



DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIA PARA O USO DE PARTÍCULAS VISCOELÁSTICAS NO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Luiz Felipe de Oliveira Campos

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Luiz Fernando Lopes Rodrigues
Silva

Rio de Janeiro
Junho de 2016

DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIA PARA O USO DE PARTÍCULAS
VISCOELÁSTICAS NO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Luiz Felipe de Oliveira Campos

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Charles Rubber de Almeida Abreu, D.Sc.

Prof. Marcos Antônio de Souza Barrozo, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
JUNHO DE 2016

Campos, Luiz Felipe de Oliveira

Desenvolvimento de Metodologia para o Uso de Partículas Viscoelásticas no Método dos Elementos Discretos /Luiz Felipe de Oliveira Campos. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2016.

XIV, 122 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2016.

Referências Bibliográficas: p. 94 – 102.

1. Método dos Elementos Discretos. 2. Simulação.
3. Viscoelástico. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*Tenho um sonho em minhas
mãos, amanhã será um novo dia.
Certamente eu vou ser mais
feliz...*

Agradecimentos

Preciso começar agradecendo a Deus por ter me dado paciência, pois se me desse força...

Falando sério, agradeço à pessoa mais importante da minha vida: Minha mãe, Tereza Cristina de Oliveira. Obrigado pelo amor, pelo apoio, compreensão e por todo o seu esforço para sempre me tornar uma pessoa melhor. Agradeço à minha família, em especial meu padrasto Wilson do Couto e à minha querida irmã Anna Carolina.

Agradeço imensamente ao Maycon Torres, pelos muitos anos de intensa convivência, companheirismo e lealdade. Sua paciência e compreensão foram fundamentais para que eu superasse esse penoso estágio da vida.

Agradeço à minha tia e segunda mãe Nora por todo o amor e carinho dado a mim, principalmente nos meus primeiros anos de vida. Serei eternamente grato. Muito obrigado!

Dedico um agradecimento especial à minha avó Denise, a todos os familiares que participaram de alguma forma desse processo e aos meus amados afilhados Ana Clara (Tatala) e Benício (Ben).

Um parágrafo especial para minha inesquecível Sasha (Bobó), responsável por me permitir sentir um dos amores sinceros e puros e por me inspirar com sua lealdade e sua bravura até nossos últimos dias juntos. Obrigado minha pretinha! Agradeço à recém-chegada Zorynha e à Pepê, doidinha que tanto amo.

Agradeço a todos os meus amigos por me mostrarem o quanto "viver não cabe no Lattes", em especial Thainá, Martina, Fred e Débora, por me aturarem por todos esses anos.

Agradeço também aos companheiros do LTFD (Thaís, Lívia, Fábio, Samel, Jovani, Amanda, Tati, Mariana(s), Gabriel, Felipe, Yuri e Antônio) e a todos os funcionários que de alguma forma contribuíram para o desenvolvimento desse trabalho.

Agradeço finalmente àqueles que participaram da realização desta tese junto comigo e às instituições que o tornaram possível: Professores Paulo Lage e Luiz Fernando Silva, Programa de Engenharia Química da COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro e ao Conselho Nacional do Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

A todos, o meu muito obrigado!

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIA PARA O USO DE PARTÍCULAS VISCOELÁSTICAS NO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Luiz Felipe de Oliveira Campos

Junho/2016

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Programa: Engenharia Química

O método dos elementos discretos é uma abordagem muito utilizada para simulações envolvendo materiais granulares. Tal método permite que forças de diferentes naturezas sejam contabilizadas durante a simulação. A presente tese tem seu escopo voltado para o estudo de forças de contato aplicáveis à corpos compostos de materiais viscoelásticos. Um modelo teórico baseado em equações constitutivas foi publicado recentemente, possuindo como parâmetros o primeiro e o segundo coeficientes de viscosidade. Como ainda não há um método experimental consistente desenvolvido para a determinação dessas propriedades, é proposta nesse trabalho uma abordagem numérica como alternativa. A metodologia proposta é baseada na utilização de dados experimentais provenientes de experimentos simples de colisão para a estimação dos parâmetros. O caso de estudo selecionado foi a colisão entre uma esfera de aço e um plano inclinável de mesmo material. Simulações utilizando modelos viscoelásticos clássico linear e não-linear foram realizadas e seus resultados comparados com aqueles obtidos com o novo modelo mostrando que o mesmo possui um promissor potencial de utilização. A aplicação da metodologia desenvolvida mostrou que tal modelo pode ser simplificado, reduzindo o número de parâmetros a apenas um. Essa simplificação levou a uma redução considerável na incerteza de estimação do parâmetro, melhorando as predições do modelo e tornando essa abordagem uma importante opção no uso do método dos elementos discretos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

DEVELOPMENT OF METHODOLOGY FOR USING VISCOELASTIC
PARTICLES IN THE DISCRETE ELEMENT METHOD

Luiz Felipe de Oliveira Campos

June/2016

Advisors: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Program: Chemical Engineering

The discrete element method is a widely used approach to simulate granular assemblies. It allows forces from different sources to be accounted for in the simulation. This work is focused on contact force models for viscoelastic materials. A theoretical model based on constitutive equations was recently published in the literature, having viscosity coefficients as parameters. As none consistent method for measuring such properties for any solid is available, a numerical approach is proposed in this work as an alternative. It is based on using data from simple collisional experiments to estimate these parameters. The studied case was a collision between a steel spherical particle and a plane of same material. Simulations using linear and nonlinear commonly used models were carried out and their results were compared with those from the theoretical model, showing the promising potential of using it. Despite of this, the proposed method showed that the stress constitutive equation may be simplified, for the case analyzed, by reducing the number of parameters to only one. This leads to considerably drop in the parameter uncertainty, improving the model predictions and making it an important option in the application of discrete element method.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xiv
1 Introdução	1
1.1 Motivação	2
1.2 Escopo	2
1.3 Objetivos	2
1.4 Estrutura do Texto	3
2 Revisão Bibliográfica	4
2.1 Dinâmica da Partícula	4
2.2 Interação entre Partículas	7
2.2.1 Mecânica do contato	9
2.2.2 Modelos de interação	13
2.2.2.1 Modelo de esfera rígida	13
2.2.2.2 Modelo de esfera macia: O método dos elementos discretos	17
2.3 Modelos de Força de Contato	23
2.3.1 Modelo elástico para a força normal: A teoria de HERTZ [1]	25
2.3.2 Modelos friccionais-elásticos para a força tangencial	27
2.3.3 Modelos Viscoelásticos	31
2.4 <i>Softwares</i> de Simulação DEM	37
2.5 Trabalhos Experimentais	38
3 Metodologia	41
3.1 Análise Comparativa de Modelos	41
3.1.1 Dados Experimentais	45
3.1.2 Implementação computacional	47
3.1.3 Simulações	49
3.2 Análise de Sensibilidade	52
3.3 Estimação de Parâmetros	53

3.3.1	Avaliação dos parâmetros obtidos	56
4	Resultados e Discussão	59
4.1	Análise Comparativa de Modelos	59
4.1.1	Verificação do código	59
4.1.2	Simulações	63
4.2	Análise de Sensibilidade	67
4.3	Estimação dos Parâmetros	71
5	Conclusões e Sugestões	88
5.1	Síntese e Conclusões	88
5.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	92
	Referências Bibliográficas	94
A	Modelos Viscoelásticos	103
A.1	Modelo de CUNDALL e STRACK [2]	104
A.2	Modelo de TSUJI <i>et al.</i> [3]	105
A.3	Modelo de ZHENG <i>et al.</i> [4]	105
B	Parâmetros dos Modelos Viscoelásticos	107
B.1	Modelo de CUNDALL e STRACK [2]	107
B.2	Modelo de TSUJI <i>et al.</i> [3]	108
B.3	Modelo de ZHENG <i>et al.</i> [4]	108
C	Códigos Implementados no LIGGGHTS®	111
C.1	Modelo de ZHENG <i>et al.</i> [4]: Componente normal	111
C.2	Modelo de ZHENG <i>et al.</i> [4]: Componente tangencial	116

Lista de Figuras

2.1	Representação do movimento de uma partícula esférica no espaço tridimensional.	5
2.2	Contato entre duas partículas esféricas i e j	8
2.3	Visualização aumentada da região do contato entre duas partículas esféricas i e j , similar ao mostrado na Figura 2.2. A direção \tilde{z} é escolhida de forma a coincidir com aquela dada pelo vetor unitário normal e as direções \tilde{x} e \tilde{y} , sobre o plano tangencial, são escolhidas arbitrariamente.	9
2.4	Representação de um instante qualquer durante o contato entre duas partículas esféricas. Nesta ilustração, $\mathbf{F}_{j/i}$ e $\mathbf{F}_{i/j}$ representam as forças que a partícula j exerce sobre a partícula i e a reação que a partícula i exerce sobre a partícula j , respectivamente.	10
2.5	Contato oblíquo entre duas partículas esféricas segundo o modelo de esfera macia. Analisando-se a dinâmica da partícula à esquerda na figura, a componente normal (δ_n) do vetor deformação ($\boldsymbol{\delta}$) está representada como a magnitude da interpenetração entre as partículas, sobre a linha de união dos centros, para facilitar a visualização do conceito.	19
2.6	Ilustração da analogia de CUNDALL e STRACK [2] com um sistema massa-mola-pistão, aplicada ao contato entre duas partículas.	22
2.7	Gráfico da relação entre tensão e deformação, sobre um corpo com comportamento elástico.	24
2.8	Material isotrópico e elástico sob a ação de uma tensão uniaxial normal. As deformações laterais e axiais decorrentes da ação dessa tensão estão representadas por ζ_x , ζ_y e ζ_z	25
2.9	Ilustração de um contato oblíquo entre duas partículas esféricas para um instante onde ocorrem os regimes de (a) aderência e (b) microdeslizamento.	28

2.10	Ilustração do desenvolvimento da região anelar onde ocorrem microdeslizamentos. Na ilustração (a), toda a região de contato encontra-se aderida enquanto que na ilustração (b), parte dos pontos de contato violam a lei de fricção de Coulomb e formam uma região de microdeslizamento dada pela área anelar hachurada.	32
3.1	Representação da colisão 2D de uma partícula esférica contra um plano.	43
3.2	Esquematização da integração do simulador, LIGGGHTS, com o otimizador, NLOpt.	56
4.1	Verificação das implementações dos modelos, representados pelos símbolos pretos em conjunto com as linhas contínuas. Os símbolos brancos representam as soluções obtidas por KRUGGEL-EMDEN <i>et al.</i> [5] para os modelos $M1$ e $M2$. As variáveis ψ_1 e ψ_2 foram definidas no Capítulo 2 e são dadas pelas equações 2.118 e 2.119, respectivamente.	60
4.2	Análise dos resultados para a força normal gerados pelo modelo $M3$ em função dos valores dos parâmetros. O valor-base supostamente utilizado por ZHENG <i>et al.</i> [4] para a razão entre os parâmetros é nulo.	62
4.3	Análise da resposta do modelo $M3$ para o coeficiente de restituição normal em função de dois valores da razão entre os parâmetros. A figura mostra a comparação entre o resultado obtido utilizando-se o valor-base nulo e o valor que melhor adequou a resposta da força normal.	62
4.4	Respostas dos modelos para o coeficiente de restituição normal. . . .	63
4.5	Respostas dos modelos para o coeficiente de restituição Tangencial. . .	64
4.6	Respostas dos modelos para a velocidade angular.	65
4.7	Histograma dos índices de desvio médio das respostas dos modelos em relação às regiões de confiança dos dados experimentais.	65
4.8	Histograma dos índices de desvio máximo das respostas dos modelos em relação às regiões de confiança dos dados experimentais.	66
4.9	Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_1 para o coeficiente de restituição normal	67
4.10	Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_1 para o coeficiente de restituição tangencial.	68
4.11	Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_1 para a velocidade angular.	68
4.12	Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_2 para o coeficiente de restituição normal	70
4.13	Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_2 para o coeficiente de restituição tangencial.	70

4.14	Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_2 para a velocidade angular.	71
4.15	Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição normal, utilizando o modelo $M3$, para os valores ótimos dos parâmetros ($M3^*$), em relação aqueles obtidos usando os valores-base ($M3^b$) para os mesmos parâmetros.	74
4.16	Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição tangencial, utilizando o modelo $M3$, para os valores ótimos dos parâmetros ($M3^*$) em relação aqueles obtidos usando os valores-base ($M3^b$) para os mesmos parâmetros.	74
4.17	Comparação dos resultados obtidos para a velocidade angular, utilizando o modelo $M3$, para os valores ótimos dos parâmetros ($M3^*$) em relação aqueles obtidos usando os valores-base ($M3^b$) para os mesmos parâmetros.	75
4.18	Histogramas dos índices de desvios relativos médios para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base.	76
4.19	Histogramas dos índices de desvios relativos máximos para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base.	76
4.20	Resultados das simulações usando o modelo $M3$ para o coeficiente de restituição normal, desconsiderados os efeitos de η_2 , a partir da utilização do valor-base de η_1 e do valor ótimo obtido após a nova estimação. Os resultados obtidos a partir do uso do novo conjunto de parâmetros ótimos estão representados por ($M3^{**}$)	79
4.21	Resultados das simulações usando o modelo $M3$ para o coeficiente de restituição tangencial, desconsiderados os efeitos de η_2 , a partir da utilização do valor-base de η_1 e do valor ótimo obtido após a nova estimação. Os resultados obtidos a partir do uso do novo conjunto de parâmetros ótimos estão representados por ($M3^{**}$)	80
4.22	Resultados das simulações usando o modelo $M3$ para a velocidade angular, desconsiderados os efeitos de η_2 , a partir da utilização do valor-base de η_1 e do valor ótimo obtido após a nova estimação. Os resultados obtidos a partir do uso do novo conjunto de parâmetros ótimos estão representados por ($M3^{**}$)	81
4.23	Histogramas dos índices de desvios médios para todas as variáveis, obtidos a partir dos resultados das simulações ao se utilizar o valor de η_1 desconsiderando-se os efeitos de η_2	81
4.24	Histogramas dos índices de desvios máximos para todas as variáveis, obtidos a partir dos resultados das simulações ao se utilizar o valor de η_1 desconsiderando-se os efeitos de η_2	82

4.25	Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição normal na simulação dos dados experimentais utilizando o modelo $M3$ simplificado com os novos parâmetros ótimos ($M3^{***}$), obtidos pela minimização da função objetivo sem contabilizar os dados de velocidade angular.	84
4.26	Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição tangencial na simulação dos dados experimentais utilizando o modelo $M3$ simplificado com os novos parâmetros ótimos ($M3^{***}$), obtidos pela minimização da função objetivo sem contabilizar os dados de velocidade angular.	85
4.27	Comparação dos resultados obtidos para a velocidade angular na simulação dos dados experimentais utilizando o modelo $M3$ simplificado com os novos parâmetros ótimos ($M3^{***}$), obtidos pela minimização da função objetivo sem contabilizar os dados de velocidade angular.	85
4.28	Histogramas dos índices de desvios relativos médios para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base, desconsiderando-se os efeitos de η_2 no modelo e os dados de velocidade angular para o cálculo da função objetivo.	86
4.29	Histogramas dos índices de desvios relativos máximos para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base, desconsiderando-se os efeitos de η_2 no modelo e os dados de velocidade angular para o cálculo da função objetivo.	87
B.1	Relação entre o coeficiente α e o coeficiente de restituição normal proposta por TSUJI <i>et al.</i> [3]. Figura reproduzida conforme publicada em TSUJI <i>et al.</i> [3] para fins ilustrativos.	110

Lista de Tabelas

3.1	Propriedades mecânicas do material utilizado no experimento de DONG e MOYS [6] [5, 6].	46
3.2	Propriedades mecânicas dos materiais envolvidos no experimento de FOERSTER <i>et al.</i> [7] considerado.	47
3.3	Valores dos parâmetros para os modelos $M1$, utilizados nas simulações dos experimentos de FOERSTER <i>et al.</i> [7].	51
3.4	Valores dos parâmetros para os modelos $M2$, utilizados nas simulações dos experimentos de FOERSTER <i>et al.</i> [7].	51
3.5	Valores dos parâmetros para os modelos $M1$, utilizados nas simulações dos experimentos de DONG e MOYS [6].	51
3.6	Valores dos parâmetros para os modelos $M2$, utilizados nas simulações dos experimentos de DONG e MOYS [6].	52
3.7	Valores dos parâmetros para o modelo $M3$, utilizados nas simulações.	52
3.8	Valores de parâmetros utilizados na análise de sensibilidade do modelo $M3$	53
4.1	Valores ótimos globais para variáveis x_1 e x_2 , além da função objetivo, obtidos pelo procedimento de estimação de parâmetros.	72
4.2	Valores ótimos locais para variáveis x_1 e x_2 , além da função objetivo, obtidos pelo refino das soluções globais.	72
4.3	Valores ótimos globais para a variável x_1 , além da função objetivo, obtidos pelo procedimento de estimação de parâmetros ao desconsiderar-se os efeitos de η_2	78
4.4	Análise dos desvios dos dados experimentais em relação às respostas do modelo para verificação das hipóteses do modelo perfeito e do experimento bem feito.	83

Capítulo 1

Introdução

O Método dos Elementos Discretos (DEM, do inglês *Discrete Element Method*) foi desenvolvido com o objetivo de prever o comportamento dinâmico de um sistema granular, o qual pode ser definido, de forma simplificada, como sendo aquele formado por um conjunto de partículas sólidas. Materiais granulares, bem como seu escoamento, são objetos de intenso estudo devido às suas características que fazem com que seus comportamentos variem entre o que se é esperado para um sólido e para um fluido. Ainda, suas naturezas macroscópica e descontínua tornam complexa a aplicação de abordagens que se propõem a desenvolver equações constitutivas para os mesmos [8–12]. Apesar disso, esse tipo de sistema surge com frequência em projetos de engenharia, em especial na engenharia química: misturadores, centrifugadores, moinhos de bola e silos são apenas alguns poucos exemplos [13–34]. O método dos elementos discretos também tem sido muito utilizado em conjunto com outros métodos, em especial o método dos elementos finitos e o método dos volumes finitos. Tal combinação permite uma ainda maior gama de aplicações em engenharia, como por exemplo ciclones, elutriadores e reatores de leito móvel [35–46].

A metodologia DEM baseia-se na modelagem do contato entre os corpos particulares que compõem o sistema em estudo, muitas das vezes recorrendo a analogias com aparatos mecânicos para explicar os efeitos observados durante a interação. Tal fato faz com que parâmetros não-físicos surjam nas formulações, de forma que seus valores precisam, necessariamente, ser estimados para cada aplicação que se deseja simular [5, 47]. Esse tipo de modelo é classificado no presente texto como abstrato. Outra abordagem desse mesmo problema propõe o uso de equações constitutivas para caracterizar o comportamento físico das tensões aplicadas de acordo com o material de cada uma das partículas e, através da integração ao longo da área de contato criada pela interação, chegar a um modelo de força. Tais modelos têm como parâmetros as propriedades materiais das partículas [4]. Apesar disso, muitas das propriedades necessárias não possuem uma técnica de mensuração desenvolvida, o que dificulta sua obtenção e, conseqüentemente, a utilização das equações desen-

volvidas. Modelos originados dessa forma serão classificados nesse trabalho como fenomenológicos.

1.1 Motivação

Os tipos de modelos classificados nesse trabalho como fenomenológicos possuem um grande potencial de aplicação dentro do contexto do método dos elementos discretos. Esse potencial é justificado pelo fato de que os parâmetros de tais modelos são propriedades dos materiais envolvidos no fenômeno em questão. Dessa maneira, para um modelo fenomenológico uma vez determinados seus parâmetros para um determinado sistema, os mesmos podem ser utilizados independentemente da aplicação na qual tal sistema esteja presente. Porém, até o momento não há um método consistente para a obtenção de tais parâmetros, o que faz com que o desenvolvimento desse ramo do conhecimento adquira uma relativa importância. Nesse contexto, a grande aplicabilidade do método dos elementos discretos somada à possibilidade de tornar seu uso mais sistemático do ponto de vista da modelagem das forças de contato, caracterizam a motivação deste trabalho.

1.2 Escopo

As equações resultantes da aplicação do tratamento fenomenológico ao problema de modelagem das forças de contato no método dos elementos discretos bem como os parâmetros a serem determinados, dependem do comportamento do material do qual as partículas são constituídas [48–53]. Viscoelástico e plástico são apenas dois exemplos da classificação existente e também os mais frequentemente estudados [4, 5, 47]. Em ambos os casos, a elasticidade é tratada como uma idealidade a qual precisa ser complementada por um termo responsável pela dissipação da energia. Enquanto que no primeiro caso tal fenômeno ocorre devido a efeitos viscosos, no segundo a energia é perdida pelo sistema devido às deformações permanentes as quais as partículas são submetidas. Devido ao fato dos fenômenos dissipadores serem de natureza tão distintas, o escopo desse trabalho tratará apenas de um deles, a saber, os materiais viscoelásticos.

1.3 Objetivos

Essa tese tem como principal objetivo, o desenvolvimento de uma metodologia que seja capaz de permitir a utilização dos modelos fenomenológicos em aplicações utilizando DEM. Nesse sentido, é preciso primeiro certificar-se da validade dos modelos, bem como de suas dependências em relação aos parâmetros. De posse dessas

informações, pode-se apresentar então uma primeira forma de obtenção dos parâmetros a partir da solução de um problema de estimação. Nesse contexto, são propostos os seguintes objetivos específicos:

- análise comparativa de modelos de contato;
- Análise de sensibilidade de um modelo viscoelástico;
- Estimação dos parâmetros do modelo viscoelástico;
- Análise dos erros de estimação dos parâmetros;
- Proposta de metodologia

1.4 Estrutura do Texto

Essa tese foi dividida em cinco capítulos apresentados a seguir.

- Introdução: o presente capítulo, o qual apresenta uma breve contextualização sobre assunto da pesquisa.
- Revisão bibliográfica: onde serão apresentados os trabalhos sobre o presente tema que já foram desenvolvidos e que serviram como base para essa tese.
- Metodologia: que apresenta a proposta de tese, bem como a estratégia adotada para o cumprimento dos objetivos definidos.
- Resultados e Discussão: que contém a apresentação dos resultados obtidos bem como sua discussão de forma aprofundada.
- Conclusão: que constitui o encerramento do trabalho, apresentando suas principais conclusões, contribuições e sugestões para trabalhos futuros.

O presente texto está estruturado de forma que serão apresentados, no início de cada capítulo, uma breve introdução, a qual servirá tanto como uma revisão dos capítulos anteriores, quanto uma contextualização. Espera-se, dessa forma, que a leitura seja a mais fluente e agradável possível.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo são lembrados alguns fundamentos de dinâmica clássica de partículas assim como são introduzidos, brevemente, alguns aspectos das teorias da mecânica de contato da elasticidade, fundamentais para a compreensão do texto. Os métodos de solução de problemas dinâmicos envolvendo sistemas particulados também são revisados com ênfase na apresentação do método dos elementos discretos, objeto de estudo do presente trabalho. Ressalta-se que apenas partículas esféricas são tratadas no presente trabalho, portanto, tanto nas seções quanto nos capítulos que seguem, deve-se assumir que todas as partículas são esféricas, salvo quando for explicitado o contrário. Uma breve discussão sobre os diferentes tipos de *softwares* disponíveis para simulação de problemas dessa natureza é feita e, por fim, alguns trabalhos experimentais encontrados na literatura são revisados e discutidos.

2.1 Dinâmica da Partícula

O movimento de uma partícula esférica, sólida e de densidade uniforme pode ser descrito em termos do seu centro de massa conforme as equações para o movimento de um corpo rígido [54], as quais são apresentadas com base na Figura 2.1.

Dessa forma, para o movimento de translação pura da partícula, define-se a velocidade linear do seu centro de massa ($\mathbf{v}_{cm,i}$) a partir da taxa de variação temporal do vetor posição do mesmo ($\mathbf{r}_{cm,i}$) e, de forma análoga, para o movimento de rotação pura de um corpo rígido, assumido para a partícula, define-se o vetor velocidade angular ($\boldsymbol{\omega}_i$) a partir da taxa de variação temporal do vetor ângular azimutal $\boldsymbol{\theta}_i$, conforme as Equações 2.1 e 2.2. A direção do vetor velocidade angular é o eixo de rotação do corpo cujo sentido é dado pela regra da mão direita.

$$\mathbf{v}_{cm,i} \doteq \frac{d\mathbf{r}_{cm,i}}{dt} \tag{2.1}$$

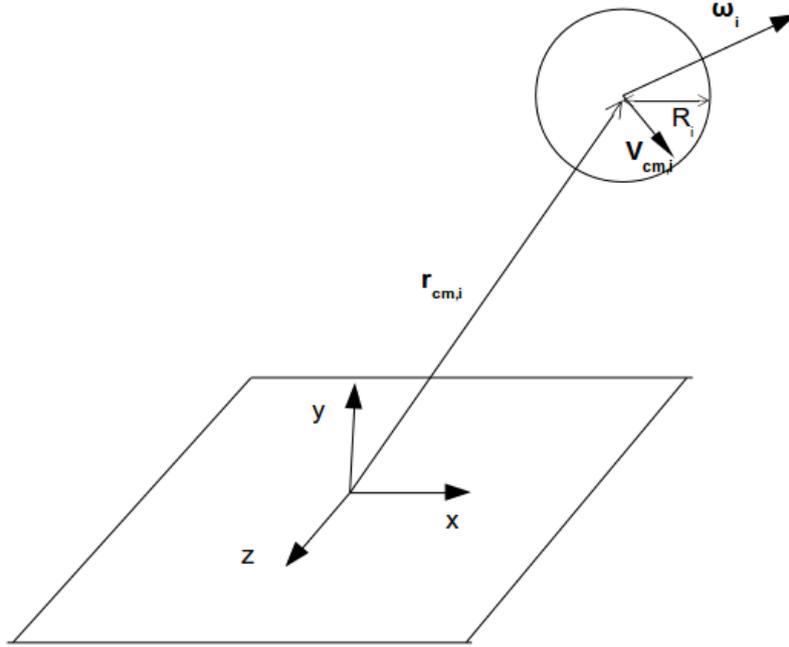


Figura 2.1: Representação do movimento de uma partícula esférica no espaço tridimensional.

$$\boldsymbol{\omega}_i \doteq \frac{d\boldsymbol{\theta}_i}{dt} \quad (2.2)$$

Um ponto qualquer em um corpo rígido possui uma velocidade de translação igual a do centro de massa do corpo e uma velocidade de rotação, em torno do centro de massa, definida pelo produto vetorial entre o vetor velocidade angular do corpo e o vetor posição do ponto em relação ao centro de massa do corpo (\mathbf{d}_P), de maneira que a velocidade total desse ponto será dada pela soma das duas contribuições. Dessa forma, pode-se definir a velocidade de um ponto qualquer (P) na partícula i conforme a Equação 2.3.

$$\mathbf{v}_{P/i} = \mathbf{v}_{cm,i} + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{d}_P \quad (2.3)$$

Se nenhuma força agir sobre uma partícula i , a primeira lei de Newton, ou Lei da Inércia, afirma que tal partícula manterá seu estado de movimento, de forma que as suas velocidades linear e angular permanecerão constantes ao longo do tempo.

Definindo-se a quantidade de movimento linear da partícula i como o vetor resultante do produto de suas massa e velocidade linear, conclui-se que a ação de uma força resultante é necessária para que a quantidade de movimento linear daquela partícula e, conseqüentemente, sua velocidade linear sejam alteradas. Tal constatação está formulada como a lei de conservação da quantidade de movimento linear, ou segunda lei de Newton, conforme as Equações 2.4 e 2.5, onde m_i representa a massa

da partícula i , \mathbf{P}_i sua quantidade de movimento linear para densidade constante, e \mathbf{F}_i a força resultante atuando sobre a mesma.

$$\mathbf{P}_i \doteq m_i \mathbf{v}_{cm,i} \quad (2.4)$$

$$\frac{d\mathbf{P}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \quad (2.5)$$

Para a análise das variações relativas ao movimento de rotação, é necessário definir os conceitos de momento de inércia (\mathbf{I}) e quantidade de movimento angular (\mathbf{L}). O primeiro, de forma análoga à massa para o movimento de translação, é uma medida da resistência do corpo a alterações em seu estado de movimento de rotação e é definido pela integral representada na Equação 2.6, onde \mathbf{d}_P representa a distância de um ponto qualquer do corpo ao centro de massa do mesmo, ρ é a densidade do corpo, dV é o volume de um elemento infinitesimal do corpo e \mathbf{E} é o tensor identidade. Para o caso particular de um corpo rígido de densidade uniforme, o tensor momento de inércia reduz-se a um escalar, sendo calculado pela Equação 2.7 para uma esfera maciça como a partícula i . A quantidade de movimento angular (\mathbf{L}), por sua vez, é obtida pelo produto vetorial entre os vetores posição do centro de massa e quantidade de movimento linear, como mostra a Equação 2.8 para a partícula i .

$$\mathbf{I} \doteq \int_V \rho [(\mathbf{d}_P \cdot \mathbf{d}_P) \mathbf{E} - \mathbf{d}_P \mathbf{d}_P] dV \quad (2.6)$$

$$\mathbf{I}_i = I_i \mathbf{E} = \frac{2}{5} m_i R^2 \quad (2.7)$$

$$\mathbf{L}_i \doteq \int_V \rho \mathbf{d}_P \times (\mathbf{v}_{P/i} - \mathbf{v}_{cm,i}) dV \quad (2.8)$$

Levando-se em consideração as definições dadas pelas equações 2.6, 2.7 e 2.8 chega-se à equação 2.9 para o cálculo da quantidade de movimento angular em termos do momento de inércia da partícula e sua velocidade angular de rotação em torno do centro de massa.

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{I}_i \cdot \boldsymbol{\omega}_i \quad (2.9)$$

Na lei de conservação da quantidade de movimento linear, a ação de uma força é o fator responsável por causar a alteração no estado de inércia do corpo. Já na lei de conservação do momento angular, esse papel é exercido pelo torque $\boldsymbol{\tau}$. Nesse sentido, a lei de conservação da quantidade de movimento angular, em relação ao centro de massa do corpo, é dada pela Equação 2.10, escrita com base na Figura

2.1. O torque, apresentada pela Equação 2.11, também escrita para a partícula i , da mesma figura, considera todas as forças \mathbf{F}_i aplicadas sobre a partícula i .

$$\frac{d\mathbf{L}_i}{dt} = \boldsymbol{\tau}_i \quad (2.10)$$

$$\boldsymbol{\tau}_i = \sum_j (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{cm,i}) \times \mathbf{F}_{ji} \quad (2.11)$$

onde \mathbf{r}_j é o vetor posição de aplicação da força sobre a partícula i e \mathbf{F}_{ji} é a força aplicada em um ponto j sobre a partícula i .

2.2 Interação entre Partículas

Antes de analisar os detalhes acerca da mecânica do contato entre partículas, faz-se necessário definir algumas variáveis importantes para que a descrição do mesmo seja realizada de forma inequívoca. Tendo em vista esse objetivo, considere a Figura 2.2, a qual ilustra o instante do contato entre duas partículas esféricas em um espaço tridimensional onde $\mathbf{r}_{cm,i}$ e $\mathbf{r}_{cm,j}$ denotam os vetores que representam as posições dos centros de massa das partículas i e j , respectivamente, os vetores $\mathbf{v}_{cm,i}$ e $\mathbf{v}_{cm,j}$ denotam os vetores que representam as velocidades dos centros de massa das partículas i e j , respectivamente e $\boldsymbol{\omega}_i$ e $\boldsymbol{\omega}_j$ denotam os vetores que representam as velocidades angulares das partículas i e j , respectivamente. Nessa figura está implícita a hipótese de que o contato entre as partículas ocorre em um único ponto, o ponto de contato C .

Se a hipótese considerada para a representação do contato através da Figura 2.2 for considerada válida, pode-se definir o vetor velocidade do ponto de contato entre as partículas i e j , $\mathbf{v}_{c,ij}$, como sendo a velocidade linear relativa entre dois pontos Q e S pertencentes às partículas i e j , respectivamente, e coincidentes com o ponto de contato. Tal definição é explicitada na Equação 2.12, onde \mathbf{v}_Q e \mathbf{v}_S denotam, respectivamente, os vetores velocidade dos referidos pontos Q e S .

$$\mathbf{v}_{c,ij} \doteq \mathbf{v}_Q - \mathbf{v}_S \quad (2.12)$$

De acordo com a Equação 2.3, as velocidades \mathbf{v}_Q e \mathbf{v}_S podem ser rescritas em termos das velocidades dos centros de massa das partículas das quais os pontos fazem parte e das velocidades angulares das mesmas. Adotando-se tal procedimento e substituindo-se as equações resultantes na Equação 2.12, a velocidade do ponto de contato entre as partículas i e j torna-se função das velocidades lineares dos pontos Q e S , conforme mostrado na Equação 2.13 onde \mathbf{R}_i e \mathbf{R}_j denotam, respectivamente, os vetores que representam as distâncias dos centros de massa das partículas i e j

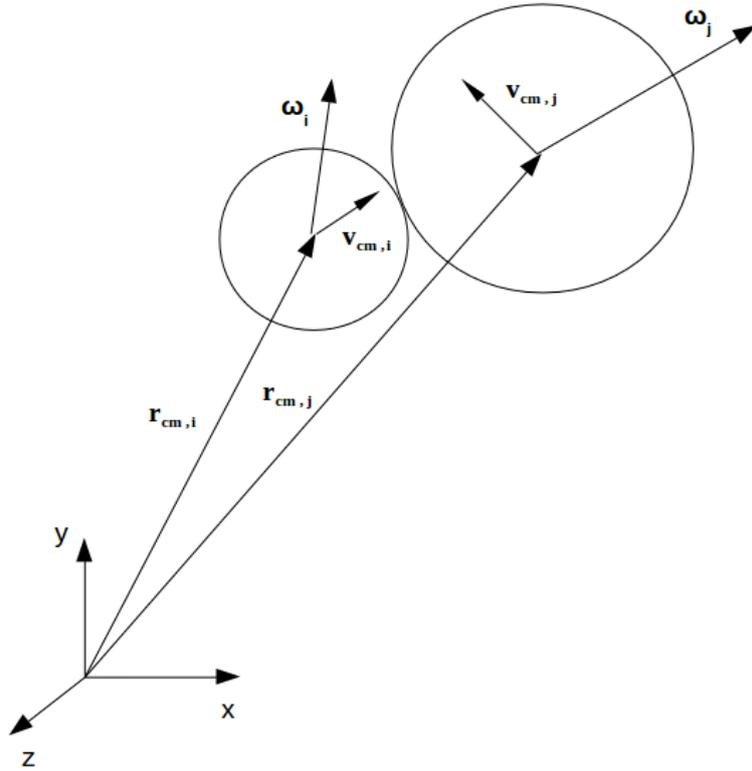


Figura 2.2: Contato entre duas partículas esféricas i e j .

até o ponto de contato. Está implícita nessa abordagem, portanto, a assunção de que as partículas são rígidas.

$$\mathbf{v}_{c,ij} = (\mathbf{v}_{cm,i} - \mathbf{v}_{cm,j}) + (\boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{R}_i - \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{R}_j) \quad (2.13)$$

A análise da mecânica do contato torna-se simplificada a partir da utilização de um sistema local de coordenadas, convenientemente definido. Para a definição do sistema local de coordenadas considere a Figura 2.3, representando um contato entre as superfícies de duas partículas esféricas i e j . Na referida figura, O representa a origem do sistema de referência escolhido de forma a ser coincidente com o ponto de contato. A Figura 2.3 deve ser entendida como uma visualização aumentada da região de contato para um sistema similar ao mostrado na Figura 2.2. O vetor unitário na direção normal, $\hat{\mathbf{n}}$, é então definido sobre a linha que une os centros das partículas, conforme mostrado na Equação 2.14 onde $\mathbf{r}_{cm,i}$ e $\mathbf{r}_{cm,j}$ denotam os vetores posição dos centros de massa das partículas i e j , respectivamente, em relação a um referencial fixo.

$$\hat{\mathbf{n}} \doteq \frac{\mathbf{r}_{cm,i} - \mathbf{r}_{cm,j}}{|\mathbf{r}_{cm,i} - \mathbf{r}_{cm,j}|} \quad (2.14)$$

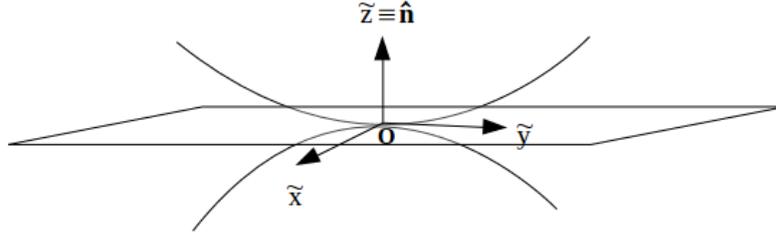


Figura 2.3: Visualização aumentada da região do contato entre duas partículas esféricas i e j , similar ao mostrado na Figura 2.2. A direção \tilde{z} é escolhida de forma a coincidir com aquela dada pelo vetor unitário normal e as direções \tilde{x} e \tilde{y} , sobre o plano tangencial, são escolhidas arbitrariamente.

Um vetor unitário pode ser definido para representar a direção tangencial a partir da componente normal da velocidade linear relativa entre as partículas i e j no ponto de contato, conforme mostrado pelas equações 2.15 e 2.16. Dessa maneira, a componente tangencial da velocidade do ponto de contato pode ser obtida conforme mostrado na Equação 2.17.

$$\mathbf{v}_{c,ij,n} = (\mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}} \quad (2.15)$$

$$\hat{\mathbf{t}} \doteq \frac{\mathbf{v}_{c,ij} - \mathbf{v}_{c,ij,n}}{|\mathbf{v}_{c,ij} - \mathbf{v}_{c,ij,n}|} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{v}_{c,ij,t} = (\mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{t}})\hat{\mathbf{t}} = \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}_{c,ij} \times \hat{\mathbf{n}} \quad (2.17)$$

É importante ressaltar que, como os vetores $\mathbf{r}_{cm,i}$, $\mathbf{r}_{cm,j}$ e $\mathbf{v}_{c,ij}$ variam ao longo do tempo, os vetores $\hat{\mathbf{n}}$ e $\hat{\mathbf{t}}$ dependem do instante em que são calculados.

2.2.1 Mecânica do contato

Quando duas partículas i e j interagem por contato direto, originam um par de forças de mesmas magnitude e direção, porém de sentidos opostos. Cada uma dessas forças atua em apenas uma das partículas, de forma que caracterizam um par de forças de ação e reação. A Figura 2.4 ilustra um instante qualquer durante uma colisão entre dois corpos esféricos representando o par de forças de ação e reação pelos símbolos $\mathbf{F}_{j/i}$ e $\mathbf{F}_{i/j}$, onde o primeiro denota a força exercida pela partícula j sobre a partícula i e o segundo denota a reação à esta força aplicada sobre a partícula j . Essas forças estão relacionadas segunda a Equação 2.18.

$$\mathbf{F}_{j/i} = -\mathbf{F}_{i/j} \quad (2.18)$$

Se um sistema local de coordenadas similar ao ilustrado pela Figura 2.3 for utilizado, as forças $\mathbf{F}_{j/i}$ e $\mathbf{F}_{i/j}$ podem ser decompostas em suas componentes na direção normal e suas componentes sobre o plano tangencial. Para a força atuando

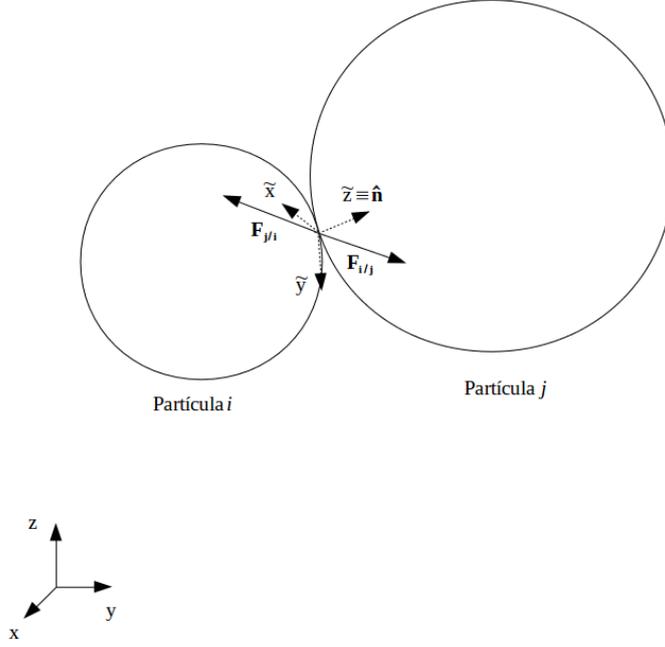


Figura 2.4: Representação de um instante qualquer durante o contato entre duas partículas esféricas. Nesta ilustração, $\mathbf{F}_{j/i}$ e $\mathbf{F}_{i/j}$ representam as forças que a partícula j exerce sobre a partícula i e a reação que a partícula i exerce sobre a partícula j , respectivamente.

sobre a partícula i , as componentes normal e tangencial designadas por $\mathbf{F}_{j/i,n}$ e $\mathbf{F}_{j/i,t}$, respectivamente, são definidas de acordo com as equações 2.19 e 2.20.

$$\mathbf{F}_{j/i,n} \doteq F_{j/i,z} \hat{\mathbf{e}}_z = F_{j/i,n} \hat{\mathbf{n}} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{F}_{j/i,t} \doteq F_{j/i,x} \hat{\mathbf{e}}_x + F_{j/i,y} \hat{\mathbf{e}}_y = F_{j/i,t} \hat{\mathbf{t}} \quad (2.20)$$

Segundo JOHNSON [55] o contato entre duas partículas pode ser descrito em termos de três diferentes regimes de movimento: deslizamento, rolamento e giro. A definição de tais regimes de movimento é realizada com base no sistema local de referência. Quando os corpos entram em contato, a velocidade linear relativa entre eles no ponto de contato, dada pela equação 2.13, pode ser decomposta em termos de sua componente normal e de suas componentes sobre o plano de contato. Se o contato entre as partículas é contínuo, de forma que as mesmas não estão nem se separando nem se interpenetrando, as componentes normais de suas velocidades lineares devem ser iguais. Essa condição, chamada de condição de contato contínuo, deve sempre ser satisfeita para qualquer contato entre duas superfícies em movimento. A consequência direta da condição de contato contínuo é a nulidade da velocidade linear relativa na direção normal [55].

