

Eduardo de M. B. Campello

Um modelo computacional para o estudo de materiais granulares

FT-3711

**São Paulo
2016**

Eduardo de M. B. Campello

Um modelo computacional para o estudo de materiais granulares

**Tese apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para a obtenção do título de
Livre-Docente**

**Departamento de Engenharia de
Estruturas e Geotécnica**

**São Paulo
2016**

Eduardo de M. B. Campello

Um modelo computacional para o estudo de materiais granulares

**Tese apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para a obtenção do título de
Livre-Docente**

**Departamento de Engenharia de
Estruturas e Geotécnica**

**São Paulo
2016**

Agradecimentos

Este trabalho é, em grande medida, fruto da convivência do autor com várias pessoas ao longo dos últimos (vários) anos. Ele não teria sido possível sem essa interação, e o autor agradece imensamente a todas elas – embora prefira não mencionar nomes para não comprometer a extensão desta seção. Em especial, contudo, por razões acadêmicas, afetivas, ou ambas, e por terem tido uma relação mais direta e permanente com este trabalho, o autor não poderia deixar de agradecer individualmente às seguintes pessoas, absolutamente indispensáveis: Paulo M. Pimenta, Evandro R. Dasambiagio, Tarek I. Zohdi, Laura M. Fortes, Telma Campello, Roberto Campello e Maria do Carmo, Joli Campello e Fabrício Coelho, Marcelo Campello, e Aurora Coelho. O autor agradece ainda à FAPESP e ao CNPq pelo suporte financeiro ao longo dos últimos anos, sem o qual este trabalho teria sido muito mais difícil de ser realizado. E também à Universidade de São Paulo e à Universidade da Califórnia em Berkeley, EUA, pelo apoio e pela oportunidade que ambas lhe deram de realizar um estágio acadêmico que foi fundamental à sua consecução.

Resumo

Este trabalho apresenta um modelo computacional para o estudo dos materiais granulares. Mostra uma maneira de como eles podem ser representados do ponto de vista de sua física (adverte-se que o enfoque é puramente mecânico) e apresenta um método numérico para a solução das equações correspondentes. Detalhes de sua implantação computacional são discutidos, e alguns exemplos de aplicação são analisados para ilustrar as potencialidades da metodologia desenvolvida.

Abstract

This work presents a computational model for the study of granular materials. It shows a way to represent their physics (from a purely mechanistic point of view) and develops a numerical method for the solution of the corresponding equations. Details of its computational implementation are discussed, and a few examples are analyzed to illustrate the potentialities of the proposed scheme.

Sumário

1	Introdução	6
1.1	Considerações iniciais	6
1.2	Por que este trabalho?	9
1.3	Sobre o método dos elementos discretos.....	10
1.4	Notação.....	12
2	Uma formulação do método dos elementos discretos	13
2.1	Considerações iniciais.....	13
2.2	Descrição vetorial das rotações.....	15
2.3	Cinemática e dinâmica de uma partícula	20
2.4	Sistemas de várias partículas.....	23
2.5	Forças de campos externos	25
2.6	Forças de arrasto	26
2.7	Forças de atração e repulsão	28
2.8	Forças de adesão	31
2.9	Forças de contato mecânico.....	34
2.10	Forças de atrito.....	39
2.11	Momentos devidos às forças de atrito.....	45
2.12	Interação com paredes ou superfícies rígidas	46
3	Solução numérica das equações do sistema e aspectos computacionais associados.....	48
3.1	Considerações iniciais.....	48
3.2	Solução numérica das equações do sistema.....	49
3.3	Erro e critério de convergência do método iterativo	53
3.4	Tamanho do passo de integração e adaptação automática.....	55
3.5	Detecção dos contatos	58
3.6	Armazenamento do histórico do atrito	63
4	Exemplos numéricos.....	65
4.1	Considerações iniciais.....	65
4.2	Choque frontal de uma partícula com uma parede.....	67
4.3	Derrapagem e rolamento de uma partícula sobre uma superfície rígida.....	68
4.4	Choque de três partículas em rolamento sobre uma superfície rígida.....	71
4.5	Segregação de grãos por vibração em um recipiente.....	73
4.6	Desmoronamento de uma pilha de grãos	78
4.7	Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada	81

4.8	Jateamento de partículas sobre uma superfície	88
5	Conclusões.....	92
6	Referências.....	95

1 Introdução

1.1 Considerações iniciais

Os materiais granulares estão presentes em uma miríade de formas naturais e aplicações por parte do homem, sendo observados em diversas escalas do comprimento: de pilhas de pedra e amontoados de blocos de rocha a pós finos e particulados; de montanhas de grãos em silos e navios graneleiros a punhados de flocos de neve ou poeira atmosférica; de montes de areia e materiais de construção a aglomerados compactos de grãos finos e alto valor agregado nas indústrias química, farmacêutica, alimentícia e microeletrônica. Não é exagero afirmar que essa classe de materiais é uma das mais presentes nas atividades humanas. Apesar disso, do ponto de vista físico o estudo rigoroso dos materiais granulares é relativamente recente, remontando à era moderna com os trabalhos de uma linhagem notável de cientistas, como C.-A. Coulomb (1736-1806), M. Faraday (1791-1867), W. J. M. Rankine (1820-1872), O. Reynolds (1842-1912), Lord Rayleigh (1842-1919) e K. Terzaghi (1883-1963). Foi somente em meados do século XX que a primeira obra reunindo observações sistemáticas sobre a física dos materiais granulares, mais ou menos na forma como hoje a conhecemos e estudamos, foi publicada. O livro “The Physics of Blown Sand and Desert Dunes”, de R.A. Bagnold (1896-1990) [1], é hoje um clássico na área e inaugura a era contemporânea desse campo da mecânica. Ainda assim, a despeito das descobertas e avanços promovidos por esses ilustres pioneiros, a mecânica dos materiais granulares nunca despertou nos estudiosos o mesmo interesse que despertaram, por exemplo, a mecânica dos sólidos e a mecânica dos fluidos, e não existe no presente nenhuma teoria (formalmente baseada em princípios e axiomas) que seja reconhecida como a *mecânica dos materiais granulares*, e sim apenas fragmentos de uma teoria, em contraste com que acontece com os sólidos e fluidos.

Os materiais granulares se distinguem dos sólidos e fluidos em vários aspectos. Um dos mais intrigantes é que o seu comportamento é por vezes semelhante ao de um sólido, por vezes ao de um fluido, e muitas vezes é algo completamente diferente, além de com frequência não intuitivo – especialmente para quem está acostumado a entender a matéria sob a ótica da mecânica dos meios contínuos. Quando fortemente excitados, os materiais granulares podem ter comportamento que se assemelha ao dos gases, como observado em nuvens de poeira ou em leitos fluidizados de instalações

industriais. Eles também podem ser bombeados no interior de dutos ou escoar em recipientes abertos, como os fluidos, podendo inclusive apresentar padrões que se assemelham aos de ondas em superfícies livres. E podem formar pilhas ou amontoados estáticos, i.e., formas que não se dissolvem espontaneamente e que resistem a tensões tangenciais, como acontece com os sólidos, e que podem até mesmo experimentar deformações plásticas.

Do ponto de vista da abstração física, os materiais granulares não podem ser idealizados como conjuntos contínuos de pontos materiais (a menos que a escala do fenômeno físico seja muito grande comparativamente ao tamanho de seus grãos, como acontece por exemplo na deformação de maciços de solo em problemas da engenharia geotécnica). Devem, ao contrário, ser entendidos a priori como meios discretos, em que a matéria é concentrada em um número grande de entidades elementares de volume e forma definidos. No contexto deste trabalho, define-se material granular como sendo um aglomerado de sólidos discretos de tamanho macroscópico que interagem permanentemente entre si e com o meio que os circunda, com a parcela mais significativa dessas interações sendo dada por contato físico (quase sempre com atrito) caracterizado por considerável dissipação de energia. Seus sólidos constituintes, também chamados de grãos ou eventualmente partículas, têm dimensões que são da ordem de, pelo menos, 10 a 100 μm ¹. Por conta disso, os materiais granulares não estão sujeitos a movimentos induzidos por flutuações térmicas, sendo o seu comportamento governado essencialmente pelo deslocamento (mais ou menos coletivo) de seus grãos. Esse aspecto explica por que eles, diferentemente dos fluidos, apresentam grande resistência a qualquer tentativa de mistura: vibrar ou chacoalhar uma amostra de grãos (disposta, digamos, no interior de um recipiente) resulta em segregação por tamanhos, e não em mistura – exatamente o oposto do desejado ou do que se espera por intuição. Esse fenômeno é apenas mais um dos aspectos intrigantes dos materiais granulares, e ilustra bem o fato de que eles, embora constituídos de entidades sólidas, e portanto que têm comportamento individual muito bem caracterizado, possuem uma física própria. A Figura 1 apresenta alguns exemplos de materiais granulares.

É usual classificar os materiais granulares segundo a dimensão de seus grãos. Conforme Brown e Richards [2], referência clássica na área, definem-se os seguintes tipos ou subclasses:

- Pós: são os materiais granulares cujos grãos têm dimensão inferior a 100 μm . São divididos em pós granulares (dimensão dos grãos entre 10 e 100 μm), pós finos ou superfinos (dimensão dos grãos entre 1 e 10 μm) e pós hiperfinos (dimensão entre 0,1 e 1 μm) (alguns autores, como já dito, não consideram esses dois últimos como materiais granulares). Poeira, argila seca e produtos manufaturados como farinha, leite instantâneo, pólvora e certos artigos cosméticos e farmacêuticos, são alguns exemplos.
- Sólidos granulares: são os materiais granulares cujas dimensões dos grãos variam de 100 μm a 3 mm. Exemplos típicos são as areias e vários produtos resultantes da sinterização de pós (muito comum em processos industriais), além de diversos artigos alimentícios processados como flocos

¹ Não existe um consenso bem estabelecido quanto a esses valores na literatura. Alguns autores, por exemplo, consideram 1 μm ou até mesmo 0,1 μm como a dimensão mínima. Neste trabalho, em consonância com a definição dada, que estabelece que os grãos devem ser macroscópicos, adota-se o limite de 10 ou 100 μm .



Figura 1. Exemplos de materiais granulares. Créditos das imagens (da esquerda para a direita, de cima para baixo): (1) John Hart, www.freeimages.com/photo/river-rocks-1474259; (2) Afonso Lima, www.freeimages.com/photo/rock-texture-1193808; (3) Alegri, www.4freephotos.com/pt/Duna-do-deserto-3078.html; (4) e (5) Laura M. Fortes e o autor; (6) Alegri, www.4freephotos.com/pt/Caminho-com-pedras-3810.html; (7) a (9) Laura M. Fortes e o autor. Sítios acessados em 10/07/2016 (o uso das imagens é gratuito).

de milho, açúcar refinado e café moído.

- Sólidos “quebrados” ou partidos: são os materiais granulares onde a maior parte dos grãos tem dimensão superior a 3 mm. Os agregados utilizados na fabricação do concreto, por exemplo, se enquadram nessa categoria.

Nesse contexto, este trabalho se restringe aos pós granulares, sólidos granulares e sólidos quebrados ou partidos. Dentro deste recorte, restringe-se ainda àqueles que são ditos *secos*, i.e., cujo meio externo em que os grãos estão imersos é o ar, inerte, sem quantidades significativas de umidade e nem a presença de fluidos de outra natureza. Em grande medida, esse recorte concorda com aquele adotado por Duran [3] (na opinião do autor, o grupo de J. Duran, da Universidade Pierre e Marie Curie na França, é hoje a maior referência acadêmica no estudo da física dos materiais granulares), com a diferença de que as interações com o meio, como se verá nos próximos capítulos, não são aqui de todo desprezadas.

No estágio atual do conhecimento sobre os materiais granulares, a maior parte dos avanços tem sido promovida por meio de experimentos – físicos e computacionais. Os experimentos físicos têm fornecido um sem número de observações valiosas, as quais têm servido de ponto de partida para a construção de modelos teóricos e o estabelecimento de conceitos muito difíceis de serem elaborados na base da abstração ou especulação puras. Por outro lado, os experimentos computacionais têm permitido que aspectos extremamente difíceis (se não impossíveis) de serem monitorados em ensaios físicos – por

exemplo, as posições e velocidades de cada um dos grãos de uma amostra de material granular em movimento, em um determinado instante de tempo, ou o valor das forças que atuam sobre os mesmos, ou outras grandezas físicas de difícil medição quando se consideram *todos* os grãos da amostra – o sejam por meio de simulações computacionais. Dados sobre os grãos estão disponíveis em qualquer estágio de um experimento computacional. Isso permite que o movimento de um conjunto de grãos possa ser inspecionado em suas minúcias, ao toque de alguns botões do teclado. Informações valiosas podem assim ser capturadas e servir de apoio à elaboração de modelos teóricos e conceitos físicos, contribuindo positivamente para o nosso entendimento sobre a mecânica desses materiais. Os experimentos computacionais podem, ainda, ser utilizados para projetar, aperfeiçoar e otimizar os ensaios físicos, servindo-lhes de suporte e com isso diminuindo o número de ensaios-testes necessários até que se atinja a forma final ou definitiva de um ensaio. O esforço demandado para todos esses propósitos é relativamente pequeno (bastam apenas algumas poucas horas, ou mesmo minutos, de simulação em um computador pessoal), e o número de parâmetros que podem ser ajustados e variados (e sua influência, pois, avaliada) a um tempo acessível é praticamente ilimitado quando comparado às possibilidades dos ensaios físicos. Nas palavras de dois dos mais renomados estudiosos dos materiais granulares da atualidade, “simulações computacionais não apenas pertencem aos mais importantes métodos de investigação teórica dos materiais granulares, como também provêm as ferramentas que têm permitido grande parte da pesquisa por parte dos físicos e engenheiros na área” (Pöschel e Schwager [4], capa posterior, em tradução livre do autor).

1.2 Por que este trabalho?

Este trabalho é uma introdução ao estudo dos materiais granulares por meio de modelos computacionais. Apresenta uma formulação, dentre as muitas possíveis, para tal propósito. Não se propõe de forma alguma a ser um tratado ou obra abrangente sobre o assunto, tampouco a ser extenso e demasiadamente rigoroso do ponto de vista formal. É, ao contrário e antes de tudo, um breve relato da experiência pessoal e dos desenvolvimentos conduzidos pelo autor ao se iniciar nesse tópico fascinante nos últimos (pouco mais de) três anos, a partir da realização de um estágio pós-doutoral na Universidade da Califórnia em Berkeley, EUA. A abordagem seguida procura ser simples e faz uso de um recorte confessadamente estreito, com a intenção de resultar em um texto que seja sucinto e acessível a quem eventualmente também deseje se iniciar no assunto. Apesar disso, um mínimo de formalismo está, sim, presente, além de algumas contribuições originais. Com relação a esse último aspecto, citam-se a descrição cinemática do movimento dos grãos, onde uma forma peculiar de descrever as rotações é utilizada², e o método de solução numérica das equações do movimento, que é uma generalização de um método proposto em Zohdi [5] para poder acomodar os graus de liberdade de rotação – além de pormenores que não cabe relacionar. Dito isso, o autor pede desculpas de antemão se determinadas passagens se mostrarem exageradamente simplificadas, ou se aspectos que mereceriam maior destaque ou que podem

² Observa-se que descrição semelhante também é proposta em Brasil [39], de forma independente e praticamente simultânea.

ser relevantes a determinado leitor forem tratados apenas superficialmente, ou forem até mesmo completamente ignorados. O autor espera poder contribuir, ainda que timidamente, para a disseminação de parte do conhecimento corrente sobre o assunto junto ao Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica da EPSUSP, e fomentar a nucleação de uma nova linha de pesquisa no âmbito do departamento, qual seja, a da modelagem computacional dos materiais granulares e suas diversas aplicações nas engenharias.

No estudo dos materiais granulares, os métodos computacionais mais utilizados pertencem à classe dos chamados *métodos de partículas*, sendo os mais conhecidos o método dos elementos discretos, os métodos de dinâmica molecular e o método da hidrodinâmica de partículas suavizado. Este trabalho faz uso do método dos elementos discretos. Uma formulação para ele será apresentada no Capítulo 2. A solução numérica das equações diferenciais correspondentes será o objeto do Capítulo 3, onde também serão discutidos aspectos relacionados à sua implantação computacional e à resolução dos contatos entre as partículas, incluindo a apresentação de algoritmos. O autor destaca que esses aspectos não são usualmente esmiuçados na literatura do método dos elementos discretos e, nesse sentido, espera poder contribuir para uma melhor apresentação dos mesmos junto às comunidades técnica e acadêmica, especialmente junto àqueles que pretendem se iniciar na modelagem desses materiais. Exemplos de validação e aplicação são apresentados no Capítulo 4 e, como fechamento, algumas conclusões e considerações são apresentadas no Capítulo 5.

1.3 Sobre o método dos elementos discretos

O método dos elementos discretos (MED) surgiu nos Estados Unidos no início dos anos 1970 com os trabalhos do engenheiro civil P. A. Cundall (Cundall [6] e [7]) para o exército americano, na tentativa de simular o movimento de blocos de rocha em maciços rochosos fragmentados. O método permaneceu relativamente desconhecido até 1979, quando apareceu pela primeira vez em um periódico acadêmico (dessa vez em coautoria com o professor O. D. L. Strack, da Universidade de Minnesota) em Cundall e Strack [8]. Esse trabalho é considerado, por praticamente toda a comunidade ligada ao uso e desenvolvimento do método, como o nascimento do MED. Em linhas gerais, a ideia central por trás do MED é a de que o comportamento mecânico de um material granular pode ser compreendido a partir do conhecimento do movimento individual de seus grãos. Essa não é, contudo, uma ideia original de Cundall. À época de seu trabalho seminal, já havia tentativas de descrever ou monitorar o movimento de conjuntos de discos e esferas por meio de modelos analíticos (Deresiewicz [9]) e experimentais (Dantu [10] apud Duran [3] e Wakabayashi [11]) (citando somente alguns) concebidos estritamente com esse propósito. A originalidade de Cundall foi tentar fazê-lo de forma numérica.

Em seu trabalho conjunto, Cundall e Strack descreveram detalhadamente o modelo idealizado em Cundall [6], com atenção especial a como representar as interações de contato e atrito entre os grãos por meio de forças – dadas, no caso, na forma de funções lineares dos deslocamentos (ou seja, na forma de “molas” de rigidez constante, caracterizando uma lei de penalidade ou, equivalentemente, uma equação constitutiva de contato e atrito). O movimento dos grãos foi descrito por equações triviais da mecânica

newtoniana, com solução realizada numericamente por meio de um método explícito de integração no tempo. Dissipação local (decorrente dos contatos e do atrito) e global (na forma de amortecimento sobre as velocidades e velocidades angulares) de energia foi considerada. Todas as expressões necessárias ao método de integração foram apresentadas em detalhes. Apesar de mencionarem que o método seria válido para elementos de qualquer forma geométrica, apenas discos e esferas foram tratados. Cundall e Strack chamaram o seu modelo de “método dos elementos distintos”, designação que, pouco tempo depois, daria lugar à atual (é oportuno comentar que o autor desconhece o motivo exato por trás disso; Cundall continuou utilizando a terminologia “elementos distintos” em todos os seus trabalhos subsequentes – como pode ser observado em um de seus artigos mais recentes, Potyondy e Cundall [12], além de em todos os outros lá citados – mas jamais conseguiu consolidá-la a contento: a designação “elementos discretos” tornou-se indiscutivelmente mais popular).

Apesar de reconhecido como pioneiro, Cundall não foi o único em sua época a tentar utilizar métodos numéricos para estudar o comportamento mecânico de conjuntos de discos e esferas. De forma totalmente independente e praticamente concomitante, porém separada geograficamente pelo Atlântico, Serrano e Rodriguez-Ortiz [13] desenvolveram na Espanha um método que em vários aspectos se assemelhou ao de Cundall. Com a distinção de terem considerado, para as forças de contato, uma mola ou penalidade com rigidez baseada na teoria de contato de Hertz, e para a força de atrito, uma mola ou penalidade com rigidez baseada na teoria de Mindlin para deformações tangenciais elásticas. A solução numérica proposta, contudo, fazia uso de matrizes (diferentemente do método de Cundall) e logo estava bastante mais limitada pela capacidade dos computadores da época. Ainda assim, os ingredientes básicos do MED podem ser observados nesse trabalho. O trabalho de Serrano e Rodriguez-Ortiz é reconhecido por Cundall e Strack como sendo uma das primeiras tentativas de utilizar métodos numéricos para estudar o comportamento de materiais granulares. Curiosamente, contudo, a comunidade acadêmica costuma ignorar a contribuição desses precursores, havendo eles praticamente caído no esquecimento fora de seu país de origem.

Hoje, passadas algumas décadas desde o seu surgimento, um grande número de formulações do MED pode ser encontrado na literatura, com aplicações aos mais variados fins. Pode-se até mesmo dizer que existem vários *métodos* dos elementos discretos, ainda que quase todos sejam na sua essência variações, generalizações ou releituras do método original, e ainda que muitos deles se autodenominem por outros nomes que não o MED, sem fazer qualquer menção à terminologia “MED”³. Já há, até mesmo, alguns programas comerciais com o método. Se, por um lado, isso comprova o sucesso do MED junto às comunidades técnica e científica ligadas ao estudo dos materiais granulares e suas aplicações, por outro deu ensejo a uma literatura extremamente variada, fragmentada e desconexa, o que contribuiu para uma falta de identidade e unidade formal ao método – para não mencionar a própria falta de consenso na sua denominação. Na visão do autor, os seguintes trabalhos devem ser citados como exemplos representativos de formulações competentes do MED (a lista é longe de ser exaustiva): Thornton [14], Munjiza et al. [15] e [16], Matuttis et al. [17], Owen e Feng [18], Rojek et al. [19], Avci e Wriggers [20], Lim e Andrade [21] e

³ Com efeito, existe uma infinidade de denominações, com vários autores cunhando a sua própria. As de “método das partículas discretas”, “método da dinâmica granular” e “método dos elementos granulares” são, contudo, mais comuns.

Zohdi [22].

Nos dias de hoje, fala-se já em *Extended Discrete Element Method (XDEM)*, para se referir a métodos que consideram, juntamente ao problema mecânico dos grãos, outras físicas, como efeitos térmicos e a interação com fluidos. Na opinião do autor, contudo, não se trata exatamente de um novo método, mas sim de modelos multifísicos, que tão somente juntam métodos preexistentes (e já consagrados) ao MED, fazendo o acoplamento de um problema de um meio discreto e puramente mecânico, descrito pelo MED, com outros de meios contínuos e governados por equações diferenciais próprias, descritos por métodos como o método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos, o método de *lattice*-Boltzmann, e vários outros. Em sua essência, a parte puramente discreta e mecânica do chamado *XDEM* continua a mesma do MED original, conforme proposto por seus engenhosos idealizadores nos idos anos 1970.

1.4 Notação

Ao longo de todo esse trabalho, grandezas escalares são designadas por letras minúsculas e maiúsculas em itálico e não negrito ($a, b, \dots, \alpha, \beta, \dots, A, B, \dots$). Vetores do espaço euclidiano tridimensional são designados por letras minúsculas em itálico e negrito ($\mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \dots$) (com duas exceções, indicadas no texto). E tensores de segunda ordem são designados por letras maiúsculas em itálico e negrito ($\mathbf{A}, \mathbf{B}, \dots$). Letras latinas maiúsculas em caracteres normais de texto (A, B, \dots) designam pontos materiais e pontos geométricos do espaço euclidiano.

2 Uma formulação do método dos elementos discretos

2.1 Considerações iniciais

O método dos elementos discretos não é exatamente um “método”, no sentido de possuir um conjunto de hipóteses, equações e procedimentos que lhe seja próprio ou particular. Difere, nesse sentido, de outros métodos numéricos utilizados na mecânica, como por exemplo, o método dos elementos finitos. Na visão do autor, o MED deve ser entendido mais como um *modelo* para a representação e o estudo de meios discretos. O MED se propõe a resolver numericamente as equações diferenciais da dinâmica dos sólidos rígidos para sistemas constituídos por um grande número desses sólidos (que são então chamados de “elementos discretos” ou “partículas”), suplementando-as com modelos fenomenológicos (por vezes *ad hoc*) para caracterizar as diversas forças que atuam sobre eles. É, nesse sentido, uma coletânea de conhecimentos teóricos previamente estabelecidos da mecânica dos sólidos, complementada por técnicas numéricas de integração de equações diferenciais e por técnicas de otimização (essas últimas necessárias à resolução dos contatos), também previamente estabelecidas. No estudo dos meios discretos, tais conhecimentos e técnicas estavam desconexos até o início dos anos 1970, quando foram então interligados nos trabalhos seminais de Cundall [6] e [7] e Cundall e Strack [8], na tentativa de construir um modelo para a simulação computacional do movimento de blocos de rocha em maciços rochosos fragmentados, como já mencionado no Capítulo 1. É nesse contexto que, na visão do autor, é mais adequado referir-se ao MED como um modelo e não um método⁴. Em todo caso, para ficar em consonância com a terminologia já consolidada na literatura, a designação “método dos elementos discretos” será utilizada neste trabalho.

Ao menos até o momento em que este trabalho foi escrito, e em parte pelas razões dadas acima, não existe na literatura uma referência que sistematize o MED em um conjunto coeso de hipóteses, definições, equações, técnicas numéricas e aspectos computacionais associados. Essa lacuna contribuiu para que haja uma enorme disparidade formal na maneira em que é apresentado pela comunidade científica (para não mencionar as suas particularizações a aplicações muito distintas entre si, o que agrava ainda mais a

⁴ À luz do que foi discutido na Seção 1.3, seria ainda mais apropriado referir-se ele como uma *classe de modelos*, e não simplesmente um modelo.

disparidade), sem que haja uma notação consolidada ou minimamente comum a toda a comunidade. A formulação apresentada neste capítulo reflete a visão presente do autor sobre o MED quando aplicado ao estudo dos materiais granulares secos. Não se propõe a ser completa, posto que é desenvolvida com vistas à simulação computacional de uma classe particular de problemas, além do que, mesmo dentro desse recorte, ainda comporta inúmeros avanços. Mas pretende ter certa generalidade, unidade e algum (porém não demasiado) rigor formal, com vistas a contribuir no preenchimento da lacuna mencionada acima e assim servir de apoio àqueles que desejam se iniciar na modelagem dos materiais granulares.

No contexto do MED, um elemento discreto, doravante chamado de partícula, pode ser definido como matéria concentrada homogeneamente em uma determinada forma geométrica (esfera, elipsoide, superelipsoide, etc), admitida infinitamente rígida, a qual é representada no espaço tridimensional por um ponto (o seu centro de massa), uma orientação angular, e um ou mais parâmetros geométricos relacionados à sua forma e dimensão (no caso de esferas, o raio). O fato de ser infinitamente rígida implica que a partícula mantém a sua forma e dimensão ao longo do tempo. A influência de outras partículas e do meio externo sobre o seu movimento é representada por meio de forças. Essas considerações permitem identificar uma partícula com um sólido rígido – embora seja no mínimo curioso observar que tal identificação não costuma ser explicitamente declarada na literatura do MED. Admite-se, então, que são válidos os princípios da mecânica dos sólidos rígidos (a saber, os conceitos de espaço físico e espaço geométrico, o princípio do tempo absoluto, o princípio das forças de volume e de superfície, o princípio da inércia, o princípio da conservação da massa, as leis de Euler e o princípio da ação e reação), de maneira que o movimento de uma partícula possa ser inteiramente descrito por meio das equações da mecânica dos sólidos rígidos. De certa forma, essa hipótese é razoavelmente válida mesmo para partículas de dimensões quase atômicas, sendo por isso também admitida no campo da dinâmica molecular, nos chamados métodos ou modelos de dinâmica molecular (MDM).

Nesse ponto, é oportuno fazer um comentário acerca da semelhança entre o MED e os MDM. Os MDM se referem a modelos matemáticos de sistemas de átomos e moléculas onde cada átomo (ou molécula) é idealizado como um ponto material, de massa conhecida e cujo movimento é governado pelas equações da mecânica clássica newtoniana. As interações entre os átomos (ou moléculas) são dadas por meio de potenciais de força, com aplicações na modelagem de sólidos, líquidos e gases. À parte da diferença na dimensão das partículas – tipicamente da ordem de nanômetros nos MDM, mas podendo ir de nanômetros a centímetros ou até mesmo metros no MED –, na visão do autor a única diferença entre os dois métodos é a forma de caracterização das forças. O MED não costuma fazer uso de potenciais. Uma consequência direta é que as partículas podem efetivamente entrar em contato físico, e a resolução dos contatos se torna, de longe, a questão dominante. Já nos MDM, os potenciais de força geralmente previnem que as partículas se toquem, por envolverem forças repulsivas suficientemente elevadas quando elas se tornam muito próximas entre si. O leitor interessado em uma introdução aos MDM pode consultar os livros clássicos de Rapaport [23] e Haile [24]. Já para um visão geral do MED, incluindo perspectivas diferentes da que é adotada neste trabalho, refere-se a Bicanic [25] (onde alguns aspectos computacionais relevantes ao método são apresentados e discutidos), O'Sullivan [26] (em que é traçado um excelente

panorama e avaliação crítica sobre a aplicação do método no estudo de solos e materiais geotécnicos), Zhu et al. [27] e [28] (em que uma vasta revisão do estado da arte é apresentada, incluindo teoria e aplicação a problemas das diferentes engenharias) e os diversos trabalhos de T. Zohdi e seu grupo que se seguiram a Zohdi [5] (esses últimos, apesar de não fazerem uso da terminologia “MED”, constituem claramente modelos de elementos discretos aplicados à simulação de materiais granulares e de processos de manufatura em que são utilizados).

A formulação do MED apresentada a seguir possui algumas distinções que convém destacar. Primeiro, utiliza uma parametrização vetorial para descrever a rotação das partículas (o que permite que as rotações sejam representadas formalmente de maneira idêntica aos deslocamentos, i.e., por meio de vetores, além de evitar o uso de entidades complexas como os ângulos de Euler, ou que não têm significado geométrico, como os quatérnions). Segundo, procura se concentrar essencialmente na física das partículas, i.e. nos aspectos relacionados à sua cinemática e dinâmica, evitando por ora misturá-los aos aspectos computacionais relativos à solução numérica de suas equações (essa última é tratada separadamente, no Capítulo 3) (essa característica não é comumente observada na literatura do MED e algumas vezes acarreta, na visão do autor, certa confusão entre a física que governa um sistema de partículas e os métodos numéricos utilizados para resolvê-la). Terceiro, procura incorporar algum (porém não demasiado) rigor formal, como já comentado acima, o que, curiosamente, também não é comumente observado na literatura do MED.

Neste trabalho, consideram-se apenas partículas esféricas. Isso permite apresentar uma formulação do MED que é ao mesmo tempo simples e suficientemente geral, e que pode servir de base para desenvolvimentos subsequentes. A consideração de partículas com outras formas geométricas pode ser feita sem maiores dificuldades conceituais, sendo para isso necessário apenas que se considere o tensor de inércia correspondente às formas geométricas consideradas (e sua eventual variação ao longo do tempo), e que os contatos sejam descritos (e resolvidos) por equações correspondentes a essas formas. No caso de partículas esféricas, como se verá mais adiante, a descrição do contato é bastante simples, envolvendo apenas equações algébricas. Já no caso de partículas com outras formas geométricas, frequentemente envolve a solução de um problema de minimização (com vistas a encontrar o ponto de contato) que por sua vez em geral não possui forma analítica, e logo requer o uso de métodos numéricos. Nesse sentido, a consideração de partículas não esféricas acarreta mais um ônus computacional do que uma dificuldade conceitual ao MED. Por esse motivo, e com a intenção de apresentar uma formulação do método que seja simples, mas que sirva de base para desenvolvimentos subsequentes, este trabalho se restringe a sistemas de partículas esféricas.

No que segue, antes de se adentrar a formulação do MED propriamente dita, faz-se uma breve apresentação da parametrização vetorial utilizada para descrever as rotações das partículas.

2.2 Descrição vetorial das rotações

A descrição das rotações no espaço tridimensional é um tópico clássico da mecânica e remonta aos trabalhos de L. Euler (1707-1783) e O. Rodrigues (1795-1851), ainda nos séculos XVIII e XIX. Apesar

disso, foi somente após a notável contribuição de J. Argyris (1913-2004) [29] no início dos anos 1980, que muito do conhecimento que se tem hoje sobre as rotações pode ser mais bem compreendido e utilizado em aplicações práticas – em grande parte devido às possibilidades abertas pela evolução dos computadores e pelo aprofundamento de diversos métodos numéricos, em particular, o método dos elementos finitos. Uma rotação finita em três dimensões é descrita por um operador vetorial ortogonal que possui um isomorfismo com um tensor de segunda ordem, o chamado tensor das rotações ou tensor rotação. Esse tensor, sendo ortogonal, pode ser representado por um número de parâmetros independentes inferior ao seu número total de componentes, que é nove. Desde que uma certa limitação na magnitude das rotações entre duas configurações consecutivas seja tolerada (esse aspecto será discutido logo mais adiante), o número de parâmetros independentes pode ser reduzido a três. Nesses casos, a parametrização é chamada de *vetorial*. Uma parametrização vetorial é bastante atrativa, não apenas pela simplicidade e eficiência computacional, mas também porque permite que as rotações sejam descritas por graus de liberdade que têm forma idêntica aos das translações, i.e., a forma de vetores.

Vários tipos de parametrizações vetoriais existem na mecânica. Os mais conhecidos são aqueles que empregam os ângulos de Euler, o vetor rotação (por vezes também chamado de vetor rotação de Euler⁵) ou um vetor de mesma direção e sentido que o vetor rotação (ou, equivalentemente, que o eixo unitário de rotação), mas de magnitude diferente. A parametrização com ângulos de Euler (remete-se ao livro clássico de Goldstein [30] para detalhes) é bastante utilizada nas áreas de mecânica quântica, aeronáutica e robótica. Define uma rotação finita como sendo a composição de três rotações consecutivas em torno, respectivamente, de três eixos arbitrários pré-definidos. Embora consistente e elegante, possui algumas desvantagens: necessita de um sistema de eixos próprio; envolve diversas (e razoavelmente longas) expressões trigonométricas para compor as três rotações, com suas eventuais singularidades; requer cuidados devido à não unicidade da ordem da composição (de fato, há doze sequências de composições possíveis, cada uma conduzindo a uma expressão diferente para o tensor das rotações); requer a extração dos ângulos de Euler a partir do tensor rotação resultante (o que pode não ser trivial); e requer cuidados quando duas das rotações intermediárias resultam com eixos alinhados (o que pode conduzir à perda de um grau de liberdade).

A parametrização com o vetor rotação ou vetor rotação de Euler, por sua vez, é livre de boa parte dessas desvantagens. Um atrativo adicional é que ela é baseada no próprio eixo de rotação, ao invés de empregar eixos arbitrários pré-definidos. Por outro lado, não é livre de expressões trigonométricas (e suas eventuais singularidades), e tampouco do fato de que a composição de rotações sucessivas requer a utilização do tensor rotação. Esse último aspecto tem duas implicações do ponto de vista computacional: primeiro por ter de lidar com tensores e operações tensoriais, segundo porque o vetor rotação referente à rotação total precisa ser extraído do tensor rotação resultante – operação que, além do mais, não é trivial.

⁵ Embora Euler jamais tenha trabalhado com vetores, essa designação não é desprovida de sentido. Euler trabalhou com grandezas escalares que posteriormente foram identificadas como os cossenos diretores do eixo de rotação, suplementadas pela magnitude da rotação, i.e., utilizou os mesmos parâmetros que definem o vetor rotação (ver, por exemplo, Cheng e Gupta [31]). Com eles, e com a ajuda de mais três cossenos diretores conhecidos, chegou a expressões que correspondem exatamente à forma escalar da aplicação da fórmula da rotação, a chamada fórmula de Euler-Rodrigues. O uso da terminologia “vetor rotação de Euler”, pois, é pertinente – além de ser uma justa homenagem ao matemático suíço.

A parametrização com um vetor de mesma direção e sentido que o vetor rotação, mas de magnitude diferente, pode eliminar essas desvantagens – desde que uma magnitude particular, como a mostrada a seguir, seja utilizada. Ao mesmo tempo em que preserva a vantagem de ser baseada no eixo de rotação (e não em eixos arbitrários pré-definidos), pode resultar em expressões com um menor número de funções trigonométricas. Nesse sentido, a parametrização apresentada nesta seção faz uso do chamado de vetor rotação de Rodrigues⁶.

Seja $\theta = \theta e$ o vetor rotação (ou vetor rotação de Euler) correspondente a uma rotação arbitrária de magnitude θ em torno do eixo e ($\|e\| = 1$) no espaço tridimensional. Um vetor qualquer v , quando rotacionado de θ em torno de e , é transformado em u de acordo com $u = Qv$, onde Q é o tensor rotação. Esse tensor, quando escrito em função de θ , é dado pela conhecida fórmula da rotação ou fórmula de Euler-Rodrigues,

$$Q = I + \frac{\sin \theta}{\theta} \Theta + \frac{1 - \cos \theta}{\theta^2} \Theta^2, \quad (2.1)$$

onde $\Theta = \text{Skew}(\theta)$ é o tensor antissimétrico cujo vetor axial é θ , i.e.,

$$\Theta = \text{Skew}(\theta) = \begin{bmatrix} 0 & -\theta_3 & \theta_2 \\ \theta_3 & 0 & -\theta_1 \\ -\theta_2 & \theta_1 & 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \theta = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \theta_3 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Inserindo as identidades trigonométricas

$$\sin \theta = 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \quad \text{e} \quad 1 - \cos \theta = 2 \sin^2(\theta/2) \quad (2.3)$$

em (2.1), tem-se

$$Q = I + \frac{2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)}{\theta} \Theta + \frac{2 \sin^2(\theta/2)}{\theta^2} \Theta^2, \quad (2.4)$$

e considerando que

$$\cos^2(\theta/2) = \frac{1}{1 + \tan^2(\theta/2)}, \quad (2.5)$$

a seguinte expressão é obtida

$$Q = I + \frac{2}{1 + \tan^2(\theta/2)} \left[\frac{\tan(\theta/2)}{\theta} \Theta + \frac{\tan^2(\theta/2)}{\theta^2} \Theta^2 \right]. \quad (2.6)$$

Seja agora $\beta = \tan(\theta/2)e$ o vetor rotação de Rodrigues, tal que $\|\beta\| = \beta = \tan(\theta/2)$ e

$$\beta = \frac{\tan(\theta/2)}{\theta} \theta \quad (2.7)$$

⁶ Assim como Euler, Rodrigues também jamais trabalhou com vetores; utilizou, porém, expressões escalares cujos parâmetros independentes são exatamente as três componentes do que é hoje chamado de vetor rotação de Rodrigues.

