partícula à fronteira onde ocorre o contato, calculado perpendicular à fronteira.

Assume-se que o amortecimento é viscoso, sendo o módulo da força de amortecimento dada por

$$F_n^d(t_{n-1/2}) = c_n v_{rn}(t_{n-1/2})$$
(2.37)

onde $v_{rn}(t_{n-1/2})$ é a projeção da velocidade relativa das duas partículas na direção normal $\mathbf{n}(t_n)$. A direção $\mathbf{n}(t_n)$, no plano xy, para o contato entre as partículas 1 e 2 é calculada por:

$$\mathbf{n}_{12}(t_n) = \frac{\left[(y_2(t_n) - y_1(t_n)) \ (x_2(t_n) - x_1(t_n)) \right]}{\left\| \left[(y_2(t_n) - y_1(t_n)) \ (x_2(t_n) - x_1(t_n)) \right] \right\|}$$
(2.38)

Os vetores $\mathbf{v}_1(t_{n-1/2})$ e $\mathbf{v}_2(t_{n-1/2})$ são definidos por

$$\mathbf{v}_{1}(t_{n-1/2}) = \begin{bmatrix} \dot{x}_{1}(t_{n-1/2}) \ \dot{y}_{1}(t_{n-1/2}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{v}_{2}(t_{n-1/2}) = \begin{bmatrix} \dot{x}_{2}(t_{n-1/2}) \ \dot{y}_{2}(t_{n-1/2}) \end{bmatrix}$$
 (2.39)

Então a velocidade relativa normal pode ser calculada por

$$v_{rn}(t_{n-1/2}) = \left(\mathbf{v}_2(t_{n-1/2}) - \mathbf{v}_1(t_{n-1/2})\right) \cdot \mathbf{n}_{12}(t_n)$$
(2.40)

No caso de contato da partícula 1 com o limite do domínio $v_{rn}(t_{n-1/2})$ será simplesmente igual a

$$v_{nn}(t_{n-1/2}) = \left(-\dot{\mathbf{v}}_1(t_{n-1/2})\right) \cdot \mathbf{n}(t_n)$$
(2.41)

onde $n(t_n)$, nesse caso, corresponde à direção perpendicular à fronteira que a partícula faz contato.

Dessa forma, a força de contato normal entre o par de partículas 1 e 2 será dada por

$$\mathbf{F}_{n12}(t_n) = (F_n^k(t_n) + F_n^d(t_{n-1/2}))\mathbf{n}_{12}(t_n)$$
(2.42)

onde a diferença de meio passo de tempo entre o cálculo da componente elástica, $F_n^k(t_n)$, e da componente proveniente do amortecimento, $F_n^d(t_{n-1/2})$, é desconsiderada (VERLET, 1967).

que de acordo com a terceira lei de Newton, equação 2.28, tem-se

$$\mathbf{F}_{n21}(t_n) = -\mathbf{F}_{n12}(t_n) \tag{2.43}$$

As forças $\mathbf{F}_{n12}(t_n)$ e $\mathbf{F}_{n21}(t_n)$ atuando nos centroides das partículas 1 e 2, respectivamente, são decompostas nas direções $x \in y$ de forma a obter as componentes de ambas as forças nessas direções. Os valores de $F_{n12_x}(t_n)$, $F_{n12_y}(t_n)$, $F_{n21_x}(t_n)$ e $F_{n21_y}(t_n)$ são incluídos no somatório de forças, conforme mostrado na equação 2.30.

Os cálculos, aqui exemplificados para o contato entre as partículas 1 e 2, devem ser repetidos para todos os pares de partículas em contato, para juntamente com as demais forças de contato, carregamentos externos e forças de corpo determinar a resultante de forças, $F_{xi}(t_n)$, $F_{yi}(t_n)$, atuando no centroide das partículas na iteração n.

2.1.7 Cálculo da Força de Contato Tangencial

Assim como no contato normal, a cada iteração n deve-se calcular a força tangencial existente entre os pares de partículas em contato, e também para os contatos entre as partículas e as fronteiras do domínio espacial. Dessa forma é possível determinar a contribuição desses contatos para a resultante de forças nas direções $x, y \in z$ atuando no centroide das partículas presentes na simulação.

O modelo de contato tangencial implementado neste trabalho se baseia na implementação proposta por Onate e Rojek (2004). Nesse modelo assume-se que o módulo da força tangencial é composto por uma parcela proveniente da mola, $F_T^k(t_n)$, e outra parcela proveniente do amortece-dor, $F_T^d(t_n)$.

$$F_T(t_n) = F_T^k(t_n) + F_T^d(t_{n-1/2})$$
(2.44)

Na ausência de coesão entre as partículas (caso as partículas não estejam ligadas ou a coesão

inicial foi quebrada) a reação tangencial $\mathbf{F}_T(t_n)$ se apresenta como um atrito oposto ao movimento relativo no ponto de contato. A velocidade relativa tangencial no ponto de contato, $\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2})$, é dada pela projetação da velocidade relativa entre as duas partículas na direção tangencial. Portanto:

$$\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2}) = \mathbf{v}_r(t_{n-1/2}) - \left(\mathbf{v}_r(t_{n-1/2}) \cdot \mathbf{n}(t_n)\right) \mathbf{n}(t_n)$$
(2.45)

onde $\mathbf{n}(t_n)$ é a direção normal ao contato, calculada conforme a equação 2.38.

A velocidade relativa $\mathbf{v}_r(t_{n-1/2})$ é calculada levando-se em consideração a contribuição das velocidades de translação no plano xy, $\mathbf{v}_i(t_{n-1/2})$ (determinado pela equação 2.39), e das velocidades de rotação na direção z, $\boldsymbol{\omega}_i(t_{n-1/2})$, no ponto de contato, conforme indicado na equação 2.46. Toma-se como exemplo que o contato ocorre entre as partículas 1 e 2.

$$\mathbf{v}_{r}(t_{n-1/2}) = \left(\mathbf{v}_{2}(t_{n-1/2}) + \boldsymbol{\omega}_{2}(t_{n-1/2}) \times \mathbf{r}_{c2}(t_{n})\right) - \left(\mathbf{v}_{1}(t_{n-1/2}) + \boldsymbol{\omega}_{1}(t_{n-1/2}) \times \mathbf{r}_{c1}(t_{n})\right)$$
(2.46)

onde $\mathbf{v}_1(t_{n-1/2})$, $\mathbf{v}_2(t_{n-1/2})$ são as velocidades de translação no plano xy das partículas em contato, $\boldsymbol{\omega}_1(t_{n-1/2})$ e $\boldsymbol{\omega}_2(t_{n-1/2})$ são as velocidades de rotação dessas partículas na direção z e $\mathbf{r}_{c1}(t_n)$, $\mathbf{r}_{c2}(t_n)$ são os vetores conectando o centro das partículas com o ponto de contato. Para o contato de uma partícula com o limite do domínio, assim como para a velocidade relativa normal, tem-se que $\mathbf{v}_2(t_{n-1/2})$ e $\boldsymbol{\omega}_2(t_{n-1/2})$ são nulos.

A relação entre o módulo da força de atrito elástica $||\mathbf{F}_T^k||$ e o deslocamento relativo tangencial u_{rT} para o modelo clássico de atrito de Coulomb (para uma força normal constante F_n) é ilustrado na Figura 2.8(a). Essa relação pode produzir oscilações não físicas da força de atrito na solução numérica devido a possíveis mudanças na direção da velocidade relativa tangencial. Para evitar isso, o modelo de contato de Coulomb deve ser regularizado. O procedimento de regularização escolhido, proposto por (ONATE E ROJEK, 2004), envolve a decomposição da velocidade relativa tangencial em uma parte reversível e outra irreversível, $\mathbf{v}_{rT}^r(t_{n-1/2})$ e $\mathbf{v}_{rT}^{ir}(t_{n-1/2})$, respectivamente.



Figura 2.8: Força relativa versus deslocamento relativo tangencial. (a) lei de Coulomb; (b) lei de Coulomb regularizada.

$$\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2}) = \mathbf{v}_{rT}^{r}(t_{n-1/2}) + \mathbf{v}_{rT}^{ir}(t_{n-1/2})$$
(2.47)

O que equivale a formular o atrito como um problema análogo ao da elasto-plasticidade, que pode ser observado pela relação entre deslocamento relativo e força de atrito na Figura 2.8(b). Essa analogia permite calcular a força de atrito empregando o seguinte algoritmo a cada iteração do método:

Para cada par de partículas em contato calcula-se o deslocamento relativo tangencial aproximado a partir da velocidade relativa tangencial, dado por $\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2})\Delta t$. O valor do deslocamento relativo tangencial pode então ser multiplicado pela rigidez tangencial, k_T , para encontrar o incremento no valor da força tangencial de atrito. O incremento na força tangencial de atrito é adicionado ao valor da força na iteração anterior (caso o par de partículas em questão estivesse em contato), $\mathbf{F}_T^k(t_{n-1})$, para encontrar o valor atualizado, conforme mostrado na equação 2.48. Se o par de partículas não estava em contato na iteração anterior o valor de $\mathbf{F}_T^k(t_{n-1})$ é considerado nulo. Portanto, para implementar o algoritmo é necessário o conhecimento da força tangencial de atrito no passo de tempo anterior para todos os pares de partículas em contato.

$$\mathbf{F}_{T}^{k,trial}(t_{n}) = \mathbf{F}_{T}^{k}(t_{n-1}) - k_{t}\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2})\Delta t$$
(2.48)

onde Δt é o passo de tempo do integrador. Após calculada a força tangencial, conforme mostrado na equação 2.48, verifica-se a condição de escorregamento

$$\phi = \left\| \mathbf{F}_T^{k,trial}(t_n) \right\| - \mu_t \left| F_n(t_n) \right|$$
(2.49)

onde $|F_n(t_n)|$ é o valor absoluto da força de contato normal, calculado pela equação 2.42 para o mesmo par de partículas. Se $\phi \leq 0$ tem-se um contato sem escorregamento e a força de atrito é dada por

$$\mathbf{F}_T^k(t_n) = \mathbf{F}_T^{k,trial}(t_n) \tag{2.50}$$

Caso contrário tem-se escorregamento no contato, onde a força de atrito é dada por

$$\mathbf{F}_{T}^{k}(t_{n}) = \mu_{t} \left| F_{n}(t_{n}) \right| \frac{\mathbf{F}_{T}^{k,trial}(t_{n})}{\left\| \mathbf{F}_{T}^{k,trial}(t_{n}) \right\|}$$
(2.51)

A componente proveniente do amortecimento viscoso $\mathbf{F}_T^d(t_n)$ é dependente da velocidade relativa tangencial $\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2})$ entre as duas partículas em contato e o coeficiente de amortecimento viscoso c_t

$$\mathbf{F}_{T}^{d}(t_{n-1/2}) = \begin{cases} -c_{t}\mathbf{v}_{rT}(t_{n-1/2}) & \text{se } \phi \leq 0\\ 0 & \text{se } \phi > 0 \end{cases}$$
(2.52)

Ou seja, o amortecimento é ativado apenas quando não ocorre escorregamento no contato do par de partículas. Isto é, considera-se que o amortecimento é viscoso e não é causado pelo atrito.

Dessa forma, a força de contato tangencial entre o par de partículas 1 e 2 será dada por

$$\mathbf{F}_{T12}(t_n) = \mathbf{F}_T^k(t_n) + \mathbf{F}_T^d(t_{n-1/2})$$
(2.53)

onde a diferença de meio passo de tempo entre o cálculo da componente elástica, $\mathbf{F}_T^k(t_n)$, e da componente proveniente do amortecimento, $\mathbf{F}_T^d(t_{n-1/2})$, é desconsiderada.

De acordo com a terceira lei de Newton, equação 2.28, tem-se

$$\mathbf{F}_{T21}(t_n) = -\mathbf{F}_{T12}(t_n) \tag{2.54}$$

O torque $T_{12}(t_n)$ será calculado de acordo com a equação 2.27, resultando em

$$\mathbf{T}_{12}(t_n) = \mathbf{F}_{T12}(t_n) \times \mathbf{r}_{c12}(t_n)$$
(2.55)

Novamente, de acordo com a terceira lei de Newton, equação 2.28, tem-se

$$\mathbf{T}_{21}(t_n) = -\mathbf{T}_{12}(t_n) \tag{2.56}$$

As forças $\mathbf{F}_{T12}(t_n)$ e $\mathbf{F}_{T21}(t_n)$ e os momentos $\mathbf{T}_{12}(t_n)$ e $\mathbf{T}_{21}(t_n)$ atuando nos centroides das partículas 1 e 2, respectivamente, são decompostos nas direções x, y e z de forma a obter as componentes nessas direções. Os valores de $F_{T12_x}(t_n)$, $F_{T12_y}(t_n)$, $F_{T21_x}(t_n)$ e $F_{T21_y}(t_n)$ são então incluídos no somatório de forças, conforme mostrado na equação 2.30, a fim de determinar as forças resultantes atuando no centroide das partículas, $F_{xi}(t_n)$ e $F_{yi}(t_n)$. Os valores de T_{12} e T_{21} , atuando na direção z, são também incluídos no somatório de torques e momentos, conforme mostrado na equação 2.30, a fim de determinar o torque resultante, $T_i(t_n)$, e o momento resultante $M_i(t_n)$ atuando no centroide das partículas.

Os cálculos, aqui exemplificados para o contato entre as partículas 1 e 2, devem ser repetidos para todos os pares de partículas em contato, para juntamente com as demais forças de contato, carregamentos externos e forças de corpo determinar a resultante de forças, $F_{xi}(t_n)$ e $F_{yi}(t_n)$, e a resultante de torques e momentos, $T_i(t_n)$ e $M_i(t_n)$, atuando no centroide das partículas na iteração n.

2.1.8 Cálculo do Momento de Rolamento

A cada iteração n calcula-se o momento de resistência ao rolamento existente entre os pares de partículas em contato, e também para os contatos entre as partículas e as fronteiras do domínio espacial. Dessa forma, é possível determinar a contribuição do efeito do rolamento para a resultante de momentos na direção z, atuando no centroide das partículas presentes na simulação. Como esse contato gera apenas momento na direção z, a notação vetorial é reduzida para valores escalares a fim de facilitar o equacionamento, uma vez que a direção, nesse caso, é sempre conhecida.

Neste trabalho adotou-se a definição clássica de atrito de rolamento, descrita por Ai *et al.* (2011), onde a pressão normal exercida pela superfície se distribui continuamente ao longo da linha de contato, sendo que a força resultante possui uma excentricidade *e* em relação ao ponto de contato estacionário na direção do rolamento, conforme mostrado na Figura 2.9(a). Essa excentricidade na força de reação gera um momento de resistência ao rolamento, definido por M_r . A excentricidade é normalmente tomada como sendo o coeficiente de resistência ao rolamento, que possui unidade de comprimento, sendo que essa definição foi usada em diversos estudos, como em (ZHOU *et al.*, 1999).





Neste estudo, o termo coeficiente de resistência ao rolamento é definido como um parâmetro adimensional, μ_r , tal como

$$\mu_r = \tan\left(\beta\right) \tag{2.57}$$

onde β é chamado de ângulo de resistência ao rolamento, que é interpretado como sendo o máximo ângulo de inclinação da superfície com relação a horizontal, no qual o momento de resistência ao rolamento se equilibra com o torque gerado pela ação da gravidade no centroide da partícula, conforme mostrado na Figura 2.9(b). O uso dessa definição tem a vantagem de ter um significado físico evidente, estando em conformidade com a definição do coeficiente de atrito tangencial.

Para a determinação do momento de resistência ao rolamento é necessário o conhecimento do raio de rolamento e da rotação relativa de um par de partículas em contato (e também de uma partícula em contato com a fronteira do domínio). O raio de rolamento e a rotação relativa das partículas podem ser definidos a partir da cinemática de uma par de partículas em contato, conforme mostrado na Figura 2.10. Assume-se que da iteração n para a iteração n + 1 (incremento de tempo Δt , de t_n para t_{n+1}), duas partículas, 1 e 2, com raios r_1 e r_2 , respectivamente, permanecem em contato. O arco gerado pela mudança do ponto de contato entre as duas partículas, dS_1 e dS_2 , pode ser definido por



Figura 2.10: Cinemática de duas partículas em contato.

$$dS_1 = r_1 (d\theta_1 + d\varphi)$$

$$dS_2 = r_2 (d\theta_2 - d\varphi)$$
(2.58)

onde $d\theta_1$ e $d\theta_2$ são as rotações incrementais nas partículas 1 e 2, e $d\varphi$ é o incremento do ângulo de contato entre as partículas. Em geral, $r_1 \neq r_2$ e dS_1 e dS_2 são ambos compostos por uma parcela de deslizamento e rolamento, dU_s e dU_r , que podem ser expressos por

$$dU_r = (r_2 dS_1 - r_1 dS_2) / (r_1 + r_2)$$
(2.59)

$$dU_s = (dS_1 + dS_2)/2 (2.60)$$

Das equações 2.58 e 2.59, pode-se determinar a rotação relativa entre as duas partículas como

$$d\theta_r = d\theta_1 - d\theta_2 = \frac{dU_r}{r_1 r_2 / (r_1 + r_2)}$$
(2.61)

Assume-se que a penetração das duas partículas em contato é pequena comparada com a dimensão de seus raios, portanto, a partir da definição de raio de rolamento

$$R_r = r_1 r_2 / \left(r_1 + r_2 \right) \tag{2.62}$$

tem-se que a equação 2.61 pode ser expressa por

$$d\theta_r = dU_r/R_r \tag{2.63}$$

A equação 2.63 pode ser aplicada também para descrever o contato de uma partícula com a fronteira do domínio espacial. Neste caso, $R_r = r_1$ quando a partícula está em contato com uma superfície plana (com $r_2 = \infty$). Isso vai ao encontro com o conceito clássico que o raio de rolamento de uma roda deve ser igual a distância entre seu centroide e o solo.

O modelo de contato de rolamento implementado neste trabalho se baseia nas implementações propostas por Iwashita e Oda (1998) e Jiang *et al.* (2005). Nesses modelos assume-se que, na iteração n, o módulo do momento de rolamento $M_r(t_n)$ é composto por duas parcelas: Uma parcela gerada pela mola torcional, $M_r^k(t_n)$, e uma outra parcela gerada pelo amortecimento viscoso, $M_r^d(t_n)$.

$$M_r(t_n) = M_r^k(t_n) + M_r^d(t_{n-1/2})$$
(2.64)

Esse modelo pode ser implementado da seguinte forma: Para a iteração n, tomando como exemplo o contato entre as partículas 1 e 2, deve-se calcular o incremento de rotação de cada partícula, $d\theta_1$ e $d\theta_2$, entre o passo de tempo atual e o anterior, t_{n-1} , conforme mostrado abaixo

$$d\theta_1 = \theta_1(t_n) - \theta_1^{old}$$

$$d\theta_2 = \theta_2(t_n) - \theta_2^{old}$$
(2.65)

onde, caso o par de partículas em questão estivesse em contato no passo de tempo anterior, ou seja, o contato entre as partículas 1 e 2 foi mantido de t_{n-1} para t_n , θ_i^{old} será dado por

$$\theta_1^{old} = \theta_1(t_{n-1})$$

$$\theta_2^{old} = \theta_2(t_{n-1})$$
(2.66)

caso contrário, os valores de θ_1^{old} e θ_2^{old} são tomados como nulos

$$\theta_1^{old} = 0$$

$$\theta_2^{old} = 0$$
(2.67)

Calcula-se também o ângulo entre a direção normal no passo de tempo atual e no passo de

tempo anterior, dado por $d\varphi$. Para isso determina-se o ângulo de ambas as direções com relação a horizontal e depois se subtrai os dois valores de forma a determinar o menor ângulo entre as duas direções. Para isso é usada a função *atan2* que leva em consideração o quadrante.

$$d\varphi = \operatorname{atan2}(\mathbf{n}_{12}^{old}(1), \mathbf{n}_{12}^{old}(2)) - \operatorname{atan2}(\mathbf{n}_{12}(t_n, 1), \mathbf{n}_{12}(t_n, 2))$$
(2.68)

onde n_{12} é calculado de acordo com a equação 2.38. Caso o par de partículas em questão estivesse em contato no passo de tempo anterior, t_{n-1} , então

$$\mathbf{n}_{12}^{old} = \mathbf{n}_{12}(t_{n-1}) \tag{2.69}$$

caso contrário, o valor de \mathbf{n}_{12}^{old} é tomando como nulo,

$$\mathbf{n}_{12}^{old} = [0 \ 0] \tag{2.70}$$

Com os valores de $d\theta_1$, $d\theta_2$ e $d\varphi$ é possível determinar o arco gerado pela mudança de contato entre t_{n-1} e t_n , de acordo com a equação 2.58. Então é possível determinar a rotação relativa entre o par de partículas, conforme descrito pela equação 2.61. Multiplicando-se a rotação relativa das partículas pela rigidez torcional k_r é possível determinar o valor do momento de rolamento incremental, conforme descrito pela equação 2.71:

$$\Delta M_r^k(t_n) = -k_r d\theta_r(t_n) \tag{2.71}$$

Calcula-se então o valor atualizado da componente elástica do momento de rolamento,

$$M_r^{k,trial}(t_n) = M_r^k(t_{n-1}) + \Delta M_r^k(t_n)$$
(2.72)

Após calculado o valor do momento de rolamento verifica-se a condição limite

$$\phi_r = \left| M_r^{k,trial}(t_n) \right| - \mu_r R_r |F_n(t_n)|$$
(2.73)

onde $\mu_r R_r |F_n(t_n)|$ é denominado de momento limite, que é atingido com o ângulo de rolamento total, sendo análogo ao caso do contato tangencial.

$$M_r^m = \mu_r R_r |F_n(t_n)| \tag{2.74}$$

Caso $\phi_r \leq 0$ sabe-se que o valor do momento de rolamento é menor que o valor limite, então

$$M_r^k(t_n) = M_r^{k,trial}(t_n)$$
(2.75)

Caso contrário o valor do momento de rolamento ultrapassou o valor limite, portanto será dado por

$$M_{r}^{k}(t_{n}) = \mu_{r}R_{r}|F_{n}(t_{n})|\frac{M_{r}^{k,trial}(t_{n})}{\left|M_{r}^{k,trial}(t_{n})\right|}$$
(2.76)

Assume-se que o momento gerado pelo amortecimento viscoso $M_r^d(t_n)$ é dependente da velocidade angular relativa $\dot{\theta}_r(t_n)$ entre as duas partículas em contato e do coeficiente de amortecimento viscoso c_r

$$M_r^d(t_{n-1/2}) = \begin{cases} -c_r \dot{\theta}_r(t_{n-1/2}) & \text{se } |M_r^k(t_n)| < M_r^m \\ 0 & \text{se } |M_r^k(t_n)| = M_r^m \end{cases}$$
(2.77)

Ou seja, o amortecimento ocorre apenas se o valor do momento de rolamento for menor que o valor do momento limite, análogo ao que ocorre para o contato tangencial.