O deslizamento é definido como o movimento relativo de translação entre as superfícies contactantes sobre o plano de contato. Dessa maneira, o deslizamento

ocorre somente no caso de ao menos uma das componentes da velocidade linear relativa sobre o plano de contato ser diferente de zero. De maneira análoga, o rolamento é definido como o movimento relativo de rotação entre as superfícies contactantes sobre o plano de contato. Tal movimento é definido em termos da velocidade angular relativa entre as superfícies das partículas i e j em contato, conforme mostrado na Equação 2.21.

$$\boldsymbol{\omega}_{ij} \doteq \boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_j \quad (2.21)$$

Portanto, o rolamento ocorre quando ao menos uma das componentes da velocidade angular relativa sobre o plano de contato das partículas for não nula. O regime de giro, por sua vez, é definido como o movimento relativo de rotação entre as partículas contactantes na direção normal ao plano de contato. Dessa forma, somente há giro caso a componente normal da velocidade angular relativa entre as partículas que estão em contato seja diferente de zero [55].

De um ponto de vista microscópico a interação entre corpos a partir do contato direto gera uma deformação em cada um desses corpos devido à ação das forças de contato. Essas deformações ocorrem no interior de uma pequena área que engloba todos os pontos, de cada superfície, que estão efetivamente se tocando. A referida área recebe o nome de área de contato. Para o caso de um contato entre duas partículas esféricas, a magnitude da área de contato pode variar bastante dependendo das propriedades elásticas e das dimensões características das partículas envolvidas [55]. Porém, para uma parcela consideravelmente grande dos casos, é razoável supor que a magnitude da área de contato seja muito menor que as áreas das superfícies das partículas que estão interagindo, dando origem ao que chamamos de contato pontual caracterizado pelo ponto de contato.

Levando-se em consideração que o contato se desenvolve sobre uma área, é importante que os conceitos de deslizamento total, comumente chamado apenas de deslizamento, e micro-deslizamento sejam diferenciados. É sabido que a magnitude da componente tangencial de uma força de contato é limitada por um valor conhecido como limite de fricção de Coulomb, ou simplesmente limite de Coulomb [55]. Esse limite é dado pela Equação 2.22 onde μ denota o coeficiente de fricção. Quando a Equação 2.22 é aplicável, assume-se que todos os pontos pertencentes à área de contato deslizam, ou seja, possuem velocidade linear não-nula, o que caracteriza o deslizamento total. Porém, há a possibilidade de que o limite de Coulomb seja violado apenas para determinados pontos na área de contato, ocasionando os micro-deslizamentos.

$$|\mathbf{F}_{t,\max}| = |\mathbf{F}_{\text{Coulomb}}| = \mu |\mathbf{F}_{\mathbf{n}}| \quad (2.22)$$

Essa diferenciação é importante por duas razões, a primeira delas é devido à grande confusão cometida na literatura entre ambos os conceitos. Por sua vez, a segunda razão consiste na própria interpretação dos resultados que venham a ser obtidos a partir da modelagem de contatos, pois é possível que, ao aproximar a área de contato por um ponto, conforme feito anteriormente, a velocidade linear relativa calculada no ponto de contato seja não-nula e ainda assim o limite de Coulomb não seja violado. A princípio, tal comportamento não faria sentido já que o deslizamento foi definido com base na não-nulidade da velocidade linear relativa no ponto de contato. O fato da lei de Coulomb não ser violada mesmo que a velocidade linear relativa no ponto de contato seja diferente de zero só faz sentido se considerarmos o conceito de micro-deslizamento. Dessa maneira, para que seja determinada a existência de deslizamento, é necessário observar não apenas a velocidade linear relativa no ponto de contato mas, mais importante, é necessário comparar a magnitude da componente tangencial da força de contato com o limite de Coulomb.

As partes que se encontram em contato das superfícies de cada uma das partículas são denominadas superfícies de contato. Em cada superfície de contato, um campo de tensões se desenvolve como resposta à interação. Naturalmente, as forças de contato podem ser escritas em termos desse campo de tensões desenvolvido sobre as superfícies de contato. Para uma superfície qualquer no espaço, uma orientação deve ser definida. A orientação de uma superfície é baseada na representação de sua área por um vetor cujo módulo é dado pela magnitude dessa área, a direção é dada pela direção normal à superfície e o sentido é arbitrário. Este vetor é aqui chamado de vetor área, \mathbf{A} .

Como não há uma operação de divisão definida entre vetores, o cálculo das tensões sobre uma superfície é realizado a partir da definição de uma entidade matemática \mathbf{T} [56]. Considerando-se a Figura 2.4, para um elemento infinitesimal $d\mathbf{A}$ da superfície de contato sobre a partícula i , \mathbf{T} é definido segundo a Equação 2.23 onde $d\mathbf{F}_{j/i}$ representa uma força infinitesimal exercida pela partícula j sobre a partícula i .

$$d\mathbf{F}_{j/i} = \mathbf{T} \cdot d\mathbf{A} \quad (2.23)$$

Como consequência dos vetores $d\mathbf{F}_{j/i}$ e $d\mathbf{A}$ serem independentes, a entidade \mathbf{T} é um tensor de segunda ordem. Dessa forma, cada elemento t_{kl} do tensor tensão, como é conhecido o tensor \mathbf{T} , representa a componente l da força $d\mathbf{F}_{j/i}$ por unidade de área projetada na direção k .

Portanto, a força de contato exercida pela partícula j sobre a partícula i pode ser calculada a partir da integração da Equação 2.23, conforme indicado pela Equação 2.24.

$$\mathbf{F}_{j/i} = \int_A \mathbf{T} \cdot d\mathbf{A} = \int_A \mathbf{T} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA \quad (2.24)$$

O cálculo de $\mathbf{F}_{j/i}$ a partir da Equação 2.24 depende do conhecimento da distribuição das tensões atuando sobre a superfície de contato, o tensor tensão \mathbf{T} , o qual por sua vez é obtido utilizando-se modelos que descrevem o campo de tensões. Esses modelos dependem das propriedades que constituem os materiais das partículas em contato e recebem o nome de equações constitutivas. Por conta disso, os modelos de força de contato obtidos a partir da Equação 2.24 são referidos no presente trabalho como modelos constitutivos. Modelos dessa e de outras classes são discutidos na próxima seção.

2.2.2 Modelos de interação

A interação entre duas partículas pode ser classificada de duas formas: colisão ou contato. Do ponto de vista da física, os dois fenômenos não diferem muito e o que os faz serem classificados como fenômenos diferentes é apenas o tempo de duração do processo. Nesse contexto, uma colisão pode ser entendida como um contato com tempo de duração extremamente pequeno. Duas abordagens se propõem a descrever esses fenômenos: o modelo de esfera rígida e o modelo de esfera macia [57].

O modelo de esfera rígida possui aplicação mais limitada pois descreve apenas colisões binárias, utilizando-se de parâmetros empíricos para obter uma relação explícita entre as variáveis nos instantes inicial e final da colisão, conforme será detalhado mais adiante. Já o modelo de esfera macia simula todo o processo de contato a partir da integração numérica das equações do movimento fornecendo informações a princípio mais detalhadas que o anterior. Ambos os modelos serão apresentados, em maiores detalhes, nas seções que seguem.

2.2.2.1 Modelo de esfera rígida

O modelo de esfera rígida é baseado no conceito de impulso, denotado por \mathbf{J} no presente texto, o qual é definido como sendo a integral temporal da força resultante que atua sobre determinada partícula no intervalo de tempo durante o qual ocorre a ação dessa força. Matematicamente, o impulso \mathbf{J}_i aplicado pela força \mathbf{F}_i sobre uma partícula i é obtido conforme a Equação 2.25:

$$\mathbf{J}_i \doteq \int_t \mathbf{F}_i(t) dt \quad (2.25)$$

A utilização do conceito de impulso é conveniente para o equacionamento do modelo de esfera rígida devido à aplicação das equações do movimento em sua forma integral nessa modelagem.

A Figura 2.4 ilustra um instante durante o contato entre duas partículas esféricas rígidas e é utilizada como referência para o desenvolvimento das equações 2.26,

2.27, 2.28 e 2.29, as quais apresentam as equações integradas de conservação de quantidades de movimento linear e angular para o sistema ilustrado.

$$m_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_i^{(0)}) = \mathbf{J}_i \quad (2.26)$$

$$m_j (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_j^{(0)}) = -\mathbf{J}_i \quad (2.27)$$

$$I_i (\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_i^{(0)}) = R_i \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{J}_i \quad (2.28)$$

$$I_j (\boldsymbol{\omega}_j - \boldsymbol{\omega}_j^{(0)}) = R_j \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{J}_i \quad (2.29)$$

No conjunto de equações 2.26, 2.27, 2.28 e 2.29, os subíndices i e j denotam as partículas às quais as variáveis fazem referência e para uma determinada partícula, m denota a massa, \mathbf{v} denota a velocidade do centro de massa, I denota o momento de inércia, $\boldsymbol{\omega}$ denota a velocidade angular e R denota o raio. O vetor $\hat{\mathbf{n}}$ denota o vetor unitário normal externo à partícula i no ponto de contato. O índice superior (0) indica que a propriedade em questão é avaliada no instante inicial do contato.

As equações 2.26, 2.27, 2.28 e 2.29 formam um sistema de quatro equações contendo cinco variáveis desconhecidas, a saber: \mathbf{v}_i , \mathbf{v}_j , $\boldsymbol{\omega}_i$, $\boldsymbol{\omega}_j$ e \mathbf{J} . Dessa maneira, para que o sistema possa vir a ter uma única solução, uma relação adicional faz-se necessária. Tal relação é obtida a partir do uso das hipóteses feitas para o contato, as quais caracterizam o modelo de esfera rígida. Tais hipóteses são: colisões binárias entre partículas esféricas, deformação desprezível, de forma que a distância entre os centros das partículas seja dado pela soma dos raios das partículas, respeito à lei de fricção de Coulomb e, por fim, a ideia de que ao findar-se o deslizamento, o mesmo não volta a ocorrer até que o contato se encerre.

A ideia da modelagem do tipo esfera rígida é obter uma relação matemática que permita o cálculo do impulso em termos das variáveis no instante inicial do contato, as quais são todas conhecidas, e de eventuais parâmetros determinados experimentalmente, como o coeficiente de fricção entre as superfícies, por exemplo. Para atingir esse objetivo, algumas definições são necessárias a priori. As equações 2.32, 2.30 e 2.31 definem as velocidades relativas entre as partículas nos instantes inicial e final do contato, bem como a velocidade linear relativa no ponto de contato no instante inicial, respectivamente.

$$\mathbf{v}_{ij}^{(0)} \doteq \dot{\mathbf{v}}_i^{(0)} - \dot{\mathbf{v}}_j^{(0)} \quad (2.30)$$

$$\mathbf{v}_{ij} \doteq \dot{\mathbf{v}}_i - \dot{\mathbf{v}}_j \quad (2.31)$$

$$\mathbf{v}_{c,ij}^{(0)} = \mathbf{v}_{ij}^{(0)} + R_i \boldsymbol{\omega}_i^{(0)} \times \hat{\mathbf{n}} + R_j \boldsymbol{\omega}_j^{(0)} \times \hat{\mathbf{n}} \quad (2.32)$$

Além das equações 2.32, 2.30 e 2.31, a definição do coeficiente de restituição é

importante para a modelagem do tipo esfera rígida. Tal coeficiente é definido de acordo com a Equação 2.33.

$$e_n \doteq - \frac{\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}} \quad (2.33)$$

É importante ressaltar que todos os vetores apresentados podem ser escritos em termos de suas componentes nas direções normal e tangencial. O coeficiente de restituição apresentado pela Equação 2.33, apesar de não ser um vetor, é definido em termos da razão entre duas componentes normais e, por essa razão é comumente chamado de coeficiente de restituição normal e foi aqui denotado por e_n . Tal nomenclatura será aplicada a partir do presente ponto.

Utilizando-se as equações 2.26, 2.27, 2.30 e 2.31, pode-se rescrever a velocidade relativa \mathbf{v}_{ij} em termos de $\mathbf{v}_{ij}^{(0)}$ e \mathbf{J}_i , conforme mostrado na Equação 2.34.

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_{ij}^{(0)} + \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} \mathbf{J}_i \quad (2.34)$$

O vetor impulso pode ser escrito em termos de suas componentes normal e tangencial conforme a Equação 2.35.

$$\mathbf{J}_i = J_{i,n} \hat{\mathbf{n}} + J_{i,t} \hat{\mathbf{t}} \quad (2.35)$$

onde $\hat{\mathbf{t}}$ é definido pela Equação 2.16.

A Equação 2.34 pode ser utilizada para obter a componente normal do impulso. Realizando-se o produto escalar de ambos os lados da Equação 2.34 pelo vetor unitário normal e utilizando-se a definição do coeficiente de restituição normal, obtém-se a Equação 2.36:

$$-e_n (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}) = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)} + \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} J_{i,n} \quad (2.36)$$

onde $\mathbf{J}_{i,n}$ denota a componente normal do vetor \mathbf{J}_i .

Portanto, a partir da Equação 2.36, conclui-se que $\mathbf{J}_{i,n}$ pode ser obtido conforme a Equação 2.37.

$$\mathbf{J}_{i,n} = -\frac{m_i m_j}{m_i + m_j} (1 + e_n) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}) \hat{\mathbf{n}} \quad (2.37)$$

Com relação à componente tangencial do impulso, é necessário determinar a priori se há deslizamento ou não. Supondo que haja deslizamento, a componente tangencial do vetor impulso, $\mathbf{J}_{i,t}$ será dada pela lei de fricção de Coulomb, conforme mostra a Equação 2.38.

$$\mathbf{J}_{i,t} = \mu J_{i,n} \hat{\mathbf{t}} \quad (2.38)$$

Portanto, para o caso onde há deslizamento ao longo de todo o contato, as equações de conservação de quantidade de movimento linear e angular integradas, representadas pelo conjunto de equações 2.26, 2.27, 2.28 e 2.29 pode ser reescrita em

termos das variáveis conhecidas no instante inicial e dos parâmetros empíricos μ e e_n a partir da utilização da Equação 2.35. Os resultados obtidos são mostrados no conjunto de equações 2.39, 2.40, 2.41 e 2.42.

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i^{(0)} - (\hat{\mathbf{n}} + \mu \hat{\mathbf{t}}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}) (1 + e_n) \frac{m_j}{m_i + m_j} \quad (2.39)$$

$$\mathbf{v}_j = \mathbf{v}_j^{(0)} + (\hat{\mathbf{n}} + \mu \hat{\mathbf{t}}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}) (1 + e_n) \frac{m_i}{m_i + m_j} \quad (2.40)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i = \boldsymbol{\omega}_i^{(0)} - \frac{5}{2R_i} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}) (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{t}}) \mu (1 + e_n) \frac{m_j}{m_i + m_j} \quad (2.41)$$

$$\boldsymbol{\omega}_j = \boldsymbol{\omega}_j^{(0)} - \frac{5}{2R_j} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{(0)}) (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{t}}) \mu (1 + e_n) \frac{m_i}{m_i + m_j} \quad (2.42)$$

Para o caso onde o deslizamento não ocorre, ou deixa de ocorrer durante o contato, a componente tangencial da velocidade linear relativa no ponto de contato no instante final deve ser avaliada. Por definição, para que o deslizamento não ocorra, essa componente deve ser nula. Em analogia à Equação 2.32, velocidade relativa no ponto de contato para o instante final pode ser escrita conforme a Equação 2.43.

$$\mathbf{v}_{c,ij} = \mathbf{v}_{ij} + R_i \boldsymbol{\omega}_i \times \hat{\mathbf{n}} + R_j \boldsymbol{\omega}_j \times \hat{\mathbf{n}} \quad (2.43)$$

Utilizando-se as equações 2.28, 2.29, 2.35 e 2.34 é possível rescrever a Equação 2.43 em termos de $\mathbf{v}_{c,ij}^{(0)}$ e das componentes normal e tangencial do vetor impulso, conforme indicado pela Equação 2.44.

$$\mathbf{v}_{c,ij} = \mathbf{v}_{c,ij}^{(0)} + (J_{i,n} \hat{\mathbf{n}} + J_{i,t} \hat{\mathbf{t}}) \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} \quad (2.44)$$

Lembrando-se que o vetor unitário tangencial é dado pela Equação 2.16, a componente tangencial $\mathbf{v}_{c,ij,t}$ pode ser obtida a partir da aplicação do produto escalar em ambos os lados da Equação 2.44 pelo vetor unitário tangencial. O resultado dessa operação é mostrado na Equação 2.45.

$$\mathbf{v}_{c,ij,t} = \frac{v_{c,ij,t}^{(0)}}{|v_{c,ij,t}^{(0)}|} \left(|v_{c,ij,t}^{(0)}| + \frac{7}{2} J_{i,t} \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} \right) \hat{\mathbf{t}} \quad (2.45)$$

Conforme mencionado anteriormente, para que não haja deslizamento, é necessário que a componente tangencial da velocidade linear relativa no ponto de contato seja nula. Considerando-se que no instante inicial tal componente não seja nula, para que a condição de não-deslizamento seja respeitada, é necessário que o termo

entre parênteses na Equação 2.45 seja zero. Dessa forma:

$$J_{i,t} = -\frac{2}{7} \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} |v_{c,ij,t}^{(0)}| \quad (2.46)$$

Assim, a solução para o caso onde não há deslizamento ou quando o deslizamento deixa de ocorrer ao longo do contato é obtida através da substituição das equações 2.37 e 2.46 nas equações de conservação de quantidade de movimento linear e angular integradas, dadas pelo sistema de equações 2.26, 2.27, 2.28 e 2.29. Os resultados são dados pelas equações 2.47, 2.48, 2.49 e 2.50.

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i^{(0)} - \left[(1 + e_n) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{c,ij}^{(0)}) \hat{\mathbf{n}} + \frac{2}{7} |v_{c,ij,t}^{(0)}| \hat{\mathbf{t}} \right] \frac{m_j}{m_i + m_j} \quad (2.47)$$

$$\mathbf{v}_j = \mathbf{v}_j^{(0)} + \left[(1 + e_n) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{c,ij}^{(0)}) \hat{\mathbf{n}} + \frac{2}{7} |v_{c,ij,t}^{(0)}| \hat{\mathbf{t}} \right] \frac{m_i}{m_i + m_j} \quad (2.48)$$

$$\boldsymbol{\omega}_i = \boldsymbol{\omega}_i^{(0)} - \frac{5}{7R_i} |v_{c,ij,t}^{(0)}| (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{t}}) \frac{m_j}{m_i + m_j} \quad (2.49)$$

$$\boldsymbol{\omega}_j = \boldsymbol{\omega}_j^{(0)} - \frac{5}{7R_j} |v_{c,ij,t}^{(0)}| (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{t}}) \frac{m_i}{m_i + m_j} \quad (2.50)$$

Dessa maneira, o objetivo de se obter as variáveis do problema no instante final do contato a partir de seus valores conhecidos no instante inicial bem como dos parâmetros empíricos μ e e_n é atingido pela modelagem do tipo esfera rígida para os possíveis regimes de movimento no que diz respeito ao deslizamento.

2.2.2.2 Modelo de esfera macia: O método dos elementos discretos

O método dos elementos discretos foi proposto originalmente por CUNDALL e STRACK [2] tendo como objetivo principal a simulação da dinâmica de um sistema granular. A principal diferença entre este modelo e de esfera rígida reside na forma como as equações do movimento são aplicadas. Em oposição à integração temporal das equações do movimento, conforme feito para o modelo de esfera rígida, no modelo de esfera macia tais equações são utilizadas em sua forma diferencial, conforme as equações 2.5 e 2.10. Tais equações ao serem simplificadas para os casos com massa m_i e momento de inércia I_i constantes, reduzem-se às equações 2.51 e 2.52.

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \quad (2.51)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \boldsymbol{\tau}_i \quad (2.52)$$

A solução de um problema para o qual o modelo de esfera macia foi utilizado fornece não apenas as velocidades de centro de massa e angulares das partículas em

questão, mas também a evolução temporal dessas variáveis. Para tanto, as forças e torques em cada instante ao longo do contato precisam ser obtidos. Duas importantes hipóteses devem ser assumidas para que um sistema seja descrito usando-se o método dos elementos discretos. A primeira delas diz respeito à propagação de perturbações devido ao contato. Assume-se que os passos de tempo utilizados para a integração das equações do movimento devem ser tão pequenos que, durante um passo de tempo, as perturbações originadas no contato não são capazes de se propagar para além de partículas imediatamente vizinhas. Dessa maneira, em todos os instantes, as forças resultantes em uma partícula qualquer do sistema são determinadas exclusivamente pela sua interação com as partículas para as quais possui contato direto [2]. Por conta disso, essa modelagem pode ser utilizada para a solução de problemas envolvendo o contato simultânea entre mais de duas partículas, simplesmente calculando a força resultante sobre uma partícula como resultado do somatório das forças atuando sobre ela devido aos contatos diretos.

A segunda hipótese que deve ser assumida diz respeito à forma como as deformações decorrentes do contato são tratadas. É sabido que ao entrar em contato, as partículas deforma-se mutuamente [55], porém, a modelagem matemática desse fenômeno pode ser muito complexa para ser utilizada. Dessa maneira, CUNDALL e STRACK [2] propuseram uma forma de levar em consideração essa deformação porém de forma aproximada. Foi proposto que se imaginasse que as partículas pudessem sofrer interpenetração, cuja magnitude estaria relacionada à força atuando sobre as partículas no contato. Baseando-se nessa ideia, pode-se definir essa interpenetração em termos do deslocamento relativo entre as partículas, mais comumente denominado vetor deformação, e representado nesse texto por $\boldsymbol{\delta}$. O vetor deformação é obtido, portanto, conforme mostra a Equação 2.53.

$$\boldsymbol{\delta} \doteq \int_t \mathbf{v}_{c,ij} dt \quad (2.53)$$

É conveniente escrever o vetor deformação em termos do sistema local de coordenadas dado pelas direções normal e tangencial. Realizando-se tal decomposição, obtêm-se os vetores $\boldsymbol{\delta}_n$ e $\boldsymbol{\delta}_t$, as componentes normal e tangencial do vetor deformação, respectivamente.

$$\boldsymbol{\delta}_n \doteq (\boldsymbol{\delta} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}} = \int_t \mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{n}} dt \hat{\mathbf{n}} \quad (2.54)$$

$$\boldsymbol{\delta}_t \doteq (\boldsymbol{\delta} \cdot \hat{\mathbf{t}}) \hat{\mathbf{t}} = \int_t \mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{t}} dt \hat{\mathbf{t}} \quad (2.55)$$

Os conceitos de deformação, bem como de suas componentes normal e tangencial estão ilustrados na Figura 2.5.

Para que uma simulação utilizando DEM como método de solução possa ser executada, faz-se necessário que as forças resultantes em cada partícula do sistema bem

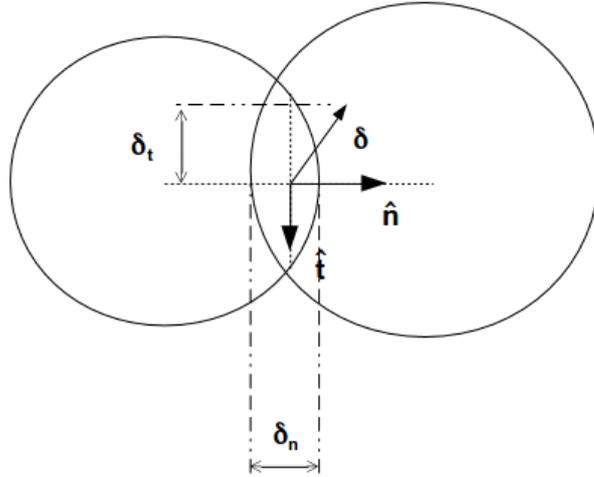


Figura 2.5: Contato oblíquo entre duas partículas esféricas segundo o modelo de esfera macia. Analisando-se a dinâmica da partícula à esquerda na figura, a componente normal (δ_n) do vetor deformação (δ) está representada como a magnitude da interpenetração entre as partículas, sobre a linha de união dos centros, para facilitar a visualização do conceito.

como os torques resultantes sobre as mesmas sejam conhecidos. Dessa forma, modelos de força e torque devem ser utilizados. CUNDALL e STRACK [2] propuseram que uma analogia com um sistema mecânico massa-mola-pistão fosse utilizada para modelar de maneira simples a força de contato entre duas partículas. De acordo com CUNDALL e STRACK [2] a mola estaria relacionada à componente elástica da força enquanto o pistão estaria relacionado à componente inelástica da mesma.

Conforme mencionado anteriormente, CUNDALL e STRACK [2] propuseram que a magnitude da força estaria diretamente relacionada com a magnitude da interpenetração, dada pela magnitude do vetor deformação. Presumiram então que tal força poderia ser escrita de forma análoga à lei de Hooke, representando uma força conservativa e, portanto, sendo responsável pelo cálculo da componente elástica da força de contato. Ao se decompor a força de contato em suas componentes normal e tangencial, essas ainda podem ser também decompostas em suas componentes elástica e inelástica. A magnitude das componentes elásticas das forças normal e tangencial são calculadas conforme às equações 2.56 e 2.57

$$|\mathbf{F}_{n,el}| = k_n |\delta_n| \quad (2.56)$$

$$|\mathbf{F}_{t,el}| = k_t |\delta_t| \quad (2.57)$$

onde as constantes de proporcionalidade k_n e k_t são denominadas rigidez normal e rigidez tangencial, respectivamente.

CUNDALL e STRACK [2] propuseram que a componente inelástica, por sua

vez, em analogia à força aplicada sobre um amortecedor, deve ter sua magnitude diretamente proporcional à taxa de interpenetração entre as partículas ou taxa de deformação associada ao contato, a qual é calculada pela Equação 2.58.

$$\dot{\boldsymbol{\delta}} \doteq \frac{d\boldsymbol{\delta}}{dt} \quad (2.58)$$

O vetor taxa de deformação também pode ser expresso em termos de suas componentes normal e tangencial, conforme indicado pelas equações 2.59 e 2.60.

$$\dot{\boldsymbol{\delta}}_n = (\dot{\boldsymbol{\delta}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}} \quad (2.59)$$

$$\dot{\boldsymbol{\delta}}_t = (\dot{\boldsymbol{\delta}} \cdot \hat{\mathbf{t}}) \hat{\mathbf{t}} \quad (2.60)$$

A ideia do modelo de força inelástica proposto por CUNDALL e STRACK [2] é apresentado nas equações 2.61 e 2.62 em termos de suas componentes normal e tangencial respectivamente

$$|\mathbf{F}_{n,inel}| = \gamma_n |\dot{\boldsymbol{\delta}}_n| \quad (2.61)$$

$$|\mathbf{F}_{t,inel}| = \gamma_t |\dot{\boldsymbol{\delta}}_t| \quad (2.62)$$

onde as constantes de proporcionalidade γ_n e γ_t são denominadas coeficientes de amortecimento normal e tangencial, respectivamente.

Forças de contato atuantes sobre uma partícula surgem como uma reação à deformação de maneira que tais forças devem possuir a mesma direção do vetor deformação, porém sentido oposto [2]. Dessa maneira, as componentes normal e tangencial de uma força de contato atuando sobre uma partícula podem ser escritas conforme às equações 2.63, 2.64, 2.65 e 2.66.

$$\mathbf{F}_{n,el} = -|\mathbf{F}_{n,el}| \frac{\boldsymbol{\delta}_n}{|\boldsymbol{\delta}_n|} = -k_n \boldsymbol{\delta}_n \quad (2.63)$$

$$\mathbf{F}_{t,el} = -|\mathbf{F}_{t,el}| \frac{\boldsymbol{\delta}_t}{|\boldsymbol{\delta}_t|} = -k_t \boldsymbol{\delta}_t \quad (2.64)$$

$$\mathbf{F}_{n,inel} = -|\mathbf{F}_{n,inel}| \frac{\dot{\boldsymbol{\delta}}_n}{|\dot{\boldsymbol{\delta}}_n|} = -\gamma_n \dot{\boldsymbol{\delta}}_n \quad (2.65)$$

$$\mathbf{F}_{t,inel} = -|\mathbf{F}_{t,inel}| \frac{\dot{\boldsymbol{\delta}}_t}{|\dot{\boldsymbol{\delta}}_t|} = -\gamma_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_t \quad (2.66)$$

Portanto, o modelo de CUNDALL e STRACK [2] para a representação da força de contato entre duas partículas pode ser expresso em termos de suas componentes normal e tangencial ao unir as duas contribuições, elástica e inelástica, em suas respectivas direções. As equações 2.67 e 2.68 mostram os modelos resultantes para

o cálculo das componentes normal e tangencial da força de contato proposta por CUNDALL e STRACK [2].

$$\mathbf{F}_n = -k_n \boldsymbol{\delta}_n - \gamma_n \dot{\boldsymbol{\delta}}_n \quad (2.67)$$

$$\mathbf{F}_t = -k_t \boldsymbol{\delta}_t - \gamma_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_t \quad (2.68)$$

Por ser um modelo de força baseado em uma analogia com um sistema massa-mola-amortecedor, o modelo de CUNDALL e STRACK [2] é também conhecido como modelo LSD (*Linear Spring Dashpot*). A Figura 2.6 ilustra esta analogia. A modelagem de forças de contato através de analogias com aparatos mecânicos dá origem a parâmetros que não possuem uma natureza física, como as constantes de rigidez e amortecimento do modelo LSD por exemplo, sendo de difícil obtenção. Embora esforços tenham sido realizados com o intuito de desenvolver uma maneira consistente de se obter tais parâmetros, os métodos existentes são restritos a alguns poucos casos para os quais é possível estimar a maior velocidade de impacto esperada no sistema e quando há informações suficientes sobre as magnitudes das interpenetrações que eventualmente ocorram [58]. Dessa forma, tais parâmetros precisam ser estimados a partir de ajustes a dados experimentais, conforme realizado nos trabalhos de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [47] e KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5]. Pelo fato dos parâmetros de modelos desse tipo possuírem natureza não-física, tais modelos serão referidos nesse texto como modelos abstratos.

Nessa versão original do método dos elementos discretos utilizando um modelo simplificado, CUNDALL e STRACK [2] propõem que o único torque atuando sobre as partículas é aquele causado pela aplicação da força de contato, de maneira que efeitos de resistência ao rolamento são desprezados. Dessa forma, o cálculo do torque para esse caso é realizado através da definição de torque dada pela Equação 2.11.

A integração temporal das equações geradas a partir da aplicação do modelo de esfera macia, em geral, é realizada a partir da utilização de métodos explícitos [59–64]. Quando concluíram a formulação DEM, CUNDALL e STRACK [2] propuseram a utilização do método de Verlet. Em tal método, mantém-se as forças constantes no início do intervalo de tempo e integra-se as equações do movimento até o meio do intervalo para obter as velocidades nesse instante, tais velocidades são então mantidas constantes e as equações são integradas do início ao fim do intervalo, devido a isso o método é análogo ao método "leap-frog"[2]. A seguir encontram-se as equações gerais da integração por esse método para as velocidades de uma partícula i e a posição de seus centro de massa:

$$\mathbf{v}_i^{(t+\frac{1}{2})} = \mathbf{v}_i^{(t-\frac{1}{2})} + \left(\frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \right)^{(t)} \Delta t \quad (2.69)$$

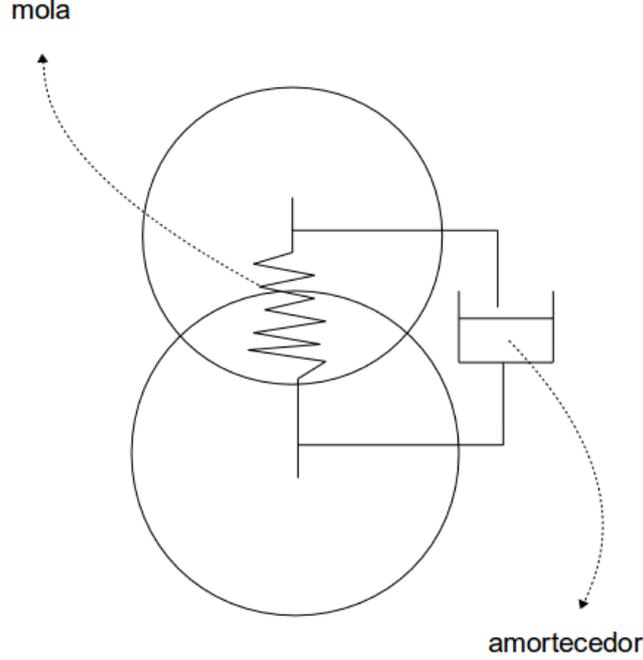


Figura 2.6: Ilustração da analogia de CUNDALL e STRACK [2] com um sistema massa-mola-pistão, aplicada ao contato entre duas partículas.

$$\boldsymbol{\omega}_i^{(t+\frac{1}{2})} = \boldsymbol{\omega}_i^{(t-\frac{1}{2})} + \left(\frac{\boldsymbol{\tau}_i}{I_i}\right)^{(t)} \Delta t \quad (2.70)$$

$$\mathbf{r}_i^{(t+1)} = \mathbf{r}_i^{(t)} + \mathbf{v}_i^{(t+\frac{1}{2})} \Delta t \quad (2.71)$$

$$\boldsymbol{\theta}_i^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}_i^{(t)} + \boldsymbol{\omega}_i^{(t+\frac{1}{2})} \Delta t \quad (2.72)$$

onde os sobrescritos (t) , $(t + 1/2)$ e $(t + 1)$ representam os instantes do intervalo de tempo para o qual a integração foi realizada.

Segundo Cundall e Strack [2], o esquema numérico só será estável se o passo de tempo Δt adotado for menor que o passo de tempo crítico do sistema, devido à natureza explícita do método. Cundall e Strack [2] sugerem que o passo de tempo crítico seja estimado com base no passo crítico de um sistema massa mola criticamente amortecido, o que equivale à $2\sqrt{\frac{m_i}{k_{N,i}}}$. Porém, KRUGGEL-EMDEN *et al.* [59] indicam que a sugestão de CUNDALL e STRACK [2] é questionada por diversos autores [62, 65–67], os quais utilizam frações do valor recomendado por CUNDALL e STRACK [2] que vão de $1/3$ até $1/50$. LANGSTON *et al.* [68] sugerem que o passo de tempo utilizado seja pelo menos um centésimo do tempo total de colisão. Esse tempo total de colisão pode ser estimado para o modelo LSD, o qual possui solução analítica [47, 69, 70], sendo dado pela equação 2.73, onde t_c e m_{eff} representam,

respectivamente o tempo de contato e a massa efetiva do sistema, esta última dada pela Equação 2.74 onde m_i e m_j representam as massas das partículas em contato.

$$t_c = \pi \left[\frac{k_n}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma_n}{2m_{eff}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (2.73)$$

$$m_{eff} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (2.74)$$

Com relação aos esquemas numéricos utilizados para a realização da integração temporal, KRUGGEL-EMDEN *et al.* [59] realizaram um estudo no qual avaliaram os efeitos em termos de tempo computacional e acurácia da solução para o caso de uma colisão entre uma partícula esférica e um plano utilizando o modelo LSD e concluíram que os algoritmos mais indicados para simulações DEM são aqueles envolvendo métodos de integração explícita, em especial o algoritmo de Verlet o qual apresentou a melhor relação custo-benefício considerando-se sistemas com muitas partículas. Com relação ao passo de tempo a ser utilizado, os autores sugerem que razões acima de 1/20 em relação ao proposto por CUNDALL e STRACK [2] oferecem ganhos de acurácia nas propriedades colisionais.

2.3 Modelos de Força de Contato

A maior parte dos modelos de forças de contato faz uso de dois tipos de abordagens, chamadas nesse texto de abordagem fenomenológica e abordagem abstrata. Conforme já mencionado, os modelos fenomenológicos são baseados no uso de modelos constitutivos para o cálculo de tensões, ao passo que os modelos abstratos são aqueles originados a partir de analogias com aparatos mecânicos. Independente de sua natureza, os modelos de contato utilizam propriedades elásticas dos materiais em suas equações. Portanto, antes de iniciar a discussão acerca dos diferentes modelos de contato, é necessário que sejam estabelecidas algumas definições básicas sobre as propriedades elásticas dos materiais.

Propriedades elásticas são definidas para materiais submetidos a deformações elásticas. Qualitativamente, pode-se dizer que deformações elásticas são aquelas completamente reversíveis. Dessa forma, um corpo submetido a uma tensão de maneira a causar uma deformação elástica retorna à sua forma original após a remoção dessa tensão [71]. Do ponto de vista matemático, deformações elásticas são aquelas que possuem uma relação linear com a tensão aplicada, conforme mostrado na Equação 2.75 onde σ e ζ denotam, respectivamente, a tensão normal aplicada e a deformação resultante. Essa relação é conhecida como lei de Hooke e está graficamente

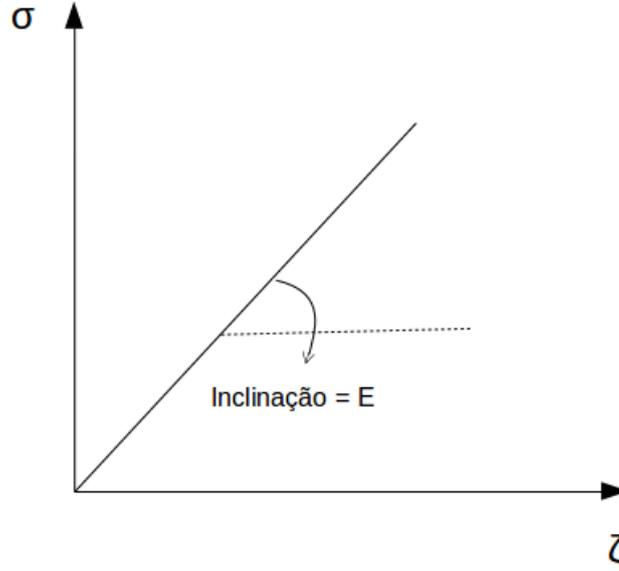


Figura 2.7: Gráfico da relação entre tensão e deformação, sobre um corpo com comportamento elástico.

representada na Figura 2.7.

$$\sigma = E\zeta \quad (2.75)$$

O coeficiente angular da reta mostrada na Figura 2.7 é dado pela constante de proporcionalidade entre a tensão normal aplicada sobre o corpo com comportamento elástico e a deformação sofrida pelo mesmo. A essa constante é dado o nome de módulo de elasticidade, também chamado de módulo de Young. O módulo de elasticidade é uma propriedade do material e fornece a resistência do mesmo à deformação elástica. Quanto maior for o módulo de Young, mais resistente à deformação elástica é o material ou, em outras palavras, menor será a deformação elástica sofrida para uma determinada tensão [71].