(remete-se ao trabalho de Argyris [29] e ao excelente registro histórico de Cheng e Gupta [31] para uma discussão mais detalhada acerca do vetor rotação de Rodrigues, bem como dos chamados “parâmetros de Rodrigues”, que são as três componentes desse vetor; citam-se também os trabalhos relativamente mais recentes de Ibrahimbegovic [32] e Ritto-Correa [33], além de trabalhos anteriores do autor como Campello [34] e Pimenta e Campello [35] e [36]. O vetor rotação de Rodrigues é um vetor paralelo ao vetor rotação de Euler (ou, equivalentemente, ao eixo de rotação), e com ele a expressão (2.6) pode ser reescrita da seguinte forma

$$Q = I + \frac{2}{1 + \beta^2} (\mathbf{B} + \mathbf{B}^2), \quad (2.8)$$

onde $\mathbf{B} = \text{Skew}(\boldsymbol{\beta})$ é o tensor antissimétrico cujo vetor axial é $\boldsymbol{\beta}$. A expressão (2.8) é conhecida como a parametrização de Rodrigues do tensor rotação. Essa parametrização não é global, visto que não consegue representar rotações de magnitude $\theta = \pm\pi$, pois nesses casos $\beta \rightarrow \pm\infty$. No entanto, apresenta duas vantagens: (1) envolve um número menor de funções trigonométricas (o que é relevante do ponto de vista computacional) e (2) permite que a composição de rotações sucessivas, digamos, Q_1 e Q_2 , seja efetuada por meio de uma expressão extremamente simples e puramente vetorial, a chamada fórmula da composição de rotações de Rodrigues, indicada abaixo:

$$\boldsymbol{\beta}_{1+2} = \frac{1}{1 - \boldsymbol{\beta}_1 \cdot \boldsymbol{\beta}_2} (\boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\beta}_2 - \boldsymbol{\beta}_1 \times \boldsymbol{\beta}_2). \quad (2.9)$$

Em (2.9), $\boldsymbol{\beta}_1$ e $\boldsymbol{\beta}_2$ são os vetores rotação de Rodrigues associados a Q_1 e Q_2 respectivamente, e $\boldsymbol{\beta}_{1+2}$ é o vetor rotação de Rodrigues associado à rotação total $Q_{1+2} = Q_2 Q_1$. O uso dessa expressão traz vantagens importantes. Primeiro, porque elimina operações algébricas com tensores, melhorando o desempenho computacional (esse aspecto é especialmente relevante quando se lida com sistemas dinâmicos, em que a discretização no domínio do tempo implica que as rotações devem ser sucessivamente acumuladas, i.e., compostas, nos diversos instantes de tempo). Segundo, porque fornece diretamente o vetor rotação $\boldsymbol{\beta}_{1+2}$, evitando-se que ele tenha que ser extraído de Q_{1+2} – operação que, como já dito, não é trivial –, o que também acaba por melhorar o desempenho computacional. A utilização da fórmula da composição de Rodrigues só é possível quando o tensor das rotações é parametrizado por meio do vetor rotação de Rodrigues, ou por um múltiplo desse.

Seja $\boldsymbol{\alpha} = 2\boldsymbol{\beta}$ um múltiplo do vetor rotação de Rodrigues, com $\|\boldsymbol{\alpha}\| = \alpha = 2 \tan(\theta/2)$, tal que

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{\tan(\theta/2)}{(\theta/2)} \boldsymbol{\theta}. \quad (2.10)$$

Esse vetor foi utilizado pelo autor em Campello [34] e Pimenta e Campello [35] no contexto da cinemática de barras, e também em Pimenta et al. [37] e Campello et al. [38] no contexto da dinâmica de barras e cascas. Ele conduz à seguinte expressão para o tensor rotação:

$$Q = I + \frac{4}{4 + \alpha^2} \left(\mathbf{A} + \frac{1}{2} \mathbf{A}^2 \right), \quad (2.11)$$

onde $A = \text{Skew}(\alpha)$, e à seguinte expressão para a fórmula da composição de rotações:

$$\alpha_{1+2} = \frac{4}{4 - \alpha_1 \cdot \alpha_2} \left(\alpha_1 + \alpha_2 - \frac{1}{2} \alpha_1 \times \alpha_2 \right). \quad (2.12)$$

Conforme evidenciado nas referências logo acima mencionadas, o uso de α conduz a expressões para o vetor velocidade angular (e suas derivadas espaciais) que são ligeiramente mais compactas do que aquelas obtidas com o uso de β . O vetor α é o vetor rotação que será utilizado na formulação do MED apresentada neste capítulo. É oportuno mencionar que a parametrização com α foi também proposta, de forma independente e praticamente simultânea, em Brasiel [39], como já dito no Capítulo 1.

Nota. A restrição de que a magnitude das rotações deve ser inferior a π não chega a configurar, para os propósitos pretendidos neste trabalho, uma desvantagem dessa parametrização. No MED, a solução das equações que governam o movimento das partículas é feita por integração numérica, o que implica a discretização do tempo em instantes. Se, entre dois instantes consecutivos, a descrição do movimento for do tipo lagrangiana atualizada (como é o caso da formulação apresentada a seguir), as rotações serão compostas somente entre esses dois instantes, de maneira que a restrição deverá ser obedecida apenas entre eles – o que não é difícil de ser atendido, já que os passos de integração dificilmente (ou até mesmo jamais) serão grandes o suficiente para ocasionar uma violação.

Nota. Convém destacar que parametrizações não vetoriais para as rotações também são possíveis – e, de fato, utilizadas em um grande número de formulações do MED encontradas na literatura. Nesse sentido, a parametrização com quatérnions é sem dúvida a mais comum (ver, por exemplo, as formulações de Omelyan [40], Pöschel e Schwager [4], Rubio-Largo et al. [41] e Servin e Wang [42], para citar somente algumas). Os quatérnions foram idealizados por W. Hamilton (1805-1865) em meados do século XIX, no contexto dos números complexos e sua representação em espaços euclidianos tridimensionais, na tentativa de construir uma álgebra para a multiplicação e divisão de triplas de números. Imediatamente, A. Cayley (1821-1895) percebeu a sua conexão com a parametrização empregada por Rodrigues na dedução da fórmula da composição das rotações, encontrando-lhe uma aplicação bastante importante. O uso dos quatérnions conduz a expressões algébricas extremamente simples na manipulação das rotações – uma grande vantagem sobre as parametrizações vetoriais. Traz contudo, algumas desvantagens. Primeiro, os quatérnions são entidades puramente algébricas, sem o significado geométrico que têm os vetores (um quatérnion não pode ser “visualizado” no espaço euclidiano, embora contenha a informação de um vetor). Segundo, utilizam quatro parâmetros para representar a rotação, ao invés de três como os vetores. Terceiro, seus quatro parâmetros precisam obedecer a uma restrição, a saber, a de que a soma de seus quadrados deve ser igual à unidade, para que possam representar uma rotação (apesar de aparentemente simples, essa restrição não é fácil de ser satisfeita em aplicações numéricas). E, por fim, a extração de um quatérnion a partir de um tensor rotação não é uma operação trivial. Ainda assim, devido à sua grande simplicidade algébrica, os quatérnions são bastante utilizados na

manipulação de rotações finitas, nas mais variadas aplicações. Na opinião do autor, o uso da parametrização vetorial com o vetor de Rodrigues, por permitir a fácil composição de rotações com a fórmula (2.9) ou (2.12), compensa as vantagens advindas da parametrização com quatérnions. Com o benefício adicional de que permite que as rotações sejam descritas da mesma maneira que as translações, i.e., por meio de vetores, o que além de ser formalmente atraente é também vantajoso do ponto de vista computacional. A única desvantagem, lembra-se, é a de que as rotações devem ser limitadas a π entre duas configurações consecutivas.

2.3 Cinemática e dinâmica de uma partícula

Esta seção se concentra na unidade básica de um sistema de partículas. Busca descrever o movimento de uma partícula individual no espaço tridimensional, e as forças nele envolvidas. Para tanto, considere-se uma partícula esférica de raio r e massa específica ρ conhecidos. Seja $\{O, e_1, e_2, e_3\}$ um sistema de referência fixo, com origem no ponto O e base ortonormal $\{e_1, e_2, e_3\}$, chamado de sistema global, e seja $\{C, e_1^\ell, e_2^\ell, e_3^\ell\}$ um sistema de referência móvel vinculado à partícula, com origem em seu centro C e base ortonormal $\{e_1^\ell, e_2^\ell, e_3^\ell\}$, chamado de sistema local da partícula (esse sistema se move solidária e rigidamente à partícula), conforme ilustrado na Figura 2. Considere-se um observador que contém o sistema global⁷, e sejam (x_1, x_2, x_3) (ou, indistintamente, (x, y, z)) as coordenadas em cada uma das direções desse sistema. No instante t_R , a partícula ocupa uma determinada região do espaço, denominada de configuração de referência, sendo $t_0 \leq t_R < t_F$, onde t_0 é o instante correspondente à sua configuração inicial e t_F o correspondente à sua configuração final. Num instante posterior qualquer t , $t_R < t \leq t_F$, ocupa a região denominada de configuração atual.

Seja x_C^r o vetor posição do centro da partícula na configuração de referência, com a notação $(\cdot)^r$ sendo introduzida para designar grandezas na configuração de referência, e seja α^r o vetor rotação de Rodrigues da partícula nessa configuração, responsável por fornecer a orientação espacial da partícula em relação à configuração inicial. É importante observar que, embora a partícula seja esférica e portanto tenha orientação espacial irrelevante, o conhecimento de sua rotação entre as configurações de referência e atual pode ser necessário, já que a ação de forças que têm excentricidade em relação ao seu centro pode induzir o seu giro – fato que deve ser considerado na descrição de seu movimento. A rotação observada entre essas duas configurações é representada aqui pelo vetor rotação incremental (de Rodrigues), α^Δ . Já a rotação total (i.e., aquela em relação à configuração inicial) é representada pelo vetor rotação total α , que pode ser obtido fazendo-se a composição de α^r e α^Δ por meio de (2.12).

A posição de um ponto material genérico da partícula na configuração de referência é expressa por

$$x^r = x_C^r + r^r, \quad (2.13)$$

onde r^r é o vetor que liga o centro C ao ponto, conforme ilustrado na Figura 2. Na configuração atual, a posição desse ponto é dada por

⁷ No que segue, todas as grandezas serão definidas em relação a esse observador.

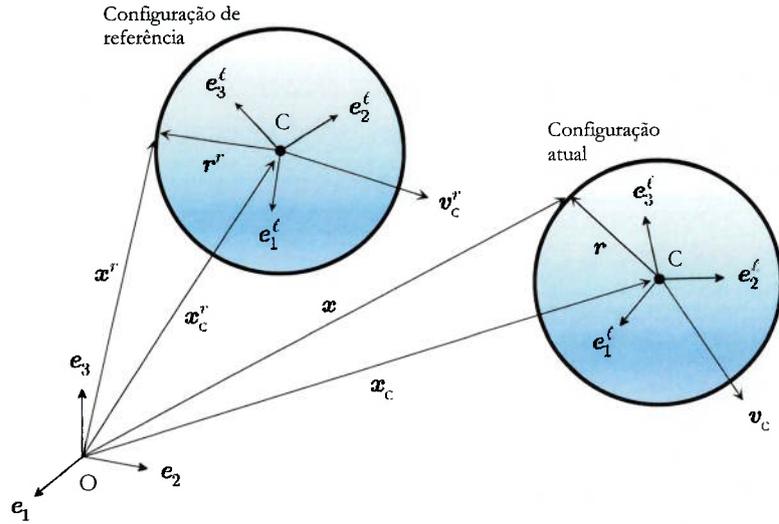


Figura 2. Cinemática de uma partícula. Por simplicidade, os vetores de rotação e velocidade angular não estão representados.

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_c + \mathbf{r}, \quad (2.14)$$

onde

$$\mathbf{r} = \mathbf{Q}_\Delta \mathbf{r}^r, \quad (2.15)$$

sendo \mathbf{Q}_Δ o tensor rotação que descreve a rotação da partícula entre as duas configurações, dado de (2.11) por

$$\mathbf{Q}_\Delta = \mathbf{I} + \frac{4}{4 + \alpha_\Delta^2} \left(\mathbf{A}_\Delta + \frac{1}{2} \mathbf{A}_\Delta^2 \right), \quad (2.16)$$

onde $\alpha_\Delta = \|\boldsymbol{\alpha}^\Delta\|$ e $\mathbf{A}_\Delta = \text{Skew}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta)$. A velocidade do ponto genérico na configuração atual, \mathbf{v} , é dada pela derivada no tempo de (2.14), o que fornece

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}_c + \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_c + \dot{\mathbf{Q}}_\Delta \mathbf{Q}_\Delta^T \mathbf{r} = \mathbf{v}_c + \boldsymbol{\Omega} \mathbf{r}, \quad (2.17)$$

onde $\mathbf{v}_c = \dot{\mathbf{x}}_c$ é a velocidade do centro da partícula (com a notação de ponto superposto sendo utilizada para designar derivação em relação ao tempo) e $\boldsymbol{\Omega} = \dot{\mathbf{Q}}_\Delta \mathbf{Q}_\Delta^T$ é o tensor velocidade angular da partícula. Nota-se que $\boldsymbol{\Omega}$ é antissimétrico, e portanto possui um vetor axial, designado por $\boldsymbol{\omega} = \text{axial}(\boldsymbol{\Omega})$, chamado de vetor velocidade angular da partícula. É possível mostrar, a partir de (2.16) (e após alguns algebrismos) que

$$\boldsymbol{\omega} = \text{axial}(\dot{\mathbf{Q}}_\Delta \mathbf{Q}_\Delta^T) = \frac{4}{4 + \alpha_\Delta^2} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} \mathbf{A}_\Delta \right) \dot{\boldsymbol{\alpha}}^\Delta = \boldsymbol{\Xi}_\Delta \dot{\boldsymbol{\alpha}}^\Delta. \quad (2.18)$$

Assim, pode-se escrever (2.17) também da seguinte forma:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_c + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (2.19)$$

A aceleração do ponto genérico na configuração atual, \mathbf{a} , é dada pela derivada no tempo de (2.17), o que fornece

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}}_c + \dot{\boldsymbol{\Omega}}\mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega}\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{a}_c + \dot{\boldsymbol{\Omega}}\mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega}(\dot{\mathbf{Q}}_\Delta \mathbf{Q}_\Delta^T \mathbf{r}) = \mathbf{a}_c + \dot{\boldsymbol{\Omega}}\mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega}^2 \mathbf{r}, \quad (2.20)$$

onde $\mathbf{a}_c = \dot{\mathbf{v}}_c$ é a aceleração do centro da partícula e $\dot{\boldsymbol{\Omega}}$ é o tensor aceleração angular da partícula, que, assim como $\boldsymbol{\Omega}$, também é antissimétrico, tendo como vetor axial o vetor $\dot{\boldsymbol{\omega}} = \text{axial}(\dot{\boldsymbol{\Omega}})$, chamado de vetor aceleração angular da partícula. Logo, a expressão (2.20) pode também ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_c + \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}). \quad (2.21)$$

O momento linear da partícula na configuração atual, $\boldsymbol{\lambda}$, é dado, com a ajuda de (2.19), por

$$\boldsymbol{\lambda} = \int_V \rho \mathbf{v} dV = \int_V \rho \mathbf{v}_c dV + \int_V \rho (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) dV = m \mathbf{v}_c, \quad (2.22)$$

onde V é o volume da partícula (que é constante no tempo por hipótese, já que a partícula é um sólido rígido) e

$$m = \int_V \rho dV \quad (2.23)$$

é a sua massa (também constante por hipótese, já que valem os princípios da mecânica dos sólidos rígidos). Observa-se que em (2.22) uma das parcelas na segunda igualdade se anula, em virtude de o vetor \mathbf{r} ser definido em relação ao centro da partícula, que é também o seu centro de massa.

O momento angular da partícula em relação ao seu centro na configuração atual, $\boldsymbol{\mu}_c$, é dado por (com a ajuda de (2.14) e (2.19), e após algumas manipulações algébricas)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_c &= \int_V (\mathbf{x} \times \rho \mathbf{v}) dV = \mathbf{x}_c \times \int_V \rho (\mathbf{v}_c + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) dV + \int_V \mathbf{r} \times \rho (\mathbf{v}_c + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) dV \\ &= \mathbf{x}_c \times m \mathbf{v}_c + \mathbf{J}_c \boldsymbol{\omega}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde

$$\mathbf{J}_c = \int_V \rho [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{I} - \mathbf{r} \otimes \mathbf{r}] dV \quad (2.25)$$

é o tensor de inércia da partícula em relação a C, que por ser esférica é constante no tempo e resulta

$$\mathbf{J}_c = j \mathbf{I}, \quad j = \frac{2}{5} m r^2. \quad (2.26)$$

Em (2.25), \mathbf{I} é o tensor identidade e o símbolo “ \otimes ” denota produto tensorial. De (2.22) e (2.24), decorre que a derivada no tempo dos momentos linear e angular resulta em

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = m \mathbf{a}_c \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\mu}}_c = j \dot{\boldsymbol{\omega}}. \quad (2.27)$$

Seja agora \mathbf{f}^{tot} o vetor que agrupa as forças e as resultantes de forças que atuam sobre a partícula na configuração atual, chamado de vetor das forças totais (cujo ponto de atuação é o centro da partícula), e seja \mathbf{m}_c^{tot} o vetor que agrupa os momentos e as resultantes de momentos que atuam sobre a partícula em relação ao seu centro também na configuração atual, chamado de vetor dos momentos totais em relação a C. De acordo com as leis de Euler, as seguintes relações devem ser satisfeitas na configuração atual:

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{f}^{tot} \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\mu}}_c = \mathbf{m}_c^{tot}, \quad (2.28)$$

que, com a ajuda de (2.27), conduzem às seguintes equações do movimento, que governam a dinâmica da partícula:

$$m\mathbf{a}_c = \mathbf{f}^{tot} \quad \text{e} \quad \mathbf{j}\dot{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{m}_c^{tot}. \quad (2.29)$$

Deve-se observar que a descrição do movimento apresentada acima é do tipo lagrangiana generalizada, uma vez que a configuração de referência não necessariamente se confunde com a configuração inicial. De fato, no próximo capítulo, quando se proceder à solução numérica de (2.29), o tempo será discretizado em instantes $\{0, t_1, t_2, \dots, t_i, t_{i+1}, \dots, t_F\}$ e, entre duas configurações consecutivas, correspondentes por exemplo a t_i e t_{i+1} , a configuração de referência será tomada como sendo aquela correspondente a t_i . Essa abordagem conduz a uma descrição que é do tipo lagrangiana atualizada.

Nota. A consideração de partículas não esféricas acarreta uma cinemática apenas ligeiramente mais elaborada, mas que segue os mesmos passos apresentados nesta seção. Nesses casos, recomenda-se definir o momento angular em relação ao centro de massa da partícula (da mesma forma como feito acima), o que simplifica as expressões. O tensor de inércia, naturalmente, deve ser calculado para a forma geométrica considerada, por meio de (2.25) (recomenda-se adotar eixos locais alinhados com os eixos principais da partícula, o que simplifica a sua expressão). No caso geral, \mathbf{J}_c não resulta constante no tempo, e esse aspecto exige um pouco mais de atenção quando se efetua a derivada no tempo do momento angular, com vistas à obtenção de expressões análogas a (2.27). Um artifício conveniente é utilizar uma descrição ligeiramente diferente para a parcela angular do movimento, em que a velocidade angular e o tensor de inércia são retrorrotacionados para a configuração de referência, onde são invariáveis no tempo; ver Pimenta et al. [37] e Campello et al. [38]. À parte disso, a cinemática e a dinâmica são exatamente as mesmas das que são apresentadas aqui.

2.4 Sistemas de várias partículas

Para descrever sistemas de várias de partículas, uma pequena modificação na notação é feita em relação à seção anterior. O índice alfabético, utilizado para designar o ponto a que algumas grandezas se referem (como, por exemplo, o índice C do vetor \mathbf{x}_c), será substituído por um índice numérico, indicando o número da partícula a que se refere a grandeza. Em se tratando de grandezas referentes a um ponto, subentende-se doravante que esse ponto é o centro da partícula (para se referir a outros pontos, notação específica será introduzida onde necessário). Assim, \mathbf{x}_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) passa a designar o vetor

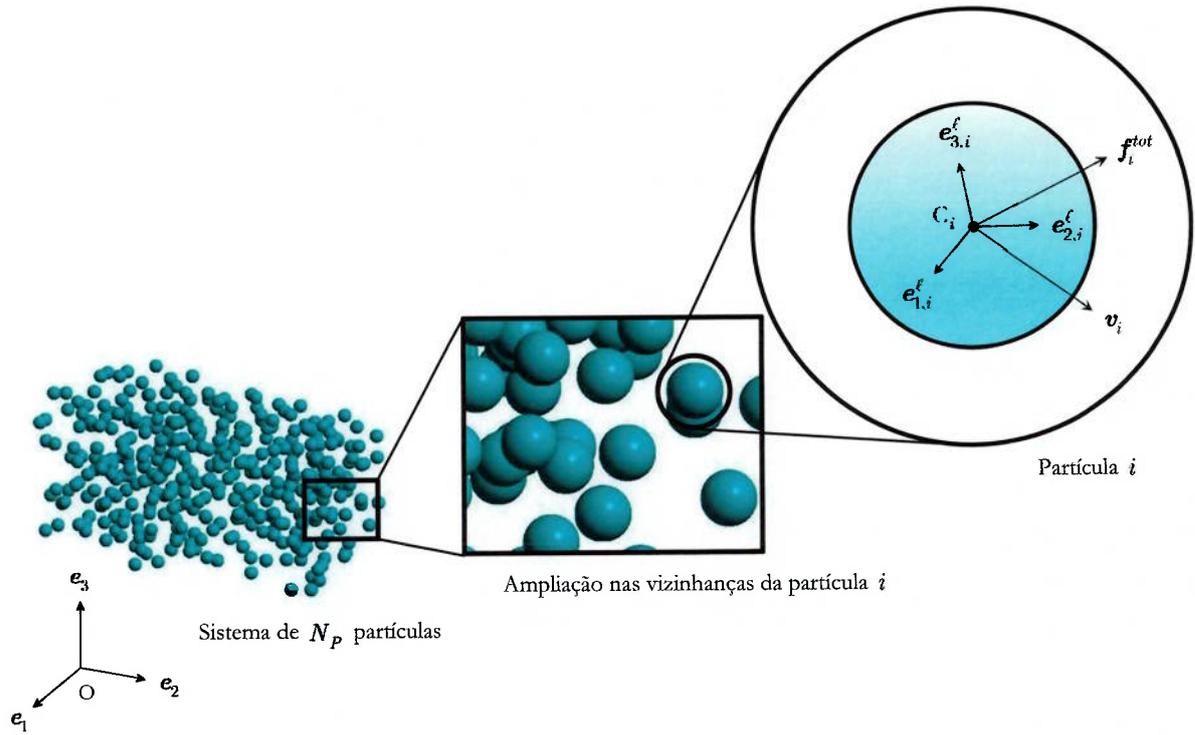


Figura 3. Sistemas de várias partículas. Representação de uma partícula genérica i . O centro da partícula é designado por C_i e o seu sistema local por $\{e_{1,i}^l, e_{2,i}^l, e_{3,i}^l\}$. Por simplicidade, os vetores posição, rotação, velocidade angular e aceleração não estão representados.

posição do centro da partícula i na configuração atual, e v_i e a_i o vetor velocidade e o vetor aceleração, respectivamente, do seu centro nessa mesma configuração. Além disso, grandezas que anteriormente foram introduzidas sem índice (por se tratarem de grandezas da partícula e não de um ponto da mesma, como é o caso do vetor rotação incremental α^A), serão agora designadas com o índice numérico da partícula a que se referem. Dessa forma, α_i^A , ω_i e $\dot{\omega}_i$ são, respectivamente, o vetor rotação incremental, o vetor velocidade angular e o vetor aceleração angular da partícula i na configuração atual.

Considere-se um sistema de N_p partículas esféricas imersas em um determinado meio, cada uma com raio r_i , massa específica ρ_i e carga elétrica q_i ($i = 1, \dots, N_p$) conhecidos, conforme ilustrado na Figura 3. O centro de cada partícula é designado por C_i . Admitindo que o meio é fluido e inerte, e que tem densidade e viscosidade conhecidas, as forças que atuam sobre uma partícula genérica i podem ser agrupadas no vetor de forças resultantes ou forças totais da partícula, f_i^{tot} , dado por

$$f_i^{tot} = f_i^{ce} + f_i^{arr} + f_i^{at-rep} + f_i^{ad} + f_i^{con} + f_i^{atr}, \quad (2.30)$$

onde f_i^{ce} é a resultante das forças de campos externos exercidos sobre i (forças de campos gravitacionais, elétricos e/ou magnéticos exteriores existentes no local onde o sistema se encontra), f_i^{arr} é a força de arrasto exercida pelo meio sobre i (decorrente da densidade e da viscosidade do meio), f_i^{at-rep} é a resultante das forças de atração e repulsão que atuam sobre i (devido à interação de i com outras partículas), f_i^{ad} é a resultante das forças de adesão sobre i (adesão a outras partículas e/ou a superfícies rígidas), f_i^{con} é a resultante das forças normais de contato mecânico sobre i (contato ou colisão com

outras partículas e/ou com superfícies rígidas) e \mathbf{f}_i^{atr} é a resultante das forças de atrito sobre i (que decorrem dos contatos ou colisões com outras partículas e/ou superfícies rígidas). Todas essas forças, à exceção das forças de atrito, são admitidas centrais, isto é, são forças que atuam no centro da partícula e , quando envolvem uma relação com outra partícula j , têm a direção dada pela linha que une os centros de i e j . As forças de atrito, por sua vez, atuam no ponto de contato de i com j , que é um ponto material sobre a superfície das partículas, e têm direção tangencial à mesma. Outras forças podem ser consideradas em (2.30), como por exemplo, forças de empuxo induzidas pelo fluido (essas são admitidas desprezíveis neste trabalho; tal aproximação é aceitável se o fluido tiver densidade muito baixa frente à densidade das partículas, fato que é admitido aqui), forças de Magnus, etc.; para os propósitos deste trabalho (que, lembra-se, é a modelagem de materiais granulares secos), no entanto, as forças indicadas acima são suficientes. Elas serão detalhadas nas seções subsequentes.

Os momentos que atuam sobre a partícula i com relação ao seu centro C_i podem agrupados num vetor de momentos resultantes ou momentos totais, \mathbf{m}_i^{tot} , e uma vez que a única força que possui excentricidade em relação a C_i é força de atrito (pelas hipóteses acima), ele é dado por

$$\mathbf{m}_i^{tot} = \mathbf{m}_i^{atr}, \quad (2.31)$$

onde \mathbf{m}_i^{atr} é a resultante dos momentos que atuam sobre i com relação ao seu centro devidos ao atrito com outras partículas e/ou superfícies rígidas.

Todas as partículas do sistema devem obedecer às leis de Euler em todos os instantes de tempo. Em particular, no instante t da configuração atual, deve-se ter

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_i = m_i \mathbf{a}_i \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\mu}}_i = j_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_P, \quad (2.32)$$

o que conduz a

$$m_i \mathbf{a}_i = \mathbf{f}_i^{tot} \quad \text{e} \quad j_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \mathbf{m}_i^{tot}, \quad i = 1, 2, \dots, N_P, \quad (2.33)$$

que são as equações que governam a dinâmica do sistema. Como se verá nas seções a seguir, as forças e momentos totais de uma partícula no instante t , em geral, dependem das posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares de todas as outras partículas nesse mesmo instante, isto é,

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i^{tot} &= \hat{\mathbf{f}}_i^{tot}(\mathbf{x}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, 2, \dots, N_P \\ \mathbf{m}_i^{tot} &= \hat{\mathbf{m}}_i^{tot}(\mathbf{x}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, 2, \dots, N_P, \end{aligned} \quad (2.34)$$

o que implica que (2.33) consiste num sistema de equações diferenciais fortemente acoplado, que invariavelmente (salvo casos muito simples) requer solução numérica. Esse aspecto será abordado no próximo capítulo. Nas seções que se seguem, modelos fenomenológicos para caracterizar as diversas forças envolvidas em (2.30) são considerados.

2.5 Forças de campos externos

As forças de campos externos são aquelas que decorrem da eventual existência de campos gravitacionais, elétricos e/ou magnéticos (e ocasionalmente outros) exteriores ao sistema no local em que ele se encontra. Esses campos são considerados aqui desacoplados entre si e estáticos em relação ao sistema, i.e., eles não são afetados pelo movimento das partículas. Sejam \mathbf{g} o vetor aceleração que define o campo gravitacional, \mathbf{E} o vetor que define o campo elétrico e \mathbf{B} o vetor que define o campo magnético no ponto em que uma partícula i se encontra (note-se que esses dois últimos, embora sejam vetores, são aqui designados por letras maiúsculas, para ficar em conformidade com a notação usual da eletrodinâmica). A resultante das forças de campos externos que atuam sobre i é dada por

$$\mathbf{f}_i^{ce} = m_i \mathbf{g} + q_i \mathbf{E} + q_i \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}, \quad (2.35)$$

onde m_i é a massa de i , obtida a partir de sua massa específica ρ_i . A soma das duas últimas parcelas na expressão acima resulta na chamada força de Lorentz. Um grande número de fenômenos envolvendo os materiais granulares pode ser estudado sem a necessidade de considerar campos elétricos e magnéticos externos, como por exemplo quando os grãos são de dimensão relativamente grande, como nos sólidos granulares e sólidos quebrados, em que as forças de inércia são preponderantes (vários materiais granulares da natureza, no seu estado bruto, são exemplos disso, como areia, cascalho, blocos de rocha, etc.). A consideração de \mathbf{E} e \mathbf{B} pode ser útil, entretanto, no estudo de processos industriais que envolvem o manuseio de sólidos granulares finos, além de pós e partículas ionizadas, como, por exemplo, nos métodos de deposição de camadas protetoras sobre superfícies sólidas e nos métodos de pintura eletrostática. Salienta-se que a influência dos campos eletromagnéticos autoinduzidos (i.e., aqueles gerados pelas cargas das próprias partículas) é considerada desprezível neste trabalho. Essa hipótese é válida desde que as velocidades das partículas sejam bastante inferiores à velocidade da luz, o que é aqui admitido. Em geral, as forças de campos externos são as forças mais simples de se caracterizar no MED, por decorrerem de parâmetros externos ao sistema e que são tomados como invariáveis no tempo (embora, não necessariamente, no espaço).

2.6 Forças de arrasto

As forças de arrasto têm origem no atrito e na pressão que o meio fluido (de viscosidade e densidade não nulas) exerce sobre a partícula quando essa se desloca em relação a ele. Uma forma simples de caracterizá-las, mas suficientemente geral para os propósitos deste trabalho, é por meio da seguinte expressão clássica, devida a Lord Rayleigh e conhecida como equação do arrasto:

$$\mathbf{f}_i^{arr} = -\frac{1}{2} \rho_F C_A A_i \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_F\| (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_F), \quad (2.36)$$

onde ρ_F é a densidade do fluido, C_A é o coeficiente de arrasto, A_i é a área “frontal” da partícula em relação ao escoamento (que, sendo ela esférica, vale $A_i = \pi r_i^2$) e \mathbf{v}_F é a velocidade local do fluido, i.e., é a velocidade (média) do escoamento na região em que a partícula se encontra. O coeficiente de arrasto é uma grandeza adimensional que depende da forma geométrica da partícula e também das características

do escoamento. Para fluidos incompressíveis, como é o caso quando a velocidade relativa entre a partícula e o fluido é inferior à velocidade de propagação do som no fluido⁸, um modelo simples e bastante eficiente de caracterizá-lo é escrevendo-o em função do número de Reynolds, Re , conforme indicado a seguir:

- Para $0 < Re \leq 1$, $C_A = 24(Re)^{-1}$; (2.37)

- Para $1 < Re \leq 400$, $C_A = 24(Re)^{-0,646}$; (2.38)

- Para $400 < Re \leq 3 \times 10^5$, $C_A = 0,5$; (2.39)

- Para $3 \times 10^5 < Re \leq 2 \times 10^6$, $C_A = 0,000366(Re)^{0,4275}$; (2.40)

- Para $Re > 2 \times 10^6$, $C_A = 0,18$; (2.41)

onde

$$Re = \frac{2r_i \rho_F \|v_i - v_F\|}{\eta_F} \quad (2.42)$$

é o número de Reynolds do escoamento na região em que a partícula se encontra, sendo η_F a viscosidade do fluido. Esse modelo foi proposto por Chow [43] (ver também Crowe et al. [44], pp. 69-75, para uma discussão mais detalhada), e graficamente corresponde à curva apresentada na Figura 4. Ele é uma aproximação da chamada curva padrão do arrasto, que é conhecida (experimentalmente) para esferas de superfície lisa. O fato de C_A ser variável para uma forma geométrica fixa pode ser explicado pelas alterações que ocorrem na camada limite aderida à partícula, que tem a espessura e o escoamento interior modificados conforme mudam as características do escoamento ao seu redor, isto é, conforme muda o número de Reynolds. Para esferas de superfície rugosa, modelos análogos podem ser considerados. É oportuno observar que a consideração de partículas não esféricas requer modelos de arrasto específicos.

Nota. Uma maneira indireta e bastante simplificada de se considerar o arrasto no movimento de uma partícula é aproximando-o por uma força de amortecimento, conforme a seguir:

$$f_i^{arr} \cong f_i^{mort} = -p_A(v_i - v_F), \quad (2.43)$$

onde p_A é um parâmetro de amortecimento, a ser arbitrado ou determinado empiricamente. Essa expressão pode ser interpretada como um modelo stokesiano de arrasto, já que implica que ele é diretamente proporcional à velocidade relativa entre a partícula e o fluido. Modelos stokesianos são válidos para escoamentos laminares com baixíssimo número Reynolds (idealmente, $Re \ll 1$), em que as forças de viscosidade preponderam bastante sobre as forças de inércia. Isso ocorre, por exemplo, quando as velocidades são muito baixas e a viscosidade do fluido é muito alta, ou quando a escala do escoamento é muito pequena. Um exemplo de escoamento stokesiano na natureza é o

⁸ Essa hipótese é verificada em um grande número de fenômenos que envolvem o movimento de materiais granulares, e será admitida neste trabalho.

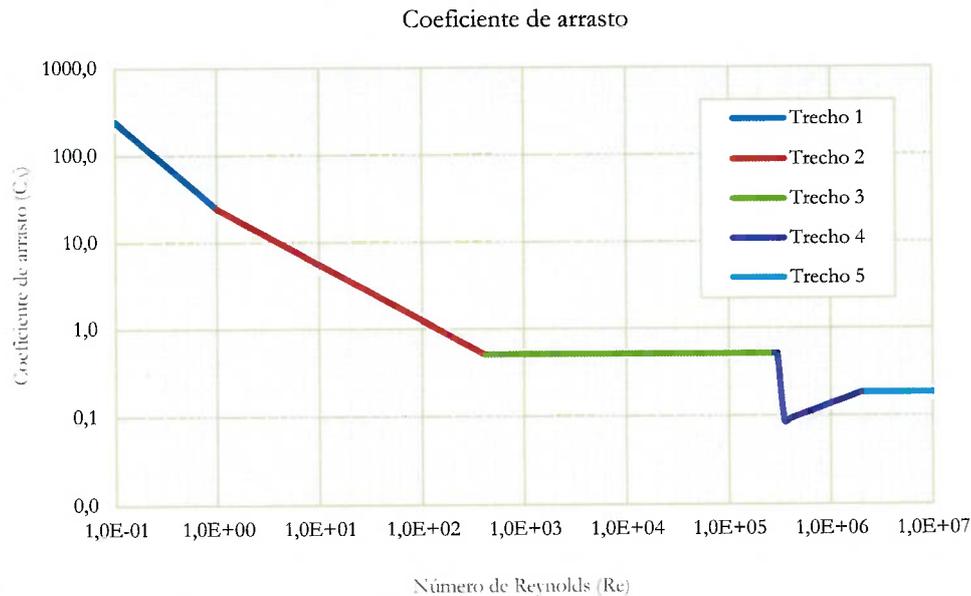


Figura 4. Coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds (eixos em escala logarítmica). Esse modelo aproxima a curva padrão do arrasto para esferas de superfície lisa.

movimento de lava vulcânica. Note-se que o modelo mais geral, dado por (2.36) em conjunto com (2.37)-(2.41), reproduz (2.43) quando $0 < Re \leq 1$. A expressão (2.43) também pode ser entendida como uma maneira expedita de se introduzir dissipação de energia no sistema, sendo de fato frequentemente utilizada com esse propósito.

Nota. O efeito das forças de Magnus no movimento das partículas é admitido desprezível neste trabalho – apesar de poder ser facilmente incorporado. Nesse caso, um termo adicional $f_i^{Mag} = M_i \omega_i \times v_i$ ($M_i =$ constante que deve ser arbitrada ou determinada empiricamente) precisaria ser acrescentado à equação (2.30). As forças de Magnus aparecem sempre que uma partícula se desloca com velocidade angular diferente de zero em um meio, como consequência de os pontos materiais de sua superfície possuírem velocidades translacionais diferentes (essas velocidades são função da posição do ponto em relação ao centro da partícula e à direção do escoamento) e, logo, estarem sujeitos a arrastos diferentes. O efeito líquido dessas diferenças de é a força de Magnus.

2.7 Forças de atração e repulsão

Forças de atração e repulsão são forças que agem entre dois corpos que, no geral, não estão em contato físico entre si. Podem ser de natureza nuclear, eletromagnética ou gravitacional. No contexto dos materiais granulares, as de natureza eletromagnética costumam ser as mais relevantes. Somente nos casos em que os corpos têm massas e dimensões relativamente grandes (como, por exemplo, asteroides e corpos celestes) é que as gravitacionais também o são. Neste trabalho, a terminologia “forças de atração e repulsão” será utilizada para designar as forças de atração e repulsão de natureza eletromagnética. Essas,

por sua vez, têm origem nas interações que ocorrem entre as nuvens de elétrons dos átomos dos dois corpos quando esses são colocados a uma distância suficientemente próxima entre si. A rigor, o conhecimento dessas forças requer a determinação dos campos elétrico e magnético que decorrem das nuvens de elétrons, o que por sua vez exige a solução das equações de Schrödinger e de Maxwell na escala atômica dos corpos – o que é muito difícil (se não impossível) de ser levado a cabo, mesmo computacionalmente. Por conta disso, é vantajoso recorrer a expressões semiempíricas para se caracterizá-las, dadas pela combinação de forças “efetivas” de atração e repulsão⁹. Aqui, a força de atração e repulsão que atua entre duas partículas i e j , ou força aplicada em i devido à atração e repulsão por j , é dada pela seguinte expressão:

$$\mathbf{f}_{ij}^{at-rep} = k_{ij}^{at} \left(\frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^{\alpha_{at}} \mathbf{n}_{ij} - k_{ij}^{rep} \left(\frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^{\alpha_{rep}} \mathbf{n}_{ij}, \quad (2.44)$$

onde k_{ij}^{at} , α_{at} , k_{ij}^{rep} e α_{rep} são parâmetros materiais determinados empiricamente e

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|} \quad (2.45)$$

é o vetor unitário que aponta do centro da partícula i para o centro da partícula j , i.e., é o versor que dá a direção central entre as partículas no sentido de i para j . Note-se que, pelo princípio da ação e reação, a força correspondente que atua em j é dada por $\mathbf{f}_{ji}^{at-rep} = -\mathbf{f}_{ij}^{at-rep}$. Os parâmetros k_{ij}^{at} e α_{at} ($k_{ij}^{at}, \alpha_{at} \geq 0$) definem a parcela atrativa da força, ao passo que k_{ij}^{rep} e α_{rep} ($k_{ij}^{rep}, \alpha_{rep} \geq 0$) definem a parcela repulsiva. Essa expressão tem origem nos potenciais de força desenvolvidos de forma semiempírica à época do surgimento das teorias modernas de dinâmica molecular, quando o conceito de energia foi introduzido como uma abordagem alternativa para representar as interações entre átomos e moléculas, sendo as forças obtidas pela diferenciação desses potenciais. Um exemplo bastante conhecido é o potencial de Lennard-Jonnes (Lennard-Jonnes [45] apud Haile [24]), dado por

$$V(\mathbf{d}) = a \left(\frac{1}{\|\mathbf{d}\|} \right)^6 - b \left(\frac{1}{\|\mathbf{d}\|} \right)^{12}, \quad (2.46)$$

onde \mathbf{d} é a distância entre o par de átomos ou moléculas considerado e a e b são constantes a serem ajustadas empiricamente. A parcela atrativa desse potencial se refere ao que hoje é conhecido como forças de van der Waals. A diferenciação de (2.46) com relação \mathbf{d} fornece uma expressão de força formalmente idêntica a (2.44), com $k_{ij}^{at} = 6a$, $\alpha_{at} = 7$, $k_{ij}^{rep} = 12b$ e $\alpha_{rep} = 13$. No âmbito da dinâmica molecular, várias outras representações são possíveis; ver, por exemplo, Rapaport [23]. Remete-se também ao trabalho de Frenklach e Carmer [46] para uma discussão sobre diversos modelos e uma comparação entre

⁹ Não faz parte do escopo deste trabalho fazer uma representação rigorosa dessas forças, para o que seria necessária a consideração de conceitos da termodinâmica clássica e estatística, e também da mecânica quântica. Ao invés disso, expressões simples, que possam capturar os fenômenos essenciais envolvidos (no caso, atração e repulsão em função da distância entre as partículas interagentes) por meio de grandezas “efetivas”, são preferidas. O leitor interessado em se aprofundar nesse assunto pode consultar o excelente tratado de Israelachvili [47]. Um ótimo histórico sobre o estudo dessas forças desde o século XVII também é apresentado, logo no início do livro.

eles.