Portanto, o momento de rolamento atuando na direção z, para o par de partículas 1 e 2, será dado por

$$M_{12}(t_n) = M_r^k(t_n) + M_r^d(t_{n-1/2})$$
(2.78)

onde a diferença de meio passo de tempo entre o cálculo da componente elástica, $M_r^k(t_n)$, e da componente proveniente do amortecimento, $M_r^d(t_{n-1/2})$, é desconsiderada.

De acordo com a terceira lei de Newton, equação 2.28, tem-se

$$M_{12}(t_n) = -M_{21}(t_n) \tag{2.79}$$

Os momentos $M_{12}(t_n)$ e $M_{21}(t_n)$ atuando nos centroides das partículas 1 e 2, respectivamente, na direção z são incluídos no somatório de momentos, conforme mostrado na equação 2.30.

Os cálculos, aqui exemplificados para o contato entre as partículas 1 e 2, devem ser repetidos para todos os pares de partículas em contato, para juntamente com as demais forças de contato, carregamentos externos e forças de corpo determinar a resultante de momentos, $M_i(t_n)$, atuando no centroide das partículas na iteração n.

2.1.9 Amortecimento Global

O amortecimento viscoso que compõe o modelo constitutivo de contato descrito na seção 2.1.4 é uma função da velocidade relativa (de translação ou rotação) do par de partículas em contato, ou da velocidade absoluta quando o contato ocorre entre uma partícula e as fronteiras do domínio espacial. Esse amortecimento é responsável pela dissipação de energia no contato, proporcionando dessa forma a estabilização das partículas.

No entanto, muitas vezes nas implementações de DEM é necessário também dissipar energia de partículas que não estão em contato (ONATE E ROJEK, 2004), de forma a acelerar a estabili-

zação das partículas e atingir mais rapidamente a situação de repouso. Para isso, Cundall e Strack (1979) propuseram um sistema de amortecimento global, que pode ser interpretado como o efeito de amortecedores conectando cada partícula do sistema as fronteiras do domínio espacial. Neste trabalho foi implementado o amortecimento global viscoso, onde assume-se que o coeficiente de amortecimento global é proporcional a massa das partículas (ONATE E ROJEK, 2004), conforme mostrado nas equações 2.83 a 2.85. Dessa forma, as equações de movimento 2.1, 2.2 e 2.3 passam a incluir o termo do amortecimento global, resultando em

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = \ddot{x}_i(t) = \frac{F_{xi}(t) + F_{xi}^{damp}(t)}{m_i}$$
(2.80)

$$\frac{d^2 y(t)}{dt^2} = \ddot{y}_i(t) = \frac{F_{yi}(t) + F_{yi}^{damp}(t)}{m_i}$$
(2.81)

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} = \ddot{\theta}_i(t) = \dot{\omega}_i(t) = \frac{T_i(t) + M_i(t) + M_i^{damp}(t)}{I_i}$$
(2.82)

onde $F_{xi}^{damp}(t)$, $F_{xi}^{damp}(t)$ e $M_i^{damp}(t)$ são as forças nas direções x e y e o momento na direção z gerados pelo amortecimento viscoso global na partícula i. Aplicando-se a discretização do tempo imposta pelo integrador de Verlet, tem-se que as forças e o momento provenientes do amortecimento global podem ser calculados como

$$F_{xi}^{damp}(t_{n-1/2}) = -\alpha^{damp,t} m_i \dot{x}_i(t_{n-1/2})$$
(2.83)

$$F_{yi}^{damp}(t_{n-1/2}) = -\alpha^{damp,t} m_i \dot{y}_i(t_{n-1/2})$$
(2.84)

$$M_i^{damp}(t_{n-1/2}) = -\alpha^{damp,r} I_i \omega_i(t_{n-1/2})$$
(2.85)

onde $\alpha^{damp,t}$ e $\alpha^{damp,r}$ são constantes de amortecimento global para translação e rotação, respectivamente. Nota-se nas equações 2.83 a 2.85 que os termos do coeficiente de amortecimento global são opostos as velocidades de translação e rotação.

Dessa forma, as expressões do algoritmo de integração de Verlet *leapfrog* para os três graus de liberdade, dadas pelas equações 2.20, 2.21 e 2.22, passam agora a incluir o termos do amortecimento global, resultado em

Translação na direção x:

$$\dot{x}_{i}(t_{n+1/2}) = \dot{x}_{i}(t_{n-1/2}) + \Delta t(F_{xi}(t_{n}) + F_{xi}^{damp}(t_{n-1/2}))/m_{i}$$

$$x_{i}(t_{n+1}) = x_{i}(t_{n}) + \Delta t \dot{x}_{i}(t_{n+1/2})$$
(2.86)

Translação na direção y:

$$\dot{y}_{i}(t_{n+1/2}) = \dot{y}_{i}(t_{n-1/2}) + \Delta t(F_{yi}(t_{n}) + F_{yi}^{damp}(t_{n-1/2}))/m_{i}
y_{i}(t_{n+1}) = y_{i}(t_{n}) + \Delta t \, \dot{y}_{i}(t_{n+1/2})$$
(2.87)

Rotação na direção z:

$$\omega_i(t_{n+1/2}) = \omega_i(t_{n-1/2}) + \Delta t [T_i(t_n) + M_i(t_n) + M_i^{damp}(t_{n-1/2})]/I_i$$

$$\theta_i(t_{n+1}) = \theta_i(t_n) + \Delta t \,\omega_i(t_{n+1/2})$$
(2.88)

Conforme descrito por Onate e Rojek (2004), os valores das constantes de amortecimento global, $\alpha^{damp,t}$ e $\alpha^{damp,r}$, devem ser grandes o suficiente para garantir a rápida estabilização das partículas, mas não podem ser valores elevados demais ao custo de prejudicar o comportamento real do material que se deseja simular. Neste trabalho optou-se por deixar a maior parcela da dissipação de energia das partículas por conta dos amortecedores que compõe os modelos de contato, usando o amortecimento global para auxiliar na estabilização numérica das partículas.

2.1.10 Determinação dos Parâmetros de Contato

Nas representações mecânica dos contatos implementadas neste trabalho foram adotados modelos compostos por molas lineares e amortecedores, cujos os coeficientes de rigidez e de amortecimento não possuem relações diretas com as propriedades físicas dos materiais. Diferentemente do modelo de contato não linear de Hertz, no qual os parâmetros do contato possuem relação direta com as propriedades do material simulado, no modelo com molas e amortecedores (*spring dashpot model*) essa relação não é pré-estabelecida.

Por isso, muitos autores adotaram metodologias de cálculo para esses parâmetros, e neste trabalho é usado o procedimento descrito por Malone e Xu (2008). Dessa forma os valores dos coeficientes de rigidez e de amortecimento viscoso são calculados da seguinte forma:

Para o contato normal:

Para o impacto de duas partículas, sendo uma delas fixa, é assumida uma relação entre o valor da rigidez normal k_n , a velocidade de impacto da partícula v_0 , e a penetração máxima resultante $\delta_{v_0}^2$, conforme a equação a seguir

$$k_n = \frac{mv_0^2}{\delta_{v_0}^2}$$
(2.89)

Essa relação é derivada através da conservação de energia, onde a energia cinética da partícula com velocidade v_0 (descrita por: $(1/2)mv_0^2$) é armazenada como energia potencial na mola comprimida em δ_{v_0} (descrita por: $(1/2)k_n\delta_{v_0}^2$), em uma colisão puramente elástica.

Obviamente que para a determinação da rigidez normal k_n através da equação 2.89 é necessário o conhecimento da velocidade v_0 , que é dependente do tipo de simulação a ser realizada. Na implementação realizada assume-se que a máxima velocidade de translação das partículas é igual a velocidade máxima atingida por uma partícula solta a partir do repouso da altura máxima do domínio espacial da simulação, apenas sobre efeito da aceleração da gravidade. Para esta situação, a energia potencial na altura máxima h_0 , que resultará em uma penetração δ_{h_0} , pode ser usada no lugar da energia cinética da partícula, resultado dessa forma em

$$k_n = \frac{2mgh_0}{\delta_{h_0}^2}$$
(2.90)

Assim, a determinação da rigidez normal fica um procedimento sistemático. Nas simulações realizadas nesse trabalho é admitida uma penetração máxima de 5% do raio da menor partícula presente na simulação.

Para determinar o valor do coeficiente de amortecimento viscoso normal c_n é necessário considerar um sistema massa - mola - amortecedor, conforme mostrado na Figura 2.11



Figura 2.11: Sistema massa-mola-amortecedor.

Esse sistema possui equação de movimento dada pela equação 2.91, onde deve-se observar que para as simulações DEM ela é válida apenas quando $\delta \ge 0$, uma vez que o contato existe apenas se houver penetração entre as partículas.

$$m\frac{d^2\delta}{dt^2} + c_n\frac{d\delta}{dt} + k_n\delta = 0$$
(2.91)

A partir da equação 2.91 é possível derivar uma relação entre o coeficiente de amortecimento c_n e o coeficiente de restituição e, que neste contexto será definido por

$$e = \sqrt{\frac{h_1}{h_0}} \tag{2.92}$$

Dadas as condições iniciais: t = 0, $\delta = 0$ e $\dot{\delta} = v_0$ a solução da equação 2.91 para o caso sub-amortecido $(c_n^2 < 4mk_n)$ é dada por

$$\delta = \frac{v_0}{\omega} \exp\left(-\frac{c_n}{2m}t\right) \sin(\omega t) \tag{2.93}$$

$$\dot{\delta} = \frac{v_0}{\omega} \exp\left(-\frac{c_n}{2m}t\right) \left[w\cos(\omega t) - \frac{c_n}{2m}\sin(\omega t)\right]$$
(2.94)

onde $\omega = \sqrt{4mk_n - c_n^2/2m}$. A equação 2.93 é uma equação senoidal com período dado por $2\pi/\omega$. A velocidade v_1 ocorre em π/ω quando δ retorna para zero, que corresponde ao ponto médio de um período de oscilação. Da equação 2.94 obtém-se a seguinte equação para o coeficiente de restituição e

$$e = \exp\left(\frac{-\pi c_n}{4mk_n - c_n^2}\right) \tag{2.95}$$

Isolando o termo c_n na equação 2.95 obtém-se

$$c_n = \frac{2(\ln e)\sqrt{mk_n}}{(\ln e)^2 + \pi^2}$$
(2.96)

Dessa forma o coeficiente de amortecimento viscoso normal fica dependente da rigidez normal, dada pela equação 2.90. O procedimento de determinação das propriedades mostrado acima estabelece uma metodologia sistemática de cálculo das propriedades do contato normal das partículas, mitigando, dessa forma, o inconveniente da falta de relação física existente entre o modelo de contato normal adotado e as propriedades físicas das partículas.

Para o contato tangencial:

Conforme citado por O'Sullivan (2011b) a rigidez tangencial pode ser determinada por uma fração da rigidez normal. Conforme discutido por Hu *et al.* (2010), a razão entre o o coeficiente de rigidez normal e tangencial (k_n e k_t , respectivamente) pode influenciar a resposta global do material granular. Foi observado que a variação da razão k_n/k_t pode afetar o ponto onde o deslizamento entre duas partículas em contato se inicia, e dessa forma afetar toda a resposta do material.

Preliminarmente foi adotado, com base nos testes de validação conduzidos com o algoritmo DEM implementado, que a razão $k_n/k_t = 20$. Dessa forma, tendo o coeficiente de rigidez sido calculado conforme mostrado na equação 2.90, o coeficiente de rigidez tangencial é igual a:

$$k_t = \frac{k_n}{20} \tag{2.97}$$

Sendo que esse valor deve ser ajustado através de testes de validação e calibração até a simulação resultar em uma resposta global adequada para o meio que se deseja simular.

Para determinar o valor do coeficiente de amortecimento viscoso tangencial, c_t , foi aplicada a mesma metodologia desenvolvida para o contato normal, apenas fazendo as modificações necessárias. Dessa força tem-se:

$$c_t = \frac{2(\ln e_t)\sqrt{Ik_t}}{(\ln e_t)^2 + \pi^2}$$
(2.98)

onde obtém-se uma equação análoga a do contato normal. Nesse caso o coeficiente de restituição tangencia, e_t , é definido por

$$e_t = \sqrt{\frac{\theta_1}{\theta_0}} \tag{2.99}$$

onde $\theta_0 \in \theta_1$ são ângulos análogos aos valores $h_0 \in h_1$ para o contato normal.

Baseado nestas hipóteses, a única propriedade do modelo de contato tangencial que deve ser inserida como dado de entrada na simulação é o coeficiente de atrito, μ_t .

Para o contato de rolamento:

Assumindo que o momento de rolamento possui a mesma ordem de grandeza do torque gerado pelo contato tangencial, Iwashita e Oda (1998) propuseram que o coeficiente de rigidez k_r pode ser expresso por:

$$k_r = k_t R_r^2 \tag{2.100}$$

onde k_t é a rigidez do contato tangencial definido pela equação 2.97, e R_r é o raio de rolamento definido pela equação 2.62

O coeficiente de amortecimento viscoso pode ser expresso por

$$c_r = \eta_r c_r^{crit} \tag{2.101}$$

onde η_r é o quociente de amortecimento viscoso de rolamento e c_r^{crit} é o coeficiente de amortecimento viscoso crítico, dado por

$$c_r^{crit} = 2\sqrt{I_r k_r} \tag{2.102}$$

onde I_r é o momento de inércia equivalente para o movimento rotacional relativo ao ponto de contato de duas partículas.

$$I_r = 1 / \left(\frac{1}{I_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{I_j + m_j r_j^2} \right)$$
(2.103)

Sendo I_i e I_j os momentos de inércia com relação ao centroide e m_i e m_j são as massas das

partículas i e j, respectivamente.

Observa-se que os valores de k_r e c_r determinados pelas equações 2.100 e 2.101, respectivamente, não são valores fixos, mas dependem do par de partículas que está em contato. Esses valores dependem dos raios, das massas e dos momentos de inércia das partículas que compõe o par que está em contato para se determinar o raio de rolamento e o momento de inércia equivalente. Caso a simulação seja composta apenas por partículas com a mesma dimensão e densidade, R_r e I_r serão contantes para todos os possíveis pares de contatos, implicando que os valores do coeficiente de rigidez e de amortecimento do contato de rolamento serão sempre iguais. Mas em simulações reais, em que as partículas geralmente possuem diferentes valores de massa e densidade é necessário calcular os valores de k_r e c_r para cada par de partículas em contato. Para uma partícula *i* em contato com as fronteiras do domínio espacial as expressões para o raio de rolamento e para o momento de inércia equivalente se reduzem para $R_r = r_i$ e $I_r = I_i$, respectivamente.

2.2 Formulação do FEM

O domínio estrutural do sistema acoplado pode ser descrito por meio da equação diferencial de movimento para um corpo contínuo. Como hipóteses para o domínio estrutural são assumidas pequenas deformações e a homogeneidade e isotropia do material, usando-se portanto as hipóteses da teoria da elasticidade linear.

A equação de movimento para um meio contínuo elástico linear pode ser escrita como (LAI *et al.*, 2010),

$$\tilde{\boldsymbol{\nabla}}^T \boldsymbol{\sigma}_s + \mathbf{b}_s = \mathbf{q}_s \tag{2.104}$$

sendo σ_s a representação vetorial para os termos do tensões de Cauchy, \mathbf{b}_s o vetor força de campo e \mathbf{q}_s representa o vetor força de inércia.

A força de campo pode ser representada pelas suas componentes como,

$$\mathbf{b}_s = \left\{ \begin{array}{cc} b_x^s & b_y^s & b_z^s \end{array} \right\}^T \tag{2.105}$$

e a força de inércia pode ser escrita em função do campo de deslocamento,

$$\mathbf{q}_s = \rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} \tag{2.106}$$

onde ρ_s é a densidade do meio contínuo sólido, que é considerada constante neste trabalho. O vetor campo de deslocamento pode ainda ser expresso pelas suas componentes,

$$\mathbf{u}_s = \left\{ \begin{array}{cc} u_x^s & u_y^s & u_z^s \end{array} \right\}^T \tag{2.107}$$

e o operador diferencial $\tilde{\nabla}$ pode ser escrito como:

$$\tilde{\boldsymbol{\nabla}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0\\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z}\\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z}\\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x}\\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix}$$
(2.108)

Supondo um regime de pequenos deslocamentos e pequenas deformações, o tensor de deformação de Green-Lagrange e o tensor de tensões de Cauchy são definidos como,

$$\mathbf{E}_{s} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx}^{s} & \varepsilon_{xy}^{s} & \varepsilon_{xz}^{s} \\ & \varepsilon_{yy}^{s} & \varepsilon_{yz}^{s} \\ sim. & \varepsilon_{zz}^{s} \end{bmatrix}; \qquad \mathbf{S}_{s} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx}^{s} & \sigma_{xy}^{s} & \sigma_{xz}^{s} \\ & \sigma_{yy}^{s} & \sigma_{yz}^{s} \\ sim. & \sigma_{zz}^{s} \end{bmatrix}$$
(2.109)

e adotando uma notação matricial, as deformações e as tensões podem ser escritas como:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{s} = \left\{ \begin{array}{ccc} \varepsilon_{xx}^{s} & \varepsilon_{yy}^{s} & \varepsilon_{zz}^{s} & \gamma_{xy}^{s} & \gamma_{yz}^{s} \end{array} \right\}^{T}; \qquad \boldsymbol{\sigma}_{s} = \left\{ \begin{array}{ccc} \sigma_{xx}^{s} & \sigma_{yy}^{s} & \sigma_{zz}^{s} & \sigma_{xy}^{s} & \sigma_{zz}^{s} \end{array} \right\}^{T}$$
(2.110)

onde $\gamma_{xy}^s = 2\varepsilon_{xy}^s, \gamma_{xz}^s = 2\varepsilon_{xz}^s$ e $\gamma_{yz}^s = 2\varepsilon_{yz}^s$.

As componentes do tensor de deformações são dadas por:

As relações cinemáticas, isto é, as relações entre os deslocamentos definidos na equação 2.107 e deformações definidas na equação 2.109, podem ser escritas de forma compacta por:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_s = \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \mathbf{u}_s$$
 (2.112)

Para um material isotrópico, as tensões e as deformações são relacionadas pela matriz constitutiva D_s que representa a lei de Hooke generalizada, dada por:

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{D}_s \boldsymbol{\varepsilon}_s \tag{2.113}$$
sendo

$$\mathbf{D}_{s} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix}$$
(2.114)

Os coeficientes de Lamé, $\lambda \in \mu$, são expressos em função do módulo de elasticidade, E, o módulo de cisalhamento, G, e o coeficiente de Poisson, ν , através das seguintes relações

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}; \qquad \mu = G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$
(2.115)

Tais propriedades (E, ν, G) são obtidas experimentalmente e caracterizam o comportamento do meio elástico contínuo na fase linear.

O problema de valor de contorno associado ao meio elástico contínuo é dado por:

$$\tilde{\boldsymbol{\nabla}}^T \boldsymbol{\sigma}_s + \mathbf{b}_s = \rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} \qquad \text{em } \Omega_s \tag{2.116}$$

Sujeito as seguintes condições de contorno de Dirichlet:

$$\mathbf{u}_s = 0 \qquad \text{em } \Gamma_{se} \tag{2.117}$$

$$\mathbf{u}_s = \bar{\mathbf{u}}_s \qquad \text{em } \Gamma_{sd} \tag{2.118}$$

e as condições de contorno de Neumann:

$$\mathbf{S}_s \mathbf{n}_s = 0 \qquad \text{em } \Gamma_{sl} \tag{2.119}$$

$$\mathbf{S}_s \mathbf{n}_s = \mathbf{f}_s \qquad \text{em } \Gamma_{sc} \tag{2.120}$$

$$\mathbf{S}_s \mathbf{n}_s = \mathbf{t}_{fs} \qquad \text{em } \Gamma_{fs} \tag{2.121}$$

sendo que

- Ω_s é o domínio estrutural elástico linear;
- Γ_{se} é a fronteira do domínio estrutural com restrição imposta;
- Γ_{sd} é a fronteira do domínio estrutural com deslocamento imposto;
- Γ_{sl} é a fronteira livre do domínio estrutural;
- Γ_{sc} é a fronteira do domínio estrutural com carregamento externo;
- Γ_{fs} é a interface entre os domínios;
- n_s é o vetor normal externo a superfície do domínio estrutural;
- $\bar{\mathbf{u}}_s$ é o deslocamento imposto no domínio estrutural;
- \mathbf{f}_s é o vetor do carregamento externo aplicado ao domínio estrutural;
- t_{fs} é o vetor da força transmitida das partículas para a estrutura através interface.

A solução das equações 2.117 à 2.121 permite encontrar uma solução para o campo de deslocamento \mathbf{u}_s , e por consequência, usando-se as equações 2.112 e 2.113, pode-se determinar o campo de tensões σ_s em um ponto qualquer do meio contínuo.

2.2.1 Aproximação por Elementos Finitos da Fase Estrutural

Para chegar na forma discretizada por elementos finitos do domínio estrutural, a forma fraca da equação diferencial é derivada usando-se o método do resíduos ponderados (Bathe, 2006).