No caso de existência de uma tensão tangencial, uma relação linear análoga àquela para a tensão normal é válida para relacionar deformação e tensão tangenciais. A relação entre tensão e deformação elástica, ambas na direção tangencial, é dada pela Equação 2.76 [71]

$$\tau = G\zeta' \quad (2.76)$$

onde G é denominado módulo de cisalhamento e ζ' é a deformação elástica na direção tangencial. O módulo de cisalhamento tem em relação à deformação tangencial o mesmo significado físico do módulo de Young em relação à deformação normal.

Quando um material sofre a ação de uma tensão normal deformando-se nessa direção, conseqüentemente haverá deformações sobre o plano tangencial onde a tensão normal foi aplicada, conforme ilustrado na Figura 2.8 onde ζ_x , ζ_y e ζ_z são, respectivamente, as deformações nas direções x e y sobre o plano tangencial (deformações

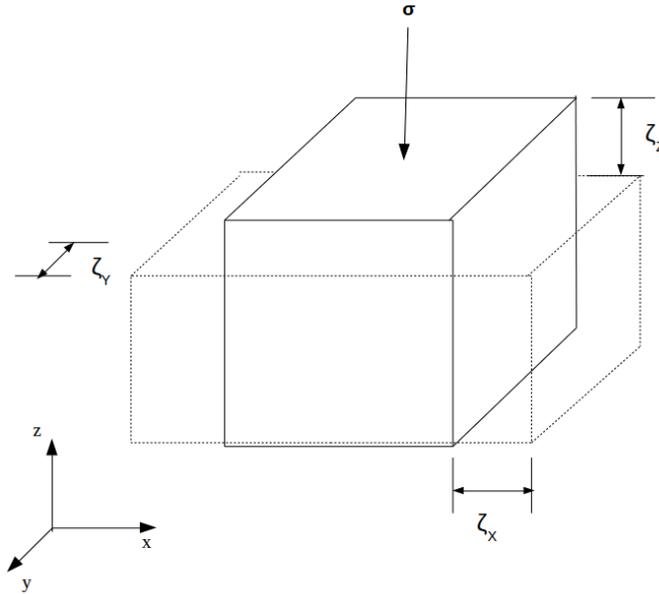


Figura 2.8: Material isotrópico e elástico sob a ação de uma tensão uniaxial normal. As deformações laterais e axiais decorrentes da ação dessa tensão estão representadas por ζ_x , ζ_y e ζ_z

laterais) e a deformação na direção normal z (deformação axial). Um parâmetro denominado razão de Poisson (ν) é definido como uma razão entre deformações laterais e axiais e, no caso de um material isotrópico sob ação de uma tensão uniaxial, é dado pela Equação 2.77] [71].

$$\nu = -\frac{\zeta_x}{\zeta_z} = -\frac{\zeta_y}{\zeta_z} \quad (2.77)$$

A razão de Poisson é sempre positiva e para garantir isso, o sinal negativo na Equação 2.77 faz-se necessário já que as deformações laterais e uniaxiais sempre terão sinais opostos. O valor máximo de da razão de Poisson é 0,5 e no caso de materiais isotrópicos ν deve possuir o valor de 0,25 e pode ser relacionada aos módulos de Young e de cisalhamento através da Equação 2.78[71].

$$E = 2G(1 + \nu) \quad (2.78)$$

2.3.1 Modelo elástico para a força normal: A teoria de HERTZ [1]

Ao estudar o padrão de interferência da luz incidente sobre lentes de vidro cilíndricas, HERTZ [1] desenvolveu o que ficou conhecida como teoria de Hertz para contatos elásticos. Essa teoria é válida para a interação normal entre os corpos. O tratamento matemático do modelo de HERTZ [1] baseia-se na aproximação das

regiões dos corpos, próximas do ponto onde se tocarão inicialmente, por equações topológicas[1]. O caso de maior interesse no método dos elementos discretos é aquele que considera contatos não-conformacionais, onde os formatos dos corpos não se ajustam um ao outro, como o contato entre duas esferas, por exemplo.

Com o objetivo de tratar o problema da maneira mais geral, HERTZ [1] propôs que a área de contato seria elíptica e introduziu a simplificação de que cada um dos corpos em contato comporta-se como um semi-espaco elástico que sofre uma carga sobre a região elíptica em uma superfície plana. Dessa forma, é possível tratar as tensões decorrentes do contato direto, de forma independente do campo de tensões gerados no interior de cada um dos corpos. Para que essa simplificação seja aceitável, é necessário que as dimensões da área de contato sejam pequenas em relação tanto às dimensões características dos corpos quanto aos raios de curvatura relativos das superfícies. Além disso, HERTZ [1] assumiu que as superfícies eram não-friccionais, de forma que as tensões tangenciais seriam nulas [1].

As hipóteses de HERTZ [1] quando aplicadas a corpos aproximados por sólidos de revolução, gera uma área de contato na qual os eixos maior e menor da elipse possuem mesma magnitude, ou seja, área de contato circular. Nesse contexto, HERTZ [1] propôs um perfil de pressão $p(r)$ capaz de satisfazer todas as condições de contato necessárias para a adoção de suas hipóteses, onde r é a coordenada radial no interior da área de contato. Tal distribuição é dada pela equação 2.79, onde p_0 representa a pressão máxima que é exercida no centro do círculo de contato, R_c é o raio da área de contato e r é a posição dentro dessa área.

$$p(r) = \frac{p_0}{R_c} (R_c^2 - r^2)^{1/2} \quad (2.79)$$

A partir da equação 2.79 e das teorias de deformações elásticas, HERTZ [1] foi capaz de calcular o raio do círculo de contato e a deformação sofrida pelos corpos, ambos como função da força aplicada, de um módulo de Young efetivo e de uma razão de Poisson efetiva. A magnitude da força normal pode, dessa maneira, ser obtida a partir da deformação sofrida pelos corpos, conforme mostra a equação 2.80

$$F = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R_{eff}} |\delta_n|^{\frac{3}{2}} \quad (2.80)$$

onde E^* denota o módulo de Young efetivo, dado pela Equação 2.81

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \quad (2.81)$$

para a qual os subíndices 1 e 2 referem-se aos diferentes materiais em contato. Da mesma forma, R_{eff} denota o raio efetivo para os corpos em contato, sendo dado

pela Equação 2.82:

$$R_{eff} = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \quad (2.82)$$

2.3.2 Modelos friccionais-elásticos para a força tangencial

Em um contato onde atuam forças tangenciais é possível que ocorra o fenômeno do deslizamento, o qual ocorre quando há velocidade linear relativa entre as superfícies no ponto de contato [55]. Portanto, o estudo de contatos na presença de forças tangenciais deve ser dividido entre aqueles casos para os quais há deslizamento e aqueles para os quais não há deslizamento.

Duas questões de relevância no estudo de contatos na presença de forças tangenciais são relativas à influência que as tensões tangenciais possam vir a ter sobre as tensões normais e sobre a área de contato. Segundo JOHNSON [55] tais efeitos podem existir no caso de materiais com propriedades elásticas muito diferentes porém, quando existem, são desprezíveis, em especial para casos onde o coeficiente limite de fricção é apreciavelmente menor que um. Dessa maneira, nos casos onde não há deslizamento, as tensões normais e tangenciais podem ser consideradas independentes, o que não acontece nos casos onde há deslizamento, quando tais tensões estão relacionadas pela lei de fricção de Coulomb.

Considerando-se o caso de duas partículas elásticas em contato e deslizando uma sobre a outra, a teoria de Hertz pode ser utilizada para determinar o perfil de tensões normais conforme a Equação 2.79 e, utilizando-se a lei de fricção de Coulomb obtém-se o perfil de tensões tangenciais $f_{t,x}(r)$ dado pela Equação 2.83

$$f_{t,x}(r) = \frac{3\mu P}{2\pi R_c^3} (R_c^2 - r^2)^{1/2} \quad (2.83)$$

onde P e R_c representam a pressão total exercida na área de contato e o raio da mesma. A coordenada r indica a posição no interior da área de contato. É importante ressaltar que nessa análise, a pressão P é mantida constante durante todo o contato.

Conforme já discutido anteriormente, para que o deslizamento ocorra é necessário a lei de fricção de Coulomb seja violada para todos os pontos no interior da área de contato e que, quando apenas alguns desses pontos violam o limite de Coulomb, ocorrem micro-deslizamentos. Para os pontos que não estão sofrendo micro-deslizamento, diz-se que estão aderidos. A Figura 2.9 ilustra as duas situações para um contato oblíquo entre duas esferas, onde A_1 e A_2 representam pontos sobre as superfícies das partículas 1 e 2 presentes na interface entre elas, T_1 e T_2 são pontos distantes da região de contato e O representa a origem do sistema local de coordenadas. Regiões próximas à superfície de contato sofrem deformações elásticas

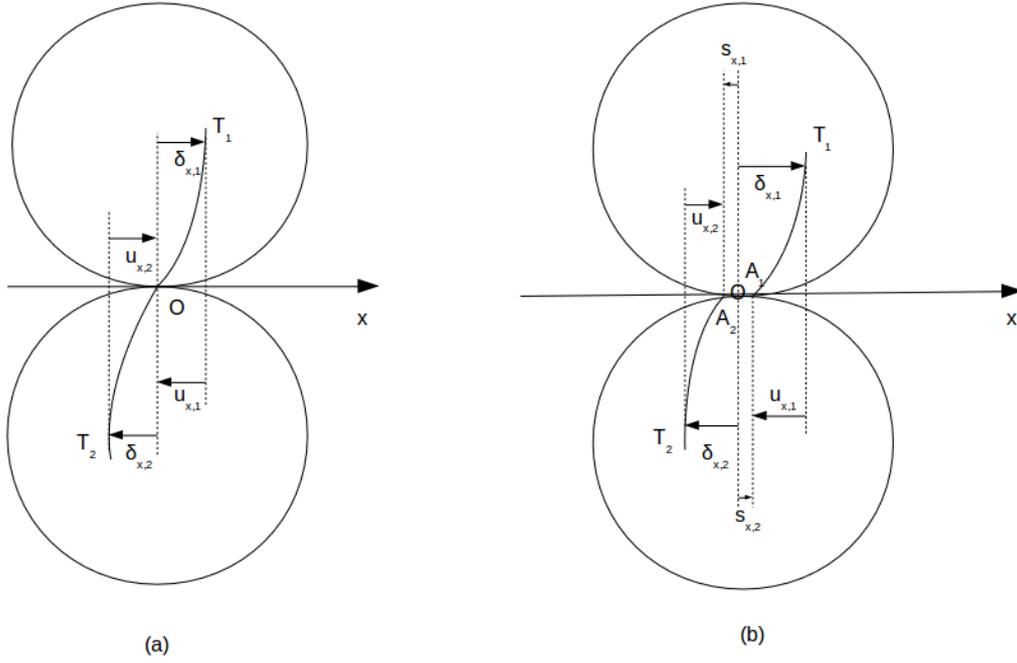


Figura 2.9: Ilustração de um contato oblíquo entre duas partículas esféricas para um instante onde ocorrem os regimes de (a) aderência e (b) micro-deslizamento.

de forma que os pontos localizados nessas regiões deslocam-se de maneira diferente daqueles localizados em regiões mais afastadas, os quais deslocam-se com a partícula segundo um comportamento típico de corpos rígidos. Dessa forma, pontos próximos à região de contato, como os pontos A_1 e A_2 , possuirão deslocamentos relativos aos pontos T_1 e T_2 , representados por $u_{x,1}$ e $u_{x,2}$, respectivamente e deslocamentos $s_{x,1}$ e $s_{x,2}$ em relação à origem.

A imagem (a) na Figura 2.9 ilustra um instante para o qual ocorre o regime de aderência entre as partículas. Nesse caso, os pontos A_1 e A_2 não possuirão deslocamento relativo à origem do sistema local de coordenadas mas ainda possuirão deslocamentos em relação aos pontos T_1 e T_2 , respectivamente, devido aos efeitos elásticos. Na imagem (b) da mesma figura, micro-deslizamento ocorre entre os pontos A_1 e A_2 , de maneira que esses pontos além de possuírem deslocamentos relativos aos pontos T_1 e T_2 , respectivamente, também possuem deslocamentos em relação à origem do sistema local de coordenadas, representados por $s_{x,1}$ e $s_{x,2}$.

Nesse contexto, pode-se definir o deslocamento devido ao micro-deslizamento conforme a Equação 2.84

$$\mathbf{s}_x \doteq \mathbf{s}_{x,1} - \mathbf{s}_{x,2} = (\mathbf{u}_{x,1} - \mathbf{u}_{x,2}) - (\boldsymbol{\delta}_{x,1} - \boldsymbol{\delta}_{x,2}) \quad (2.84)$$

e, com isso, tem-se que a condição de aderência deve ser dada pela Equação 2.85

$$\mathbf{u}_{x,1} - \mathbf{u}_{x,2} = \boldsymbol{\delta}_{x,1} - \boldsymbol{\delta}_{x,2} = \boldsymbol{\delta}_x \quad (2.85)$$

onde δ_x representa o deslocamento tangencial relativo entre as partículas como um todo. É importante lembrar que para que a condição de aderência esteja completamente especificada, além de satisfazer a Equação 2.85, o perfil de tensões deve ser tal que não viole a lei de fricção de Coulomb. Na condição de deslizamento, por sua vez, a Equação 2.85 é violada e o perfil de tensões tangenciais assume a forma dada pelo limite de fricção de Coulomb.

Dadas as devidas condições de contorno para os possíveis regimes existentes em um contato oblíquo, estão disponíveis as informações necessárias para a determinação do perfil de tensões sobre a área de contato e das deformações decorrentes das mesmas. Para o caso do contato oblíquo bidimensional e sem deslizamento entre duas partículas esféricas, sendo válida a teoria de HERTZ [1], a área de contato será circular com raio determinado e distribuição de tensão normal elipsoidal e dada pela Equação 2.79. Considerando-se as condições de aderência desenvolvidas anteriormente, a distribuição de tensão tangencial deve ser tal que produza deslocamentos tangenciais relativos constantes em toda a área de contato, conforme mostra a Equação 2.85. JOHNSON [55] calcularam o perfil de tensão tangencial $q_x(r)$ submetido a essas condições e obtiveram como resultado a Equação 2.86.

$$f_{t,x}(r) = f_{t,0} \left(1 - \frac{r^2}{R_c^2} \right)^{-1/2} \quad (2.86)$$

onde $f_{t,0}$ é a tensão exercida em $r = 0$, dada por

$$f_{t,0} = \frac{F_{t,x}}{2\pi R_c^2} \quad (2.87)$$

para a qual $F_{t,x}$ é a força tangencial. Tal perfil de tensões gera uma deformação elástica tangencial dada por

$$u_x = \frac{\pi(2 - \nu)}{4G} f_{t,0} R_c \quad (2.88)$$

e um deslocamento tangencial obtido através da equação a seguir

$$\delta_x = \frac{F_{t,x}}{8R_c} \left(\frac{2 - \nu_1}{G_1} + \frac{2 - \nu_2}{G_2} \right) \quad (2.89)$$

onde os índices 1 e 2 referem-se às duas partículas em contato. A Equação 2.89 mostra que, no caso de duas partículas elásticas em contato oblíquo, a relação entre a deformação e a força tangenciais é linear, diferentemente da relação entre a deformação e a força normais obtidas pela teoria de HERTZ [1].

Para o caso de um contato oblíquo onde a tensão tangencial não supera o limite de fricção de Coulomb em toda a área de contato, micro-deslizamentos ocorrerão.

Nesses casos, é preciso determinar em que região da área de contato esses micro-deslizamentos ocorrem. O perfil de tensões tangenciais radialmente simétrico dado pela Equação 2.86 sugere que a região de aderência deva ser circular e concêntrica com o círculo de contato [55]. Quando deslizamento ocorre em toda a área de contato, o perfil de tensões tangenciais resultantes é obtido pela lei de fricção de Coulomb conforme mostrado na Equação 2.90.

$$f'_{t,x}(x, y) = \mu f_{n,z}(x, y) = \mu f_{n,0} \left(1 - \frac{r^2}{R_c^2}\right)^{1/2} \quad (2.90)$$

Se um perfil de tensões tangenciais similar, dado pela Equação 2.91, for suposto como válido para um círculo de raio c concêntrico ao círculo de contato, é possível calcular os deslocamentos elásticos relativos (u_x) no círculo de raio c .

$$f''_{t,x}(x, y) = -\frac{c}{R_c} f_{n,0} \left(1 - \frac{r^2}{c^2}\right)^{1/2} \quad (2.91)$$

Da mesma forma, os deslocamentos elásticos relativos para o caso de deslizamento total também podem ser calculados. Superpondo-se os deslocamentos elásticos relativos para ambos os casos, é possível verificar que os deslocamentos elásticos resultantes obedecem às condições de aderência no interior do círculo de raio c e seguem, de forma aproximada, as condições de deslizamento para a região anular $c \leq r \leq R_c$, conforme mostrado por JOHNSON [55]. Dessa forma, confirma-se que a região de aderência é dada pelo círculo de raio c , concêntrico com o círculo de contato, cujo raio é dado por $R_c \geq c$. Assim, as condições de aderência geram uma deformação tangencial resultante dada pela Equação 2.92 para o interior do círculo de raio c .

$$\delta_{t,x} = \frac{3\mu F_{n,z}}{16} \left(\frac{2 - \nu_1}{G_1} + \frac{2 - \nu_2}{G_2} \right) \frac{R_c^2 - c^2}{R_c^3} \quad (2.92)$$

O raio da região de aderência pode então ser obtido a partir da força tangencial conforme mostra a Equação 2.93

$$F_{t,x} = \int_0^{R_c} 2\pi f'_{t,x} r dr - \int_0^c 2\pi f''_{t,x} r dr = \mu F_{n,z} \left(1 - \frac{c^3}{R_c^3}\right) \quad (2.93)$$

de onde conclui-se que

$$\frac{c}{R_c} = \left(1 - \frac{F_{t,x}}{\mu F_{n,z}}\right)^{1/3} \quad (2.94)$$

O cálculo da deformação tangencial $\delta_{t,x}$ em termos da força tangencial é mais conveniente e pode ser obtido substituindo-se a Equação 2.94 em 2.92, obtendo como

resultado a Equação 2.95

$$\delta_{t,x} = \frac{3\mu F_{n,z}}{16R_c} \left(\frac{2 - \nu_1}{G_1} + \frac{2 - \nu_2}{G_2} \right) \left[1 - \left(1 - \frac{F_{t,x}}{\mu F_{n,z}} \right)^{2/3} \right] \quad (2.95)$$

Fisicamente, o fenômeno modelado acima mostra que ao passo que a força tangencial aumenta, mantendo-se a força normal constante, o tamanho da região de aderência diminui conforme a Equação 2.94. Um região de micro-deslizamento, em formato anelar, penetra no círculo de contato a partir de sua circunferência, até que $F_{t,x} = \mu F_{n,z}$, quando a região de aderência resume-se a um único ponto e os corpos deslizam no que é conhecido como deslizamento total [55]. A Figura 2.10 ilustra esse fenômeno.

O estado das tensões decorrentes do contato entre dois corpos sujeito a variações nas componentes normal e tangencial da força de contato é uma função da sequência de compressão-descompressão realizadas. Dessa forma, a maneira como foram executados esses ciclos interfere nos perfis de tensão de forma que problemas de contato oblíquo mais realistas são de difícil análise. O trabalho de MINDLIN e DERESIEWICZ [72] se propõe a investigar as variações nos perfis de tensões entre corpos esféricos sujeitos aos mais variados ciclos de compressão-descompressão como por exemplo, as diversas formas de combinação entre crescente e decrescente para as componentes normal e tangencial, isso é, normal crescente/tangencial crescente, normal crescente/tangencial decrescente, e assim sucessivamente. Esse trabalho é considerado de alta complexidade para ser utilizado em problemas práticos mas, no entanto, simplificações do mesmo são muito utilizadas, dando origem a equações similares às mostradas anteriormente nessa seção.

2.3.3 Modelos Viscoelásticos

O escopo do presente trabalho abrange a classe dos materiais viscoelásticos, conforme definido no primeiro capítulo. Dessa forma, apenas os modelos relativos a essa classe de materiais será revisado em maiores detalhes. O primeiro modelo de força de contato utilizado no método dos elementos discretos foi descrito anteriormente, tendo sido proposto por CUNDALL e STRACK [2] e sendo conhecido como *Linear Spring-Dashpot*, ou simplesmente LSD. A ideia de analogias com aparatos mecânicos, conforme utilizada por CUNDALL e STRACK [2] resultou em uma série de modelos similares, nos quais pequenas alterações foram sendo propostas. TSUJI *et al.* [3] propuseram a utilização da teoria de HERTZ [1] para descrever a parcela elástica da interação na direção normal enquanto para a mesma parcela, na direção tangencial, sugeriram a utilização de uma versão simplificada da teoria de MINDLIN e DERESIEWICZ [72] para casos sem deslizamento. Porém, a maior contribuição

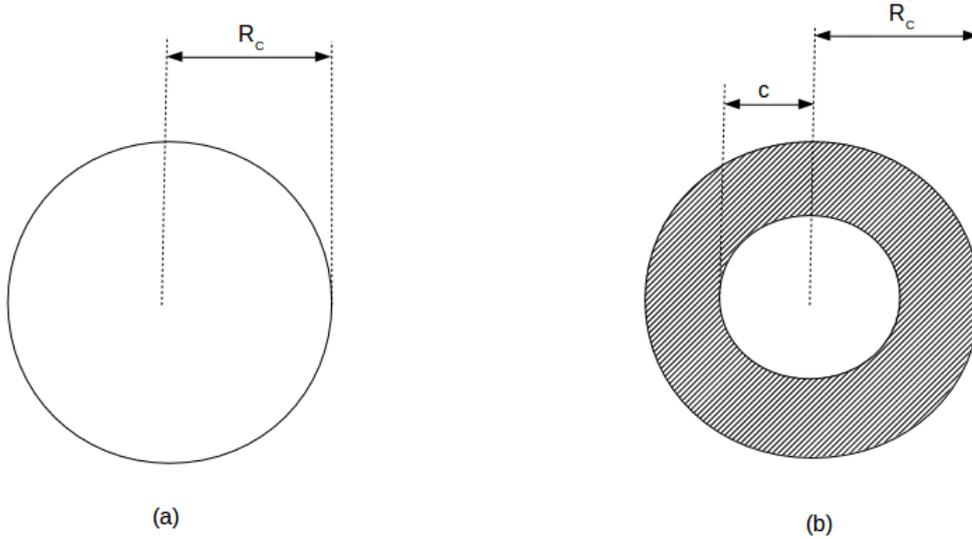


Figura 2.10: Ilustração do desenvolvimento da região anelar onde ocorrem microdeslizamentos. Na ilustração (a), toda a região de contato encontra-se aderida enquanto que na ilustração (b), parte dos pontos de contato violam a lei de fricção de Coulomb e formam uma região de microdeslizamento dada pela área anelar hachurada.

feita pelo modelo de TSUJI *et al.* [3] foi em relação ao cálculo das parcelas viscosas. Tal parcela é calculada da mesma forma que no modelo de CUNDALL e STRACK [2], a diferença encontra-se no coeficiente de *damping*. Enquanto no modelo LSD esse coeficiente deve ser estimado experimentalmente, para TSUJI *et al.* [3] ele deve ser obtido a partir de uma relação com uma propriedade do sistema [3]. Dessa forma, propuseram uma equação heurística que relaciona o coeficiente de *damping* com o coeficiente de restituição normal. A relação proposta por TSUJI *et al.* [3] é dada pela equação 2.96, onde α é uma constante empírica dependente do coeficiente de restituição normal. O coeficiente de *damping* para a direção tangencial é assumido igual àquele para a direção normal.

$$\tilde{\gamma}_n = \alpha \sqrt{m\tilde{k}_n} |\delta_n|^{\frac{1}{4}} \quad (2.96)$$

Uma vantagem do modelo de TSUJI *et al.* [3] é que seus parâmetros são todos obtidos a partir das propriedades mecânicas dos materiais envolvidos no choque. Os coeficientes de rigidez para o caso das parcelas elásticas são obtidos das teorias clássicas de contato para ambas as direções do sistema local de referência. Tais coeficientes são dados pelas equações 2.97 e 2.98, para o caso do contato entre uma partícula e um plano de materiais distintos. Nessas equações, R é o raio da partícula, ν é a razão de Poisson do material, E é o módulo de Young do material e G é o módulo de cisalhamento. Os subscritos p e s indicam propriedades da partícula e da superfície, respectivamente.

$$\tilde{k}_n = \frac{4\sqrt{R}}{\frac{3}{1 - \nu_p^2} + \frac{1 - \nu_s^2}{E_s}} \quad (2.97)$$

$$\tilde{k}_t = \frac{8\sqrt{R}G_p}{2 - \nu_p} \quad (2.98)$$

Dessa forma, o modelo proposto por TSUJI *et al.* [3] é não linear, sendo dado pelo conjunto de equações 2.99- 2.102.

$$\mathbf{F}_{\mathbf{n},\text{el}} = -\tilde{k}_n |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\delta}_n \quad (2.99)$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{t},\text{el}} = -\tilde{k}_t |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\delta}_t \quad (2.100)$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{n},\text{inel}} = -\tilde{\gamma}_n \dot{\boldsymbol{\delta}}_n = \alpha \sqrt{m\tilde{k}_n} |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{4}} \dot{\boldsymbol{\delta}}_n \quad (2.101)$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{t},\text{inel}} = -\tilde{\gamma}_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_t = \alpha \sqrt{m\tilde{k}_n} |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{4}} \dot{\boldsymbol{\delta}}_t \quad (2.102)$$

O modelo de TSUJI *et al.* [3], assim como o modelo de CUNDALL e STRACK [2], resulta em um coeficiente de restituição normal constante. Contudo, trabalhos experimentais já mostraram a dependência tanto do coeficiente de restituição quanto do tempo de colisão em relação à velocidade normal de impacto [47]. Apesar disso, diferentemente do modelo LSD, o resultado da modelagem de TSUJI *et al.* [3] para o tempo de contato não é constante sendo dependente da velocidade na direção normal.

KUWABARA e KONO [73] desenvolveram um modelo viscoelástico para a componente normal da força de contato ao estudarem o coeficiente de restituição na colisão entre duas esferas. Eles partiram da ideia de HERTZ [1] ao desenvolver sua teoria para colisões elásticas. KUWABARA e KONO [73] propuseram calcular a força normal viscosa integrando um perfil de tensões na área de contato, porém, diferente de HERTZ [1] que utilizou uma analogia com problemas envolvendo distribuições de carga devido à aplicação de um potencial eletrostático para propor uma distribuição de tensão normal elástica, KUWABARA e KONO [73] fizeram a mesma analogia, mas aplicada à parcela viscosa. O perfil parabólico gerado em ambos os casos é então utilizado para realizar a integração e dar origem à força normal viscoelástica. Os parâmetros que surgem na equação resultante são funções apenas das propriedades viscoelásticas do material, naturalmente. Anos mais tarde, a abordagem fenomenológica utilizada por KUWABARA e KONO [73] também foi

adotada por BRILLIANTOV *et al.* [74]. Esses últimos desenvolveram sua modelagem quando estudavam o comportamento de gases. Tendo como premissa básica a ideia de que o gás seria composto por esferas maciças, BRILLIANTOV *et al.* [74] utilizaram um modelo constitutivo para caracterizar o campo de tensões normais e então calcularam a força resultante nessa direção a partir de uma integração na área de contato. Esses primeiros modelos de base fenomenológica inspiraram o trabalho desenvolvido por ZHENG *et al.* [4], no qual o mesmo procedimento desenvolvido por BRILLIANTOV *et al.* [74] foi adotado para a força normal. ZHENG *et al.* [4] apontaram um erro no desenvolvimento matemático do modelo de BRILLIANTOV *et al.* [74] e realizaram a correção, dando origem a um novo modelo viscoelástico para essa componente. Tal correção levou, finalmente, à equação 2.103 para a força normal viscosa. É importante ressaltar que a parcela elástica é calculada pela teoria elástica de HERTZ [1] tendo portanto a mesma forma da equação 2.99.

$$\mathbf{F}_{\mathbf{n},\text{inel}} = -\check{\gamma}_n |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \dot{\boldsymbol{\delta}}_n \quad (2.103)$$

Na equação 2.103, o parâmetro $\check{\gamma}_n$ é função das propriedades viscoelásticas dos materiais envolvidos na colisão, segundo as equações 2.104 - 2.106, onde A é uma constante dependente do sistema e E^* é o módulo de Young efetivo. É importante notar que o modelo foi desenvolvido para contato entre uma partícula esférica e uma parede plana indeformável. Na Equação 2.105 η_1 e η_2 representam, respectivamente, o primeiro e o segundo coeficiente de viscosidade do material do qual a partícula e o plano são feitos

$$\check{\gamma}_n = 2AE^* \sqrt{R} \quad (2.104)$$

$$A = \frac{(1 - 2\nu)(1 + \nu)}{E} \left(2\eta_2 + \frac{\eta_1}{3} \right) \quad (2.105)$$

$$E^* = \frac{E}{1 - \nu^2} \quad (2.106)$$

No caso da parcela viscosa da direção tangencial, DINTWA *et al.* [75] aplicaram o mesmo procedimento utilizado para o cálculo da sua análoga na direção normal. Utilizaram um modelo constitutivo análogo ao de um fluido viscoelástico e calcularam a força tangencial através de sua integração na área. ZHENG *et al.* [4] incluíram essa ideia em seu trabalho, adicionando a parcela elástica proveniente de simplificações da teoria de MINDLIN e DERESIEWICZ [72] para gerar a força tangencial total. O modelo resultante é dado pelo conjunto de equações 2.107-2.109.

$$\mathbf{F}_{t,el} = -\frac{\mu|\mathbf{F}_n|}{|\delta_t|} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{\min(|\delta_t|; \delta_{t,max})}{\delta_{t,max}} \right]^{\frac{3}{2}} \right\} \delta_t \quad (2.107)$$

$$\delta_{t,max} = \frac{1}{2}\mu|\delta_n|\frac{2-\nu}{1-\nu} \quad (2.108)$$

$$\mathbf{F}_{t,inel} = -\frac{\eta_1}{2G\delta_{t,max}} \left[\frac{3}{2}\mu|\mathbf{F}_n| \sqrt{1 - \frac{\min(|\delta_t|; \delta_{t,max})}{\delta_{t,max}}} \right] \dot{\delta}_t \quad (2.109)$$

Comparando os resultados gerados pelo uso do modelo proposto com aqueles obtidos por simulações de elementos finitos, ZHENG *et al.* [4] chegaram à conclusão de que suas equações poderiam ser melhoradas através da adoção de fatores de correção empíricos para os termos viscosos. Tais fatores, k e h , para as componentes normal e tangencial, respectivamente, são dados pelas equações 2.110 e 2.111.

$$k = (0,8 + 26\nu^3) \left(\frac{\eta_2}{\eta_1} \right)^{-0,5} \left(\frac{|\delta_n|}{R} \right)^{0,04} \quad (2.110)$$

$$h = 1 - 0,4\eta_1 \frac{|\dot{\delta}_t|}{2G\delta_{t,max}} \quad (2.111)$$

Dessa maneira, o modelo de ZHENG *et al.* [4] pode ser escrito, de forma simplificada, conforme as equações 2.112 e 2.113

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{F}_{n,el} + k\mathbf{F}_{n,inel} \quad (2.112)$$

$$|\mathbf{F}_t| = \min(|\mathbf{F}_{n,el} + h\mathbf{F}_{n,inel}|; \mu|\mathbf{F}_n|) \quad (2.113)$$

sendo que o sentido do vetor \mathbf{F}_t , na equação 2.113, é contrário à deformação na direção tangencial.

Como pode ser observado no conjunto de equações 2.103 - 2.113, os parâmetros do modelo de ZHENG *et al.* [4] são funções do primeiro e do segundo coeficientes de viscosidade do material do qual é feito a partícula, η_1 e η_2 , respectivamente. Apesar de serem propriedades do material, até o momento do registro da presente tese, η_1 e η_2 não são possíveis de serem obtidos experimentalmente. Dessa maneira, ZHENG *et al.* [4] propuseram que esses valores de η_1 e η_2 podem ser calculados como funções das propriedades elásticas do material através do uso das equações 2.114 e 2.115, as quais foram obtidas a partir de uma análise de sensibilidade.

$$10^{-8}s \leq \frac{\eta_1}{E} \leq 10^{-5}s \quad (2.114)$$

$$0 \leq \frac{\eta_2}{\eta_1} \leq 10 \quad (2.115)$$

É importante ressaltar que o trabalho de ZHENG *et al.* [4] é puramente computacional e a partícula foi considerada como sendo feita de um material hipotético. As relações mostradas foram propostas sem argumentação alguma, o que leva a crer que são puramente heurísticas. Apesar disso, até então essa é a única informação quantitativa que se tem conhecimento acerca de possíveis valores que essas propriedades poderiam assumir. No mesmo trabalho, ZHENG *et al.* [4] assumem valores de referência para as relações propostas, as quais são mostradas nas equações 2.116 e 2.117

$$\left(\frac{\eta_1}{E}\right)_{referência} = 10^{-6}s \quad (2.116)$$

$$\left(\frac{\eta_2}{\eta_1}\right)_{referência} = 0 \quad (2.117)$$

Os valores de referência foram usados no trabalho de ZHENG *et al.* [4] para o cálculo dos valores de η_1 e η_2 a serem utilizados nas simulações.

É importante ressaltar o estudo realizado por ZHANG e WHITEN [76] sobre a condição de término do contato. Os autores avaliaram o comportamento de modelos viscoelásticos submetidos à condição usualmente adotada para determinar o encerramento do contato, a qual determina que a colisão termina quando a deformação normal se anula. ZHANG e WHITEN [76] concluíram que essa condição leva a uma força de atração nos instantes finais do contato, o que é irreal do ponto de vista físico visto que as partículas devem se repelir até o fim desde que a única interação seja devido ao contato. Dessa forma, propuseram uma condição de término que, desde então, é adotada em trabalhos envolvendo simulações com o método dos elementos discretos. Segundo ZHANG e WHITEN [76], o contato deve ser considerado encerrado no instante em que a força normal se anula. Essa assunção faz com que as partículas deixem o contato com uma deformação residual, a qual foi atribuída à menor taxa de recuperação do material viscoelástico em relação à taxa na qual as partículas se afastam. Dessa forma, as partículas terminam de recuperar sua forma original apenas alguns instantes após o término do contato.

Por fim, é importante deixar registrado um trabalho bastante recente desenvolvido por BRILLIANTOV *et al.* [77] no qual é analisada a colisão entre partículas viscoelásticas a partir de relações constitutivas, conforme realizado para os modelos fenomenológicos, em geral. A diferença desse trabalho encontra-se no método de solução das equações. BRILLIANTOV *et al.* [77] desenvolveram um método de solução por perturbações das equações o qual permitiu que a hipótese de estado quase-estático não fosse necessária. A aproximação quase-estática é uma premissa básica de todos os modelos desenvolvidos, inclusive o de ZHENG *et al.* [4]. A partir

desse novo método de solução, BRILLIANTOV *et al.* [77] deram origem a um novo modelo de força normal viscoelástica, muito parecido com o de ZHENG *et al.* [4]. Apesar de promissor, o modelo foi desenvolvido de forma completamente teórica, sem nenhum tipo de validação experimental.

2.4 *Softwares* de Simulação DEM

Existem duas linhas de *softwares* a serem utilizados em um trabalho computacional, os *softwares* livres ou de código aberto e os *softwares* comerciais. Os programas de código aberto exibem algumas vantagens em relação aos comerciais devido ao seu maior potencial de desenvolvimento e adaptabilidade ao caso específico que se está analisando. Além de terem seu uso dependente da obtenção de licenças a um custo relativamente elevado, os simuladores comerciais não permitem acesso ao seu código fonte, dificultando o desenvolvimento e a solução de determinados tipos de problemas. Por conta dessas características, a utilização de *softwares* de código aberto é mais difundida no meio acadêmico em relação aos comerciais.

No grupo dos *softwares* comerciais, dois simuladores são bastante difundidos, o ROCKY distribuído no Brasil pela ESSS e o EDEM da empresa DEM SOLUTIONS. Por se tratarem de códigos comerciais cujo objetivo é conquistar o mercado, ambos possuem uma interface gráfica amigável e de fácil utilização, além de contarem com um suporte técnico qualificado que os usuários podem contactar em caso de dúvidas. Maiores detalhes acerca dos mesmos podem ser obtidos nos *sites* de seus distribuidores [78, 79].

No conjunto dos programas de código aberto dois são comumente utilizados, o YADE desenvolvido originalmente por um grupo da Universidade de Grenoble na França e o LIGGGHTS, desenvolvido originalmente pelo laboratório de modelagem em escoamento de materiais particulados, da Universidade Johannes Kepler na Áustria [80–83]. O primeiro consiste em um código computacional escrito em linguagem C++ para simulações DEM e é naturalmente mais difundido devido ao seu desenvolvimento anterior ao do LIGGGHTS [84]. Esse último é um programa baseado no LAMMPS, o qual por sua vez consiste em um código originalmente escrito em linguagem F77 e atualmente convertido à C++, desenvolvido pelo departamento de energia do governo dos Estados Unidos e distribuído pelo *Sandia National Labs*. O LAMMPS foi projetado para realizar simulações em paralelo de forma eficiente, apesar de também poder ser utilizado para simulações *serial*. Dessa forma, pode-se simular casos para os quais o número de partículas pode chegar à ordem dos bilhões. Sendo um programa voltado para a simulação molecular clássica, o LAMMPS basicamente realiza a integração das equações do movimento newtoniano para um conjunto de átomos, moléculas ou partículas macroscópicas interagindo via forças

de curto e/ou longo alcance submetidas à uma variedade de possíveis condições iniciais e/ou condições de contorno [85].

Conforme citado anteriormente, o LAMMPS serviu como base para o desenvolvimento do LIGGGHTS o qual se deu com o objetivo de realizar melhorias no pacote *granular* do LAMMPS a fim de torná-lo mais adequado a aplicações industriais. Dentre as características desenvolvidas para o LIGGGHTS que não constam no LAMMPS pode-se citar como principais a importação de geometrias complexas geradas com *softwares* CAD, utilização de geometria móvel, inclusão de modelos de contato, adesão e torque de rolamento e transferência de calor entre partículas em contato [85]. As ferramentas de pós processamento do LIGGGHTS foram todas herdadas do conjunto de ferramentas originais do LAMMPS. Maiores detalhes acerca da estrutura de classes e dos algoritmos de solução incorporados no LIGGGHTS serão dados no Capítulo 3.

2.5 Trabalhos Experimentais

O estudo das variáveis envolvidas em uma colisão entre duas partículas esféricas pode ser realizado a partir da análise da colisão entre uma esfera e um plano. Isso é possível devido ao fato de um plano poder ser entendido como uma esfera de raio infinito. Essa é a simplificação utilizada pela grande maioria dos trabalhos experimentais que se propõem a fazer medições de variáveis envolvidas em um choque, visto que o método experimental aplicado nesse caso é relativamente simples [7]. As variáveis possíveis de serem medidas em um ensaio de colisão podem ser divididas em dois grandes grupos: variáveis macroscópicas e variáveis microscópicas [47]. No primeiro grupo, estão incluídas as medições realizadas ao término do contato, representando o processo de forma global. Já no grupo das variáveis microscópicas, incluem-se aquelas que dependem da evolução do choque, medidas ao longo do processo de colisão, e por isso, gerando perfis temporais. Exemplos de variáveis macroscópicas são velocidades e posições após a colisão, bem como coeficientes de restituição. Por outro lado, forças e deformações são exemplos que se enquadram no grupo de variáveis microscópicas. Variáveis microscópicas são muito difíceis de serem medidas e, por isso, dados desse tipo são muito limitados na literatura [5, 47].