Um caso particular que pode ser obtido a partir de (2.44) é quando as forças de atração e repulsão são devidas a interações puramente eletrostáticas, as quais são regidas pela lei de Coulomb e resultam em

$$\mathbf{f}_{ij}^{at-rep} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon} \left(\frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \right)^2 \mathbf{n}_{ij}, \quad (2.47)$$

onde q_i e q_j (lembra-se) são as cargas elétricas das partículas i e j , e ϵ é a constante elétrica (ou permissividade) do meio em que se encontram, com frequência dada em relação à constante elétrica do vácuo, ϵ_0 . Essa expressão é obtida fazendo-se

$$k_{ij}^{at} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon}, \quad \alpha_{at} = 2, \quad k_{ij}^{rep} = 0 \quad \text{e} \quad \alpha_{rep} = 0 \quad (2.48)$$

em (2.44), onde se subentende que a parcela não nula se refere tanto a uma força de atração quanto a uma de repulsão, conforme o sinal das cargas envolvidas. Forças eletrostáticas podem aparecer em materiais granulares devido, por exemplo, à redistribuição de cargas elétricas que tenham eventualmente sido induzidas por atrito entre os grãos – fenômeno muitas vezes observado em silos de armazenamento e em navios graneleiros, e que pode ocasionar faíscas e, na presença de gases inflamáveis, até mesmo explosões. Alguns tipos de grãos metálicos e pós finos, por sua vez, costumam ser carregados eletricamente em processos industriais com vistas à sua aplicação sobre superfícies, como em certos métodos de pintura e jateamento e em métodos de deposição de camadas antiabrasivas e barreiras térmicas (ver, por exemplo, Zohdi [22]).

As forças de atração e repulsão eletromagnéticas costumam ser desprezíveis quando a dimensão das partículas é razoavelmente grande, de cerca de 1 mm ou mais (Zohdi [5], p. 10). Já para partículas menores do que 1 mm, quase sempre têm magnitude semelhante (ou até mesmo maior) à das demais forças envolvidas.

A resultante das forças de atração e repulsão que atuam sobre uma partícula i , decorrente de sua interação com todas as demais partículas do sistema, é dada por

$$\mathbf{f}_i^{at-rep} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_p} \mathbf{f}_{ij}^{at-rep}. \quad (2.49)$$

Nota. É comum classificar as forças de atração e repulsão em forças de alcance curto e forças de alcance longo. Isso é feito a partir dos expoentes que definem a sua energia potencial, posto que são eles que governam o decaimento da força com relação à distância entre as partículas. Forças cujo potencial tem expoente menor ou igual a 3 são consideradas forças de alcance longo, enquanto aquelas cujo potencial tem expoente maior do que 3 são consideradas forças de alcance curto. As forças de natureza eletromagnética em geral são de alcance curto (uma exceção é força eletrostática); a força gravitacional, por sua vez, é de alcance longo. Outra classificação é em função da intensidade dessas forças. As forças eletromagnéticas são forças fortes (embora, como dito, em geral de alcance

curto), ao passo que as forças gravitacionais são forças fracas (mas de alcance longo). As forças eletrostáticas são fortes e de alcance longo. Remete-se a Israelachvili [47] para uma discussão aprofundada no assunto, incluindo vários exemplos numéricos que calculam a ordem de grandeza dessas forças para diferentes entidades interagentes.

Nota. Os potenciais de força (e, conseqüentemente, as forças que deles decorrem) podem apresentar uma distância a partir da qual a interação que eles representam se torna instável, no sentido de que uma mínima perturbação na configuração das partículas ocasiona efeitos drásticos. Essa distância é comumente chamada de distância crítica, e pode ser determinada analisando-se o sinal das derivadas do potencial. Uma condição necessária e suficiente para a estabilidade é que o potencial seja uma função convexa da distância. O ponto em que ele deixa de ser convexo e passa a ser côncavo, se houver, é o ponto de instabilidade. As interações entre partículas que estão afastadas de uma distância maior do que a distância crítica devem ser tratadas com muito cuidado. Um artifício usual é desprezá-las por completo. Para detalhes, ver, por exemplo, Zohdi [5], pp. 107-112

2.8 Forças de adesão

A adesão entre duas partículas pode ocorrer quando essas são colocadas em contato físico ou a uma distância suficientemente próxima entre si, podendo a partir daí ser induzida por fatores internos ou externos às mesmas. No primeiro caso, as forças de atração e repulsão eletromagnéticas que agem sobre elas podem ter a sua parcela atrativa significativamente aumentada devido à proximidade ou ao contato; havendo contato, as deformações localizadas que se processam em suas superfícies aumentam a área de contato e logo expõem um número maior de suas moléculas, elevando, por exemplo, as forças atrativas de van der Waals. As partículas podem encontrar uma posição de equilíbrio mecânico em que ficam aderidas, sendo o acréscimo das forças de atração chamado de força de adesão. No segundo caso, a adesão pode ser induzida pela ação de elementos ligantes presentes no meio fluido em que as partículas se encontram, ou aplicados sobre suas superfícies, os quais podem desenvolver forças atrativas quando as partículas se tocam ou ficam suficientemente próximas entre si, formando eventualmente uma ligação. Isso pode se dar por meio de reações químicas, por meio de efeitos de temperatura (que podem causar amolecimento e derretimento de material), por uma combinação de ambos, ou também por efeito de capilaridade (causado por gotículas de líquido eventualmente presentes no meio, que podem aderir à superfície das partículas). A força de ligação é então chamada de força de adesão. Em qualquer dos casos, as forças de adesão são, em última instância, forças eletromagnéticas.

O primeiro estudo teórico rigoroso das forças de adesão em sólidos foi feito por Johnson, Kendall e Roberts [48] no início dos anos 1970, e constitui o que é hoje conhecido como teoria JKR. Os autores se basearam em estudos anteriores de H. R. Hertz (1857-1894) e desenvolveram uma expressão para a força de adesão entre esferas elásticas lisas postas em contato, com base na deformação das mesmas e na energia de superfície de seus materiais. Consideraram apenas a adesão induzida pelas próprias esferas, i.e., aquela devida às forças de van der Waals, sem a presença de elementos ligantes.

Neste trabalho, com a intenção de caracterizar as forças de adesão por meio de uma expressão que seja razoavelmente simples, mas que ao mesmo tempo seja válida para representar tanto a adesão “espontânea” (i.e., aquela induzida pelo contato mecânico) como a “forçada” (i.e., aquela induzida por elementos ligantes), recorre-se a um modelo semiempírico. Esse é baseado na deformação local observada entre as superfícies das partículas e na rigidez da ligação. Considerem-se duas partículas i e j , conforme ilustrado na Figura 5, e seja δ_{ij} o comprimento definido por

$$\delta_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - (r_i + r_j), \quad (2.50)$$

que representa o afastamento entre as suas superfícies, quando resulta em um valor positivo, ou o encurtamento combinado de seus raios no ponto de contato¹⁰, quando resulta em um valor negativo. Seja ε_{ij} uma medida de deformação local entre as partículas, definida como

$$\varepsilon_{ij} = \frac{|\delta_{ij}|}{r_i + r_j}, \quad (2.51)$$

válida quando $\delta_{ij} < 0$, e seja ε_c um valor crítico (conhecido) de deformação. A força de adesão entre i e j , ou força que atua em i devido à adesão a j , é dada por

$$\mathbf{f}_{ij}^{ad} = k_{ij}^{ad} (\varepsilon_{ij})^\beta \mathbf{n}_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} \geq \varepsilon_c, \quad (2.52)$$

onde k_{ij}^{ad} é um parâmetro relacionado à rigidez da ligação, β é um parâmetro material a ser ajustado empiricamente e \mathbf{n}_{ij} é a direção central entre as partículas no sentido de i para j , dada por (2.45). Note-se que a força de adesão só se manifesta quando a deformação local atinge ou supera a deformação crítica ε_c ; caso contrário, tem valor nulo. Note-se também que a força de adesão que atua em j é dada por $\mathbf{f}_{ji}^{ad} = -\mathbf{f}_{ij}^{ad}$. É importante observar que esse modelo, assim como outros de seções subsequentes, viola a hipótese de esferas infinitamente rígidas. Tal violação, contudo, é apenas local e é intrínseca do MED quando há contato físico entre duas partículas. Ela ocorre somente para permitir o uso de modelos fenomenológicos na caracterização das forças desenvolvidas na região do contato. A cinemática das partículas continua sendo a cinemática dos sólidos rígidos. Assim, desde que as deformações (2.51) sejam suficientemente pequenas, a ponto acarretar alterações desprezíveis na geometria das partículas e em seus tensores de inércia, é uma violação aceitável.

Uma interpretação que pode ser dada para o que acontece quando $\delta_{ij} < 0$ é que as partículas sofrem uma *interpenetração* na região do contato, isto é, apresentam uma região de sobreposição. Isso é uma irrealidade do ponto de vista físico, mas vale como artifício para se determinar as forças de contato envolvidas. Nesse caso, é comum referir-se ao comprimento δ_{ij} como sendo a interpenetração entre as partículas. Se ela for suficientemente pequena em relação às dimensões das esferas, terá poucas

¹⁰ A rigor, não existe um “ponto de contato”, mas sim infinitos pontos, que são os pontos materiais sobre a *superfície de contato* – forma que a superfície das partículas adquire na região de contato quando elas se tocam e se deformam localmente. A terminologia *ponto de contato* será utilizada neste trabalho para se referir ao ponto material que ocupa o lugar geométrico da projeção ortogonal dos centros das partículas sobre a superfície de contato. Aqui, como as partículas são esféricas, tal lugar coincide com o centro geométrico dessa superfície. Nesses casos, a resultante das forças que atuam na superfície de contato é uma força aplicada no ponto de contato.

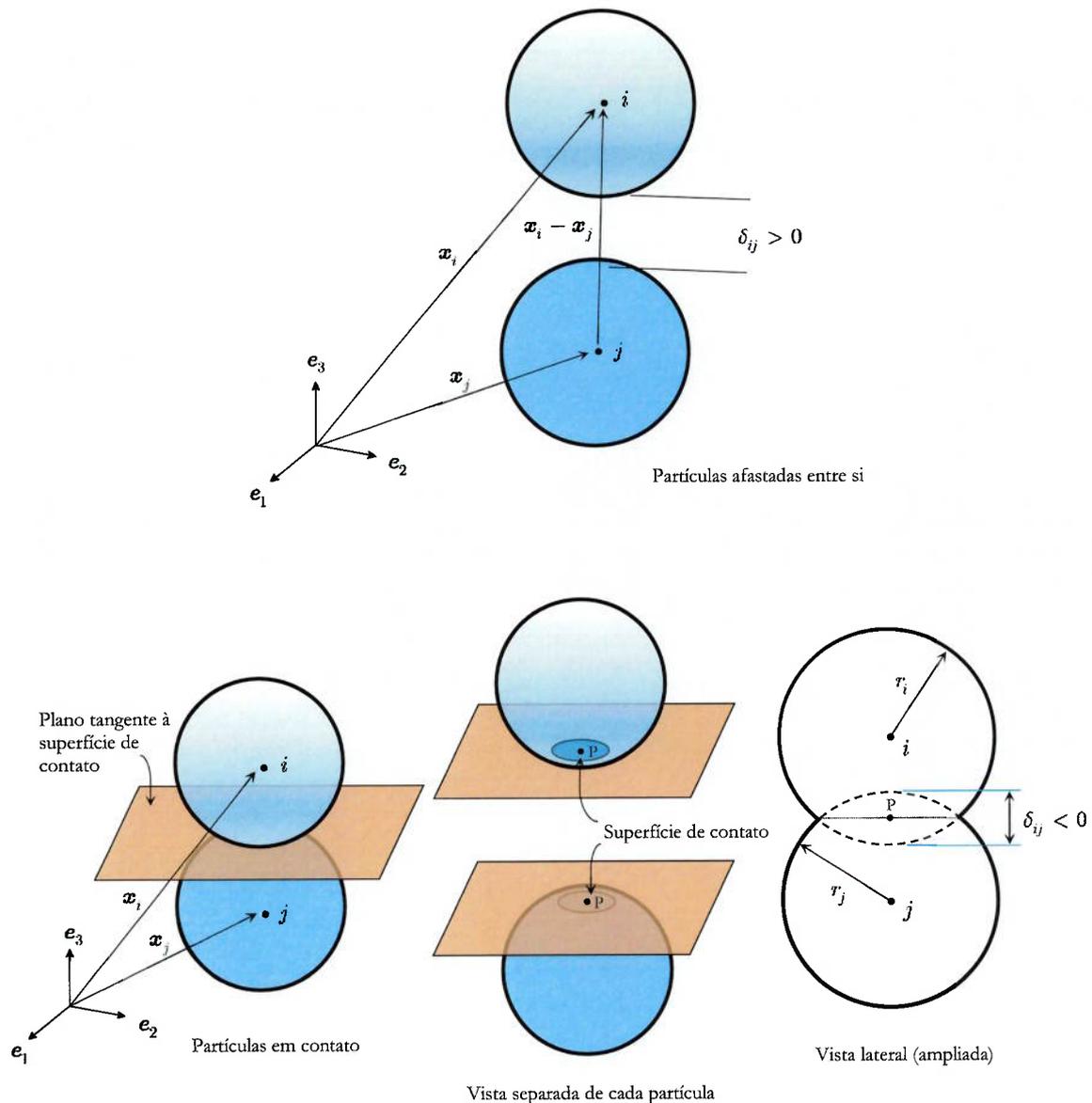


Figura 5. Relação de proximidade entre duas partículas genéricas. A grandeza δ_{ij} mede o afastamento entre a superfície das partículas quando resulta em um valor positivo (figura superior), ou o encurtamento combinado dos seus raios no ponto de contato quando resulta em um valor negativo (figura inferior). O ponto de contato, P, é definido como sendo a projeção ortogonal dos centros das partículas sobre a superfície de contato.

consequências na dinâmica das mesmas. Fica evidente por esses argumentos que o MED não é adequado para a descrição de sistemas onde as deformações das partículas são relevantes – nesses casos, modelos que consideram as partículas como sólidos deformáveis devem ser preferidos.

Pelas mesmas razões que nas forças de atração e repulsão, as forças de adesão espontânea (aquelas induzidas puramente pelo contato mecânico) costumam ser desprezíveis quando a dimensão das partículas é de cerca de 1 mm ou mais; para partículas menores do que 1 mm, contudo, podem ser relevantes. O trabalho de Avci e Wriggers [20] propõe uma maneira bastante simples de se caracterizá-las, com base na teoria JKR.

É possível ainda acrescentar uma parcela tangencial (i.e. normal a \mathbf{n}_{ij}) à expressão (2.52), para

caracterizar uma componente tangente de adesão.

A resultante das forças de adesão que atuam sobre uma partícula i , decorrente de sua adesão a n_i^{ad} outras partículas do sistema, é dada por

$$f_i^{ad} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{ad}} f_{ij}^{ad}. \quad (2.53)$$

Nota. A adesão por capilaridade é um fenômeno mais complexo e requer um modelo mais elaborado do que o modelo acima para poder ser caracterizada satisfatoriamente. O estudo da capilaridade, por outro lado, é antigo e existem diversos resultados que permitem estimar a adesão que ela gera, com base na geometria do menisco (ou ponte capilar) e na tensão superficial do líquido no meio considerado. Ver, por exemplo, Duran [3], p. 24, Crowe et al. [44], pp. 133-134 e Israelachvili [47], pp. 456-460. Infelizmente, tais resultados só são úteis ao MED se a geometria do menisco for conhecida para todos os pares de partículas aderidas (ou candidatas a se aderirem), o que dificilmente ocorre. Pode-se, contudo, estabelecer critérios e tentar arbitrá-los.

2.9 Forças de contato mecânico

As forças de contato mecânico decorrem da elasticidade e da troca de momentos linear e angular entre as partículas quando elas se tocam ou colidem. Diferentemente das forças de atração e repulsão e das forças de adesão, não têm, pois, uma origem diretamente eletromagnética. Quando o contato ou colisão é perfeitamente elástico, as partículas trocam quantidade de movimento de forma a que esse se conserve exatamente; do contrário, sendo apenas parcialmente elástico, parte dos momentos é perdida e logo alguma energia cinética é dissipada. As forças de contato mecânico costumam ser separadas em duas componentes, sendo uma normal, que é a que age normalmente às superfícies das partículas, e uma tangencial, que é a força de atrito – que pode ou não existir, a depender da rugosidade das superfícies na região de contato. Neste trabalho, a terminologia “forças de contato” será utilizada para designar apenas a componente normal dessas forças; já “forças de atrito” será utilizada para designar a componente tangencial, a qual será assunto da próxima seção.

O primeiro estudo teórico rigoroso sobre o contato mecânico entre sólidos foi feito por Hertz já no século XIX. Ele está sistematizado, de forma detalhada e ainda bastante estendida, no livro (hoje clássico) de Johnson [49]. Essa obra estabeleceu o surgimento de uma subárea bastante prolífica na mecânica dos sólidos contemporânea, a mecânica do contato. Muito se avançou nas últimas duas décadas, em especial devido à abordagem computacional levada a cabo pelos grupos de P. Wriggers (ver Wriggers [50]) e T. Laursen (ver Laursen [51]). O MED não se propõe a fazer uma representação rigorosa das forças de contato. Ao invés disso, procura utilizar expressões simples que permitam capturar a essência da dinâmica das partículas enquanto em contato, i.e., seus movimentos como corpos rígidos que se tocam, sem resolver as complexas deformações localizadas que se processam em suas superfícies durante o contato. Por esse motivo, não será apresentada aqui uma descrição minuciosa do fenômeno do contato. O leitor

interessado em se aprofundar no assunto pode consultar as referências acima mencionadas.

No contexto do MED, uma maneira simples e bastante eficiente de se caracterizar a força de contato que atua entre duas partículas i e j , ou mais especificamente, a força que atua em i devido ao contato com j , é por meio da seguinte expressão geral

$$\mathbf{f}_{ij}^{con} = -k_{ij}^{con} (\varepsilon_{ij})^\lambda \mathbf{n}_{ij}, \quad (2.54)$$

onde k_{ij}^{con} é um parâmetro relacionado à rigidez do material das partículas, ε_{ij} é uma medida local de deformação na região do contato (dada, por exemplo, por (2.51)), λ é um parâmetro material a ser determinado empiricamente, e \mathbf{n}_{ij} é a direção normal entre as superfícies das partículas no ponto de contato, no sentido de i para j , que coincide com a direção central dada por (2.45) já que as partículas são esféricas. Do ponto de vista estritamente matemático, (2.54) pode ser interpretado como uma lei de penalidade, estabelecida com vistas a impedir que i e j se interpenetrem mais do que um valor aceitável.

Diversos modelos de contato podem ser escritos na forma de (2.54). Os livros de Pöschel e Schwager [4] e Crowe et al. [44] discutem vários deles, para os quais a medida local de deformação é o encurtamento combinado dos raios, i.e., é o valor absoluto da interpenetração δ_{ij} . Os mais conhecidos dentre esses são o modelo linear, em que k_{ij}^{con} é uma constante e $\lambda = 1$, e o modelo baseado na teoria de Hertz, em que k_{ij}^{con} também é uma constante (dada em função da elasticidade e das dimensões das partículas) e $\lambda = 3/2$. Os trabalhos de Zohdi (vide [52] e [22]), por sua vez, costumam utilizar modelos em que a deformação local é dada por (2.51), e o parâmetro de rigidez dado em função da área de contato entre as partículas, a qual varia com a deformação e pode ser calculada por meio da teoria de Hertz. Em todos os casos, é comum ainda somar a (2.54) uma força de amortecimento, dada em função da velocidade de aproximação (ou afastamento) das partículas, para permitir eventual dissipação de energia na direção central durante o contato ou colisão.

Neste trabalho, adota-se um modelo baseado na teoria de Hertz, suplementado por uma força de amortecimento. Assim, a força de contato que atua em uma partícula i devido ao contato com outra partícula j é dada por

$$\mathbf{f}_{ij}^{con} = -\frac{4}{3} E^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{3/2} \mathbf{n}_{ij} - d^* \dot{\delta}_{ij} \mathbf{n}_{ij}, \quad (2.55)$$

onde

$$E^* = \frac{E_i E_j}{E_j (1 - \nu_i^2) + E_i (1 - \nu_j^2)} \quad \text{e} \quad r^* = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \quad (2.56)$$

são os chamados módulo de elasticidade equivalente e raio equivalente do par de partículas em contato (com E_i e ν_i o módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson da partícula i , e E_j e ν_j os seus correspondentes para a partícula j), δ_{ij} é o encurtamento combinado de seus raios no ponto de contato, ou interpenetração, dado por (2.50), $\dot{\delta}_{ij}$ é a taxa de variação desse encurtamento em relação ao tempo (que é igual à velocidade de aproximação ou de afastamento das partículas na direção central, ou seja, à velocidade relativa das mesmas na direção \mathbf{n}_{ij}) e d^* é um parâmetro de amortecimento associado à

dissipação de energia na direção central durante o contato. A força de contato que atua em j , por sua vez, é $f_{ji}^{con} = -f_{ij}^{con}$. A teoria de Hertz presume que as superfícies em contato sejam lisas e tenham vetor normal bem definido em todos os seus pontos. Presume também que as deformações sejam pequenas e restritas à região de contato, de maneira a que sejam válidas as equações da teoria linear da elasticidade. Para partículas esféricas, desde que o valor de δ_{ij} fique restrito a uma fração pequena de seus raios, essas hipóteses são razoavelmente bem atendidas.

Para arbitrar o valor do parâmetro de amortecimento d^* , faz-se aqui uma analogia entre o movimento das partículas na direção central e a vibração de um sistema massa-mola-amortecedor de um grau de liberdade nessa direção, de massa m^* , mola de rigidez k^* e amortecedor de coeficiente d^* . Sendo esse movimento descrito por δ_{ij} , a equação que governa o sistema é

$$m^* \ddot{\delta}_{ij}(t) + d^* \dot{\delta}_{ij}(t) + k^* \delta_{ij}(t) = 0, \quad (2.57)$$

que também pode ser escrita como

$$\ddot{\delta}_{ij}(t) + 2\xi_n \omega_0^* \dot{\delta}_{ij}(t) + \omega_0^{*2} \delta_{ij}(t) = 0, \quad (2.58)$$

onde

$$\xi_n = \frac{d^*}{2\sqrt{m^* k^*}} \quad \text{e} \quad \omega_0^* = \sqrt{\frac{k^*}{m^*}} \quad (2.59)$$

são a taxa de amortecimento do sistema e a frequência natural não amortecida (o índice “n” é utilizado em ξ_n para especificar que se trata de um amortecimento na direção normal ao contato). De (2.59)₁ decorre que

$$d^* = 2\xi_n \sqrt{m^* k^*}, \quad (2.60)$$

que constitui uma maneira simples de se obter d^* uma vez que m^* , k^* e ξ_n sejam conhecidos. Nesse caso, a massa m^* pode ser tomada como sendo a massa equivalente do par de partículas, i.e.,

$$m^* = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}, \quad (2.61)$$

e a rigidez k^* como sendo a rigidez equivalente decorrente da teoria de Hertz, i.e.,

$$k^* = \frac{d}{d|\delta_{ij}|} \left(\frac{4}{3} E^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{3/2} \right) = 2E^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{1/2}, \quad (2.62)$$

de modo que de (2.60) tem-se

$$d^* = 2\xi_n \sqrt{2m^* E^* \sqrt{r^*}} |\delta_{ij}|^{1/4}. \quad (2.63)$$

Já a taxa de amortecimento ξ_n pode ser tomada como sendo aquela que decorre da definição do coeficiente de restituição e do contato ou colisão, dada por

$$e = -\frac{\dot{\delta}_{ij}(t_f)}{\dot{\delta}_{ij}(t_i)}, \quad (2.64)$$

onde $\dot{\delta}_{ij}(t_f)$ é a velocidade de afastamento das partículas no instante t_f em que o contato é finalizado, e $\dot{\delta}_{ij}(t_i)$ é a velocidade de aproximação das mesmas no instante t_i em que é iniciado. Sendo essas velocidades dadas pela solução de (2.58), i.e., obtidas a partir de

$$\dot{\delta}_{ij}(t) = \frac{\dot{\delta}_{ij}(0)}{\omega_0^* \sqrt{1 - \xi_n^2}} \exp(-\xi_n \omega_0^* t) \left[\omega_0^* \sqrt{1 - \xi_n^2} \cos(\omega_0^* \sqrt{1 - \xi_n^2} t) - \xi_n \omega_0^* \sin(\omega_0^* \sqrt{1 - \xi_n^2} t) \right] \quad (2.65)$$

(admitindo amortecimento subcrítico), e sendo t_f o instante que corresponde à metade do período de oscilação do sistema, i.e., o instante em que a massa, após comprimir e descomprimir a mola e o amortecedor, passa de volta em sua posição inicial, dado da solução de (2.58) por

$$t_f = \frac{\pi}{\omega_0^* \sqrt{1 - \xi_n^2}}, \quad (2.66)$$

a expressão (2.64) resulta (fazendo-se $t_i = 0$)

$$e = \exp(-\xi_n \omega_0^* t_f) = \exp\left(-\frac{\xi_n \pi}{\sqrt{1 - \xi_n^2}}\right). \quad (2.67)$$

Desse resultado, decorre que

$$\xi_n = -\frac{\ln e}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e}}, \quad (2.68)$$

que é uma maneira bastante simples de se controlar a dissipação de energia na direção central do contato uma vez que e seja conhecido. Nesse aspecto, ressalta-se que e é um parâmetro que pode ser facilmente medido em laboratório.

Convém observar que, em sendo a rigidez k^* aquela que decorre da teoria de Hertz, os resultados da analogia acima são apenas uma aproximação. Isso porque (2.57)–(2.60) e (2.65)–(2.66) são válidos para um sistema massa-mola-amortecedor com mola de rigidez constante, i.e., que não depende dos deslocamentos, o que não é o caso de (2.62). Uma expressão análoga a (2.67) para um sistema com mola de rigidez não constante é apresentada em Ramirez et al. [53], e particularizada para a mola da teoria de Hertz em Pöschel e Schwager [4] (pp. 142-144). Essa, contudo, é bastante mais intrincada, e não permite que se escreva ξ_n em função de e , como em (2.68). Além disso, o modelo proposto por esses autores supõe que o parâmetro de amortecimento é constante, o que não concorda com observações experimentais. Shunying e Hayley [54], comparando resultados de ensaios numéricos com ensaios físicos, sugerem que o parâmetro de amortecimento seja dependente dos deslocamentos – como é o caso de (2.63). Mais ainda, sugerem que tal dependência seja uma potência de δ_{ij} , com expoente variando entre 1/4 e 1/2, a depender do material – o que concorda com (2.63). Por esses motivos, e dada a simplicidade

do modelo, a expressão (2.63) será utilizada neste trabalho, com a taxa de amortecimento sendo dada por meio de (2.68).

A parcela elástica da expressão (2.55) resulta sempre em uma contribuição repulsiva na força de contato, i.e., tem sempre direção contrária a \mathbf{n}_{ij} . A parcela de amortecimento, por sua vez, pode resultar repulsiva ou atrativa, a depender do sinal de δ_{ij} . Quando as partículas estão na fase de *compressão* do contato, a contribuição é repulsiva; quando estão na fase de *descompressão*, ela é atrativa. Como consequência, se o amortecimento for muito forte na descompressão, pode acontecer de (2.55) resultar em uma força atrativa – o que não faz sentido do ponto de vista físico. Essa inconsistência é contornada verificando-se o sinal de (2.55) em relação a \mathbf{n}_{ij} . Caso ele seja positivo, deve-se impor $\mathbf{f}_{ij}^{con} = \mathbf{o}$ (onde \mathbf{o} é o vetor nulo). Esse artifício não é desprovido de significado físico: quando o amortecimento é muito alto, as partículas têm deformação (local) diferente de zero mesmo que já tenha sido finalizada a descompressão, significando que, embora elas não mais se toquem, seus centros estão separados por uma distância inferior à soma de seus raios. Assim, mesmo que δ_{ij} resulte negativo em (2.50), a força de contato é inexistente. Vide Pöschel e Schwager [4], pp. 21-22 para uma ilustração e uma descrição um pouco mais detalhada.

É evidente que, no nível binário, i.e., entre duas partículas quaisquer, as inúmeras variantes do modelo dado por (2.54) conduzem a resultados distintos entre si, especialmente no que se refere à deformação máxima observada durante o contato e à duração do mesmo. Shunying e Hayley [54], entretanto, comprovaram que todas levam ao mesmo comportamento coletivo do sistema quando utilizadas para descrever sistemas de muitas partículas – como é o caso dos materiais granulares –, ou, em outras palavras, todas geram resultados qualitativamente semelhantes para o sistema como um todo. Crowe et al. [44], p. 130, também fazem comentário semelhante. Não é difícil entender as razões dessa constatação ao lembrar que, do ponto de vista matemático, todos são modelos de penalidade, diferindo entre si apenas pelos valores dos parâmetros de penalização. A utilização de um ou outro para o estudo de sistemas de várias partículas pode parecer, pois, em parte uma questão de preferência pessoal. Na opinião do autor, o modelo baseado na teoria de Hertz tem a distinção de ser baseado na mecânica do contato, i.e., na representação física do que ocorre elasticamente com as partículas na sua região de contato. Como consequência, os parâmetros de penalidade que dele decorrem advêm de grandezas físicas facilmente conhecidas, que são o raio, o módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson das partículas. A teoria de Hertz provém, nesse sentido, uma maneira expedita de se arbitrar k_{ij}^{con} para cada par de contato, além de um valor para o expoente λ . Essa é sem dúvida uma grande vantagem sobre outros modelos. Além disso, já foi exaustivamente testada e validada em ensaios físicos de laboratório, comprovando que fornece excelentes resultados para esferas elásticas suficientemente rígidas (i.e., em que as deformações durante o contato não são grandes). Traz, contudo, uma desvantagem. Como (2.55) é não linear em relação a δ_{ij} , sua integração no tempo requer certos cuidados, como passos de integração suficientemente pequenos, para que não haja perda significativa de precisão e consequente geração (ou redução) espúria de energia entre as partículas em contato. Esse aspecto será discutido mais adiante no Capítulo 3.

A resultante das forças de contato que atuam sobre uma partícula i , decorrente de seus contatos

com n_i^{con} outras partículas do sistema, é dada por

$$f_i^{con} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{con}} f_{ij}^{con}. \quad (2.69)$$

Nota. Da mesma forma que na seção anterior, os modelos de contato dados pela forma geral (2.54) – dos quais o modelo de Hertz é um caso particular – violam a hipótese de esferas rígidas. Observa-se, mais uma vez, que tal violação se verifica apenas localmente. Ela ocorre somente para permitir o uso de modelos fenomenológicos na caracterização das forças de contato. A cinemática das partículas continua sendo a cinemática dos sólidos rígidos. É possível, contudo, formular o MED sem essa violação. Nesses casos, os contatos são tratados como eventos instantâneos, sendo então resolvidos pelo balanço de momentos linear e angular entre o par colidente, levando em conta o coeficiente de restituição do par (ver, por exemplo, Zohdi [5], Campello [55] e Campello e Zohdi [56]). Modelos desse tipo são correntemente designadas de “modelos de esferas rígidas”, ou *hard sphere models* (Pöschel e Schwager [4], Crowe et al. [44], dentre outros), enquanto que os primeiros são designados de “modelos de esferas deformáveis”, ou *soft sphere models*. A formulação original do MED, conforme proposta por Cundall e Strack [8], é um exemplo de modelo de esferas deformáveis (embora essa classificação não existisse à época). O modelo de esferas rígidas é bastante eficiente na resolução dos contatos; é válido, contudo, apenas se os contatos forem realmente de curta duração, a ponto de poderem ser aproximados por eventos instantâneos. Situações que envolvem contatos relativamente longos, ou ainda “duradouros” ou permanentes – por exemplo, quando as partículas encontram uma configuração estática de equilíbrio em que ficam permanentemente em contato entre si, como em pilhas de grãos em repouso sobre superfícies, ou em amostras de grãos compactadas no interior de recipientes –, não são adequadamente representadas. Já o modelo de esferas deformáveis permite a solução de contatos com duração qualquer (quase instantâneos, longos e permanentes), sendo nesse sentido mais geral do que o modelo de esferas rígidas; é, contudo, bastante mais dispendioso, uma vez que requer a integração das equações do movimento das partículas durante toda a duração do contato.

2.10 Forças de atrito

O atrito, ou mais precisamente, o atrito seco (aquele que se desenvolve entre corpos sólidos de superfícies completamente secas) tem origem preponderantemente nas asperezas das superfícies em contato, cujas microrrugosidades podem se intertravar ou encaixar mecanicamente e assim oferecer resistência ao movimento tangencial relativo entre elas. Esse tipo de atrito é fortemente governado pelas forças normais que se desenvolvem em decorrência do contato – incluídas aí as ações normais externas, as forças normais de inércia, as forças normais de adesão espontânea, ou ainda uma combinação de todas essas. Em corpos de dimensões muito pequenas, a adesão espontânea costuma ter contribuição bastante significativa na força normal; já em corpos maiores, conforme já comentado, as forças de inércia e as

forças externas (incluindo as de adesão forçada, se houver) preponderam. Neste trabalho, os efeitos da adesão espontânea sobre o atrito serão considerados desprezíveis.

No estudo do atrito entre corpos sólidos, é usual falar ainda em atrito com lubrificação, por vezes também chamado de atrito hidrodinâmico ou hidroelastodinâmico. Esse se refere aos casos em que as superfícies em contato possuem entre si uma fina camada de material viscoso, a qual dá origem a forças de viscosidade e de lubrificação que desempenham papel significativo juntamente com as forças normais. Essa camada pode até mesmo não existir inicialmente, e ser formada por derretimento localizado de material na região de contato, induzido pelo aumento de temperatura que se observa em decorrência do atrito. Este trabalho não considera esse tipo de atrito. A presença de lubrificantes ou de outros materiais de viscosidade razoavelmente elevada entre as partículas não é admitida, em conformidade com a hipótese de material granular seco.

O estudo do atrito seco é bastante antigo. Nos tempos modernos, remonta aos trabalhos de G. Amontons (1663–1705) sobre o deslizamento de blocos de madeira em superfícies rígidas, e também aos trabalhos de C.-A. Coulomb sobre a distinção entre atrito estático e atrito dinâmico pouco tempo depois. As chamadas leis de Amontons¹¹ são três e postulam que: (1) a força de atrito é diretamente proporcional à força normal externa aplicada; (2) a força de atrito não depende da área aparente de contato; e (3) havendo movimento tangencial, a força de atrito não depende da velocidade relativa de deslizamento (essa última é com frequência também chamada de lei de Coulomb, embora equivocadamente). Nos dias de hoje, sabe-se que as duas primeiras leis só são válidas quando não há forças de adesão entre as superfícies em contato, de forma a que o atrito resulte governado essencialmente pela ação da força normal externa aplicada. Havendo adesão, a força de atrito passa a ter uma parcela adicional, que é função da área de contato e também da intensidade das forças intermoleculares atuantes entre as superfícies. A terceira lei, por outro lado, é ainda hoje considerada razoavelmente válida – mesmo que já se saiba que uma fraca dependência da velocidade de fato exista (Israelachvili [47], p. 482). O conhecimento adquirido pelo homem a partir do estudo do atrito é hoje vasto e constitui uma importante subárea da ciência e das engenharias: a tribologia.

Quando um sólido é comprimido contra outro, mesmo que as suas velocidades tangenciais sejam impostas idealmente de forma constante em seu centro de massa, o movimento tangencial relativo na região do contato (i.e., entre as suas superfícies de contato) não é uniforme. Existe uma defasagem entre a resposta do sólido como corpo rígido – por exemplo, a velocidade de seu centro de massa, que está afastado da região de contato – e a resposta na região de contato – por exemplo, a velocidade de seus pontos da superfície de contato. A primeira pode ser uniforme, ao passo que a segunda é geralmente bastante não uniforme. Essa defasagem tem origem em parte na deformabilidade do sólido, que em geral depende da taxa de carregamento (mesmo que de forma fraca), e em parte na ocorrência de ciclos localizados de aderência e deslizamento (“*stick-slip*”) entre as diversas microrrugosidades de suas

¹¹ Essa designação não é de todo apropriada, posto que quem estudou e descreveu esses fenômenos pioneiramente foi L. da Vinci (1452–1519) (Israelachvili [47]), ainda no século XV. Os estudos de da Vinci, contudo, permaneceram guardados em suas notas pessoais até serem descobertos – e levados adiante – por Amontons muito tempo depois. É inegável, portanto, a contribuição de Amontons para o entendimento do atrito seco na forma como o conhecemos hoje.

superfícies na região de contato. Nem Amontons nem da Vinci mencionam sobre esse fenômeno em seus estudos. Coulomb, por outro lado, ao perceber a distinção entre atrito estático e atrito dinâmico, sugere indiretamente a existência de (e a diferença entre) aderência e deslizamento.

Neste trabalho, com a intenção de caracterizar as forças de atrito por meio de um modelo que seja razoavelmente simples, mas que ao mesmo tempo permita capturar os fenômenos essenciais envolvidos, como aderência, deslizamento e eventuais ciclos de aderência-deslizamento, adota-se um modelo de atrito semiempírico baseado no chamado modelo de Coulomb (ver, por exemplo, Wriggers [50]). Nesse, a força de atrito f^{atr} é acoplada à força normal de contato f^{con} por meio do coeficiente de atrito, μ , tal que a relação $f^{atr} \leq \mu_S f^{con}$ é válida quando há aderência, e $f^{atr} = \mu_D f^{con}$ é válida quando há deslizamento, sendo μ_S o coeficiente de atrito estático e $\mu_D \leq \mu_S$ o coeficiente de atrito dinâmico. Note-se que, quando há aderência, a força de atrito assume um valor (a princípio desconhecido) entre zero e $\mu_S f^{con}$. Esse valor é o valor necessário para fazer com que as superfícies dos corpos tenham velocidade relativa nula na direção tangencial de contato. No modelo de Coulomb, ele é determinado por meio de tentativas, a partir de uma equação constitutiva que procura descrever a deformação tangencial localizada experimentada pelas superfícies quando há aderência. Essa deformação é representada aqui pelo alongamento de um dispositivo mola-amortecedor tangencial fictício, em paralelo, posicionado no ponto de contato. Presume-se, inicialmente, que há aderência, calculando-se o alongamento da mola e a força correspondente no dispositivo; checka-se, em seguida, se essa força ultrapassa o limite do atrito estático. Em caso afirmativo, há deslizamento e a força de atrito é dada por $f^{atr} = \mu_D f^{con}$; caso contrário, há aderência, e a força de atrito é dada pelo oposto da força no dispositivo (i.e., pelo oposto da soma da força na mola com a força no amortecedor). O modelo é descrito em maiores detalhes a seguir.