A aplicação do método dos resíduos ponderados implica em multiplicar a equação 2.116 por um conjunto de funções ponderadoras, w_s , e integrar no domínio material, Ω_s ,

$$\int_{\Omega_s} \mathbf{w}_s^T \left(\tilde{\boldsymbol{\nabla}}^T \boldsymbol{\sigma}_s - \rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} + \mathbf{b}_s \right) dV = 0$$
(2.122)

Aplicando o teorema de Green-Gauss no primeiro termo da equação 2.122 obtém-se,

$$\int_{\Omega_s} (\mathbf{w}_s)^T \tilde{\boldsymbol{\nabla}}^T \boldsymbol{\sigma}_s dV = \int_{\Gamma_{fs}} (\mathbf{w}_s)^T \mathbf{t}_{fs} dS + \int_{\Gamma_{sc}} (\mathbf{w}_s)^T \mathbf{f}_s dS - \int_{\Omega_s} \left(\tilde{\boldsymbol{\nabla}} \mathbf{w}_s \right)^T \boldsymbol{\sigma}_s dV \qquad (2.123)$$

Pode-se então, escrever a forma fraca do problema da seguinte maneira:

$$\int_{\Omega_s} (\mathbf{w}_s)^T \rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} dV + \int_{\Omega_s} \left(\tilde{\boldsymbol{\nabla}} \mathbf{w}_s \right)^T \boldsymbol{\sigma}_s dV - \int_{\Gamma_{fs}} (\mathbf{w}_s)^T \mathbf{t}_{fs} dS$$

$$- \int_{\Gamma_{sc}} (\mathbf{w}_s)^T \mathbf{f}_s dS - \int_{\Omega_s} (\mathbf{w}_s)^T \mathbf{b}_s dV = 0$$
(2.124)

Introduzindo uma aproximação por elementos finitos dos deslocamentos nodais, fazendo-se uma discretização do domínio e do contorno em elementos finitos e propondo uma aproximação do tipo nodal polinomial para todos os elementos é possível escrever:

$$\mathbf{u}_s = \mathbf{N}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \tag{2.125}$$

sendo que N_s contém as funções de forma polinomiais para o domínio estrutural, e \tilde{u}_s são os valores nodais da aproximação proposta. Dessa forma, as deformações podem ser expressas por:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_s = \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \mathbf{N}_s \tilde{\mathbf{u}}_s \tag{2.126}$$

Adotando-se o método de Galerkin, escolhe-se as funções ponderadoras idênticas as funções de forma, ou seja, $\mathbf{w}_s = \mathbf{N}_s$ (REDDY, 2006). A aproximação é feita em nível elementar para posteriormente proceder a montagem da matriz global.

A formulação por elementos finitos do domínio estrutural pode então ser descrita para um meio contínuo como sendo

$$\sum_{i=1}^{nel} \left\{ \int_{\Omega_s} \mathbf{N}_s^T \rho_s \mathbf{N}_s dV \ddot{\tilde{\mathbf{u}}}_s + \int_{\Omega_s} \left(\tilde{\boldsymbol{\nabla}} \mathbf{N}_s \right)^T \mathbf{D}_s \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \mathbf{N}_s dV \tilde{\mathbf{u}}_s = \\ = \int_{\Gamma_{fs}} \mathbf{N}_s^T \mathbf{t}_{fs} dS + \int_{\Gamma_{sc}} \mathbf{N}_s^T \mathbf{f}_s dS + \int_{\Omega_s} \mathbf{N}_s^T \mathbf{b}_s dV \right\}$$
(2.127)

onde \sum representa o procedimento de montagem do sistema global e nel é o número de elementos da malha.

O sistema matricial de equações para o domínio estrutural pode ser definido como:

$$\mathbf{M}_{s}\ddot{\tilde{\mathbf{u}}}_{s} + \mathbf{K}_{s}\tilde{\mathbf{u}}_{s} = \mathbf{f}_{fs} + \mathbf{f}_{s} + \mathbf{f}_{b}$$
(2.128)

Adotando-se para a interpolação das variáveis funções de aproximação N_s do tipo suporte compacto, isto é:

$$\mathbf{N}_{s}^{j}(x_{i}) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j \\ 1 & \text{se } i = j \end{cases}$$
(2.129)

sendo que o índice i indica nó e o índice j indica a função de forma da aproximação.

Ou seja, N_s é nula fora do domínio do elemento Ω_s^e onde a função é definida. Assim, a aproximação pode ser feita elemento por elemento:

$$\mathbf{u}_s^e = \mathbf{N}_s^e \tilde{\mathbf{u}}_s^e \tag{2.130}$$

Portanto, os termos da equação global, equação 2.128, podem ser calculados de forma elementar:

$$\mathbf{M}_{s}^{e} = \int_{\Omega_{s}^{e}} (\mathbf{N}_{s}^{e})^{T} \rho_{s} \mathbf{N}_{s}^{e} dV; \qquad \mathbf{K}_{s}^{e} = \int_{\Omega_{s}^{e}} \left(\tilde{\mathbf{\nabla}} \mathbf{N}_{s}^{e} \right)^{T} \mathbf{D}_{s} \tilde{\mathbf{\nabla}} \mathbf{N}_{s}^{e} dV$$

$$\mathbf{f}_{fs}^{e} = \int_{\Gamma_{fs}^{e}} (\mathbf{N}_{s}^{e})^{T} \mathbf{t}_{fs} dS; \qquad \mathbf{f}_{s}^{e} = \int_{\Gamma_{sc}^{e}} (\mathbf{N}_{s}^{e})^{T} \mathbf{f}_{s} dS; \qquad \mathbf{f}_{b}^{e} = \int_{\Omega_{s}^{e}} (\mathbf{N}_{s}^{e})^{T} \mathbf{b}_{s} dV$$

$$(2.131)$$

onde $\mathbf{M}_{s}^{e} \in \mathbf{K}_{s}^{e}$ são as matrizes de massa e de rigidez elementares, respectivamente, da fase estrutural do sistema, \mathbf{f}_{fs}^{e} é vetor que representa a força de superfície nodal equivalente que as partículas exercem na estrutura, \mathbf{f}_{s}^{e} é o vetor das forças nodais de superfície que atuam na estrutura e \mathbf{f}_{b}^{e} é o vetor das forças nodais de corpo que atuam na estrutura.

A equação de equilíbrio que governa o problema dinâmico é dada por

$$\mathbf{M}_s \ddot{\mathbf{u}}_s + \mathbf{K}_s \mathbf{u}_s = \mathbf{f}_{fs} + \mathbf{f}_s + \mathbf{f}_b \tag{2.132}$$

Introduzindo forças de amortecimento juntamente com as forças de corpo que atuam na estrutura tem-se:

$$\mathbf{M}_{s}\ddot{\mathbf{u}}_{s} + \mathbf{C}_{s}\dot{\mathbf{u}}_{s} + \mathbf{K}_{s}\mathbf{u}_{s} = \mathbf{f}_{fs} + \mathbf{f}_{s} + \mathbf{f}_{b}$$
(2.133)

onde \mathbf{C}_s é a matriz de amortecimento da estrutura, formalmente definida por:

$$\mathbf{C}_{s} = \int_{\Omega_{s}^{e}} \kappa^{e} (\mathbf{N}_{s}^{e})^{T} \mathbf{N}_{s}^{e} dV$$
(2.134)

sendo que κ^e é o parâmetro da propriedade de amortecimento do elemento e.

Na prática é difícil determinar os parâmetros de amortecimento dos elementos, em especial porque as propriedades de amortecimento são frequentemente dependentes da frequência da es-

trutura. Por essas razões, a matriz C_s geralmente não é construída a partir da equação 2.134, mas usando-se as matrizes de massa e rigidez globais da malha de elementos finitos, juntamente com resultados experimentais. Neste trabalho adotou-se um modelo de amortecimento proporcional, onde a matriz de amortecimento será dada por,

$$\mathbf{C}_s = c_a \mathbf{M}_s + c_b \mathbf{K}_s \tag{2.135}$$

onde c_a e c_b são duas constantes, sendo que nesta implementação adotou-se que $c_a = 0,005$ e $c_b = 0,003$.

Observa-se neste caso que o sistema modelado pelo FEM é considerado como um sistema linear. Todavia, na equação 2.133, o termo \mathbf{f}_{fs} é não linear e depende fortemente do campo de deslocamentos, \mathbf{u}_s .

2.2.2 Estado Plano de Deformação

O problema do estado plano de deformação, usado neste trabalho, supõe que a dimensão do corpo na direção z é muito grande e que as forças não variam ao longo dessa direção. Uma vez que as condições são as mesmas em todas as seções transversais, basta considerar uma fatia entre duas seções que distam uma unidade entre si.

As componentes de deslocamento $u_x^s e u_y^s$ são funções das coordenadas x e y, mas independem da coordenada longitudinal z. Supondo que o deslocamento u_z^s seja nulo, observa-se que as componentes de deformação γ_{zy}^s , $\gamma_{zx}^s e \varepsilon_{zz}^s$ são nulas.

Para problemas planos, a matriz de deformação, $\left(\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\mathbf{N}_{s}^{e}\right)^{T}$, para um nó *i* de um elemento finito *e* é dada por:

$$\left(\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\mathbf{N}_{s}^{e}\right)^{T} = \begin{bmatrix} \partial N_{s}^{e}(x_{i})/\partial x & 0\\ 0 & \partial N_{s}^{e}(x_{i})/\partial y\\ \partial N_{s}^{e}(x_{i})/\partial y & \partial N_{s}^{e}(x_{i})/\partial x \end{bmatrix}$$
(2.136)

Já a matriz constitutiva se reduz a:

$$\mathbf{D}_{s} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu \end{bmatrix}$$
(2.137)

que é usada para meios homogêneos e isotrópicos com comportamento linear elástico.

2.2.3 Integração Numérica de Newmark

Na seção 2.2.1 foi derivada a equação 2.133 de equilíbrio que governa o comportamento dinâmico linear de um sistema de elementos finitos. Matematicamente essa equação representa um sistema de equações diferenciais de segunda ordem e, a princípio, as soluções para essas equações podem ser obtidas através de procedimentos clássicos de solução de equações diferenciais com coeficientes constantes. No entanto, para sistemas com muitos elementos (implicando que a ordem das matrizes é alta) a solução geral clássica pode se tornar inviável. Portanto, nas soluções práticas do método dos elementos finitos se está interessado em métodos eficazes para a solução da equação 2.133, sendo que esses métodos podem ser divididos em dois grupos principais: os métodos de integração direta e os de superposição modal.

Para possibilitar o acoplamento com o DEM, no qual a integração no tempo é feita pelo algoritmo de Verlet, adotou-se nesse trabalho o método de integração de Newmark para a fase estrutural. Trata-se de um método de integração direto (o termo "direto"significa que não há necessidade de transformar a equação diferencial em outra forma a fim de desenvolver a solução) onde a equação 2.133 é integrada através de um procedimento numérico passo-a-passo. Essencialmente, o método de Newmark, assim como os demais métodos de integração direta, é baseado em um princípio básico: Ao invés de satisfazer a equação 2.133 para qualquer tempo t, o objetivo é satisfazer a equação apenas para instantes discretos de tempo, separados por um intervalo Δt (passo de tempo). Isso possibilita que se possa realizar o acoplamento com o DEM, onde o integrador de Verlet também é baseado na solução discreta no tempo das equações de equilíbrio das partículas.

O que diferencia o método de Newmark dos demais métodos de integração direta é a maneira

como se assume as variações dos deslocamentos, velocidades e acelerações entre cada intervalo de tempo Δt , sendo que cada caso influencia diretamente na precisão, estabilidade e custo computacional do método. No método de Newmark assume-se que a variação da aceleração é linear no intervalo de tempo Δt , motivo pelo qual o método é dito como sendo incondicionalmente estável, de forma que não é necessário que o passo de tempo usado seja menor que um determinado valor crítico para que a solução convirja. Essa característica torna o método de Newmark muito interessante, uma vez que ele permite o uso de passos de tempo maiores que os usados nos métodos condicionalmente estáveis, a exemplo do integrador de Verlet, no entanto implica em um método implícito, exigindo a solução de um sistema de equações lineares a cada passo de tempo. A escolha do método de integração adequado é dependente do tipo de problema que se deseja analisar, como neste trabalho o tipo e a quantidade de elementos finitos usados na modelagem da estrutura não impõe uma limitação computacional para o algoritmo do FEM optou-se pelo método de Newmark, pela vantagem que um método incondicionalmente estável tem sobre os demais. Obviamente que por ser um método implícito cada passo de tempo do algoritmo de Newmark exige um esforço computacional maior, mas comparado com o tempo de processamento gasto pelo integrador de Verlet esse esforço pode ser desprezado, sendo que neste caso o uso de um método incondicionalmente estável se torna a melhor opção.

Conforme descrito por Bathe (2006), no método de integração direta de Newmark as seguintes hipóteses são assumidas na iteração *n*:

$$\dot{\mathbf{u}}_s(t_{n+1}) = \dot{\mathbf{u}}_s(t_n) + [(1-\delta)\ddot{\mathbf{u}}_s(t_n) + \delta\ddot{\mathbf{u}}_s(t_{n+1})]\Delta t$$
(2.138)

$$\mathbf{u}_s(t_{n+1}) = \mathbf{u}_s(t_n) + \dot{\mathbf{u}}_s(t_n)\Delta t + \left[\left(\frac{1}{2} - \alpha\right)\ddot{\mathbf{u}}_s(t_n) + \alpha\ddot{\mathbf{u}}_s(t_{n+1})\right]\Delta t^2$$
(2.139)

onde α e δ são parâmetros que podem ser determinados para se obter precisão na integração e estabilidade. Quando $\delta = \frac{1}{2}$ e $\alpha = \frac{1}{6}$ as relações 2.138 e 2.139 correspondem ao método da aceleração linear.

Juntamente com as equações 2.138 e 2.139, para determinar os deslocamentos, velocidades e acelerações no passo de tempo t_{n+1} , a equação de equilíbrio 2.133 no passo de tempo t_{n+1} também é considerada,

$$\mathbf{M}_{s}\ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n+1}) + \mathbf{C}_{s}\dot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n+1}) + \mathbf{K}_{s}\mathbf{u}_{s}(t_{n+1}) = \mathbf{f}_{fs}(t_{n+1}) + \mathbf{f}_{s}(t_{n+1}) + \mathbf{f}_{b}(t_{n+1})$$
(2.140)

Resolvendo a equação 2.139 para $\ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ em termos de $\mathbf{u}(t_{n+1})$ e então substituindo em 2.138 obtêm-se equações para $\ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ e $\dot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$, ambas apenas em termos do deslocamento desconhecido $\mathbf{u}(t_{n+1})$. As duas relações para $\ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ e para $\dot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ são substituídas na equação 2.140 a fim de resolver para $\mathbf{u}(t_{n+1})$, que depois, usando-se novamente as equações 2.138 e 2.139, pode-se determinar $\dot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$ e $\ddot{\mathbf{u}}(t_{n+1})$. O algoritmo completo usando o esquema de integração de Newmark é mostrado no pseudocódigo abaixo.

Algoritmo Newmark:

A. Cálculos iniciais:

- \circ 1. Montar as matrizes de rigidez K_s, de massa M_s e de amortecimento C_s.
- 2. Inicializar os vetores $\mathbf{u}_s(t_0)$, $\dot{\mathbf{u}}_s(t_0)$ e $\ddot{\mathbf{u}}_s(t_0)$.
- 3. Selecionar o passo de tempo Δt e os parâmetros α e δ e calcular os parâmetros de integração:

$$\delta \ge 0.50; \quad \alpha \ge 0.25 \left(0.5 + \delta^2\right)$$

$$a_0 = \frac{1}{\alpha \Delta t^2}; \quad a_1 = \frac{\delta}{\alpha \Delta t}; \quad a_2 = \frac{1}{\alpha \Delta t}; \quad a_3 = \frac{1}{2\alpha} - 1$$

$$a_4 = \frac{\delta}{\alpha} - 1; \quad a_5 = \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\delta}{\alpha} - 2\right); \quad a_6 = \Delta t (1 - \delta); \quad a_7 = \delta \Delta t$$
(2.141)

• 4. Construir a matriz de rigidez efetiva $\hat{\mathbf{K}}_s$: $\hat{\mathbf{K}}_s = \mathbf{K}_s + a_0 \mathbf{M}_s + a_1 \mathbf{C}_s$.

B. Para cada passo de tempo:

• 1. Calcular o carregamento efetivo no instante t_{n+1} :

$$\hat{\mathbf{R}}_{s}(t_{n+1}) = \mathbf{R}_{s}(t_{n+1}) + \mathbf{M}_{s} \left(a_{0} \mathbf{u}_{s}(t_{n}) + a_{2} \dot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) + a_{3} \ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) \right) + \\ + \mathbf{C}_{s} \left(a_{1} \mathbf{u}_{s}(t_{n}) + a_{4} \dot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) + a_{5} \ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) \right)$$
(2.142)

onde $\mathbf{R}_s = \mathbf{f}_{fs}(t_{n+1}) + \mathbf{f}_s(t_{n+1}) + \mathbf{f}_b(t_{n+1})$

- \circ 2. Resolver para os deslocamentos no instante t_{n+1}
- \circ 3. Calcular as acelerações e velocidades em t_{n+1} :

$$\ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n+1}) = a_{0} \left(\mathbf{u}_{s}(t_{n+1}) - \mathbf{u}_{s}(t_{n}) \right) - a_{2} \dot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) - a_{3} \ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n})
\dot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n+1}) = \dot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) + a_{6} \ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n}) + a_{7} \ddot{\mathbf{u}}_{s}(t_{n+1})$$
(2.143)

Neste trabalho adotou-se que $\delta = 0.5$

2.3 Acoplamento DEM-FEM

O acoplamento do método dos elementos discretos com o método dos elementos finitos exige o tratamento adequado do contato entre as partículas discretas e a fronteira do domínio contínuo, discretizado por elementos finitos, conforme mostrado na Figura 2.12. O contato entre o domínio discreto e o contínuo deve ser detectado e avaliado a cada passo de tempo do algoritmo DEM-FEM, de forma que se possa calcular as forças exercidas nas partículas devido ao contato com a malha de elementos finitos, além de calcular o carregamento nodal gerado na malha de elementos finitos devido ao contato com as partículas discretas.



Figura 2.12: Contato entre o domínio discreto e o contínuo.

2.3.1 Contato Partícula-Elemento

Nas publicações de acoplamento DEM-FEM, como por exemplo em Onate e Rojek (2004), Dang e Meguid (2013) e em Nakashima e Oida (2004), o contato de uma partícula com a face de um elemento finito é tratado de forma similar ao contato de uma partícula com a fronteira do domínio espacial. Como exemplo, na Figura 2.13 é mostrado o contato de uma partícula, com centroide C, com a face externa de um elemento finito definida pelos nós 1 e 2. A partícula possui velocidade de translação no plano xy dada por \mathbf{v}_c e velocidade angular na direção z dada por ω_z ; e os nós 1 e 2 possuem velocidade de translação no plano xy dadas por $\dot{\mathbf{u}}_1$ e $\dot{\mathbf{u}}_2$, respectivamente.



Figura 2.13: Contato entre uma partícula e a face de um elemento.

Conforme pode-se observar na Figura 2.13, em uma implementação DEM-FEM a interação entre os domínios discreto e contínuo é tratado através da avaliação do contato de cada partícula discreta com a fronteira externa da malha de elementos finitos. Esse contato se assemelha ao caso do contato de uma partícula com a fronteira do domínio espacial, tópico que foi abordado na seção 2.1.5 deste trabalho, porém com algumas particularidades. Diferentemente da fronteira do domínio espacial, que é estática, a implementação do FEM desenvolvida neste trabalho é dinâmica, usando-se o método de integração de Newmark. Portanto, a cada passo de tempo, de acordo com o carregamento externo e/ou contato com as partículas discretas, as coordenadas dos nós da malha podem sofrer alterações com relação ao passo de tempo anterior e, consequentemente, as coordenadas dos nós que formam a fronteira da malha podem ser alteradas também. Isso implica que, a cada passo de tempo do algoritmo acoplado DEM-FEM, deve-se verificar a existência de contato

entre todas as partículas discretas com as faces externas da malha de elementos finitos, levando em consideração que tanto as coordenadas das partículas quanto as coordenadas dos nós da malha podem sofrer alterações a cada passo de tempo devido à integração no tempo de *Verlet* e Newmark, respectivamente.

Seguindo a modelagem por *soft sphere* adotada neste trabalho na implementação do DEM, é permitida a penetração da partícula na face do elemento finito, sendo que as forças de contato são proporcionais a essa penetração, calculadas a partir do modelo constitutivo adotado. Uma vez detectado que a partícula entrou em contato com a face externa de um dos elementos da malha na iteração *n*, as forças e o momentos que ocorrem no ponto de contato devem ser calculados, sendo esses responsáveis pelo acoplamento dos dois domínios. Assim como no contato entre uma partícula e a fronteira do domínio espacial, o ponto de contato será definido como o ponto na metade da penetração sofrida pela partícula, ao longo da linha que passa pelo centroide da partícula e é normal a face do elemento que ocorreu o contado, conforme mostrado na Figura 2.13.

2.3.2 Abordagem Proposta

Detectar o contato das partículas discretas com a faces externas da malha de elementos finitos a cada passo de tempo implica em ampliar a complexidade da implementação do algoritmo de detecção de contato DEM-FEM. Conforme mostrado acima, devido a natureza dinâmica de ambos os modelos, tanto as coordenadas da malha quanto das partículas podem sofrer alterações a cada passo de tempo, o que dificulta a implementação de um algoritmo de detecção de contato que seja computacionalmente eficiente, fator limitante para a grande maioria das simulações do DEM.

Além disso, a avaliação das forças de contato e a posterior transferência do carregamento do ponto de contato para o centroide da partícula e para os nós que formam a face do elemento exige um trabalho mais criterioso. Para o cálculo das componentes das forças de contato provenientes dos amortecedores é necessário o conhecimento da velocidade de translação da face do elemento no ponto onde ocorreu o contato, exigindo dessa forma a incorporação de mais cálculos no algoritmo. Também, diferentemente do contato com as fronteiras do domínio espacial, em que o ponto onde ocorreu o contato não influenciava nos cálculos, aqui é necessário saber em qual elemento ocorreu o contato, além da posição do contato na face do elemento, para que a transferência das forças para o carregamento nodal dos nós que compõe a face do elemento onde ocorreu o contato possa ser

feita corretamente.