FOERSTER *et al.* [7] realizaram experimentos envolvendo tanto colisões binárias partícula-partícula quanto colisões partícula-plano. Nesse trabalho, FOERSTER *et al.* [7] definiram duas variáveis adimensionais e publicaram seus dados baseados nessas definições. A primeira variável adimensional definida (ψ_1) relaciona as componentes tangencial e normal da velocidade linear no ponto de contato ambas antes da colisão. Já a segunda variável adimensional (ψ_2) é dada pela razão entre a componente tangencial da velocidade de contato após a colisão com a componente

normal antes da colisão. As definições para ψ_1 e ψ_2 são dadas pelas equações 2.118 e 2.119, respectivamente.

$$\psi_1 = -\frac{\mathbf{v}_{c,a} \cdot \hat{\mathbf{t}}}{\mathbf{v}_{c,a} \cdot \hat{\mathbf{n}}} \quad (2.118)$$

$$\psi_2 = -\frac{\mathbf{v}_{c,d} \cdot \hat{\mathbf{t}}}{\mathbf{v}_{c,a} \cdot \hat{\mathbf{n}}} \quad (2.119)$$

Em ambas as equações, \mathbf{v}_c representa a velocidade linear no ponto de contato e os subíndices a e d denotam instantes antes e depois da colisão.

Nesse trabalho, as colisões binárias foram realizadas para duas partículas de mesmo material. O primeiro ensaio foi realizado utilizando-se partículas de vidro e no segundo, partículas de acetato de celulose. Os experimentos de colisão partícula-plano foram realizados com as mesmas partículas de vidro e acetato, porém, contra um plano de alumínio. Os autores utilizaram os dados experimentais para realizar o ajuste de um modelo de esfera rígida, tendo como resultados os coeficientes de restituição normal e tangencial, bem como o coeficiente de fricção. A falta de informações precisas relativas às condições experimentais, no entanto, dificultam o uso desses dados em trabalhos de simulação.

LORENZ *et al.* [86] utilizaram o mesmo aparato experimental do trabalho de FOERSTER *et al.* [7], refinando o método para permitir a avaliação de efeitos de ligeiras não-esfericidades das partículas, bem como efeitos relacionados ao desgaste de suas superfícies. Os autores utilizaram as mesmas variáveis adimensionais propostas por FOERSTER *et al.* [7] para reportar seus resultados. Os ensaios de colisão binária foram realizados para pares de partículas de mesmos materiais, sendo o primeiro par formado por partículas de aço inoxidável e o segundo, formado por partículas de vidro os demais pares foram formados por partículas de poliestireno e acrílico. Os choques partícula-plano foram realizados com partículas de vidro e plano de alumínio. Da mesma forma que FOERSTER *et al.* [7], os autores realizaram um ajuste do modelo de esfera rígida, chegando aos coeficientes de restituição e de fricção para os sistemas avaliados. O trabalho de LORENZ *et al.* [86], assim como seu predecessor, carece de informações a respeito das condições experimentais, de forma que sua utilização para fins de simulação é questionável.

Em um trabalho envolvendo apenas colisões partícula-plano, GORHAM e KHARAZ [87] utilizaram um sistema formado por esferas de óxido de alumínio incidindo em um plano de vidro, e outro de alumínio. Diferentemente dos trabalhos realizados por FOERSTER *et al.* [7] e LORENZ *et al.* [86], GORHAM e KHARAZ [87] publicaram seus resultados em termos das variáveis originais do problema, ou seja, as velocidades linear e angular. Os autores reportaram a presença de deformações permanentes durante os ensaios de colisão com o plano de alumínio, indicando que

o sistema utilizado comporta-se de forma plástica. Enquanto isso, afirmam que o par óxido de alumínio/vidro apresenta resposta elástica. Dadas essas observações, GORHAM e KHARAZ [87] conduziram comparações entre os dados experimentais e as respostas dos modelos de esfera rígida e o modelo com solução desenvolvida por MAW *et al.* [88] para colisões oblíquas elásticas entre duas esferas.

STEVENS e HRENYA [89] realizaram experimentos envolvendo colisões normais binárias entre partículas de aço inoxidável e entre partículas de aço cromado. As variáveis medidas foram o coeficiente de restituição normal e o tempo de colisão. Os autores realizaram ajustes paramétricos para uma série de modelos de forças de contato, levando em consideração ambos os conjuntos de dados experimentais quando os modelos continham dois parâmetros ajustáveis e apenas os dados de coeficiente de restituição normal quando os modelos possuíam apenas um parâmetro ajustável. A conclusão que STEVENS e HRENYA [89] chegaram foi que metade dos modelos considerados foram capazes de prever corretamente a dependência funcional do coeficiente de restituição normal e do tempo de colisão com a velocidade normal de impacto. Além disso, observaram que os valores calculados pela teoria elástica de HERTZ [1] apresentam erros de apenas 10% quando comparado com o valor medido experimentalmente.

DONG e MOYS [6] estudaram o impacto de uma partícula esférica em um plano inclinável, ambos feitos de aço inoxidável. Nesse experimento, uma partícula com 44,45 mm de diâmetro e uma velocidade de impacto de 4,2 m/s, incide em uma superfície plana sob uma faixa de ângulos que varia entre 0 e 60 graus. Diferente dos trabalhos anteriores, DONG e MOYS [6] realizaram os experimentos não apenas para velocidades angulares inicialmente nula, mas também para casos onde havia uma velocidade angular inicial. As variáveis medidas, para ambos os casos, foram os coeficientes de restituição normal e tangencial, além do coeficiente de fricção, da velocidade angular após o contato e do ângulo de rebote. Os autores constataram que para os dados obtidos sem velocidade angular inicial, o modelo de esfera rígida prediz relativamente bem os experimentos. Por outro lado, quando há velocidade angular no instante inicial, o modelo não se adequa aos dados, em particular nas regiões onde o regime de não-deslizamento é dominante. O trabalho realizado por DONG e MOYS [6] apresenta suficientemente os dados e as informações necessárias para que sejam utilizados em simulações. Em especial, os dados são apresentados juntamente com suas réplicas, o que faz com que o trabalho seja um bom candidato ao uso em procedimentos de estimação de parâmetros, como o proposto na presente tese.

Capítulo 3

Metodologia

O presente trabalho tem por objetivo principal, o desenvolvimento de uma metodologia a ser aplicada em conjunto com o método dos elementos discretos. Considerando-se esse contexto, neste capítulo serão apresentadas todas as ideias que guiaram e motivaram cada passo da metodologia proposta. A começar pela comparação entre os resultados obtidos por diferentes modelos de força de contato, passando pelo detalhamento das etapas de desenvolvimento e indo até a implementação e o uso da metodologia sugerida.

3.1 Análise Comparativa de Modelos

Os modelos selecionados para a análise comparativa são de natureza viscoelástica em função do escopo do trabalho. Foram utilizados os modelos de força de contato de CUNDALL e STRACK [2] e TSUJI *et al.* [3] como referências para comparação com o modelo de ZHENG *et al.* [4]. Será adotada a notação $M1$, $M2$ e $M3$ para referir-se aos modelos de CUNDALL e STRACK [2], TSUJI *et al.* [3] e ZHENG *et al.* [4], respectivamente, por conveniência. As equações que compõem cada um dos modelos utilizados estão resumidas no apêndice A desta tese. A obtenção dos parâmetros encontra-se resumida no apêndice B.

O universo de modelos de contato para materiais viscoelásticos é restrito e agrupável em dois grandes grupos, aqui denominados abstratos e fenomenológicos. No grupo dos modelos abstratos estão todos aqueles que partem de analogias com sistemas mecânicos, gerando equações cujos parâmetros não possuem significados físicos. Já no grupo dos modelos fenomenológicos, estão aqueles originados a partir da utilização de equações constitutivas para a tensão do sólido, a qual através da análise do contato, leva a modelagem das forças envolvidas, cujos parâmetros são propriedades dos materiais envolvidos no processo. O primeiro grupo pode ser subdividido em dois outros grupos, dependendo das relações estabelecidas entre as magnitudes das forças e as respectivas deformações: lineares ou não-lineares. A ampla utilização

dos modelos $M1$, abstrato linear, e $M2$, abstrato não-linear, somada à classificação apresentada, faz com que os mesmos sejam bons representantes do universo dos modelos de forças de contato clássicas para materiais viscoelásticos o que, portanto, justifica suas escolhas como referências.

O modelo $M3$ foi escolhido para ser testado por ser promissor, do ponto de vista dos autores. A impressão se justifica, inicialmente, pelo simples fato de ser um modelo fenomenológico. O método dos elementos discretos possui um problema relativo à dificuldades de generalização dos modelos de forças de contato utilizados, já que os parâmetros dos modelos mais utilizados, os abstratos, são de difícil generalização devido à sua natureza não-física. Técnicas de estimação de parâmetros são geralmente utilizadas e, ainda assim, o problema persiste, visto que tais parâmetros seriam válidos apenas para as partículas que deram origem aos dados utilizados na estimação e para as mesmas condições nas quais tais dados foram gerados [58]. Ou seja, a utilização do conjunto de parâmetros estimados usando dados experimentais de colisão de pares de partículas é estendido para todas as partículas do sistema em condições genéricas de contato. Assim, esses parâmetros acabam sendo fortemente dependentes do processo que está sendo simulado de forma que precisam ser re-estimados para cada aplicação diferente. Tal problema é superado pela utilização de modelos fenomenológicos, pois as propriedades dos materiais não se alteram em função das aplicações em si. Além de possuir essas desejáveis características, o modelo $M3$, é um modelo recente e que carrega consigo a correção de um erro de derivação cometido no desenvolvimento de um dos modelos nos quais se baseou, a saber, o modelo de BRILLIANTOV *et al.* [74], conforme reportado no capítulo 2. Tais fatos, motivaram a avaliação de $M3$ e o tornaram o objeto de estudo dessa tese.

O caso selecionado para ser simulado utilizando os modelos citados foi a colisão de uma partícula esférica contra uma superfície plana. Esse caso foi escolhido pelo fato de ser representativo de uma colisão partícula-partícula, onde uma das partículas possui raio muito maior que a outra, sendo considerado, portanto, infinito. Essa simplificação foi discutida no capítulo anterior. Como não houve realização de experimentos nessa tese, dados provenientes da literatura foram utilizados. O conjunto de dados experimentais utilizado foi aquele publicado no trabalho de DONG e MOYS [6], para a colisão entre uma partícula esférica de aço contra uma superfície plana de mesmo material. Tal experimento foi brevemente descrito na revisão bibliográfica e será revisitado nessa seção para maior detalhamento visto que será utilizado extensivamente até o fim deste trabalho.

Antes de discutir sobre os dados experimentais utilizados e descrever a implementação, é necessário definir precisamente, em termos matemáticos, o problema que será abordado. Nessa tese, conforme já mencionado anteriormente, o problema a ser trabalhado será a colisão oblíqua bidimensional de uma esfera contra um plano.

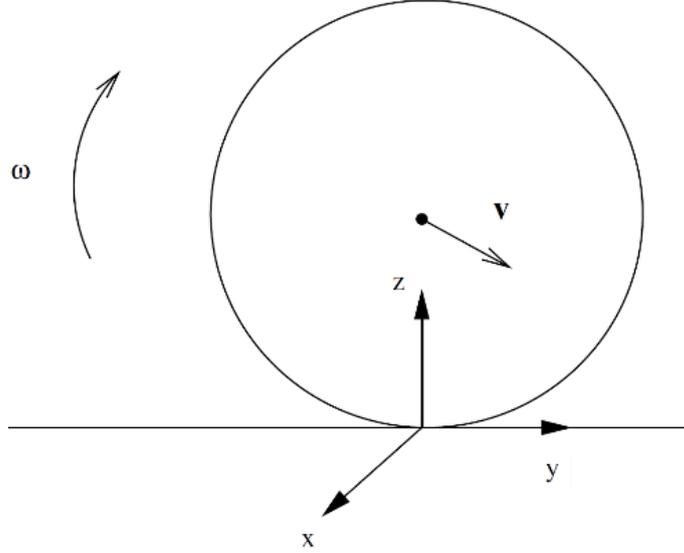


Figura 3.1: Representação da colisão 2D de uma partícula esférica contra um plano.

Através da aplicação do modelo de esfera macia, chega-se ao sistema de equações diferenciais formado pelas equações do movimento, conforme descrito de forma geral na revisão bibliográfica. Agora serão apresentadas as equações particulares para o caso 2D que foram resolvidas nesta tese, tomando como base a figura 3.1.

Aplicando-se as equações 2.5, para a conservação da quantidade de movimento linear, considerando-se o sistema de coordenadas adotado e a massa da partícula constante e igual a um valor genérico m , chega-se ao sistema de equações 3.1, onde F_n e F_t representam as componentes normal e tangencial, respectivamente, convenientemente coincidentes com as direções z e y do referencial.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_z}{dt} = \frac{F_n}{m} \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{F_t}{m} \end{array} \right. \quad (3.1)$$

A movimentação do centro de massa da partícula é dada pela aplicação da equação 2.1, dando origem às equações 3.2, onde r_y e r_z representam as componentes y e z do vetor posição do centro de massa da partícula analisada.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dz}{dt} = v_z \\ \frac{dy}{dt} = v_y \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Levando-se em conta a definição da deformação normal dada pela equação 2.54 e aplicando-a para o sistema de coordenadas vigente, chega-se à sua formulação para este caso 2D em particular, explicitada na equação 3.3, para a qual v_z representa a

componente z do vetor velocidade do ponto de contato e R é o raio da partícula.

$$\boldsymbol{\delta}_n = \int_0^t \mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dt \quad \hat{\mathbf{n}} = \int_0^t v_z \, dt \quad \hat{\mathbf{n}} = (z - R) \hat{\mathbf{n}} \quad (3.3)$$

Dessa forma, segue que:

$$\boldsymbol{\delta}_n = \delta_n \hat{\mathbf{n}} = (z - R) \hat{\mathbf{n}} \quad (3.4)$$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{d\delta_n}{dt} \quad (3.5)$$

O movimento de rotação pode ser considerado a partir da aplicação da conservação da quantidade de movimento angular, dada pela equação 2.10. Considerando-se que o único torque atuante nesse fenômeno é aquele devido à presença da força tangencial, ou seja, supondo desprezível o efeito de torque de rolamento, assumindo que a deformação sofrida pela partícula é muito menor que o raio da mesma e sabendo que $\delta_n < 0$, e adotando o valor constante para o momento de inércia da partícula dado pela equação 2.7, chega-se ao sistema 3.6, onde ω_x representa a componente x da velocidade angular da partícula.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dr_y}{dt} = v_y \\ \frac{d\delta_n}{dt} = v_z \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{F_t}{m} \\ \frac{dv_z}{dt} = \frac{F_n}{m} \\ \frac{d\omega_x}{dt} = \frac{R}{I} F_t \end{array} \right. \quad (3.6)$$

O fato de δ_n ser tal que $\delta_n < 0$ é importante pois permite a simplificação da equação de conservação de quantidade de movimento angular para a forma mostrada na última equação do sistema 3.6.

O sistema de equações 3.6 é o que será resolvido para cada uma das condições experimentais a serem descritas nesse capítulo. Os termos relativos às forças normal e tangencial são obtidos a partir da utilização dos modelos $M1$, $M2$ e $M3$, cujas descrições e formulações foram apresentadas no capítulo 2. É importante ressaltar que a comparação dos modelos $M1$, $M2$ e $M3$ se deu a partir da implementação dos mesmos em um código próprio em linguagem C++. O método de integração numérica utilizado para solucionar o sistema de equações 3.6 foi o método de Euler explícito. Tal método foi selecionado levando-se em consideração sua simplicidade

e sua adequação ao problema proposto, conforme mencionado em um estudo prévio realizado por KRUGGEL-EMDEN *et al.* [59].

3.1.1 Dados Experimentais

Conforme mencionado anteriormente, o conjunto de dados experimentais a ser utilizado é aquele fornecido por DONG e MOYS [6]. Tais dados foram gerados a partir de um experimento de colisão entre uma partícula de aço contra uma superfície plana, também de aço. DONG e MOYS [6] ressaltam que as partículas são feitas de aço cromado com dureza média de Vickers de 952 ao passo que tal especificação não é explicitamente feita para a superfície plana de aço cromado. Dessa forma, no presente trabalho, considerou-se que a superfície e as partículas são feitas do mesmo tipo de aço. O método empregado na condução dos experimentos consiste na liberação em queda livre da partícula a uma altura fixa de 90 *cm* em relação ao plano, o que fornece uma velocidade de impacto constante de 4,2 *m/s*. O plano é inclinável, de forma que colisões oblíquas puderam ser realizadas para ângulos de inclinação entre 0 e 60 graus, com incrementos dados de 10 em 10 graus. O aparato experimental desse trabalho, permitiu a execução de experimentos onde a partícula possuía velocidade angular inicial, porém, no presente texto, serão considerados apenas os dados para os quais a partícula apresenta velocidade angular inicialmente nula.

Em seu trabalho, DONG e MOYS [6] utilizaram o modelo de esfera rígida para simular os conjuntos de dados obtidos tanto para os casos onde a partícula possuía velocidade angular inicial quanto para os casos onde a mesma não possuía velocidade angular inicial e chegaram à conclusão de que, para casos sem velocidade angular inicial, o modelo de esfera rígida era suficiente para prever o comportamento pós colisional da partícula ao passo que, nos casos onde a partícula possuía velocidade angular inicial o modelo falhava em simular adequadamente o comportamento da partícula após a colisão. Os autores finalizam o trabalho afirmando que o desenvolvimento de modelos de força de contato capazes de descrever situações para as quais as partículas possuam velocidade angular inicial permanece um desafio [6]. Trabalhos anteriores demonstram que atualmente os modelos de força de contato mais utilizados ainda encontram algumas dificuldades para descrever corretamente os fenômenos associados ao contato entre partículas em situações simples, como os casos onde não há velocidade angular inicial [5, 47].

A utilização do conjunto de dados para partículas com velocidades angulares não-nulas requereria um estudo detalhado acerca da adequação do modelo de ZHENG *et al.* [4] para a simulação dos mesmos. A utilização de dados de colisão com velocidade angular inicial não-nula sem o estudo mencionado caracterizaria uma falha

Tabela 3.1: Propriedades mecânicas do material utilizado no experimento de DONG e MOYS [6] [5, 6].

Raio (m)	$2,225 \times 10^{-2}$
Densidade (kg/m^3)	$7,766 \times 10^3$
Razão de Poisson ($-$)	0,3
Módulo de Young (N/m^2)	$2,1 \times 10^{11}$

metodológica visto que o procedimento desenvolvido para a obtenção dos parâmetros do modelo de ZHENG *et al.* [4] poderiam falhar tanto por problemas do método proposto, quanto por problemas relativos à não adequação do modelo para a descrição desses dados. Além disso, trabalhos anteriores indicam que, em casos para os quais os quais a partícula possui velocidade angular inicial, o torque de rolamento pode ser relevante e é importante lembrar que a ausência do torque de rolamento foi uma hipótese adotada na modelagem do contato na presente tese. Dessa maneira, considera-se justificável a exclusão dos dados obtidos por DONG e MOYS [6] para casos onde a velocidade angular inicial é diferente de zero.

Para a realização do conjunto de medidas que caracterizam o experimento de DONG e MOYS [6], foi utilizada uma partícula esférica de 44,5 mm de diâmetro cujas propriedades mecânicas são apresentadas na tabela 3.1. É importante ressaltar que as medições foram inferidas a partir de imagens de câmeras de alta velocidade, onde todo o movimento ocorreu ao longo de um plano. Dessa forma, justifica-se a abordagem bidimensional adotada para as simulações contidas nesta tese. As variáveis obtidas a partir dos experimentos foram os coeficientes de restituição normal e tangencial bem como a velocidade angular após a colisão. É importante ressaltar que os dados obtidos por DONG e MOYS [6] foram publicados de forma a mostrar todas as réplicas realizadas, o que é de extrema importância para sua utilização em análises de estimação de parâmetros, conforme objetivaram os autores do artigo.

Apesar das simulações para a análise comparativa dos modelos ter utilizado os dados de DONG e MOYS [6], é importante frisar que a etapa de verificação da implementação dos modelos utilizou os resultados numéricos obtidos por KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5] e que se basearam nos dados experimentais de FOERSTER *et al.* [7]. Conforme mencionado no capítulo 2, os resultados experimentais de FOERSTER *et al.* [7] são de difícil reprodução visto que foram publicados com escassez de informações necessárias para sua simulação. As condições iniciais não são claras e nem mesmo a descrição do método experimental fornece informações suficientes para que as mesmas sejam inferidas. O artigo de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5], apesar de utilizar os dados de FOERSTER *et al.* [7], não faz menção à tais informações.

Tabela 3.2: Propriedades mecânicas dos materiais envolvidos no experimento de FOERSTER *et al.* [7] considerado.

Propriedade	Vidro	Alumínio
Raio (m)	$1,59 \times 10^{-3}$	∞
Densidade (kg/m^3)	$2,5 \times 10^3$	$2,7 \times 10^3$
Razão de Poisson ($-$)	0,22	0,33
Módulo de Young (N/m^2)	$7,1 \times 10^{10}$	$6,9 \times 10^{10}$

O presente autor buscou na tese de doutorado [90] que originou o artigo publicado por FOERSTER *et al.* [7] as informações necessárias e encontraram apenas alguns indicativos a respeito das condições a serem utilizadas.

O aparato experimental usado por FOERSTER *et al.* [7], é análogo ao descrito para DONG e MOYS [6], porém, aparentemente, a magnitude da velocidade de impacto é mantida em $2,0 m/s$. Essa informação, em conjunto com os pontos experimentais, permitiu inferir as prováveis condições iniciais para as componentes normal e tangencial da velocidade de contato. Neste trabalho, apenas os dados do experimento de colisão entre uma esfera de vidro e um plano de alumínio foram considerados. As propriedades mecânicas de cada um estão apresentados na tabela 3.2.

Para fins de verificação do código, os dados de FOERSTER *et al.* [7] foram suficientes, já que havia a solução numérica de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5] para comparação. É importante ressaltar que KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5] realizaram a estimação dos parâmetros para os modelos $M1$ e $M2$ para o sistema estudado por FOERSTER *et al.* [7], o que facilitou o trabalho de verificação do código. Porém, para utilização nas etapas seguintes da metodologia, os dados de FOERSTER *et al.* [7] carregavam uma quantidade muito grande de imprecisões e por isso foram substituídos pelos dados experimentais de DONG e MOYS [6].

3.1.2 Implementação computacional

A implementação computacional dos modelos de contato utilizados nesse trabalho ocorreu em duas partes. Em um primeiro momento, os modelos de CUNDALL e STRACK [2] e TSUJI *et al.* [3] foram implementados em um código próprio desenvolvido em linguagem C++ para simular o caso específico de uma colisão bidimensional do tipo esfera-plano. Em um momento posterior, o modelo de ZHENG *et al.* [4] foi implementado no LIGGGHTS, visto que o *software* está montado sobre uma estrutura robusta de dados e que, possivelmente, será utilizado em uma eventual continuação desse trabalho.

Para o programa desenvolvido neste trabalho, foi definida uma estrutura de classes de forma que o programa funcionasse de acordo com um paradigma de programação orientada a objetos. A classe principal desse programa é denominada *Simulador* e contém as classes *Integrador*, *Particula*, *Contato* e *Modelos*. Além de conter essas classes, a classe principal conta ainda com funções que permitem realizar o pré-processamento dos dados através da leitura dos arquivos de entrada, bem como o pós-processamento, criando os arquivos de saída tanto no formato texto, quanto na forma de gráficos.

A classe *integrador* é aquela que realiza a solução do sistema de equações utilizando o método de Euler explícito. Essa classe tem acesso para leitura e modificação das variáveis armazenadas na classe *Particula*, visto que precisa atualizá-las para o novo instante de tempo. A classe *Particula*, por sua vez, armazena todas as propriedades mecânicas da mesma, bem como as variáveis que definem seu estado em determinado instante, com a posição do centro de massa e suas velocidades. Tal classe gera uma cópia para que seja utilizada em cálculos por outras classes, como por exemplo a classe *Contato*. Essa última é responsável por criar uma estrutura representativa do plano e utilizá-la em conjunto com uma cópia da partícula para calcular as propriedades efetivas e as variáveis que surgem em decorrência do contato, como por exemplo as deformações e a velocidade do ponto de contato. As informações geradas nessa classe são então acessadas pela classe *Modelos*, a qual contém a implementação das equações dos modelos *M1* e *M2*, e são utilizadas para que sejam calculadas as componentes das forças de contato. Esses resultados são então acessados pelo integrador que, em conjunto com as informações obtidas em um instante t e relativas à partícula, são utilizadas para que se calcule o estado da partícula no novo instante de tempo $t + \Delta t$. A estruturação do programa da maneira descrita, permitiu que se obtivesse a flexibilidade e a automatização necessárias para a simulação de tantos casos, gerando um grande volume de resultados de forma otimizada.

O modelo *M3*, pelos motivos já mencionados, foi implementado no LIGGGHTS. Nesse programa, a implementação de um novo modelo pode seguir duas vias onde a primeira consiste na simples cópia de um modelo já existente, alterando apenas as suas equações, enquanto a segunda requer um pouco mais de conhecimento da estrutura de classes do código, pois baseia-se no registro de novas variáveis para posterior utilização. O primeiro modo de implementação é muito útil para quando se tem modelos de fácil manipulação matemática, visto que é necessário escrevê-lo no formato do modelo LSD, que é como os modelos estão implementados no LIGGGHTS. Além disso, é necessário que as únicas propriedades utilizadas nesse modelo já estejam definidas no código original, o que não é o caso para do modelo *M3*, visto que os coeficientes de viscosidade não estão definidos no LIGGGHTS, por

exemplo. Nesse contexto, optou-se pela segunda forma de implementação.

A classe do LIGGGHTS que define o *template* de um modelo no código é chamada *contact_models*. Nessa classe estão definidas as funções que permitem fazer as configurações do modelo, inseri-lo na lista de modelos registrados no código fonte, permitir o acesso à lista de propriedades definidas, entre outras atividades auxiliares. O novo modelo foi implementado tomando-se como base o arquivo de um modelo já existente e devidamente registrado na lista do *software*. Tal arquivo foi utilizado para que, de forma análoga, fossem realizados os ajustes necessários para o registro do novo modelo, evitando-se assim maiores aprofundamentos na estrutura de dados do código. Foi criado, então, o arquivo *normal_model_zheng.h*, onde constarão as equações do modelo *M3*. Conforme dito anteriormente, algumas propriedades necessárias para a implementação do modelo de ZHENG *et al.* [4] não constam na lista daquelas já registradas no código fonte. Esta inserção é realizada a partir da utilização de duas classes: *property_registry* e *global_properties*. A primeira delas é responsável pelo registro da nova propriedade a ser criada. Nela estão definidas funções que permitem a utilização das propriedades contidas na lista. Já a classe *global_properties* é responsável pela definição das propriedades, já devidamente registradas na lista. É nessa classe que podem ser definidos, por exemplo, os cálculos das propriedades efetivas.

O procedimento descrito foi o utilizado para realizar a implementação do modelo de força normal. A implementação do modelo tangencial, porém, segue exatamente o mesmo padrão. A única diferença reside na configuração do cálculo da deformação tangencial, realizada através da função *add_history_value*, membro da classe *IContactHistorySetup*, a qual por sua vez é definida na classe *contact_interface*. Essa configuração é realizada durante a construção do modelo tangencial *tangential_history_zheng* a partir do *template TangentialModel*. O objetivo dessa configuração é apenas informar ao código que a deformação tangencial deve ser calculada de forma diferente da normal, considerando-se o histórico da aplicação da força tangencial.

3.1.3 Simulações

Os códigos implementados foram utilizados para realizar as simulações que permitiram a análise comparativa dos modelos de força de contato selecionados. Tais simulações utilizaram as condições iniciais calculadas a partir das informações dadas nos experimentos. Para os experimentos de FOERSTER *et al.* [7], conforme discutido, considerou-se a magnitude da velocidade de impacto constante e igual a $2,0 \text{ m/s}$ e a partir dos valores da velocidade tangencial adimensional inicial, a variável escolhida para representar a variável independente, foi possível obter as condições iniciais das componentes normal e tangencial da velocidade. Já no caso

de DONG e MOYS [6], o processo de obtenção das condições iniciais foi muito mais simples, visto que as informações sobre a velocidade de impacto e sobre os ângulos de incidência foram claramente publicadas. Sendo assim, de posse dessas informações, o cálculo das condições iniciais para as velocidades normal e tangencial foi direto, sem necessidade de suposições.

O conhecimento dos valores dos parâmetros é imprescindível para que as simulações possam ser realizadas. Neste trabalho, os parâmetros da força normal do modelo *M1* foram obtidos diretamente do trabalho de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5], os quais obtiveram tais valores através de um procedimento de estimação de parâmetros. Para a componente tangencial foi utilizada a relação proposta por SCHAFFER *et al.* [91]. Essa última baseia-se em uma proposta de modificação da razão entre as rigidezes tangencial e normal, calculada a partir da equação 3.7 para contatos elásticos, de forma que sua utilização possa ser estendida para o uso em sistemas sujeitos à colisões inelásticas. SCHAFFER *et al.* [91] chegaram à relação dada pela equação 3.8, a qual somente é válida para modelos lineares.

$$\kappa = \frac{\frac{1 - \nu_a}{G_a} + \frac{1 - \nu_b}{G_b}}{\frac{1 - 0,5\nu_a}{G_a} + \frac{1 - 0,5\nu_b}{G_b}} \quad (3.7)$$

$$k_t = \kappa m_{eff} \frac{\pi^2}{t_c^2} \quad (3.8)$$

Na equação 3.7, G representa o módulo de cisalhamento enquanto os subíndices a e b representam os materiais dos quais são feitas as partículas. Na equação 3.8, m_{eff} denota a massa efetiva dos corpos em contato e t_c , o tempo de contato, sendo calculados de acordo com as equações 2.74 e 2.73, respectivamente.

Para o modelo *M2*, os parâmetros tanto da componente normal da força quanto da componente tangencial, são obtidos pelas equações 2.96, 2.97 e 2.98 conforme descrito no capítulo 2. É necessário salientar que os valores da constante empírica α , presente no modelo *M2*, utilizados na presente tese são 0,1 para o sistema vidro/aço utilizado por FOERSTER *et al.* [7] e 0,015 para o sistema aço/aço utilizado por DONG e MOYS [6]. Tais valores foram obtidos com base na relação heurística proposta por TSUJI *et al.* [3], conforme mencionado no Capítulo 2 e resumido no apêndice B. Os valores dos coeficientes de restituição normal para a colisão entre a partícula de vidro e o plano de alumínio é de 0,831 e para o choque entre a esfera de aço contra o plano de aço, é de 0,95, conforme reportado por KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5]. Os coeficientes de *damping* normal e tangencial foram considerados iguais tanto para o modelo *M1* quanto para o *M2*.

Os coeficientes de viscosidade do modelo *M3* não são conhecidos e não possuem nenhum método de obtenção, sendo a única fonte de informação a respeito dos mes-

Tabela 3.3: Valores dos parâmetros para os modelos $M1$, utilizados nas simulações dos experimentos de FOERSTER *et al.* [7].

$k_n(N/m)$	$\gamma_n(kg/s)$	$k_t(N/m)$	$\gamma_t(kg/s)$
$3,6479 \times 10^5$	0,6137	$3,0398 \times 10^5$	0,6137

Tabela 3.4: Valores dos parâmetros para os modelos $M2$, utilizados nas simulações dos experimentos de FOERSTER *et al.* [7].

$\tilde{k}_n(N/m^{3/2})$	$\tilde{\gamma}_n(Ns/m)$	$\tilde{k}_t(N/m^{3/2})$	$\tilde{\gamma}_t(Ns/m)$
$2,0202 \times 10^9$	29,1614	$4,9550 \times 10^9$	29,1614

mos o artigo de ZHENG *et al.* [4] onde os autores propõem, de forma aparentemente heurística, uma relação para que se tenha um valor base dos mesmos, de maneira que uma simulação possa ser conduzida. As relações propostas por ZHENG *et al.* [4] e dadas pelas equações 2.116 e 2.117 foram apresentadas no Capítulo 2 e são adotadas nessa tese de forma que os modelos $M1$, $M2$ e $M3$ possam ser comparados. Os valores adotados para as simulações obedecem os valores de referência dados por ZHENG *et al.* [4] para o primeiro e o segundo coeficientes de viscosidade dos materiais dos quais são feitas as partículas, conforme dados pelas equações 2.116 e 2.117.

As simulações a que se refere essa seção são tanto aquelas realizadas com os dados de DONG e MOYS [6] para a comparação dos modelos, quanto as realizadas a partir dos dados de FOERSTER *et al.* [7] para a verificação dos códigos implementados. Dessa forma, foram gerados conjuntos de parâmetros diferentes para cada uma delas, levando-se em consideração o que foi previamente discutido. Os valores dos parâmetros de cada um dos modelos utilizados nas simulações estão contidos nas Tabelas 3.3, 3.4, 3.5, 3.6 e 3.7.

É importante ressaltar que os coeficientes de fricção utilizados nessas simulações também foram obtidos a partir do trabalho de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5]. Para

Tabela 3.5: Valores dos parâmetros para os modelos $M1$, utilizados nas simulações dos experimentos de DONG e MOYS [6].

$k_n(N/m)$	$\gamma_n(kg/s)$	$k_t(N/m)$	$\gamma_t(kg/s)$
$7,1863 \times 10^6$	1,4188	$5,9181 \times 10^6$	1,4188

Tabela 3.6: Valores dos parâmetros para os modelos $M2$, utilizados nas simulações dos experimentos de DONG e MOYS [6].

$k_n(N/m^{3/2})$	$\tilde{\gamma}_n(Ns/m)$	$k_t(N/m^{3/2})$	$\tilde{\gamma}_t(Ns/m)$
$2,2935 \times 10^{10}$	$1,3575 \times 10^3$	$5,6664 \times 10^{10}$	$1,3575 \times 10^3$

Tabela 3.7: Valores dos parametros para o modelo $M3$, utilizados nas simulações.

Dados	$\eta_1(Pa \cdot s)$	$\eta_2(Pa \cdot s)$
FOERSTER <i>et al.</i> [7]	$3,7962 \times 10^4$	0,0
DONG e MOYS [6]	$1,1538 \times 10^5$	0,0

o conjunto de dados experimentais obtidos por FOERSTER *et al.* [7], o coeficiente de fricção apresenta um valor de 0,125 enquanto que para os dados obtidos por DONG e MOYS [6], esse mesmo parâmetro assume o valor de 0,091.

3.2 Análise de Sensibilidade

Após realizar as simulações, uma análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação aos parâmetros foi executada com o objetivo de avaliar o potencial de obtenção dos mesmos através de um procedimento de estimação de parâmetros. Os dados utilizados para a realização dessa análise de sensibilidade foram aqueles obtidos por DONG e MOYS [6]. Nesse momento é importante lembrar que o modelo $M3$ possui dois parâmetros a serem determinados, a saber, os primeiro e segundo coeficientes de viscosidade, η_1 e η_2 , respectivamente.

Os parâmetros η_1 e η_2 são valores constantes e independentes do caso simulado. Um par de valores deve então ser especificado de maneira a tornar possível a simulação de todas as condições experimentais disponíveis. Como o objetivo de uma análise de sensibilidade é avaliar a possível influência que variações nos parâmetros possuem sobre a resposta final do problema, faz-se necessário gerar conjuntos de simulações das mesmas condições experimentais utilizando, para cada um desses conjuntos, diferentes pares dos parâmetros. Os diferentes pares de parâmetros foram obtidos com base nos limites inferiores e superiores, bem como nos valores de referência das relações heurísticas propostas por ZHENG *et al.* [4] descritas no Capítulo 2.

Valores-base para os parâmetros η_1 e η_2 foram definidos utilizando-se suas respectivas relações de referência, Equação 2.116 e 2.117, dando origem aos valores

Tabela 3.8: Valores de parâmetros utilizados na análise de sensibilidade do modelo *M3*.

Parâmetro	Base	Inferior	Superior
η_1	$2,1 \times 10^5$	$2,1 \times 10^3$	$2,1 \times 10^6$
η_2	0,0	$2,1 \times 10^4$	$2,1 \times 10^6$

$\eta_{1,base}$ e $\eta_{2,base}$. Dois valores adicionais foram calculados para cada um dos dois parâmetros. Tais valores, denotados por $\eta_{1,inferior}$, $\eta_{1,superior}$, $\eta_{2,inferior}$ e $\eta_{2,superior}$, foram obtidos a partir dos limites inferiores e superiores de η_1 e η_2 , dados pelas equações 2.114 e 2.115. A partir desses valores, cinco diferentes pares (η_1, η_2) foram definidos: $(\eta_{1,base}, \eta_{2,base})$, $(\eta_{1,base}, \eta_{2,inferior})$, $(\eta_{1,base}, \eta_{2,superior})$, $(\eta_{1,inferior}, \eta_{2,base})$ e $(\eta_{1,superior}, \eta_{2,base})$. É importante ressaltar que os valores de referência e inferior de η_2 sugeridos por ZHENG *et al.* [4] são coincidentes, dessa maneira, arbitrou-se um valor de 10^{-1} para a razão entre η_2 e η_1 de forma a analisar um valor de razão menor que a unidade. Os valores obtidos e utilizados na análise de sensibilidade estão agrupados na tabela 3.8.

3.3 Estimação de Parâmetros

O processo de estimação dos parâmetros transcorreu inicialmente a partir da definição da função objetivo como sendo a função de máxima verossimilhança. Para que tal função seja válida, duas hipóteses fundamentais devem ser assumidas: Hipótese do experimento bem-feito e hipótese do modelo perfeito [92, 93]. A primeira admite que os desvios experimentais seguem uma distribuição normal de probabilidades com média nula visto que, se o experimento é bem-feito, não deve apresentar nenhuma tendência, de forma que as medições oscilarão em torno do valor real da variável medida. Já a hipótese do modelo perfeito, assume que o modelo descreve perfeitamente a realidade observável e que, portanto, qualquer desvio das medições em relação à resposta fornecida pelo modelo será atribuído ao erro experimental [92–94]. O presente autor assumiu como válidas tais hipóteses, de forma que a função de máxima verossimilhança foi utilizada nessa tese. Tal função possui a forma da equação 3.9.

$$F_{obj} = (\mathbf{y}^e - \mathbf{y}^m)^T \mathbf{V}_y^{-1} (\mathbf{y}^e - \mathbf{y}^m) \quad (3.9)$$

Na equação 3.9, \mathbf{y} representa um vetor contendo as variáveis resposta medidas no procedimento experimental enquanto que \mathbf{V}_y é a matriz de covariância dos dados. Os índices m e e denotam as variáveis fornecidas pelo modelo e pelos experimentos,

respectivamente. Considerando-se a definição do vetor \mathbf{y} dada anteriormente, o vetor \mathbf{y}^e deve armazenar as variáveis que foram medidas nos experimentos de DONG e MOYS [6] e o vetor \mathbf{y}^m , por sua vez, deve armazenar os valores preditos pelo sistema através do uso do modelo $M3$ para essas mesmas variáveis. Logo, tais vetores devem ser representados pela forma geral do vetor \mathbf{y} dada pela Equação 3.10

$$\mathbf{y} = [e_{n,1}\dots e_{n,NE} | e_{t,1}\dots e_{t,NE} | \omega_{z,1}\dots \omega_{z,NE}]^T \quad (3.10)$$

onde e_n e e_t são os coeficientes de restituição nas direções normal e tangencial, respectivamente, ω_z é a componente perpendicular ao plano no qual o contato ocorre. Nesse momento é importante lembrar que os experimentos realizados por DONG e MOYS [6] foram projetados de forma a reproduzirem um contato bidimensional, de forma que a velocidade angular seja perpendicular ao plano de contato. Na representação desse experimento adotada na presente tese, o plano de contato é coincidente com o plano XY e, portanto, a velocidade angular possui somente a componente Z. Por essa razão, a velocidade angular é denotada por ω_z na Equação 3.10. Na Equação 3.10 os subíndices $i = 1, \dots, NE$ utilizados em todas as variáveis, representam as diferentes condições experimentais para as quais o contato foi realizado.

É importante ressaltar que os dados publicados por DONG e MOYS [6] fornecem triplicatas para os experimentos onde apenas os valores das variáveis dependentes são mostrados com flutuações. Dessa forma, considerou-se, nessa tese, para efeitos de cálculos da função objetivo, que não há erro de medição nas variáveis independentes. Além disso, as variáveis nas diferentes condições experimentais não estão correlacionadas, de forma que considerou-se que são independentes. Nesse contexto, a matriz de covariâncias torna-se diagonal, e seus elementos são dados pelas variâncias das variáveis dependentes em cada condição experimental [92]. Essa variância foi calculada com base nas triplicatas publicadas por DONG e MOYS [6].