Seja f_{ij}^{atr} a força de atrito que atua em uma partícula i devido ao contato com outra partícula j , com $f_{ji}^{atr} = -f_{ij}^{atr}$ a força correspondente que atua em j . Seja $f_{ij}^{atr,tent}$ a força de atrito *tentativa*, i.e., aquela que corresponde à hipótese de que há aderência, dada por

$$f_{ij}^{atr,tent} = -(k_{ij}^{atr} \Delta x_{ij}^{tent} + d_{ij}^{atr} v_{ij}), \quad (2.70)$$

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

$$\Delta x_{ij}^{tent} = \Delta x_{ij}^{accum} + \delta x_{ij}^{tent}, \quad (2.71)$$

onde Δx_{ij}^{accum} é o alongamento acumulado em instantes anteriores (i.e., alongamento adquirido por ter havido aderência em configurações anteriores) e δx_{ij}^{tent} é o alongamento incremental tentativa, i.e., é o acréscimo de alongamento devido à hipótese de haver aderência na configuração atual, cuja expressão será dada logo mais adiante. A velocidade de alongamento, por sua vez, é tomada como sendo a velocidade relativa entre as superfícies das partículas no ponto de contato P na direção tangente, designada por $v_{rel,t}^p$ (o índice “t” é utilizado para designar a direção tangente), i.e.,

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_{rel,t}^P = \mathbf{v}_{rel}^P - (\mathbf{v}_{rel}^P \cdot \mathbf{n}_{ij})\mathbf{n}_{ij}, \quad (2.72)$$

onde \mathbf{v}_{rel}^P é a velocidade relativa no ponto de contato¹². Essa última pode ser expressa por

$$\mathbf{v}_{rel}^P = \mathbf{v}_i^P - \mathbf{v}_j^P, \quad (2.73)$$

onde \mathbf{v}_i^P e \mathbf{v}_j^P são as velocidades do ponto de contato de i e de j , respectivamente, que são dadas por

$$\mathbf{v}_i^P = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{r}_i^P \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_j^P = \mathbf{v}_j + \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{r}_j^P, \quad (2.74)$$

sendo \mathbf{r}_i^P e \mathbf{r}_j^P os vetores que ligam os centros de i e j a P, respectivamente. Esses vetores, por sua vez, são dados por

$$\mathbf{r}_i^P = (r_i - \delta_i)\mathbf{n}_{ij} \quad \text{e} \quad \mathbf{r}_j^P = -(r_j - \delta_j)\mathbf{n}_{ij}, \quad (2.75)$$

onde δ_i e δ_j são o encurtamento local dos raios de i e de j no ponto P, respectivamente, que podem ser obtidos a partir da interpenetração δ_{ij} por meio de

$$\delta_i = \frac{E_i}{E^*} |\delta_{ij}| \quad \text{e} \quad \delta_j = \frac{E_j}{E^*} |\delta_{ij}|. \quad (2.76)$$

A expressão (2.76) decorre da teoria de Hertz e significa que o encurtamento do raio de cada partícula é uma fração da interpenetração total entre as partículas, dada na proporção de seus módulos de elasticidade em relação ao módulo de elasticidade equivalente do par. Quando a interpenetração é pequena (o que deve acontecer por hipótese), é aceitável fazer-se $\mathbf{r}_i^P \approx r_i \mathbf{n}_{ij}$ e $\mathbf{r}_j^P \approx -r_j \mathbf{n}_{ij}$.

A direção da força de atrito tentativa é designada pelo versor \mathbf{t}_{ij}^{tent} , e é dada por

$$\mathbf{t}_{ij}^{tent} = \frac{\mathbf{f}_{ij}^{atr,tent}}{\|\mathbf{f}_{ij}^{atr,tent}\|}. \quad (2.77)$$

Para verificar se a tentativa é válida ou admissível, i.e., se hipótese de aderência de fato se verifica, define-se uma função *critério de deslizamento*, F , dada por

$$F(\mathbf{f}_{ij}^{atr}) = \|\mathbf{f}_{ij}^{atr}\| - \mu_S \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\|, \quad (2.78)$$

tal que

$$\begin{cases} F(\mathbf{f}_{ij}^{atr,tent}) \leq 0 \Rightarrow \text{a tentativa é admissível (não há deslizamento)} \\ F(\mathbf{f}_{ij}^{atr,tent}) > 0 \Rightarrow \text{a tentativa não é admissível (há deslizamento)}. \end{cases} \quad (2.79)$$

Se a tentativa for admissível, a força de atrito entre i e j é tomada como sendo a força no dispositivo, i.e., $\mathbf{f}_{ij}^{atr} = \mathbf{f}_{ij}^{atr,tent}$, e o alongamento é igual ao alongamento tentativa, i.e., $\Delta \mathbf{x}_{ij} = \Delta \mathbf{x}_{ij}^{tent}$; caso contrário, há deslizamento, e logo $\mathbf{f}_{ij}^{atr} = \mu_D \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \mathbf{t}_{ij}$, onde $\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{t}_{ij}^{tent}$ é a direção de deslizamento.

¹² A rigor, existem *dois* pontos de contato, um pertencente à partícula i e outro pertencente à partícula j , já que o ponto de contato é um ponto material. Para simplificar a notação, contudo, utiliza-se aqui a designação “ponto P” para se referir indistintamente tanto ao ponto de contato de i quanto ao de j , fazendo-se a distinção onde necessário.

Nesse caso, o alongamento não é igual ao alongamento tentativa. Ele pode, contudo, ser obtido a partir desse último por meio de uma correção Δx_{ij}^{corr} , tal que não ultrapasse o máximo alongamento possível, que é o alongamento correspondente ao limite do atrito estático:

$$\Delta x_{ij} = \Delta x_{ij}^{tent} - \Delta x_{ij}^{corr} = \left(\frac{\|f_{ij}^{atr,tent}\|}{k_{ij}^{atr}} - \frac{\|f_{ij}^{atr,tent}\| - \mu_S \|f_{ij}^{con}\|}{k_{ij}^{atr}} \right) t_{ij}^{tent} = \frac{\mu_S \|f_{ij}^{con}\|}{k_{ij}^{atr}} t_{ij}^{tent}. \quad (2.80)$$

Note-se que a correção é feita na direção t_{ij}^{tent} da tentativa. Ela pode ser entendida como uma espécie de “método de retorno”, em analogia ao que é feito nos métodos de integração de tensões da teoria de plasticidade quando um estado elástico tentativa conduz a tensões que ultrapassam a tensão de escoamento do material. O estado elástico tentativa é, assim, o análogo a um *estado aderente tentativa*, e a tensão de escoamento o análogo ao limite do atrito estático.

Ao final da tentativa, faz-se

$$\Delta x_{ij}^{accum} \leftarrow \Delta x_{ij}, \quad (2.81)$$

de maneira que o alongamento adquirido pelo dispositivo na configuração atual seja guardado e assim permita o cálculo de novas tentativas num instante ou configuração seguintes (a notação $(\cdot) \leftarrow (\cdot)$ é introduzida acima para designar que a grandeza (\cdot) recebe o valor de (\cdot)). Aqui, novamente a analogia com os métodos de integração de tensões da teoria da plasticidade pode ser feita, onde o histórico de deformações plásticas precisa ser continuamente armazenado.

É interessante observar, de (2.80), que o modelo prevê um alongamento no dispositivo mesmo no caso de haver deslizamento. A princípio isso pode parecer contraditório, já que que o dispositivo é utilizado para representar a deformação devido à aderência. Mas do ponto de vista físico faz todo o sentido: para que haja deslizamento, mesmo que esse se inicie quase que imediatamente, tem-se primeiro que vencer o atrito estático entre as superfícies das partículas, o que implica deformá-las localmente na direção tangencial, i.e., implica solicitar o dispositivo até que ele atinja o seu máximo alongamento possível, além do qual não oferece resistência e o deslizamento se inicia.

Dois aspectos importantes precisam ser comentados. O primeiro é a obtenção do alongamento incremental tentativa, que pode ser feita de diferentes formas. Aqui, semelhantemente à ideia original de Cundall e Strack [8], e também seguida por diversos autores (vide, por exemplo, Pöschel e Schwager [4] e Avci e Wriggers [20]), faz-se

$$\delta x_{ij}^{tent} = \int_{t_a}^t v_{rel,t}^p(\tau) d\tau, \quad (2.82)$$

onde t_a é o instante anterior até o qual o alongamento acumulado é conhecido (i.e., instante correspondente à configuração anterior conhecida) e t é o instante da configuração atual, com $t_i \leq t_a < t$ e $t \leq t_f$, sendo t_i o instante de início do contato e t_f o instante de seu término. No caso geral, a integral acima não pode ser calculada analiticamente, em virtude de o integrando ser uma função desconhecida. É necessário, pois, recorrer a alguma aproximação, e isso é feito aqui utilizando o método

do trapézio generalizado, por meio do qual se escreve

$$\delta \mathbf{x}_{ij}^{\text{tent}} \cong \left[(1 - \varphi) \mathbf{v}_{rel,t}^p(t_a) + \varphi \mathbf{v}_{rel,t}^p(t) \right] (t - t_a), \quad 0 \leq \varphi \leq 1. \quad (2.83)$$

Quando $\varphi = 0$, a aproximação corresponde ao método de Euler explícito; quando $\varphi = 1$, ao método de Euler implícito; e quando $\varphi = 1/2$, ao método do trapézio clássico. O segundo aspecto é que, durante o contato, o plano tangente entre as partículas, no caso geral, não é fixo. Ele pode girar em decorrência do movimento das partículas, o que implica que o dispositivo fictício deve girar junto com ele. Para levar isso em consideração, é necessário, no início da tentativa, aplicar ao alongamento acumulado uma rotação igual àquela experimentada pelo plano tangente entre os instantes t_a e t . Alternativamente, conforme proposto em Luding [57] e Avci e Wriggers [20], pode-se, no início da tentativa, substituir o alongamento acumulado por sua projeção no plano tangente da configuração atual, o que é feito por meio da seguinte expressão:

$$\Delta \mathbf{x}_{ij}^{\text{acum}} \leftarrow \Delta \mathbf{x}_{ij}^{\text{acum}} - (\Delta \mathbf{x}_{ij}^{\text{acum}} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij}. \quad (2.84)$$

A utilização da projeção no lugar do alongamento rotacionado conduz a resultados praticamente idênticos àqueles obtidos com a utilização desse último. Isso se explica pelo fato de que no modelo acima a força de atrito é indeterminada quando há aderência, podendo assumir qualquer valor entre zero e $\mu_s \|\mathbf{f}_{ij}^{\text{con}}\|$, como comentado anteriormente. A projeção ou a rotação são apenas maneiras distintas de se determinar esse valor. A utilização de (2.84), contudo, é nitidamente mais vantajosa, uma vez que não requer o cálculo de uma rotação, e é preferida neste trabalho.

A rigidez k_{ij}^{atr} do dispositivo fictício é tomada aqui a partir da solução de Mindlin para a deformação tangencial experimentada pelas superfícies de dois corpos elásticos em aderência (vide Mindlin [58], e Crowe et al. [44], pp. 128-129; remete-se ainda a Johnson [49], pp. 202-224, para uma discussão mais abrangente), tal que

$$k_{ij}^{\text{atr}} = 8G^* \sqrt{r^*} |\delta_{ij}|^{1/2}, \quad (2.85)$$

onde

$$G^* = \frac{G_i G_j}{G_i + G_j} \quad (2.86)$$

é o módulo de elasticidade transversal equivalente do par de partículas em contato, e G_i e G_j os módulos de elasticidade transversal de i e de j , respectivamente. Já a constante de amortecimento d_{ij}^{atr} é aqui arbitrada a partir de considerações semelhantes àquelas feitas para o amortecimento na direção normal, i.e., a partir de uma taxa de amortecimento ξ_t desejada para o dispositivo tangencial fictício, tal que

$$d_{ij}^{\text{atr}} = 2\xi_t \sqrt{m^* k_{ij}^{\text{atr}}} \quad (2.87)$$

(o índice “t” é utilizado em ξ_t para explicitar que se trata do amortecimento na direção tangencial ao contato).

A resultante das forças de atrito que atuam sobre a partícula i , decorrente de seus contatos com n_i^{con} outras partículas do sistema, é dada por

$$\mathbf{f}_i^{atr} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{con}} \mathbf{f}_{ij}^{atr}. \quad (2.88)$$

Nota. O modelo apresentado nesta seção é um modelo *regularizado* de atrito, no sentido de que, se o contato entre as partículas for tal que deva haver aderência, a força de atrito necessária para fazer com que as suas superfícies adquiram velocidade relativa tangente nula é aplicada de forma gradual, e não abrupta. Isso explica o fato de, nos instantes iniciais do contato, existir um \mathbf{v}_{ij} em (2.70), que pode ser diferente de zero e atinge valor nulo somente algum tempo depois, em algum instante entre t_i e t_f . Em outras palavras, a aderência, se houver, ocorre somente em alguma configuração posterior à do início do contato. Pode ainda ocorrer, subsequentemente ao instante em que há aderência, perda de aderência antes de o contato ser finalizado, em decorrência de a força normal \mathbf{f}_{ij}^{con} ser variável durante o contato. Isso reconduz \mathbf{v}_{ij} a valores diferentes de zero, eventualmente resultando em oscilações do tipo aderência-deslizamento durante o restante do contato. É notável que modelos regularizados baseados no modelo de Coulomb, embora extremamente simples, sejam capazes de capturar com razoável fidelidade fenômenos tão complexos decorrentes do atrito, como a aderência, o deslizamento, e as oscilações entre esses dois estados. Modelos regularizados têm ainda a vantagem de que suavizam as discontinuidades que seriam observadas no movimento das partículas caso a força de atrito fosse aplicada abruptamente.

Nota. Um modelo alternativo em relação ao modelo apresentado nesta seção, em que o alongamento tentativa é calculado de maneira diferente daquela dada por (2.82), pode ser encontrado em Campello [59]. Esse, por sua vez, é baseado no modelo proposto por Gay Neto et al. [60] para o atrito entre barras, o qual também é utilizado em Brasiel [39]. Ressalta-se que os resultados obtidos com o uso de um ou outro são praticamente idênticos. A vantagem do modelo aqui apresentado é que a expressão do alongamento tentativa é ligeiramente mais simples, além de mais eficiente do ponto de vista computacional por não envolver o uso do tensor rotação.

2.11 Momentos devidos às forças de atrito

Como já mencionado, as forças de atrito não são forças centrais. Elas têm excentricidade em relação aos centros de massa das partículas em que atuam e tendem, portanto, a girá-las em relação aos mesmos, afetando-lhes o movimento rotacional. O momento induzido em uma partícula i devido ao atrito com outra partícula j é dado por

$$\mathbf{m}_{ij}^{atr} = \mathbf{r}_i^p \times \mathbf{f}_{ij}^{atr}, \quad (2.89)$$

onde, recorda-se, \mathbf{r}_i^p é o vetor que liga o centro de massa de i ao ponto de contato P com j , dado por (2.75). A resultante dos momentos devidos às forças de atrito que atuam sobre i , decorrente de seus

contatos com n_i^{con} outras partículas do sistema, é dada por

$$\mathbf{m}_i^{atr} = \sum_{j=1, j \neq i}^{n_i^{con}} \mathbf{m}_{ij}^{atr}. \quad (2.90)$$

Nota. Quando existe movimento de rolamento entre i e j , i.e., quando as partículas têm velocidade angular não nula mas velocidade translacional relativa igual a zero no ponto de contato, pode aparecer a chamada *resistência ao rolamento*. Isso ocorre em virtude de haver histerese no contato, combinado com o fato de que as partículas se tocam na verdade em uma superfície de contato e não em um ponto, como já comentado. A histerese faz com que a pressão de contato seja ligeiramente maior na região anterior ou da “frente” da superfície de contato (tornando-a mais comprimida) do que na região posterior ou da sua “traseira” (que é menos comprimida). Essa diferença causa uma leve excentricidade na resultante de pressão em relação ao centro de massa de cada partícula, que por sua vez gera um momento oposto ao rolamento – daí chamado de resistência ao rolamento. Em geral, quanto mais deformáveis forem as partículas, mais pronunciado é esse efeito, já que a superfície de contato pode ser relativamente grande e assim induzir maior excentricidade. Neste trabalho, a resistência ao rolamento é considerada desprezível (à exceção de dois exemplos do Capítulo 4, conforme explicado mais adiante). Ela pode, contudo, ser incorporada sem maiores dificuldades. Para tanto, um termo adicional \mathbf{m}_i^{rol} deve ser acrescentado à expressão (2.31). O momento de resistência ao rolamento que atua em uma partícula i devido ao rolamento sobre outra partícula j , \mathbf{m}_{ij}^{rol} , pode ser caracterizado por uma equação constitutiva, por exemplo na forma de um dispositivo rotacional fictício análogo ao dispositivo tangencial do atrito. Um modelo simples pode ser obtido considerando um amortecedor sobre a velocidade angular de rolamento; outro, um pouco mais elaborado, é considerando uma mola rotacional em paralelo com o amortecedor, conforme proposto em Iwashita e Oda [61]; refere-se ainda ao modelo de Jiang et al. [62].

2.12 Interação com paredes ou superfícies rígidas

As forças de adesão, contato e atrito das seções anteriores foram apresentadas apenas para o caso de interações entre partículas. No caso de as partículas interagirem também com paredes ou superfícies rígidas, as forças correspondentes podem ser escritas como um caso particular das primeiras. Para tal, admite-se que o tamanho, a rigidez e a massa inercial das paredes (ou superfícies rígidas) são muito maiores do que os valores correspondentes das partículas.

Considere-se a interação entre uma partícula i e uma parede w , cuja interpenetração δ_{iw} é dada por

$$\delta_{iw} = d_{iw} - r_i, \quad (2.91)$$

onde d_{iw} é a distância entre o centro de i e a face de w . A medida de deformação na região do contato entre i e w é dada por

$$\varepsilon_{iw} = \frac{|\delta_{iw}|}{r_i}. \quad (2.92)$$

Fazendo-se $r_w \rightarrow \infty$, $E_w \rightarrow \infty$, $m_w \rightarrow \infty$ e $G_w \rightarrow \infty$ em (2.56), (2.61) e (2.86), respectivamente, o raio equivalente, o módulo de elasticidade equivalente, a massa equivalente e o módulo de elasticidade transversal equivalente de i e w resultam em

$$r^* = r_i, \quad E^* = E_i, \quad m^* = m_i \quad e \quad G^* = G_i. \quad (2.93)$$

Com (2.91)–(2.93), a força de adesão e a força de contato entre i e w podem ser obtidas por meio das mesmas expressões apresentadas anteriormente, i.e., por (2.52) e (2.55), respectivamente. A força de atrito, por sua vez, pode ser obtida por meio do mesmo modelo regularizado apresentado na Seção 2.10, com um correspondente momento sobre i . Na expressão dessas forças, observa-se que a direção central \mathbf{n}_{iw} é agora dada pelo vetor normal (unitário) à parede w no ponto de contato com i , apontando no sentido de i para w . Esse vetor deve ser calculado a partir dos dados que definem a geometria da parede. No caso de paredes planas, por exemplo, \mathbf{n}_{iw} é igual ao vetor normal que define o plano da parede, sendo portanto o mesmo para todos os pontos de w ; no caso de paredes fixas (imóveis), \mathbf{n}_{iw} é constante no tempo para cada ponto de w , sendo portanto igual ao \mathbf{n}_{iw} da configuração inicial para cada ponto.

A adesão da partícula i a $n_i^{ad,w}$ paredes ou superfícies rígidas gera a contribuição

$$\sum_{w=1}^{n_i^{ad,w}} \mathbf{f}_{iw}^{ad} \quad (2.94)$$

na resultante das forças de adesão (2.53). Já o contato de i com $n_i^{con,w}$ paredes gera a contribuição

$$\sum_{w=1}^{n_i^{con,w}} \mathbf{f}_{iw}^{con} \quad (2.95)$$

na resultante das forças de contato (2.69), a contribuição

$$\sum_{w=1}^{n_i^{con,w}} \mathbf{f}_{iw}^{atr} \quad (2.96)$$

na resultante das forças de atrito (2.88), e a contribuição

$$\sum_{w=1}^{n_i^{con,w}} \mathbf{m}_{iw}^{atr} \quad (2.97)$$

na resultante dos momentos devidos às forças de atrito (2.90).

Nota. Eventualmente, forças de atração e repulsão entre partículas e paredes (induzidas, por exemplo, por cargas elétricas distribuídas na superfície dessas últimas, com uma densidade de carga conhecida) também podem ser consideradas.

3 Solução numérica das equações do sistema e aspectos computacionais associados

3.1 Considerações iniciais

As forças e os momentos totais que atuam em uma partícula em um determinado instante t , correspondente à configuração atual do sistema, dependem, no caso geral, das posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares de todas as outras partículas nesse mesmo instante, i.e.,

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i^{tot} &= \hat{\mathbf{f}}_i^{tot}(\mathbf{x}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, 2, \dots, N_P \\ \mathbf{m}_i^{tot} &= \hat{\mathbf{m}}_i^{tot}(\mathbf{x}_j, \mathbf{v}_j, \boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\omega}_j), \quad j = 1, 2, \dots, N_P. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Esse aspecto já foi mencionado na Seção 2.4, e ficou evidenciado nas seções subsequentes do Capítulo 2. Como consequência, as equações que governam a dinâmica do sistema, dadas por (2.33), formam um sistema de equações diferenciais fortemente acoplado, que invariavelmente (salvo casos muito simples, e envolvendo um número muito pequeno de partículas) requer solução numérica. Para partículas esféricas, como é o caso da formulação do MED proposta neste trabalho, a dependência de \mathbf{f}_i^{tot} e \mathbf{m}_i^{tot} na orientação espacial $\boldsymbol{\alpha}_j$ em geral não existe ou é irrelevante, mas isso não diminui de maneira significativa o acoplamento observado entre as equações¹³.

Este capítulo apresenta um método para a solução numérica de (2.33). Ele é baseado no método proposto por Zohdi [5], que por sua vez consiste em uma aplicação particular do método do trapézio para a integração de equações diferenciais ordinárias. Deve ser entendido como uma generalização do método de Zohdi [5], no sentido de que considera a rotação e a velocidade angular das partículas (o método original foi desenvolvido para sistemas sem graus de liberdade de rotação). Além disso, é aqui aplicado à solução de sistemas cujos contatos são descritos pelo modelo de esferas deformáveis, com o atrito sendo dado pelo modelo incremental regularizado – em contraste a formulação de Zohdi [5], que adota o modelo de esferas rígidas e um esquema correspondente para o atrito.

¹³ Se o modelo de atrito de Campello [59] (que é baseado no modelo para barras de Gay Neto et al. [60]) for utilizado no lugar do modelo da Seção 2.10, a dependência nas rotações incrementais existe.

3.2 Solução numérica das equações do sistema

As equações (2.33) são equações diferenciais ordinárias de segunda ordem na variável independente t . Para proceder à sua solução numérica, deve-se primeiramente selecionar um intervalo de interesse (t_0, t_F) , com t_0 sendo o instante inicial, em que o estado do sistema é conhecido, e t_F o instante final, em que é desconhecido. Em seguida, deve-se discretizar esse intervalo em instantes $\{t_0, t_1, t_2, \dots, t_i, t_{i+1}, \dots, t_F\}$, sendo conveniente fazer-se $t_0 = 0$, por simplicidade. Entre dois instantes consecutivos quaisquer, t_i e t_{i+1} , admite-se que a configuração correspondente a t_i é a configuração de referência, e a configuração correspondente a t_{i+1} é a configuração atual. Iniciando-se com $i = 0$, e utilizando as expressões apresentadas logo mais a seguir, procede-se então, para todos os pares de instantes consecutivos, à obtenção das posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares das partículas na configuração atual a partir dos seus valores conhecidos na configuração de referência. Uma vez que essas grandezas são obtidas, faz-se $i \leftarrow i + 1$ (i.e., a configuração atual passa ser a nova configuração de referência) e procede-se à determinação do estado do sistema no instante seguinte. O procedimento é repetido até que $t_{i+1} = t_F$. Essa abordagem conduz a uma descrição do movimento que é do tipo lagrangiana atualizada. As expressões necessárias à sua execução são apresentadas a seguir.

Seja $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ o intervalo de tempo entre dois instantes consecutivos quaisquer, e sejam $t = t_i$ o instante da configuração de referência e $t + \Delta t = t_{i+1}$ o instante da configuração atual (a notação com o índice sobre os instantes será doravante abandonada para evitar ambiguidade com o índice das partículas). Considerem-se os vetores aceleração e aceleração angular de uma partícula, que estão relacionados aos vetores velocidade e velocidade angular por meio de

$$\mathbf{a}_i = \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \quad \text{e} \quad \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt}. \quad (3.2)$$

A integração no tempo das equações (2.33) entre t e $t + \Delta t$, considerando (3.2), fornece

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{m_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot}(\tau) d\tau, \\ \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{1}{j_i} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot}(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (3.3)$$

As integrais do lado direito de (3.3) não podem, no caso geral, ser calculadas analiticamente, pois os integrandos não são funções conhecidas. Elas são aqui aproximadas por meio do método do trapézio generalizado, tal que

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{tot}(\tau) d\tau &\cong \left[(1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t) \right] \Delta t, \\ \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{m}_i^{tot}(\tau) d\tau &\cong \left[(1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t) \right] \Delta t, \quad 0 \leq \phi \leq 1. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Como o estado do sistema é conhecido na configuração de referência, os vetores $\mathbf{f}_i^{tot}(t)$ e $\mathbf{m}_i^{tot}(t)$ em (3.4) são conhecidos, mas $\mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t)$ e $\mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t)$ não o são. Assim, quando $\phi = 0$, a aproximação corresponde ao método de Euler explícito; quando $\phi = 1$, ao método de Euler implícito; e

quando $\phi = 1/2$, ao método do trapézio clássico. Inserindo-se (3.4) em (3.3), tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \left[(1 - \phi) \mathbf{f}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t) \right], \\ \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t) + \frac{\Delta t}{j_i} \left[(1 - \phi) \mathbf{m}_i^{tot}(t) + \phi \mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t) \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Sejam agora $\mathbf{v}_{i,m}$ e $\boldsymbol{\omega}_{i,m}$ os vetores velocidade e velocidade angular de uma partícula em um instante de tempo intermediário t_m entre t e $t + \Delta t$. As seguintes aproximações são aqui adotadas:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{i,m} &= \frac{1}{\Delta t} \left[\mathbf{x}_i(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t) \right], \\ \boldsymbol{\omega}_{i,m} &= \frac{1}{\Delta t} \boldsymbol{\alpha}_i^A(t + \Delta t), \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde implicitamente se convencionou que $\boldsymbol{\alpha}_i^A(t) = \mathbf{0}$ ¹⁴. De (3.6), decorre

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \mathbf{v}_{i,m} \Delta t, \\ \boldsymbol{\alpha}_i^A(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_{i,m} \Delta t, \end{aligned} \quad (3.7)$$

e dessa, fazendo uso das interpolações

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{i,m} &\cong \left[(1 - \phi) \mathbf{v}_i(t) + \phi \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \right], \\ \boldsymbol{\omega}_{i,m} &\cong \left[(1 - \phi) \boldsymbol{\omega}_i(t) + \phi \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) \right], \quad 0 \leq \phi \leq 1, \end{aligned} \quad (3.8)$$

tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \left[(1 - \phi) \mathbf{v}_i(t) + \phi \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \right] \Delta t, \\ \boldsymbol{\alpha}_i^A(t + \Delta t) &= \left[(1 - \phi) \boldsymbol{\omega}_i(t) + \phi \boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t) \right] \Delta t. \end{aligned} \quad (3.9)$$

As expressões (3.9), com $\mathbf{v}_i(t + \Delta t)$ e $\boldsymbol{\omega}_i(t + \Delta t)$ dadas por (3.5), e $i = 1, \dots, N_P$, constituem um sistema de equações por meio do qual as posições, rotações incrementais, velocidades e velocidades angulares de todas as partículas podem ser obtidas uma vez que $\mathbf{x}_i(t)$, $\mathbf{v}_i(t)$ e $\boldsymbol{\omega}_i(t)$ sejam conhecidos. Sua solução, contudo, não pode ser efetuada de forma direta, já que (3.5) envolve $\mathbf{f}_i^{tot}(t + \Delta t)$ e $\mathbf{m}_i^{tot}(t + \Delta t)$ e esses, por sua vez, são funções de todas as posições, velocidades, orientações espaciais e velocidades angulares no instante $t + \Delta t$, conforme (3.1). É necessário, assim, recorrer a métodos iterativos. Neste trabalho, adota-se um método de ponto fixo baseado no esquema proposto por Zohdi [5] (ver também Zohdi [63] e [64]). Ele é relativamente simples e fácil de ser codificado, sendo apresentado a seguir na forma de algoritmo:

Algoritmo 1. Método iterativo para solução das equações do sistema entre dois instantes de tempo consecutivos.

¹⁴ Em (3.6) deve-se notar que, a despeito de a expressão que define o vetor velocidade angular envolver o tensor $\boldsymbol{\Xi}_\Delta$ (vide (2.18) no Capítulo 2), a aproximação adotada para $\boldsymbol{\omega}_{i,m}$ é válida uma vez que satisfaz o requisito de consistência numérica. Em outras palavras, ela reproduz (2.18) quando $\Delta t \rightarrow 0$, já que nesse caso $\boldsymbol{\Xi}_\Delta \rightarrow \mathbf{I}$.

Sejam t , Δt , ϕ , $\mathbf{x}_i(t)$, $\boldsymbol{\alpha}_i(t)$, $\mathbf{v}_i(t)$ e $\boldsymbol{\omega}_i(t)$ conhecidos, e seja K o contador das iterações, com $(\cdot)^K$ o valor assumido pela grandeza (\cdot) na iteração K . Fazer:

1. Inicializar contador: $K = 0$;
2. Arbitrar previsor ou estimativa inicial:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_i^K(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t, \\ \mathbf{v}_i^K(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t), \\ \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K}(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t)\Delta t, \\ \boldsymbol{\omega}_i^K(t + \Delta t) &= \boldsymbol{\omega}_i(t);\end{aligned}$$

3. Para cada partícula i , $i = 1, \dots, N_P$, fazer:

- 3.1. Calcular as forças e momentos totais em $t + \Delta t$ (utilizando as expressões do Capítulo 2):

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

- 3.2. Atualizar as velocidades e velocidades angulares:

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

- 3.3. Atualizar as posições e rotações incrementais:

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

4. Calcular erros:

$$\begin{aligned}\text{error}(\mathbf{x}) &= \frac{\sum_{i=1}^{N_P} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_P} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t)\|}, \\ \text{error}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) &= \frac{\sum_{i=1}^{N_P} \|\boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K}(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_P} \|\boldsymbol{\alpha}_i^{\Delta,K+1}(t + \Delta t)\|};\end{aligned}$$

5. Checar convergência:

- 5.1. Se $\text{error}(\mathbf{x}) \leq \text{tol}_x$ e $\text{error}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) \leq \text{tol}_{\alpha^\Delta}$, a solução convergiu. Atualizar as rotações totais $\boldsymbol{\alpha}_i(t + \Delta t)$, fazer $t \leftarrow t + \Delta t$ e repetir o algoritmo para o próximo passo de tempo (i.e., para o próximo par de instantes consecutivos);
- 5.2. Se $\text{error}(\mathbf{x}) > \text{tol}_x$ ou $\text{error}(\boldsymbol{\alpha}^\Delta) > \text{tol}_{\alpha^\Delta}$, a solução não convergiu. Fazer $K \leftarrow K + 1$ e repetir os passos 3, 4 e 5 acima.

No passo 2, o previsor (ou estimativa inicial) é arbitrado supondo-se que as partículas sofrerão movimento uniforme entre t e $t + \Delta t$, i.e., supondo-se que as velocidades e velocidades angulares serão constantes no intervalo, sendo as posições e rotações incrementais obtidas correspondentemente. Outros

previsores também são possíveis. Pode-se, por exemplo, supor que o sistema permanecerá estático e, logo, com posições e orientações espaciais em $t + \Delta t$ iguais às em t , com velocidades e velocidades angulares nulas. Na experiência do autor, a hipótese de movimento uniforme é mais indicada pois, no geral, as partículas têm algum movimento entre t e $t + \Delta t$ – mesmo que pequeno. Assim, conduz a uma estimativa que costuma ser mais próxima da solução (uma exceção é o caso de sistemas globalmente estáticos, i.e., sistemas em que se sabe, a priori, que as partículas devem permanecer mais ou menos paradas ao longo do tempo).

As grandezas $tol\omega$ e $tol\alpha^A$ que aparecem no passo 5 são as tolerâncias do critério de convergência, referentes às posições e às rotações incrementais, respectivamente. Devem ser números pequenos, tão menores quanto mais precisa se deseje a solução. Valores típicos são da ordem de 10^{-6} . Note-se que as rotações totais, $\alpha_i(t + \Delta t)$, só são atualizadas uma vez que a convergência é atingida, em 5.1. Isso é feito por meio da fórmula da composição de rotações de Rodrigues, tal que

$$\alpha_i(t + \Delta t) = \frac{4}{4 - \alpha_i(t) \cdot \alpha_i^A(t + \Delta t)} \left(\alpha_i(t) + \alpha_i^A(t + \Delta t) - \frac{1}{2} \alpha_i(t) \times \alpha_i^A(t + \Delta t) \right). \quad (3.10)$$

Destaca-se que o método não envolve o uso de matrizes, o que é uma peculiaridade notável do ponto de vista computacional.

Um detalhe importante deve ser comentado. Em uma iteração, ao se executar 3.1 para uma partícula i , as posições, velocidades, rotações incrementais e velocidades angulares das partículas $j < i$ já terão sido atualizadas. Logo, podem ser utilizadas para calcular as forças e momentos de i . Dito de outra forma, os vetores $f_i^{tot,K+1}(t + \Delta t)$ e $m_i^{tot,K+1}(t + \Delta t)$ de i podem ser calculados utilizando $x_j^{K+1}(t + \Delta t)$, $v_j^{K+1}(t + \Delta t)$, $\alpha_j^{A,K+1}(t + \Delta t)$ e $\omega_j^{K+1}(t + \Delta t)$, se $j < i$; se $j \geq i$, utilizam-se $x_j^K(t + \Delta t)$, $v_j^K(t + \Delta t)$, $\alpha_j^{A,K}(t + \Delta t)$ e $\omega_j^K(t + \Delta t)$. Isso é análogo ao que é feito nos métodos iterativos do tipo Gauss-Seidel de solução de sistemas de equações lineares, e acelera a convergência (nos casos em que há convergência) ou a divergência (nos casos em que há divergência) se comparado a uma versão do método que utiliza $x_j^K(t + \Delta t)$, $v_j^K(t + \Delta t)$, $\alpha_j^{A,K}(t + \Delta t)$ e $\omega_j^K(t + \Delta t)$ para todo j (essa última, por sua vez, seria análoga ao que é feito nos métodos iterativos do tipo Jacobi).

É possível demonstrar que o método tem convergência garantida, desde que as forças e momentos que atuam sobre as partículas assumam valores finitos e não variem exageradamente entre t e $t + \Delta t$. Essa exigência pode ser atendida sem maiores dificuldades se o tamanho do passo de integração for escolhido adequadamente, tal que as forças e momentos sejam funções suficientemente bem comportadas no intervalo Δt . A demonstração de convergência envolve o conceito de contração ou aplicação contrativa, além do chamado teorema da contração, que garante a existência e unicidade de pontos fixos de aplicações contrativas. Em linhas gerais, escrevem-se as expressões do passo 3.3 como a soma de duas funções, uma que agrupa as grandezas em t e outra as grandezas em $t + \Delta t$. Em seguida, escreve-se a expressão do erro (com relação à solução exata) e mostra-se que, se Δt for suficientemente pequeno e as forças e momentos assumirem valores finitos em $t + \Delta t$ (e não exageradamente diferentes em relação aos seus valores em t), a segunda função é uma aplicação contrativa, sendo essa uma condição suficiente para que o erro decresça entre duas iterações consecutivas. Mostra-se, aliás, que esse decréscimo é

linear ou no máximo superlinear, a depender da natureza das forças e momentos envolvidos. Assim, o erro tende a zero com o progresso das iterações e a convergência fica assegurada. O leitor interessado pode consultar Zohdi [63] e [5] para maiores detalhes.

Nota. Existem duas conotações para o termo *convergência* quando se resolve a dinâmica de um sistema de partículas por meio de métodos como o descrito nesta seção, e é importante não confundir-las. Uma se refere à convergência dentro de um passo de integração, que aqui é a convergência do método iterativo de ponto fixo conforme comentado logo acima, a qual é linear ou no máximo superlinear. A outra se refere à convergência do método numérico de discretização do tempo e integração das equações diferenciais do movimento, que aqui é o método do trapézio generalizado. Esse último, como se sabe, tem taxa de convergência de ordem 1 quando $\phi = 0$ (i.e., tem acurácia de primeira ordem quando é explícito), e de ordem 2 quando $\phi = 1/2$ (i.e., tem acurácia de segunda ordem quando é o método implícito do trapézio clássico).

3.3 Erro e critério de convergência do método iterativo

No método acima, o erro de uma iteração é medido pelas grandezas normalizadas $\text{error}(\mathbf{x})$ e $\text{error}(\alpha^\Delta)$, definidas no passo 4. Os normalizadores adotados nessas grandezas são a norma do incremento das posições e a norma do incremento das rotações, respectivamente. Pode acontecer, em um determinado instante ou passo de integração, de eles tenderem a zero ou a um número muito pequeno, causando um problema de divisão por zero ou de perda de precisão na aritmética de ponto flutuante – o que acaba por estragar o erro e, por conseguinte, o critério de convergência, dado no passo 5. É o que acontece, por exemplo, quando o sistema atinge (ou se aproxima de) uma configuração estática de equilíbrio, com as partículas permanecendo imóveis ou quase imóveis entre t e $t + \Delta t$, tal que $\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) \approx \mathbf{x}_i(t)$ e $\alpha_i^{\Delta, K+1}(t + \Delta t) \approx \mathbf{o}$. Para contornar essas situações, deve-se sempre checar o valor dos normalizadores, adotando-se normalizadores alternativos quando necessário. Aqui, considerando operações em precisão dupla¹⁵, acrescentam-se as seguintes condições no passo 4:

$$\begin{aligned} \text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t)\| < 10^{-14} \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\|, \quad \text{então} \\ \text{error}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\|}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

e

$$\begin{aligned} \text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\alpha_i^{\Delta, K+1}(t + \Delta t)\| < 10^{-14}, \quad \text{então} \\ \text{error}(\alpha^\Delta) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\alpha_i^{\Delta, K+1}(t + \Delta t) - \alpha_i^{\Delta, K}(t + \Delta t)\|. \end{aligned} \quad (3.12)$$

¹⁵ Na representação de ponto flutuante com precisão dupla, um número real hexadecimal possui cerca de quinze algarismos significativos (a quantidade exata varia de número para número, conforme a sua conversão do sistema binário para o hexadecimal).

Quando $\text{error}(\mathbf{x})$ passa a ser dado por (3.11), deve-se ainda verificar se o novo normalizador também não é zero ou próximo de zero, alterando-o em caso afirmativo conforme abaixo:

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t)\| < 10^{-14}, \quad \text{então} \quad (3.13)$$

$$\text{error}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{x}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i^K(t + \Delta t)\|.$$

Nesse caso, como $\text{error}(\mathbf{x})$ deixa de ser normalizado, é recomendável alterar tolx para um valor mais restritivo – por exemplo, 10^{-15} . Da mesma forma, quando $\text{error}(\boldsymbol{\alpha}^A)$ passa a ser dado por (3.12) (e portanto deixa de ser normalizado), é recomendável alterar $\text{tol}\boldsymbol{\alpha}^A$ para um valor mais restritivo – por exemplo, 10^{-15} .