Portanto, a implementação de um algoritmo de detecção e avaliação do contato DEM-FEM que atenda a essas necessidades e ao mesmo tempo seja computacionalmente eficiente é uma das dificuldades encontradas nas implementações do acoplamento dos dois métodos. Com o objetivo de tornar esse algoritmo mais eficiente, neste trabalho foi proposto um modelo no qual é fixada uma fronteira de partículas discretas no contorno da malha de elementos finitos, conforme mostrado na Figura 2.14(a) para uma malha retangular e na Figura 2.14(b) para uma malha circular.



Figura 2.14: Elementos discretos fixos à malha de elementos finitos. (a) malha retangular; (b) malha circular.

Com essa abordagem o contato das partículas discretas com as faces da malha passa a ser feito com o auxílio da fronteira de partículas, não existindo mais o contato direto da malha do FEM com as partículas. Dessa forma, uma partícula discreta deixa de entrar em contato com a malha e está na realidade entrando em contato com uma partícula fixa na face externa da malha, conforme mostrado na Figura 2.15. As forças provenientes do contato entre a partícula livre e a partícula fixa são então transferidas para a partícula discreta e para os nós que formam a face onde ocorreu o contato entre as duas partículas.

Não há necessidade portanto de implementar um novo algoritmo de detecção de contato, uma vez que o algoritmo de detecção de contato implementado para um par de partículas discretas livres, mostrado na seção 2.1.3, atende a essa necessidade. Também não é necessária implementação de um novo algoritmo para o cálculo da força de contato, uma vez que o contato DEM-FEM se reduz a um contato entre um par de partículas e já está implementado no algoritmo do DEM.



Figura 2.15: Abordagem proposta para o contato entre uma partícula e a face de um elemento.

O contato dessas partículas do contorno com as partículas discretas do DEM é governado pelo mesmo modelo constitutivo determinado para o contato entre um par de partículas, além de possuírem as mesmas propriedades de contato das demais partículas discretas. A única característica que as diferencia das demais partículas discretas livres é que elas estão sempre fixas aos nós e faces externos da malha de elementos finitos. As partículas do contorno não são integradas junto com as demais partículas livres através do integrador explícito de *leapfrog* Verlet, de forma que sua posições e velocidades são definidas exclusivamente pelas coordenadas e velocidades dos nós da malha do FEM, que são integrados no tempo pelo algoritmo implícito de Newmark. A cada iteração do método FEM deve-se reposicionar as partículas do contorno de acordo com a nova coordenada dos nós da malha, de forma que as partículas sempre permaneçam fixas e posicionadas no contorno da malha. Além disso, a velocidade das partículas do contorno devem ser recalculadas de acordo com a velocidade dos nós que formam as faces externas da malha.

Essa abordagem simplifica o acoplamento dos dois métodos, uma vez que a detecção de contato entre as partículas livres e as faces externas da malha é feita pelas partículas do contorno, usando o mesmo algoritmo de detecção de contato e de cálculo de forças já implementado no DEM para o contato entre um par de partículas livres. Dessa forma, a detecção do contato DEM-FEM se torna um processo automático, contornando a necessidade de implementar um algoritmo específico para a detecção de contato dos dois métodos. Além disso, as propriedades das partículas fixas na malha podem ser controladas de forma a atender algum requisito de propriedade superficial do modelo estrutural usado.

2.3.3 Posicionamento das Partículas do Contorno na Malha do FEM

As partículas do contorno da malha do modelo de elementos finitos possuem todas o mesmo diâmetro, sendo este valor um dado de entrada do algoritmo, definido como uma fração do diâmetro da menor partícula presente no sistema. Antes de iniciar a sequência iterativa do algoritmo as partículas são posicionadas regularmente no contorno da malha de elementos finitos, resultando em um contorno de partículas em torno da malha, conforme mostrado na Figura 2.14 e 2.15.



Figura 2.16: Determinação da velocidade das partículas do contorno.

A quantidade de partículas em cada face externa da malha depende da distância entre os nós que compõe o face do elemento, sendo que cada nó externo da malha coincide sempre com o centroide de uma partícula do contorno. Na implementação realizada neste trabalho adotou-se que será introduzido o maior número inteiro de partículas, de tal forma que a distância entre seus centroides será igual e nunca menor que o diâmetro das partículas do contorno sempre posicionadas sobre a face do elemento. Foi implementado um algoritmo de posicionamento das partículas, sendo que a cada iteração do FEM o algoritmo é executado novamente para reposicionar as partículas, uma vez que as coordenadas da malha podem ter sofrido alterações.

As velocidades de translação nas direções x e y das partículas do contorno serão dadas pelas velocidades dos nós externos da malha determinados na última iteração do integrador de Newmark. Como a velocidade dos nós da malha são sempre valores próximos, assume-se que todas as partículas do contorno posicionadas ao longo da face externa de um elemento, incluindo as que estão fixas aos nós da malha, possuem velocidade (em ambas as direções) igual à média da velocidade

dos nós que compõem a face do elemento, conforme ilustrado na Figura 2.16. A velocidade de rotação é tomada sempre como nula, ou seja as partículas do contorno, assim como os nós da malha, possuem apenas dois graus de liberdade (translação nas direções x e y). O algoritmo implementado para posicionar as partículas também é responsável pela determinação da velocidade de translação das partículas.

2.3.4 Cálculo das Forças de Contato DEM-FEM

Quando o algoritmo de detecção de contato do DEM detecta o contato de uma partícula discreta com uma partícula fixa no contorno da malha na iteração n, conforme ilustrado na Figura 2.17, as forças de contato que ocorrem no ponto de contato são calculadas.



Figura 2.17: Interface de contato DEM-FEM.

Como o contato ocorre entre um par de partículas, as forças e o momento resultantes do contato são calculados usando-se o mesmo modelo constitutivo determinado anteriormente para o contato entre um par de partículas discretas, mostrado na Figura 2.6. Tem-se, portanto, como resultado do contato, a ação de uma força normal $\mathbf{F}_n(t_n)$, que atua na direção normal ao longo da linha que conecta o centro das partículas no plano xy; a força tangencial $\mathbf{F}_T(t_n)$, também no plano xy e perpendicular à força normal. Ambas as forças são aplicadas no ponto de contato, que corresponde ao ponto central da penetração, ao longo da direção que passa pelo centroide das duas partículas em contato. Além das duas forças, de acordo com o modelo constitutivo adotado, o contato entre as partículas também resulta na aplicação do momento de rolamento, $\mathbf{M}(t_n)$, que atua na direção z, e é aplicado no centroide das duas partículas. Como a partícula do contorno não possui o grau de liberdade de rotação, a aplicação do momento de rolamento é ignorada. Na Figura 2.18 são mostrados as forças e o momento resultantes do contato entre uma partícula discreta e uma

partícula do contorno na iteração n.



Figura 2.18: Contato DEM-FEM.

Conforme abordado anteriormente, quando o contato ocorre entre um par de partículas discretas livres, as forças e o momento de contato são transferidos do ponto de contato para os centroides das duas partículas. No caso do contato de uma partícula discreta com uma partícula fixa no contorno da malha de elementos finitos, para que o efeito do contato possa ser incorporado pelos dois domínios (discreto e contínuo), as forças e o momento de contato precisam ser transferidos tanto para o centroide da partícula discreta incidente quanto para os dois nós da malha que formam a face onde a partícula do contorno está fixa. Como o elemento do tipo quadrado linear escolhido para formar a malha de elementos finitos nesta implementação possui apenas dois graus de liberdade por nó (translação nas direções x e y), adotou-se que o momento de rolamento oriundo do contato é ignorado na transferência do carregamento do ponto de contato para os nós do elemento finito. Portanto, assume-se que, para o carregamento nodal do FEM, o resultado do contato da malha com uma partícula discreta é a incorporação de forças na direções x e y ao carregamento nodal dos nós que formam a face do elemento que sofreu o contato.

Para a partícula discreta incidente as forças e o momento de contato são transferidos da mesma forma que no contato entre um par de partículas ou com a fronteira do domínio espacial. Por equilíbrio estático a transferência resulta na adição de um torque $T(t_n)$ que atua na direção z, juntamente com o momento de rolamento.

A transferência das forças $\mathbf{F}_n(t_n) \in \mathbf{F}_T(t_n)$ do ponto de contato para os dois nós que formam a face onde a partícula do contorno (que sofreu o contato com a partícula discreta) está fixa é feita através da teoria de força nodal equivalente. Como o raio da partícula fixa é uma fração do raio da menor partícula discreta presente na simulação, assume-se que o ponto de contato é muito próximo da face do elemento, de tal forma que pode-se assumir, para a transferência de forças para o carregamento nodal do FEM, que o ponto de contato coincide com o centroide da partícula fixa no contorno da malha, que está posicionado sobre a face do elemento. Na Figura 2.19 tem-se uma ilustração do contato entre uma partícula discreta e uma partícula fixa no contorno da malha.



Figura 2.19: Transferência de carga DEM-FEM.

Observa-se na Figura 2.19 que as forças F_x e F_y , aplicadas no centroide da partícula fixa, correspondem a resultante das forças $\mathbf{F}_n(t_n)$ e $\mathbf{F}_T(t_n)$ nas direções x e y. Isso é necessário pois os cálculos das forças nodais equivalentes ficam facilitados se a força incidente na face do elemento estiver em termos de suas componentes cartesianas.

A transferência das forças do centroide da partícula fixa para os nós que formam a face é feita

usando-se o conceito de força nodal equivalente. Como a posição do centroide da partícula fixa é conhecida ao longo da face do elemento tem-se:

$$\mathbf{f}_{fs}^{1} = \begin{cases} \mathbf{f}_{fs}^{1,x} \\ \mathbf{f}_{fs}^{1,y} \\ \mathbf{f}_{fs}^{2,x} \\ \mathbf{f}_{fs}^{2,y} \\ \mathbf{f}_{fs}^{2,y} \end{cases} = \begin{bmatrix} N_{1} & 0 & N_{2} & 0 \\ 0 & N_{1} & 0 & N_{2} \end{bmatrix} \begin{cases} F_{x} \\ F_{y} \end{cases}$$
(2.144)

em que os valores N_1 e N_2 correspondem as funções de forma do elemento finito do tipo quadrilateral linear, avaliadas no centroide da partícula fixa. tem-se portanto que:

$$N_{1} = (L - x) / L$$

$$N_{2} = x / L$$
(2.145)

em que L corresponde ao comprimento da face do elemento onde a partícula do contorno está fixa, e x é a distância, ao longo da face do elemento, do centroide da partícula fixa ao nó da malha, conforme mostrado na Figura 2.19. Para calcular as medidas de L e x toma-se como referência o mesmo nó.

Os valores de que compõem o vetor f_{fs}^1 são então adicionados ao vetor de carregamento nodal do FEM de acordo com a numeração dos graus de liberdade definidos no pré-processamento do algoritmo.

Esse procedimento é repetido a cada novo contato detectado entre uma partícula discreta e as partículas do contorno da malha, de forma que ao final de cada iteração tem-se calculado o efeito do contato da malha com as partículas discretas. Pela forma como são posicionadas as partículas no contorno da malha de elementos finitos o contato de uma partícula discreta não ocorre necessariamente com apenas uma partícula do contorno, mas pode ocorrer com duas partículas simultaneamente. Nesse caso cada um dos contatos é tratado igualmente, sendo as forças equivalentes, tanto no centroide da partícula quando nos nós da malha, calculadas da mesma forma que em um contato simples.

2.4 Convergência e Estabilidade Numérica

Tanto na formulação do DEM quanto na do FEM a determinação do passo de tempo, Δt , é de grande importância para a simulação. Por um lado, deve-se sempre selecionar o maior passo de tempo possível, de forma que o número de iterações necessárias para atingir o tempo de simulação seja minimizado. Por outro lado, existem questões relacionadas a estabilidade numérica dos integradores usados nos algoritmos que limitam o uso de passos de tempo maiores que um determinado valor crítico, Δt_c .

No algoritmo acoplado DEM-FEM implementado neste trabalho tem-se o acoplamento de dois integradores distintos, o integrador explícito de Verlet, usado no domínio particulado e o integrador implícito de Newmark usado no domínio contínuo. Para garantir a estabilidade numérica do algoritmo, o integrador explícito usado no DEM exige passos de tempo muito menores que o necessários no integrador implícito de Newmark. O resultado da implementação mostrou que o algoritmo acoplado DEM-FEM apresenta um comportamento mais estável se o passo de tempo dos dois domínios forem iguais. Por isso, nesta implementação, adotou-se que o passo de tempo usado no FEM é determinado pelo valor do passo de tempo do DEM, que é sempre muito menor que o necessário para garantir a precisão numérica do integrador de Newmark. A diminuição de desempenho computacional resultante dessa hipótese não é significativo, uma vez que nas simulações realizadas neste trabalho o FEM representa apenas uma pequena parcela do esforço computacional do algoritmo acoplado. Porém fica em aberto para trabalhos futuros o aprofundamento desse tema.

Vários autores têm sugerido diretrizes para calcular o maior passo de tempo que pode ser usado no DEM a partir da propriedades das partículas da simulação, principalmente para integradores de baixa ordem como o algoritmo de Verlet implementado neste trabalho É geralmente aceito que o passo de tempo deva ser menor que um valor crítico, que geralmente é expressado como sendo uma fração da frequência natural de um sistema massa-mola equivalente. No entanto, o valor da fração usada e até mesmo a maneira de calcular a frequência natural tem variado muito entre os autores. Cundall e Strack (1979) determina o valor do passo de tempo crítico como

$$\Delta t_c = 2\sqrt{m/k_n} \tag{2.146}$$

em que m e k_n são a massa e a rigidez normal, respectivamente, das partículas. Os autores estabeleceram que o valor do passo de tempo deveria ser uma fração de Δt_c , mas não recomendaram nenhum valor.

A partir de Cundall e Strack (1979) tornou-se comum calcular o passo de tempo crítico do DEM para modelagem de sistemas particulados a partir da relação

$$\Delta t_c = C\sqrt{m/k_n} \tag{2.147}$$

em que C é uma constante, sendo que vários autores propuseram diferentes valores para C. O uso de $C = 0,2\pi$ é comum, assim como, o uso de C = 0,2, no entanto, existem publicações que utilizam valores como C = 2. Malone e Xu (2008) demostraram através de testes numéricos que para $C \le 0,5$ o erro encontrado na conservação de energia de um sistema de partículas perfeitamente elástico era minimizado após um determinado número de iterações. Portanto, baseado nos resultados de Malone e Xu (2008) adotou-se neste trabalho que C = 0,5.

A equação 2.147 estabelece o valor do passo de tempo crítico baseado nas propriedades do contato normal das partículas. No entanto, no modelo constitutivo adotado neste trabalho, além do contato normal adotado, também presente na implementação de Cundall e Strack (1979), tem-se também o contato tangencial e o atrito de rolamento. Dessa forma, deve-se também verificar o critério de convergência a partir das propriedades dos demais contatos.

Assim, o passo de tempo crítico, Δt_c , usado no algoritmo acoplado DEM-FEM, tanto no integrador de Verlet como no de Newmark é dado pelo menor valor entre Δt_c^n e Δt_c^t ,

$$\Delta t_c = \min\left(\Delta t_c^n, \Delta t_c^t\right) \text{ onde } \begin{cases} \Delta t_c^n \le 0.5\sqrt{\frac{m_{min}}{k_n}}\\ \Delta t_c^t \le 0.5\sqrt{\frac{I_{min}}{k_t r_{max}^2}} \end{cases}$$
(2.148)

em que Δt_c^n corresponde ao passo de tempo crítico baseado nos parâmetros do contato normal, e Δt_c^t corresponde ao passo de tempo crítico baseado nos parâmetros do contato tangencial. m_{min} e I_{min} correspondem aos menores valores de massa e momento de inércia, respectivamente, dentre as partículas presentes na simulação, enquanto r_{max} corresponde ao raio da maior partícula. Ao calcular o passo de tempo crítico com m_{min} e I_{min} garante-se que, para simulações com partículas de diferentes diâmetros e densidades, o valor de Δt_c calculado pela equação 2.148 será o caso mais crítico.

Não há necessidade de calcular Δt_c a partir das propriedades do contado de rolamento, uma vez que, de acordo com a implementação realizada neste trabalho o valor da rigidez torcional, k_r , é sempre uma fração da rigidez tangencial, k_t , o que resulta em um passo de tempo crítico maior que Δt_c^t .

3 Implementação e Validação

Este capítulo dedica-se a apresentar os principais aspectos da implementação do algoritmo acoplado DEM-FEM realizada neste trabalho, discutir exemplos clássicos de validação para o algoritmo DEM que foram estudados, além de apresentar os resultados obtidos com testes de verificação realizados com o algoritmo acoplado.

Assim como em qualquer implementação numérica, é essencial que o código de DEM seja validado. Como exemplo, no método dos elementos finitos, o chamado *patch test* é usado para checar a convergência e verificar a correta programação do código. A princípio a validação do DEM pode ser abordada de duas formas: analiticamente e experimentalmente. Validações analíticas, usando soluções fechadas, possibilitam prover informações de que o modelo está funcionando como deveria, enquanto validações experimentais confirmam que a resposta real do material foi capturada. Testes de validação são importantes para confirmar a correta implementação dos algoritmos, a consistência dos parâmetros de entrada selecionados, além da sensibilidade do programa à plataforma de hardware utilizada.

Segundo mencionado por O'Sullivan (2011b), é importante diferenciar testes de validação experimental dos testes de calibração. Ao calibrar um modelo, o material real é testado e os parâmetros do DEM são variados de forma a aproximar a resposta da simulação à resposta física observada. Em contraste, em um teste de validação experimental um material granular simplificado é considerado, permitindo a correta representação do tamanho das partículas e das propriedades do material na simulação. Portanto, em um teste de validação experimental o objetivo é analisar a resposta global do conjunto de partículas, comparando o resultado com um ensaio experimental similar. Testes de validação experimental amplamente utilizados na literatura são a comparação do ângulo de empilhamento da simulação com ensaios físicos com partículas simplificadas.

Dessa forma, como neste trabalho não foram realizados experimentos reais, buscou-se o resultado de experimentos publicados na literatura para a validação experimental do algoritmo. Neste capítulo são mostrados os testes de validação realizados com o código DEM implementado neste trabalho, divididos em duas partes:

 Ensaios de validação analíticos com poucas partículas. O objetivo desses testes são a validação dos modelos de contato implementados. Ensaios de validação experimental, baseados em resultados publicados, a fim de verificar o comportamento global do sistema.

3.1 Implementação do Algoritmo DEM-FEM

Para a implementação dos algoritmos do DEM e do FEM estudados neste trabalho utilizouse o software de computação numérica Matlab[®]. Como este é o primeiro estudo do grupo sobre o acoplamento dos dois métodos, o foco deste trabalho é o estudo aprofundado dos métodos e de seu acoplamento, não sendo alvo do trabalho a implementação eficiente dos algoritmos. Portanto, a opção pelo software de computação numérica ao invés de uma linguagem de programação é justificada, uma vez que o menor desempenho computacional obtido com o software é compensado pela facilidades oferecidas pelo Matlab[®], concentrando dessa forma os esforços desse trabalho em seus objetivos principais. Devido ao grande esforço computacional envolvido nas simulações do DEM foi usado o recurso de compilação de linguagem do Matlab[®], de forma que código é automaticamente compilado em linguagem de C++ antes de ser executado, obtendo-se dessa forma um ganho significativo de desempenho.

Ambos os métodos foram implementados separadamente de acordo com a formulação apresentada no capítulo 2. Tem-se a seguir as principais características de ambas as implementações:

- Domínio espacial quadrado ($L_x = L_y$). Essa abordagem simplifica o algoritmo de busca de contatos, trazendo dessa forma uma melhora no desempenho computacional do algoritmo.
- Possibilidade de adicionar partículas com até três dimensões de raio diferentes. Para evitar a acomodação das partículas em estruturas regulares, prejudicando assim o comportamento de solo desejado nas simulações deste trabalho, é necessário que as partículas tenham uma distribuição de raios.
- Número livre de partículas presentes na simulação, com distribuição de raios definida.
- Introdução de barreiras de partículas fixas ou móveis. Essas barreiras permitem a formação de domínios espaciais específicos usados principalmente nas simulações de empilhamento nos testes de validação.

- Elementos finitos do tipo quadrado de 4 nós com gerador de malha para simulações de vigas e estruturas tubulares.
- Visualização da configuração do sistema nas iterações parciais da simulação com a possibilidade de gerar animações ao final.

O algoritmo para análise dinâmica do problema envolvendo elementos discretos e elementos finitos é composto pela seguinte sequência de cálculos:

Passo Inicial: Definir os dados de entrada:

Antes de iniciar a simulação é necessário inserir os dados de entrada necessários para a simulação, tanto para o FEM quanto para o DEM: informações sobre a geometria do problema a ser estudado, incluindo a dimensão do domínio, o número e distribuição dos raios das partículas, o tipo de estrutura e quantidade de elementos finitos. Também é necessário inserir as propriedades de material, tanto do meio contínuo quando do discreto, além de todos os parâmetros de contato do DEM.

<u>Passo 1:</u> Geração do domínio discreto com a determinação da posição inicial das partículas do DEM.

Passo 2: Geração da malha inicial do FEM e posicionamento das partículas fixas ao contorno da malha.

Passo 3: Detecção e aplicação das forças de contato no DEM:

Executa-se o algoritmo de detecção de contato do DEM. A cada novo par de partículas em contato que é detectado são calculadas as forças de contato, tanto para as partículas livres quanto para as partículas fixas ao contorno da malha de elementos finitos. Em seguida é detectado se existe contato de alguma partícula com a fronteira espacial do domínio. Havendo contato é aplicada a força de reação da fronteira sobre essa partícula. Ao final desse passo tem-se as forças resultantes, nas direções x e y, e o momento resultante na direção z, atuando em todas as partículas do sistema.