O procedimento de estimação de parâmetros é, fundamentalmente, um problema de otimização. O *software* NLOpt [95] foi utilizado para resolver tal problema sendo uma biblioteca livre e de código aberto desenvolvida com o objetivo principal de auxiliar na solução de problemas de otimização não-linear. O paradigma de programação utilizado em seu desenvolvimento é a orientação a objetos sendo a linguagem utilizada em sua programação o C++, a mesma utilizada pelo simulador LIGGGHTS. Os algoritmos disponíveis no otimizador são divididos nas classes contendo os algoritmos de busca global e outra contendo aqueles de busca local. Cada uma das classes é subdividida em outras duas onde é possível separar os métodos de busca que usam informações da derivada da função objetivo daqueles que não fazem uso da mesma.

A forma de solução do problema de otimização posto foi dividido em duas partes

onde, primeiramente, adotou-se um método de solução global e, em seguida, um refino da solução encontrada foi realizado a partir da utilização de um método de busca local. Os contornos da região de busca foram definidos de acordo com os limites propostos por ZHENG *et al.* [4] para os coeficientes de viscosidade, conforme mostrado no conjunto de inequações 3.11.

$$\begin{aligned} 10^{-8}s &\leq \frac{\eta_1}{E} \leq 10^{-5}s \\ 0 &\leq \frac{\eta_2}{\eta_1} \leq 10 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Devido à grande extensão da região de busca original, foi proposta uma mudança de variáveis. Os parâmetros de busca originais, que seriam dados pelos dois coeficientes de viscosidade, foram substituídos pelas variáveis x_1 e x_2 , cujas definições são dadas pelas equações 3.12 e 3.13.

$$x_1 \doteq \log_{10} \left(\frac{\eta_1}{E} \right) \tag{3.12}$$

$$x_2 \doteq \frac{\eta_2}{\eta_1} \tag{3.13}$$

A partir das definições de x_1 e x_2 , as fronteiras da região de busca foram reduzidas àquelas mostradas pelo conjunto de inequações 3.14.

$$\begin{aligned} 3,32 &\leq x_1 \leq 6,32 \\ 0 &\leq x_2 \leq 10 \end{aligned} \tag{3.14}$$

O método de otimização global utilizado na primeira etapa da estimação foi o *Controlled Random Search* (CRS), um algoritmo de busca aleatória proposto por KAELO e ALI [96]. Tal método consiste em, dada uma população inicial de pontos distribuídos ao longo da região de busca que, a partir de sucessivos cálculos da função objetivo em cada um desses pontos, evoluem por um algoritmo randômico até que o ponto de mínimo seja encontrado. Esse método foi utilizado partindo da população inicial padrão, dada para o caso em questão, por 30 partículas e, em seguida, dobrando-se a população, sucessivamente, até que o valor encontrado para a função objetivo atingisse um valor considerado convergido. O número máximo de partículas utilizado nesse trabalho foi de 7680. Então, tendo como estimativa inicial dos parâmetros a solução global, procedia-se com o refino da otimização utilizando-se o método de Powell [97] para realizar a busca local. Os critérios de parada para o método global foram erros relativos de 10^{-4} tanto para a função objetivo quanto para

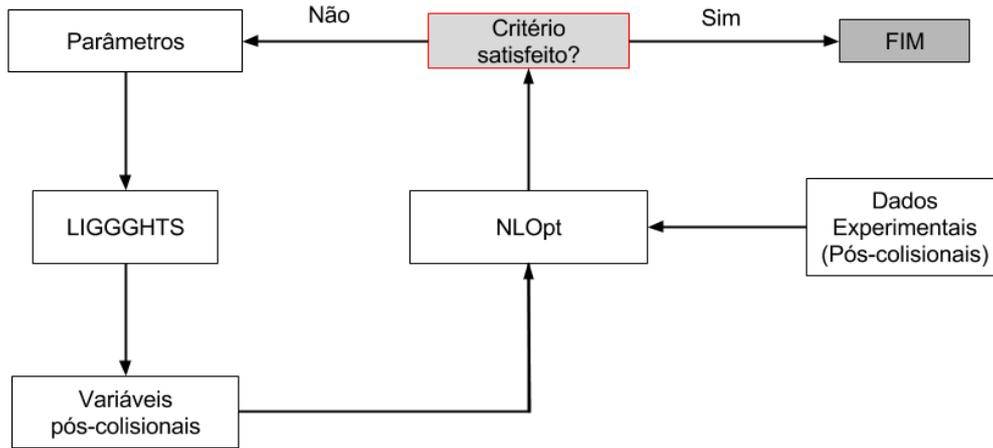


Figura 3.2: Esquemática da integração do simulador, LIGGGHTS, com o otimizador, NLOpt.

as variáveis otimizadas, ao passo que, para a busca local, tais critérios assumiram o valor de 10^{-8} . O número máximo de avaliações para a função objetivo também foi utilizado como critério de parada, tendo sido definido como 10^6 . É importante ressaltar que o otimizador encerra sua busca quando ao menos um dos critérios é atingido.

Para que o problema de estimação como um todo seja solucionado com sucesso, é necessário realizar uma integração entre o simulador e o otimizador, de forma que os resultados de um alimentem o outro. A troca de informações entre os mesmos se dá via arquivos. O controle da otimização é feito pelo otimizador, o qual chama o simulador a cada vez que precisa recalcular a função objetivo, devido às alterações dos valores dos parâmetros. O otimizador é iniciado com um conjunto de parâmetros os quais são inseridos no arquivo de entrada que alimentará o simulador. Passado ao LIGGGHTS o arquivo de entrada, a simulação é iniciada para uma determinada condição experimental. É importante ressaltar que cada uma das condições experimentais representa uma simulação diferente, de forma que a cada simulação, o arquivo de entrada é modificado para que as condições iniciais sejam atualizadas. Ao término das simulações de todas as condições experimentais, o otimizador utiliza os resultados obtidos e os dados experimentais lidos de um outro arquivo para calcular a função objetivo e, a partir de seu valor, decidir os próximos passos da otimização, baseado nas regras do método utilizado. A figura 3.2 mostra, de forma simplificada o processo de integração entre o NLOpt e o LIGGGHTS.

3.3.1 Avaliação dos parâmetros obtidos

O bom procedimento de estimação de parâmetros não termina quando estes são calculados. É necessário que a qualidade desses parâmetros seja avaliada. Nesse

trabalho, algumas ferramentas foram utilizadas para tal fim. A primeira forma de avaliar o ajuste, foi simular novamente os dados experimentais de DONG e MOYS [6] utilizando os valores ótimos obtidos, em vez dos valores-base, previamente usados. Nesse contexto, definiu-se a variável ϵ , a qual fornece uma ideia da adequação das respostas do modelo em relação ao intervalo de confiança dos dados experimentais. Tal variável é definida conforme mostrado na equação 3.15.

$$\epsilon_i \doteq \frac{1}{NE} \sum_{j=1}^{NE} \frac{|y_{ij}^m - y_{ij}^e|}{\epsilon_{ij,95\%}} \quad (3.15)$$

Na equação 3.15, os índices i e j representam uma determinada variável e a condição experimental na qual foi medida, respectivamente. Além disso, NE denota o número de experimentos e $\epsilon_{ij,95\%}$ é o erro da variável i na condição experimental j , considerando-se um grau de confiança de 95%. A presente definição permite inferir que a qualidade do ajuste foi boa caso a mesma seja menor que um, enquanto que, caso contrário, pode-se dizer que o ajuste não foi satisfatório pois, na média, as respostas do modelo cairão fora da região de confiança dos experimentos. Além de ϵ , o desvio médio, também foram avaliados os valores máximos desses desvios, ϵ_{max} .

Para avaliar o ajuste à luz da estatística, recorreu-se ao teste χ^2 para a função objetivo. A função de máxima verossimilhança, por definição, segue uma distribuição χ^2 , o que faz com que seja possível obter o intervalo onde é esperado que seu valor esteja contido, dado um grau de confiança pré-estabelecido e o número de graus de liberdade do problema. Segundo esse teste, caso o valor obtido para a função objetivo após a estimação esteja dentro do intervalo definido pelo teste χ^2 , o ajuste é considerado satisfatório. Por último, a partir dos resultados simulados utilizando-se os parâmetros ótimos e dos dados experimentais, os desvios foram calculados e a validade da hipótese do experimento bem feito foi testada.

Além da avaliação do ajuste em si, a qualidade dos parâmetros também foi avaliada. Para isso foi calculado o intervalo de confiança para ambos os parâmetros, ou em outras palavras, a incerteza dos mesmos. Tal cálculo foi realizado considerando-se que a função objetivo é linearizável próximo ao ponto de mínimo e, após sua linearização, obteve-se uma aproximação para a matriz Hessiana da mesma, utilizando-se a hipótese do experimento bem feito para desprezar os termos de ordem superior, conforme proposto por PINTO e SCHWAAB [92]. A partir da matriz de sensibilidade do modelo, \mathbf{B} , e da matriz aproximação adotada para a matriz Hessiana, \mathbf{H}_α , dada pela equação 3.16, calculou-se a matriz de covariância dos parâmetros, \mathbf{V}_α , de acordo com o proposto por PINTO e SCHWAAB [92] e mostrado na equação 3.17.

$$\mathbf{H}_\alpha = 2\mathbf{B}^T \mathbf{V}_\alpha^{-1} \mathbf{B} \quad (3.16)$$

$$\mathbf{V}_\alpha = (\mathbf{B}^T \mathbf{V}_\alpha^{-1} \mathbf{B})^{-1} \quad (3.17)$$

Nas equações 3.16 e 3.17, o índice α denota que as matrizes estão sendo calculadas em relação aos parâmetros do modelo.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Neste capítulo, os resultados obtidos ao longo da presente tese serão apresentados. Será seguida a ordem cronológica da execução da metodologia, conforme descrita no capítulo anterior. Primeiramente os resultados da análise comparativa serão apresentados e discutidos, juntamente com a verificação dos códigos implementados, para mostrar o potencial do modelo de interesse. Em seguida, os resultados da análise de sensibilidade mostrarão a possibilidade de obtenção dos parâmetros através de um procedimento de estimação. Tal procedimento terá seus resultados apresentados e discutidos, encerrando-se com uma avaliação da análise dos parâmetros obtidos à luz de ferramentas estatísticas.

4.1 Análise Comparativa de Modelos

4.1.1 Verificação do código

A análise dos modelos de contato teve como primeiro passo a implementação dos mesmos em um código próprio. A verificação se deu a partir da comparação dos resultados simulados para os experimentos de FOERSTER *et al.* [7] com os resultados numéricos obtidos por KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5], para os modelos $M1$ e $M2$. A figura 4.1 mostra os resultados obtidos para todos os modelos, utilizando-se os códigos implementados. É possível observar que os resultados obtidos para os modelos $M1$ e $M2$ aproximam-se dos resultados numéricos publicados previamente por KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5]. Tal comportamento foi considerado satisfatório a nível de verificação do código visto que as discrepâncias existentes provavelmente estão associadas às incertezas nas condições iniciais. Conforme já mencionado antes, o trabalho de FOERSTER *et al.* [7] não fornece claramente as informações necessárias para a simulação e, de forma similar, KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5] também não as reporta.

Em relação ao modelo $M3$, a verificação torna-se um pouco mais complexa devido

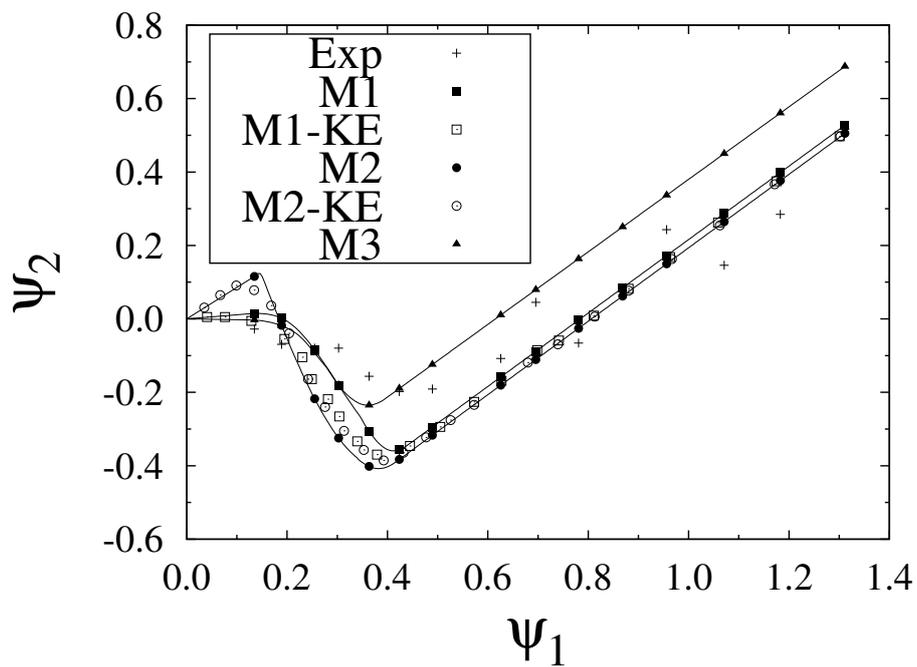


Figura 4.1: Verificação das implementações dos modelos, representados pelos símbolos pretos em conjunto com as linhas contínuas. Os símbolos brancos representam as soluções obtidas por KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5] para os modelos $M1$ e $M2$. As variáveis ψ_1 e ψ_2 foram definidas no Capítulo 2 e são dadas pelas equações 2.118 e 2.119, respectivamente.

ao fato do mesmo ser recente e possuir poucos resultados com os quais possa ser comparado. O trabalho de ZHENG *et al.* [4] que deu origem ao modelo *M3* apresenta um caso-teste de uma colisão oblíqua entre uma esfera e um plano feitos de materiais hipotéticos, para o qual, apesar de fornecer com clareza as condições iniciais, não fornece os valores de parâmetros η_1 e η_2 utilizados para simulá-lo. Nesse contexto, alguns valores dos parâmetros η_1 e η_2 foram utilizados para verificar seu efeito no comportamento da solução do modelo implementado, conforme mostram as Figuras 4.2 e 4.3 para a força normal e para o coeficiente de restituição normal.

Primeiramente, os casos apresentados nas figuras 4.2 e 4.3 foram realizadas utilizando-se os valores de referência dos parâmetros conforme sugerido por ZHENG *et al.* [4] e apresentado nas equações 2.116 e 2.117. Os resultados mostram que ao se utilizar tais valores consideráveis discrepâncias em relação aos resultados publicados por ZHENG *et al.* [4] surgem. No referido trabalho, ZHENG *et al.* [4] realizaram simulações via método dos elementos finitos (FEM) utilizando materiais hipotéticos, cujos resultados foram utilizados no lugar de dados experimentais. Visto que ZHENG *et al.* [4] não utilizaram os valores de referência para os parâmetros nas simuações de seus casos-testes, outros possíveis valores foram testados de acordo com os limites estabelecidos por ZHENG *et al.* [4] para os parâmetros. Tais limites foram discutidos no Capítulo 2 e são dados pelas equações 2.114 e 2.115. Como é possível observar na Figura 4.2, a razão $\eta_2/\eta_1 = 0,5$ foi a que apresentou maior concordância com os resultados obtidos via FEM por ZHENG *et al.* [4]. Esse valor foi utilizado para o cálculo dos valores de η_1 e η_2 que foram utilizados nas simulações apresentadas na Figura 4.3. Da mesma forma que para a análise da componente normal da força de contato, apresentada na Figura 4.2, os parâmetros de referência propostos por ZHENG *et al.* [4] geraram resultados muito discrepantes daqueles obtidos via FEM pelos mesmos autores. Ainda, a utilização dos valores de η_1 e η_2 obtidos com base nos resultados da Figura 4.2 apresentaram maior concordância com os dados das simulações FEM de ZHENG *et al.* [4]. Considerando-se que ZHENG *et al.* [4] tenham utilizado na simulações de seus casos-testes o material hipotético ao qual se referem em todo o seu trabalho, de maneira que as propriedades elásticas são as fornecidas pelos autores, conclui-se que as relações utilizadas para a obtenção dos parâmetros viscosos não foram aquelas sugeridas como referência ao longo de seu próprio trabalho, o que seria de se esperar visto que os autores não tornaram públicos os valores utilizados.

O conjunto de análises realizada para avaliar a implementação da força normal bem como os resultados obtidos para a simulação dos dados de FOERSTER *et al.* [7], reportados na forma de velocidades tangenciais adimensionais e mostrados na Figura 4.1, apresentaram resultados considerados satisfatórios dentro do contexto apresentado. Dessa forma, o autor assumiu que o código está suficientemente veri-

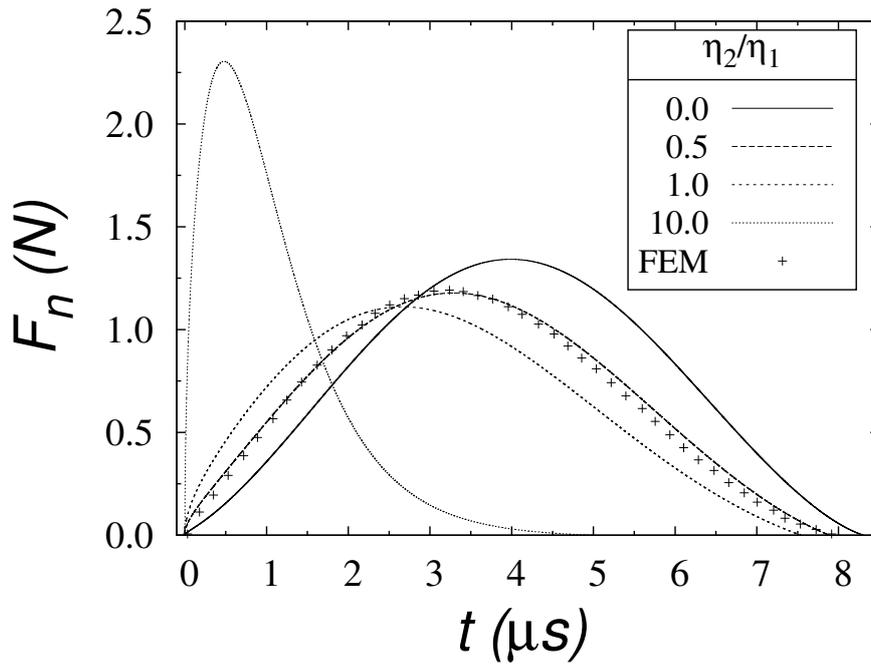


Figura 4.2: Análise dos resultados para a força normal gerados pelo modelo $M3$ em função dos valores dos parâmetros. O valor-base supostamente utilizado por ZHENG *et al.* [4] para a razão entre os parâmetros é nulo.

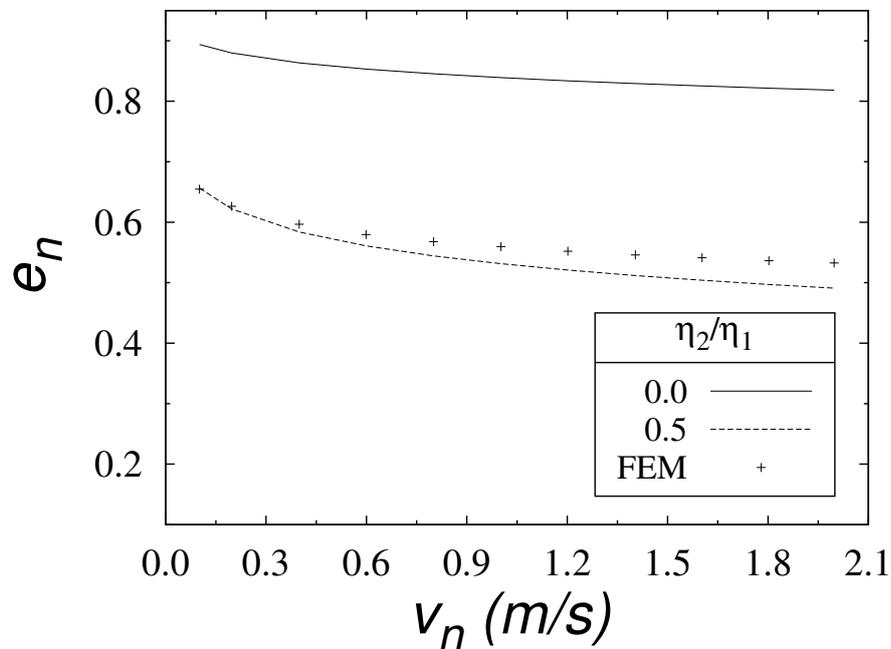


Figura 4.3: Análise da resposta do modelo $M3$ para o coeficiente de restituição normal em função de dois valores da razão entre os parâmetros. A figura mostra a comparação entre o resultado obtido utilizando-se o valor-base nulo e o valor que melhor adequou a resposta da força normal.

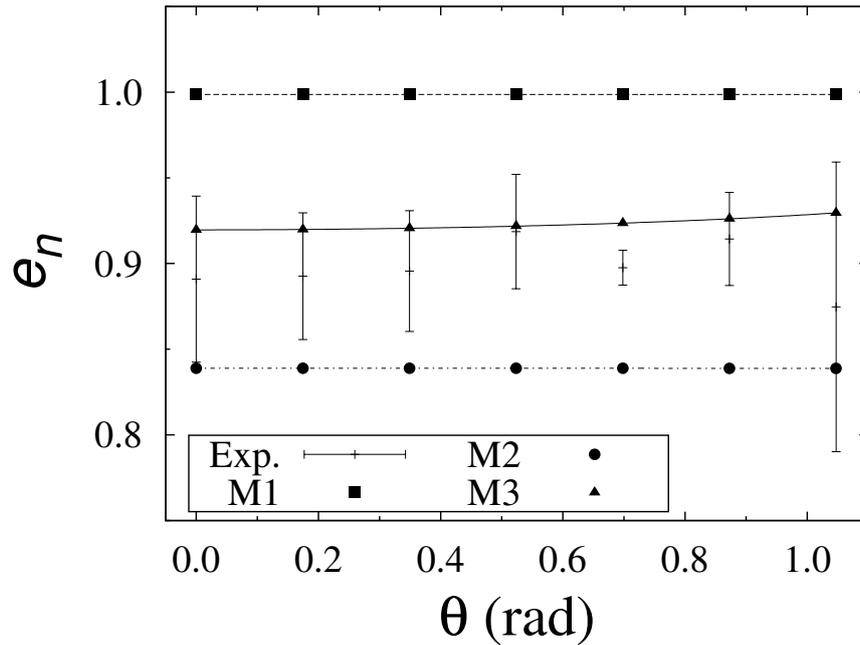


Figura 4.4: Respostas dos modelos para o coeficiente de restituição normal.

ficado, de maneira que sua utilização para simulações posteriores é viável.

4.1.2 Simulações

Os experimentos realizados por DONG e MOYS [6] foram simulados nessa tese e os resultados são apresentados nessa seção. A figura 4.4 mostra os resultados obtidos para as simulações, utilizando cada um dos modelos selecionados, para o coeficiente de restituição normal. É possível verificar que para essa variável, o modelo *M3* apresenta o melhor comportamento, adequando-se às faixas de erro experimental para praticamente todas as condições. Conforme já esperado, os modelos *M1* e *M2* apresentam coeficientes de restituição normal constantes sendo que o primeiro gera valores sempre acima dos dados enquanto que o segundo apresenta valores sempre abaixo dos mesmos.

Com relação ao coeficiente de restituição tangencial, mostrado na Figura 4.5 todos os modelos foram capazes de prever satisfatoriamente sua evolução. Para esses resultados, porém, é importante observar que o modelo *M2* apresenta um comportamento diferente dos demais para ângulos de inclinação mais baixo, apresentando um pico em torno de $0,15 \text{ rad}$ enquanto os demais mostram um comportamento decrescente ao longo de todas essas inclinações mais baixas até atingirem seu ponto de mínimo, quando então voltam a crescer continuamente. Além disso, o modelo *M2* prediz valores muito baixos de coeficiente de restituição tangencial para pequenas inclinações ao passo que os demais modelos convergem para um valor em torno de

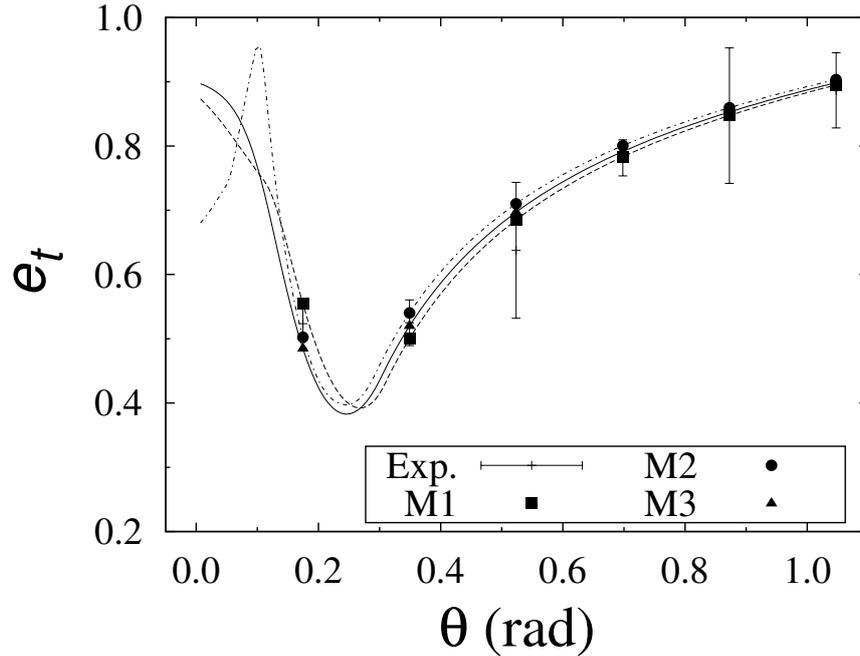


Figura 4.5: Respostas dos modelos para o coeficiente de restituição Tangencial.

0,9.

Os resultados para a velocidade angular estão representados na figura 4.6. Novamente, o modelo $M2$ apresenta um comportamento destoante dos demais para baixos ângulos de inclinação. Enquanto os modelos $M1$ e $M2$ são completamente decrescentes nessa região, o modelo $M2$ apresenta um mínimo e um máximo locais em torno de $0,05$ rad e $0,15$ rad, respectivamente. Todos os modelos apresentam uma magnitude máxima de rotação para aproximadamente o mesmo ângulo de inclinação, em torno de $0,3$ rad, convergindo ao final do contato para um mesmo valor final de $|\omega_z|$ em torno de 45 rad/s. Para essa variável, raros são os casos onde os modelos conseguem prever os dados dentro de sua região de confiança. O modelo $M2$, o qual prediz as mais altas velocidades de rotação, consegue atingir tal região em duas condições experimentais, assim como o modelo $M3$. O modelo linear, $M1$, não atinge a região de confiança para nenhuma condição experimental tendo apresentado o pior desempenho para essa variável.

Utilizando-se a definição do índice de desvio ϵ , conforme descrito pela equação 3.15, é possível obter uma análise quantitativa das respostas dos modelos em relação aos dados experimentais. As figuras 4.7 e 4.8 mostram um histograma com os valores dos desvios médio e máximo, respectivamente, para cada um dos modelos em relação a cada uma das variáveis simuladas.

Como pode ser observado, é realmente difícil obter uma resposta sobre qual modelo é mais adequado. Os resultados mostram que tal resposta depende de qual é

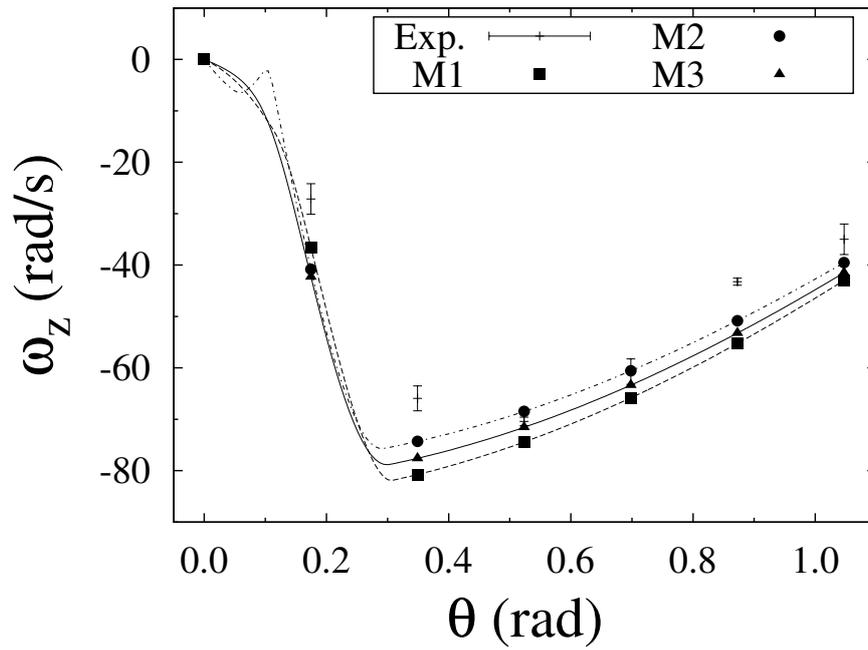


Figura 4.6: Respostas dos modelos para a velocidade angular.

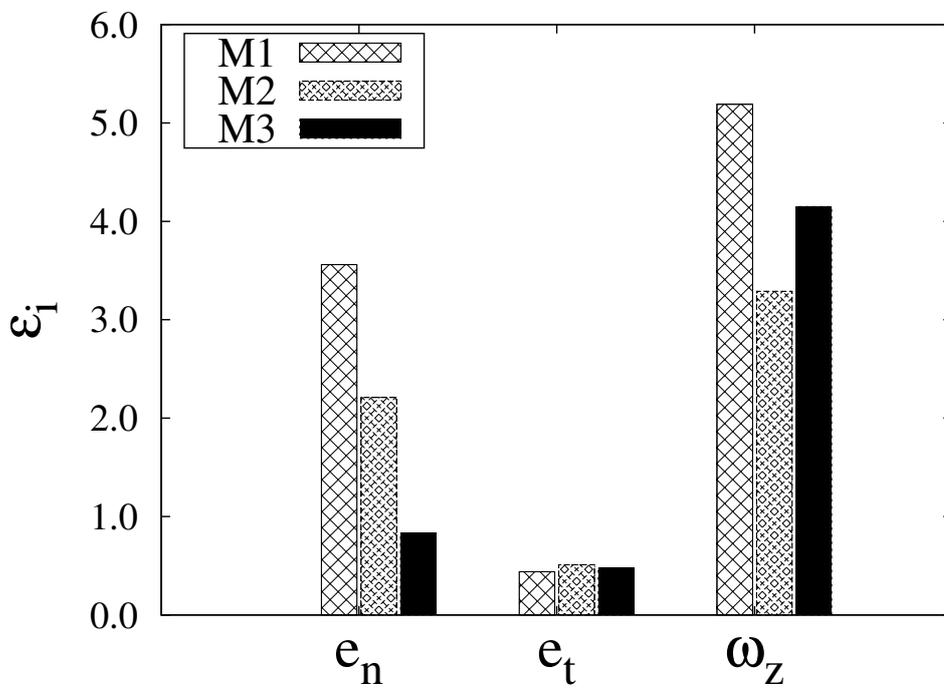


Figura 4.7: Histograma dos índices de desvio médio das respostas dos modelos em relação às regiões de confiança dos dados experimentais.

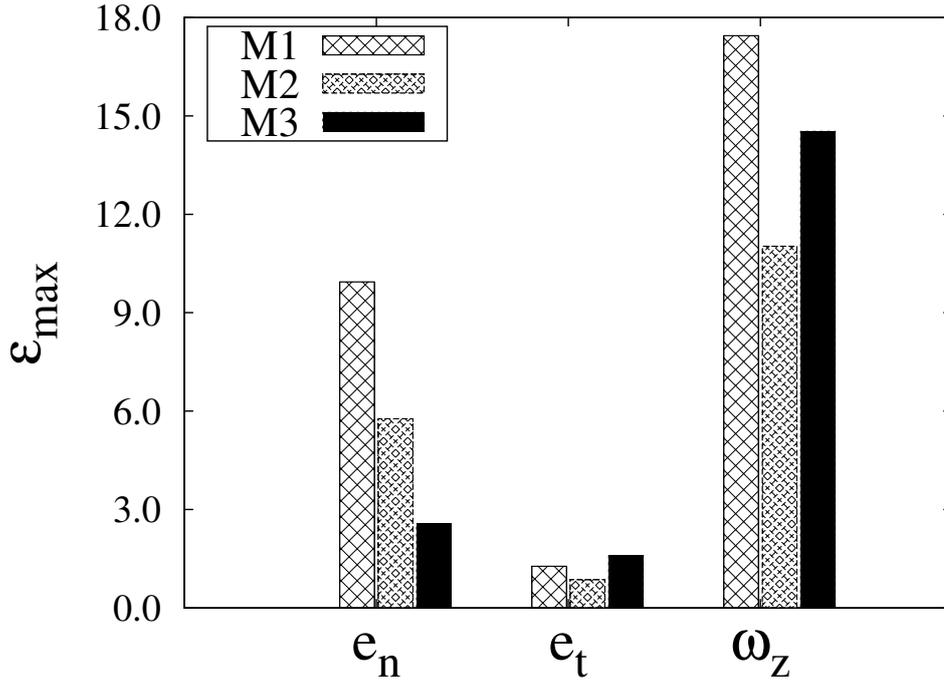


Figura 4.8: Histograma dos índices de desvio máximo das respostas dos modelos em relação às regiões de confiança dos dados experimentais.

a variável de interesse. Para o caso da avaliação em relação ao coeficiente de restituição normal, o modelo $M3$ apresenta desvios muito menores que os demais, com valores abaixo da unidade, o que indica que, na média, o modelo é capaz de prever os dados dentro de suas regiões de confiança. Os modelos $M1$ e $M2$, na média, atingem valores fora da região aceitável experimentalmente. Logo, para essa variável, apenas o modelo $M3$ é capaz de gerar respostas confiáveis. Já para o coeficiente de restituição tangencial, a análise é mais simples visto que todos os modelos fornecem índices de desvio menores que a unidade. Dessa forma, todos os modelos mostram-se capazes de prever tal variável, confirmando o que foi observado na figura 4.5.

Os resultados para a velocidade angular são ruins para qualquer que seja o modelo. Observa-se que nenhum deles é capaz de obter um índice de desvio médio menor que a unidade, de forma que nenhum dos resultados é confiável, ao menos quantitativamente. O modelo $M2$ apresenta o menor desvio, seguido do modelo $M3$, porém ambos com valores acima de 3,0. A princípio, pode-se sugerir algumas hipóteses para explicar tal comportamento para a velocidade angular. Em primeiro lugar é necessário lembrar que os valores dos parâmetros utilizados para realizar essas simulações são os valores-base sugeridos por ZHENG *et al.* [4] e dados pelas Equações 2.116 e 2.117, os quais, conforme já mostrado durante a verificação, nem sempre fornecem os melhores resultados. Além disso, é importante frisar que a modelagem realizada para a solução do problema desconsiderou os efeitos de torque de rolamento, os quais podem ser responsáveis por tal desvio, isto é, os modelos

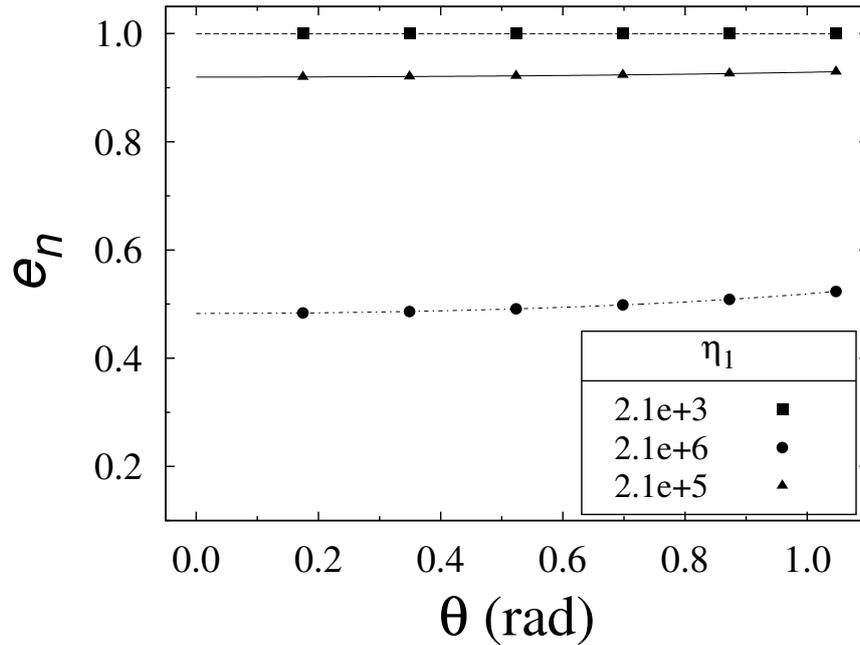


Figura 4.9: Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_1 para o coeficiente de restituição normal .

podem, realmente, não serem capazes de descrever com precisão essa variável. A possibilidade de erros experimentais mal determinados existe, porém, como o autor da presente tese não reproduziu tais experimentos a fim de caracterizar seus erros experimentais, tal possibilidade é considerada remota.

A partir dos resultados obtidos, pode-se dizer que o modelo $M3$ apresenta dentre os modelos testados, a melhor performance visto que foi o único capaz de reproduzir os dados experimentais, dentro do erro experimental, para os dois coeficientes de restituição, considerando-se que nenhum apresentou bom rendimento em termos da velocidade angular. Nesse contexto, fica demonstrado o potencial do modelo $M3$ para utilização em simulações envolvendo o método dos elementos discretos.

4.2 Análise de Sensibilidade

A análise de sensibilidade foi realizada com o modelo $M3$ para os dados de DONG e MOYS [6]. Conforme relatado no capítulo anterior, enquanto um dos parâmetros foi mantido em seu valor-base, o outro foi variado de acordo com a Tabela 3.8. Esse procedimento foi realizado para ambos os parâmetros. Os resultados obtidos para a análise de sensibilidade em relação ao primeiro coeficiente de viscosidade estão representados nas Figuras 4.9, 4.10 e 4.11.

Os efeitos do primeiro coeficiente de viscosidade nas respostas do modelo para

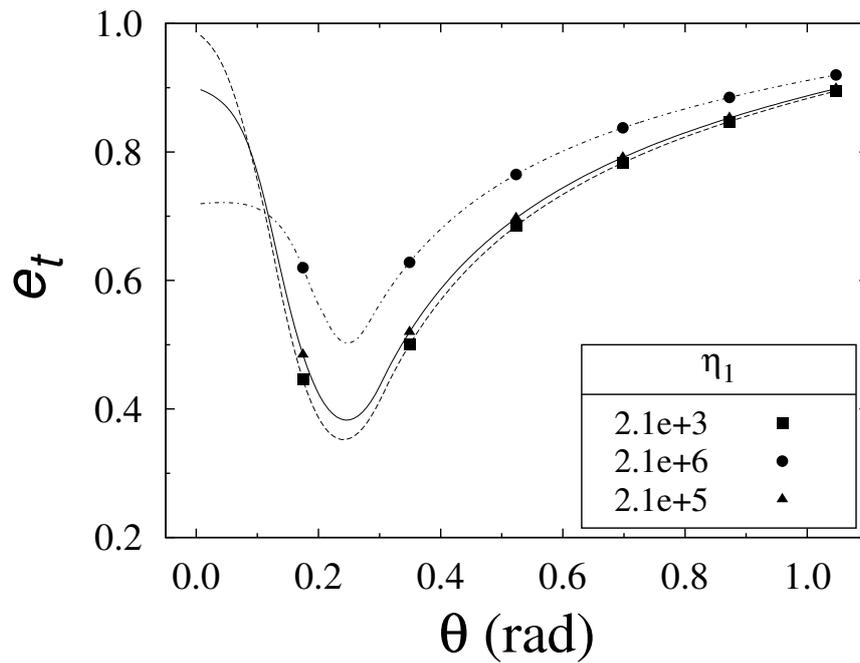


Figura 4.10: Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_1 para o coeficiente de restituição tangencial.