Opcionalmente, é possível introduzir no critério de convergência um controle também sobre o erro das velocidades e velocidades angulares. Para tanto, pode ser incluído no passo 4 o cálculo das seguintes grandezas:

$$\text{error}(\mathbf{v}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i^K(t)\|} \quad \text{e} \quad (3.14)$$

$$\text{error}(\boldsymbol{\omega}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\omega}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\boldsymbol{\omega}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\omega}_i^K(t)\|},$$

fazendo-se no passo 5 a checagem contra as tolerâncias correspondentes tolv e $\text{tol}\boldsymbol{\omega}$, respectivamente. A vantagem de se incluir (3.14) é que a solução ganha mais precisão, melhorando, por exemplo, os momentos linear e angular do sistema e também a sua energia cinética (já que essas grandezas dependem diretamente das velocidades e velocidades angulares). A desvantagem é que, no geral, implica um número ligeiramente maior de iterações em um passo de tempo até que a convergência seja atingida. Esse último aspecto pode ser atenuado escolhendo-se valores adequados para tolv e $\text{tol}\boldsymbol{\omega}$. Na experiência do autor, um bom compromisso entre precisão e eficiência computacional é que essas tolerâncias sejam uma ou duas ordens de grandeza maiores do que tolx e $\text{tol}\boldsymbol{\alpha}^A$, respectivamente. Assim, valores típicos podem ser da ordem de 10^{-5} ou 10^{-4} .

Deve-se notar que os normalizadores de $\text{error}(\mathbf{v})$ e $\text{error}(\boldsymbol{\omega})$ em (3.14) também podem causar problemas quando tendem a zero ou a um número muito pequeno. Assim, esquema análogo ao que é feito para as posições e rotações incrementais deve ser adotado, impondo-se seguintes condições:

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i^K(t)\| < 10^{-14} \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t)\|, \quad \text{então} \quad (3.15)$$

$$\text{error}(\mathbf{v}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t)\|};$$

e

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\omega_i^{K+1}(t + \Delta t) - \omega_i^K(t)\| < 10^{-14} \sum_{i=1}^{N_p} \|\omega_i^{K+1}(t + \Delta t)\|, \quad \text{então}$$

$$\text{error}(\omega) = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \|\omega_i^{K+1}(t + \Delta t) - \omega_i^K(t + \Delta t)\|}{\sum_{i=1}^{N_p} \|\omega_i^{K+1}(t + \Delta t)\|}. \quad (3.16)$$

Caso $\text{error}(\mathbf{v})$ ou $\text{error}(\omega)$ passem a ser dados por (3.15) ou (3.16), deve-se verificar se seus novos normalizadores também não são zero ou próximos de zero, alterando-os em caso afirmativo conforme abaixo:

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t)\| < 10^{-14}, \quad \text{então}$$

$$\text{error}(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\mathbf{v}_i^{K+1}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i^K(t + \Delta t)\|; \quad (3.17)$$

e

$$\text{se } \sum_{i=1}^{N_p} \|\omega_i^{K+1}(t + \Delta t)\| < 10^{-14}, \quad \text{então}$$

$$\text{error}(\omega) = \sum_{i=1}^{N_p} \|\omega_i^{K+1}(t + \Delta t) - \omega_i^K(t + \Delta t)\|, \quad (3.18)$$

sendo recomendável nesses casos que se adotem valores mais restritivos para $tolv$ e $tol\omega$, já que os erros deixam de ser normalizados.

3.4 Tamanho do passo de integração e adaptação automática

Em sistemas de várias partículas, a discretização do tempo deve ser densa ou refinada o suficiente para garantir que todos os possíveis contatos sejam detectados durante o intervalo de solução. Como a detecção é feita calculando-se o valor das grandezas δ_{ij} e δ_{iw} (vide equações (2.50) e (2.91), respectivamente) para todos os pares de partículas e superfícies rígidas do sistema (ou, ao menos, para todos os pares que estão relativamente próximos entre si, conforme descrito na próxima seção), um dos aspectos que deve ser levado em consideração na definição do Δt é a distância máxima que as partículas podem percorrer entre dois instantes consecutivos da discretização. Essa distância não pode, evidentemente, exceder o diâmetro da menor das partículas, caso contrário um possível contato dessa com outras partículas (ou com superfícies rígidas) seria “perdido” ou não detectado.

Um outro aspecto a ser considerado – esse bem mais restritivo – é que a utilização do modelo de esferas deformáveis para a caracterização do contato requer que a trajetória das partículas seja descrita durante o contato, i.e., requer que as equações do movimento sejam resolvidas durante o mesmo. Isso implica que a discretização deve ser tal que sempre haja instantes de tempo *durante* os contatos. Como, em geral, os contatos têm duração muito curta comparativamente ao tamanho do intervalo (t_0, t_F) , é inevitável que isso resulte em passos de tempo muito pequenos. Mesmo nos casos em que os contatos são relativamente “longos” ou duradouros, a utilização de passos pequenos é necessária em virtude de as forças de contato serem variáveis no tempo (aliás, em geral de forma não linear, conforme a expressão (2.54), e em particular neste trabalho, conforme (2.55)), com um período de vibração associado, e assim

exigirem uma discretização relativamente refinada para que sejam integradas com razoável acurácia. De acordo com a teoria de Hertz, a duração Δt_c do contato entre duas partículas (ou entre uma partícula e uma superfície rígida) é dada pela seguinte expressão (vide, por exemplo, Johnson [49], pp. 351-353)

$$\Delta t_c \cong 2,87 \left[\frac{(m^*)^2}{r^* (E^*)^2 v_{rel}} \right]^{1/5}, \quad (3.19)$$

onde, recorda-se, m^* , r^* e E^* são a massa, o raio e o módulo de elasticidade equivalentes do par em contato, e v_{rel} é a velocidade relativa de aproximação do par na sua direção central no instante em que o contato se inicia. Chamando de $\Delta t_{c,\min}$ a menor das durações de todos os possíveis contatos do sistema, recomenda-se aqui o uso do seguinte critério:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta t_{c,\min}}{10}. \quad (3.20)$$

Isso garante que ao menos dez instantes de tempo serão utilizados para descrever todos os contatos. Na experiência do autor, esse número é suficiente para que se tenha uma acurácia razoavelmente aceitável na solução¹⁶. Deve-se observar que o cálculo de $\Delta t_{c,\min}$ por meio de (3.19) envolve a velocidade v_{rel} , que em geral não é conhecida. Essa, contudo, pode ser estimada (ou ao menos ter a sua ordem de grandeza conhecida) sem maiores dificuldades, com base nas características do sistema em estudo. O uso de um valor apenas estimado não chega a ser um problema, uma vez que o expoente de (3.19) faz com que Δt_c seja pouco sensível a variações em v_{rel} .

Considerações semelhantes se aplicam com relação à integração no tempo das forças de atração e repulsão e das forças de adesão, dadas respectivamente por (2.44) e (2.52). Essas forças também são variáveis no tempo (com variação governada pelos parâmetros α_{at} , α_{rep} e β , respectivamente), e logo o passo de integração deve ser definido considerando o seu período de vibração e o seu grau de não linearidade, de modo a que possam ser integradas com a acurácia adequada. Aqui, fazendo-se uma analogia entre as interações representadas por essas forças e a vibração de um dispositivo massa-mola de um grau de liberdade, e chamando de T_{at-rep} e T_{ad} os períodos de oscilação correspondentes para duas partículas interagentes, tem-se

$$T_{at-rep} = 2\pi\sqrt{m^*/k^{at-rep}} \quad \text{e} \quad T_{ad} = 2\pi\sqrt{m^*/k^{ad}}, \quad (3.21)$$

onde k^{at-rep} pode ser obtido pela diferenciação das forças de atração e repulsão em relação à distância entre as duas partículas, e k^{ad} pela diferenciação das forças de adesão em relação à interpenetração entre elas. Sendo $T_{at-rep,\min}$ e $T_{ad,\min}$ o menor dos respectivos períodos de todo o sistema, recomenda-se o uso do seguinte critério:

$$\Delta t \leq \frac{T_{at-rep,\min}}{10} \quad \text{e} \quad \Delta t \leq \frac{T_{ad,\min}}{10}. \quad (3.22)$$

¹⁶ Em colisões centrais e perfeitamente elásticas entre duas partículas, por exemplo, o uso desse critério conduz a velocidades pós-contato que têm erro inferior a 1%.

Deve-se lembrar ainda que, se a integração no tempo for feita com a versão explícita do método (i.e., com $\phi = 0$), é especialmente importante que Δt seja menor do que o período crítico do sistema (que pode ser tomado como o menor período natural de oscilação de toda as forças do sistema), já que nesse caso o método é apenas condicionalmente estável. Um critério usual, baseado em observações empíricas, é que Δt seja no máximo um décimo do período crítico (ver, por exemplo, Crowe et al [44], p. 130). Os critérios acima satisfazem automaticamente a essa restrição.

As expressões (3.20) e (3.22) estabelecem limites superiores para o tamanho do passo de integração. Elas são baseadas na física do sistema e também em considerações de acurácia. Mesmo que sejam satisfeitas durante a solução numérica, não garantem necessariamente que o método de ponto fixo do Algoritmo 1 irá convergir em todos os passos de integração. De fato, pode acontecer (e na verdade é usual que aconteça) de as forças e momentos apresentarem descontinuidades significativas entre dois instantes consecutivos, fato que pode comprometer a convergência do método conforme já comentado na Seção 3.2. Essas descontinuidades podem ocorrer, por exemplo, quando pares de contato que não existem em um instante t passam a existir no instante $t + \Delta t$, implicando o surgimento repentino de forças e momentos f_i^{con} , f_i^{atr} e m_i^{atr} correspondentes que, se suficientemente grandes, perturbam a convergência. O mesmo pode ocorrer quando pares existentes em t deixam de existir em $t + \Delta t$. Assim, é desejável que o tamanho passo de tempo seja adaptável durante solução, tal que possa ser reduzido quando a convergência não é atingida, ou aumentado quando a convergência é atingida muito facilmente. A adaptabilidade do Δt é, na verdade, um artifício indispensável na simulação de sistemas de partículas, uma vez que a dinâmica do sistema pode mudar drasticamente ao longo do intervalo de solução. Neste trabalho, adota-se um esquema de adaptação bastante simples e eficiente, apresentado a seguir.

Seja N_{des} (dado) o número desejável de iterações de ponto fixo em um passo de integração, e seja N_{max} (dado) o número máximo de iterações permitido. Seja Δt o passo de tempo atual, e sejam Δt_{min} e Δt_{max} (dados) os valores mínimo e máximo permitidos, com Δt_{max} obedecendo às expressões (3.20) e (3.22). Seja N_{real} o número de iterações de ponto fixo realizadas até então no passo de integração atual. Deve-se substituir o passo 5 do Algoritmo 1 pelo novo passo 5 abaixo:

Novo passo 5 para o Algoritmo 1.

5. Checar convergência e fazer adaptação do passo de tempo:

5.1. Se $\text{error}(\mathbf{x}) \leq \text{tolx}$ e $\text{error}(\alpha^A) \leq \text{tol}\alpha^A$, a solução convergiu. Atualizar as rotações totais $\alpha_i(t + \Delta t)$ e fazer $t \leftarrow t + \Delta t$.

Calcular o novo passo de tempo:

$$\Delta t \leftarrow \sqrt{\frac{N_{des}}{N_{real}} \Delta t}, \quad \Delta t_{min} \leq \Delta t \leq \Delta t_{max};$$

Repetir o algoritmo para o próximo passo de integração;

5.2. Se $\text{tolx} < \text{error}(\mathbf{x}) \leq \text{max_error}$ ou $\text{tol}\alpha^A < \text{error}(\alpha^A) \leq \text{max_error}$, e

$N_{real} \leq N_{max}$, a solução não convergiu. Fazer $K \leftarrow K + 1$ e repetir os passos 3, 4 e 5.

5.3. Se $\text{error}(\mathbf{x}) > \text{max_error}$ ou $\text{error}(\alpha^A) > \text{max_error}$, ou se $N_{real} > N_{max}$, a

solução divergiu. Calcular o novo passo de tempo:

$$\Delta t \leftarrow \sqrt{\frac{N_{\text{des}}}{N_{\text{real}}}} \Delta t, \quad \Delta t_{\text{min}} \leq \Delta t \leq \Delta t_{\text{max}};$$

Recomeçar o passo de integração com o novo Δt .

Note-se que o limite *max_error* foi introduzido nos passos 5.2 e 5.3, como forma de controlar o crescimento indesejado dos erros e, assim, contornar as situações em que pode haver divergência. Ele deve ser um número grande – por exemplo, 10^6 . Note-se também que foi introduzido o limite N_{max} no número de interações, para evitar que o método faça iterações indefinidamente quando a convergência não consegue ser atingida. Foi introduzido ainda o limite Δt_{min} , para evitar que a adaptação reduza indefinidamente o passo de integração quando há divergência ou falta de convergência (além de assegurar um tamanho mínimo para o passo, com vistas a não comprometer excessivamente a eficiência computacional da integração). Com relação ao número desejado de iterações, N_{des} , valores típicos são de 4 a 10.

Como comentado na Seção 3.3, os erros $\text{error}(v)$ e $\text{error}(\omega)$ também podem ser incluídos nos passos acima.

Nota. Esquemas de adaptação que dividem ou multiplicam o passo de tempo por um fator fixo (ao invés de um variável, como nos passos 5.1 e 5.3 acima) também podem ser utilizados. Nesses casos, por experiência própria, o autor recomenda que o multiplicador seja um número entre 1 e 1,5. O uso de valores maiores do que 1,5 implica aumentos muito bruscos de Δt , que geralmente levam o sistema a uma configuração muito distinta daquela em que se encontra no instante em consideração – o que dificulta a convergência ou, até mesmo, leva à divergência, conduzindo a nova adaptação e logo piorando a eficiência do esquema. O divisor, por sua vez, pode ser maior do que 1,5 (por exemplo, 2). Nesse aspecto, O esquema proposto nos passos 5.1 e 5.3 é mais versátil pois utiliza um fator variável que é função da eventual facilidade ou dificuldade de convergência em determinado instante, além de não conduzir a aumentos bruscos de Δt já que a raiz quadrada suaviza a razão $N_{\text{des}}/N_{\text{real}}$. Outros esquemas de adaptação automática também são possíveis, ver por exemplo Zohdi [5], que por sua vez é baseado no método de Zohdi [65] para a solução de problemas termomecânicos de meios contínuos.

3.5 Detecção dos contatos

A detecção dos contatos é o grande “gargalo” computacional do MED. Em sistemas de partículas esféricas, o que define se uma partícula está ou não em contato com outras e/ou com superfícies rígidas – e, logo, se as forças e momentos correspondentes devem ser calculados no passo 3.1 do Algoritmo 1 – é o sinal das grandezas δ_{ij} e δ_{iw} , definidas em (2.50) e (2.91), respectivamente. Quando ele é negativo, o contato existe e, como já dito, δ_{ij} e δ_{iw} passam a ser chamados de interpenetração. A detecção dos contatos requer, pois, que se efetue uma varredura sobre as partículas e superfícies rígidas do sistema a

cada execução do passo 3.1, a fim de se calcular δ_{ij} e δ_{iw} para todos os pares de contato possíveis. Essa varredura é a operação que mais demanda esforço computacional em um passo de integração. Se ela for efetuada sobre *todos* os pares do sistema, o tempo necessário para a sua execução será proporcional ao quadrado do número total de partículas e superfícies rígidas. Em sistemas razoavelmente grandes, essa tarefa é extremamente demorada e pode, até mesmo, inviabilizar a simulação numérica.

Uma maneira de tornar a detecção ou busca mais eficiente é definir um domínio espacial para o sistema (por exemplo, atribuindo-lhe dimensões finitas nas direções x_1 , x_2 e x_3 , ou x , y e z), dividi-lo em subdomínios ou regiões, e fazer a varredura somente dentro dessas regiões, percorrendo separadamente cada uma delas. Nesse caso, para cada partícula i , faz-se a varredura apenas sobre as partículas j e superfícies rígidas w que se encontram na mesma região de i e nas regiões imediatamente adjacentes. Esse artifício reduz drasticamente o tamanho das varreduras, especialmente se o sistema for denso ou constituído de muitas partículas. Métodos que seguem essa abordagem são chamados de métodos de “subdivisão do domínio”, de “divisão por células” ou ainda de “engradamento ou encaixotamento do domínio” (*grid, cell ou binning algorithms*; ver, por exemplo, Pöschel e Schwager [4]). Neste trabalho, faz-se uso de um método de subdivisão relativamente simples, apresentado a seguir.

Sejam (x_I, x_F) , (y_I, y_F) e (z_I, z_F) as coordenadas iniciais e finais do domínio nas direções x , y e z , respectivamente, e sejam $L_x = x_F - x_I$, $L_y = y_F - y_I$ e $L_z = z_F - z_I$ as dimensões do domínio nessas direções. Sejam $NDIVx$, $NDIVy$ e $NDIVz$ o número de divisões, subdomínios ou células nessas direções. Seja $(CELLx, CELLy, CELLz)$ o “endereço” de um subdomínio ou célula, com $CELLx$, $CELLy$ e $CELLz$ números inteiros tais que $0 \leq CELLx \leq NDIVx + 1$, $0 \leq CELLy \leq NDIVy + 1$ e $0 \leq CELLz \leq NDIVz + 1$. Seja $LIST(CELLx, CELLy, CELLz) = \{l, m, n, \dots\}$ a lista das partículas contidas na célula $(CELLx, CELLy, CELLz)$ em um determinado instante, onde l, m, n, \dots são os números dessas partículas, e seja $ADDR_i = (CELLx_i, CELLy_i, CELLz_i)$ o endereço da célula em que uma partícula i se encontra nesse instante. Em $t = 0$, antes de iniciar a integração no tempo por meio do Algoritmo 1, devem-se construir as listas $LIST(CELLx, CELLy, CELLz)$ de todas as células conforme descrito no Algoritmo 2 abaixo:

Algoritmo 2. Construção das listas de partículas contidas nos subdomínios ou células.

Seja $\mathbf{x}_i = (x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i}) = (x_i, y_i, z_i)$ o vetor posição da partícula i no instante de tempo em consideração. Fazer:

1. Inicializar as listas:

Para $ix = 0, \dots, NDIVx + 1$, fazer:

Para $iy = 0, \dots, NDIVy + 1$, fazer:

Para $iz = 0, \dots, NDIVz + 1$, fazer:

$LIST(ix, iy, iz) = \{ \}$ (célula inicialmente vazia)

2. Para cada partícula i , $i = 1, \dots, N_p$, fazer:

Identificar a célula em que i se encontra:

$$\begin{aligned}
CELLx_i &= \text{int} \left(\frac{x_i - x_I}{L_x} \right) \times NDIVx + 1, \\
CELLy_i &= \text{int} \left(\frac{y_i - y_I}{L_y} \right) \times NDIVy + 1, \\
CELLz_i &= \text{int} \left(\frac{z_i - z_I}{L_z} \right) \times NDIVz + 1;
\end{aligned}$$

Guardar o endereço de i em $ADDR_i = (CELLx_i, CELLy_i, CELLz_i)$;
 Acrescentar i à lista $LIST(CELLx_i, CELLy_i, CELLz_i)$.

A notação $\text{int}(\cdot)$ é introduzida acima para designar a função que transforma o número real (\cdot) no número inteiro mais próximo (porém não superior) a (\cdot) . Note-se que na verdade são criados mais subdomínios ou células do que o especificado por $NDIVx$, $NDIVy$ e $NDIVz$, já que os índices do passo 1 acima variam de zero ao número de divisões mais um. Esse artifício é feito apenas para facilitar o algoritmo de detecção (descrito logo a seguir), não sendo estritamente necessário. Uma vez que o Algoritmo 1 é iniciado, no início de seu passo 3.1 deve-se fazer:

Algoritmo 3. Detecção dos contatos utilizando o método da subdivisão do domínio.

Para cada partícula i , $i = 1, \dots, N_p$, fazer:

1. Identificar a célula onde a partícula se encontra:

$$\begin{aligned}
CELLx_i &= ADDR_i(1), \\
CELLy_i &= ADDR_i(2), \\
CELLz_i &= ADDR_i(3);
\end{aligned}$$

2. Efetuar a varredura sobre a célula $ADDR_i$ e suas células imediatamente adjacentes:

Para $ix = CELLx_i - 1, \dots, CELLx_i + 1$, fazer:

Para $iy = CELLy_i - 1, \dots, CELLy_i + 1$, fazer:

Para $iz = CELLz_i - 1, \dots, CELLz_i + 1$, fazer:

Para $jcell = 1, \dots$, número de partículas na célula (ix, iy, iz) , fazer:

$j \leftarrow$ número da partícula que ocupa a posição $jcell$ em $LIST(ix, iy, iz)$

Se $j > i$, calcular δ_{ij}

Se $\delta_{ij} < 0$, há contato \Rightarrow calcular f_{ij}^{con} , f_{ij}^{atr} e m_{ij}^{atr} .

Note-se que δ_{ij} só é calculado para $j > i$, de modo a evitar que se calcule δ_{ji} (isso seria uma duplicidade desnecessária, já que $\delta_{ji} = \delta_{ij}$). Ao final de cada passo de tempo do Algoritmo 1, após atingida a convergência, devem-se atualizar as listas $LIST(CELLx, CELLy, CELLz)$. Isso é feito executando-se o Algoritmo 2 novamente, no final do passo 5.1, dessa vez utilizando as novas posições das partículas.

Uma maneira de tornar a busca dos contatos ainda mais eficiente é definir, dentro das células, uma vizinhança para cada partícula, caracterizada por uma distância de busca, e fazer a varredura somente dentro dessa vizinhança, i.e., somente sobre as partículas e superfícies rígidas cujas distâncias à partícula

em consideração são inferiores à distância de busca. Métodos desse tipo são por vezes chamados de métodos de Verlet ou de listas de Verlet (ver, por exemplo, Pöschel e Schwager [4], pp. 54-61). Neste trabalho, propõe-se o método apresentado a seguir, como um complemento ao método da subdivisão do domínio.

Seja d_V a distância de busca, também chamada de distância de Verlet. Seja $VLIST_i = \{l, m, n, \dots\}$ a lista de partículas contidas na vizinhança da partícula i em um determinado instante, ou lista de Verlet de i nesse instante, onde l, m, n, \dots são os números dessas partículas. Em $t = 0$, antes de iniciar a integração no tempo por meio do Algoritmo 1, devem-se construir as listas $VLIST_i$ de todas as partículas conforme o Algoritmo 4 abaixo:

Algoritmo 4. Construção das listas de partículas contidas nas vizinhanças, ou listas de Verlet.

Seja $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$ o vetor posição da partícula i no instante de tempo em consideração. Fazer:

1. Dividir o domínio em células e construir as listas $LIST(CELLx, CELLy, CELLz)$ por meio do Algoritmo 2.

2. Inicializar as listas de Verlet:

Para cada partícula i , $i = 1, \dots, N_p$, fazer:

$$VLIST_i = \{ \} \text{ (lista inicialmente vazia)}$$

3. Efetuar varredura sobre todas as células:

Para $ix = 1, \dots, NDIVx$, fazer:

Para $iy = 0, \dots, NDIVy$, fazer:

Para $iz = 1, \dots, NDIVz$, fazer:

Para $icell = 1, \dots$, número de partículas na célula (ix, iy, iz) , fazer:

$i \leftarrow$ número da partícula que ocupa a posição $icell$ em $LIST(ix, iy, iz)$

Para $iix = ix - 1, \dots, ix + 1$, fazer:

Para $iyy = iy - 1, \dots, iy + 1$, fazer:

Para $iiz = iz - 1, \dots, iz + 1$, fazer:

Para $jcell = 1, \dots$, número de partículas na célula (iix, iyy, iiz) , fazer:

$j \leftarrow$ número da partícula que ocupa a posição $jcell$ em $LIST(iix, iyy, iiz)$

Se $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq d_V$, acrescentar j à lista $VLIST_i$.

Uma vez que o Algoritmo 1 é iniciado, no início de seu passo 3.1 deve-se fazer:

Algoritmo 5. Detecção dos contatos utilizando as listas de Verlet.

Para cada partícula i , $i = 1, \dots, N_p$, fazer:

1. Efetuar a varredura sobre a lista de vizinhos de i :

Para $iviz = 1, \dots$, número de partículas na lista $VLIST_i$, fazer:

$j \leftarrow$ número da partícula que ocupa a posição $iviz$ na lista $VLIST_i$

Se $j > i$, calcular δ_{ij}

Se $\delta_{ij} < 0$, há contato \Rightarrow calcular f_{ij}^{con} , f_{ij}^{atr} e m_{ij}^{atr} .

Ao final de cada passo de tempo do Algoritmo 1, depois de atingida a convergência, devem-se atualizar as listas $VLIST_i$ de cada partícula. Isso é feito executando-se o Algoritmo 4 novamente no final do passo 5.1, agora utilizando as novas posições das partículas.

As listas de Verlet aceleram significativamente a detecção dos contatos, posto que reduzem o tamanho da varredura dentro das células (desde que, claro, a distância de busca seja escolhida apropriadamente¹⁷). A título de ilustração, para sistemas constituídos de mil partículas, que são considerados sistemas pequenos a moderados, quando d_V é igual ao tamanho das células o ganho de eficiência é da ordem de 40% se comparado ao método da subdivisão “puro”, i.e, sem listas de Verlet (esse percentual se refere ao tempo de processamento de um passo de integração, considerando programação não paralelizada). Em sistemas maiores, o ganho é ainda maior; para sistemas de poucas partículas, contudo, não há ganhos perceptíveis. A escolha da distância de busca deve levar em consideração a distância máxima que as partículas podem percorrer entre dois instantes consecutivos da discretização do tempo, tal que nenhum possível contato seja “perdido” em um passo de integração. Outros aspectos que afetam a eficiência da detecção, como por exemplo o tamanho das células, também devem ser selecionados com critério. Han et al. [66], por exemplo, recomenda que as células tenham dimensão de cerca de três vezes (em problemas bidimensionais) ou cinco vezes (em problemas tridimensionais) o diâmetro da menor partícula. Ver também Santasusana et al. [67] para uma discussão nesse sentido, além de uma descrição de outros métodos de busca.

A implantação computacional dos algoritmos acima não é complicada, mas requer algum cuidado. A maior dificuldade é o gerenciamento das listas de partículas, pois elas variam de tamanho a cada passo de integração. Sua alocação e realocação deve ser feita apropriada e eficientemente, à medida que partículas entram ou saem das células e das vizinhanças de outras partículas.

Nota. É possível atualizar as listas dos subdomínios e as listas de Verlet somente depois de decorridos *alguns* passos de integração, ao invés de em todos os passos como descrito acima. Isso aumenta ainda mais a eficiência da busca, mas deve ser feito escolhendo-se com muito cuidado a frequência das atualizações. Deve-se sempre considerar a distância máxima que as partículas podem percorrer entre duas atualizações consecutivas, comparando-a com o tamanho das células e/ou com a distância de Verlet, de modo a que nenhuma partícula saia ou entre nas células e nas vizinhanças de outras partículas antes de as listas serem atualizadas novamente. Embora essa distância máxima seja a princípio desconhecida, ela pode ao menos ser estimada, com base na ordem de grandeza esperada para as velocidades e no tamanho do passo de integração adotado.

Nota. Na literatura, é comum referir-se a algoritmos como os 2 e 4 acima como sendo a “busca

¹⁷ Essa distância deve ser menor do que três vezes o tamanho das células, já que a varredura empreendida na montagem da lista de uma partícula é feita sobre a célula em que a partícula se encontra e sobre as duas células imediatamente adjacentes (a anterior e a posterior) em cada direção. Não deve, contudo, ser muito pequena, conforme comentado logo a seguir.

global de vizinhos” (*global neighbor search*), e aos 3 e 5 como sendo a “busca local” (*local neighbor search*). A busca global é um filtro relativamente grosseiro, que identifica os potenciais pares de contato ou candidatos ao contato. Ele não depende da forma geométrica das partículas, mas sim (e apenas) das suas relações de proximidade. Já a busca local é um filtro fino, que identifica, somente dentre os potenciais pares de contato, aqueles que realmente estão em contato. Esse filtro, sim, depende da forma das partículas. Quando elas não são esféricas, a busca local pode ser extremamente demorada, constituindo a parte da detecção (e eventualmente do próprio MED) que mais demanda esforço computacional, em geral envolvendo a solução de um problema de minimização para cada par candidato ao contato.

Nota. O cálculo das forças de atração e repulsão também exige que se façam varreduras sobre as partículas. Essas forças não dependem de as partículas estarem em contato, sendo diferentes de zero até mesmo para partículas muito afastadas entre si. A rigor, portanto, seu cálculo requer que a varredura seja feita sobre todas as partículas. Muitas vezes, contudo, é possível definir uma distância limite ou distância de corte, a partir da qual as interações de atração e repulsão passam a ser desprezíveis. Nesses casos, uma partícula i somente terá interações com outra partícula j se essa última estiver no interior da vizinhança definida pela distância de corte. Esse artifício pode diminuir significativamente o tamanho da varredura. Sua implantação computacional é semelhante à das listas de Verlet. O valor da distância de corte também pode ser estabelecido com base na distância crítica do potencial das forças de atração e repulsão, que é a distância a partir da qual a interação se torna instável – fato que deve ser evitado (vide nota ao final da Seção 2.7).

3.6 Armazenamento do histórico do atrito

Como visto na Seção 2.10, o cálculo da força de atrito entre um par de contato requer que o alongamento acumulado no dispositivo tangencial fictício (i.e., o *histórico* do atrito) seja armazenado durante o contato. Isso deve ser feito para todos os pares de partículas e superfícies rígidas que estiverem em contato entre si. Uma maneira de se fazê-lo é por meio da criação de listas de contatos, conforme descrito a seguir.

Seja $CONTLIST_i = \{l, m, n, \dots\}$ a lista de contatos de uma partícula i em um determinado instante, i.e., a lista de partículas e superfícies rígidas que efetivamente estão em contato com i nesse instante. Ela deve ser inicializada com conteúdo vazio em $t = 0$, e atualizada toda vez que um contato é detectado no último passo dos Algoritmos 3 ou 5 acima. Para cada um de seus elementos j , deve ser criado um vetor \mathbf{x}_{ij}^{accum} correspondente, o qual é inicializado como um vetor nulo tão logo j é acrescentado a $CONTLIST_i$. O cálculo da força de atrito entre i e j deve então proceder conforme descrito na Seção 2.10, armazenando-se em $\Delta\mathbf{x}_{ij}^{accum}$ o alongamento resultante no dispositivo, como indicado em (2.84).

As listas de contato também devem ser atualizadas toda vez que um par deixa de estar em contato, i.e., toda vez que um par que estava em contato no instante t deixa de o estar em $t + \Delta t$. Isso deve ser

feito imediatamente após o cálculo de δ_{ij} nos Algoritmos 3 ou 5: se j pertence a $CONTLIST_i$, mas tem agora vetor posição tal que $\delta_{ij} > 0$, então o contato entre i e j foi “desfeito” e j deve ser removido da lista. Por esse aspecto fica evidente que a implantação computacional das listas de contato exige cuidados semelhantes aos das listas da seção anterior: como elas podem variar de tamanho a cada passo de integração, sua alocação e realocação deve ser feita apropriada e eficientemente, à medida que novos pares de contato são formados e/ou outros são desfeitos.

Os comentários acima podem parecer um tanto desnecessários, mas não é comum encontrar menção (muito menos detalhes) sobre o armazenamento do histórico do atrito na literatura do MED – nem mesmo naqueles textos mais voltados aos aspectos computacionais do método. Por esse motivo é que se optou por incluir uma seção (ainda que muito breve) sobre isso neste trabalho.

4 Exemplos numéricos

4.1 Considerações iniciais

A formulação do MED e o esquema de solução numérica apresentados nos capítulos anteriores deram origem ao programa computacional PSY (*Particle Systems Analysis Program*), desenvolvido pelo autor. O PSY foi concebido para servir de ambiente de programação e ferramenta de simulação para o estudo de materiais granulares e particulados. Seu código está escrito em linguagem Fortran 90/95/2003 e é baseado no paradigma da orientação a objetos, com encapsulamento de dados, polimorfismo, herança e carga de operadores. Essas características permitem que ele possa ser utilizado de forma concomitante por diferentes programadores, o que facilita a sua extensão gradativa e a inclusão de novos desenvolvimentos teóricos à medida que esses são conduzidos. Dispõe de interface gráfica para a entrada de dados e a visualização de resultados, baseada nos programas auxiliares GiD® [68] e Paraview® [69]. Dispõe também de um gerador de partículas, desenvolvido com base em técnicas de adição sequencial aleatória. Com relação a esse último aspecto, convém destacar que a geração de partículas (i.e., a definição de suas coordenadas iniciais no interior de um domínio de interesse) é uma etapa à parte no MED. Ela antecede a simulação computacional propriamente dita e pode ser empreendida por meio de diversos métodos. Os mais simples (porém não necessariamente os mais eficientes) são os de adição sequencial aleatória, que se baseiam na adição, uma após uma, de partículas de forma aleatória mas tal que nenhuma nova partícula possua interpenetração com outras já previamente adicionadas (e nem com superfícies rígidas que eventualmente façam parte do sistema). A geração é finalizada quando um número total desejado de partículas for atingido, quando uma densidade desejada (relação entre o volume total das partículas e o volume do domínio) for atingida, ou quando o domínio estiver saturado e não for mais possível adicionar novas partículas com os parâmetros utilizados. A ideia é bastante simples e tem origem no trabalho de Widom [70], ainda da década de 1960.

No gerador desenvolvido neste trabalho, as partículas são geradas com diâmetros que seguem uma curva granulométrica ou uma distribuição de probabilidade dadas (por exemplo, com forma gaussiana), cuja média e desvio padrão devem ser fornecidos. Se desejado, a geração pode ser seguida de uma pré-simulação do sistema, tal que as partículas recém-geradas sejam postas a se movimentar e assim

“relaxar” (por exemplo, sob a ação da gravidade), atingindo uma configuração estática de equilíbrio que serve então como configuração inicial para a simulação que se deseja empreender. Métodos que seguem essa abordagem são chamados de métodos dinâmicos de geração¹⁸. A geração de partículas (por vezes também chamada de empacotamento de partículas) é um tópico que tem atraído o interesse das comunidades de física e mecânica computacionais já há algumas décadas. Ela é importante para a simulação de diversos sistemas, como coloides (Bolintineanu et al. [71]), cristais (Tan et al. [72]), polímeros (Kroupa et al. [73]) e materiais granulares (Han et al. [74], Xu e Chen [75], Cui e O’Sullivan [76], Donev [77], Feng et al. [78] e Jiang et al. [79], citando somente alguns), e não é exagero afirmar que o desenvolvimento de algoritmos de geração ou empacotamento hoje constitui uma área de pesquisa por si só. Na visão do autor, além dos trabalhos citados acima, as contribuições do grupo de S. Torquato (ver [80], [81] e [82]) e de Thornton et al [83] estão dentre as mais relevantes na área. Não faz parte do escopo deste trabalho entrar em detalhes sobre os métodos de geração de partículas. O leitor interessado pode consultar as referências acima e também o trabalho do autor em Campello e Cassares [84], o qual deu origem ao gerador aqui utilizado.

Este capítulo apresenta alguns exemplos para ilustrar a validade da formulação apresentada nos Capítulos 2 e 3, e a sua aplicabilidade ao estudo dos materiais granulares secos. Não pretende de forma alguma ser exaustivo, mas sim apenas apresentar exemplos de validação e exemplos representativos de caráter geral que possam dar uma ideia das capacidades do MED – na forma como foi aqui formulado – para esse propósito. O autor adverte que diversos desenvolvimentos estão no momento em curso no âmbito de sua pesquisa, com vistas à modelagem de problemas específicos, como por exemplo ensaios triaxiais de amostras de solo, processos de deposição de partículas sobre substratos flexíveis, processos de impressão tridimensional e de sinterização a *laser* com partículas poliméricas, dentre outros, mas que esses não serão incluídos neste trabalho por ainda se encontrarem em fase de desenvolvimento. Assim, os exemplos apresentados neste capítulo são propositadamente genéricos. Os primeiros, aliás, são extremamente simples, envolvendo um número muito pequeno de partículas, de modo a que a resposta possa ser conhecida analiticamente (ou ao menos antecipada qualitativamente) e a validação ser suficientemente conclusiva. Curiosamente, não é comum encontrar exemplos de validação na literatura do MED. Espera-se, assim, que este capítulo possa contribuir (ainda que timidamente) no preenchimento dessa lacuna, ajudando a estabelecer algumas soluções de referência por meio das quais outros pesquisadores possam testar e validar as suas formulações e implantações computacionais.

No que segue, algumas hipóteses são comuns a todos os exemplos. Com relação ao meio fluido em que as partículas estão imersas, admite-se que é o ar (ínerte e seco) e que sua velocidade é muito pequena se comparada à velocidade das partículas, tal que se possa fazer $v_F \approx 0$ em (2.36). Isso implica que o

¹⁸ Os métodos dinâmicos têm origem na década de 1990, com o famoso algoritmo de Lubachevsky-Stillinger [92], e são bastante utilizados no MED e nos métodos de dinâmica molecular. Possuem inúmeras variantes. Há também os métodos construtivos, que partem de considerações puramente geométricas para preencher o domínio, sem envolver uma pré-simulação do sistema. Esses são, em geral, mais eficientes do ponto de vista computacional do que os primeiros. Os métodos dinâmicos, contudo, têm maior simplicidade de implantação e são capazes de gerar configurações iniciais mais densas – aspecto que muitas vezes é desejado, ou até mesmo necessário.

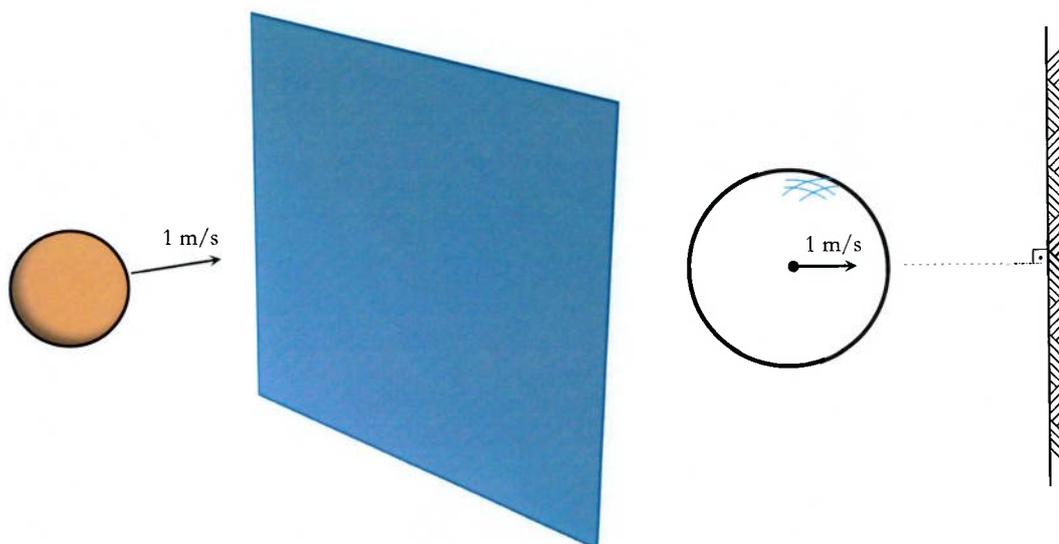


Figura 6. Choque frontal de uma partícula com uma parede. Vista em perspectiva (à esquerda) e vista lateral (à direita, ligeiramente ampliada).

conhecimento da dinâmica do fluido não é necessário para o conhecimento do movimento das partículas (ou, em outras palavras, que as partículas são afetadas pelo fluido, mas o fluido não é afetado pelas partículas). Em aplicações onde o escoamento do fluido é relativamente rápido, a dinâmica do fluido deve ser resolvida junto com a dinâmica das partículas, o que requer um modelo acoplado partícula-fluido para descrever adequadamente a evolução do sistema ao longo do tempo. Isso será objeto de desenvolvimentos futuros por parte do autor. Admite-se também que a densidade das partículas é muito maior do que a densidade do fluido, de modo que se possa desprezar a força de empuxo. Com relação às forças de atrito, a obtenção do alongamento incremental tentativa (vide equação (2.83)) é feita com $\varphi = 0$, independentemente do valor que é adotado para ϕ no método de integração do Algoritmo 1. Isso se faz apenas por questão de simplicidade e eficiência computacional, sem nenhuma perda de generalidade.