Passo 4: Transferência de carga DEM - FEM:

As forças resultantes calculadas para as partículas fixas à malha de elementos finitos são transferidas para o vetor de carregamento nodal equivalente do FEM, para isso executa-se o algoritmo de acoplamento descrito na seção 2.3. Também é acrescentado o carregamento externo imposto a estrutura e forças de corpo, definidos nos dados iniciais do problema.

Passo 5: Passo de avanço no tempo:

Tendo-se as forças e momentos resultantes atuando em cada partícula e o carregamento nodal da malha de elementos finitos, faz-se a integração no tempo. Para o método dos elementos discretos é utilizado o integrador explícito de *Leapfrog* Verlet e para o método dos elementos finitos é usado o integrador implícito de Newmark. A união de um integrador implícito com um explícito já foi utilizada em trabalhos de sobre o acoplamento de DEM-FEM, em especial em Onate e Rojek (2004) no qual é utilizado um integrador explícito com um semi-implícito.

Passo 6: Atualização das posições:

Com o avanço no tempo efetuado pelos integradores tem-se o deslocamento sofrido por todas as partículas e nós da malha. Atualiza-se então as coordenadas das partículas e dos nós da malha de elemento finitos. Como as coordenadas e velocidades dos nós da malha sofreram alterações é necessário atualizar a posição das partículas do contorno, para isso é executado o algoritmo de posicionamento descrito na seção 2.3.3.

Passo 7: Cálculo das tensões no FEM:

A partir do resultado do deslocamento total dos nós da malha de elementos finitos são calculadas as tensões nas direções x e y atuantes na estrutura, além da tensão equivalente de Von Mises.

Passo 8: Saída gráfica do estado do sistema:

O algoritmo termina com o registro gráfico das variáveis de estado das partículas e da malha de elementos finitos para uma adequada visualização da evolução do sistema no tempo. As tensões são mostradas no domínio estrutural através de um mapa de cores. Como o número total de iterações por simulação geralmente é muito grande é inviável fazer o registo gráfico da simulação a cada iteração do algoritmo, portanto, esse registro é feito de acordo com a frequência determinada

nos dados inicias. Nas simulações efetuadas neste trabalho o registro gráfico é feito 20 vezes por segundo de simulação.

Passo 9: Iterações:

Retorna-se ao Passo 3 e se repete todo o procedimento dos passos 3 ao 8 para a próxima iteração (t_{n+1}) até atingir o tempo de simulação determinado. Nesta implementação, a fim de gerar um número inteiro de passos de tempo para cada 1 s de simulação, o passo de tempo, Δt , usado é sempre menor que o valor do passo de tempo crítico determinado pela equação 2.148, contribuindo também para a estabilidade numérica do algoritmo.

Na Figura 3.1 tem-se um diagrama esquemático da sequência de cálculos efetuada a cada iteração do algoritmo acoplado DEM-FEM.

Conforme pode-se observar na Figura 3.1 existem muitas semelhanças no processo geral envolvido em uma simulação do DEM e do FEM. Ambos os métodos possuem uma sequência de inserção de dados iniciais e pré-processamento, seguida pelo processamento do algoritmo e ao final tem-se o pós-processamento da solução, no entanto, existem diferenças essenciais entre os dois métodos.

Em métodos baseados na formulação do contínuo tem-se o esforço associado a geração da malha que para geometrias complexas pode ser um processo não trivial. Por outro lado, no DEM, há a necessidade de gerar a posição inicial das partículas do problema a ser analisado, que no geral é um processo complexo e envolve a execução inicial de um algoritmo de DEM específico. De fato, em alguns casos de problemas de consolidação de solos, a geração da condição inicial das partículas no DEM pode ser um processo com tempo de processamento maior que a própria simulação do problema desejado.

Isso ocorre pois não é possível apenas estabelecer a posição das partículas no domínio como se faz com as coordenadas da malha de elementos finitos durante a geração da malha. Primeiramente porque as partículas, em geral (e nesta implementação também), possuem raios diferentes, sendo necessário posicioná-las de maneira aleatória de forma que não haja interferência entre elas, ainda mais quando as partículas não são circulares. E em segundo lugar, mesmo na eventualidade do sistema ser composto apenas por partículas circulares e com mesmo raio, as partículas precisam estar em equilíbrio estático sob o efeito da gravidade. Desta forma, com exceção de alguns testes



Figura 3.1: Diagrama da sequência de cálculos.

de validação, ou verificações específicas, a geração da condição inicial do DEM exige uma etapa preliminar de processamento.

Conforme descrito por O'Sullivan (2011a) existem diversas técnicas publicadas sobre a geração da condição inicial das partículas. Neste trabalho, adotou-se a abordagem clássica de adensamento. Nessa técnica as partículas são inicialmente posicionas regularmente espaçadas umas das outras, de forma que o espaçamento d_e é ligeiramente maior que o diâmetro da maior partícula presente no sistema, conforme ilustrado na Figura 3.2.



Figura 3.2: Posicionamento inicial das partículas.

Depois de posicionada a quantidade desejada de partículas, respeitando a distribuição de raios previamente definida, executa-se uma sequência de iterações onde as partículas estão sujeitas apenas a ação da força gravitacional. Dessa forma as partículas irão se assentar naturalmente e de forma aleatória na parte inferior do domínio espacial, formando a condição inicial desejada, conforme ilustrado na Figura 3.3. Nesta etapa as partículas devem possuir as mesmas propriedades de contado que serão usadas posteriormente na simulação desejada. O tempo de simulação necessário para o adensamento das partículas é variável, sendo dependente do número de partículas, de suas propriedades (dimensão e densidade), além dos parâmetros de contato.



Figura 3.3: Posição final das partículas.

3.2 Validação Analítica DEM

Segundo Xiang *et al.* (2009) um teste de verificação preliminar importante em qualquer código DEM é checar se uma única partícula, em repouso sobre um superfície horizontal vai exibir um movimento harmônico simples, sendo o período determinado pela massa e a rigidez da mola de contato. A simulação desse sistema também possibilita uma avaliação da natureza dinâmica do sistema. Sistemas simples com apenas uma ou duas partículas podem ser ferramentas robustas de validação analítica. Como exemplo, O'Sullivan e Bray (2003) demostraram que a simulação de uma partícula bidimensional rolando um plano inclinado a partir do repouso é um teste útil para confirmar a correta implementação do contato tangencial no código DEM.

Neste trabalho foram implementados três testes analíticos de validação. O objetivo de cada teste é validar os modelos de contato normal, tangencial e rotacional separadamente, a fim de verificar suas implementações e o comportamento dos três modelos conforme são combinados.

3.2.1 Colisão Elástica de Duas Partículas

No primeiro teste de validação implementado buscou-se a verificação do contato normal das partículas. Para isso, o resultado da simulação foi comparado com o problema da colisão elástica de dois corpos circulares, conforme mostrado na Figura 3.4, um problema clássico da mecânica com solução analítica conhecida.



Figura 3.4: Colisão elástica de duas partículas.

Para o caso da colisão totalmente elástica de duas partículas rígidas com mesma massa, com o alvo (partícula 2) inicialmente em repouso e a partícula incidente (partícula 1) tendo uma velocidade inicial, v_{1i} , conforme mostrado na Figura 3.4, é possível demostrar através do princípio da conservação de energia e da quantidade de momento linear que o ângulo formado pela trajetória das duas partículas após o impacto é sempre perpendicular, independentemente do raio e da distância *b*. Os detalhes dos cálculos que demostram essa solução estão contemplados no Apêndice A deste trabalho.

Dessa forma, utilizando o algoritmo de DEM implementado foi realizada a mesma simulação. A partícula incidente possui raio igual a 0,03 m, enquanto a partícula alvo possui raio igual a 0,05 m, ambas possuem massa igual a 0,5 kg e estão sujeitas apenas ao contato normal (o integrador para a direção z foi desligado nesta simulação) e sem nenhum amortecimento atuando no sistema (tanto local quanto global). Como está ativa apenas a componente normal do modelo constitutivo mostrado na Figura 2.6 e não há presença de amortecimento, o único parâmetro de interesse neste

teste é a rigidez normal, que foi calculada de acordo com a metodologia apresentada na seção 2.1.10 resultado em 4.9×10^4 N/m. Nesse caso assume-se que a gravidade atua na direção perpendicular ao plano, e, portanto não foi levada em consideração nessa simulação. A partícula incidente possuí velocidade inicial de 1 m/s e b = 0.03 m, sendo $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s, o que corresponde a 0.6 % do passo do tempo crítico desta simulação. Na Figura 3.5 é mostrada a trajetória das partículas, e suas posições iniciais e finais, após 3 s de simulação.



Figura 3.5: Trajetória da colisão de duas partículas.

Após o impacto, a velocidade das partículas foram coletadas e o ângulo de suas trajetórias calculados, conforme mostrado na Tabela 3.1.

De acordo com os resultados do teste foi confirmado que o ângulo entre as trajetórias após o impacto de fato é de 90° ,

	v_{if}^x	v_{if}^y	θ
Partícula incidente	0,15	0,36	66,99
Partícula alvo	0,85	-0,36	-23,01

Tabela 3.1: Velocidades e ângulos de trajetória após o impacto.

$$\theta_1 + \theta_2 = 66,99^\circ + 23,01^\circ = 90^\circ \tag{3.1}$$

mostrando, dessa forma, que o modelo numérico implementado representa satisfatoriamente o contato de dois corpos rígidos.

Com os resultados obtidos verificou-se também se houve conservação de energia na colisão, para isso calculo-se a energia cinética T antes e após o impacto,

$$T_i = 0.5m_1(v_{1i})^2 = 0.25 \text{ N}$$

$$T_f = 0.5m_1\left((v_{1f}^x)^2 + (v_{1f}^y)^2\right) + 0.5m_2\left((v_{2f}^x)^2 + (v_{2f}^y)^2\right) = 0.25 \text{ N}$$
(3.2)

onde fica demostrado que há conservação de energia no impacto das duas partículas, validando, dessa forma, o algoritmo de integração no tempo para translação nas direções x e y.

3.2.2 Rolamento com Deslizamento no Plano

A exemplo do primeiro, no segundo teste de validação buscou-se um problema comumente estudado nos livros de mecânica clássica a fim de se comparar com os resultados da simulação. Neste teste o objetivo é validar o contato tangencial das partículas, e por consequência o algoritmo de integração no tempo na direção z. Para isso estudou-se o caso do rolamento acompanhado de deslizamento sobre um plano horizontal, que é encontrado no clássico problema de uma tacada em uma bola de bilhar, conforme mostrado na Figura 3.6.

Neste problema o corpo rígido circular se encontra inicialmente em repouso e é golpeado pelo



Figura 3.6: Tacada em bola de bilhar.

taco no instante t = 0, sendo que sua linha de ação é horizontal com distância *b* da linha que passa pelo centroide da partícula, conforme mostrado na Figura 3.6. O resultado da tacada é a aplicação de uma força impulsiva que faz a partícula iniciar um movimento de translação acompanhado por um movimento de rotação. Tanto a velocidade inicial de translação quanto a de rotação podem ser calculadas analiticamente, sendo os cálculos apresentados com maiores detalhes no Apêndice A deste trabalho. De acordo com os parâmetros da tacada e da partícula, inicialmente pode não haver o estado de rolamento puro, de forma que há deslizamento no ponto de contato, implicando dessa forma na ação de uma força de atrito que irá modificar tanto a velocidade de rotação quanto a de translação, até que a partícula atinja o rolamento puro. Como não é considerado na formulação desse problema o atrito de rolamento, o movimento atinge o regime permanente quando se estabelecer o rolamento puro, sendo que a partir deste instante o movimento continua indefinidamente por não haver mais forças atuantes na partícula. A evolução no tempo das velocidades de translação e de rotação da partícula, deduzidas analiticamente, são comparadas com os resultados numéricos obtidos neste teste.

Para esta simulação foi utilizada uma partícula com massa de 0,5 kg e raio de 0,03 m, a aceleração da gravidade é de 9,81 m/s². Foi considerada uma força impulsiva de 50 N agindo durante 0,01 s, dessa forma, as equações A.10 e A.11 fornecem que a velocidade inicial de translação é de 1 m/s e a velocidade inicial de rotação é de -27,78 rad/s. Na Tabela 3.2 são mostrados os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados neste teste, calculados de acordo com a metodologia apresentada na seção 2.1.10 deste trabalho, sendo que o valor do coeficiente de atrito foi determinado empiricamente. Para esta simulação $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s, o que corresponde a 0,7 % do passo de tempo crítico.

A simulação foi conduzida até 0,2 s. Observa-se nas Figuras 3.7 e 3.8 a evolução da velocidade de translação na direção x e da velocidade angular, respectivamente, obtidas pelo método

Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	6.5×10^4
k_t	(N/m)	$3.3 imes 10^3$
c_n	(N.s/m)	89,3
c_t	(N.s/m)	$12,\!6$
μ_t		0,57
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	0
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	0

Tabela 3.2: Parâmetros usados no teste de validação analítico 2.

numérico e também pela previsão teórica.



Figura 3.7: Comparação da solução numérica e teórica para a velocidade de translação.

Observa-se que os resultados numéricos convergem para a solução teórica de maneira satisfatória, sendo que a inflexão da curva na solução numérica pode ser ajustada alterando o valor da rigidez tangencial, k_t , do modelo de contato adotado, assim como o coeficiente de amortecimento.



Figura 3.8: Comparação da solução numérica e teórica para a velocidade angular.

3.2.3 Partícula com Atrito de Rolamento

No último teste de validação analítico estudado neste trabalho foi abordado o problema de uma única partícula rolando sobre uma superfície plana sujeita também ao atrito de rolamento, conforme em Zhou *et al.* (1999) e Ai *et al.* (2011). O objetivo deste teste é verificar o modelo de atrito de rolamento implementado, analisando também seu funcionamento em conjunto com os demais modelos de contato validados nos testes anteriores.

Neste teste foi utilizada uma partícula com raio de 0,05 m, sendo a massa definida por sua densidade, $\rho = 1056 \text{ kg/m}^3$. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados neste teste podem ser verificados na Tabela 3.3, sendo calculados de acordo com a metodologia apresentada na seção 2.1.10 deste trabalho. A fim de comparar os resultados, os valores dos coeficientes de atrito foram adotados do trabalho de Ai *et al.* (2011), em que realizou-se um teste similar.

A partícula foi deixada em repouso apenas sob a ação da gravidade ($g = 9.81 \text{m/s}^2$) em uma superfície horizontal plana. Após atingir o equilíbrio estático uma velocidade de translação inicial
Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	65×10^4
k_t	(N/m)	33×10^3
k_r	(N.m.rad)	$8,1 \times 10^{-2}$
c_n	(N.s/m)	36,5
c_t	(N.s/m)	5,7
c_r	(N.m.s/rad)	0,004
μ_t		0,8
μ_r		0,2
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	0
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	0

Tabela 3.3: Parâmetros usados no teste de validação analítico 3.

de $v_0 = 1$ m/s é aplicada a partícula na direção x, enquanto a velocidade angular é mantida nula. Para esta simulação $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s, o que corresponde a 1,8 % do passo de tempo crítico dp DEM.

A Figura 3.9 mostra a evolução no tempo, durante 1 s de simulação, dos valores da posição na direção x da partícula (distância de rolamento) para diferentes valores do coeficiente de atrito de rolamento. A Figura 3.10 mostra a evolução no tempo do momento gerado pelo atrito de rolamento na partícula, para dois valores do coeficiente de amortecimento viscoso de rolamento.

É possível observar na Figura 3.9 que a distância percorrida pela partícula inicialmente aumenta, mas rapidamente atinge um valor terminal constante. Para a curva com coeficiente de rolamento igual a 0,2, obtém-se aproximadamente o mesmo valor para a distância de rolamento obtido no teste realizado por Ai *et al.* (2011), indicando a correta implementação do atrito de rolamento no modelo.

Na Figura 3.10 é mostrado o comportamento do momento de rolamento da partícula com dois valores do amortecimento viscoso de rolamento. Se o coeficiente de amortecimento é nulo, o momento oscila em torno da posição final, mas devido a influência do amortecimento presente no contato tangencial ainda se observa um amortecimento no valor do momento. Para o coeficiente de amortecimento viscoso de rolamento igual a 0,3 observa-se uma estabilização mais rápida do momento ao valor final, mantendo o mesmo período de oscilação. Esse resultado indica que o



Figura 3.9: Influência do coeficiente de rolamento na distância de rolamento da partícula.

modelo de contato tangencial e de rolamento possuem uma resposta dinâmica consistente quando inseridos em conjunto no código.

A influência da rigidez de rolamento no valor do momento de rolamento aplicado à partícula é mostrado na Figura 3.11. Uma rigidez de rolamento maior leva a uma frequência de oscilação maior, o que reduz o período de oscilação quando o amortecimento de rolamento está ativo.

Este teste de validação mostra que o modelo de atrito de rolamento implementado no código responde de maneira satisfatória estando de acordo com resultados publicados.



Figura 3.10: Influência do coeficiente de amortecimento viscoso no momento em função do tempo.



Figura 3.11: Influência da rigidez de rolamento.

3.3 Validação Experimental DEM

Nos testes analíticos de validação o objetivo foi testar e validar os modelos de contato implementados no algoritmo DEM. Esses testes fornecem uma indicação do correto funcionamento dos modelos de contato que compõe o modelo constitutivo adotado, além da possibilidade de verificação com os resultados de testes analíticos conhecidos. No entanto, apenas esses testes de validação não garantem que a resposta global do algoritmo esteja de acordo com resposta esperada para a simulação que se deseja efetuar.

Validações analíticas da capacidade do código de DEM em simular a resposta de múltiplas partículas interagindo umas com as outras são inviáveis devido a indeterminação estática do sistema. Neste contexto, conforme mostrado por O'Sullivan (2011b), os testes de validação experimental desempenham um papel fundamental na correta validação do algoritmo DEM.

Nos testes de validação experimental encontrados na literatura busca-se comparar a reposta da simulação com um ensaio experimental controlado, onde as partículas possuem dimensão e propriedades conhecidas. Nesse ambiente controlado, é possível representar corretamente o ensaio físico na simulação, validando, dessa forma, a reposta global do algoritmo.

Em materiais granulares, como solos e areias secas por exemplo, uma das características fundamentais é a formação de pilhas. As pilhas formadas por esses materiais fornecem características importantes sobre o material e são alvo de estudo em muitas aplicações reais como mineração, armazenagem de grãos e geotécnica. Portanto a correta representação do efeito de empilhamento é uma característica que deve ser validada neste algoritmo.

Neste trabalho não foram realizados ensaios experimentais, portanto, buscou-se o resultado de dois ensaios publicados na literatura que possibilitam a validação experimental deste algoritmo.

3.3.1 Empilhamento Livre

No primeiro teste foi reproduzido o ensaio realizado por Ai *et al.* (2011). Um conjunto formado por 25 partículas idênticas foi organizado acima de uma superfície plana de acordo com o padrão mostrado na Figura 3.12. Todas as partículas possuem a mesma dimensão, com r = 0.005 m e $\rho = 1056 \text{ kg/m}^3$, os valores das propriedades do contato usados neste teste podem ser verificados na Tabela 3.4, sendo calculados de acordo com a metodologia apresentada na seção 2.1.10 deste trabalho. A fim de comparar os resultados, os valores dos coeficientes de atrito foram adotados do trabalho de Ai *et al.* (2011), no qual realizou-se um teste similar.



Figura 3.12: Conjunto de discos em uma superfície plana.

Tabela 3.4: Parâmetros usados no teste de validação experimental 1.

Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	6.5×10^4
k_t	(N/m)	33×10^3
c_n	(N.s/m)	36,5
c_t	(N.s/m)	5,7
μ_t		0,8
μ_r		0,2
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	1.0×10^{-5}
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	1.0×10^{-6}

Os valores de k_t e c_t não constam na tabela 3.4 pois seus valores dependem do par de partículas que está em contato ou se o contato ocorre com as fronteiras do domínio espacial, sendo determinados pelas equações 2.100 e 2.101, respectivamente. Para esta simulação adotou-se que $\eta_r = 0.6$.

O objetivo é verificar o comportamento dos três modelos de contato (normal, tangencial e de rolamento) quando trabalham juntos em uma simulação que envolve tanto uma fase dinâmica quanto estática. Quando solto a partir da condição inicial, o conjunto de partículas entra em uma

fase dinâmica, enquanto elas interagem umas com as outras e com o limite do domínio espacial, até atingirem uma nova condição de repouso. Espera-se que após o repouso a configuração final das partículas seja semelhante à obtida no ensaio físico, confirmando que o comportamento global do conjunto de partículas é consistente com o comportamento de um material granular real.

O teste foi realizado usando todos os modelos de contato implementados, com passo de tempo igual a $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ s, que corresponde a 1,8% do passo de tempo crítico para essa simulação. A Figura 3.14 mostra a condição final das partículas, já em repouso, após 10 s de simulação. Na Figura 3.13 tem-se o resultado obtido por Ai *et al.* (2011).



Figura 3.13: Condição final simulação de empilhamento livre obtido por Ai *et al.* (2011).

É possível observar que o resultado obtido é semelhante ao publicado, com a formação de uma pilha com formato similar. Isso indica que o método implementado possui uma resposta global adequada para a simulação de materiais granulares.



Figura 3.14: Condição final da simulação de empilhamento livre.

3.3.2 Teste com Barreiras

No segundo teste de validação experimental buscou-se verificar a resposta global do algoritmo DEM com um número maior de partículas e comparar com um resultado experimental publicado. Para isso, buscou-se reproduzir o experimento realizado por Li *et al.* (2005), onde foi utilizado o dispositivo mostrado Figura 3.15.

Neste dispositivo experimental a caixa menor se encaixa na caixa maior, permitindo que as partículas sejam lentamente liberadas pela abertura inferior conforme a caixa interna é movida verticalmente para cima. Os resultados experimentais obtidos por Li *et al.* (2005) foram compa-



Figura 3.15: Dimensões do dispositivo usado por Li et al. (2005).

rados com os resultados obtidos com simulações do DEM, que mostraram grande semelhança no comportamento. Portanto, o objetivo deste teste é reproduzir o experimento realizado por Li *et al.* (2005) com o algoritmo DEM implementado neste trabalho e comparar a resposta global com os resultados experimentais e computacionais publicados.