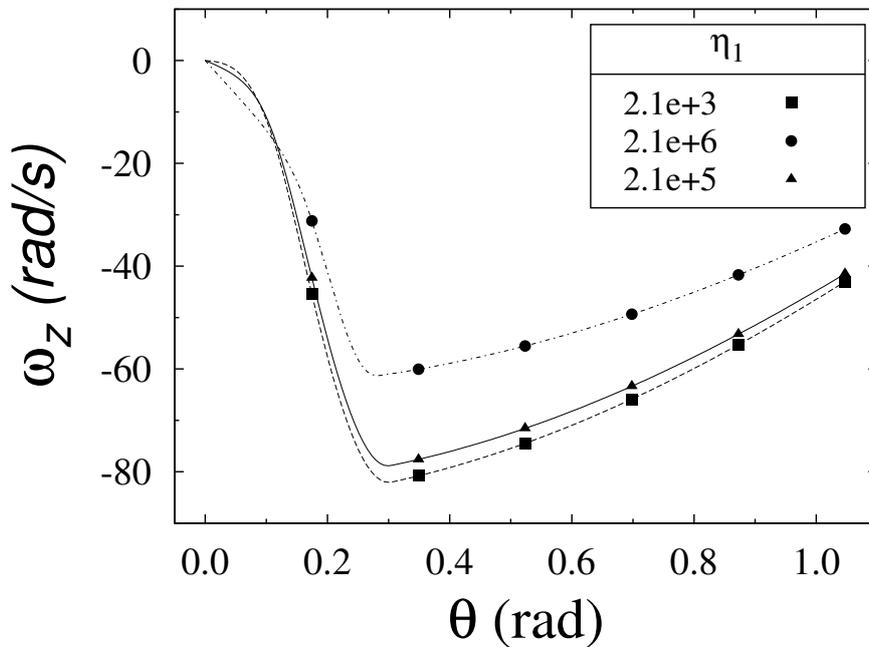


Figura 4.11: Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_1 para a velocidade angular.

qualquer que seja a variável analisada, dentre as simuladas, são claramente visíveis. Para o coeficiente de restituição normal, é bastante perceptível o efeito do aumento desse parâmetro. Quanto maior o valor de η_1 , maiores são os efeitos da dissipação viscosa para a componente normal da força de contato, de forma que o coeficiente de restituição deve retratar essa realidade. Tal comportamento é observado na figura 4.9, onde para o menor valor testado para esse parâmetro foi suficiente para tornar o contato praticamente elástico, enquanto que o maior valor dissipou mais da metade da energia cinética do movimento na direção normal.

Para o coeficiente de restituição tangencial, os efeitos ainda são bem claros, porém o comportamento do modelo ao longo das diferentes inclinações mostra-se mais complicado. Conforme pode ser observado na figura 4.10, o padrão de comportamento observado para o coeficiente de restituição normal em relação ao primeiro coeficiente de viscosidade se mantém para o coeficiente de restituição tangencial, para pequenos valores do ângulo de inclinação. Nessas condições, a energia do movimento na direção tangencial é dissipada em maior magnitude quanto mais alto o valor de η_1 . Porém, como o aumento da inclinação, ocorre uma inversão nas tendências das respostas de forma que os casos onde há um menor coeficiente de viscosidade apresentam menores coeficientes de restituição, indicando que dissipam mais energia. Esse comportamento se mantém até o fim do contato onde as respostas tendem a convergir para um mesmo valor final, em torno de 0,9. Os resultados para a velocidade angular mostram uma inversão similar à ocorrida para o coeficiente de restituição tangencial, conforme mostra a figura 4.11. Para baixos ângulos de inclinação são observadas menores magnitudes da velocidade de rotação para os casos onde foram usados os maiores valores do primeiro coeficiente de viscosidade.

As respostas das variáveis analisadas às variações no segundo coeficiente de viscosidade, mantendo-se o primeiro coeficiente de viscosidade em seu valor-base, estão expostos nas Figuras 4.12, 4.13 e 4.14.

Os resultados obtidos para a análise de sensibilidade do modelo em relação a η_2 mostram uma leve flutuação das respostas dos coeficientes de restituição tangencial e para a velocidade angular, enquanto que o coeficiente de restituição normal é mais afetado pela variação do segundo coeficiente de viscosidade. As tendências de inversão do comportamento para o coeficiente de restituição tangencial e para a velocidade angular são análogas aqueles observados na análise de sensibilidade em relação a η_1 , o que parece ser uma característica do modelo. Com relação ao comportamento das respostas do coeficiente de restituição normal, os efeitos observados também são análogos aos ressaltados para a análise sobre η_1 .

De posse dos dados obtidos através das análises de sensibilidade do modelo em relação a cada um dos parâmetros analisados, pode-se inferir que ambos possuem alguma influência sobre o modelo, sendo que a sensibilidade do modelo ao valor

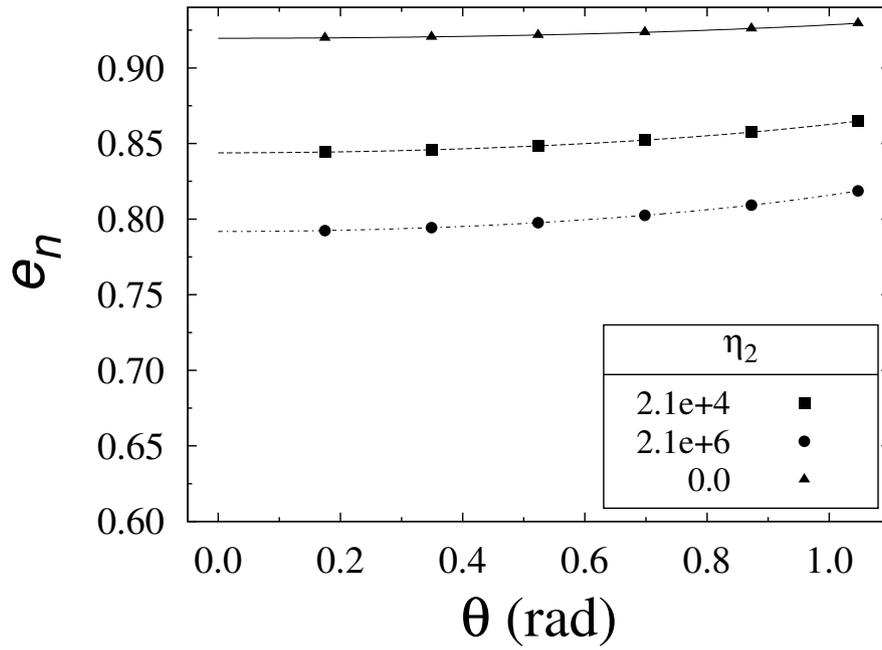


Figura 4.12: Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_2 para o coeficiente de restituição normal .

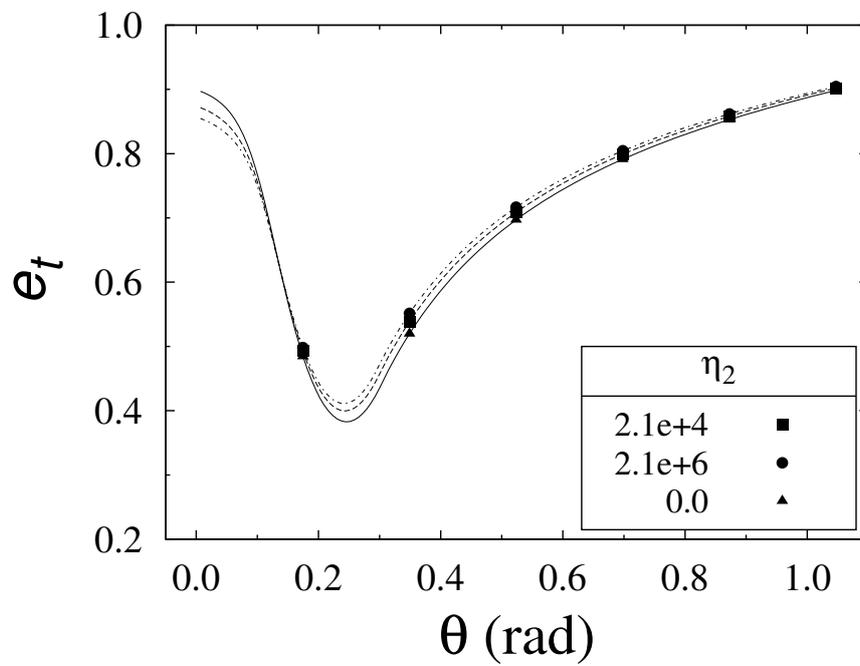


Figura 4.13: Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_2 para o coeficiente de restituição tangencial.

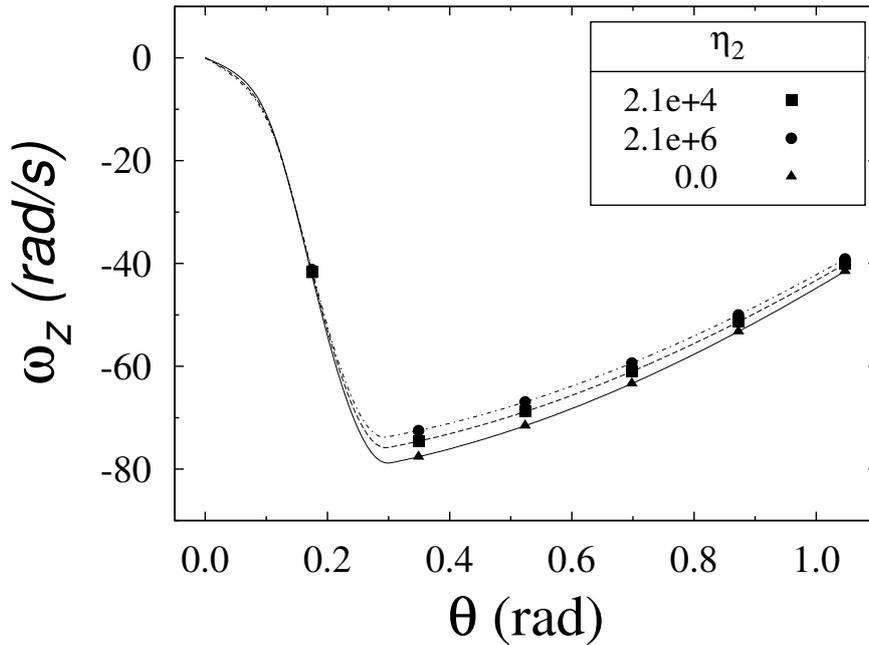


Figura 4.14: Análise de sensibilidade do modelo $M3$ em relação ao parâmetro η_2 para a velocidade angular.

do primeiro coeficiente de viscosidade é maior. Os efeitos da variação do segundo coeficiente de viscosidade são muito pequenos quando comparados aqueles causados por η_1 . Nesse contexto, mostra-se que os parâmetros podem ser obtidos a partir de um procedimento de estimação de parâmetros.

4.3 Estimação dos Parâmetros

A estimação dos parâmetros foi realizada conforme descrito no capítulo 3. Os valores utilizados para os parâmetros, como estimativa inicial, foram aqueles sugeridos por ZHENG *et al.* [4] como valores-base. A solução do problema de estimação foi obtida a partir de uma busca global, seguida de um refino da solução a partir de uma otimização local, partindo da solução global como estimativa inicial. A solução global utilizada é baseada em um algoritmo de busca aleatória para o qual inicia-se uma população de pontos distribuída sobre a região de busca, que evolui segundo regras heurísticas em busca do ótimo. Para garantir a convergência da busca em direção ao mínimo, foram realizadas sucessivas buscas globais seguidas de refinamentos locais, onde a cada nova busca global, utilizou-se uma população duas vezes maior que a anterior iniciando-se com 30 pontos e indo até o limite de 7680 pontos. Os resultados para as buscas globais encontram-se na Tabela 4.1 enquanto que os resultados do refino local encontram-se na Tabela 4.2.

Tabela 4.1: Valores ótimos globais para variáveis x_1 e x_2 , além da função objetivo, obtidos pelo procedimento de estimação de parâmetros.

População	$x_{1,global}$	$x_{2,global}$	$F_{obj,global}$
30	5,48927	0,00000	$1,37311 \times 10^3$
60	5,74056	0,19143	$1,35806 \times 10^3$
120	5,66850	0,53658	$1,36437 \times 10^3$
240	5,73864	0,16308	$1,35798 \times 10^3$
480	5,72493	0,21896	$1,35947 \times 10^3$
960	5,73843	0,16133	$1,35798 \times 10^3$
1920	5,73830	0,20416	$1,35816 \times 10^3$
3840	5,72289	0,29018	$1,35953 \times 10^3$
7680	5,73562	0,21431	$1,35829 \times 10^3$

Tabela 4.2: Valores ótimos locais para variáveis x_1 e x_2 , além da função objetivo, obtidos pelo refino das soluções globais.

População	$x_{1,local}$	$x_{2,local}$	$F_{obj,local}$
30	5,49954	0,00000	$1,37220 \times 10^3$
60	5,73925	0,18436	$1,35799 \times 10^3$
120	5,67004	0,53427	$1,36430 \times 10^3$
240	5,73962	0,16802	$1,35793 \times 10^3$
480	5,73446	0,22472	$1,35841 \times 10^3$
960	5,73937	0,16645	$1,35794 \times 10^3$
1920	5,73932	0,18348	$1,35798 \times 10^3$
3840	5,72887	0,26133	$1,35898 \times 10^3$
7680	5,73778	0,19785	$1,35809 \times 10^3$

Analisando-se as tabelas 4.1 e 4.2 pode-se concluir que os valores ótimos das variáveis x_1 e x_2 são, respectivamente, 5,73962 e 0,16802, os quais geram um valor de função objetivo igual a $1,35793 \times 10^3$. Tais valores resultam em η_1 igual a $5,49060 \times 10^5 Pa \cdot s$ e η_2 igual a $9,22531 \times 10^4 Pa \cdot s$, conforme as equações 3.12 e 3.13. Também fica claro ao se analisar aquelas tabelas que o parâmetro x_1 e, conseqüentemente, η_1 está determinado de forma muito mais precisa se comparado ao outro parâmetro. Para x_1 , a faixa de variação dos valores ótimos obtidos após o refino vai de 5,49954 até 5,73962, fazendo com que η_1 vá de $3,15893 \times 10^5 Pa \cdot s$ a $5,49060 \times 10^5 Pa \cdot s$, ao passo que para x_2 , a mesma faixa vai de 0,00000 até 0,53427, resultando em variações de η_2 que vão de $0,00000 Pa \cdot s$ a $2,49921 \times 10^5 Pa \cdot s$. Como se pode ver, enquanto η_1 varia relativamente pouco dentro da mesma ordem de grandeza, η_2 abrange ao menos 5 ordens de grandezas diferentes, o que faz com que, a princípio, sua determinação seja menos precisa. É importante observar que a função objetivo flutua relativamente pouco para todos os pares de parâmetros ótimos encontrados mostrando que a mesma possui uma grande quantidade de mínimos locais, sendo de difícil otimização.

De posse dos valores ótimos, os dados experimentais de DONG e MOYS [6] foram novamente simulados e seus resultados foram comparados com aqueles obtidos ao se utilizar os valores-base para os parâmetros. As Figuras 4.15, 4.16 e 4.17 mostram os resultados de tais simulações para os coeficientes de restituição normal e tangencial, respectivamente, bem como para a velocidade angular.

Observando-se os resultados obtidos para o coeficiente de restituição normal, Figura 4.15, é possível notar que a utilização dos valores ótimos piorou os resultados, no sentido de que fez as respostas do modelo saírem da região experimental para praticamente todos os pontos. Apenas para os pontos com maiores erros experimentais o modelo *M3* com os parâmetros ótimos conseguiu obter uma resposta aceitável. Já para os resultados obtidos com os valores-base, o coeficiente de restituição normal predito pelo modelo só ficou fora da região de confiança dos experimentos em um dos pontos, o de menor erro.

Apesar de ter tornado os resultados para o coeficiente de restituição normal ruins, os parâmetros ótimos melhoraram a já boa resposta do modelo em relação ao coeficiente de restituição tangencial, como mostra a Figura 4.16. Prova disso é que o único caso para o qual o resultado obtido usando o modelo para prever o coeficiente de restituição tangencial não estava entre os limites da região delimitada pelos erros experimentais, após a otimização passou a gerar resultados contidos na região experimentalmente aceitável. Logo, para o coeficiente de restituição normal, a otimização não apresentou efeitos consideráveis. O mesmo pode ser dito em relação à velocidade angular. A Figura 4.17 mostra que apesar de ter havido uma melhoria do ajuste, ela foi muito pequena. Antes da otimização apenas dois pontos

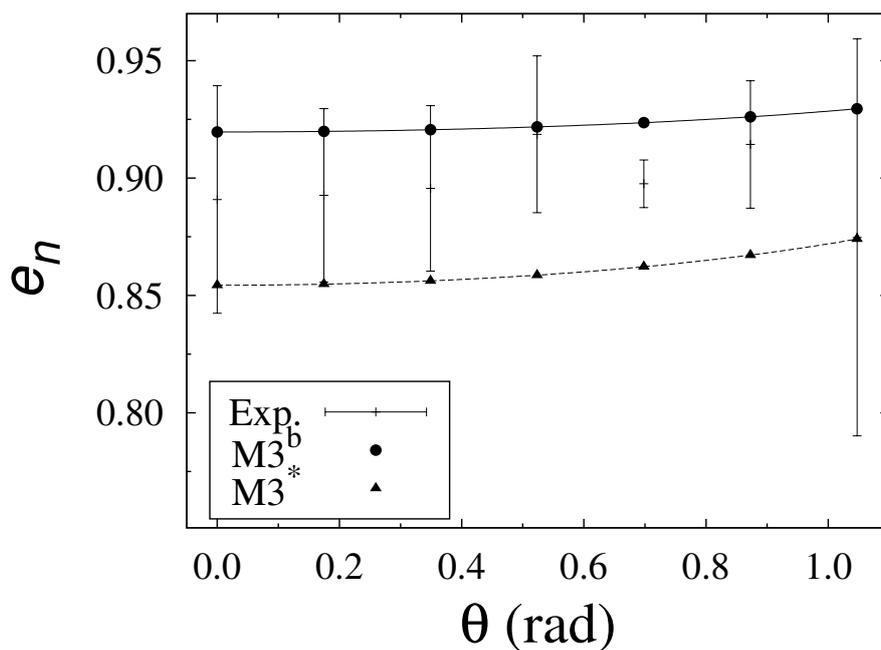


Figura 4.15: Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição normal, utilizando o modelo $M3$, para os valores ótimos dos parâmetros ($M3^*$), em relação aqueles obtidos usando os valores-base ($M3^b$) para os mesmos parâmetros.

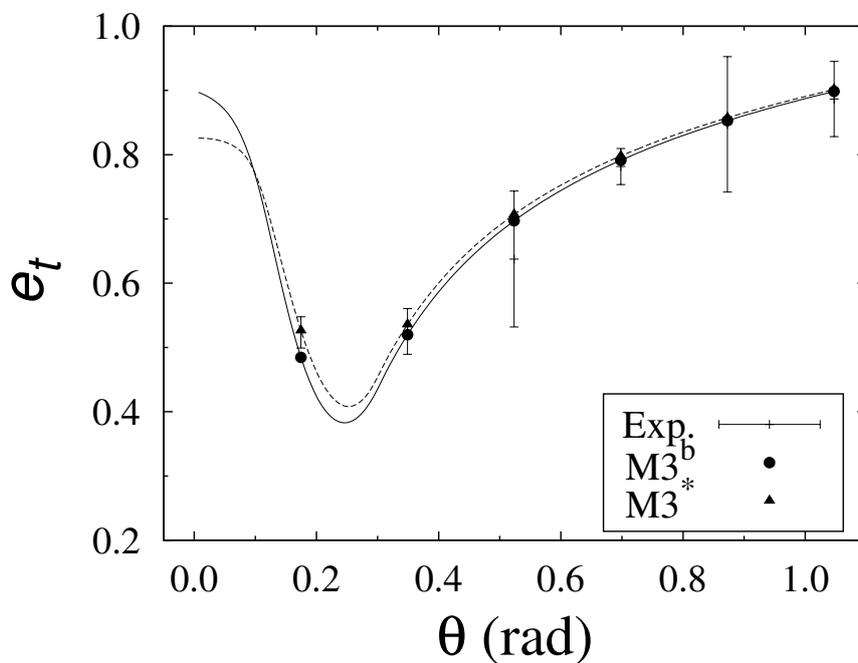


Figura 4.16: Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição tangencial, utilizando o modelo $M3$, para os valores ótimos dos parâmetros ($M3^*$) em relação aqueles obtidos usando os valores-base ($M3^b$) para os mesmos parâmetros.

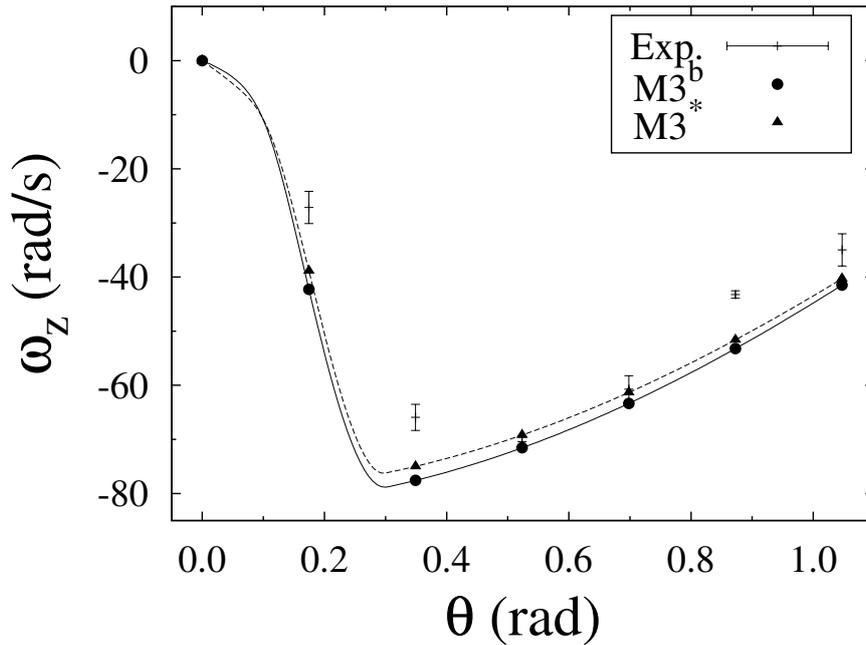


Figura 4.17: Comparação dos resultados obtidos para a velocidade angular, utilizando o modelo $M3$, para os valores ótimos dos parâmetros ($M3^*$) em relação aqueles obtidos usando os valores-base ($M3^b$) para os mesmos parâmetros.

simulados estavam dentro da região do erro experimental, após, os mesmos dois pontos continuam dentro do erro mas os demais se aproximaram um pouco mais de tais regiões, o que levará a uma diminuição dos desvios.

Os histogramas dos índices de desvio médio e máximo para as simulações com os parâmetros assumindo tanto os valores-base quanto os valores ótimos encontram-se nas Figuras 4.18 e 4.19. Tais resultados confirmam o que foi sugerido pelas curvas das Figuras 4.15, 4.16 e 4.17. O processo de otimização está realizando uma espécie de penalização do coeficiente de restituição normal para que haja uma melhoria tanto nos coeficientes de restituição tangencial quanto para a velocidade angular. Apesar do esforço, o otimizador melhorou muito pouco essas últimas variáveis e piorou demais o coeficiente de restituição normal a ponto de fazê-lo ter um índice de desvio médio acima da unidade, o que indica que ele não mais representa bem essa variável. Como anteriormente apenas a velocidade angular não obtia boas respostas, tendo ϵ maior que um, e agora apenas o coeficiente de restituição tangencial pode ser considerado como bem ajustado, pode-se afirmar que o procedimento de estimação não foi satisfatório, apesar de correto.

A avaliação da qualidade do ajuste foi feita a partir da realização do teste χ^2 para a função objetivo. Tal teste fornece os limites inferior e superior esperados para o valor da função objetivo dados o número de graus de liberdade do problema e o grau de confiança desejado. Para o problema em questão, há 16 graus de liberdade

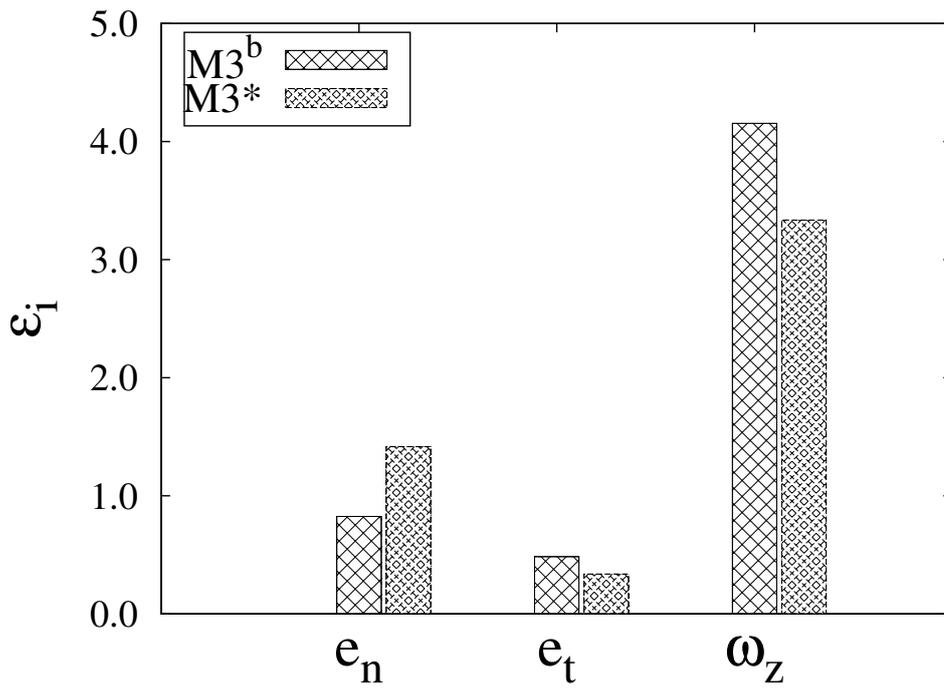


Figura 4.18: Histogramas dos índices de desvios relativos médios para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base.

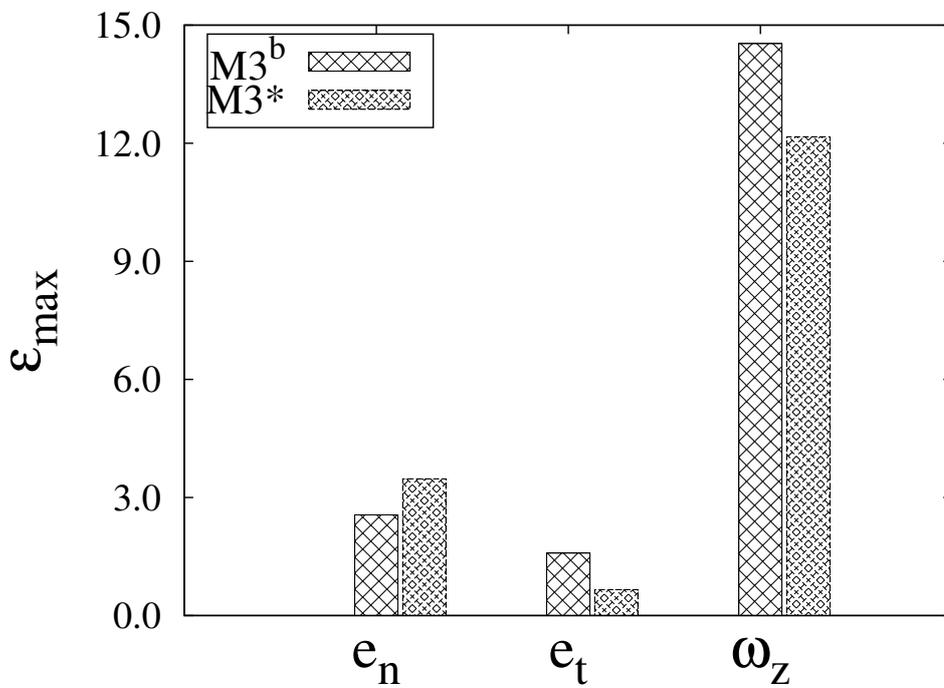


Figura 4.19: Histogramas dos índices de desvios relativos máximos para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base.

e admitindo-se um grau de confiança de 95% obtém-se que o intervalo esperado para o valor da função objetivo deve ser aquele representado pela inequação 4.1.

$$6,908 \leq F_{obj} \leq 28,845 \quad (4.1)$$

O valor obtido para a função objetivo após a otimização é de 1357,93, logo muito acima do valor máximo sugerido pelo teste χ^2 . Tal resposta mostra que o modelo não está sendo capaz de descrever a realidade dos dados experimentais pois os erros de predição são significativamente maiores do que os erros experimentais. Segundo PINTO e SCHWAAB [92], essa situação pode ocorrer tanto devido à imperfeições do modelo, violando a hipótese do modelo perfeito, quanto ao fato dos erros experimentais estarem subestimados. Nesse último caso, uma reavaliação das medidas feitas torna-se necessária. Dessa forma, aparentemente o modelo não é capaz de descrever os experimentos, porém, antes de fazer tal afirmação, é necessário antes avaliar o intervalo de confiança dos parâmetros para se ter deia a respeito da magnitude do erro de estimação dos mesmos.

A obtenção do intervalo de confiança dos parâmetros estimados foi realizada conforme descrito no capítulo 3. A partir da consideração de comportamento linear do modelo na região do mínimo e da hipótese do experimento bem feito, foi possível obter uma aproximação da matriz Hessiana do sistema em termos das matrizes de sensibilidade do modelo e de covariâncias do problema e, então, obteve-se a matriz de covariâncias dos parâmetros estimados em termos dessa aproximação da Hessiana. Os intervalos de confiança para os primeiro e segundo coeficientes de viscosidades encontram-se representados nas equações 4.2 e 4.3.

$$3,73093 \times 10^5 Pa \cdot s \leq \eta_{1,otimo} \leq 7,25027 \times 10^5 Pa \cdot s \quad (4.2)$$

$$-9,91281 \times 10^6 Pa \cdot s \leq \eta_{2,otimo} \leq 1,00973 \times 10^7 Pa \cdot s \quad (4.3)$$

O intervalo de confiança para o segundo coeficiente de viscosidade, dado pela equação 4.3, contém o valor zero. Dessa forma, não é possível afirmar que tal parâmetro seja diferente de zero. Tal situação indica que o parâmetro é não-significativo, ou seja, o modelo deve ser simplificado a partir da anulação dos efeitos desse parâmetro. A partir dessa informação, o problema foi novamente resolvido, porém assumindo o valor nulo para o parâmetro η_2 e estimando-se apenas o primeiro coeficiente de viscosidade. A busca pelo mínimo nessas condições convergiu mais rapidamente que para as condições anteriores, sendo necessário duplicar a população de pontos apenas até um tamanho de 480 partículas, conforme mostrado na Tabela 4.3. Os resultados das simulações encontram-se representados nas Figuras 4.20, 4.21 e 4.22. É possível observar uma melhora substancial no ajuste do modelo aos dados expe-

Tabela 4.3: Valores ótimos globais para a variável x_1 , além da função objetivo, obtidos pelo procedimento de estimação de parâmetros ao desconsiderar-se os efeitos de η_2 .

População	$x_{1,global}$	$F_{obj,global}$	$x_{1,local}$	$F_{obj,local}$
30	5,49937	$1,37220 \times 10^3$	5,49928	$1,37219 \times 10^3$
60	5,49885	$1,37220 \times 10^3$	5,49954	$1,37220 \times 10^3$
120	5,49836	$1,37220 \times 10^3$	5,49836	$1,37220 \times 10^3$
240	5,49937	$1,37220 \times 10^3$	5,49928	$1,37219 \times 10^3$
480	5,49937	$1,37220 \times 10^3$	5,49928	$1,37219 \times 10^3$

rimentais para o coeficiente de restituição normal, conforme mostra a Figura 4.20. Para esse novo ajuste, todos os pontos simulados encontram-se dentro da faixa do erro experimental, indicando que tais predições são confiáveis.

Considerando-se as variáveis coeficiente de restituição tangencial, representado na Figura 4.21, e velocidade angular, Figura 4.22, é possível observar ainda uma ligeira melhoria nos resultados, ajustando-se quase perfeitamente aos dados para a primeira variável. No caso da velocidade angular, permanece a dificuldade em se alcançar as regiões experimentais, havendo melhorias bem pequenas quando comparadas ao resultado da primeira estimação para a mesma variável. Dessa forma, caso a qualidade do ajuste se mostre razoável, pode-se inferir que o efeito do torque de rolamento, negligenciado no presente modelo, tenha importância.

As avaliações dos índices de desvios médio e máximo, ϵ e ϵ_{max} , respectivamente, são mostradas nas Figuras 4.23 e 4.24, nessa ordem. Os resultados mostram, quantitativamente, as melhorias em termos do novo ajuste obtido para o coeficiente de restituição normal, para o qual, novamente, seu desvio volta a ser menor que a unidade, indicando que, na média, representa bem os dados experimentais, assim como para o coeficiente de restituição normal. As ligeiras melhorias são também observadas para o caso da velocidade angular. Tais resultados confirmam o observado nas curvas das Figuras 4.20, 4.21 e 4.22. É necessário ressaltar que tais índices representam um comportamento médio para as variáveis, de forma que, apesar do desse comportamento médio ter mostrado uma melhora, o valor da função objetivo não necessariamente diminui. Nesse caso, o valor da função objetivo, na realidade, aumentou. Esse comportamento já era esperado visto que a adição da variabilidade de um parâmetro pode aumentar o erro de sua determinação mas não piora o ajuste da função objetivo. Para fins de comparação, o valor da função objetivo após a remoção do parâmetro η_2 é de 1372,2 enquanto que o valor considerando-se o ajuste dos dois parâmetros foi de 1357,9, ligeiramente melhor, o que ilustra a expectativa mencionada.

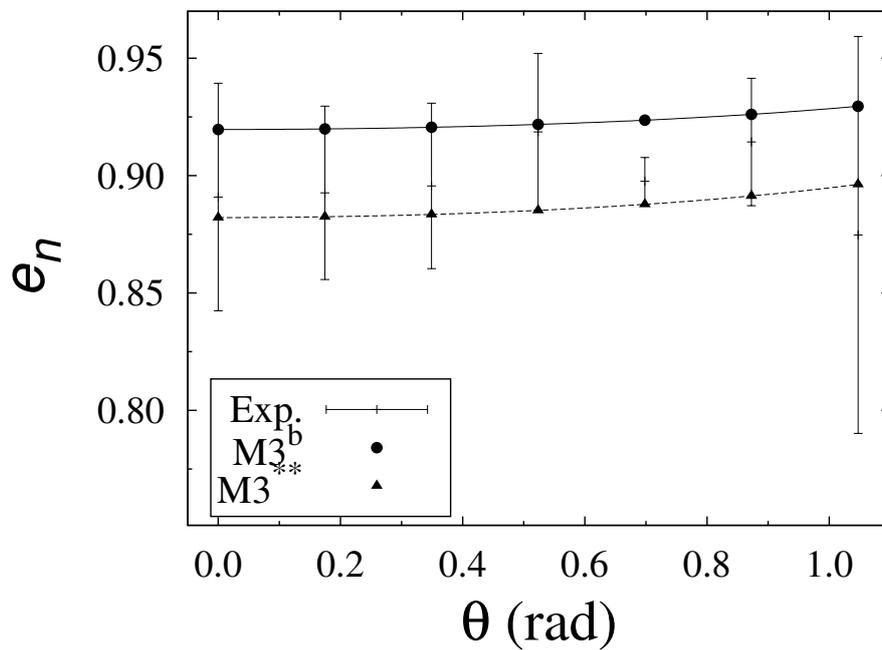


Figura 4.20: Resultados das simulações usando o modelo $M3$ para o coeficiente de restituição normal, desconsiderados os efeitos de η_2 , a partir da utilização do valor-base de η_1 e do valor ótimo obtido após a nova estimação. Os resultados obtidos a partir do uso do novo conjunto de parâmetros ótimos estão representados por ($M3^{**}$)

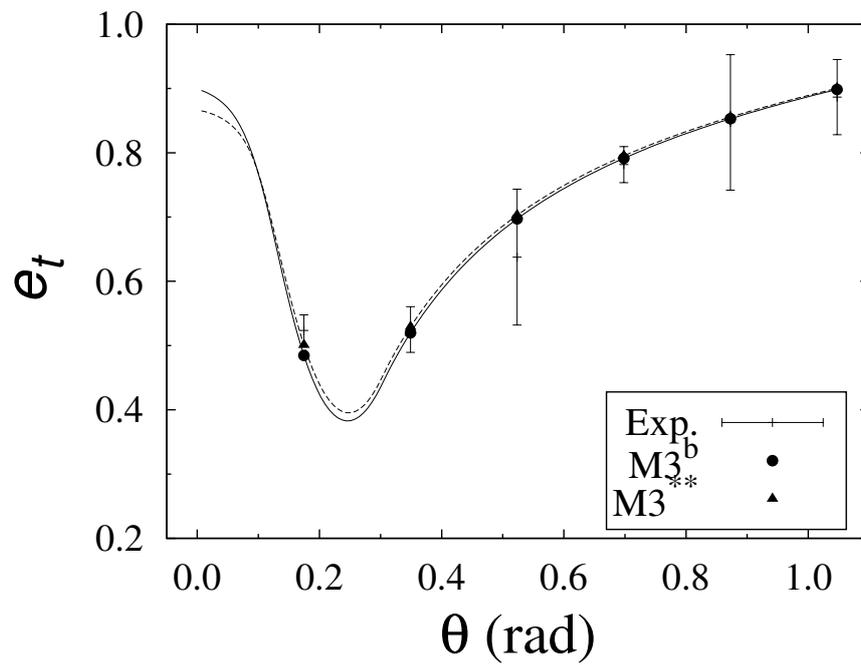


Figura 4.21: Resultados das simulações usando o modelo $M3$ para o coeficiente de restituição tangencial, desconsiderados os efeitos de η_2 , a partir da utilização do valor-base de η_1 e do valor ótimo obtido após a nova estimação. Os resultados obtidos a partir do uso do novo conjunto de parâmetros ótimos estão representados por ($M3^{**}$)

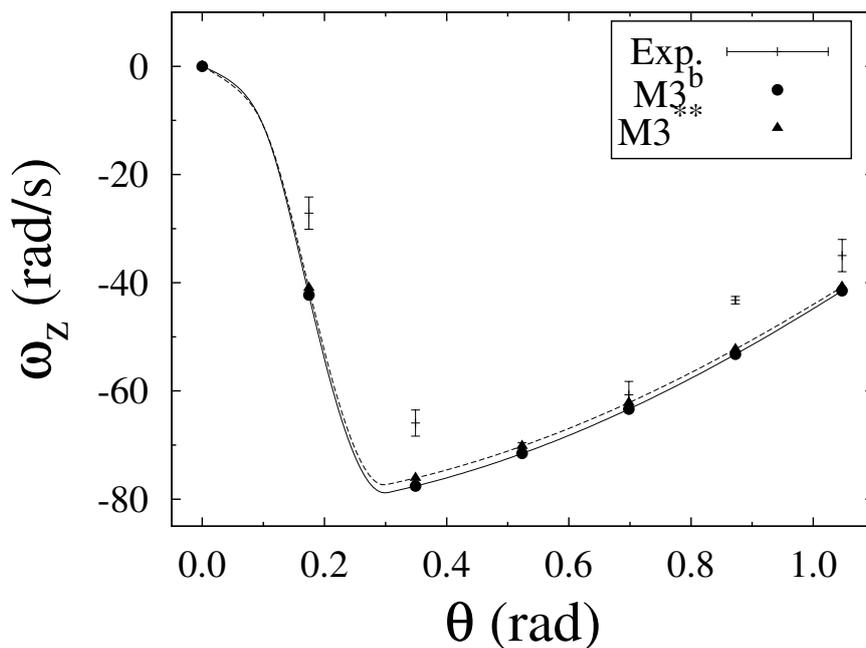


Figura 4.22: Resultados das simulações usando o modelo $M3$ para a velocidade angular, desconsiderados os efeitos de η_2 , a partir da utilização do valor-base de η_1 e do valor ótimo obtido após a nova estimação. Os resultados obtidos a partir do uso do novo conjunto de parâmetros ótimos estão representados por ($M3^{**}$)

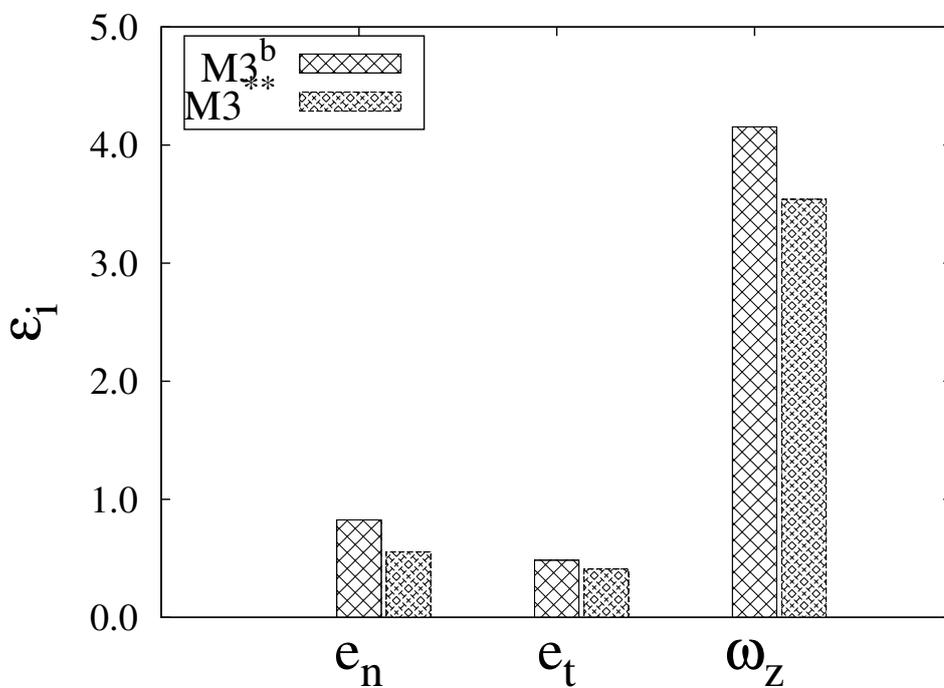


Figura 4.23: Histogramas dos índices de desvios médios para todas as variáveis, obtidos a partir dos resultados das simulações ao se utilizar o valor de η_1 desconsiderando-se os efeitos de η_2 .