4.2 Choque frontal de uma partícula com uma parede

Esse exemplo é extremamente simples e tem o propósito de dar uma breve ideia sobre a acurácia do método numérico aqui proposto, por meio da simulação de uma colisão isolada. Uma partícula esférica de raio $r = 0,1$ m e massa $m = 10$ kg é projetada contra uma parede plana a uma velocidade $v = 1$ m/s, como ilustrado na Figura 6. A partícula tem propriedades elásticas $E = 10^9$ N/m² e $\nu = 0$, e não está sujeita a nenhuma força externa além da força de contato que surge durante o choque. O choque, por sua vez, é perfeitamente elástico (i.e., o par partícula-parede tem parâmetros de amortecimento e coeficientes de atrito nulos: $\xi_n = \xi_t = 0$ e $\mu_S = \mu_D = 0$), e sua duração, de acordo com (3.19), é $\Delta t_c \cong 2,87 \times 10^{-3}$ s. O problema é simulado com passos de integração progressivamente refinados, com ordem de grandeza variando de Δt_c a $\Delta t_c/1000$. Tanto a versão explícita quanto implícita do método de integração são utilizadas. No caso da versão implícita, adota-se $\phi = 1/2$ (i.e., método do trapézio clássico) e $tolx = tol\alpha^A = tolv = tol\omega = 10^{-6}$, sem adaptação automática. Os resultados

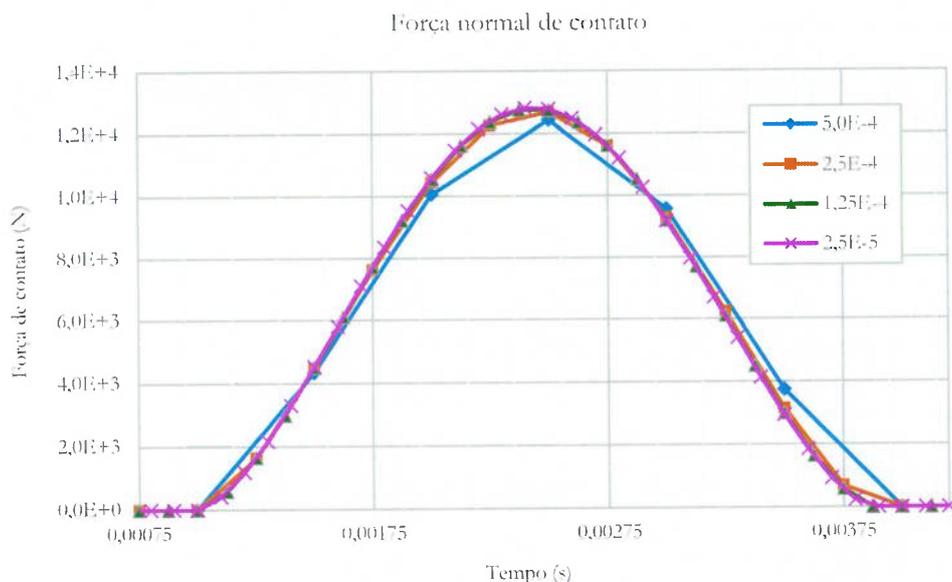


Figura 7. Choque frontal de uma partícula com uma parede. Evolução da força de contato com o tempo durante o choque. Os resultados para o passo de integração mais refinado não estão representados por serem visualmente idênticos aos do passo $2,5 \times 10^{-5}$ s.

obtidos para a velocidade pós-choque estão apresentados na Tabela 1 a seguir. A Figura 7, por sua vez, apresenta um gráfico da evolução da força de contato com o tempo durante o choque. Como se observa, a resposta numérica converge adequadamente para o resultado esperado à medida que o passo de integração é reduzido. Em especial, para um Δt de cerca de um vigésimo de Δt_c , o erro na velocidade pós-choque já é de apenas 0,015% (com o método explícito) ou 0,0024% (com o método implícito). Na experiência do autor, a utilização de $\Delta t_c/20$ é quase sempre um bom compromisso entre acurácia e eficiência computacional. Os resultados que se obtêm utilizando tolerâncias mais rigorosas no critério de convergência são idênticos aos aqui apresentados.

Tabela 1. Choque frontal de uma partícula com uma parede. Velocidades pós-choque (em m/s) obtidas com diferentes passos de integração. Os números entre parênteses são o erro em relação à resposta exata.

Δt (s)	Explicit	Implicit
$5,0 \times 10^{-4}$ ($\sim \Delta t_c/5$)	-1,011929 (1,19%)	-1,006123 (0,61%)
$2,5 \times 10^{-4}$ ($\sim \Delta t_c/10$)	-1,007418 (0,74%)	-1,001939 (0,19%)
$1,25 \times 10^{-4}$ ($\sim \Delta t_c/20$)	-1,000154 (0,015%)	-1,000024 (0,0024%)
$2,5 \times 10^{-5}$ ($\sim \Delta t_c/100$)	-1,000006 (0,0006%)	-1,000006 (0,0006%)
$2,5 \times 10^{-6}$ ($\sim \Delta t_c/1000$)	-1,000000 (0%)	-1,000000 (0%)

4.3 Derrapagem e rolamento de uma partícula sobre uma superfície rígida

Este exemplo está apresentado em Campello [59], e é uma adaptação de exemplo semelhante proposto por Gay Neto et al. [60] envolvendo o rolamento de uma barra cilíndrica. Uma partícula esférica

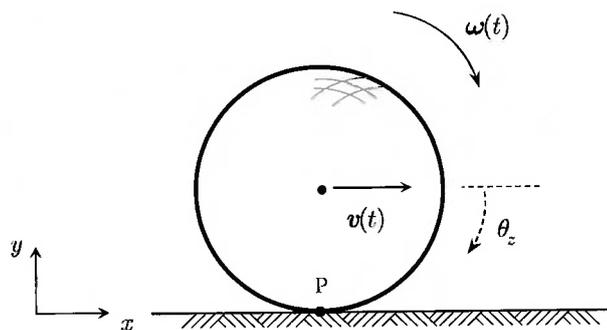


Figura 8. Derrapagem e rolamento de uma partícula sobre uma superfície rígida. Vista lateral.

de raio $r = 0,2$ m e massa $m = 1000$ kg é posicionada sobre uma superfície rígida (plana) com velocidade inicial $\mathbf{v}(0) = (2,355; 0; 0)$ m/s e velocidade angular inicial $\boldsymbol{\omega}(0) = (0; 0; -127,03)$ rad/s, tangenciando-a conforme representado na Figura 8. A superfície está no plano xz e tem coeficiente de atrito com a partícula $\mu_S = \mu_D = \mu = 0,25$. A aceleração da gravidade atua no sentido $-y$, com valor $g = 9,81$ m/s², e faz com que a partícula entre em contato com a superfície rígida já no início do seu movimento. Nessa ocasião, as velocidades iniciais são tais que a partícula começa a “derrapar” sobre a superfície, i.e., a girar e escorregar com atrito, no sentido $+x$. É possível compreender a dinâmica do problema olhando para o que ocorre com a velocidade translacional do ponto de contato P na direção x . Em $t = 0$, tem-se

$$v_x^P(0) = 2,355 - 127,03 \times 0,2 = -23,051 \text{ m/s.} \quad (4.1)$$

A força de atrito, então, tem sentido oposto e causa dois efeitos distintos: por um lado, acelera a translação da partícula no sentido $+x$; por outro, desacelera a sua velocidade angular, já que gera um momento em relação ao seu centro que é contrário ao giro que ela possui nesse instante. A combinação desses efeitos faz com que v_x^P comece a decrescer a partir de então em valor absoluto, até que, decorrido algum tempo, chegue a zero e o ponto P fica instantaneamente “aderido” à superfície – embora a velocidade translacional da partícula não seja nula. Nessa ocasião, como deixa de haver movimento relativo entre P e a superfície rígida, a partícula para de derrapar e começa a experimentar rolamento puro. A integração das equações do movimento durante a fase de derrapagem fornece uma expressão analítica para as velocidades da partícula ao longo do tempo, conforme abaixo:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(t) &= (v_x(t), 0, 0), & v_x(t) &= v_x(0) + \mu g t = 2,355 + 2,453t, \\ \boldsymbol{\omega}(t) &= (0, 0, \omega_z(t)), & \omega_z(t) &= \omega_z(0) + \frac{5\mu g}{2r} t = -127,03 + 30,656t. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Esse resultado é válido para $t \leq t_{rol}$, onde t_{rol} é o instante em que o rolamento puro é iniciado. De (4.2), decorre que a velocidade do ponto P na direção x ao longo do tempo é

$$v_x^P(t) = v_x(t) + \omega_z(t)r = -23,051 + 8,548t, \quad (4.3)$$

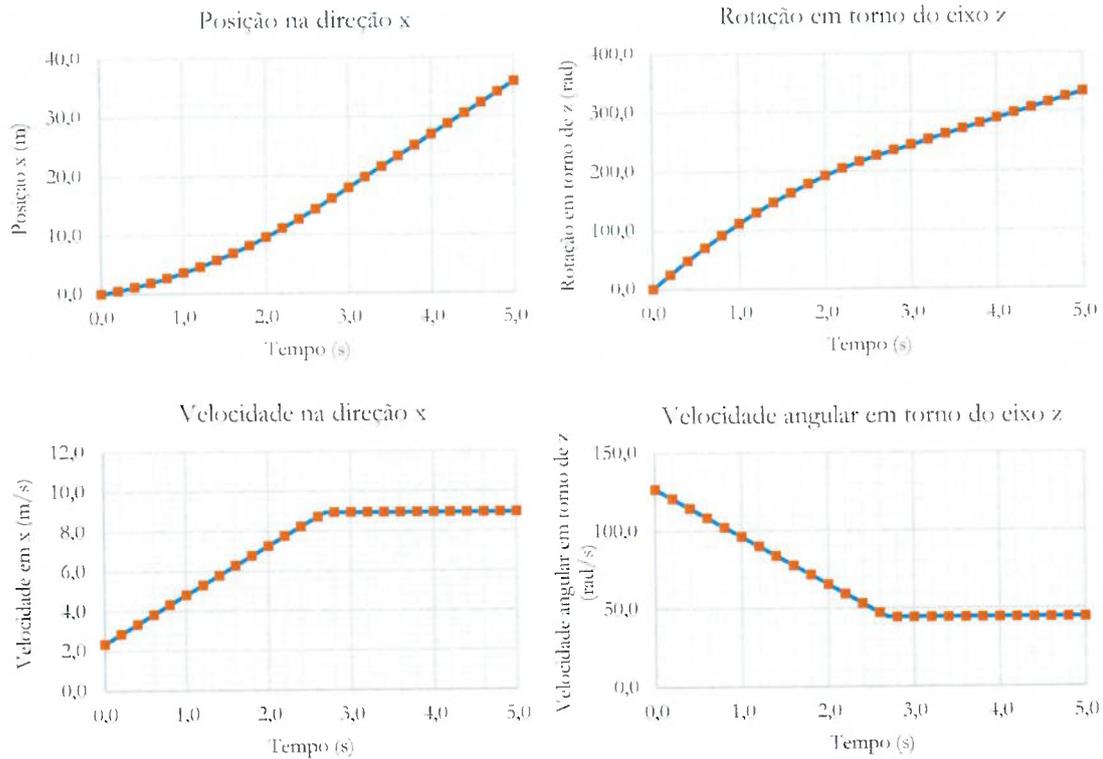


Figura 9. Derrapagem e rolamento de uma partícula sobre uma superfície rígida. Histórico da posição, rotação, velocidade e velocidade angular da partícula ao longo do tempo. Os resultados numéricos estão representados com linha cheia e os analíticos com marcadores.

e dessa expressão, fazendo-se $v_x^p = 0$, obtém-se

$$-23,051 + 8,548t = 0 \Rightarrow t = t_{rol} = 2,69s. \quad (4.4)$$

Após esse instante, a partícula permanece em movimento uniforme indefinidamente (admite-se que não há resistência ao rolamento), com velocidade de translação $v_{x,rol}$ e velocidade angular $\omega_{z,rol}$ constantes, cujos valores podem ser obtidos fazendo-se $t = 2,69$ s em (4.2):

$$\begin{aligned} v_{x,rol} &= v_x(2,69) = 8,95 \text{ m/s}, \\ \omega_{z,rol} &= \omega_z(2,69) = -44,57 \text{ rad/s}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

A solução numérica obtida neste trabalho está apresentada na Figura 9 para um intervalo de análise de 5,0 s, juntamente com a solução analítica acima para comparação. Como se vê, os resultados são visualmente idênticos¹⁹. Pode-se constatar que a fase de derrapagem e a transição para a fase de rolamento são adequadamente representadas. Além disso, os valores da solução numérica para t_{rol} (2,69 s), $v_{x,rol}$ (8,94 m/s) e $\omega_{z,rol}$ (-44,70 rad/s) estão em excelente concordância com a resposta analítica. Esse exemplo é um bom teste para verificar se o modelo de atrito captura adequadamente os fenômenos de aderência e deslizamento. Os parâmetros utilizados na simulação foram: $E = 10^{10}$ N/m² e $\nu = 0,25$;

¹⁹ A rotação apresentada se refere à componente em z do vetor rotação θ , o qual pode ser calculado uma vez que o vetor rotação de Rodrigues é obtido. Neste exemplo, contudo, o eixo de rotação não varia ao longo do tempo e, logo, a rotação total em qualquer instante pode ser obtida por simples soma das rotações incrementais de até então.

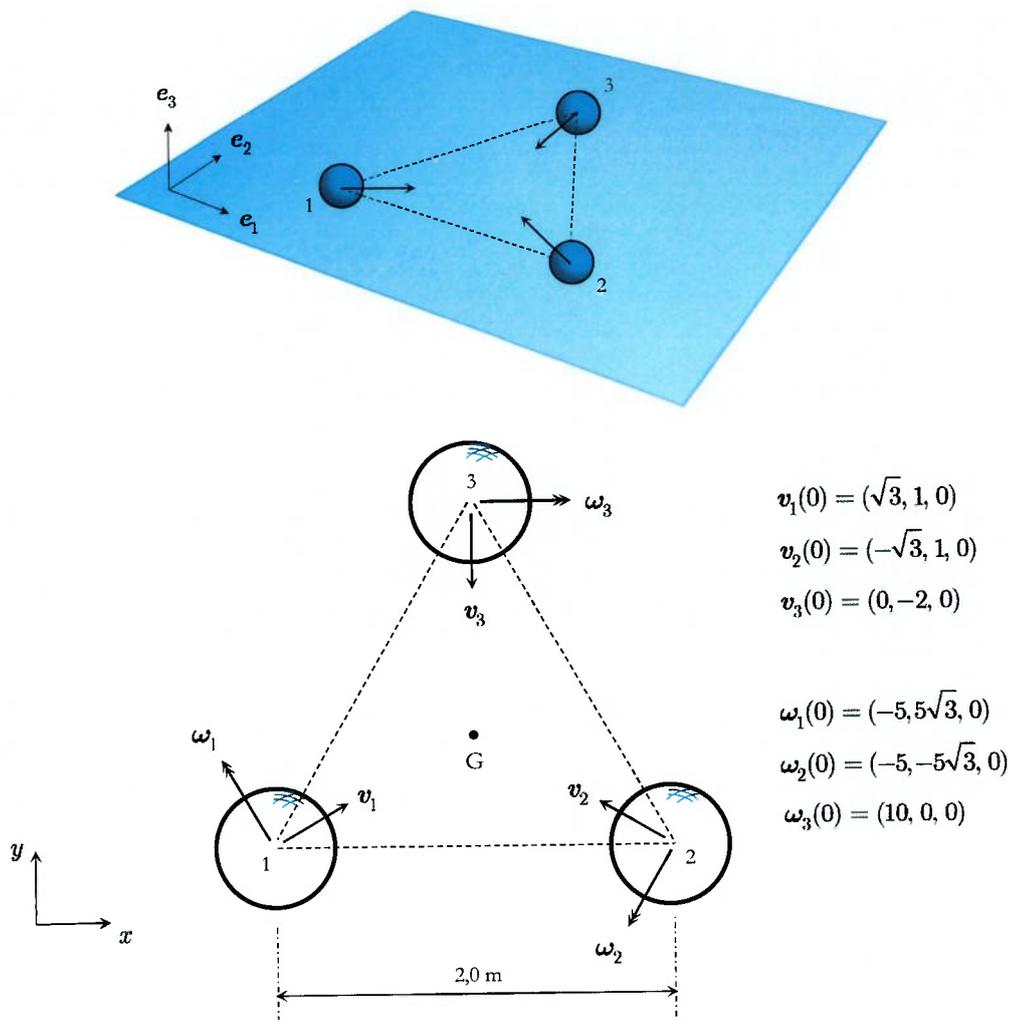


Figura 10. Choque de três partículas em rolamento sobre uma superfície rígida. Vista em perspectiva (parte superior da figura) e vista superior (logo abaixo). Os vetores de velocidade angular estão representados com seta dupla.

$\xi_n = \xi_t = 0$ (i.e., não há amortecimento); $\Delta t = 10^{-4}$ s (com adaptação automática, sendo $\Delta t_{\min} = 10^{-5}$ s e $\Delta t_{\max} = \Delta t = 10^{-4}$ s); integração implícita com $\phi = 1/2$ (i.e., método do trapézio clássico) e tolerâncias do critério de convergência $tolx = tol\alpha^A = tolv = tol\omega = 10^{-6}$. Forças arrasto, de atração e repulsão e de adesão não são consideradas.

4.4 Choque de três partículas em rolamento sobre uma superfície rígida

Este exemplo foi proposto em Campello [59] e se assemelha ao choque de bolas de bilhar. Três partículas idênticas de raio $r = 0,2$ m, massa $m = 1000$ kg e propriedades elásticas $E = 10^{10}$ N/m² e $\nu = 0,25$ são colocadas em aproximação numa formação equilátera sobre uma superfície rígida, como mostrado na Figura 10 (a superfície é plana e está no plano xy ; as partículas tangenciam-na). A gravidade atua no sentido $-z$, com valor $g = 9,81$ m/s², e há atrito entre as partículas e a superfície, caracterizado por $\mu_S = \mu_D = 0,5$ (o atrito entre as próprias partículas também existe e tem os mesmos coeficientes).

As velocidades iniciais das partículas são tais que elas experimentam, desde o início do movimento, rolamento puro em direção ao centro geométrico G da formação (em outras palavras, não há derrapagem nessa fase do movimento: as partículas se aproximam com velocidade translacional e angular constantes), até se chocarem. Após o choque, o movimento é revertido e elas passam a se afastar em direção às suas posições de origem. O amortecimento é nulo ($\xi_n = \xi_t = 0$). A solução numérica obtida neste trabalho está apresentada na Figura 11, onde pode ser vista a evolução das velocidades e da rotação da partícula 1 ao longo do tempo para um intervalo de análise de 2,0 s. O choque acontece em $t \cong 0,46$ s, e dura aproximadamente 0,0047 s. Assim que é finalizado, no instante $t = 0,4647$ s, observa-se que a velocidade de translação da partícula é revertida a um valor praticamente idêntico (mas de sinal contrário) ao seu valor inicial. Esse fato é esperado, já que não há amortecimento. A sua conservação exata, porém, não ocorre, mas isso também é esperado: durante o contato, as partículas perdem a “aderência” que possuíam com a superfície rígida e passam a derrapar, tanto na fase de compressão quanto na de descompressão, dissipando energia. Essa dissipação, contudo, é pequena, pois o contato tem duração muito curta, de modo que visualmente as velocidades anterior e imediatamente posterior ao choque são idênticas nos gráficos da Figura 11 (o valor exato para a partícula 1 após o choque é $v_{1,x} = -1,691$ m/s e $v_{1,y} = -0,976$ m/s, o que representa uma redução de cerca de 2% em relação à velocidade de aproximação). A reversão da velocidade angular, por outro lado, acontece num intervalo de tempo maior do que a duração do choque. Isso porque a força de atrito, responsável por essa reversão, precisa atuar por um tempo suficientemente longo até que a partícula tenha derrapado o bastante a ponto de zerar o seu giro e só então inverter o seu sentido. Como pode ser visto nos gráficos, a velocidade angular começa a decrescer (em magnitude) assim que o choque se inicia, e isso prossegue até $t \cong 0,62$ s, quando ela muda de sinal e começa a crescer. Em $t \cong 0,69$ s, o ponto de contato da partícula com a superfície rígida volta a “aderir” à superfície, e o rolamento puro é restaurado – agora em sentido contrário. Note-se que, como há derrapagem entre $0,46 \text{ s} \leq t \leq 0,69 \text{ s}$, há dissipação de energia, de modo que a velocidade de translação da partícula é progressivamente reduzida nesse intervalo, conforme pode ser observado nos gráficos. De $t \cong 0,69$ s em diante, havendo o rolamento puro sido restaurado, a partícula segue em movimento uniforme em direção à sua posição inicial, com $v_{1,x} = -0,760$ m/s, $v_{1,y} = -0,439$ m/s, $\omega_{1,x} = 2,193$ rad/s e $\omega_{1,y} = -3,799$ rad/s constantes. Os resultados da partícula 2 são simetricamente idênticos, e os da partícula 3 seguem comportamento totalmente semelhante (para essa última, após $t \cong 0,69$ s, tem-se $v_{3,y} = 0,877$ m/s e $\omega_{3,x} = -4,387$ rad/s). As partículas passam de volta na posição inicial em $t \cong 1,38$ s. Os demais parâmetros utilizados na simulação foram: $\Delta t = 10^{-4}$ s (com adaptação automática, sendo $\Delta t_{\text{min}} = 10^{-5}$ s e $\Delta t_{\text{max}} = \Delta t = 10^{-4}$ s); $\phi = 1/2$ (i.e., integração implícita com o método do trapézio clássico) e tolerâncias do critério de convergência $\text{tol}_x = \text{tol}_\alpha^A = \text{tol}_v = \text{tol}_\omega = 10^{-6}$. Forças arrasto, de atração e repulsão e de adesão não foram consideradas. Esse exemplo é um bom teste para verificar se os contatos são corretamente resolvidos em situações em que uma partícula tem contato com mais do que uma outra partícula em um mesmo instante de tempo. É útil, também, para verificar se o método de solução fornece resultados simétricos quando o problema é simétrico. E constitui, ainda, uma situação extremamente simples para validar a implantação

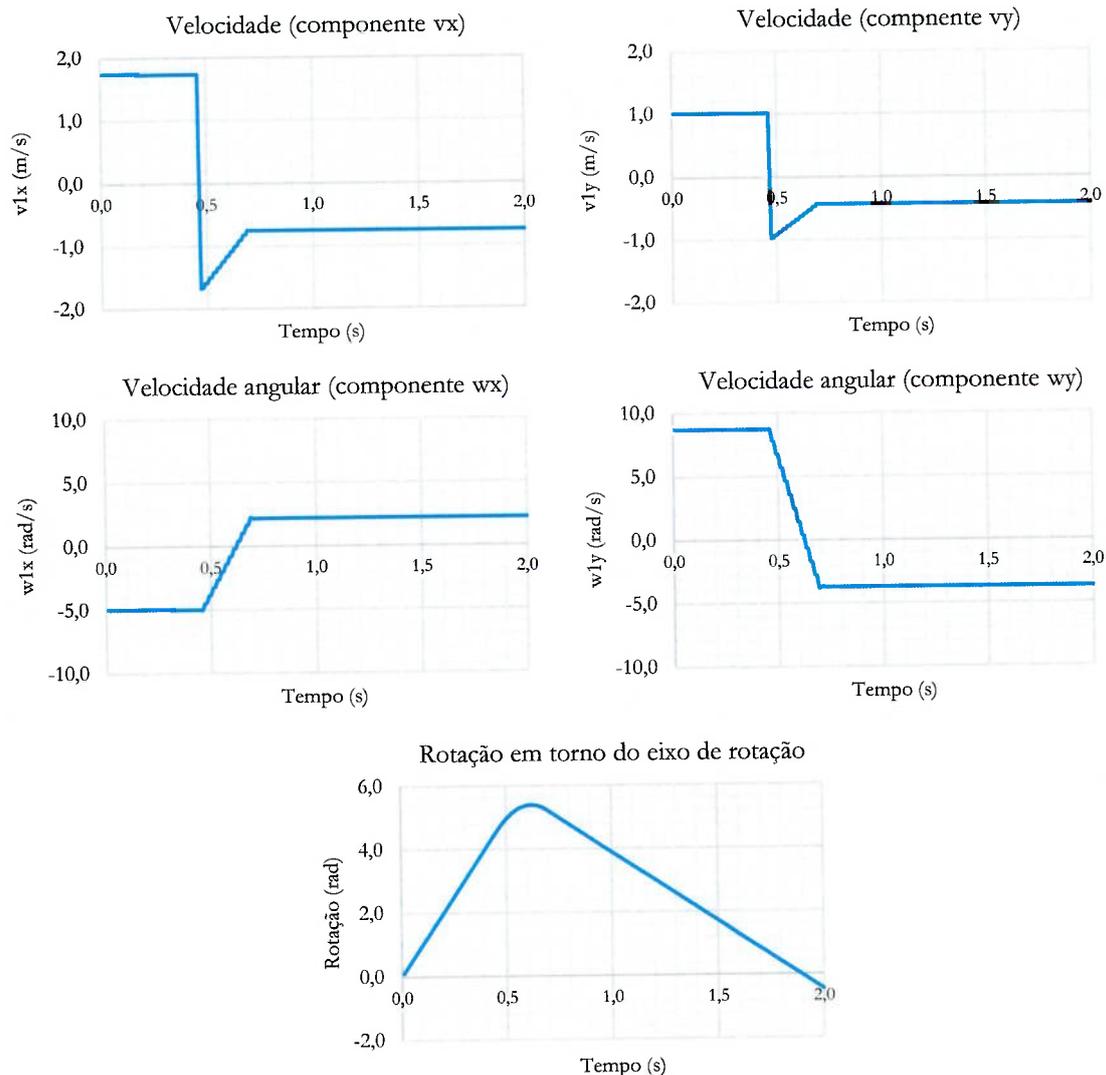


Figura 11. Choque de três partículas em rolamento sobre uma superfície rígida. Histórico da velocidade, velocidade angular e rotação da partícula 1 ao longo do tempo. A rotação apresentada é em relação ao eixo de rotação da partícula, que é fixo.

das listas de contato ($LISTCONT_i$).

4.5 Segregação de grãos por vibração em um recipiente

Este exemplo é proposto em Pöschel e Schwager [4], e é aqui reproduzido com pequenas adaptações. Uma amostra de material granular com grãos esféricos de tamanhos variados é depositada por gravidade no interior de um recipiente, no fundo do qual se encontra um grão de tamanho muito maior do que os demais, conforme esquematizado na Figura 12. A gravidade atua na direção vertical (sentido $-y$). Depois que os grãos atingem o repouso, o recipiente é chacoalhado na vertical por vários segundos, durante o que o material desenvolve um complexo movimento em seu interior, com os grãos trocando energia e momentos (linear e angular) seguidamente por meio de múltiplas colisões entre si e com as paredes. O problema é tratado de forma bidimensional, de maneira que o recipiente é um retângulo no plano xy , com dimensões internas 0,4 m (base) e 1,0 m (altura). O material, por sua vez, é constituído de

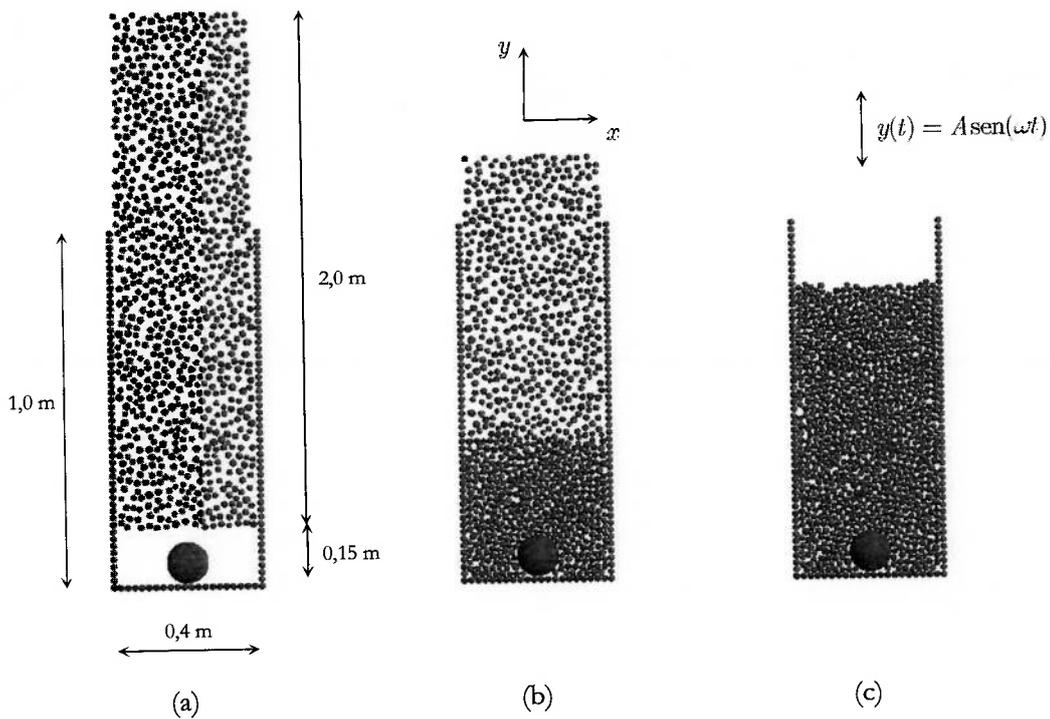


Figura 12. Segregação de grãos por vibração em um recipiente. (a) Início da deposição do material no interior do recipiente, (b) instante intermediário da deposição e (c) final da deposição (configuração estática de equilíbrio antes do início da vibração).

$N_p = 1000$ partículas, e tem curva granulométrica dada por uma distribuição gaussiana com raio médio $\bar{r} = 0,01$ m e desvio padrão $\sigma_r = 0,001$ m. A distribuição é truncada a dois desvios padrões de distância da média, tal que $r_i \in (0,008 \text{ m}; 0,012 \text{ m})$, $i = 1, \dots, 1000$. Seguindo o modelo de Pöschel e Schwager [4], as paredes do recipiente são representadas por partículas justapostas com restrição de movimento, sobre as quais se impõe uma vibração harmônica vertical definida por $y(t) = A \text{sen}(\omega t)$, com amplitude $A = 0,02$ m e frequência angular $\omega = 30$ rad/s, constantes ao longo do tempo (o movimento nas outras direções, bem como as rotações, são impedidos). Essa representação, ao invés do uso de superfícies rígidas, permite capturar, ainda que de maneira muito simplificada, os efeitos geométricos da rugosidade das paredes. Esse é um artifício de modelagem muito comum no MED (deve-se observar, por outro lado, que a rugosidade já é de alguma forma considerada, por meio do coeficiente de atrito). O exemplo é analisado conforme a explicado seguir. Inicialmente, uma “nuvem” de partículas é gerada no interior do recipiente por meio do gerador de partículas mencionado no início deste capítulo. A nuvem é em seguida depositada no fundo do recipiente por ação da gravidade, com as partículas partindo do repouso, até atingir a configuração de equilíbrio indicada na Figura 12(c) (isso ocorre em pouco menos de 0,5 s de simulação). O recipiente é então posto a vibrar por um tempo de 25,0 s. Os seguintes parâmetros são utilizados:

- raio da partícula maior: $r_M = 0,06$ m;
- raio das partículas das paredes: $r_P = 0,01$ m;

- densidade das partículas: $\rho = 8000 \text{ kg/m}^3$;
- propriedades elásticas das partículas: $E = 10^9 \text{ N/m}^2$ e $\nu = 0$;
- coeficientes de atrito (entre todas as partículas, incluindo as das paredes): $\mu_S = \mu_D = 0,5$;
- taxas de amortecimento: $\xi_n = 0,0002$ e $\xi_t = 0,02$;
- aceleração da gravidade: $g = -9,81 \text{ m/s}^2$;
- passo de integração: $\Delta t = 2,5 \times 10^{-5} \text{ s}$ (integração com o método explícito, i.e., $\phi = 0$);
- subdivisão do domínio: 5 células na direção x e 10 na direção y , com distância de Verlet $d_V = 0,12 \text{ m}$ e atualização das listas a cada $0,005 \text{ s}$.

Forças de arrasto, de atração e repulsão e de adesão não são consideradas. Deve-se ressaltar que as propriedades de amortecimento utilizadas não são as mesmas das de Pöschel e Schwager [4], em virtude de esse último adotar um modelo de contato e atrito diferente do que é aqui proposto. Uma correlação aproximada, comparando-se as equações que definem as constantes de amortecimento (i.e., (2.60) e (2.87)) com as equações correspondentes do modelo de Pöschel e Schwager [4], conduz aos valores acima. A Figura 13 apresenta retratos da configuração do sistema em diferentes instantes de tempo conforme a solução numérica obtida neste trabalho. Como se observa, após decorridos cerca de 20,0 s de excitação, a partícula maior “emerge” na camada superior da amostra, e lá permanece indefinidamente até o final da simulação. A Figura 14 apresenta a evolução de sua coordenada vertical ao longo do tempo. Pode-se perceber que a partícula ascende em um movimento cíclico, que acompanha a vibração do recipiente mas que tem coordenada média crescente, até atingir o valor de cerca de 0,73 m – correspondente ao nível médio da camada superior. É interessante constatar a partir do gráfico que essa ascensão ocorre a uma velocidade aproximadamente constante até $t \cong 11 \text{ s}$, quando então se torna mais pronunciada e assim prossegue até $t \cong 17 \text{ s}$, a partir do que desacelera progressivamente até cessar (em valor médio), em $t \cong 20 \text{ s}$. Essas variações de velocidade podem ser explicadas pela diferença de densidade observada na amostra ao longo da altura do recipiente: as partículas das camadas superiores são mais “soltas”, ou livres para se movimentar verticalmente, pelo fato de haver menos material (e logo peso) acima de si, o que oferece menos restrição ao movimento da partícula maior. Esse exemplo ilustra um fenômeno típico dos materiais granulares, que é a segregação de grãos por diferença de tamanho devido a vibrações impostas. Na física dos materiais granulares, esse fenômeno é muitas vezes chamado de “efeito castanha-do-Pará” (“*Brazil nuts effect*”), por ter sido assim designado após o famoso trabalho de Rosato et al. [85] (ver também Jullien e Meakin [86]), um dos pioneiros na sua investigação. Esse tipo de segregação é curioso por ser de certa maneira contrário à intuição, já que são as partículas mais pesadas as que ascendem à superfície. Sua causa é a existência da chamada *convecção granular* (vide Duran [3], dentre outros), que é o transporte ou migração de grãos (induzido por vibração) com forte componente rotacional devido ao atrito. É instrutivo observar que esse mesmo exemplo, se analisado inibindo-se a rotação das partículas, mas com os mesmos parâmetros acima, não apresenta a segregação. Nesse caso, a partícula maior permanece indefinidamente no fundo do recipiente, como pode ser observado na Figura 15.

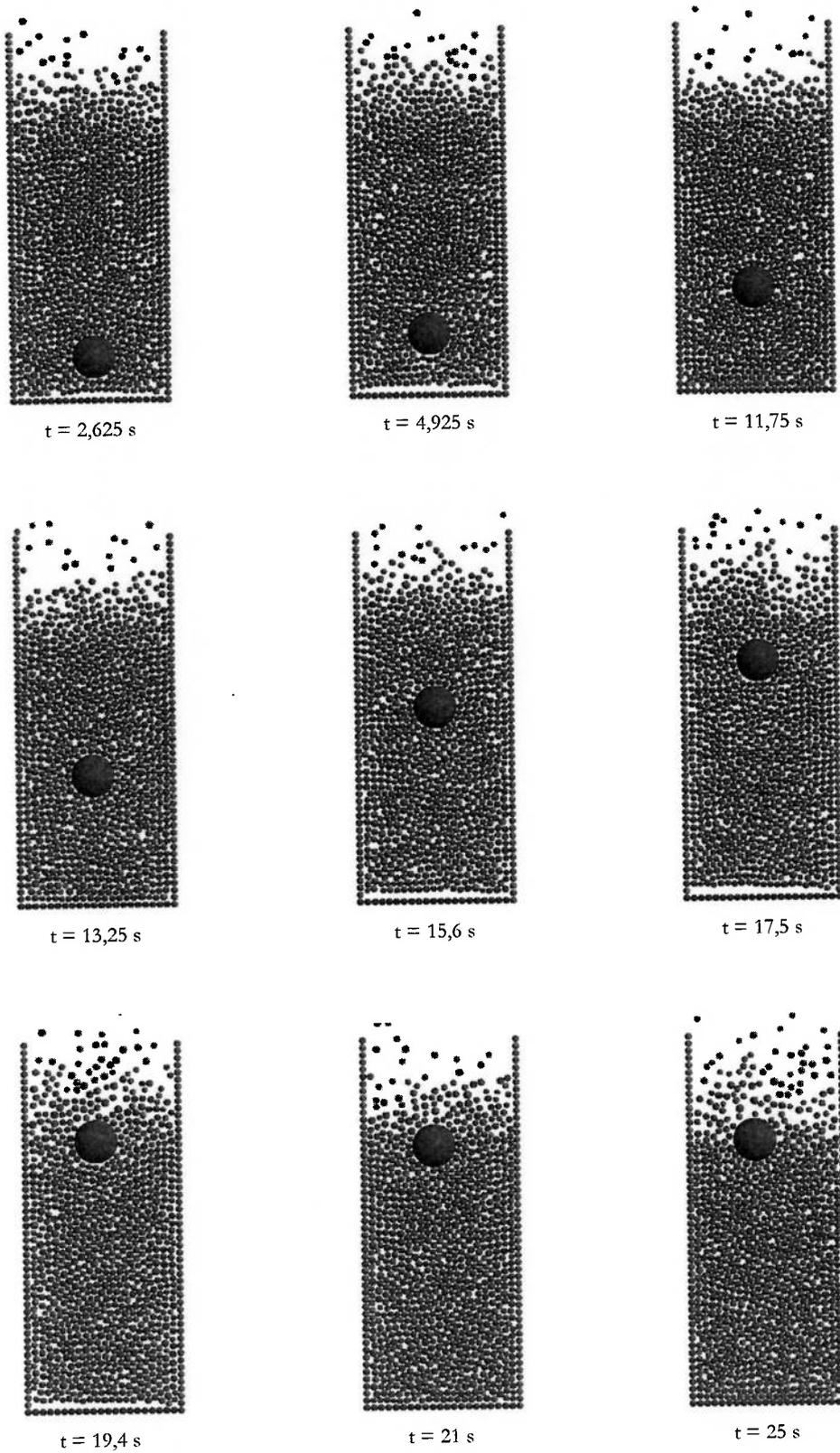


Figura 13. Segregação de grãos por vibração em um recipiente. Retratos da configuração do sistema em diferentes instantes (ordem da sequência é da esquerda para a direita, de cima para baixo).