Pelas limitações físicas impostas na construção do dispositivo experimental não é possível reproduzir uma simulação bidimensional, uma vez que o atrito oriundo das faces da caixa interfeririam fortemente no resultado do experimento. Portanto, a espessura do dispositivo mostrado na Figura 3.15 é maior que o diâmetro das esferas usadas no experimento, implicando que tanto a simulação quanto o experimento são realizados considerando um domínio tridimensional. Como a implementação realizada neste trabalho é bidimensional algumas modificações foram necessárias para manter a equivalência de ambos, obviamente tendo em vista que tais modificações prejudicam as posteriores comparações dos resultados.

No experimento real foram usadas 3000 esferas com raio médio de 6 mm. A fim de usar as mesmas dimensões espaciais do dispositivo experimental, neste teste foram usadas 420 partículas com raio médio igual a 6 mm, sendo que a distribuição de tamanhos das partículas é mostrada na Tabela 3.5, onde foi mantida a mesma proporção de tamanhos do experimento real. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados neste teste são mostrados na Tabela 3.6, calculados conforme descrito na metodologia apresentada na seção 2.1.10 deste trabalho. A fim de comparar os resultados, foram usados os mesmos valores adotados por Li *et al.* (2005) para os coeficientes de atrito.

Os valores de k_t e c_t não constam na tabela 3.4 pois dependem do par de partículas que está em contato, ou se o contato ocorre com as fronteiras do domínio espacial, sendo determinados pelas

Grupo	1	2	3
Diâmetro (m)	0,013	0,012	0,011
Quantidade	105	210	105

Tabela 3.5: Distribuição de tamanho das partículas do teste de validação experimental 2.

Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	$1,02 \times 10^{6}$
k_t	(N/m)	$5,09 \times 10^4$
c_n	(N.s/m)	173,4
c_t	(N.s/m)	27,7
μ_t		0,4
μ_r		0,1
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	$6,7 imes 10^{-5}$
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	$6,7 \times 10^{-6}$

Tabela 3.6: Parâmetros usadas no teste de validação experimental 2.

equações 2.100 e 2.101, respectivamente. Para esta simulação adotou-se que $\eta_r = 0,3$.

As partículas foram inicialmente posicionadas de maneiras aleatória a acomodadas sob a ação da gravidade sobre a barreira fixa de partículas, em uma simulação com 2 s de duração. Após a etapa de adensamento a barreira é aberta e movida a uma velocidade de 0,01 m/s durante 15 s, permitindo que as partículas saiam da caixa interna pela abertura no canto inferior esquerdo e se acomodem na caixa externa. Após atingir a altura máxima, a barreira permanece em repouso por mais 2 s para permitir a acomodação final das partículas, totalizando 19 s de simulação. Na Figura 3.16 é possível acompanhar o progresso da simulação em quatro momentos distintos. O passo de tempo utilizado é igual a $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ s, o que corresponde a 5,4% do passo de tempo crítico desse sistema.

É possível observar a formação de uma pilha com ângulo em relação a horizontal de aproximadamente 28°, conforme mostrado na Figura 3.18 com a posição das partículas após atingirem o repouso. Esse resultado é ligeiramente maior que o obtido por Li *et al.* (2005) em seu experimento físico, 21°, conforme mostrado na Figura 3.17. Essa diferença pode ser atribuída às implicações que



Figura 3.16: Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 5 s; (c) 10 s; (d) 17 s para o teste com barreira móvel.

a simplificação de um domínio tridimensional para um domínio bidimensional trazem na resposta global da simulação. Também deve-se notar diferença nos métodos de contato normal e tangencial usados no modelo constitutivo da implementação de Li *et al.* (2005), onde é usado o modelo de contato não linear de Hertz e partículas tridimensionais.



Figura 3.17: Resultado do experimento realizado por Li et al. (2005)



Figura 3.18: Ângulo de empilhamento obtido no teste com barreira móvel.

A fim de avaliar o efeito do aumento do número de partículas no ângulo de empilhamento final foi realizada uma nova simulação. Na nova simulação foram mantidas as mesmas dimensões do domínio espacial da simulação anterior, porém foi aumentado o número de partículas para 15000, assim como foi reduzido o diâmetro médio de forma que a altura inicial da coluna de partículas em repouso no início da simulação fosse aproximadamente a mesma. Na Tabela 3.7 tem-se a nova distribuição de tamanhos.

 Grupo
 1
 2
 3

 Diâmetro (m)
 0,002
 0,0018
 0,0022

3750

7500

3750

Quantidade

Tabela 3.7: Distribuição de tamanho das partículas.

Os demais valores de propriedades foram mantidos os mesmos mostrados na Tabela 3.6. Na Figura 3.19 tem-se a condição de equilíbrio após 19 s de simulação.

Com o aumento do número de partículas o ângulo de empilhamento obtido foi de 20,5°, um valor mais próximo do obtido no experimento conduzido por Li *et al.* (2005). Esse resultado indica que a quantidade de partículas usadas no teste anterior não foi suficiente para capturar a resposta global desejada do material granular que se desejava simular. Além disso, mostra a limitação do modelo bidimensional, uma vez que o primeiro ensaio foi feito com o mínimo de partículas usado no experimento.



Figura 3.19: Configuração final com 15000 partículas.

3.4 Verificação do Algoritmo Acoplado DEM-FEM

Nos testes anteriores foi validado e verificado o algoritmo DEM implementado neste trabalho. Uma sequência de testes de validação analíticos e experimentais indicaram a correta implementação do método e sua capacidade de capturar a resposta de materiais granulares de maneira satisfatória, localmente e globalmente.

O algoritmo FEM implementado neste trabalho já havia sido alvo de estudos anteriores no mesmo tema, no qual foi validado e testado através da comparação dos resultados com softwares comerciais de elementos finitos. Os testes de validação realizados com o algoritmo FEM utilizado neste trabalho podem ser verificados em Gomes (2012).

Com ambos os métodos implementados, verificados e testados neste trabalho, resta ainda verificar o funcionamento quando acoplados. Para isso foi estudado o caso de uma viga apoiada sobre uma barreira de partículas fixas sujeita a um carregamento distribuído ao longo da face superior da malha, conforme ilustrado na Figura 3.20. As partículas possuem todas o mesmo diâmetro e estão posicionadas regularmente ao longo da face inferior da malha, de forma que a distância entre sues centroides seja igual ao diâmetro.



Figura 3.20: Configuração do teste de verificação do acoplamento DEM-FEM.

Para este teste as partículas que formam a barreira na Figura 3.20 estão com todos os graus de liberdade fixos, no entanto, elas podem interagir livremente com as partículas fixas na face externa da malha de elementos finitos, sendo esse contato modelado conforme descrito na seção 2.3 deste trabalho. Com as partículas fixas o problema do contato DEM-FEM se reduz basicamente ao contado da malha de elementos finitos com um conjunto de molas lineares e amortecedores viscosos posicionados regularmente ao longo da face inferior da malha. Essa configuração se assemelha muito a modelagem de contato solo-estrutura proposta pelas teorias de fundação elástica do tipo Winkler, que possuem solução analítica para o meio contínuo. Portanto, o objetivo deste teste é verificar o funcionamento do acoplamento DEM-FEM proposto neste trabalho e comparar o comportamento da deflexão da viga com teorias clássicas de fundação elástica. Essa compara-ção permite verificar se a iteração do meio contínuo com um solo linear, neste teste representado por uma barreira de partículas fixas, ocorre de acordo com o previsto pelas soluções analíticas, validando dessa forma o algoritmo acoplado DEM-FEM.

Foram usadas 120 partículas com raio igual a 0,005 m, o que corresponde à mesma quantidade e dimensão das partículas fixas ao contorno da face inferior da malha de elementos finitos, posicionadas exatamente abaixo umas das outras conforme ilustrado na Figura 3.20. Dessa forma garante-se que o contato da malha com as partículas será uniforme e simétrico, algo que seria muito difícil de se obter e controlar com as partículas livres, devido ao seu posicionamento aleatório após a etapa inicial de adensamento. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados neste teste são mostrados na Tabela 3.8. Como as partículas estão fixas e posicionadas de tal forma que não há contato entre elas, esses parâmetros se aplicam apenas aos contatos entre as partículas da barreira e as partículas fixas ao contorno da malha de elementos finitos.

Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	$1,\!97 \times 10^5$
k_t	(N/m)	$9,\!86 imes10^3$
k_r	(N.m.rad)	$6,\!16 \times 10^{-2}$
c_n	(N.s/m)	$156,\!24$
c_t	(N.s/m)	24,70
c_r	(N.m.s/rad)	229×10^{-4}
μ_t		0,8
μ_r		0,2
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	0
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	0

Tabela 3.8: Parâmetros usados no teste de verificação do acoplamento DEM-FEM.

A viga possui 1,0 m de comprimento, com 0,05 m de altura, sendo discretizada em 80 elementos finitos do tipo quadrado linear. O módulo de elasticidade adotado é E = 70 GPa, com densidade igual a 2700 kg/m³ e coeficiente de Poisson igual a 0,35. O carregamento distribuído é aplicado progressivamente até 0,5 s de simulação e depois mantido no valor máximo até o final da simulação. Adotou-se um coeficiente de rigidez relativamente baixo para que a rigidez da viga fosse próxima da rigidez normal, k_n , das partículas, o que permitiu avaliar melhor a deflexão da viga. Não existe nenhum tipo de condição de contorno de deslocamento imposto na malha, a única restrição ao seu movimento vem do contato com as partículas que compõem a barreira posicionada abaixo da malha. Essa condição determina que a malha está sujeita à deformações e deslocamentos.

Para esta simulação $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s, para ambos os domínios, o que corresponde a aproximadamente 6,26 % do passo de tempo crítico do DEM. A simulação foi conduzida por 1 s, tempo suficiente para a solução convergir, conforme pode-se observar na Figura 3.21 onde tem-se o gráfico da posição do centroide da malha em função de tempo.

Na Figura 3.22 tem-se a condição final obtida após o término da simulação, onde a tensão na direção x na viga é mostrada de acordo com a escala de cores.



Figura 3.21: Centroide da malha em função de tempo.

Observa-se pelo mapa de tensões na direção x mostrado na Figura 3.22 que a viga apresenta tensões de tração na parte inferior da malha e tensões de compressão na parte superior. Esse comportamento vai ao encontro com o resultado das teorias de fundação elástica, no qual é previsto que uma viga apoiada sobre um solo (modelado por um conjunto de molas e amortecedores) sujeita a um carregamento distribuído uniformemente possui deflexão voltada para cima. É mostrado dessa forma a capacidade do algoritmo de acoplamento DEM-FEM proposto nesse trabalho de capturar o comportamento previsto pelas teorias analíticas. Na Figura 3.23 tem-se a deflexão da linha neutra da viga ao longo de seu comprimento.

Na Figura 3.23 a referência para a curva de deflexão mostrada é a coordenada na direção y do nó do canto inferior esquerdo da malha. Isso é necessário para uma melhor visualização da deflexão sofrida pela viga, uma vez que, como não existem condições de contorno na malha, a estrutura sofre um deslocamento de corpo rígido, conforme pode ser observado na Figura 3.21, o que prejudicaria a visualização da curva da deflexão.

Observa-se que a deflexão sofrida pela viga é consistente com o mapa de tensões mostrado na Figura 3.22, além de ser simétrica com relação ao centro da estrutura. Neste trabalho não foi



Figura 3.22: Condição final teste verificação do do acoplamento DEM-FEM.

reproduzido o mesmo teste aplicando-se os modelos de fundação elástica a fim de comparar os resultados. No entanto, em comparação com os resultados obtidos por Celep e Demir (2007), no quais avaliou-se uma viga sujeita a um carregamento distribuído uniforme sustentada por uma fundação elástica do tipo Winkler, a curva de deflexão obtida neste teste possui um comportamento muito próximo. A comparação quantitativa não é apresentada, pois aqui é utilizado uma modelagem de estado plano de deformações para a modelagem da viga.

Na Figura 3.24 é mostrada força resultante na direção y atuando nas partículas que compõem a barreira fixa. Observa-se que a distribuição de forças é simétrica sendo ligeiramente maior nas partículas centrais, o que também está de acordo com a previsão teórica dada pelas teorias de fundação elástica.

Na Figura 3.25 tem-se o gráfico da força nodal equivalente na direção y aplicada sobre os nós da face inferior da malha devido ao contato com a barreira de partículas para a condição final.



Nota-se que para os nós centrais a força gerada pelo contado com a malha é praticamente constante, sendo menor nos nós externos.

Portanto, os resultados mostrados acima indicam que o acoplamento DEM-FEM proposto neste trabalho é capaz de modelar adequadamente o problema de contato solo-estrutura que é alvo de estudo neste trabalho. Conclui-se desta forma que o conjunto de testes de validação apresentados neste capítulo mostram que a implementação dos algoritmos neste trabalho permite a simulação dos problemas acoplados de iteração solo-estrutura.



Figura 3.24: Força vertical resultante nas partículas da barreira fixa.



Figura 3.25: Força vertical nos nós inferiores da malha.

4 Resultados

Este capítulo tem como objetivo apresentar os principais resultados obtidos com o algoritmo acoplado DEM-FEM proposto. Dada a motivação deste trabalho, as simulações de contato soloestrutura que serão aqui apresentadas foram organizadas em dois tipos:

- Estrutura rígida: Nessas simulações considera-se que a estrutura é rígida e, portanto, a formulação do FEM não está presente na modelagem do problema. O objetivo dessas simulações é avaliar o comportamento do solo sujeito a grandes deslocamentos e avaliar os carregamentos que o solo aplica na estrutura rígida.
- Estrutura deformável: Nessas simulações a estrutura é deformável, sendo que a formulação do FEM faz parte do equacionamento do problema acoplado. O objetivo é avaliar o carregamento da estrutura devido ao contato com o solo, e o campo de deslocamento gerado na estrutura.

Em ambos os tipos são apresentados os resultados para duas configurações, o contato do solo com uma estrutura tubular e o contato do solo com uma viga.

4.1 Acoplamento DEM-Estrutura Rígida

Nessas simulações a estrutura é considerada rígida, sendo que o objetivo é avaliar a resposta do solo, modelado pelo DEM, em um problema de contato do solo com um corpo rígido sujeito a grandes deslocamentos. Conforme descrito na motivação deste trabalho, esses problemas são de grande interesse na indústria petrolífera, em especial nas operações de exploração de petróleo em águas profundas (profundidades maiores de 1000 m). Nessas situações, o solo do leito marinho se comporta como uma lama com rigidez muito menor que das tubulações que conduzem o petróleo da cabeça do poço até a plataforma de exploração. Durante o trajeto dessas tubulações, chamadas de risers ou dutos, ocorre o contato com o solo do leito marinho, onde devido ao movimento da plataforma e das correntezas oceânicas, ocorrem grandes deslocamentos da estrutura no solo. Esses deslocamentos são responsáveis pela escavação de leito marinho, formando as chamadas trincheiras, que são responsáveis por gerar altos níveis de solicitação dinâmica na estrutura. Portanto, é de

interesse nessas simulações avaliar a resposta do solo em um problema com grandes deslocamentos.

Como nesta configuração a rigidez do solo é muito menor que da estrutura considera-se que a estrutura é rígida, sendo que os deslocamentos dos nós da malha de elementos finitos não são determinados pelo FEM, mas impostos a cada passo de tempo de acordo com uma função preestabelecida nos dados de entrada do algoritmo. Apesar da formulação do FEM não compor o algoritmo nessas simulações a estrutura continua sendo definida por uma malha geométrica, uma vez que o contato das partículas com a estrutura é feito pelo algoritmo de acoplamento descrito na seção 2.3, que exige a presença da malha para posicionar as partículas no contorno da estrutura.

Foram conduzidas duas simulações usado-se o mesmo domínio discreto, o acoplamento do DEM com um tubo rígido e com uma viga rígida. Ambas configurações são mostradas na Figura 4.1.



Figura 4.1: Configurações de contato DEM-estrutura rígida. (a) viga - corte longitudinal; (b) estrutura tubular - corte transversal

Os exemplos escolhidos representam esquematicamente dois cortes (longitudinal e transversal) do problema local de contato de um duto com o solo.

4.1.1 Tubo Rígido

A estrutura tubular é definida por uma malha de elementos finitos composta por elementos quadrilaterais bilineares. A simulação é efetuada com 15000 partículas DEM livres e mais 180 partículas fixas ao contorno da malha. O domínio espacial é um quadrado com lado igual 1,2 m. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados no DEM, neste teste, podem ser verificados

na Tabela 4.1, sendo calculados de acordo com a metodologia apresentada na seção 2.1.10 deste trabalho. A dimensão e distribuição de tamanhos das partículas são mostradas na Tabela 4.2, sendo que todas possuem a mesma densidade, $\rho = 1600 \text{ kg/m}^3$. O tubo possui raio externo igual a 0,05 m e raio interno igual a 0,04 m.

Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	1.98×10^{6}
k_t	(N/m)	$9,91 \times 10^4$
c_n	(N.s/m)	99,31
c_t	(N.s/m)	$15,\!90$
μ_t		0,8
μ_r		0,2
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	4.91×10^{-3}
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	$3,03 \times 10^{-3}$

Tabela 4.1: Parâmetros do DEM usados no acoplamentocom a estrutura rígida.

Tabela 4.2: Distribuição de tamanho das partículas do acoplamento do DEM com estrutura rígida.

Grupo	1	2	3
Diâmetro (m)	0,0022	0,002	0,0018
Quantidade	3750	7500	3750

A análise foi dividida em duas partes, primeiramente fez-se necessária uma etapa de adensamento numérico para possibilitar a acomodação inicial das partículas. Para isso as partículas são soltas a parir de certa posição, de forma que elas se acomodassem naturalmente e aleatoriamente na parte inferior do domínio. Nessa etapa ainda não há a presença da estrutura. O passo de tempo utilizado foi de $\Delta t = 4 \times 10^{-5}$ s que corresponde a 88% do passo de tempo crítico do DEM.

Passado um tempo suficiente para as partículas atingirem o repouso é introduzida a estrutura tubular e inicia-se uma nova etapa da simulação. Nessa etapa o tubo é inicialmente posicionado um pouco acima da linha superior das partículas e, em seguida, é movimentado de acordo com a trajetória definida nos dados de entrada da simulação. O movimento do tudo é discretizado de

acordo com o número de iterações da simulação, sendo que a cada iteração as coordenadas dos nós da malha são atualizados de forma que a estrutura percorra a trajetória desejada.

A simulação é conduzida por 20 s após a inclusão da estrutura tubular, nos primeiros 10 s o tubo é deslocado 0,1 m verticalmente para baixo, e nos 10 s restantes é retornado para a posição inicial. Nas imagens mostradas na Figura 4.2 têm-se a condição do sistema em quatro instantes de tempo da simulação.



Figura 4.2: Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 6,7 s; (c) 13,4 s; (d) 20 s.

Observa-se na Figura 4.2(d) que após o término do contato com o tubo, as partículas sofreram

um deslocamento permanente com a formação de uma trincheira. Esse efeito é característico do contato de uma estrutura com o tipo de solo encontrado no leito marinho em grandes profundidades, mostrando, dessa forma, a capacidade do algoritmo DEM implementado de capturar a resposta típica de solos.

Na Figura 4.3 tem-se um gráfico da força vertical resultante no tubo em função do tempo de simulação. A força resultante é dada pelo somatório das forças verticais resultantes que atuam nas partículas fixas ao contorno da estrutura, sendo esse cálculo repetido a cada iteração do algoritmo.



Figura 4.3: Força vertical resultante no tubo em função do tempo.

Observa-se na Figura 4.3 que nos instantes iniciais da simulação a força resultante é nula, uma vez que o tubo ainda não entrou em contato com as partículas. Após o início do contato observase que a força resultante aumenta gradativamente, a medida que o tubo é movido para baixo, até a metade da simulação. A força atinge o valor máximo de aproximadamente 1200 N juntamente com a máxima penetração do tubo nas partículas. Em seguida, com a retirada da estrutura, a força é rapidamente reduzida. Pode-se observar que o valor da força sofre flutuações, que podem ser atribuídas a acomodação das partículas conforme elas se reposicionam em torno do tubo devido a sua movimentação. O reposicionamento das partículas altera a rigidez do domínio particulado e consequentemente provoca uma oscilação no valor da força resultante. Na Figura 4.4 tem-se o gráfico da força vertical resultante no tubo em função de sua penetração nas partículas.



Figura 4.4: Penetração vertical do tubo em função da força de reação vertical.

É possível observar que o valor da força resultante tende a aumentar com a maior penetração do tubo no material granular, um resultado coerente com o esperado. Novamente são observadas flutuações no valor da força, efeito que também foi observado por Tanaka *et al.* (2000), em que foi efetuada a comparação da força de resistência de um penetrador no solo em uma simulação com DEM e por experimento físico. As flutuações poderiam ser suavizadas com a diminuição do tamanho das partículas e consequente aumento da quantidade, de forma que a acomodação das partículas interfira menos na rigidez equivalente do solo. No entanto, o aumento no número de partículas exige um esforço computacional maior.

A fim de explorar a capacidade do algoritmo DEM implementado de formar trincheiras quando sujeito a grandes deslocamentos, a simulação acima foi repetida com uma trajetória diferente para o corpo rígido. Nessa nova simulação o tubo é deslocado 0,1 m verticalmente para baixo por 5 s, depois é deslocado 0,1 m horizontalmente para a esquerda por mais 5 s, seguido por um novo deslocamento horizontal de 0,2 m para a direita por mais 10 s. Depois o tubo é retornado para a posição original, novamente deslocando-se para a esquerda por 0,1 m e depois mais 0,1 m verticalmente para cima. O tempo total de simulação é de 30 s, nas imagens mostradas na Figura 4.5 têm-se a condição do sistema em quatro instantes de tempo da simulação.



Figura 4.5: Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 10 s; (c) 20 s; (d) 30 s.