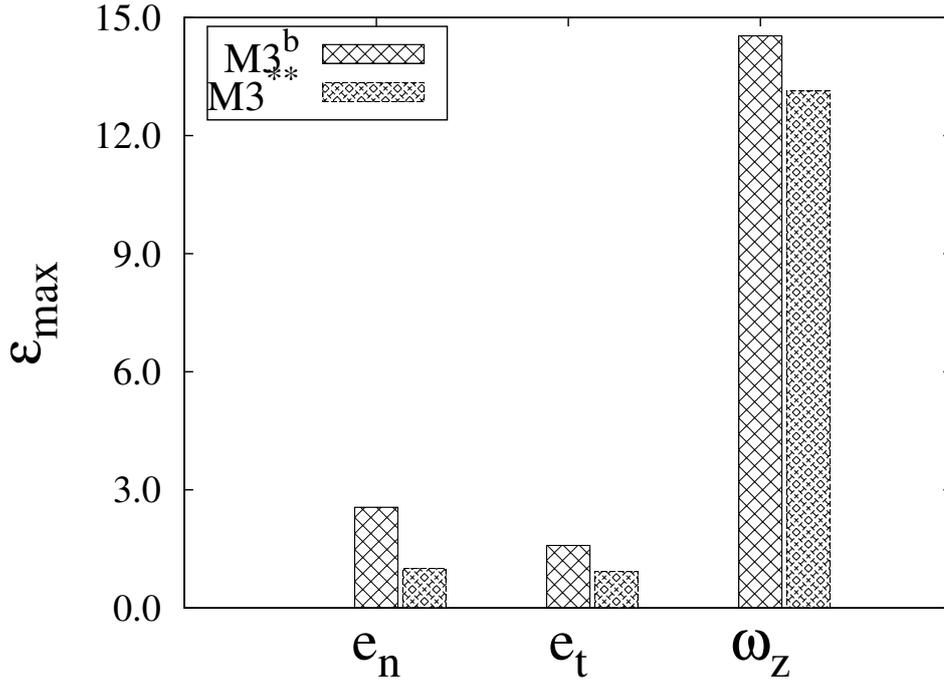


Figura 4.24: Histogramas dos índices de desvios máximos para todas as variáveis, obtidos a partir dos resultados das simulações ao se utilizar o valor de η_1 desconsiderando-se os efeitos de η_2 .

A nova estimaco foi submetida aos mesmos testes para a avaliao da qualidade do ajuste obtido. O teste χ^2 revelou novos limites para a aceitao do ajuste da funo objetivo, dados pela inequao 4.4, para 95% de grau de confiana e com 17 graus de liberdade.   claramente percept vel que o valor obtido para a funo objetivo, mesmo ap s a eliminao do par metro η_2 , ainda n o   satisfat rio, de forma que as hip teses do modelo n o ser capaz de descrever a realidade f sica do problema, bem como de erros experimentais subestimados ainda devem ser levadas em considerao. O intervalo de confiana para o par metro η_1 foi novamente calculado considerando-se as mesmas hip teses feitas no procedimento de estimaco anterior. Foi obtido um intervalo mais restrito, conforme pode ser observado na inequao 4.5, o que indica uma maior acur cia na determinao do par metro. De fato, na primeira estimaco, que considerava os efeitos de η_2 , o primeiro coeficiente de viscosidade foi determinado com um erro relativo de aproximadamente 32% enquanto que agora, ap s a remoo de η_2 , tal erro caiu para 6,4%. O valor  timo de η_1 encontrado nessa nova estimaco foi de $3,15769 \times 10^5$.

$$7,564 \leq F_{obj} \leq 30,191 \quad (4.4)$$

$$2,95912 \times 10^5 Pa \cdot s \leq \eta_{1,otimo} \leq 3,36088 \times 10^5 Pa \cdot s \quad (4.5)$$

Tabela 4.4: Análise dos desvios dos dados experimentais em relação às respostas do modelo para verificação das hipóteses do modelo perfeito e do experimento bem feito.

$e_{n,exp} - e_{n,sim}$	$e_{t,exp} - e_{t,sim}$	$\omega_{exp} - \omega_{sim}$
0,01020	0,02257	13,80384
0,01214	-0,00411	10,15872
0,03346	-0,06532	-0,21814
0,00981	-0,01369	1,45132
0,02298	-0,00828	9,03687
-0,02156	-0,01371	5,78214
0,01117	-0,01376	6,66912

Como mesmo após a eliminação do parâmetro η_2 , através de sua anulação, o valor da função objetivo ficou fora da faixa aceitável pelo teste χ^2 , decidiu-se testar a validade do conjunto de premissas dada pelas hipóteses do experimento bem feito e do modelo perfeito. Tais hipóteses, conforme já discutido anteriormente, partem do princípio de que se o experimento é bem feito as medidas devem oscilar em torno do valor real da variável, o qual é dado pelo modelo, já que é considerado perfeito. Dessa forma, os desvios das medidas experimentais em relação às respostas do modelo devem possuir média zero. A Tabela 4.4 mostra a distribuição desses desvios e as médias dos mesmos para cada uma das variáveis, dada pelos valores em negrito na última linha da tabela.

Como é possível observar, nenhuma das médias é nula, apesar daquelas relativas aos dois coeficientes de restituição estarem muito próximo de zero. Como as médias avaliadas são amostrais, considerou-se a realização de um teste t-student para determinar o intervalo no qual a média real de cada uma das distribuições dos desvios. Considerando-se 95% de confiança, o teste t-student mostrou que a média real da distribuição de desvios para o coeficiente de restituição normal está contida no intervalo que vai de 0,01081 até 0,01153, para o coeficiente de restituição tangencial, o intervalo se inicia em -0,01462 e se estende até -0,01290, enquanto que a média real da distribuição dos desvios para a velocidade angular deve estar contida no intervalo que vai de -23,58774 até 36,92599. Portanto, pode-se afirmar, com 95% de confiança, que as médias dos desvios dos coeficientes de restituição não são nulas, enquanto é possível que a média dos desvios para a velocidade angular seja. Dessa forma, a utilização das hipóteses do modelo perfeito e do experimento pode não ser adequada.

A simplificação do modelo a partir da anulação dos efeitos de η_2 melhorou o ajuste para o coeficiente de restituição normal de forma que a realidade dos experimentos

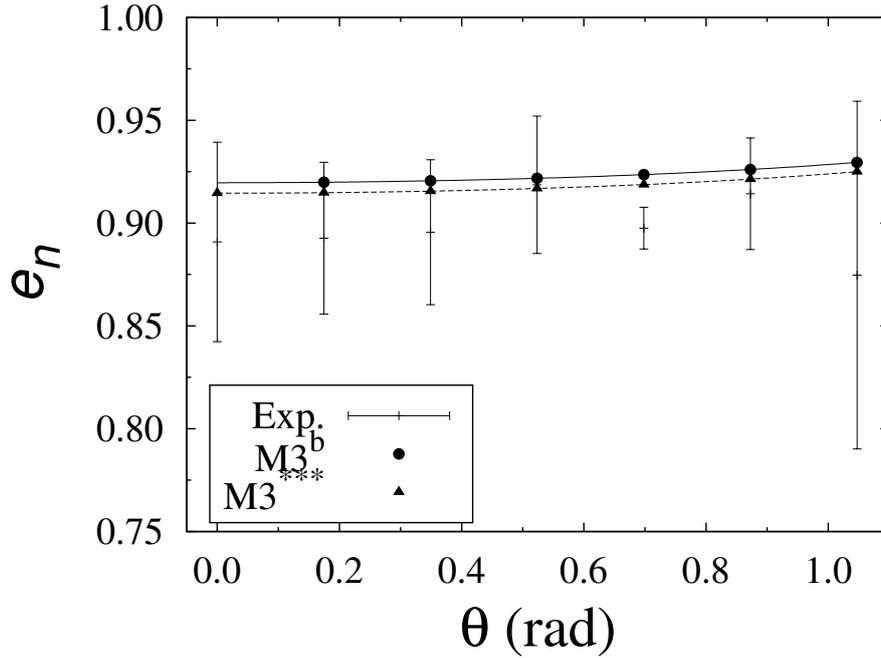


Figura 4.25: Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição normal na simulação dos dados experimentais utilizando o modelo $M3$ simplificado com os novos parâmetros ótimos ($M3_{***}$), obtidos pela minimização da função objetivo sem contabilizar os dados de velocidade angular.

para essa variável passou a ser aceitável, assim como aquela para o coeficiente de restituição tangencial. Porém, o valor da função objetivo permanece muito elevado, de forma que o teste χ^2 reprovava o ajuste realizado. Observando-se as variáveis a serem ajustadas percebe-se que aquela com maior erro é a velocidade angular a qual acaba contribuindo bastante para o valor da função objetivo. Além disso, considerando-se que o modelo pode estar deficiente devido à ausência do torque de rolamento, a velocidade angular será a mais afetada. Levando em consideração essas observações, foi realizado um novo procedimento de estimação de parâmetros para o modelo simplificado, ou seja, sem os efeitos de η_2 e, além disso, desconsiderando-se os dados de velocidade angular para fins de cálculo da função objetivo. Após a nova estimação, o valor ótimo obtido para o primeiro coeficiente de viscosidade foi de $2,3 \times 10^5 Pa \cdot s$, correspondendo a um valor de função objetivo de 50,19. As Figuras 4.25, 4.26 e 4.27 mostram os resultados obtidos para a comparação das simulações com o novo valor estimado para η_1 com aqueles obtidos ao se utilizar o valor-base.

É possível observar que, para todas as variáveis simuladas, as curvas são muito próximas. Na realidade, são coincidentes para o coeficiente de restituição tangencial e para a velocidade angular, sendo bastante próxima para o coeficiente de restituição normal. Considerando-se que o valor-base sugerido por ZHENG *et al.* [4] para o primeiro coeficiente de viscosidade, para esse caso, é de $2,1 \times 10^5 Pa \cdot s$ e que o

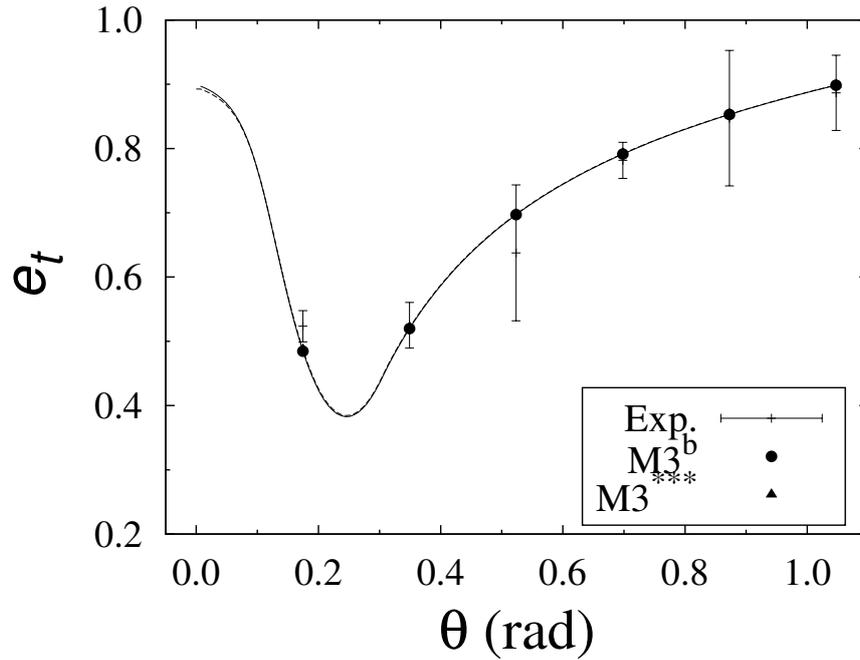


Figura 4.26: Comparação dos resultados obtidos para o coeficiente de restituição tangencial na simulação dos dados experimentais utilizando o modelo $M3$ simplificado com os novos parâmetros ótimos ($M3^{***}$), obtidos pela minimização da função objetivo sem contabilizar os dados de velocidade angular.

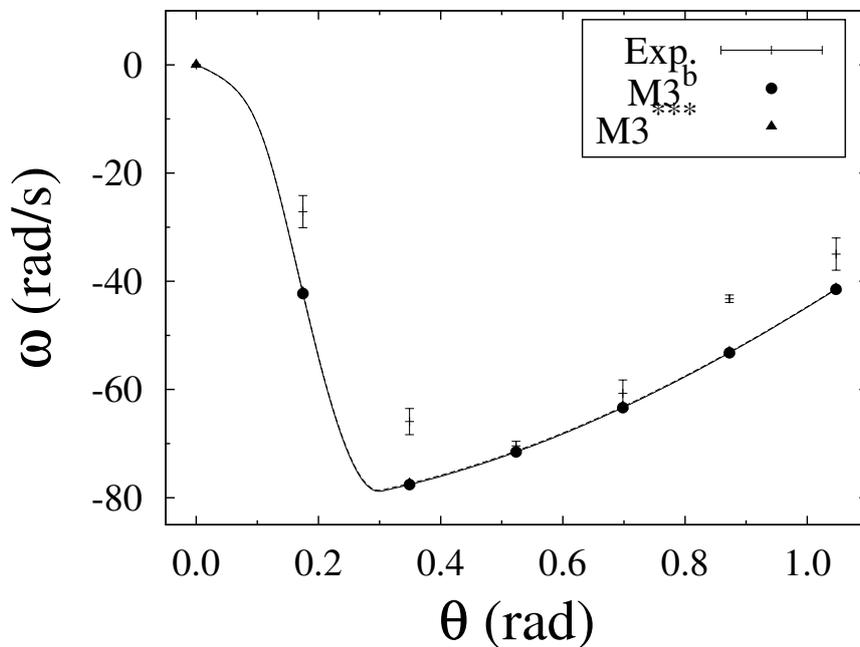


Figura 4.27: Comparação dos resultados obtidos para a velocidade angular na simulação dos dados experimentais utilizando o modelo $M3$ simplificado com os novos parâmetros ótimos ($M3^{***}$), obtidos pela minimização da função objetivo sem contabilizar os dados de velocidade angular.

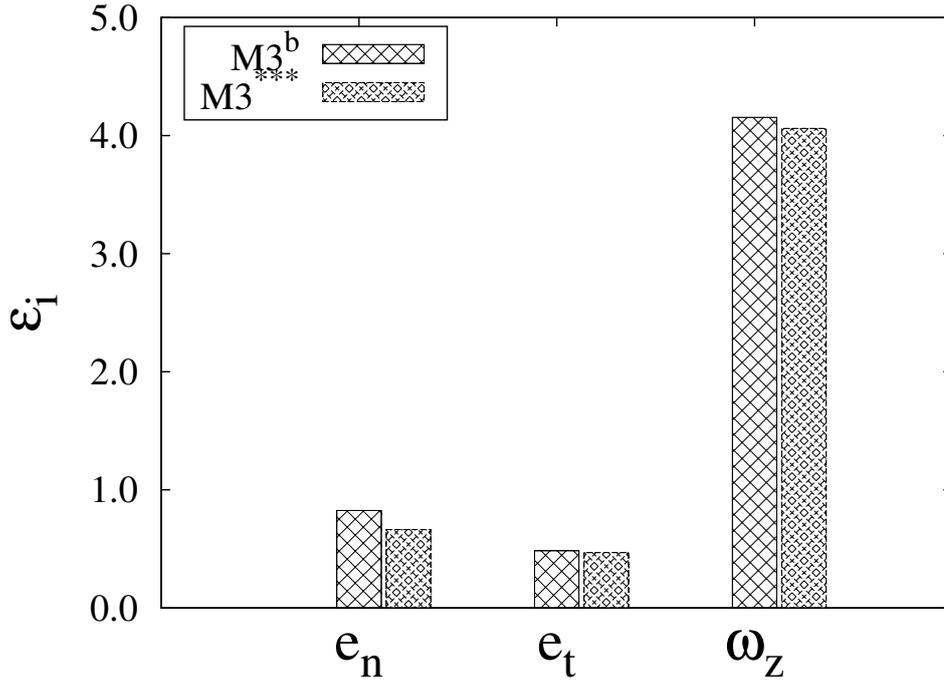


Figura 4.28: Histogramas dos índices de desvios relativos médios para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base, desconsiderando-se os efeitos de η_2 no modelo e os dados de velocidade angular para o cálculo da função objetivo.

valor ótimo calculado é de $2,3 \times 10^5 Pa \cdot s$, entende-se a proximidade dos resultados gerados por ambos os valores considerados. O histograma de índices de desvios médio e máximo para todas as variáveis analisadas são mostrados nas Figuras 4.28 e 4.29, respectivamente.

Os índices de desvios mostram que os ajustes para os coeficientes de restituição, geraram valores menores para os desvios, sendo considerados satisfatórios visto que ϵ mantém-se menor que a unidade. A velocidade angular sofre uma pequena redução no desvio mas ainda continua muito longe de ser aceitável. Comparado com o ajuste realizado a partir da função objetivo que contabilizava os dados de velocidade angular, houve uma ligeira piora nos resultados médios para os desvios, porém ainda aceitáveis, no que diz respeito às variáveis com menores erros, os coeficientes de restituição. O que é mais importante nos resultados nessa última análise é a redução substancial do valor da função objetivo. Anteriormente, considerando-se o modelo simplificado e levando-se em conta os dados de ω , a função objetivo atingia um valor mínimo de ordem de grandeza em torno de 10^3 enquanto que, nessa última estimativa, seu valor mínimo foi de 50,19. Tal valor, ainda é reprovado pelo teste χ^2 , porém, está muito mais próximo de alcançar o limite superior do intervalo obtido pelo mesmo, mostrado na inequação 4.6. Dessa forma, conclui-se que a para a estimação a um parâmetro, conforme realizada para o modelo simplificado, a hipótese

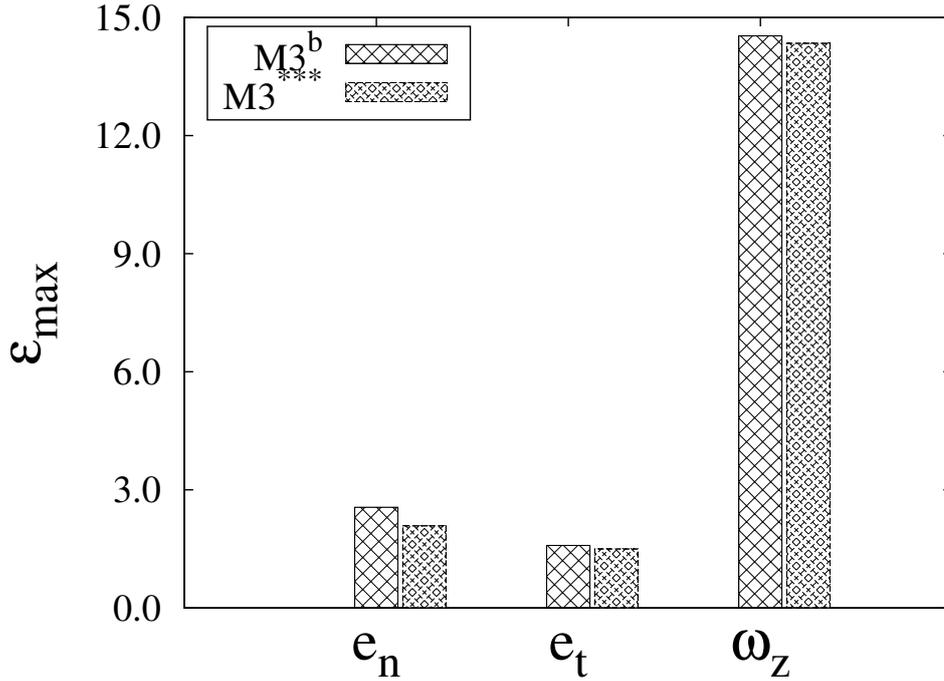


Figura 4.29: Histogramas dos índices de desvios relativos máximos para todas as variáveis simuladas utilizando-se os valores de parâmetros ótimo e base, desconsiderando-se os efeitos de η_2 no modelo e os dados de velocidade angular para o cálculo da função objetivo.

de erros experimentais subestimados, inicialmente considerada pouco provável, pode ser válida. É possível que o baixo número de experimentos tenha gerado uma variância amostral não representativa, de forma que esteja impedindo a aprovação do procedimento pelo teste χ^2 para a função objetivo. Portanto, não é possível afirmar ainda que tal resultado tenha se dado em função da qualidade do modelo, pois para isso seria necessário reproduzir o procedimento experimental com um maior número de ensaios a fim de obter uma melhor caracterização dos erros experimentais.

$$3,82 \leq F_{obj} \leq 21,9 \quad (4.6)$$

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

Neste capítulo serão revisados os principais objetivos desse trabalho e também apresentadas as principais conclusões obtidas ao longo do desenvolvimento da presente tese, através de uma síntese da mesma. Além disso, serão apresentadas sugestões para trabalhos futuros que eventualmente venham a dar continuidade à esta pesquisa. Tais sugestões são baseadas nas discussões realizadas ao longo do capítulo anterior e visam aprimorar os resultados obtidos pela metodologia proposta bem como motivar o surgimento de novas pesquisas na área do método dos elementos discretos, o qual tem crescido em importância na engenharia nos últimos anos.

5.1 Síntese e Conclusões

O método dos elementos discretos, usualmente conhecido pela sigla DEM proveniente de seu nome em inglês, *Discrete Element Method*, tem por objetivo simular a dinâmica de um sistema granular. O método consiste na aplicação das equações diferenciais de conservação de quantidade de movimento angular e linear para cada uma das partículas do sistema. A solução do sistema de equações só é possível se houver modelos disponíveis para as forças e os torques atuantes sobre as partículas, individualmente. Tais forças e torques podem ter diversas origens, sendo os modelos mais comumente considerados relacionados ao contato direto entre os corpos.

O grande diferencial do DEM, quando proposto, foi abrir mão de uma modelagem formal das deformações sofridas pelos corpos, substituindo-a por uma pseudo-deformação, dada pelo deslocamento relativo das partículas no ponto de contato e tendo como significado físico, a ideia de que os corpos poderiam se sobrepor desde que tal sobreposição fosse muito menor que os comprimentos característicos dos mesmos. Dessa forma, muitos modelos simplificados de força de contato surgiram, onde a maioria deles é baseada em analogias com equipamentos mecânicos. Tais modelos foram chamados ao longo dessa tese de modelos abstratos por darem origem a parâmetros ajustáveis que não possuem significado físico. Com o passar do tempo, novos

modelos foram surgindo a partir de abordagens mais comprometidas com a física do problema. Esses modelos são gerados a partir da utilização de modelos constitutivos para as tensões sofridas pelos corpos e oriundas do contato entre eles, os quais resultam no cálculo da força a partir da integração ao longo da área de contato. Tais modelos foram denominados nessa tese de modelos fenomenológicos e diferem da classe anterior por possuírem parâmetros calculáveis a partir de propriedades mecânicas dos materiais.

A busca por modelos de força de contato que descrevam adequadamente a realidade dos fenômenos físicos e que sejam dependentes de um conjunto de parâmetros que permita a generalização de seu uso ainda é um desafio, sendo um campo de pesquisa em desenvolvimento atualmente. Recentemente, um modelo fenomenológico foi proposto por ZHENG *et al.* [4] para o contato entre partículas esféricas de materiais viscoelásticos, os quais propuseram, pela primeira vez, um modelo completamente dependente apenas das propriedades dos materiais envolvidos. O potencial de generalização do modelo é atraente porém, uma dificuldade em sua utilização é obter dados para os primeiro e segundo coeficientes de viscosidade dos materiais envolvidos no contato, os quais são utilizados como parâmetros nas equações que o descrevem. Por não haver, na literatura consultada, um método consistente de determinação dos dois coeficientes de viscosidade para materiais sólidos, este se tornou o objetivo principal desta tese: O desenvolvimento de uma metodologia para a determinação dos coeficientes de viscosidade dos materiais utilizados no contato formulado pelo modelo de ZHENG *et al.* [4].

Antes de desenvolver a metodologia, foram realizados testes de comparação do modelo de ZHENG *et al.* [4] com modelos viscoelásticos clássicos e frequentemente utilizados na literatura. Os resultados mostraram que o novo modelo possui um desempenho superior ao dos demais, descrevendo com boa aproximação a realidade dos dados experimentais nas regiões de movimento sem deslizamento, onde os modelos anteriores costumam ter mais dificuldades. Para realizar tal análise, foram utilizadas as regras, consideradas heurísticas pelos presentes autores, propostas por ZHENG *et al.* [4], sem justificativas, para a determinação dos coeficientes de viscosidade em função do módulo de Young dos materiais. Os resultados das simulações utilizadas para a comparação demonstraram o potencial do novo modelo, denotado por *M3* ao longo desse trabalho.

O modelo em questão possui como parâmetros a serem determinados os dois coeficientes de viscosidade, os quais, por serem propriedades materiais, ao serem obtidos, podem ser utilizados em qualquer aplicação do modelo *M3*, independente do processo que esteja sendo simulado. Essa possibilidade de generalização, somada aos bons resultados da análise de comparação em relação aos modelos clássicos, foram as maiores motivações dos presentes autores. A metodologia proposta buscou

a praticidade e inspirou-se em experimentos de colisões entre partículas esféricas e superfícies planas, valendo-se das simplificações que surgem em decorrência desse caso específico. Foram privilegiados os sistemas cujas superfícies e partículas fossem de mesmo material, o que permitiria obter as propriedades do material em questão em vez de uma propriedade efetiva do sistema. O procedimento então proposto foi a estimação dos parâmetros do modelo a partir da minimização da função objetivo de máxima verossimilhança. Porém, antes de iniciar o procedimento foi necessário avaliar se o mesmo seria possível verificando a sensibilidade do modelo a variações nos parâmetros a serem determinados. Os dados experimentais a serem utilizados para uma eventual estimação foram definidos como aqueles fornecidos por DONG e MOYS [6] para o sistema formado por partícula e plano de aço cromado, tendo as medidas sido realizadas para os coeficientes de restituição normal e tangencial, bem como para a velocidade angular.

A análise de sensibilidade realizada baseou-se na faixa de valores proposta por ZHENG *et al.* [4], onde para se avaliar os efeitos de variação de um dos parâmetros, um deles era mantido em seu valor-base ao passo que o outro variava dentro da faixa considerada e vice-versa. Os resultados mostraram que ambos os parâmetros poderiam ter alguma influência na resposta do modelo, com uma maior variabilidade relacionada ao primeiro coeficiente de viscosidade. O segundo coeficiente de viscosidade apresentou uma fraca perturbação nas respostas para o coeficiente de restituição normal e para a velocidade angular. Apesar dessa última observação, considerou-se importante a manutenção do mesmo para o procedimento de estimação de parâmetros a ser realizada.

A solução do problema de estimação deu-se a partir da integração dos *softwares* de código livres chamados LIGGGHTS e NLOpt, o primeiro um simulador que utiliza o método dos elementos discretos para solução de problemas envolvendo escoamento granular e o segundo, um otimizador especializado na solução de problemas de otimização não-linear. Os valores obtidos para os parâmetros foram $5,49060 \times 10^5 Pa \cdot s$ para o primeiro coeficiente de viscosidade e $9,22531 \times 10^5 Pa \cdot s$ para o segundo, levando a um valor de função objetivo de 1357,93. O ajuste não foi considerável satisfatório pois os resultados mostraram uma penalização muito grande do ajuste do coeficiente de restituição normal para que se obtivesse pequenos ganhos no coeficiente de restituição tangencial e na velocidade angular. Além disso, o valor obtido para a função objetivo ficou fora do intervalo de confiança para a mesma, dado pelo método χ^2 , o que indica um ajuste ruim devido a possíveis causas, baixa qualidade do modelo ou erros experimentais subestimados. Considerou-se, a princípio, que o problema poderia ser do modelo visto que os dados não seriam reproduzidos e que os efeitos de torque de rolamento não foram considerados. Porém, ao avaliar-se o intervalo de confiança para os parâmetros obtidos constatou-se que o modelo

deveria ser simplificado a partir da anulação dos efeitos do segundo coeficiente de viscosidade visto que seu intervalo de confiança continha o valor nulo, de forma que não se pode garantir que o mesmo não o seja.

Um novo procedimento de estimação de parâmetros foi realizado considerando-se apenas os efeitos do primeiro coeficiente de viscosidade, o que levou a um valor ótimo de $3,15769 \times 10^5 Pa \cdot s$ com uma função objetivo de 1372,2. Conforme os resultados mostraram, essa nova solução reduziu muito os desvios médios associados ao coeficiente de restituição normal de forma que seu ajuste foi considerado satisfatório, assim como o ajuste para o coeficiente de restituição tangencial. O mesmo não pode ser dito a respeito da velocidade angular que, apesar da redução do desvio médio, manteve-se com um ajuste de qualidade ruim. Apesar da melhora em termos de desvios médios, o valor obtido para a função objetivo continuou fora da faixa de validade considerada pelo teste χ^2 , o que continua indicando um ajuste ruim. Verificou-se então o intervalo de confiança do parâmetro obtido e constatou-se uma redução na incerteza de sua determinação a qual atingiu um valor de 6,4%, inferior os 32% de incerteza do procedimento anterior. A validade do conjunto de premissas dada pelas hipóteses do experimento bem feito e do modelo perfeito, utilizadas como base para a formulação da função objetivo de máxima verossimilhança, foi testada. Observou-se que, para duas das variáveis, a média dos desvios não poderia ser considerada nula, de forma que a hipótese de experimento bem feito pode não ser adequada para o problema estudado.

Por fim, avaliou-se que os valores obtidos para a função objetivo são altos comparados aos limites fornecidos pelo teste χ^2 para que a mesma indique que o procedimento foi satisfatório. Dessa forma, observou-se que a manutenção da velocidade angular na formulação da função objetivo poderia estar contribuindo negativamente para o ajuste, pois é a variável com maiores erros experimentais. Além disso, essa é a variável mais afetada por efeitos de torque de rolamento, os quais não foram considerados nesse estudo. Dessa forma, optou-se por retirá-la do processo de otimização e o procedimento de estimação do primeiro coeficiente de viscosidade do material foi novamente executado. Os resultados mostraram que o ajuste para ambos os coeficientes de restituição são satisfatórios, na média e, além disso, o valor da função objetivo caiu para 50,19, duas ordens de grandeza menor que os valores anteriores. Dessa forma, concluiu-se que a hipótese de erros experimentais subestimados pode ser válida para o ajuste a um parâmetro do modelo em questão.

O desenvolvimento desta tese levou a uma proposta de metodologia para a determinação dos parâmetros do modelo de ZHENG *et al.* [4], de forma que o mesmo possa ser utilizado independente do processo a ser simulado. A generalização da aplicação do modelo estudado é a contribuição deixada pelo presente trabalho para o corpo do conhecimento científico no qual está inserido o método dos elementos discretos. O

autor ressalta a importância desta contribuição e encerra o trabalho iniciado nessa tese reconhecendo que, assim como qualquer conhecimento construído, a metodologia aqui proposta pode e deve ser testada continuamente de forma que, através do questionamento, possa ser julgada e aprimorada pela comunidade científica.

5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Baseando-se na discussão gerada pela análise dos resultados obtidos através da aplicação da metodologia proposta nessa tese, bem como das conclusões apresentadas, algumas sugestões serão fornecidas nessa seção com o objetivo de motivar a continuidade da pesquisa iniciada nesse trabalho, levando ao seu aperfeiçoamento. Como primeira sugestão, indica-se inserir um modelo de torque de rolamento no problema para avaliar se a ausência desse efeito será, por si só, suficiente para que o ajuste atinja um nível aceitável pelo teste χ^2 . Um modelo recentemente proposto pelos mesmos desenvolvedores do modelo de força de contato *M3*, avaliado nessa tese, foi formulado. O modelo de torque de rolamento proposto por ZHENG *et al.* [98] também possui como parâmetros a serem determinados os mesmos coeficientes de viscosidade. Dessa forma, ao se inserir o modelo de torque de rolamento, é possível que o segundo coeficiente de viscosidade torne-se importante para a análise.

Uma segunda sugestão seria avaliar as respostas geradas pelo modelo, utilizando-se os resultados obtidos nessa tese, para um caso aplicado, onde muitas partículas estão presentes. A validação do modelo de força por ZHENG *et al.* [4] foi feita baseando-se em dados gerados por simulações FEM para um sistema formado por materiais hipotéticos e para validá-lo frente à dados reais, os resultados obtidos nessa tese são suficientes. Porém, na simulação de uma situação real e em três dimensões, outros efeitos podem surgir e agir de forma igualmente importante aos considerados para a estimação dos parâmetros feita nessa tese, para a qual considerou-se apenas os efeitos de força em um caso bi-dimensional. Nas novas circunstâncias sugeridas, além dos efeitos de rolamento, efeitos relativos ao giro, ou *spin*, das partículas podem influenciar o comportamento do sistema de forma que os valores de parâmetros obtidos utilizando-se a metodologia proposta podem não ser satisfatórios. Nessa caso, um outro problema seria desenvolver um modelo para a resistência ao giro, visto que, até então não há modelos publicados na literatura que contemplem esse fenômeno.

Por fim, mas não menos importante, sugere-se que, se possível, os experimentos sejam reproduzidos com um número maior de réplicas e que seus erros sejam devidamente caracterizados. Uma das hipóteses assumidas para a utilização da função objetivo de máxima verossimilhança é que os erros experimentais seguem uma distribuição normal de probabilidades e, portanto, a caracterização dos mesmos é

fundamental para que a utilização da função de máxima verossimilhança seja asseguradamente confiável. Além disso, essa caracterização permitirá determinar as medidas de média e variância experimental para as variáveis de maneira que a hipótese de erros experimentais subestimados como explicação para a não adequação dos valores de função objetivo encontrados nesse trabalho, em relação ao teste χ^2 , possa ser testada.

Referências Bibliográficas

- [1] HERTZ, H. “On the contact of elastic solids”. In: Jones, D., Schott, G. (Eds.), *Miscellaneous Papers by Heinrich Hertz*, 1 ed., cap. 5, New York, USA, Macmillan and Co., 1896.
- [2] CUNDALL, P., STRACK, O. “A discrete numerical model for granular assemblies”, *Géotechnique*, v. 29, pp. 47–65, 1979.
- [3] TSUJI, Y., TANAKA, T., ISHIDA, T. “Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe”, *Powder Technology*, v. 71, pp. 239–250, 1992.
- [4] ZHENG, Q., ZHU, H., YU, A. “Finite element analysis of the contact forces between a viscoelastic sphere and a rigid plane”, *Powder Technology*, v. 226, pp. 130–142, 2012.
- [5] KRUGGEL-EMDEN, H., WIRTZ, S., SCHERER, V. “A study on tangential force laws applicable to the discrete element method (DEM) for materials with viscoelastic or plastic behavior”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, pp. 1523–1541, 2008.
- [6] DONG, H., MOYS, M. “Experimental study of oblique impacts with initial spin”, *Powder Technology*, v. 161, pp. 22–31, 2006.
- [7] FOERSTER, S., LOUGE, M., CHANG, H., ALLIA, K. “Measurements of the collision properties of small spheres”, *Physics of Fluids*, v. 6, pp. 1108–1115, 1994.
- [8] PÖSCHEL, T., SCHWAGER, T. *Computational Granular Dynamics - Models and Algorithms*. 1 ed. , Springer, 2005.
- [9] ZHU, H., YU, A. “A theoretical analysis of the force models in discrete element method”, *Powder Technology*, v. 161, pp. 122–129, 2006.
- [10] ZHU, H., ZHOU, Z., YANG, R., YU, A. “Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, pp. 5728–5770, 2008.

- [11] JAEGER, H., NAGEL, S., BEHRINGER, R. “The Physics of Granular Materials”, *Physics Today*, v. 49, n. 4, pp. 32–38, 1996.
- [12] FATIH, G. *Mechanics of Granular Materials: Constitutive Behavior and Pattern Transformation*. Tese de D.Sc., Delft University Technology, Delft, Netherlands, 2012.
- [13] MASSON, S., MARTINEZ, J. “Micromechanical Analysis of the shear behavior of a granular material”, *Journal of Engineering Mechanics*, v. 127, pp. 1007–1016, 2001.
- [14] THORNTON, C., ZHANG, L. “Numerical simulations of the direct shear test”, *Chemical Engineering and Technology*, v. 26, pp. 153–156, 2003.
- [15] THORNTON, C., ZHANG, L. “A numerical examination of shear banding and simple shear non-coaxial flow rules”, *Philosophical Magazine*, v. 86, pp. 3425–3452, 2006.
- [16] GUTFRAIND, R., POULIQUEN, O. “Study of the origin of shear zones in quasi-static vertical chute flows by using discrete particle simulations”, *Mechanics of Materials*, v. 24, pp. 273–285, 1996.
- [17] URABE, C. “Dynamics of fluctuation of the top location of a sandpile”, *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 74, pp. 2475–2479, 2005.
- [18] ZEILSTRA, C., COLLIGNON, J., VAN DER HOEF, M., DEEN, N., KUIPERS, J. “Experimental and numerical study of wall-induced granular convection”, *Powder Technology*, v. 184, pp. 166–176, 2008.
- [19] PORTILLO, P., MUZZIO, F., IERAPETRITOU, M. “Hybrid DEM-compartment modeling approach for granular mixing”, *A.I.Ch.E Journal*, v. 53, n. 1, pp. 119–128, 2007.
- [20] MORRISON, R., SHI, F., WHYTE, R. “Modelling of incremental rock breakage by impact for use in DEM models”, *Minerals Engineering*, v. 20, pp. 303–309, 2007.
- [21] JAYASUNDARA, C., YANG, R., YU, A., CURRY, D. “Discrete particle simulation of particle flow in IsaMill”, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 45, pp. 6349–6359, 2006.
- [22] OTTINO, J., KHAKHAR, D. “Mixing and segregation of granular materials”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 32, pp. 55–91, 2000.