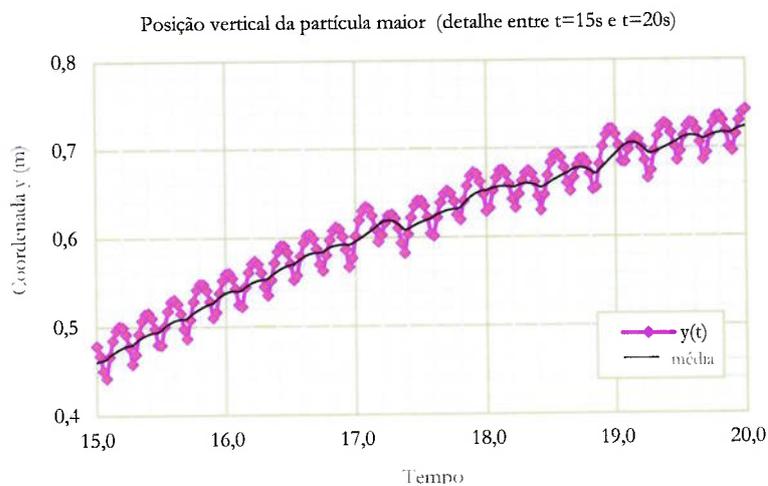
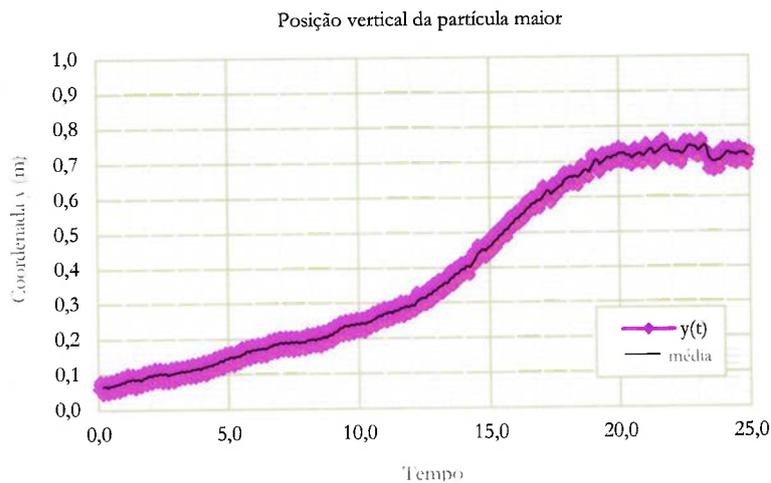


Figura 14. Segregação de grãos por vibração em um recipiente. Evolução da coordenada vertical da partícula maior ao longo do tempo (gráfico superior) e detalhe entre os instantes $t = 15,0$ s e $t = 20,0$ s (gráfico inferior). A linha escura se refere à média das coordenadas.

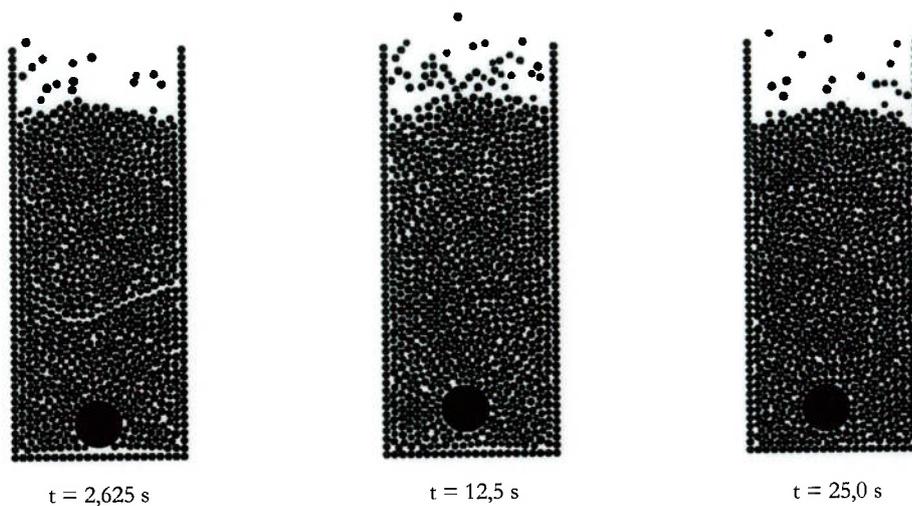


Figura 15. Segregação de grãos por vibração em um recipiente. Retratos da configuração do sistema quando a simulação é feita inibindo-se a rotação das partículas.

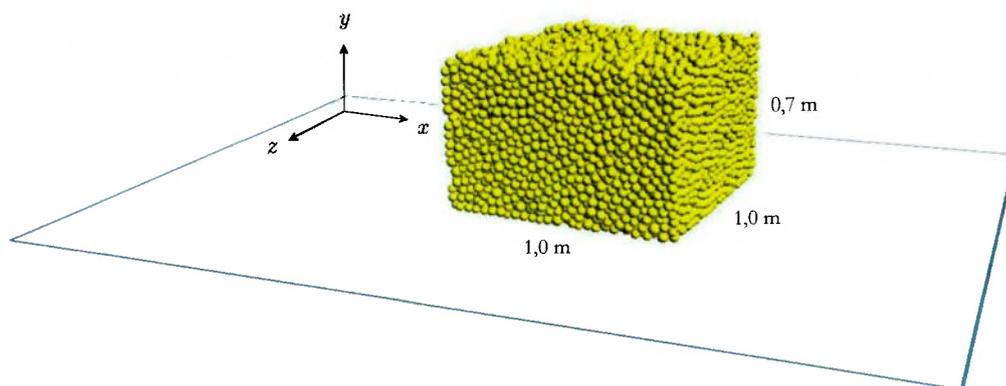


Figura 16. Desmoronamento de uma pilha de grãos. A pilha possui contenções laterais nas quatro faces verticais, não representadas por simplicidade.

4.6 Desmoronamento de uma pilha de grãos

Uma certa quantidade de material granular é empilhada verticalmente (com contenções laterais) sobre uma superfície rígida, formando um prisma de base quadrada conforme representado na Figura 16 (as contenções não são mostradas por simplicidade). A gravidade atua na direção vertical (sentido $-y$). Com os grãos em repouso, as contenções são removidas repentinamente e a pilha sofre um desmoronamento brusco, atingindo uma configuração estática de equilíbrio certo tempo depois. A forma dessa configuração depende, fundamentalmente, do atrito interno do material, e esse aspecto é investigado nesse exemplo. A pilha tem dimensões iniciais de 1,0 m (lados) e 0,7 m (altura). Os grãos, por sua vez, são esféricos e seus raios seguem uma distribuição gaussiana de valor médio $\bar{r} = 0,02$ m e desvio padrão $\sigma_r = 0,002$ m (a distribuição é truncada a três desvios padrões da média, tal que $r_i \in (0,014 \text{ m}; 0,026 \text{ m})$). O empilhamento inicial é feito por meio do gerador de partículas mencionado no início deste capítulo, seguindo a técnica de deposição por camadas proposta em Campello e Cassares [84]. A densidade da pilha assim obtida (razão entre o volume total ocupado pelas partículas e o volume do prisma) é de 0,57. O efeito do atrito interno em pilhas de grãos também é estudado em Yan et al. [87], embora em um problema bastante diferente. Aqui, adotam-se os mesmos parâmetros de atrito e material utilizados nessa referência. Um aspecto importante é que nesse exemplo a resistência ao rolamento deve ser necessariamente considerada, do contrário as partículas, por serem perfeitamente esféricas, passariam a rolar indefinidamente sobre a superfície rígida após o desmoronamento, o que causaria uma “dissolução” progressiva da pilha, até o seu completo desmancho. Adota-se aqui um modelo simplificado de resistência ao rolamento, adaptado do modelo de Yan et al. [87]. O momento de resistência ao rolamento que atua em uma partícula i devido ao contato com outra partícula j (ou com a superfície rígida) é aqui dado por

$$m_{ij}^{rol} = -\mu_R r^* \|\mathbf{f}_{ij}^{con}\| \frac{\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_j}{\|\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_j\|}, \quad (4.6)$$

onde μ_R é o chamado coeficiente de resistência ao rolamento, r^* é o raio equivalente do par em contato

(dado em (2.56) ou (2.93)), f_{ij}^{con} é a força normal de contato entre o par, e ω_i e ω_j suas velocidades angulares. Nesse exemplo, o desmoronamento é estudado por meio de cinco simulações diferentes, cada uma correspondendo a parâmetros distintos para o atrito interno (partícula-partícula) do material:

- simulação 1: $\mu_S = \mu_D = 0$ e $\mu_R = 0$;
- simulação 2: $\mu_S = \mu_D = 0,15$ e $\mu_R = 0,05$;
- simulação 3: $\mu_S = \mu_D = 0,25$ e $\mu_R = 0,1$;
- simulação 4: $\mu_S = \mu_D = 0,5$ e $\mu_R = 0,45$;
- simulação 5: $\mu_S = \mu_D = 1$ e $\mu_R = 0,9$.

Os seguintes demais parâmetros são utilizados, com base em Yan et al. [87]:

- densidade das partículas: $\rho = 2500$ kg/m³;
- propriedades elásticas das partículas: $E = 2 \times 10^7$ N/m² e $\nu = 0,25$;
- coeficiente de atrito partícula-superfície rígida: $\mu_S = \mu_D = 0,65$;
- coeficiente de resistência ao rolamento partícula-superfície rígida: igual ao partícula-partícula;
- taxas de amortecimento: $\xi_n = \xi_t = 0,1$;
- aceleração da gravidade: $g = -9,81$ m/s²;
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ s (integração com o método explícito, i.e., $\phi = 0$);
- número total de partículas no empilhamento inicial: $N_p = 12360$;
- subdivisão do domínio: 12 células nas direções x e z e 5 na direção y , com distância de Verlet $d_V = 0,125$ m e atualização das listas a cada 0,005 s.

Forças de arrasto, de atração e repulsão e de adesão não são consideradas. A Figura 17 apresenta retratos da configuração do sistema em diferentes instantes de tempo conforme obtidos em uma simulação típica (o caso mostrado é o da simulação 5). Como pode ser observado, após o desmoronamento a pilha adquire a forma de um cone abatido, conforme esperado. A razão de aspecto desse cone pode ser caracterizada pelo chamado ângulo de repouso do material, designado por θ . Essa grandeza é aqui medida conforme sugerido por Yan et al. [87] e indicado na Figura 18, fazendo-se

$$\theta = \frac{\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 + \theta_4}{4}. \quad (4.7)$$

Nesse caso, θ_m ($m = 1, \dots, 4$) são as inclinações médias das faces de duas seções transversais ortogonais alinhadas com os eixos de referência. A Tabela 2 apresenta os valores de θ obtidos em cada uma das simulações. A Figura 19, por sua vez, apresenta a configuração final das pilhas (em vista lateral) para cada caso. As inclinações médias estão indicadas em escala, e atestam a ótima concordância observada entre o ângulo de repouso obtido e o coeficiente de atrito entre os grãos, que podem ser relacionados por meio da expressão clássica $\mu_S = \tan \theta$. É importante ressaltar que a resistência ao rolamento pode ter influência significativa na forma estática da pilha, como demonstrado em Yan et al. [87]. Por esse motivo, o estudo

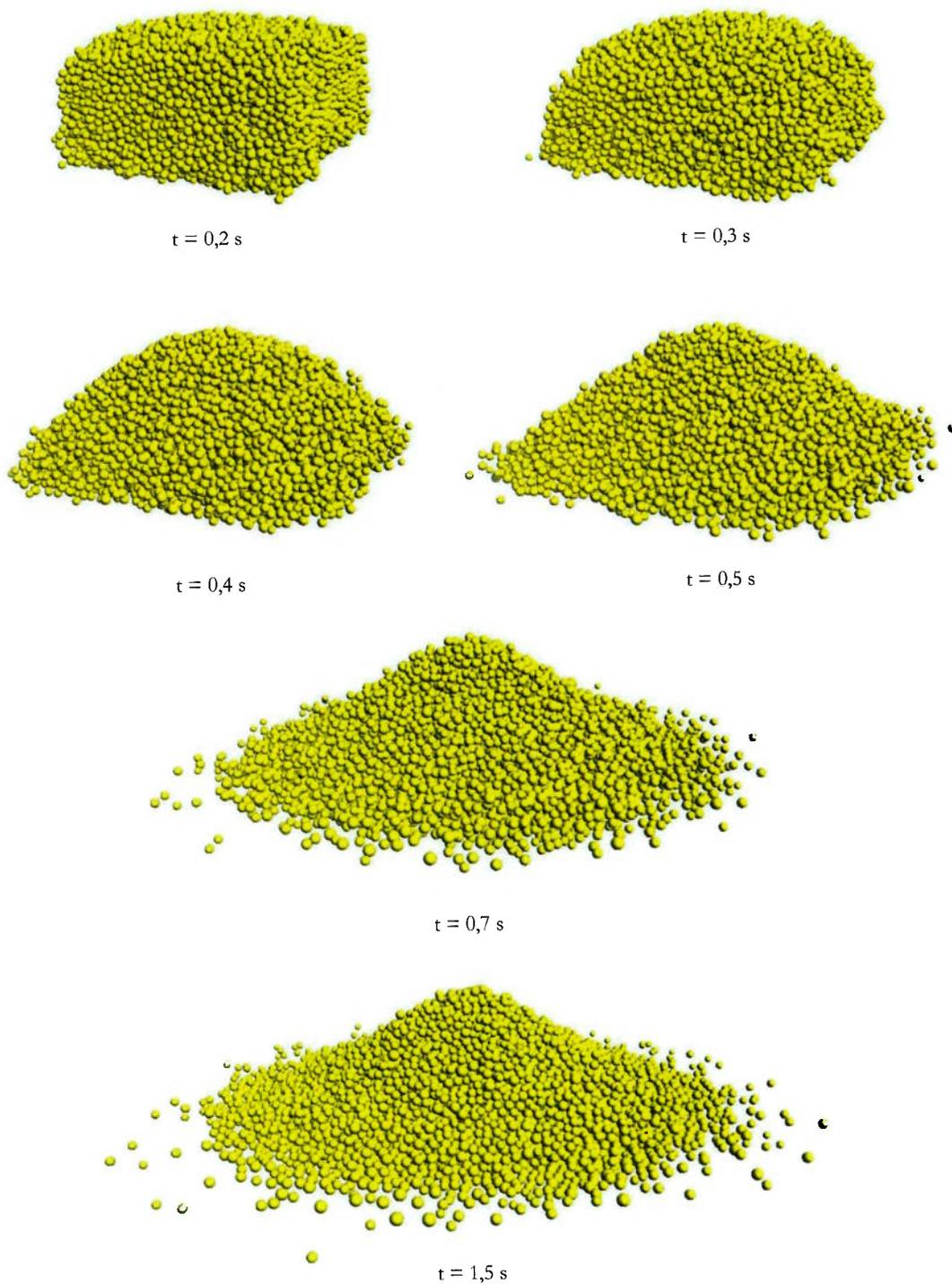


Figura 17. Desmoronamento de uma pilha de grãos. Retratos da configuração do sistema em diferentes instantes obtidos na simulação 5 (ordem da sequência é da esquerda para a direita, de cima para baixo). A superfície rígida sob a pilha não é mostrada por simplicidade.

rigoroso de problemas de desmoronamento exige que modelos mais sofisticados de resistência ao rolamento sejam considerados. Fenômenos de avalanche também podem ser estudados por meio de modelos de MED como o descrito nesse exemplo.

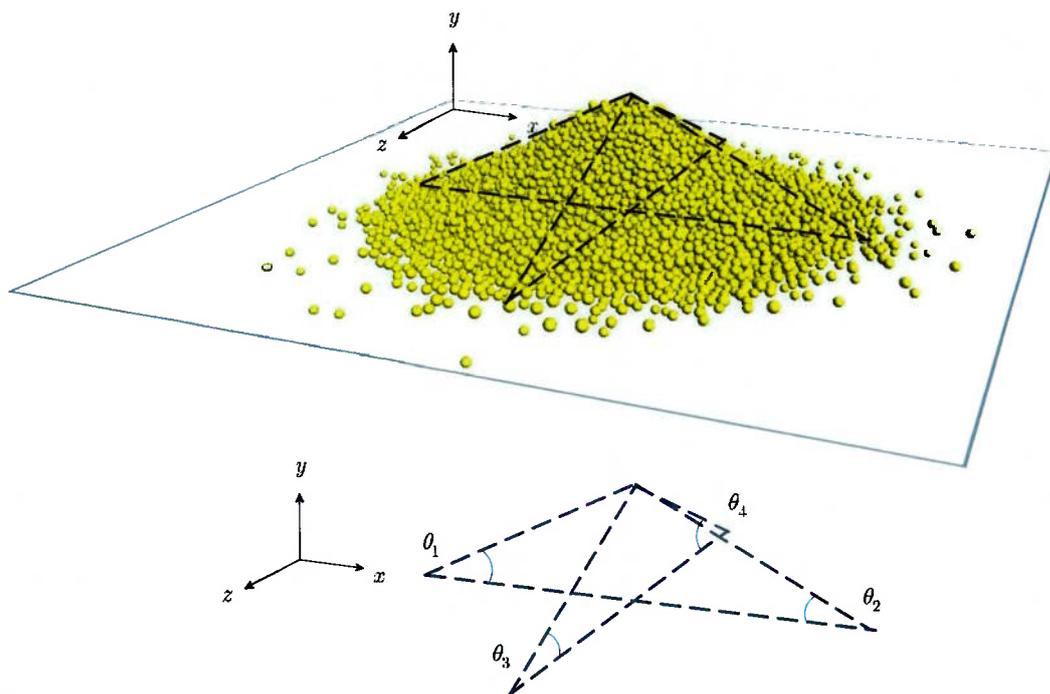


Figura 18. Desmoronamento de uma pilha de grãos. Medida da inclinação média das faces após o desmoronamento. As seções transversais indicadas são alinhadas com os eixos de referência. As retas pontilhadas devem ser traçadas para um trecho de altura intermediária da pilha, de modo a não incluir o efeito parede induzido pela superfície rígida (na base da pilha) e nem o abaulamento (próximo ao cume).

Tabela 2. Desmoronamento de uma pilha de grãos. Ângulo de repouso obtido com diferentes parâmetros de atrito interno do material.

Atrito interno	Inclinação média ($\tan \theta$)	Ângulo de repouso (θ)
Simulação 1	0	0
Simulação 2	0,15	8,5°
Simulação 3	0,26	14,5 °
Simulação 4	0,51	27,0°
Simulação 5	0,89	41,7°

4.7 Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada

Este é um dos principais exemplos analisados em Zohdi [5] e [88]. Um aglomerado de partículas carregadas eletricamente, formando uma espécie de “gota” ou “pingo” com o aspecto de uma esfera, é projetado contra a superfície de um bloco rígido a alta velocidade inicial, conforme esquematizado na Figura 20. O bloco está eletrificado por um campo elétrico uniforme de intensidade E^{ext} no sentido $+x$, cuja influência se inicia a 1,0 m de distância de sua superfície frontal. Essa, por sua vez, se encontra na coordenada $x = 2,0$ m. As partículas exercem forças de atração e repulsão entre si, na forma dada pela equação (2.44). Deseja-se aqui estudar o comportamento do aglomerado ao impactar a superfície do bloco

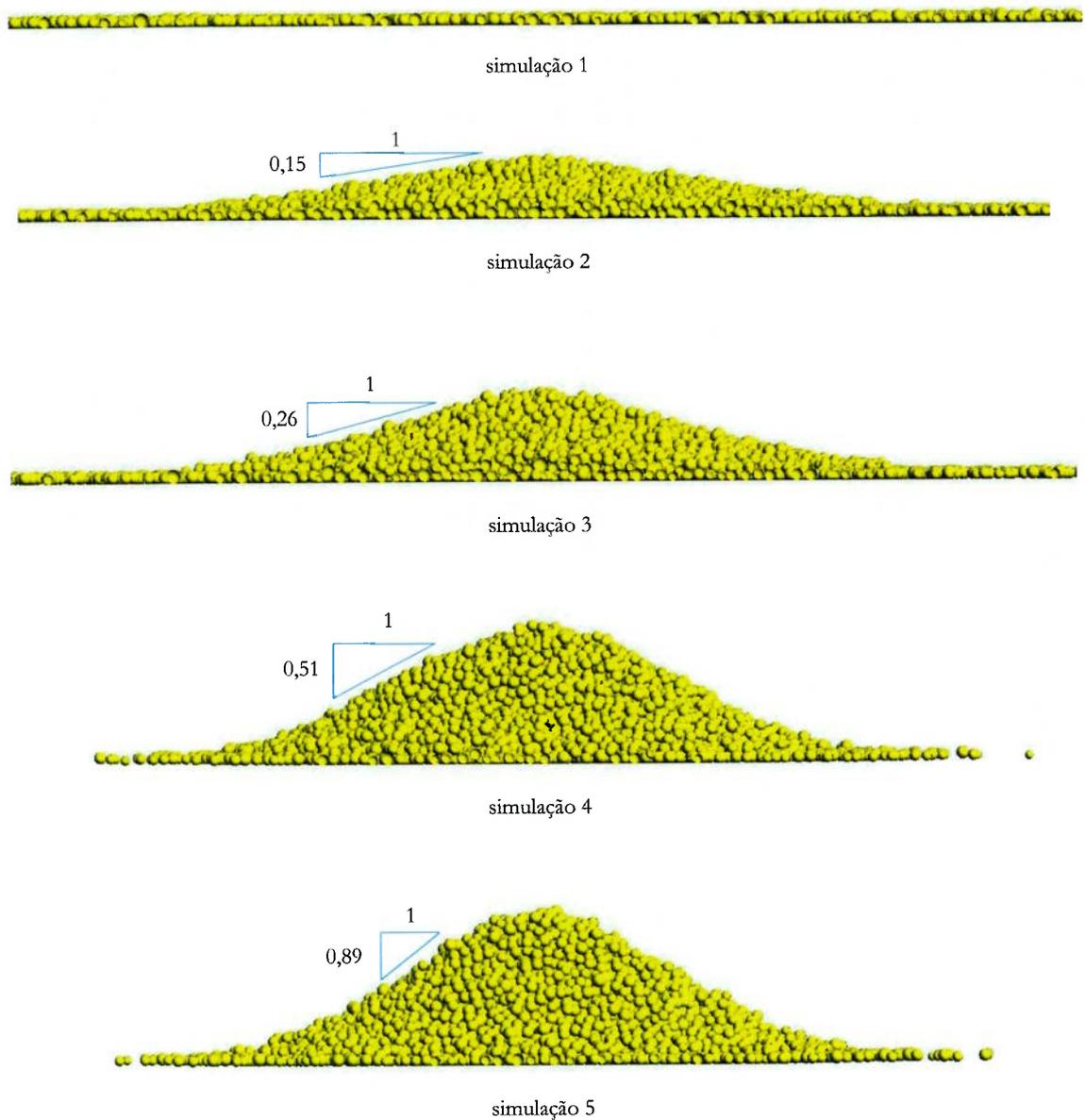


Figura 19. Desmoronamento de uma pilha de grãos. Configuração final da pilha em cada simulação (vista lateral paralela ao plano xy). A superfície rígida sob a pilha não é mostrada por simplicidade.

sob diferentes valores de E^{ext} . Em especial, deseja-se investigar o grau de coerência do aglomerado após o impacto, i.e., o quanto as partículas conseguem permanecer mais ou menos coesas entre si e aderidas à superfície dentro de uma região-alvo após a colisão. Define-se como região-alvo um círculo de raio 2,0 m com centro no ponto $A = (2,0,0)$, conforme indicado na Figura 20. As seguintes grandezas são consideradas após o impacto:

- distância de uma partícula i (de coordenadas y_i e z_i) em relação ao centro da região-alvo:

$$d_i = \sqrt{y_i^2 + z_i^2}; \quad (4.8)$$

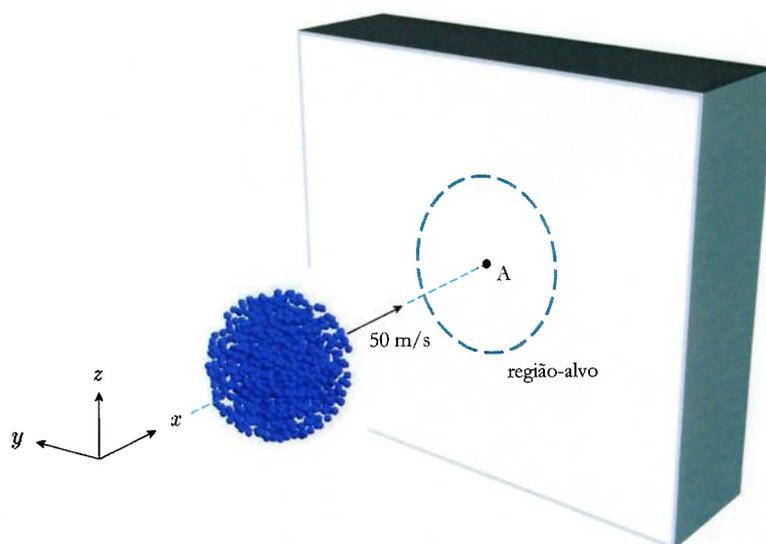


Figura 20. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. No instante inicial, o centro do aglomerado está na origem do sistema de referência. A superfície é paralela ao plano yz e está na coordenada $x = 2,0$ m.

- distância média das partículas em relação ao centro da região-alvo:

$$\bar{d} = \frac{1}{N_P} \sum_{i=1}^{N_P} d_i, \quad (4.9)$$

onde N_P é o número total de partículas do aglomerado;

- desvio padrão em relação à distância média:

$$\sigma_d = \sqrt{\frac{1}{N_P} \sum_{i=1}^{N_P} (d_i - \bar{d})^2}; \quad (4.10)$$

- espessura média da camada depositada sobre a superfície do bloco, definida como sendo a diferença média entre a coordenada $x = 2,0$ m da superfície e a coordenada x_i de cada partícula:

$$\bar{h} = \frac{1}{N_P} \sum_{i=1}^{N_P} (2 - x_i); \quad (4.11)$$

- desvio padrão em relação à espessura média:

$$\sigma_h = \sqrt{\frac{1}{N_P} \sum_{i=1}^{N_P} (x_i - \bar{h})^2}; \quad (4.12)$$

- percentual de deposição na região-alvo: é o número de partículas que satisfazem a condição $d_i \leq 2,0$ m, dividido pelo número total de partículas N_P .

O aglomerado é formado por $N_P = 1000$ partículas de raio $r_i = 0,05$ m, aleatoriamente

posicionadas no interior de uma esfera fictícia de raio 1,0 m (a técnica de adição sequencial aleatória é utilizada para a sua geração). O centro da esfera coincide com a origem do sistema de referência no instante $t = 0$. Os demais parâmetros são:

- densidade das partículas: $\rho = 2000 \text{ kg/m}^3$;
- carga elétrica das partículas: $q_i = 1,0 \text{ C}$;
- propriedades elásticas das partículas: $E = 2 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ e $\nu = 0,25$;
- coeficiente de atrito partícula-partícula e partícula-superfície do bloco: $\mu_g = \mu_D = 0,2$;
- taxas de amortecimento: $\xi_n = \xi_t = 0,3$;
- parâmetros das forças de atração e repulsão: $k_{ij}^{at} = 0,5$, $\alpha_{at} = 1$, $k_{ij}^{rep} = 0,25$ e $\alpha_{rep} = 2$, com distância de corte $d_c = 1,0 \text{ m}$;
- velocidade inicial do aglomerado: $\mathbf{v} = (50,0,0) \text{ m/s}$;
- campo elétrico: $E^{ext} = 0, 10, 100, 1000$ e 10000 N/C (conforme a simulação), atuando a partir da coordenada $x = 1,0 \text{ m}$;
- passo de integração: $\Delta t = 2 \times 10^{-5} \text{ s}$ (integração com o método explícito, i.e., $\phi = 0$);
- tempo total de simulação: $t_F = 1,0 \text{ s}$;
- subdivisão do domínio: 5 células na direção x e 10 células nas direções y e z , com distância de Verlet $d_V = 0,2 \text{ m}$ e atualização das listas a cada $0,002 \text{ s}$.

A aceleração da gravidade é desprezada e forças de arrasto e de adesão não são consideradas. Deve-se ressaltar que as propriedades de amortecimento não são as mesmas utilizadas em Zohdi [5], em virtude de esse último adotar um modelo de contato e atrito baseado no conceito de esferas rígidas (vide nota ao final da Seção 2.9), cujo parâmetro de dissipação é o coeficiente de restituição e não as taxas de amortecimento. Uma correlação entre essas grandezas, por meio das equações (2.60) e (2.87), conduz aos valores acima. Ainda assim, salienta-se que esses são apenas valores aproximados, obtidos a partir da média dos coeficientes de restituição utilizados na referência em questão (nela, o coeficiente de restituição não é constante, mas sim uma função da velocidade de aproximação das partículas colidentes). Deve-se ressaltar também que em Zohdi [5] o problema é analisado com partículas que não têm graus de liberdade de rotação.

A Figura 21 apresenta retratos da configuração do sistema em diferentes instantes de tempo obtidos em uma simulação típica (o caso mostrado é o de $E^{ext} = 100 \text{ N/C}$). Como pode ser observado, assim que o aglomerado atinge a superfície do bloco, as partículas de seu fronte rebotam (com perda de energia devido ao amortecimento) e colidem com as que estão em aproximação, o que confina a amplitude do rebote. Essas colisões acabam por provocar também um movimento transversal à velocidade de aproximação, em decorrência de elas serem (em sua maioria) não frontais. Um grande número de partículas passa então a se deslocar tangencialmente à superfície, de modo que o aglomerado se espalha ou esparrama sobre ela. Esse movimento de espalhamento ocorre com bastante dissipação de energia, já que a força de atrito é mobilizada devido à força normal induzida pelo campo elétrico. Decorrido algum

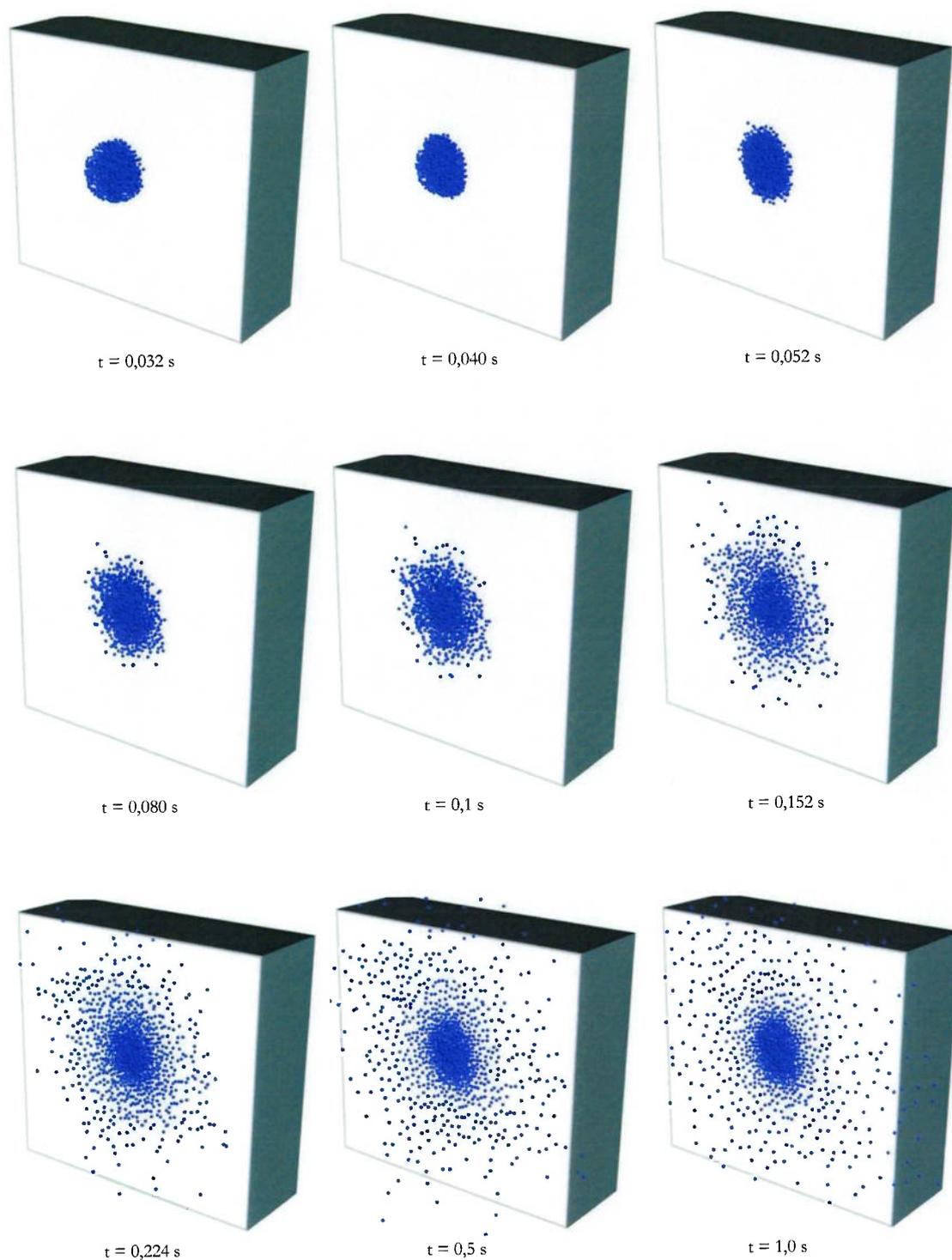


Figura 21. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. Retratos da configuração do sistema em diferentes instantes de tempo obtidos para o caso $E^{ext} = 100$ N/C (ordem da sequência é da esquerda para a direita, de cima para baixo).

tempo, toda a energia das partículas terá sido dissipada e o sistema atinge uma configuração estática de equilíbrio.

A Tabela 3, Tabela 4 e Tabela 5 e a Figura 22 apresentam os resultados obtidos em cada uma das simulações. Os resultados de Zohdi [5] e [88] também são apresentados para comparação. Para uma

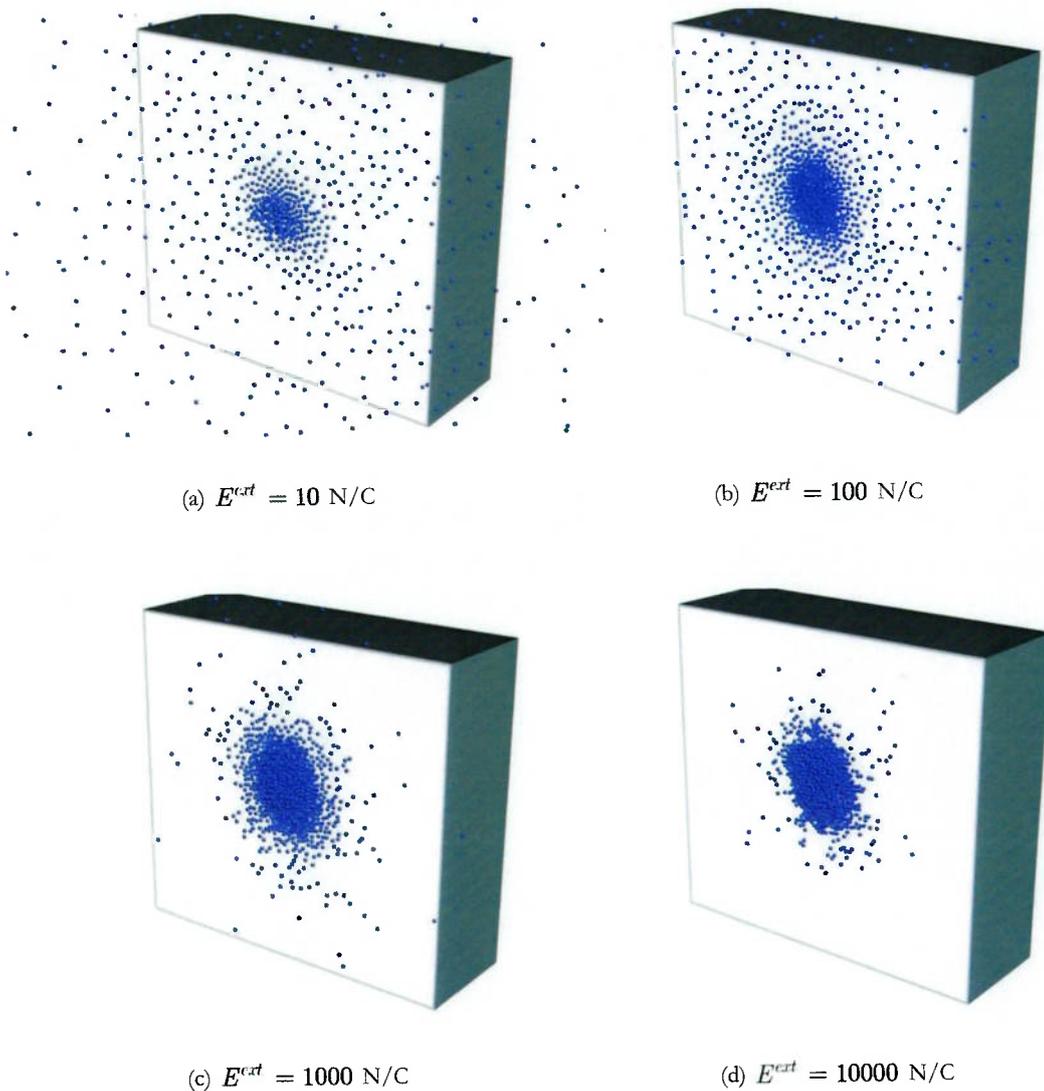


Figura 22. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. Configurações finais do sistema para cada uma das simulações (rotações não inibidas): (a) $E^{ext} = 10 \text{ N/C}$, (b) $E^{ext} = 100 \text{ N/C}$, (c) $E^{ext} = 1000 \text{ N/C}$ e (d) $E^{ext} = 10000 \text{ N/C}$.

melhor correspondência com os resultados dessas referências, o exemplo também é aqui analisado inibindo-se a rotação das partículas, e os resultados correspondentes são mostrados nessas tabelas e também na Figura 23. Como conclusões gerais, pode-se afirmar, exatamente como constatado em Zohdi [5] e [88], que:

- Para $E^{ext} = 0$, as partículas rebotam quase que inteiramente, não aderindo à superfície (no instante final, algumas poucas partículas, que correspondem a menos de 10% do total, são observadas na região-alvo, mas isso é decorrente de terem dissipado energia por colisões com outras partículas, e não por terem aderido à superfície);
- Para $E^{ext} = 10 \text{ N/C}$, parte das partículas rebota e parte adere à superfície, sendo que aquelas que aderem se espalham bastante sobre a mesma;

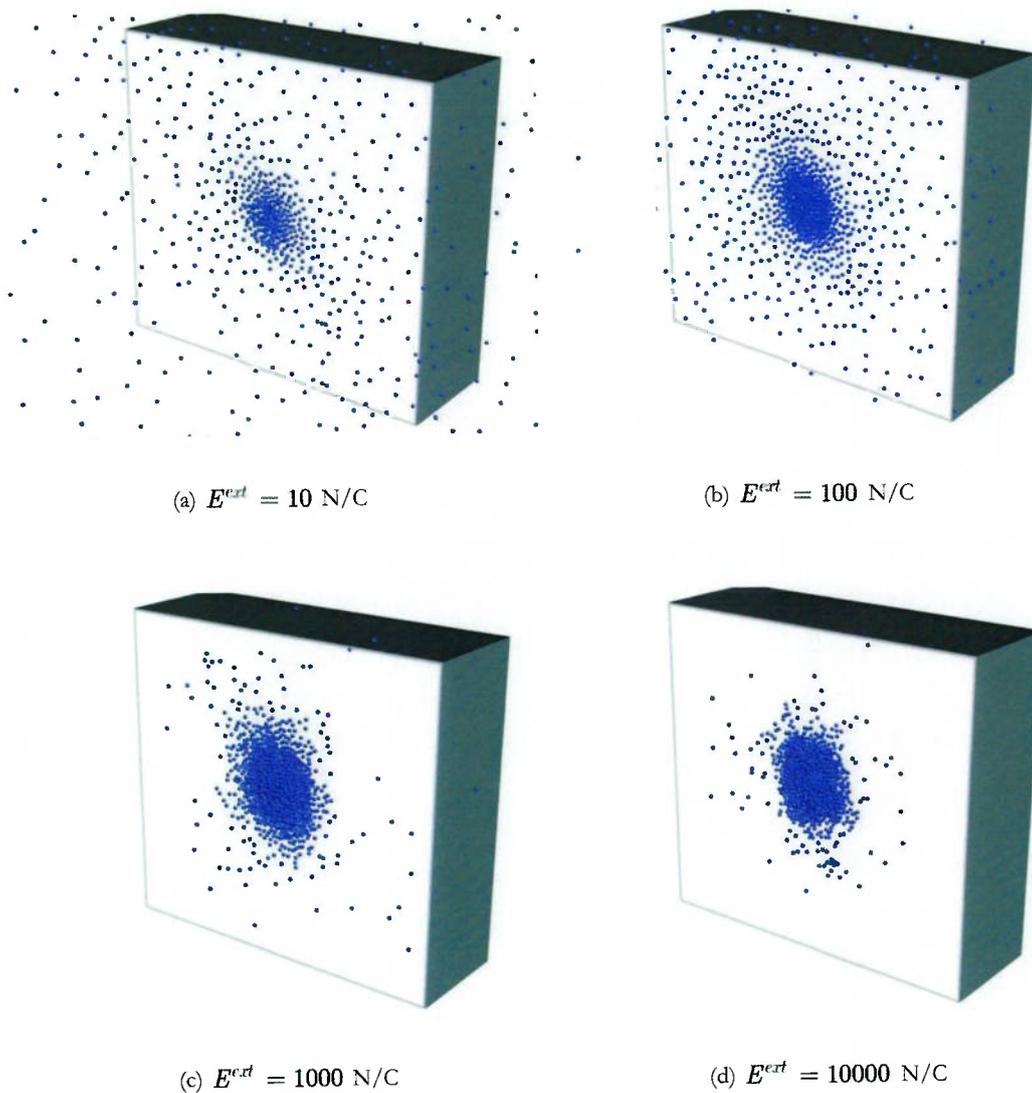


Figura 23. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. Configurações finais do sistema para a simulação com rotações inibidas: (a) $E^{ext} = 10 \text{ N/C}$, (b) $E^{ext} = 100 \text{ N/C}$, (c) $E^{ext} = 1000 \text{ N/C}$ e (d) $E^{ext} = 10000 \text{ N/C}$.