Nas Figuras 4.6 e 4.7 tem-se a evolução no tempo das forças resultantes nas direções x e y, respectivamente, atuando no tubo. Observa-se a mudança no sinal da força resultante na direção x devido à inversão do sentido de deslocamento horizontal do tubo após 10 s de simulação.



Figura 4.6: Força resultante horizontal em função do tempo.



Figura 4.7: Força resultante vertical em função do tempo.

4.1.2 Viga Rígida

Em uma simulação análoga, utilizando o mesmo domínio discreto da simulação anterior, foi realizado o acoplamento do DEM com uma viga rígida. A estrutura é definida por uma malha geométrica composta por retângulos lineares de quatro nós. Ao contorno da malha são fixados os elementos discretos que formam o contorno da interface entre os dois domínios.

A simulação é efetuada com 15000 partículas DEM livres e mais 588 partículas fixas ao contorno da malha. O domínio espacial é um quadrado com lado igual 1,2 m. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados no DEM, neste teste, são os mesmos da simulação anterior e são apresentados na Tabela 4.1. A dimensão e distribuição de tamanhos das partículas são mostradas na Tabela 4.2, sendo que todas possuem a mesma densidade, $\rho = 1600 \text{ kg/m}^3$. A viga possui 0,5 m de comprimento e altura igual a 0,025 m.

Utilizou-se o mesmo domínio discreto empregado na simulação do exemplo anterior, de forma que não é necessário realizar novamente o adensamento das partículas. A simulação se inicia com o posicionamento da estrutura um pouco acima da linha superior das partículas, e, em seguida, a viga é movimentada de acordo com a trajetória definida nos dados de entrada da simulação. Novamente o movimento da viga é discretizado de acordo com o número de iterações da simulação, sendo que a cada iteração as coordenadas dos nós da malha são atualizadas de forma que a estrutura percorra a trajetória desejada. Ou seja, todos os deslocamentos da malha são impostos.

O passo de tempo utilizado foi de $\Delta t = 4 \times 10^{-5}$ s que corresponde novamente a 88% do passo de tempo crítico do DEM. A simulação é conduzida por 20 s após a inclusão da estrutura, nos primeiros 10 s a viga é deslocada 0,05 m verticalmente para baixo, e nos 10 s restantes é retornada para a posição inicial. Nas imagens mostradas na Figura 4.8 tem-se a condição do sistema em quatro instantes de tempo da simulação.

Observa-se na Figura 4.8(d) que após o término do contato com a viga as partículas sofreram um deslocamento permanente, com a formação de uma cavidade na região abaixo da estrutura. Esse efeito, também observado na simulação com o tubo rígido, confirma a potencialidade do algoritmo do DEM implementado de formar trincheiras, comportamento típicos de solos e materiais granulares determinante em muitas aplicações de contato solo-estrutura.



Figura 4.8: Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 6,7 s; (c) 13,4 s; (d) 20 s.

Seguindo a mesma metodologia usada na simulação do tubo rígido, foi calculada a força de reação vertical atuando na estrutura. Na Figura 4.9 é mostrado o valor da força vertical resultante em função do tempo de simulação.

Observa-se na Figura 4.9 que antes do início do contato com as partículas a força de reação na viga é nula. Após o início do contato observa-se que a força resultante aumenta gradativamente, a medida que a viga é movida para baixo, até a metade da simulação. A força de reação atinge o valor máximo de aproximadamente 13,35 kN, valor muito maior que o obtido na simulação com o tubo



Figura 4.9: Tempo de simulação versus força de reação vertical na viga.

rígido, uma vez que na viga a região de contato com as partículas é maior que no tubo. Em seguida, com a retirada da estrutura a força é rapidamente reduzida. Observa-se mais uma vez a flutuação no valor da força, que pode ser atribuída à acomodação das partículas conforme elas se reposicionam embaixo da viga devido a sua movimentação. O reposicionamento das partículas altera a rigidez do domínio particulado e consequentemente provoca uma oscilação no valor da força resultante.

Na Figura 4.4 tem-se o gráfico da força vertical resultante na viga em função de sua penetração nas partículas.

Novamente é possível observar que a força vertical resultante tende a aumentar com o aumento da penetração da viga no material granular. Da mesma forma que ocorreu na simulação com a estrutura tubular, ocorrem oscilações no valor da força, um resultado que vai ao encontro com o observado por Tanaka *et al.* (2000) e é atribuído a possibilidade da dimensão das partículas ser muito grande com relação a estrutura.



Figura 4.10: Penetração vertical da viga versus força de reação vertical.

4.2 Acoplamento DEM-Estrutura Deformável

Nas simulações apresentadas a seguir o algoritmo acoplado DEM-FEM proposto neste trabalho é aplicado para analisar duas configurações de contato solo-estrutura, uma viga e uma estrutura tubular. As configurações são mostradas na Figura 4.11, sendo que a modelagem de ambos os meios segue a formulação apresentada no Capítulo 2. O objetivo dessas simulações é determinar o comportamento da estrutura em contato com um meio granular, analisar o carregamento gerado pelo solo na estrutura e as consequentes deformações e tensões oriundas do contato dos dois meios.

Em ambas as configurações é aplicado um carregamento distribuído uniforme verticalmente para baixo. Na viga o carregamento é aplicado sobre a face superior da malha, enquanto no tubo é aplicado em um arco de aproximadamente 120 ° no contorno superior externo da malha, conforme ilustrado na Figura 4.11. Nos resultados mostrados a seguir não é considerado o peso próprio da estrutura na formulação do FEM e não existem condições de contorno essenciais, de forma que a única restrição imposta na estrutura é proveniente do contato com as partículas.



Figura 4.11: Configurações de contato DEM-estrutura deformável. (a) viga; (b) estrutura tubular

4.2.1 Tubo Deformável

A estrutura tubular é definida por uma malha de elementos finitos composta por 60 elementos quadrilaterais bilineares, dispostos em duas camadas regularmente em torno da malha. A simulação é efetuada com 15000 partículas DEM livres e mais 180 partículas fixas ao contorno da malha. O domínio espacial é um quadrado com lado igual 1,2 m. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados no DEM, neste teste, podem ser verificados na Tabela 4.3, sendo calculados de acordo com a metodologia apresentada na seção 2.1.10 deste trabalho. A dimensão e distribuição de tamanhos das partículas são mostradas na Tabela 4.4, sendo que todas possuem a mesma densidade, $\rho = 1600 \text{ kg/m}^3$. O tubo possui raio externo igual a 0,05 m e raio interno igual a 0,04 m.

Parâmetro	Unidade	Valor
k_n	(N/m)	$1,\!98 \times 10^6$
k_t	(N/m)	$9,91 \times 10^4$
c_n	(N.s/m)	99,31
c_t	(N.s/m)	$15,\!90$
μ_t		0,8
μ_r		0,2
$\alpha^{damp,t}$	(1/s)	4.91×10^{-3}
$\alpha^{damp,r}$	(1/s)	$3,03 \times 10^{-3}$

Tabela 4.3: Parâmetros do DEM usados no acoplamentodo DEM com estrutura deformável.

Na estrutura é aplicado um carregamento de 1000 N distribuído uniformemente a linha su-

Grupo	1	2	3
Diâmetro (m)	0,0022	0,002	0,0018
Quantidade	3750	7500	3750

Tabela 4.4: Distribuição de tamanho das partículas usados no acoplamento do DEM com estrutura deformável.

perior do tubo em um arco de 120° , conforme é ilustrado na Figura 4.11(b), o que resulta em uma carga distribuída de q = 9500 N/m. O carregamento é aplicado progressivamente até 0,5 s de simulação e depois mantido no valor máximo até o final da simulação. Na Tabela 4.5 são apresentados os valores das propriedades adotadas para o meio contínuo. Adotou-se um coeficiente de rigidez relativamente baixo para que a rigidez da viga fosse próxima da rigidez normal k_n das partículas, o que permitiu avaliar melhor a deformação da estrutura devido ao contato com o meio discreto. Não existe nenhum tipo de condição de contorno de deslocamento imposto na malha, a única restrição ao seu movimento vem do contato com as partículas. Essa condição determina que a malha está sujeita tanto a deformações quanto a deslocamentos.

Tabela 4.5: Propriedades do FEM usadas no acoplamentodo DEM com estrutura deformável.

Parâmetro	Unidade	Valor
E	(Pa)	70×10^5
ρ	(kg/m^3)	2700
ν		$0,\!35$

Para esta simulação adotou-se $\Delta t = 4 \times 10^{-5}$ s, em ambos os domínios, o que corresponde a aproximadamente 88,3 % do passo de tempo crítico do DEM. Realizou-se inicialmente o adensamento numérico das partículas, de forma a gerar a condição inicial do domínio particulado. Nesta etapa ainda não há a presença da estrutura, sendo que a simulação foi conduzida por 2 s, tempo suficiente para as partículas atingirem o repouso sob a ação da gravidade. Após realizada a etapa de adensamento o tubo é inicialmente posicionado um pouco acima da linha superior das partículas, e inicia-se a simulação com o algoritmo acoplado.

A simulação foi conduzida por 5 s, tempo suficiente para o algoritmo convergir, conforme

pode-se observar na Figura 4.12 na qual tem-se o gráfico da coordenada do centroide na direção y do tubo em função de tempo.



Figura 4.12: Posição vertical do centroide do tubo em função do tempo.

Nas imagens mostradas na Figura 4.13 têm-se a condição do sistema em 2 instantes de tempo parciais da simulação, e na Figura 4.14 é mostrada a condição final após o término da simulação. Nas imagens mostradas o mapa de cores da estrutura é proporcional ao valor da tensão de von Mises atuante, sendo que a escala de correspondência é mostrada na barra lateral na Figura 4.14.



Figura 4.13: Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 2,5 s.



Figura 4.14: Condição final simulação DEM-tubo deformável.
Na Figura 4.15 é mostrada uma ampliação da Figura 4.14, onde para uma melhor visualização das tensões observa-se apenas a estrutura na condição final.



Figura 4.15: Tensões de von Mises atuando na estrutura.

Observa-se na Figura 4.15 que o mapa de tensões obtido é coerente com a deformação sofrida pelo tubo. Os pontos de maior concentração de tensão estão situados na face na altura da linha do centroide do tubo, onde obteve-se uma tensão máxima de 27,7 MPa.

Na Figura 4.16 tem-se um gráfico em função do tempo da força de reação vertical das partículas atuando no tubo. A força de reação é dada pelo somatório das forças verticais resultantes que atuam nas partículas fixas ao contorno da estrutura, sendo esse cálculo repetido a cada iteração do algoritmo.

Observa-se na Figura 4.16 que a força de reação das partículas no tubo aumenta nos primeiros 0,5 s de simulação até atingir o valor de 1000 N, que corresponde ao valor do carregamento externo aplicado. Isso comprova que no equilíbrio a força resultante atuando na estrutura é nula, uma vez que a força de reação das partículas no tubo se iguala ao carregamento total aplicado na estrutura.



Figura 4.16: Força de reação vertical das partículas em função do tempo.

Na Figura 4.17 tem-se o gráfico da distribuição da força vertical resultante atuando nas partículas fixas ao contorno da metade inferior da malha. Observa-se que a força vertical resultante das partículas fixas na região mais inferior do tubo (região central do gráfico) é maior, uma vez que as partículas fixas nessas posições sofrem uma penetração maior que as demais partículas. Para as partículas que estão acima da linha de penetração do tubo a força resultante vertical é nula, conforme pode-se observar nos dois extremos horizontais do gráfico. Nota-se uma grande dispersão desses valores.



Figura 4.17: Força resultante vertical das partículas fixas ao contorno da metade inferior da malha.

A fim de avaliar o carregamento nodal equivalente gerado pelas forças verticais mostradas na Figura 4.17, é mostrado na Figura 4.18 a distribuição da força vertical atuando nos nós do contorno da metade inferior da malha. Observa-se, conforme esperado, que a componente vertical da força nodal equivalente é maior nos nós mais inferiores do contorno da malha. A distribuição da força não é simétrica, em função do posicionamento irregular das partículas da região inferior do tubo. Nota-se também que a distribuição da força nodal equivalente (Figura 4.18) apresenta uma menor dispersão que as forças nas partículas (Figura 4.17).



Figura 4.18: Força vertical atuando nos nós do contorno da metade inferior da malha.

Por fim, na Figura 4.19 é mostrado uma imagem do sistema na condição final onde a cor das partículas é proporcional (do azul ao vermelho) à penetração normal das partículas. Essa grandeza é proporcional às forças de contato normal. Com as partículas posicionadas na condição final é executado mais uma vez o algoritmo do DEM, com a diferença de que desta vez a penetração calculada nos pares de partículas em contato é contabilizada em um somatório para cada partícula. Ao final desse cálculo tem-se o valor da penetração equivalente de cada partícula, que está diretamente relacionada à distribuição de forças de contato normal no meio particulado. Esse resultado mostra a forma como o carregamento causado pela estrutura no meio discreto devido ao contato de ambos os meios se distribui entre as partículas, fornecendo uma medida do estado de tensão no meio particulado.

Observa-se na Figura 4.19 que o carregamento causado pelo contato da estrutura no solo se distribui na região abaixo do tubo, formando um padrão de ramificações.



Figura 4.19: Distribuição do carregamento no meio discreto devido ao contato solo-estrutura.

4.2.2 Viga Deformável

Em uma simulação análoga, utilizando o mesmo domínio discreto da simulação anterior, foi realizado o acoplamento do DEM com uma viga deformável. A viga é definida por uma malha de elementos finitos composta por retângulos lineares de quatro nós. Ao contorno da malha são fixados os elementos discretos que formam o contorno da interface entre os dois domínios.

A simulação é efetuada com 15000 partículas DEM livres e mais 588 partículas fixas ao contorno da malha. O domínio espacial é um quadrado com lado igual 1,2 m. Os valores dos parâmetros dos modelos de contato usados no DEM, neste teste, são os mesmos da simulação

anterior e são apresentados na Tabela 4.3. A dimensão e distribuição de tamanhos das partículas são mostradas na Tabela 4.4, sendo que todas possuem a mesma densidade, $\rho = 1600 \text{ kg/m}^3$. A viga possui 0,5 m de comprimento e altura igual a 0,025 m.

Na viga é aplicado um carregamento de 6000 N distribuído uniformemente na face superior da malha, conforme é ilustrado na Figura 4.11(a), o que resulta em uma carga distribuída de q = 12000 N/m. O carregamento é aplicado progressivamente até 0,5 s de simulação e depois mantido no valor máximo até o final da simulação. Os valores das propriedades usadas no FEM são os mesmos da simulação com o tubo deformável, sendo apresentados na Tabela 4.5. Novamente, adotou-se um coeficiente de rigidez relativamente baixo para que a rigidez da viga fosse próxima da rigidez normal k_n das partículas, o que permitiu avaliar melhor a deformação da estrutura devido ao contato com o meio discreto. Não existe nenhum tipo de condição de contorno de deslocamento imposto na malha, a única restrição ao seu movimento vem do contato com as partículas. Essa condição determina que a malha está sujeita tanto a deformações quanto a deslocamentos.

Para esta simulação adotou-se $\Delta t = 4 \times 10^{-5}$ s, para ambos os domínios, o que corresponde a aproximadamente 88,3 % do passo de tempo crítico do DEM. Com as partículas já previamente adensadas na simulação anterior, a simulação inicia-se com o posicionamento da viga um pouco acima da linha superior das partículas. A simulação foi conduzida por 5 s, tempo suficiente para o algoritmo convergir, conforme pode-se observar na Figura 4.20 onde tem-se o gráfico da coordenada do centroide na direção y da viga em função de tempo.



Figura 4.20: Posição vertical do centroide da viga em função do tempo.

Nas imagens mostradas na Figura 4.21 têm-se a condição do sistema em dois instantes de tempo parciais da simulação, e na Figura 4.22 é mostrada a condição final após o término da simulação. Nas imagens mostradas o mapa de cores da estrutura é proporcional ao valor da tensão na direção x, sendo que a escala de correspondência é mostrada na barra lateral na Figura 4.22.



Figura 4.21: Posição das partículas em (a) 0 s; (b) 2,5 s.



Figura 4.22: Condição final simulação DEM-viga deformável.

Na Figura 4.23 é mostrada uma ampliação da Figura 4.22, na qual para uma melhor visualização das tensões observa-se apenas a viga na condição final.



Figura 4.23: Tensões na direção x atuando na estrutura.

Observa-se na Figura 4.23 que o mapa de tensões obtido é coerente com a deformação sofrida pela viga. Devido a flexão voltada para baixo ocorrem tensões de tração na parte superior da viga e tensões de compressão na parte inferior, a tensão máxima obtida é de 5,3 MPa de tração.

Na Figura 4.24 tem-se um gráfico em função do tempo da força de reação vertical das partículas atuando na viga. A força de reação é dada pelo somatório das forças verticais resultantes que atuam nas partículas fixas ao contorno da estrutura, sendo esse cálculo repetido a cada iteração do algoritmo.

Observa-se na Figura 4.24 que a força de reação das partículas na viga aumenta nos primeiros 0,5 s de simulação até atingir o valor de 6000 N, o que corresponde ao valor do carregamento externo aplicado. Novamente tem-se que no equilíbrio a força resultante atuando na estrutura é nula, uma vez que a força de reação das partículas na viga se iguala ao carregamento total aplicado.



Figura 4.24: Força de reação vertical das partículas em função do tempo.

Na Figura 4.25 tem-se o gráfico da distribuição da força vertical resultante atuando nas partículas fixas ao contorno da face inferior da malha. Observa-se uma grande oscilação no valor da força entre as partículas vizinhas fixas no contorno, variando de extremos positivos para zero de uma partícula para outra. Esse comportamento indica claramente que o contato da viga com as partículas não é uniforme, mas se estabelece com um número reduzido de partículas dentre as que se encontram na interface dos dois meios. Isso se deve a natureza discreta do DEM, que devido a organização e posicionamento aleatório das partículas, não gera uma superfície de contato uniforme. O uso de partículas de menor tamanho é uma alternativa para amenizar esse efeito, mas obviamente que isso implica em um aumento considerável no tempo de simulação.



Figura 4.25: Força resultante vertical das partículas fixas ao contorno da metade inferior da malha.

A fim de avaliar o carregamento nodal equivalente gerado pelas forças verticais mostradas na Figura 4.25, é mostrado na Figura 4.26 a distribuição da força vertical atuando nos nós do contorno da face inferior da malha. A distribuição da força não é simétrica, em função do posicionamento irregular das partículas da região inferior do viga, e não conduz a uma deformação da viga conforme previsto pela na teoria linear de Winkler.



Figura 4.26: Força vertical atuando nos nós da metade inferior da malha.

Na Figura 4.27 é mostrado uma imagem do sistema na condição final em que a cor das partículas é proporcional (do azul ao vermelho) à penetração normal das partículas, conforme estratégia descrita no exemplo anterior.

Observa-se na Figura 4.27 que o carregamento causado pelo contato da estrutura no solo se distribui na região abaixo da viga formando um padrão de ramificações. Também é possível concluir que grande parte da força de reação se distribui entre as partículas posicionadas na parte inferior a viga, com mais intensidade na região central da estrutura. Isso implica que as extremidades da viga estão menos sustentadas pelas partículas que a região central.



Figura 4.27: Distribuição do carregamento no meio discreto devido ao contato solo-estrutura.

Por fim, com os resultados apresentados acima é possível analisar o comportamento da deflexão sofrida pela estrutura. Na Figura 4.28 tem-se a deflexão da viga ao longo de seu comprimento, na qual a referência para a curva de deflexão mostrada é a coordenada na direção y do nó do canto inferior esquerdo da malha. Isso é necessário para uma melhor visualização da deflexão sofrida pela viga, uma vez que, como não existem condições de contorno na malha, a estrutura sofre um deslocamento de corpo rígido, conforme pôde ser observado na Figura 3.21, o que prejudicaria a visualização da curva da deflexão.

Observa-se que a viga sofre uma flexão voltada para baixo, resultado bastante diferente do encontrado no teste de verificação descrito na seção 3.4 deste trabalho e do comportamento previsto pelas teorias de fundação elástica, a exemplo dos resultados obtidos por Celep e Demir (2007), que



Figura 4.28: Deflexão da viga.

preveem que nesta configuração de contato a viga sofre uma deflexão voltada para cima. Observase também é a viga sofreu uma pequena rotação no sentido horário, uma vez que a coordenada vertical do nó do extremo direito é menor que do esquerdo.

Esse resultado, apesar de contrariar as previsões teóricas, é coerente com os resultados apresentados acima. As Figuras 4.25 e 4.26 mostram claramente que a reação do solo na viga é menor nos extremos da estrutura, ou seja, a viga está mais apoiada pelo solo na sua porção central. Comportamento que é novamente visualizado na Figura 4.27, uma vez que as ramificações do carregamento gerado pela estrutura nas partículas é menor nas extremidades da viga. Ou seja, os resultados obtidos apontam que com o aumento da penetração da viga, as partículas posicionadas próximas a extremidade da estrutura sofreram deslocamentos maiores que as posicionadas sob a região central, o que diminuiu a rigidez equivalente do meio discreto nesses regiões. A diminuição da rigidez equivalente do meio discreto nas extremidades da viga implica em uma menor força de reação das partículas nessa região, e, consequentemente, houve o aumento do deslocamento da estrutura em suas extremidades.

Apesar de ser o oposto do comportamento previsto pelas teorias de fundação elástica deve-se

apontar as diferenças entre os dois métodos. No contato solo-estrutura modelado pelo acoplamento DEM-FEM o solo é altamente não linear, uma vez que a rigidez equivalente do meio é alterada a cada passo de tempo devido ao reposicionamento das partículas, o que é totalmente diferente dos modelos de fundação elástica. Nota-se também que nos modelos teóricos as molas que representam o solo estão sempre posicionadas regulamente em baixo da estrutura e estão fixas, o que é bastante diferente do contato da estrutura com as partículas do DEM.

No teste de verificação apresentado na seção 3.4, no qual as partículas estavam fixas e posicionadas regularmente, obteve-se o comportamento esperado pelas teorias de fundação elástica, usando-se o mesmo algoritmo usado nesta simulação. Isso indica que a natureza discreta do DEM interfere fortemente nos resultados do contato solo-estrutura.

Além disso, deve-se notar que o esquema de acoplamento DEM-FEM proposto implica na inserção de rugosidade na estrutura. A rugosidade surge em função da rugosidade geométrica imposta pelo posicionamento das partículas no contorno da malha. Essa rugosidade gera um atrito considerável no contato da estrutura com o solo nas simulações, o que interfere no carregamento da estrutura. O refinamento do domínio particulado ajudaria a reduzir esses efeitos, no entanto isso acarreta em um aumento do esforço computacional.

Também é importante notar que é necessário um trabalho de calibração do DEM, a fim de ajustar os parâmetros de contato das partículas. Dessa forma, é possível calibrar o modelo numérico de forma a aproximar da resposta do solo real desejado.

5 Considerações Finais

Neste capítulo são apresentadas as análises e conclusões referentes ao desenvolvimento deste trabalho, que teve como principal objetivo a proposição, implementação e validação de uma metodologia de acoplamento do DEM com o FEM. São apresentadas análises referentes às formulações escolhidas para o DEM e para o FEM e sobre os resultados obtidos com a aplicação do algoritmo acoplado proposto. Ao final do capítulo, são feitas sugestões para trabalhos futuros, visando o desenvolvimento e aprofundamento de certos aspectos abordados no trabalho.

5.1 Conclusões

Este trabalho apresentou o desenvolvimento e validação de uma metodologia para o acoplamento do DEM com o FEM. A seguir, são feitas algumas análises e conclusões sobre os principais tópicos abordados.

Modelagem do Problema:

Foi usada uma formulação acoplada DEM-FEM para analisar o problema do contato bidimensional solo-estrutura. Nessa formulação o domínio contínuo é modelado pelo FEM, que é amplamente utilizado para simular domínios estruturais com pequenas deformações e comportamento linear. Enquanto o domínio discreto é modelado pelo DEM, que é mais apropriado para simular o comportamento de materiais granulares como solos sujeitos a grandes deslocamentos e com comportamento tipicamente não linear.

No DEM adotou-se a formulação explícita clássica com partículas circulares e com a adição de atrito de rolamento. Uma metodologia baseada nas propriedades físicas das partículas permitiu calcular os parâmetros de contato usados no modelo constitutivo adotado. Os testes de validação realizados demonstraram que o algoritmo implementado é capaz de capturar o comportamento típico de materiais granulares, tais como a formação de pilhas. Para o FEM foi usada uma formulação dinâmica implícita com comportamento linear elástico, pequenas deformações e assumindo-se as hipóteses simplificadoras do estado plano de deformações.

Para a integração no tempo do algoritmo acoplado é utilizado uma abordagem explícita-

implícita que acopla o integrador de *leapfrog* Verlet, utilizado no DEM, com o integrador de Newmark, utilizado no FEM. O resultado da implementação mostrou que o algoritmo acoplado apresenta um comportamento mais estável se o passo de tempo dos dois domínios forem iguais, dessa forma, adotou-se o mesmo passo de tempo para ambos os integradores, sendo o passo de tempo crítico determinado pelo algoritmo de Verlet.

Acoplamento DEM-FEM:

Para o acoplamento dos dois métodos foi proposto um esquema baseado em uma interface de partículas fixas no contorno externo da malha de elementos finitos. Essas partículas possuem as mesmas propriedades das demais partículas do domínio discreto, no entanto, não são integradas no tempo juntamente com as demais, sendo suas posições definidas exclusivamente pelas coordenadas dos nós da malha. Esse esquema de acoplamento se mostrou eficiente uma vez que para sua implementação não é necessário um novo algoritmo de detecção de contato DEM-FEM, uma vez que o contato é detectado automaticamente pelas partículas fixas no contorno da malha.

Testes de validação mostraram que o esquema de acoplamento proposto funciona adequadamente, gerando carregamentos consistentes com as teorias de fundação elástica para configurações com meio discreto com posicionamento controlado. O resultado das simulações mostraram que o posicionamento das partículas no contorno da malha gera o inconveniente de introduzir rugosidade na superfície da estrutura, efeito que pode ser controlado através da diminuição do diâmetro dessas partículas.

Conclusão Geral:

Como conclusão geral deste trabalho pode-se dizer que a formulação acoplada DEM-FEM implementada foi satisfatória para a simulação bidimensional do contato solo-estrutura, tanto em regime dinâmico quanto estacionário, com relação aos critérios propostos.

As simulações realizadas com o acoplamento do DEM com estruturas rígidas mostraram a capacidade do algoritmo de capturar o comportamento de solos e materiais granulares quando sujeito a grandes deslocamentos. Foi possível simular a formação de trincheiras no solo devido ao contato com a estrutura rígida, característica do solo que é determinante no projeto de tubulações, como o risers usados na indústria de petróleo. Também, as simulações realizadas com o acoplamento DEM-FEM demostraram a capacidade do algoritmo de simular o carregamento gerado na estrutura devido ao contato com o solo. O resultado do contato solo-viga obtido diverge do comportamento previsto pelas teorias de fundação elástica do tipo Wikler quando as partículas estão sujeitas à deslocamentos irregulares. As soluções obtidas são não intuitivas, mas consistentes em relação aos principais parâmetros do modelo DEM-FEM. Um aprofundamento deste caso é necessário.

5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Na sequência são apresentadas algumas sugestões para continuidade de certos aspectos relevantes abordados durante este trabalho.

- Implementação do modelo de contato de Hertz no DEM.
- Generalização do algoritmo acoplado DEM-FEM para o domínio tridimensional.
- Implementação de uma formulação FEM não linear para o domínio estrutural.
- Paralelização do código computacional em GPU, visando a utilização do programa em placas de vídeo de alto desempenho.
- Incorporação do efeito do domínio fluido no problema de contato solo-estrutura, de forma a capturar o fenômeno de sucção que ocorre no contato da estrutura com solos saturados.
- Implementação de *clusters* de partículas e partículas com formato não circular.
- Calibração dos parâmetros do modelo DEM.

Referências

AI, J.; CHEN, J.F.; ROTTER, J.M. e OOI, J.Y. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. **Powder Technology**, v. 206, 269–282, 2011.

ALDER, B.J. e WAINWRIGHT, T.E. Studies in molecular dynamics. i. general method. **Journal** of Chemical Physics, v. 31, n. 2, 459–466, 1959.

AZEVEDO, N.M. e LEMOS, J. Hybrid discrete element/finite element method for fracture analysis. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 195, 4579 – 4593, 2006.

BARROS, P.L.A.; PAVANELLO, R.; MESQUITA, E. e MOROOKA, C.K. Scr-seafloor interaction modeling with winkler, pasternak ans keer beam-on-elastic-foundation theories. In OMAE 2009 - Proceedings of the ASME 28th International Conference on Ocean. Offshore and Artic Engineering, v. 1. Honolulu, June 2009.

BATHE, K.J. Finite Element Procedures. Prentice Hall, 2006.

CALVETTI, F.; DI PRISCO, C. e NOVA, R. Experimental and numerical analysis of soil-pipe interaction. Journal of geotechnical and geoenvironmental engineering, v. 130, n. 12, 1292–1299, 2004a.

CALVETTI, F.; NOVA, R. e CASTELLANZA, R. Modelling the subsidence induced by degradation of abandoned mines. In **Proceedings of Second International Symposium on Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive-Frictional Materials**, pp. 137–148. Taylor & Francis, September 2004b.

CELEP, Z. e DEMIR, F. Symmetrically loaded beam on a two-parameter tensionless foundation.

Structural Engineering and Mechanics, v. 27, 555–574, 2007.

CUNDALL, A.P. e STRACK, O.D.L. A discrete numerical model for granular assenblies. **Geote-chnique**, v. 29, 47–65, 1979.

CUNDALL, P.A. e HART, R.D. Numerical modeling of descontinua. **Engineering Computations**, v. 9, n. 2, 101–113, 1992.

DANG, H.K. e MEGUID, M.A. An efficient finite discrete element method for quasi-static nonlinear soil structure interaction problems. **International journal for numerical and analytical methods in geomechanics**, v. 37, 130–149, 2013.

DURAN, J. Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials. Springer New York, 2012.

FAKHIMI, A. A hybrid discrete-finite element model for numerical simulation of geomaterials. **Computers and Geotechnics**, v. 36, 386–395, 2009.

GOMES, A.V.S. Estudo do acoplamento do metodo dos elementos finitos e do metodo dos elementos discretos na analise de interacao solo-estrutura, 2012. [trabalho de conclusao de curso]. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, Curso de Engenharia Mecanica, Departamento de Mecanica Computacional; 2012.

HAN, K.; PERIC, D.; OWEN, D. e YU, J. A combined finite/discrete element simulation of shot peening processes. **Engineering Computations**, v. 19, 680–702, 2000.

HU, M.; O'SULLIVAN, C.; JARDINE, R.R. e JIANG., M. Stress-induced anisotropy in sand under cyclic loading potential particles. In **Proceedings of the International Symposium on Geomecha-nics and Geotechnics: From Micro to Macro.** 2010.

HUANG, A.B. e MA, M.Y. An analytical study of cone penetration tests in granular material. **Canadian Geotechnical Journal**, v. 31, 91–103, 1994.

IWASHITA, K. e ODA, M. Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by dem. **Journal of Engineering Mechanics**, v. 124, 285–292, 1998.

JENCK, O.; DIAS, D. e KASTNER, R. Discrete element modelling of a granular platform supported by piles in soft soil - validation on a small scale model test and comparison to a numerical analysis in a continuum. **Computers and Geotechnics**, v. 36, 917–927, 2009.

JIANG, M.J.; YU, H.S. e HARRIS, D. A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance. **Computers and Geotechnics**, v. 32, 340–357, 2005.

JIANG, M.J.; YU, H.S. e HARRIS, D. Discrete element modelling of deep penetration in granular soils. **International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics**, v. 30, 335–361, 2006.

LABAKI, J.; MESQUITA, E. e RAJAPAKSE, R.K.N.D. Coupled horizontal and rocking vibrations of a rigid circular plate on a transversely isotropic bi-material interface. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, v. 37, 1367–1377, 2013.

LAI, M.; KREMPL, E. e RUBEN, D. Introduction to continuum machanics. Elsevier, 4 ed., 2010.

LI, Y.; XU, Y. e THORNTON, C. A comparison of discrete element simulations and experiments for "sandpiles" composed of spherical particles. **Powder Technology**, v. 160, n. 3, 219 – 228, 2005.

LUBICH, C. From Quantum to Classical Molecular Dynamics: Reduced Models and Numerical Analysis. European Mathematical Society, 2008.

MALONE, K.F. e XU, B.H. Determination of contact parameters for discrete element method simulations of granular systems. **Particuology**, v. 6, n. 6, 521 – 528, 2008.

MUNJIZA, A. The Combined finite-discrete element method. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.

MUNJIZA, A. e ANDREWS, K.R.F. Nbs contact detection algorithm for bodies of similar size. **INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING**, v. 43, 131–149, 1998.

NAKASHIMA, H. e OIDA, A. Algorithm and implementation of soil-tire contact analysis code based on dynamic fe-de method. **Journal of Terramechanics**, v. 41, 127–137, 2004.

NUNSSENZVEIG, H.M. Curso de Fisica Basica. Mecanica, v. 1. Edgard Blucher, 4 ed., 2002.

ONATE, E. e ROJEK, J. Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Enginee-ring**, v. 193, 3087–3128, 2004.

O'SULLIVAN, C. Particle-based discrete element modeling: Geomechanics perspective. **International Journal of Geomechanics**, v. 11, 449–464, 2011a.

O'SULLIVAN, C. Particle Discrete Element Modeling. Spon Press, 2011b.

O'SULLIVAN, C. e BRAY, J.D. Modified shear spring formulation for discontinuous deformation analysis of particulate media. **Journal of Engineering Mechanics**, v. 129, 830–834, 2003.

O'SULLIVAN, C.; BRAY, J.D. e RIEMER, M.F. Influence of particle shape and surface friction variability on response of rod-shaped particulate media. **Journal of engineering mechanics**, v. 128, 1182–1192, 2002.

PESCE, C.P.; DE A. MARTINS, C. e DA SILVEIRA, L.M.Y. Riser-soil interaction: Local dynamics at tdp and a discussion on the eigenvalue and the viv problems. **Journal of Offshore Mechanics and Arctic Engineering**, v. 128, 39–55, 2006.

PETERS, J.F.; KALA, R. e MAIER, R.S. A hierarchical search algorithm for discrete element method of greatly differing particle sizes. Engineering Computations: International Journal for Computer-Aided Engineering and Software, v. 26, 621–634, 2009.

REDDY, J.N. An Introduction to the Finite Element Method. Mc Graw Hill, 3 ed., 2006.

SCHLICK, T. Molecular Modeling and Simulation. Springer, 2 ed., 2010.

TANAKA, H.; MOMUZU, M.; AIDA, A. e YAMAZAKI, M. Simulation of soil deformation and resistance at bar penetration by the distinct element method. **Journal of Terramechanics**, v. 37, 41–56, 2000.

TIANG, J.M.; CORKUM, B.T.; KAUFFMAN, C.R. e GRECO, C. Discrete numerical model for soil mechanics. **Journal of Geotechnical Engineering**, v. 115, 379–398, 1989.

VERLET, L. Computer "experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennardjones molecules. **Physical Review**, v. 159, 98–103, 1967.

XIANG, J.; MUNJIZA, A.; LATHAM, J.P. e GUISES, R. On the validation of dem and fem/dem models in 2d and 3d. Engineering Computations: International Journal for Computer-Aided Engineering and Software, v. 26, 673–687, 2009.

ZHOU, Y.; WRIGHT, B.; YANG, R.; XU, B. e YU, A. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 269, 536 – 553, 1999.

ZHU, H.P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y. e YU, A.B. Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. **Chemical Engineering Science**, v. 62, 3378–3396, 2007.

APÊNDICE A – Formulação dos Testes de Validação

Neste apêndice são demostradas as formulações de dois casos exemplos clássicos de mecânica básica que foram aplicados para na validação do algoritmo DEM implementado neste trabalho. Ambas as formulações são desenvolvidas analiticamente.

No primeiro exemplo é desenvolvida a formulação do problema da colisão elástica de dois corpos esféricos rígidos. Sendo demostrado que, quando ambos possuem a mesma massa e a partícula alvo se encontra em repouso, o ângulo formado pela trajetória de ambas as partículas após o impacto é sempre perpendicular.

No segundo exemplo é abordado o problema de uma partícula sobre um plano que, sujeita a ação de uma força impulsiva, inicia um movimento de rolamento com deslizamento. A formulação é desenvolvida a fim de prever a evolução das velocidades de translação e rotação em função do tempo.

A.1 Colisão Elástica de Dois Corpos Rígidos

Segundo Nunssenzveig (2002) a colisão elástica de dois corpos esféricos rígidos, bolas de bilhar, por exemplo, é caracterizada pela conservação de momento linear (ou quantidade de movimento linear). Para o caso da colisão de duas partículas, com o alvo (partícula 2) inicialmente em repouso e a partícula incidente (partícula 1) tendo uma velocidade inicial v_{1i} o momento linear inicial do sistema é

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_{1i} = m_1 \mathbf{v}_{1i} \tag{A.1}$$

Entretanto, para caracterizar a configuração inicial, os dados acima não são suficientes. É preciso especificar ainda a que distância a partícula incidente passaria da outra se não houvesse colisão. Esta distância *b* chama-se parâmetro de choque. Na Figura A.1(a), é a distância entre a linha de movimento inicial do centro da partícula incidente e o centro *O* do alvo. O resultado da colisão é muito diferente conforme o valor de *b*. Por exemplo, para b = 0, temos uma colisão

frontal, que é essencialmente unidimensional; no exemplo acima se b é maior que a soma dos raios das duas bolas não há colisão.



Figura A.1: (a) Colisão bidimensional; (b) Momentos inicial e finais.

Se \mathbf{p}_{1f} e \mathbf{p}_{2f} são os momentos finais das duas partículas, e considerando que o sistema é conservativo $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_f$ o momento do sistema na configuração final é

$$\mathbf{p}_f = \mathbf{p}_{1f} + \mathbf{p}_{2f} \leftrightarrow \mathbf{p}_{1i} = \mathbf{p}_{1f} + \mathbf{p}_{2f} \tag{A.2}$$

Esta relação mostra que os três vetores pertencem ao mesmo plano, conforme mostrado na Figura A.1(b), que se chama plano de colisão. A energia cinética inicial e final é dada por

$$\mathbf{T}_i = \frac{\mathbf{p}_{1i}^2}{2m_1} \tag{A.3}$$

$$\mathbf{T}_{f} = \frac{\mathbf{p}_{1f}^{2}}{2m_{1}} + \frac{\mathbf{p}_{2f}^{2}}{2m_{2}}$$
(A.4)

Supondo $m_1 = m_2 = m$, e a hipótese da colisão elástica $\mathbf{T}_i = \mathbf{T}_f$, tem-se que

$$\mathbf{p}_{1i}^2 = \mathbf{p}_{1f}^2 + \mathbf{p}_{2f}^2 \tag{A.5}$$

Por outro lado, elevando ao quadrado ambos os membros da equação A.2 (ou seja, tomando o produto escalar dos vetores por eles mesmos), vem

$$p_{1i}^2 = (\mathbf{p}_{1f} + \mathbf{p}_{2f}) \cdot (\mathbf{p}_{1f} + \mathbf{p}_{2f}) = p_{1f}^2 + p_{2f}^2 + 2\mathbf{p}_{1f} \cdot \mathbf{p}_{2f}$$
(A.6)

O que equivale a aplicação da lei dos cossenos ao triângulo da A.1(b). Comparando as equações A.5 e equações A.6, conclui-se que

$$\mathbf{p}_{1f} \cdot \mathbf{p}_{2f} = 0 \Rightarrow \theta_1 + \theta_2 = \frac{\pi}{2} \tag{A.7}$$

Logo, as direções de movimento de duas partículas de massas iguais, após uma colisão elástica com uma delas inicialmente em repouso, são perpendiculares.

A.2 Rolamento com Deslizamento no Plano



Figura A.2: Tacada em bola de bilhar.

Como exemplo do que acontece quando o rolamento é acompanhado de deslizamento, Nunssenzveig (2002) considera o movimento de uma bola de bilhar, golpeada pelo taco no plano mediano, com parâmetro de choque *b* em relação ao centro da bola, conforme mostrado na Figura A.2. A força impulsiva *F* exercida pelo taco, que atua durante o intervalo de tempo Δ_t de sua colisão com a bola, transmite à mesma um impulso inicial dado por

$$\Delta P = F\Delta_t = mV_0 \tag{A.8}$$

onde V_0 é a velocidade inicial do centro de massa C após a tacada.

A força F também exerce um torque -Fb em relação a C, que transmite a bola um momento angular inicial

$$-Fb\Delta t = I_c\omega_0 \tag{A.9}$$

onde ω_0 é a velocidade angular inicial de rotação ($\omega_0 < 0$ no caso da Figura A.2, em que b > 0). Substituindo $F\Delta t$ pela equação A.8, obtém-se

$$-mV_0b = \frac{2}{5}mR^2\omega_0 \Rightarrow \omega_0 = -\frac{5}{2}\frac{V_0b}{R^2}$$
 (A.10)

A velocidade de deslizamento da bola é a velocidade v do seu ponto de contato com o plano da mesa de bilhar. O valor v_0 de v é

$$v_0 = V_0 + \omega_0 R = V_0 \left(1 - \frac{5}{2} \frac{b}{R} \right)$$
 (A.11)

A condição de rolamento puro, que implica que $v_0 = 0$, o que dá

$$b = \frac{2}{5}R = b_r \tag{A.12}$$

Uma tacada com $b > b_r$ chama-se tacada alta, e a equação A.12 mostra que nesse caso $v_0 < 0$, ou seja, a velocidade inicial de deslizamento se opõe à velocidade V_0 do centro de massa. A Figura A.2 corresponde a uma tacada baixa, com $b < b_r$, quando $v_0 > 0$. A força de atrito cinético F_c tem sentido oposto ao deslizamento, de modo que aponta para a esquerda no caso da Figura A.2, criando um torque, que tende a aumentar a magnitude da velocidade angular, diminuindo assim a velocidade de deslizamento (para uma tacada alta ocorre o contrário). Tem-se portando, no caso da tacada baixa, a equação de movimento para translação

$$m\ddot{X} = F_e = -\mu_c N = -\mu_c mg \tag{A.13}$$

onde μ_c é o coeficiente de atrito cinético. As forcas verticais mg e N (reação), que se equilibram, não foram representadas na Figura A.2; a única forca horizontal é F_c , que atua enquanto houver deslizamento. A equação de movimento para a rotação em torno do centro de massa é:

$$F_c R = -\mu_c m g R = I_c \alpha = \frac{2}{5} m R^2 \alpha \tag{A.14}$$

As velocidades linear e angular no instante t são calculadas a partir das expressões para o movimento uniformemente acelerado

$$V = V_0 + \ddot{X}t = V_0 - \mu_c gt$$
 (A.15)

$$\omega = \omega_0 + \alpha t = \omega_0 - \frac{5}{2}\mu_c \frac{g}{R}t \tag{A.16}$$

A velocidade de deslizamento do ponto de contato no instante t é portanto

$$v = V + \omega R = v_0 - \frac{7}{2}\mu_c gt \tag{A.17}$$

e se anula para $t = t_1$, onde

$$t_1 = \frac{2}{7} \frac{v_0}{\mu_c g}$$
(A.18)

Com v_0 dado pela equação A.11. O valor correspondente a velocidade de translação da bola de bilhar é, pela equação A.15

$$V_1 = V_0 - \mu_c g t_1 = \frac{5}{7} V_0 \frac{(b+R)}{R}$$
(A.19)

Para $t > t_1$, o atrito cinético é substituído pelo atrito estático e a bola entra em rolamento puro, com $V = V_1$ e $\omega = \omega_1 = -V_1/R$. Nessa condição não há dissipação de energia, de modo que o rolamento puro se manteria indefinidamente.