- Para $E^{ext} = 100 \text{ N/C}$, as partículas aderem à superfície com quase nenhum rebote, mas o espalhamento ainda é razoavelmente pronunciado;
- Para $E^{ext} \geq 1000 \text{ N/C}$, as partículas aderem integralmente à superfície e o espalhamento é limitado a uma região relativamente pequena.

É interessante observar que neste problema a consideração das rotações não altera qualitativamente os resultados: a tendência geral do sistema é a mesma independentemente de elas serem inibidas ou não. Isso pode ser explicado pelo fato de as velocidades de translação serem muito altas comparativamente às velocidades angulares desenvolvidas. A propósito, deve-se observar que a resistência ao rolamento precisa ser considerada no caso em que as rotações não são inibidas, pela mesma razão exposta no exemplo anterior. Aqui, adota-se $\mu_R = 0,3$. Por fim, ressalta-se que o valor do raio da região-alvo e o valor da distância de corte para as forças de atração e repulsão não são reportados em Zohdi [5] e [88]. Eles foram

arbitrados aqui por inspeção dos resultados dessa referência. Por meio de modelos como o construído neste exemplo, é possível estudar diversos problemas de interesse da indústria e da engenharia, como processos de pintura eletrostática, aplicação de *sprays* sobre superfícies, aplicação de camadas antiabrasivas e barreiras térmicas em substratos sólidos, impressão por jateamento de tinta, dentre vários outros.

Tabela 3. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. Distância média das partículas em relação ao centro da região-alvo para diferentes valores do campo elétrico. O desvio padrão está indicado entre parênteses.

Campo elétrico (N/C)	Zohdi [5]	Rotações inibidas	Rotações não inibidas
0	5,46 m (1,81 m)	5,92 m (5,18 m)	6,12 m (5,15 m)
10	5,13 m (2,08 m)	5,26 m (6,96 m)	5,63 m (5,12 m)
100	2,19 m (1,70 m)	2,42 m (2,57 m)	2,85 m (3,12 m)
1000	1,07 m (0,52 m)	1,10 m (0,78 m)	1,30 m (1,72 m)
10000	0,99 m (0,41 m)	0,98 m (0,92 m)	0,98 m (0,90 m)

Tabela 4. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. Percentual de deposição na região-alvo para diferentes valores do campo elétrico.

Campo elétrico (N/C)	Zohdi [5]	Rotações inibidas	Rotações não inibidas
0	6%	9%	8%
10	11%	34%	34%
100	60%	61%	56%
1000	95%	91%	87%
10000	99%	93%	94%

Tabela 5. Deposição de um aglomerado de partículas sobre uma superfície rígida eletrificada. Espessura média da camada depositada sobre a superfície para diferentes valores do campo elétrico. O desvio padrão está indicado entre parênteses.

Campo elétrico (N/C)	Zohdi [5]	Rotações inibidas	Rotações não inibidas
0	1,887 m (2,692 m)	1,662 m (3,754 m)	1,724 m (3,222 m)
10	0,423 m (1,389 m)	0,589 m (4,281 m)	0,128 m (0,356 m)
100	0,050 m (0,003 m)	0,057 m (0,021 m)	0,055 m (0,018 m)
1000	0,050 m (0,000 m)	0,075 m (0,046 m)	0,068 m (0,038 m)
10000	0,050 m (0,000 m)	0,059 m (0,027 m)	0,085 m (0,052 m)

4.8 Jateamento de partículas sobre uma superfície

Este exemplo é uma versão simplificada de exemplo semelhante apresentado pelo autor em Campello [89]. Um jato de partículas esféricas é projetado sobre uma superfície rígida conforme indicado na Figura 24. A intenção é que, após o impacto, as partículas fiquem aderidas à superfície e sirvam-lhe de pintura ou camada protetora. Deseja-se investigar qual é a velocidade adequada de jateamento, v_x , tal que

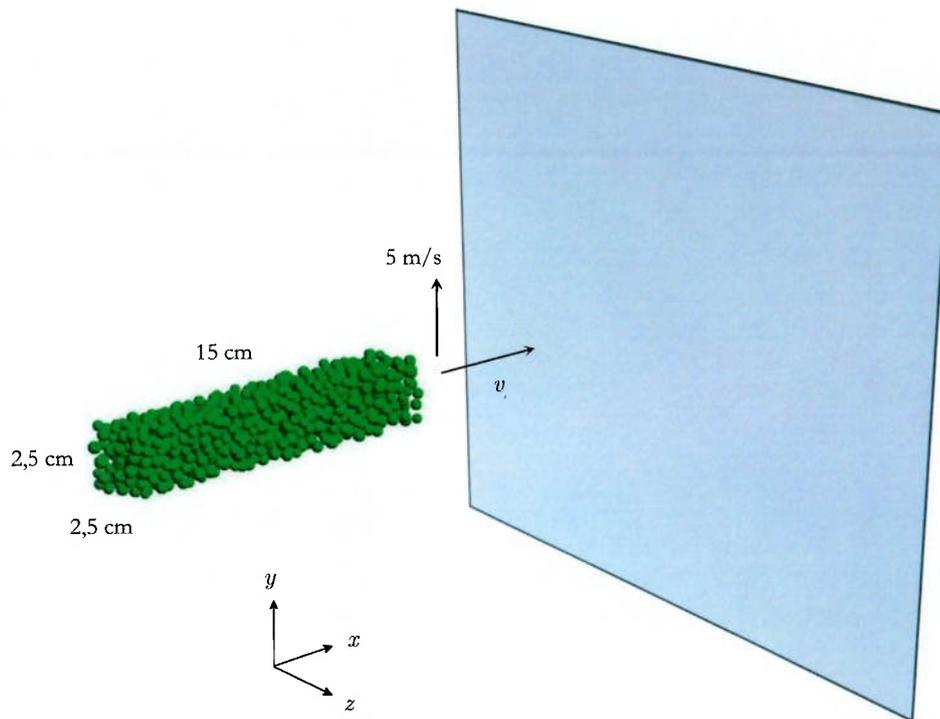


Figura 24. Jateamento de partículas sobre uma superfície.

se promova uma boa aderência e acabamento à camada jateada. O jato consiste de $N_p = 1500$ partículas (dispostas aleatoriamente no interior de uma prisma fictício de dimensões 15 cm x 2,5 cm x 2,5 cm – a técnica de adição sequencial aleatória é utilizada), com seus raios seguindo uma distribuição gaussiana de valor médio $\bar{r} = 2,0$ mm e desvio padrão $\sigma_r = 0,2$ mm (a distribuição é truncada a três desvios padrões da média, tal que $r_i \in (1,4 \text{ mm}; 2,6 \text{ mm})$). O jato se move no sentido $+y$ a uma velocidade constante de 5 m/s. A adesão entre as partículas (e também entre elas e a superfície rígida) é representada por forças conforme a expressão (2.52). Além disso, dadas as velocidades e dimensões envolvidas, forças de arrasto também são consideradas, utilizando-se o modelo apresentado na Seção 2.6 (admite-se que o meio fluido é o ar). Os demais parâmetros utilizados são:

- densidade das partículas: $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$;
- propriedades elásticas das partículas: $E = 1 \times 10^7 \text{ N/m}^2$ e $\nu = 0,25$;
- coeficiente de atrito partícula-partícula: $\mu_S = \mu_D = 0,05$;
- coeficiente de atrito partícula-superfície rígida: $\mu_S = \mu_D = 0,4$;
- coeficiente de resistência ao rolamento partícula-partícula: $\mu_R = 0,1$;
- coeficiente de resistência ao rolamento partícula-superfície rígida: $\mu_R = 0,25$;
- taxas de amortecimento partícula-partícula e partícula-superfície rígida: $\xi_n = 0,8$ e $\xi_t = 0,1$;
- parâmetros das forças de adesão: $k_{ij}^{ad} = 10^3 \text{ N/m}$ e $\beta = 3/2$;
- densidade e viscosidade do ar: $\rho_F = 1,2 \text{ kg/m}^3$ e $\eta_F = 1,8 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$;
- velocidade de jateamento: $v_x = 1, 5, 10$ e 20 m/s ;

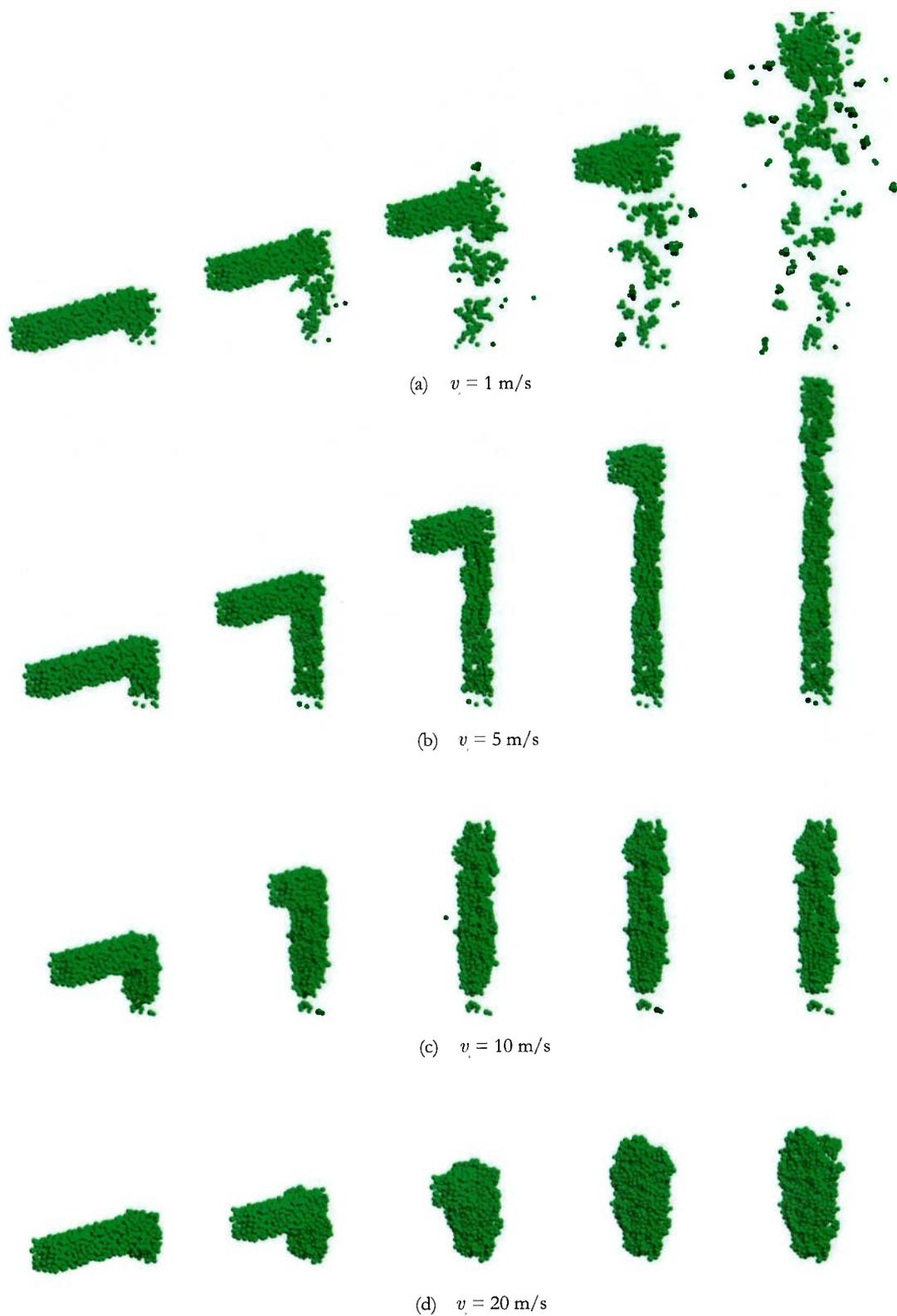


Figura 25. Jateamento de partículas sobre uma superfície. Retratos da configuração do sistema em diferentes instantes para cada uma das velocidades de jateamento consideradas. O último retrato se refere ao instante final. A superfície não está representada por simplicidade.

- aceleração da gravidade: $g = -9,81 \text{ m/s}^2$ (sentido $-y$);
- passo de integração: $\Delta t = 1 \times 10^{-4} \text{ s}$ (integração com o método explícito, i.e., $\phi = 0$);

- tempo de simulação: $t_F = 1,0$ s;
- subdivisão do domínio: 5 células nas direções x e z e 10 na direção y , com distância de Verlet $d_V = 1$ cm e atualização das listas a cada 0,001 s.

A Figura 25 apresenta retratos da simulação em diferentes instantes de tempo para cada uma das velocidades consideradas. Como pode ser observado, o jateamento com $v_x = 1$ m/s não consegue promover a aderência das partículas à superfície. Já para os demais casos, há aderência praticamente total, mas o aspecto da camada depositada é bastante diferente em cada situação. No caso de $v_x = 5$ m/s, a camada é bastante comprida e estreita, e tem espessura média pequena; no caso de $v_x = 10$ m/s, ela é menos comprida e um pouco mais larga do que o caso anterior, além de um pouco mais espessa; já no caso de $v_x = 20$ m/s, ela tem um aspecto bastante compacto, além de maior espessura. Cada uma dessas características pode ser mais ou menos desejada, a depender da aplicação em que se está interessado. A Tabela 6 apresenta os valores da espessura média e do comprimento da camada em cada caso.

Tabela 6. Jateamento de partículas sobre uma superfície. Espessura média e comprimento da camada depositada para diferentes valores da velocidade de jateamento.

Velocidade de jateamento	Espessura média e desvio padrão	Comprimento
1 m/s	--	--
5 m/s	0,9 cm (0,42 cm)	34 cm
10 m/s	1,4 cm (0,61 cm)	18 cm
20 m/s	1,6 cm (0,72 cm)	13 cm

5 Conclusões

Este trabalho apresentou um modelo computacional para o estudo de materiais granulares. O autor acredita que ele é relativamente simples, ao mesmo tempo em que mantém razoável consistência com os princípios da mecânica dos sólidos rígidos, que é, até certo ponto, a física que governa o movimento da unidade básica de um material granular – o grão. Os exemplos apresentados ilustram algumas de suas potencialidades.

Apesar de os modelos computacionais e experimentos numéricos terem contribuído positivamente para o avanço do conhecimento na área, é importante destacar as limitações inerentes a qualquer modelo de partículas utilizado na modelagem dos materiais granulares – inclusive o modelo apresentado neste trabalho. Um primeiro aspecto é que modelos de elementos discretos tipicamente fazem uso de muitos parâmetros para caracterizar as diversas forças que representam as interações entre as partículas. É verdade que boa parte desses parâmetros pode ser determinada com razoável base teórica, como é o caso dos parâmetros da parcela elástica da força normal de contato, que podem ser derivados de uma teoria de contato, como a teoria de Hertz (naturalmente que algumas hipóteses precisam ser minimamente satisfeitas para que tais modelos sejam válidos, como já discutido no Capítulo 2). É o caso também dos parâmetros das forças de campos externos e da força de arrasto, sob determinadas condições. Outros, contudo, não derivam de teorias já consolidadas ou de bases tão sólidas assim (ao menos ainda) e devem, invariavelmente, ser obtidos de modelos empíricos ou semiempíricos de caracterização das forças. Os parâmetros da força de adesão e das forças de atração e repulsão são exemplos disso. Soma-se a isso o fato de que eles devem ser determinados por meio de experimentos *ad hoc* em laboratório (muitos dos quais, aliás, não são tão simples de serem realizados como pode parecer), ou por calibração, confrontando-se ensaios numéricos com ensaios físicos, ajustando-se os seus valores até que se obtenha uma boa aderência de resultados.

Um segundo aspecto é que modelos de elementos discretos pressupõem formas geométricas bem definidas para as partículas, e isso é uma aproximação quase sempre grosseira da realidade. Admitir que essas formas são esféricas, como é feito neste trabalho, pode ser ainda mais grosseiro. Uma maneira de diminuir o efeito dessa aproximação é utilizar formas que reproduzam mais fielmente os grãos do material

que se deseja estudar. Essas podem ser desde formas ligeiramente mais elaboradas, como elipsoides ou poliedros, a formas extremamente mais complexas, construídas por exemplo a partir de técnicas de segmentação de imagem, utilizando imagens de grãos reais capturadas em laboratório. Naturalmente que a inicialização do modelo (i.e., a geração das partículas em uma configuração inicial) se torna muito mais trabalhosa, e a descrição cinemática do movimento das partículas (e também a detecção e resolução de seus contatos) adquire maior complexidade. Esses aspectos já estão sendo pouco a pouco incorporados ao MED, inclusive por parte do autor, e devem se tornar lugar comum junto aos meios técnico e científico ligados ao método no futuro não muito distante. Ainda assim, modelos que fazem uso de formas geométricas idealizadas e simples – principalmente esferas – são muito úteis, pois conseguem capturar com surpreendente fidelidade os fenômenos essenciais envolvidos no movimento de uma massa de grãos – além de serem extremamente convenientes por sua simplicidade formal e eficiência computacional, permitindo que sistemas constituídos por um número muito grande de partículas (dezenas ou centenas de milhares, ou até mesmo poucos milhões) sejam estudados (isso ainda não acontece com os outros modelos, mesmo aqueles que fazem uso de formas apenas ligeiramente mais complexas do que a de uma esfera, como os elipsoides). Os modelos que consideram partículas esféricas ainda são a ferramenta básica de investigação no estudo dos materiais granulares. Isso pode ser constatado ao se lançar um rápido olhar sobre a literatura da área.

Um outro aspecto, não menos relevante na visão do autor, é que modelos de elementos discretos devem ser utilizados para estudar o comportamento *coletivo* de um sistema de partículas, e não para prever deterministicamente o comportamento individual, no tempo e no espaço, de alguma partícula em específico – embora para isso faça uso de uma descrição determinística do movimento de cada uma delas. Isso implica que deve-se sempre extrair conclusões a partir de grandezas *médias* ou *homogeneizadas*, i.e., que representem o sistema como um todo ou determinado subgrupo dele, como por exemplo energia (em suas diversas formas), força média (em seus diversos tipos), temperatura média, posição e velocidade médias, etc., de um conjunto de partículas em um certo intervalo de tempo, e não a partir de grandezas de uma partícula individual em uma ocasião instantânea. Nesse sentido, a consideração de medidas de variabilidade e dispersão (ou momentos estatísticos) dessas grandezas, como o desvio padrão, a variância, etc., é importante e, mais ainda, é mesmo extremamente útil, pois dá suporte à identificação de *tendências* do sistema. Os últimos exemplos do capítulo anterior dão uma ideia de como isso pode ser feito. Eventualmente, podem-se fazer experimentos computacionais utilizando um número suficientemente grande de “amostras” de materiais granulares (entre aspas por serem amostras virtuais e não físicas), geradas aleatoriamente mas sob as mesmas condições, i.e., a partir dos mesmos dados de entrada, calculando-se os momentos estatísticos das respostas de interesse e os coeficientes de correlação entre os vários parâmetros do modelo. Com esses últimos, pode-se proceder, por exemplo, a uma quantificação simples das incertezas, de modo que o impacto da variabilidade de cada dado de entrada sobre os resultados pode ser objetivamente estimado – e os parâmetros mais relevantes de determinado problema, representado pelo experimento computacional, assim identificados. Remete-se a Campello e Zohdi [56] e [89] e Campello e Cassares [84] para exemplos de como isso pode ser feito. Com todas essas questões e

limitações em mente, não há dúvidas de que os modelos computacionais e experimentos numéricos muito têm a contribuir para o avanço do conhecimento sobre os materiais granulares.

Cumprido destacar que o modelo apresentado neste trabalho constitui a pedra fundamental sobre a qual vários desenvolvimentos subsequentes serão conduzidos por parte do autor – alguns dos quais já em curso. No momento atual, o autor tem envidado esforços em três direções principais: (1) a incorporação de efeitos térmicos no modelo, o que permitirá, por exemplo, a simulação computacional de processos de sinterização de objetos (a sinterização ocorre a partir do aquecimento e posterior fusão de pós e grãos metálicos ou poliméricos, e geralmente se dá por passagem de corrente elétrica ou exposição a *laser*) e de impressão tridimensional; (2) a incorporação do movimento do fluido junto à descrição do movimento das partículas, o que permitirá a simulação computacional, por exemplo, do transporte de partículas por correntes marítimas ou fluviais, do transporte de poeira e poluição atmosférica no ar, e de processos industriais e biológicos que envolvem o escoamento de grãos ou partículas imersos em fluidos, dentre vários outros; e (3) a incorporação de partículas não esféricas no modelo, com vistas a uma representação mais fiel de amostras de solos granulares e de agregados compactos secos, como o concreto. Naturalmente que esses desenvolvimentos só são possíveis de serem empreendidos no âmbito de um grupo de pesquisa, ainda que pequeno.

Por fim, cabe lembrar algo já dito no Capítulo 1: este trabalho deve ser entendido como um breve relato da experiência acumulada pelo autor ao adentrar o estudo dos materiais granulares. É o fechamento da etapa inicial de um trabalho maior, iniciada há pouco mais de três anos. O autor espera poder contribuir, ainda que timidamente, para a disseminação de parte do conhecimento corrente sobre o assunto junto ao Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica da EPSUSP, e fomentar a nucleação de uma nova linha de pesquisa no âmbito do departamento, qual seja, a da modelagem computacional de materiais granulares e suas diversas aplicações nas engenharias.

6 Referências

- [1] R. A. Bagnold, *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes*, London: Methuen, 1941.
- [2] R. L. Brown and J. C. Richards, *Principles of powder mechanics*, Oxford: Pergamon Press, 1970.
- [3] J. Duran, *Sands, Powders and Grains: An introduction to the physics of granular matter*, New York: Springer, 1997.
- [4] T. Pöschel and T. Schwager, *Computational Granular Dynamics*, Berlin: Springer, 2004.
- [5] T. Zohdi, *Dynamics of charged particulate systems: modeling, theory and computation*, New York: Springer, 2012.
- [6] P. A. Cundall, "A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems," in *Proc. Symp. Int. Soc. Rock Mech.*, Nancy, 1971.
- [7] P. A. Cundall, "A computer model for rock-mass behavior using interactive graphics for the input and output of geometrical data," Report MRD-2-74. University of Minnesota (for Missouri River Division, US Army Corps of Engineers), Minneapolis, 1974.
- [8] P. A. Cundall and O. D. L. Strack, "A discrete numerical model for granular assemblies," *Géotechnique*, vol. 1, pp. 47-65, 1979.
- [9] H. Deresiewicz, "Mechanics of granular material," *Advances in Applied Mechanics*, vol. 5, pp. 233-306, 1958.
- [10] P. Dantu, "Contribution à l'étude mécanique et géométrique des milieux pulvérulents," in *Proceedings of the 4th International Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering*, London, 1957.
- [11] T. Wakabayashi, "Photoelastic method for determination of stress in powdered mass," in *Proceedings of the 7th Japanese National Congress for Applied Mechanics*, Tokyo, 1957.
- [12] D. O. Potyondy and P. A. Cundall, "A bonded-particle model for rock," *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, vol. 41, p. 1329-1364, 2004.
- [13] A. A. Serrano and J. M. Rodriguez-Ortiz, "A contribution to the mechanics of heterogeneous

- granular media," in *Proc. Symp. Plasticity and Soil Mechanics*, Cambridge, 1973.
- [14] C. Thornton, "Applications of DEM to process engineering problems," *Engineering Computations*, vol. 9, pp. 289-297, 1992.
- [15] A. Munjiza, D. R. J. Owen and N. Bicanic, "A combined finite/discrete element method in transient dynamics of fracturing solids," *Engineering Computations*, vol. 12, pp. 145-174, 1995.
- [16] A. Munjiza, J. P. Latham e N. W. M. John, "3D dynamics of discrete element systems comprising irregular discrete elements—integration solution for finite rotations in 3D," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 56, n° 1, pp. 35-55, 2003.
- [17] H. G. Matuttis, S. Luding and H. J. Herrmann, "Discrete element simulations of dense packings and heaps made of spherical and non-spherical particles," *Powder Technology*, vol. 109, no. 1, pp. 278-292, 2000.
- [18] D. R. J. Owen and Y. T. Feng, "Parallelised finite/discrete element simulation of multi fracture solids and discrete systems," *Engineering Computations*, vol. 18, pp. 557-576, 2001.
- [19] J. Rojek, E. Oñate, C. Labra e H. Kargl, "Discrete element simulation of rock cutting," *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, vol. 48, n° 6, pp. 996-1010, 2011.
- [20] B. Avci and P. Wriggers, "A DEM-FEM Coupling Approach for the Direct Numerical Simulation of 3D Particulate Flows," *Journal of Applied Mechanics*, vol. 79, pp. 010901-1-7, 2012.
- [21] K.-W. Lim e J. E. Andrade, "Granular element method for three-dimensional discrete element calculations," *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, vol. 38, pp. 167-188, 2014.
- [22] T. Zohdi, "Additive particle deposition and selective laser processing - A computational manufacturing framework," *Computational Mechanics*, vol. 54, pp. 171-191, 2014.
- [23] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- [24] J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods*, Wiley, 1997.
- [25] N. Bicanic, "Discrete Element Methods," in *Encyclopedia of Computational Mechanics, Volume 1: Fundamentals*, vol. 1, E. Stein, R. d. Borst and T. J. Hughes, Eds., Chichester, John Wiley & Sons, 2004, pp. 1-33.
- [26] C. O'Sullivan, "Particle-based discrete element modeling: Geomechanics perspective," *International Journal of Geomechanics*, vol. 11, p. 449-464, 2011.
- [27] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang and A. B. Yu, "Discrete particle simulation of particulate systems: theoretical developments," *Chemical Engineering Science*, vol. 62, p. 3378-3392, 2007.
- [28] H. P. Zhu, Z. Y. Zhou, R. Y. Yang and A. B. Yu, "Discrete particle simulation of particulate systems: a review of major applications and findings," *Chemical Engineering Science*, vol. 63, p. 5728-5770, 2008.
- [29] J. Argyris, "An excursion into large rotations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 32, p. 85-155, 1982.

- [30] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Reading: Addison-Wesley, 1980.
- [31] H. Cheng and K. C. Gupta, "An historical note on finite rotations," *Journal of Applied Mechanics*, vol. 56, p. 139–145, 1989.
- [32] A. Ibrahimbegovic, "On the choice of finite rotation parameters," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 149, p. 49–71, 1997.
- [33] M. Ritto-Correa and D. Camotim, "On the differentiation of the Rodrigues formula and its significance for the vector-like parameterization of Reissner-Simo beam theory," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 55, no. 9, p. 1005–1032, 2002.
- [34] E. M. B. Campello, *Análise não linear de perfis metálicos conformados a frio*, Dissertação (Mestrado). São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2000.
- [35] P. M. Pimenta and E. M. B. Campello, "Geometrically nonlinear analysis of thin-walled space frames," in *Proceedings of the European Conference on Computational Mechanics*, Cracow, 2001.
- [36] P. M. Pimenta and E. M. B. Campello, "Finite rotation parameterizations for the nonlinear static and dynamic analysis of shells," in *Proceedings of the 5th International Conference on Computation of Shell and Spatial Structures*, Salzburg, 2005.
- [37] P. M. Pimenta, E. M. B. Campello and P. Wriggers, "An exact conserving algorithm for nonlinear dynamics with rotational DOFs and general hyperelasticity. Part 1: Rods," *Computational Mechanics*, vol. 42, p. 715–732, 2008.
- [38] E. M. B. Campello, P. M. Pimenta and P. Wriggers, "An exact conserving algorithm for nonlinear dynamics with rotational DOFs and general hyperelasticity. Part 2: shells," *Computational Mechanics*, vol. 48, p. 195–211, 2011.
- [39] M. Brasiel, *Uma formulação do método dos elementos discretos com descrição vetorial das rotações*, Tese (Doutorado). São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2016.
- [40] I. P. Omelyan, "On the numerical integration of motion for rigid polyatomics: The modified quaternion approach," *Computers in Physics*, vol. 12, n° 1, pp. 97-103, 1998.
- [41] S. M. Rubio-Largo, P. G. Lind, D. Maza and R. C. Hidalgo, "Granular gas of ellipsoids: analytical collision detection implemented on GPUs," *Computational Particle Mechanics*, vol. 2, no. 2, pp. 127-138, 2015.
- [42] M. Servin and D. Wang, "Adaptive model reduction for nonsmooth discrete element simulation," *Computational Particle Mechanics*, vol. 3, no. 1, pp. 107-121, 2016.
- [43] S. Biringen and C.-Y. Chow, *An introduction to computational fluid mechanics by example*, Hoboken: Wiley, 2011.
- [44] C. T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld and Y. Tsuji, *Multiphase flows with droplets and particles*, Boca Raton: CRC Press, 2012.
- [45] J. E. Lennard-Jones, "On the Determination of Molecular Fields," *Proceedings of the Royal Society London A*, vol. 106, no. 738, p. 463–477, 1924.
- [46] M. Frenklach and C. S. Carmer, "Molecular dynamics using combined quantum & empirical forces: application to surface reactions," *Advances in classical trajectory methods*, vol. 4, pp. 27-63, 1999.

- [47] J. N. Israelachvili, *Intermolecular and surface forces*, Amsterdam: Elsevier, 2011.
- [48] K. L. Johnson, K. Kendall and A. D. Roberts, "Surface energy and the contact of elastic solids," *Proceedings of the Royal Society London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 324, p. 301–313, 1971.
- [49] K. L. Johnson, *Contact Mechanics*, Cambridge: Cambridge University Press, 1985.
- [50] P. Wriggers, *Computational contact mechanics*, John-Wiley, 2002.
- [51] T. A. Laursen, *Computational Contact and Impact Mechanics*, Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2003.
- [52] T. Zohdi, "A direct particle-based computational framework for electrically-enhanced thermo-mechanical sintering of powdered materials," *Mathematics and Mechanics of Solids*, vol. 19, no. 1, pp. 93–113, 2014.
- [53] R. Ramirez, T. Poschel, N. B. Brilliantov and T. Schwager, "Coefficient of restitution of colliding viscoelastic sphere," *Physical Review E*, vol. 60, no. 4, pp. 4465–4472, 1999.
- [54] J. Shunying and H. S. Hayley, "Effect of Contact Force Models on Granular Flow Dynamics," *Journal of Engineering Mechanics (ASCE)*, vol. 132, pp. 1252–1259, 2006.
- [55] E. M. B. Campello, "Computational modeling and simulation of rupture of membranes and thin films," *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 37, pp. 1793–1809, 2015.
- [56] E. M. B. Campello and T. Zohdi, "A computational framework for simulation of the delivery of substances into cells," *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, vol. 30, p. 1132–1152, 2014.
- [57] S. Luding, "Micro-macro transition for anisotropic, frictional granular packings," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 41, p. 5821–5836, 2004.
- [58] R. D. Mindlin, "Compliance of elastic bodies in contact," *Journal of Applied Mechanics*, vol. 16, pp. 259–268, 1949.
- [59] E. M. B. Campello, "A description of rotations for DEM models of particle systems," *Computational Particle Mechanics*, vol. 2, p. 109–125, 2015.
- [60] A. G. Neto, P. M. Pimenta and P. Wriggers, "Contact between rolling beams and flat surfaces," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 97, p. 683–706, 2014.
- [61] K. Iwashita and M. Oda, "Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM," *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 124, p. 285–292, 1998.
- [62] M. J. Jiang, H.-S. Yu and D. Harris, "A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance," *Computers and Geotechnics*, vol. 32, no. 5, pp. 340–357, 2005.
- [63] T. Zohdi, *Introduction to the modeling and simulation of particulate flows*, Berkeley: SIAM (Society for Industrial and Applied Mathematics), 2007.
- [64] T. Zohdi, "On the dynamics of charged electromagnetic particulate jets," *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 17, no. 2, p. 109–135, 2010.

- [65] T. Zohdi, "An adaptive-recursive staggering strategy for simulating multifield coupled processes in microheterogeneous solids," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 53, pp. 1511-1532, 2002.
- [66] K. Han, Y. T. Feng and D. R. J. Owen, "Performance comparisonsof tree-based and cell-based contact detection algorithms," *Engineering Computations*, vol. 24, no. 2, p. 165–181, 2007.
- [67] M. Santasusana, J. Irazábal, E. Oñate and J. M. Carbonell, "The Double Hierarchy Method. A parallel 3D contact method for the interaction of spherical particles with rigid FE boundaries using the DEM," *Computational Particle Mechanics*, vol. (online first), pp. 1-22, 2016.
- [68] A. Coll, R. Ribó, M. Pasenau, E. Escolano, J. Perez, A. Melendo, A. Monros and J. Gárate, *GiD v.13 Reference Manual*, Barcelona: CIMNE, 2016.
- [69] J. Ahrens, B. Geveci and C. Law, *ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization*, Visualization Handbook, Elsevier, 2005.
- [70] B. Widom, "Random sequential addition of hard spheres to a volume," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 44, p. 3888, 1966.
- [71] D. S. Bolintineanu, G. S. Grest, J. B. Lechman, F. Pierce, S. J. Plimpton and P. R. Schunk, "Particle dynamics modeling methods for colloid suspensions," *Computational Particle Mechanics*, vol. 1, no. 3, p. 321–356, 2014.
- [72] Y. Tan, D. Yang and Y. Sheng, "Discrete element method (DEM) modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline SiC," *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 29, no. 6, p. 1029–1037, 2009.
- [73] M. Kroupa, M. Klejch, M. Vonka and J. Kosek, "Discrete element modeling (DEM) of agglomeration of polymer particles," *Procedia Engineering*, vol. 42, p. 58–69, 2012.
- [74] K. Han, Y. T. Feng and D. R. J. Owen, "Sphere packing with geometric based compression algorithm," *Powder Technology*, vol. 155, pp. 33-41, 2005.
- [75] W. X. Xu and H. S. Chen, "Numerical investigation of effect of particle shape and particle size distribution on fresh cement paste microstructure via random sequential packing of dodecahedral cement particles," *Computers and Structures*, vol. 114–115, p. 35–45, 2013.
- [76] L. Cui and C. O'Sullivan, "Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations," *Granular Matter*, vol. 5, pp. 135-145, 2003.
- [77] A. Donev, *Jammed packings of hard particles*, PhD Dissertation, Princeton University, 2006.
- [78] Y. T. Feng, K. Han and D. R. J. Owen, "Filling domains with disks: an advancing front approach," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 56, pp. 699-713, 2003.
- [79] M. J. Jiang, J. M. Konrad and S. Leroueil, "An efficient technique for generating homogenous specimens for DEM studies," *Computers and Geotechnics*, vol. 30, p. 579–597, 2003.
- [80] S. Torquato, T. M. Truskett and P. G. Debenedetti, "Is random close packing of spheres well defined?," *Physical Review Letters*, vol. 84, no. 10, p. 2064–2067, 2000.
- [81] A. R. Kansal, S. Torquato and S. H. Stillinger, "Diversity of order and densities in jammed hard-particle packings," *Physical Review E*, vol. 66, p. 041109, 2002.

- [82] G. Zhang and S. Torquato, "Precise algorithm to generate random sequential addition of hard hyperspheres at saturation," *Physical Review E*, vol. 88, p. 053312, 2013.
- [83] C. Thornton, G. Gong and A. H. C. Chan, "DEM Simulations of Undrained Triaxial Behavior of Granular Material," *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 138, pp. 560-566, 2012.
- [84] E. M. B. Campello and K. R. Cassares, "Rapid generation of particle packs at high packing ratios for DEM simulations of granular compacts," *Latin American Journal of Solids and Structures*, vol. 13, pp. 23-50, 2016.
- [85] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz and R. H. Swendsen, "Why the Brazil nuts are on top: size segregation of particulate matter by shaking," *Physical Review Letters*, vol. 58, no. 10, pp. 1038-1040, 1987.
- [86] R. Jullien and P. Meakin, "A mechanism for particle size segregation in three dimensions," *Nature*, vol. 344, pp. 425-427, 1990.
- [87] Z. Yan, S. K. Wilkinson, E. H. Stitt and M. Marigo, "Discrete Element Modelling (DEM) input parameters: understanding their impact on model predictions using statistical analysis," *Computational Particle Mechanics*, vol. 2, p. 283-299, 2015.
- [88] T. Zohdi, "Numerical simulation of the impact and deposition of charged particulate droplets," *Journal of Computational Physics*, vol. 233, p. 509-526, 2013.
- [89] E. M. B. Campello, *Computational modeling of discrete materials*, Berkeley: FAPESP Week California, 2015.
- [90] E. M. B. Campello and T. Zohdi, "Design evaluation of a particle bombardment system used to deliver substances into cells," *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, vol. 98, no. 2, pp. 221-245, 2014.
- [91] O. Rodrigues, "Des lois géométriques qui régissent les déplacements d'un système solid dans l'espace, et de la variation des coordonnées provenant de ces déplacements consideres indépendamment des causes qui peuvent les produire," *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, vol. 5, p. 380-440, 1840.
- [92] P. M. Pimenta, *Fundamentos da Mecânica dos Sólidos e das Estruturas*, Apostila. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2008.
- [93] C. Wellmann and P. Wriggers, "A two-scale model of granular materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vols. 205-208, p. 46-58, 2012.
- [94] C. T. David, R. Garcia-Rojo, H. J. Herrmann and S. Luding, "Powder flow testing with 2D and 3D biaxial and triaxial simulations," *Particles and Particle Systems Characterization*, vol. 24, p. 29-33, 2007.
- [95] B. D. Lubachevsky and F. H. Stillinger, "Geometric properties of random disk packings," *Journal of Statistical Physics*, vol. 60, pp. 561-583, 1990.