- [23] LEE, J., HERRMANN, H. “Angle of repose and angle of marginal stability — molecular-dynamics of granular particles”, *Journal of Physics A - Mathematical and General*, v. 26, n. 2, pp. 373–383, 1993.
- [24] AOKI, K., AKIYAMA, T. “Simulation studies of pressure and density wave propagations in vertically vibrated beds of granules”, *Physical Review E*, v. 52, n. 3, pp. 3288–3291, 1995.
- [25] BAXTER, J., TÜZÜN, U., BURNELL, J., HEYES, D. “Granular dynamics simulation of two-dimensional heap formation”, *Physical Review E*, v. 55, n. 3, pp. 3546–3554, 1997.
- [26] BARDET, J., HUANG, Q. “Numerical modeling of micropolar effects in idealized granular materials”, *American Society of Mechanical Engineers*, v. 37, pp. 85–92, 1992.
- [27] MORGAN, J. “Capturing physical phenomena in particle dynamics simulations of granular fault gouge”, *3rd ACES workshop proceedings, Melbourne and Brisbane*, pp. 23–30, 2003.
- [28] SAKAGUCHI, E., OZAKI, E., IGARASHI, T. “Plugging of the flow of granular materials during the discharge from a silo”, *Int. J. Mod. Phys. B*, v. 7, pp. 1949–1963, 1993.
- [29] LI, Y., XU, Y., THORNTON, C. “A comparison of discrete element simulations and experiments for sandpiles composed of spherical particles”, *Powder Technology*, v. 160, pp. 219–228, 2005.
- [30] ZHOU, Y., XU, B., YU, A., ZULLI, P. “An experimental and numerical study of the angle of repose of coarse spheres”, *Powder Technology*, v. 125, n. 1, pp. 45–54, 2002.
- [31] MATUTTIS, H., LUDING, S., HERRMANN, H. “Discrete element simulations of dense packing and heaps made of spherical and non-spherical particles”, *Powder Technology*, v. 109, n. 1-3, pp. 278–292, 2000.
- [32] OOI, J. “Establishing predictive capabilities of DEM - Verification and validation for complex granular processes”, *AIP Conferences Proceedings*, v. 1542, n. 20, pp. 20–24, 2013.
- [33] ABREU, C. *Método de Monte Carlo aplicado à compactação e segregação de partículas*. Dissertação de M.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2000.

- [34] ABREU, C. *Simulação Computacional de Sistemas Granulares: Aplicação dos Métodos de Monte Carlo e de Elementos Distintos*. Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2004.
- [35] HOOMANS, B., KUIPERS, J., BRIELS, W., VAN SWAAIJ, W. “Discrete Particle Simulation of Bubble and Slug Formation in a Two-Dimensional Gas-Fluidised Bed: A Hard-Sphere Approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 1, pp. 99–118, 1996.
- [36] XU, B., YU, A. “Numerical Simulation of the Gas-Solid Flow in a Fluidized Bed by Combining Discrete Particle Method with Computational Fluid Dynamics”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 16, pp. 2785–2809, 1997.
- [37] TSUJI, Y., KAWAGUCHI, T., TANAKA, T. “Discrete Particle Simulation of Two-Dimensional Fluidized Bed”, *Powder Technology*, v. 77, pp. 79–87, 1993.
- [38] FENG, Y., YU, A. “Assessment of Model Formulations in the Discrete Particle Simulation of Gas-Solid Flow”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 43, pp. 8378–8390, 2004.
- [39] PATIL, A., PETERS, E., KUIPERS, J. “Comparison of CFD-DEM heat transfer simulations with infrared/visual measurements”, *Chemical Engineering Journal*, v. 277, pp. 388–401, 2015.
- [40] BEINERT, S., FRAGNIERE, G., SCHILDE, C., KWADE, A. “Analysis and modelling of bead contacts in wet-operating stirred media and planetary ball mills with CFD-DEM simulations”, *Chemical Engineering Science*, v. 134, pp. 648–662, 2015.
- [41] SUN, X., SAKAI, M. “Three-dimensional simulation of gas-solid-liquid flows using DEM-VOF”, *Chemical Engineering Science*, v. 134, pp. 531–548, 2015.
- [42] JOVANOVIĆ, A., PEZO, M., PEZO, L., LEVIĆ, L. “Dem/CFD analysis of granular flow in static mixers”, *Powder Technology*, v. 266, pp. 240–248, 2014.
- [43] NING, G., ZHAO, J. “A coupled FEM/DEM approach for hierarchical multiscale modelling of granular media”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 99, n. 11, pp. 789–818, 2014.

- [44] MAHABADI, O., COTRELL, B. E., GRASSELLI, G. “An example of realistic modelling of rock dynamics problems: FEM/DEM simulation of dynamic brazilian test on barre granite”, *Rock Mechanics and Rock Engineering*, v. 43, n. 6, pp. 707–716, 2010.
- [45] MAENO, S., BIERAWSKI, L., WALDEMAR, M., OGAWA, M. “VOF-DEM-FEM combined model of the reef breakwater collapse”, *Coastal Engineering Journal*, v. 51, n. 3, pp. 223–242, 2009.
- [46] NITKA, M., COMBE, G., CRISTIAN, D., DESRUES, J. “Two-scale modeling of granular materials: a DEM-FEM approach”, *Granular Matter*, v. 13, n. 3, pp. 227–281, 2011.
- [47] KRUGGEL-EMDEN, H., SIMSEK, E., RICKELT, S., WIRTZ, S., SCHERER, V. “Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method”, *Powder Technology*, v. 171, pp. 157–173, 2007.
- [48] VU-QUOC, L., ZHANG, X. “An accurate and efficient tangential force–displacement model for elastic frictional contact in particle-flow simulations.” *Mechanics of Materials*, v. 31, pp. 235–269, 1999.
- [49] WALTON, O., BRAUN, R. “Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks”, *Journal of Rheology*, v. 30, n. 5, pp. 949–980, 1986.
- [50] THORNTON, C., CUMMINGS, S., CLEARY, P. “An investigation of the comparative behaviour of alternative contact force models during inelastic collisions”, *Powder Technology*, v. 233, pp. 30–46, 2013.
- [51] THORNTON, C., CUMMINS, S., CLEARY, P. “An Investigation of the Comparative Behaviour of Alternative Contact Force Models During Elastic Collisions”, *Powder Technology*, v. 210, pp. 189–197, 2011.
- [52] THORNTON, C. “Coefficient of restitution for collinear collisions of elastic perfectly plastic spheres”, *Journal of Applied Mechanics—Transactions of the ASME*, v. 64, n. 2, pp. 383–386, 1997.
- [53] THORNTON, C., NING, Z. “A theoretical model for the stick/bounce behaviour of adhesive, elastic-plastic spheres”, *Powder Technology*, v. 99, n. 2, pp. 154–162, 1997.
- [54] HALLIDAY, D., RESNICK, R., WALKER, J. *Fundamentos de Física - Mecânica*. 9th ed. , Wiley, 2012.

- [55] JOHNSON, K. *Contact Mechanics*. 1st ed. , Cambridge University Press, 1985.
- [56] ARIS, R. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. 1 ed. , Dover Publications, 1990.
- [57] CROWE, C., SCHWARZKOPF, J., SOMMERFELD, M., TSUJI, Y. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 2nd ed. , CRC Press, 2012.
- [58] MALONE, K., XU, B. “Determination of contact parameters for discrete element method simulations of granular systems”, *Particuology*, v. 6, pp. 521–528, 2008.
- [59] KRUGGEL-EMDEN, H., STURM, M., WIRTZ, S., SCHERER, V. “Selection of an appropriate time integration scheme for the discrete element method (DEM)”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 32, pp. 2263–2279, 2008.
- [60] KRUGGEL-EMDEN, STEPANEK, F., MUNJIZA, A. “Performance of integration schemes in discrete element simulations of particle systems involving consecutive contacts”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 35, pp. 2152–2157, 2011.
- [61] FREIGE, F., LANGSTON, P. “Integration schemes and damping algorithms in distinct element models”, *Advanced Powder Technology*, v. 15, n. 2, pp. 227–245, 2004.
- [62] O’SULLIVAN, C., BRAY, J. “Selecting a suitable time step for discrete element simulations that use the central difference time integration scheme”, *Engineering Computations*, v. 21, n. 2–4, pp. 278–303, 2004.
- [63] ROUGIER, E., MUNJIZA, A., JOHN, N. “Numerical Comparison of some explicit time integration schemes used in DEM, FEM/DEM and molecular dynamics”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 61, n. 6, pp. 856–879, 2005.
- [64] ZHANG, D., WHITEN, W. “Step size control for efficient discrete element simulation”, *Minerals Engineering*, v. 14, n. 10, pp. 1341–1346, 2001.
- [65] DURY, C., RISTOW, G. “Radial segregation in a two-dimensional rotating drum”, *Journal de Physique I*, v. 7, n. 5, pp. 737–745, 1997.
- [66] PETERS, B., DZIUGYS, A., HUNSINGER, H., KREBS, L. “An approach to qualify the intensity of mixing on a forward acting grate”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 6, pp. 1649–1659, 2005.

- [67] THOMPSON, P., GREST, G. “Granular flow - Friction and the dilatancy transition”, *Physical Review Letters*, v. 67, n. 13, pp. 1751–1754, 1991.
- [68] LANGSTON, P., TUZUM, U., HEYES, D. “Continuous potential discrete particle simulations of stress and velocity fields in hoppers: Transition from fluid to granular flow”, *Chemical Engineering Science*, v. 49, n. 8, pp. 1259–1275, 1994.
- [69] KRUGGEL-EMDEN, H., WIRTZ, S., SCHERER, V. “An analytical solution of different configurations of the linear viscoelastic normal and frictional-elastic tangential contact model”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 23, pp. 6914–6926, 2007.
- [70] DI MAIO, F., DI RENZO, A. “Analytical solution for the problem of frictional-elastic collisions of the spherical particles using the linear model”, *Chemical Engineering Science*, v. 59, pp. 3461–3475, 2004.
- [71] CALLISTER, W. J. *Materials Science and Engineering - An introduction*. 7th ed. , John Wiley and Sons, 2007.
- [72] MINDLIN, R., DERESIEWICZ, H. “Elastic spheres in contact under varying oblique forces”, *Journal of Applied Mechanics*, v. 20, pp. 327–344, 1953.
- [73] KUWABARA, G., KONO, K. “Restitution coefficient in collision between two spheres”, *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 26, pp. 1230–1233, 1987.
- [74] BRILLIANTOV, N., SPAHN, F., HERTZSCH, J., POSCHEL, T. “A model for collisions in granular gases”, *Phys. Rev. E*, v. 53, pp. 1–12, 1996.
- [75] DINTWA, E., VAN ZEEBROECK, M., TIJSKENS, E., RAMON, H. “Determination of parameters of a tangential contact force model for viscoelastic spheroids (fruits) using a rheometer device”, *Biosystems Engineering*, v. 91, n. 3, pp. 321–327, 2005.
- [76] ZHANG, D., WHITEN, W. “The calculation of contact forces between particles using spring and damping models”, *Powder Technology*, v. 88, pp. 59–64, 1996.
- [77] BRILLIANTOV, N., ANASTASIYA, V., DENIS, S. “A dissipative force between colliding viscoelastic bodies: Rigorous approach”, *Europhysics Letters*, v. 109, n. 1, pp. 140051–140056, 2015.
- [78] “ESSS Website”. jan. 2014. Disponível em: <<http://www.esss.com.br/>>.

- [79] “EDEM Website”. jan. 2014. Disponível em: <<http://www.dem-solutions.com/>>.
- [80] KOZICKI, J., DONZÉ, F. “YADE-OPEN DEM: an open-source software using a discrete element method to simulate granular material”, *Engineering Computations*, v. 26, n. 7, pp. 786–805, 2009.
- [81] KLOSS, C., GONIVA, C. “LIGGGHTS - Open source discrete element simulations of granular materials based on LAMMPS”, *Supplemental Proceedings : Materials Fabrication, Properties, Characterization, and Modeling*, v. 2, pp. 781–788, 2011.
- [82] KLOSS, C., GONIVA, C., HAGER, A., AMBERGER, S., PIRKER, S. “Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM”, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, v. 12, n. 2/3, pp. 140–152, 2012.
- [83] VEDACHALAM, V. *Discrete Element Modelling of Granular Snow Particles Using LIGGGHTS*. Dissertação de M.Sc., University of Edinburgh, Edinburgh, UK, 2011.
- [84] “YADE Website”. jan. 2014. Disponível em: <<https://yade-dem.org/doc/>>.
- [85] “LIGGGHTS Website”. jan. 2014. Disponível em: <<http://cfdem.dcs-computing.com/?q=OpenSourceDEM>>.
- [86] LORENZ, A., TUOZZOLO, C., LOUGE, M. “Measurements of Impact Properties of Small, Nearly Spherical Particles”, *Experimental Mechanics*, v. 37, n. 3, pp. 292–298, 1997.
- [87] GORHAM, D., KHARAZ, A. “The measurements of particle rebound characteristics”, *Powder Technology*, v. 112, pp. 193–202, 2000.
- [88] MAW, N., BARBER, J., FAWCETT, J. “Oblique impacts of elastic spheres”, *Wear*, v. 38, n. 1, pp. 101–114, 1976.
- [89] STEVENS, A., HRENYA, C. “Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts”, *Powder Technology*, v. 154, pp. 99–109, 2005.
- [90] FOERSTER, S. *Measurements of particle collision properties*. Dissertação de M.Sc., Faculty of the Graduate Scholl of Cornell University, New York, USA, 1993.

- [91] SCHAFFER, J., DIPPEL, S., WOLF, D. “Force schemes in simulations of granular materials”, *Journal de Physique I*, v. 6, n. 1, pp. 5–20, 1996.
- [92] PINTO, J., SCHWAAB, M. *Análise de Dados Experimentais I - Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros*. 1st ed. Rio de Janeiro, e-papers, 2007.
- [93] SCHWAAB, M., BISCAIA JR., E., MONTEIRO, J., PINTO, J. “Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, pp. 1542–1552, 2008.
- [94] LARENTIS, A., BENTES JR., A., RESENDE, N., SALIM, V., PINTO, J. “Analysis of experimental errors in catalytic tests for production of synthesis gas”, *Applied Catalysis A: General*, v. 242, pp. 365–379, 2003.
- [95] JOHNSON, S. G. “The NLOpt nonlinear-optimization package”. 2016. Disponível em: <<http://ab-initio.mit.edu/nlopt>>.
- [96] KAELO, P., ALI, M. “Some variants of the controlles random search algorithm for global optimization”, *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 130, n. 2, pp. 253–264, 2006.
- [97] POWELL, M. “Direct search algorithms for optimization calculations”, *Acta Numerica*, v. 7, pp. 287–336, 1998.
- [98] ZHENG, Q., ZHU, H., YU, A. “Finite element analysis of the rolling friction of a viscous particle on a rigid plane”, *Powder Technology*, v. 207, pp. 401–406, 2011.

Apêndice A

Modelos Viscoelásticos

Os modelos viscoelásticos utilizados nas simulações realizadas no presente trabalho foram os modelos de CUNDALL e STRACK [2], TSUJI *et al.* [3] e ZHENG *et al.* [4], descritos ao longo do Capítulo 2 e denotados por $M1$, $M2$ e $M3$, respectivamente, no Capítulo 3. As equações para cada um dos modelos citados encontram-se resumidas neste apêndice.

É importante lembrar que uma força pode ser escrita em termos de suas componentes em relação a um eixo local de coordenadas. A definição do eixo local de coordenadas para um contato compreende, usualmente, duas direções. Uma direção normal externa à partícula em análise e uma direção tangencial. O vetor unitário da direção normal a uma partícula i em análise, $\hat{\mathbf{n}}$ é definida matematicamente de acordo com a Equação A.1, considerando-se que tal partícula possui um vetor posição do centro de massa dado por \mathbf{r}_i , em relação a um sistema de coordenadas global fixo, e esteja em contato com uma partícula j , a qual possui um vetor posição do centro de massa dado por \mathbf{r}_j , em relação a um sistema de coordenadas global fixo.

$$\hat{\mathbf{n}} \doteq \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (\text{A.1})$$

O vetor unitário da direção tangencial $\hat{\mathbf{t}}$ é obtido a partir da velocidade linear relativa entre as partículas i e j no ponto de contato, $\mathbf{v}_{c,ij}$, dada pela Equação A.2, e da sua componente normal, $\mathbf{v}_{c,ij,n}$, dada pela Equação A.3, conforme mostrado na Equação A.4.

$$\mathbf{v}_{c,ij} = (\mathbf{v}_{cm,i} - \mathbf{v}_{cm,j}) + (\boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{R}_i - \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{R}_j) \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{v}_{c,ij,n} = \mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{\mathbf{t}} \doteq \frac{\mathbf{v}_{c,ij} - \mathbf{v}_{c,ij,n}}{|\mathbf{v}_{c,ij} - \mathbf{v}_{c,ij,n}|} \quad (\text{A.4})$$

Baseando-se no sistema local de coordenadas definido pelos vetores unitários $\hat{\mathbf{n}}$ e $\hat{\mathbf{t}}$, a força de contato pode ser decomposta em termos de suas componentes nas

direções normal e tangencial, conforme mostrado na Equação A.5

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_t = F_n \hat{\mathbf{n}} + F_t \hat{\mathbf{t}} \quad (\text{A.5})$$

Os modelos viscoelásticos a serem resumidos nesse apêndice encontram-se escritos em termos de suas componentes normal, \mathbf{F}_n , e tangencial, \mathbf{F}_t . Tais modelos são usualmente escritos em termos das componentes normal e tangencial do vetor deslocamento relativo entre as partículas no ponto de contato, usualmente chamados de deformações normal, δ_n , e tangencial, δ_t , respectivamente, e de suas respectivas taxas de variação com o tempo, $\dot{\delta}_n$ e $\dot{\delta}_t$. As referidas variáveis são definidas conforme mostrado nas equações A.6, A.7, A.8 e A.9.

$$\delta_n \doteq \left(\int_t \mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{n}} dt \right) \hat{\mathbf{n}} \quad (\text{A.6})$$

$$\delta_t \doteq \left(\int_t \mathbf{v}_{c,ij} \cdot \hat{\mathbf{t}} dt \right) \hat{\mathbf{t}} \quad (\text{A.7})$$

$$\dot{\delta}_n \doteq \frac{d\delta_n}{dt} \quad (\text{A.8})$$

$$\dot{\delta}_t \doteq \frac{d\delta_t}{dt} \quad (\text{A.9})$$

É importante lembrar que, caso o limite de Coulomb para a fricção seja violado, a o vetor deformação tangencial deve ser tal que

$$|\mathbf{F}_t| = \mu |\mathbf{F}_n| \quad (\text{A.10})$$

e, portanto, para esses casos, não deve ser calculado utilizando-se a Equação A.7.

A.1 Modelo de CUNDALL e STRACK [2]

A componente normal do modelo de CUNDALL e STRACK [2], denotado no presente trabalho por $M1$, é calculada conforme mostra a Equação A.11

$$\mathbf{F}_n = -k_n \delta_n - \gamma_n \dot{\delta}_n \quad (\text{A.11})$$

onde k_n e γ_n são a rigidez normal e o coeficiente de amortecimento normal, respectivamente.

A componente tangencial deste mesmo modelo é calculada conforme mostra a Equação A.12

$$\mathbf{F}_t = -k_t \delta_t - \gamma_t \dot{\delta}_t \quad (\text{A.12})$$

onde k_t e γ_t são a rigidez tangencial e o coeficiente de amortecimento tangencial,

respectivamente.

A.2 Modelo de TSUJI *et al.* [3]

A componente normal do modelo de TSUJI *et al.* [3], denotado no presente trabalho por $M2$, é calculada conforme mostra a Equação A.13

$$\mathbf{F}_n = -\tilde{k}_n |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\delta}_n - \tilde{\gamma}_n \dot{\boldsymbol{\delta}}_n \quad (\text{A.13})$$

onde \tilde{k}_n e $\tilde{\gamma}_n$ são a rigidez normal e o coeficiente de amortecimento normal, respectivamente.

A componente tangencial deste mesmo modelo é calculada conforme mostra a Equação A.14

$$\mathbf{F}_t = -\tilde{k}_t |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\delta}_t - \tilde{\gamma}_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_t \quad (\text{A.14})$$

onde \tilde{k}_t e $\tilde{\gamma}_t$ são a rigidez tangencial e o coeficiente de amortecimento tangencial, respectivamente.

A.3 Modelo de ZHENG *et al.* [4]

A componente normal do modelo de ZHENG *et al.* [4], denotado no presente trabalho por $M3$, é calculada conforme mostra a Equação A.15

$$\mathbf{F}_n = -\tilde{k}_n |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\delta}_n - k \tilde{\gamma}_n |\boldsymbol{\delta}_n|^{\frac{1}{2}} \dot{\boldsymbol{\delta}}_n \quad (\text{A.15})$$

onde \tilde{k}_n e $\tilde{\gamma}_n$ são a rigidez normal e o coeficiente de amortecimento normal, respectivamente, e k é um fator de correção. É importante ressaltar que a rigidez normal para o modelo de ZHENG *et al.* [4] é igual à rigidez normal para o modelo de TSUJI *et al.* [3] pois as parcelas elásticas de ambos os modelos são baseadas no mesmo modelo de referência, no caso, o modelo de HERTZ [1].

A componente tangencial deste mesmo modelo é calculada conforme mostra a Equação A.16

$$\mathbf{F}_t^z = -\frac{\mu |\mathbf{F}_n|}{|\boldsymbol{\delta}_t|} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{\min(|\boldsymbol{\delta}_t|; \delta_{t,max})}{\delta_{t,max}} \right]^{\frac{3}{2}} \right\} \boldsymbol{\delta}_t - h \frac{\eta_1}{2G \delta_{t,max}} \left[\frac{3}{2} \mu |\mathbf{F}_n| \sqrt{1 - \frac{\min(|\boldsymbol{\delta}_t|; \delta_{t,max})}{\delta_{t,max}}} \right] \dot{\boldsymbol{\delta}}_t \quad (\text{A.16})$$

onde $\delta_{t,max}$ é dado pela Equação A.17

$$\delta_{t,max} = \frac{1}{2} \mu |\boldsymbol{\delta}_n| \frac{2 - \nu}{1 - \nu} \quad (\text{A.17})$$

e G é o módulo de cisalhamento do material da partícula. O parâmetro h é um fator de correção.

Por fim, a força tangencial é obtida conforme a Equação A.18

$$\mathbf{F}_t = -\frac{\min(|\mathbf{F}_t^z|; \mu|\mathbf{F}_n|)}{|\boldsymbol{\delta}_t|} \boldsymbol{\delta}_t \quad (\text{A.18})$$

Apêndice B

Parâmetros dos Modelos Viscoelásticos

Um resumo dos procedimentos realizados para obter os parâmetros dos modelos viscoelásticos utilizados no presente trabalho é apresentado a seguir.

B.1 Modelo de CUNDALL e STRACK [2]

Os parâmetros do modelo de CUNDALL e STRACK [2] são as rigidezes normal e tangencial, denotadas ao longo do presente trabalho por k_n e k_t , respectivamente, além dos coeficientes de amortecimento normal e tangencial, denotados ao longo do presente trabalho por γ_n e γ_t , respectivamente.

Os valores para a rigidez normal e para o coeficiente de amortecimento normal tanto para o sistema Vidro/Alumínio, utilizado por FOERSTER *et al.* [7], quanto para o sistema Aço/Aço, utilizado por DONG e MOYS [6], foram extraídos do trabalho de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5]. O valor do coeficiente de amortecimento tangencial foi considerado igual ao valor do coeficiente de amortecimento normal.

Os valores para a rigidez tangencial foram calculados conforme a Equação B.1 [5], [47]

$$k_t = \kappa m_{eff} \frac{\pi^2}{t_c^2} \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\kappa = \left(\frac{1 - \nu_a}{G_a} + \frac{1 - \nu_b}{G_b} \right) \left(\frac{1 - 0,5\nu_a}{G_a} + \frac{1 - 0,5\nu_b}{G_b} \right)^{-1} \quad (\text{B.2})$$

$$m_{eff} = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} \quad (\text{B.3})$$

$$t_c = \pi \left[\frac{k_n}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma_n}{2m_{eff}} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (\text{B.4})$$

B.2 Modelo de TSUJI *et al.* [3]

Os parâmetros do modelo de TSUJI *et al.* [3] são as rigidezes normal e tangencial, denotadas ao longo do presente trabalho por \tilde{k}_n e \tilde{k}_t , respectivamente, além dos coeficientes de amortecimento normal e tangencial, denotados ao longo do presente trabalho por $\tilde{\gamma}_n$ e $\tilde{\gamma}_t$, respectivamente.

Os valores para a rigidez normal foram calculados através da Equação B.5 [3]

$$\tilde{k}_n = \frac{4}{3} \sqrt{R_p} \left[\frac{(1 - \nu_p^2)}{E_p} + \frac{(1 - \nu_s^2)}{E_s} \right]^{-1} \quad (\text{B.5})$$

onde os subíndices p e s denotam propriedades relativas à partícula esférica e à superfície plana, respectivamente.

Os valores para o coeficiente de amortecimento normal foram calculados através da Equação B.6

$$\tilde{\gamma}_n = \alpha \sqrt{m_p \tilde{k}_n} |\boldsymbol{\delta}_n|^{1/4} \quad (\text{B.6})$$

onde α é um coeficiente relacionado com o coeficiente de restituição normal e obtido através do gráfico mostrado na Figura B.1, extraído do trabalho de TSUJI *et al.* [3].

Os valores dos coeficientes de restituição normal, necessários para a obtenção de α , para os sistemas vidro/alumínio e aço/aço, usados nas simulações do presente trabalho, são, respectivamente, 0,831 e 0,95 e foram extraídos do trabalho de KRUGGEL-EMDEN *et al.* [5]. Portanto, os valores de α resultantes para os sistemas vidro/alumínio e aço/aço são, respectivamente, 0,1 e 0,015.

Os valores para a constante de rigidez tangencial foram calculados através da Equação B.7

$$\tilde{k}_t = \frac{8 \sqrt{R_p} G_p}{2 - \nu_p} \quad (\text{B.7})$$

É importante lembrar que o valor adotado para o coeficiente de amortecimento tangencial foi considerado igual ao valor calculado para o coeficiente de amortecimento normal.

B.3 Modelo de ZHENG *et al.* [4]

Os parâmetros do modelo de ZHENG *et al.* [4] são a rigidez normal e o coeficiente de amortecimento normal, denotados ao longo do presente trabalho por \tilde{k}_n e $\tilde{\gamma}_n$, além de parâmetros auxiliares denotados por A , k e h . Os dois últimos sendo fatores de correção das componentes viscosas das forças normal e tangencial, respectivamente.

O valor do coeficiente de rigidez normal do modelo de ZHENG *et al.* [4] é igual ao valor do coeficiente de rigidez normal do modelo de TSUJI *et al.* [3], sendo, portanto,

dado pela Equação B.7. Por sua vez, o valor do coeficiente de amortecimento normal do modelo de ZHENG *et al.* [4] é calculado através da Equação B.8

$$\check{\gamma}_n = 2AE^* \sqrt{R_{eff}} \quad (\text{B.8})$$

onde

$$A = \frac{(1 - 2\nu)(1 + \nu)}{E} \left(2\eta_2 + \frac{\eta_1}{3} \right) \quad (\text{B.9})$$

$$E^* = \frac{(1 - \nu_a^2)}{E_a} + \frac{(1 - \nu_b^2)}{E_b} \quad (\text{B.10})$$

$$R_{eff} = \frac{R_a R_b}{R_a + R_b} \quad (\text{B.11})$$

e os subscritos *eff* denotam variáveis efetivas e os subíndices *a* e *b* denotam, respectivamente, variáveis relativas às partículas *a* e *b*.

O fator de correção para a componente normal viscosa da força de contato é calculado pela Equação B.12

$$k = (0,8 + 26\nu^3) \left(\frac{\eta_2}{\eta_1} \right)^{-0,5} \left(\frac{|\delta_n|}{R_{eff}} \right)^{0,04} \quad (\text{B.12})$$

onde as propriedades efetivas foram calculadas de maneira análoga à Equação B.11 e η_1 e η_2 denotam o primeiro e o segundo coeficientes de viscosidade, os quais são determinados utilizando-se o método desenvolvido no presente trabalho. Para as simulações preliminares, quando o método de determinação de η_1 e η_2 ainda não havia sido desenvolvido, as relações B.13 e B.14, propostas por ZHENG *et al.* [4], foram usadas

$$\eta_1 = \left(\frac{\eta_1}{E} \right)_{ref} E = 10^{-6} E \quad (\text{B.13})$$

$$\eta_2 = \left(\frac{\eta_2}{\eta_1} \right)_{ref} \eta_1 = 0 \quad \eta_1 = 0 \quad (\text{B.14})$$

onde o subscrito *ref* denota um valor de referência.

O fator de correção para a componente tangencial viscosa da força de contato é dado pela Equação B.15

$$h = 1 - 0,4\eta_1 \frac{|\dot{\delta}_n|}{2G\delta_{t,max}} \quad (\text{B.15})$$

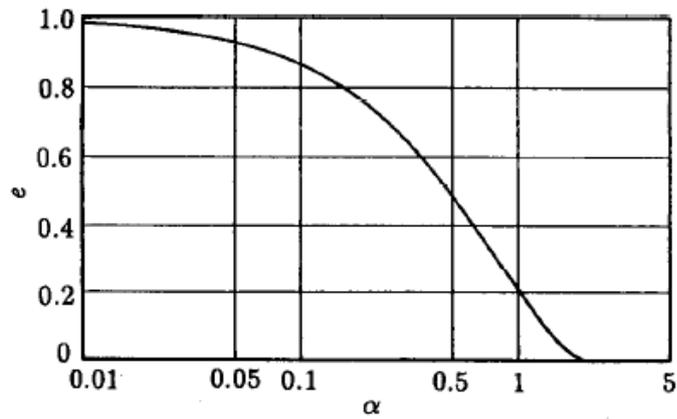


Figura B.1: Relação entre o coeficiente α e o coeficiente de restituição normal proposta por TSUJI *et al.* [3]. Figura reproduzida conforme publicada em TSUJI *et al.* [3] para fins ilustrativos.

Apêndice C

Códigos Implementados no LIGGGHTS®

C.1 Modelo de ZHENG *et al.* [4]: Componente normal

Código C.1: Implementação da componente normal do modelo de ZHENG *et al.* [4] no LIGGGHTS®

```
1 /*  
  
LIGGGHTS - LAMMPS Improved for General Granular and Granular Heat  
3 Transfer Simulations  
  
5 LIGGGHTS is part of CFDEM project  
www.liggghts.com | www.cfdem.com  
  
Christoph Kloss, christoph.kloss@cfdem.com  
9 Copyright 2009–2012 JKU Linz  
Copyright 2012– DCS Computing GmbH, Linz  
  
LIGGGHTS and CFDEM are registered trade marks of DCS Computing  
GmbH,  
13 the producer of the LIGGGHTS software and the CFDEM coupling  
software  
See http://www.cfdem.com/terms-trademark-policy for details.  
  
LIGGGHTS is based on LAMMPS  
17 LAMMPS – Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator  
http://lammps.sandia.gov, Sandia National Laboratories  
19 Steve Plimpton, sjplimp@sandia.gov
```

21 This software is distributed under the GNU General Public License.

23 See the README file in the top-level directory.

*/

/*

27 Contributing authors:

Christoph Kloss (JKU Linz, DCS Computing GmbH, Linz)

29 Richard Berger (JKU Linz)

*/

31 #ifdef NORMAL_MODEL

NORMAL_MODEL(ZHENG, zheng, 5)

33 #else

#ifndef NORMAL_MODEL_ZHENG_H_

35 #define NORMAL_MODEL_ZHENG_H_

#include "global_properties.h"

37 #include "math.h"

39 namespace LIGGGHTS {

41 namespace ContactModels

{

43 template<>

class NormalModel<ZHENG> : protected Pointers

45 {

public:

47 static const int MASK = CM_REGISTER_SETTINGS |
CM_CONNECT_TO_PROPERTIES | CM_COLLISION;

49 NormalModel(LAMMPS * lmp, IContactHistorySetup*) : Pointers(lmp),

Yeff(NULL),

51 vEff(NULL),

Geff(NULL),

53 //Eta1(NULL),

Etaleff(NULL),

55 //Eta2(NULL),

Eta2eff(NULL),

57 limitForce(false),

displayedSettings(false)

59 {

61 }

```

63 void registerSettings(Settings & settings)
    {
65     settings.registerOnOff("limitForce", limitForce);
    }

void connectToProperties(PropertyRegistry & registry) {
69     registry.registerProperty("Yeff", &MODEL_PARAMS::createMyYeff, "
        model zheng");
    registry.registerProperty("vEff", &MODEL_PARAMS::createNuEff, "
        model zheng");
71     registry.registerProperty("Geff", &MODEL_PARAMS::createMyGeff, "
        model zheng");

73     //registry.registerProperty("Eta1", &MODEL_PARAMS::
        createFirstViscosityCoefficient, "model zheng");
    //registry.registerProperty("Eta2", &MODEL_PARAMS::
        createSecondViscosityCoefficient, "model zheng");

    registry.registerProperty("Etaleff", &MODEL_PARAMS::createEtaleff
        , "model zheng");
77     registry.registerProperty("Eta2eff", &MODEL_PARAMS::createEta2eff
        , "model zheng");

79     registry.connect("Yeff", Yeff, "model zheng");
    registry.connect("vEff", vEff, "model zheng");
81     registry.connect("Geff", Geff, "model zheng");

83     //registry.connect("Eta1", Eta1, "model zheng");
    //registry.connect("Eta2", Eta2, "model zheng");

    registry.connect("Etaleff", Etaleff, "model zheng");
87     registry.connect("Eta2eff", Eta2eff, "model zheng");
    }

// effective exponent for stress-strain relationship

inline double stressStrainExponent()
93 {
    return 1.5;
95 }

97 inline void collision(CollisionData & cdata, ForceData & i_forces,
    ForceData & j_forces)
    {
99     const int itype = cdata.itype;
    const int jtype = cdata.jtype;
101     double ri = cdata.radi;

```

```

double rj = cdata.radj;
103 double reff=cdata.is_wall ? cdata.radi : (ri*rj/(ri+rj));
double meff=cdata.meff;

double sqrtval = sqrt(reff*cdata.deltan);
107 sqrtval = sqrt(reff*fabs(cdata.deltan));

109 if(!displayedSettings)
{
111     displayedSettings = true;
}

115 double A = ( (1.0 - 2.0*vEff[itype][jtype])*(1.0 + vEff[itype][
    jtype])/Yeff[itype][jtype] ) * ( 2.0*Eta2eff[itype][jtype] +
    Eta1eff[itype][jtype]/3.0 );

117 const double Fn_contact = (fabs(cdata.deltan) <= 1.0e-20) ? 0.0 :
    (4.0/3.0) * Yeff[itype][jtype] * sqrtval * cdata.deltan;
const double Fn_damping = (fabs(cdata.vn) <= 1.0e-20) ? 0.0 :
    -2.0 * A * Yeff[itype][jtype] * sqrtval * cdata.vn;

double k = 0.0;

k = (Eta2eff[itype][jtype] >= 1.0e-20) ? ( 0.8 + 26 * pow( vEff[
    itype][jtype], 3.0) ) * sqrt(Eta1eff[itype][jtype]/Eta2eff[
    itype][jtype]) * pow( cdata.deltan/reff, 0.04) : 10;

double Fn = Fn_contact + k*Fn_damping;

// TESTE DE IMPLEMENTA O !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

-----

//printf("\n Eta1[1] = %5.3e \t Eta1[2] = %5.3e", Eta1[1], Eta1
[2]);
131 //printf("\n Eta2[1] = %5.3e \t Eta2[2] = %5.3e", Eta2[1], Eta2
[2]);

133 //printf("\n Eta1eff11 = %5.3e \n", Eta1eff[itype][jtype]);
//printf("\n Eta2eff11 = %5.3e \n", Eta2eff[itype][jtype]);

//printf("\n A = %5.3e \n ", A);
137 //printf("\n F_hertz = %5.3e \t F_nd = %5.3e \t Fn = %5.3e \n",
    Fn_contact, Fn_damping, Fn);

```

```

139     //exit(1);

141     //

```

```

143     //limit force to avoid the artefact of negative repulsion force
    if(limitForce && (Fn<0.0) )
145     {
        Fn = 0.0;
147     }

149     cdata.Fn = Fn;

151     // apply normal force
    if(cdata.is_wall) {
153         const double Fn_ = Fn * cdata.area_ratio;
        i_forces.delta_F[0] = Fn_ * cdata.en[0];
155         i_forces.delta_F[1] = Fn_ * cdata.en[1];
        i_forces.delta_F[2] = Fn_ * cdata.en[2];
157     } else {
        i_forces.delta_F[0] = cdata.Fn * cdata.en[0];
159         i_forces.delta_F[1] = cdata.Fn * cdata.en[1];
        i_forces.delta_F[2] = cdata.Fn * cdata.en[2];

        j_forces.delta_F[0] = -i_forces.delta_F[0];
163         j_forces.delta_F[1] = -i_forces.delta_F[1];
        j_forces.delta_F[2] = -i_forces.delta_F[2];
165     }
    }

    void noCollision(ContactData&, ForceData&, ForceData&){}
169    void beginPass(CollisionData&, ForceData&, ForceData&){}
    void endPass(CollisionData&, ForceData&, ForceData&){}

protected:
173     double ** Yeff;
        double** vEff;
175     double ** Geff;

177     double** Eta1eff;
        double** Eta2eff;

        //double* Eta1;
181     //double* Eta2;

183     bool limitForce;

```

```

        bool displayedSettings;
185     };

187 }

189 }
    #endif
191 #endif

```

C.2 Modelo de ZHENG *et al.* [4]: Componente tangencial

Código C.2: Implementação da componente tangencial do modelo de ZHENG *et al.* [4] no LIGGGHTS®

```

1 /*

```

```

    LIGGGHTS – LAMMPS Improved for General Granular and Granular Heat
3    Transfer Simulations

5    LIGGGHTS is part of CFDEMproject
    www.liggghts.com | www.cfdem.com

    Christoph Kloss, christoph.kloss@cfdem.com
9    Copyright 2009–2012 JKU Linz
    Copyright 2012–      DCS Computing GmbH, Linz

    LIGGGHTS and CFDEM are registered trade marks of DCS Computing
        GmbH,
13    the producer of the LIGGGHTS software and the CFDEM coupling
        software
    See http://www.cfdem.com/terms-trademark-policy for details.

    LIGGGHTS is based on LAMMPS
17    LAMMPS – Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
    http://lammps.sandia.gov, Sandia National Laboratories
19    Steve Plimpton, sjplimp@sandia.gov

21    This software is distributed under the GNU General Public License.

23    See the README file in the top-level directory.

```

```

*/

```

```

/*


---


27   Contributing authors:
      Christoph Kloss (JKU Linz, DCS Computing GmbH, Linz)
29   Richard Berger (JKU Linz)


---


    */

#ifdef TANGENTIAL_MODEL
33 TANGENTIAL_MODEL(TANGENTIAL_HISTORY_ZHENG, history_zheng, 2)
#else
35 #ifndef TANGENTIAL_MODEL_HISTORY_ZHENG_H_
#define TANGENTIAL_MODEL_HISTORY_ZHENG_H_
37 #include "contact_models.h"
#include "math.h"
39 #include "update.h"
#include "global_properties.h"
41 #include "atom.h"

43 namespace LIGGGHTS {
  namespace ContactModels
45 {
    template<>
47   class TangentialModel<TANGENTIAL_HISTORY_ZHENG> : protected Pointers
    {
49     double ** coeffFrict;
      int history_offset;

      double** Yeff;
53     double** vEff;
      double** Etaleff;
55     double** Geff;

57   public:
      static const int MASK = CM_CONNECT_TO_PROPERTIES | CM_COLLISION |
        CM_NO_COLLISION;

      TangentialModel(LAMMPS * lmp, IContactHistorySetup * hsetup) :
        Pointers(lmp),
61     coeffFrict(NULL),
        Yeff(NULL),
63     vEff(NULL),
        Etaleff(NULL),
65     Geff(NULL)
    {

```

```

67     history_offset = hsetup->add_history_value("shearx", "1");
        hsetup->add_history_value("sheary", "1");
69     hsetup->add_history_value("shearz", "1");

71     }

73     inline void registerSettings(Settings&){

75     inline void connectToProperties(PropertyRegistry & registry)
    {
77         registry.registerProperty("coeffFrict", &MODEL_PARAMS::
            createCoeffFrict);
        registry.registerProperty("Yeff", &MODEL_PARAMS::createMyYeff);
79         registry.registerProperty("vEff", &MODEL_PARAMS::createNuEff);
        registry.registerProperty("Etaleff", &MODEL_PARAMS::createEtaleff
            );
81         registry.registerProperty("Geff", &MODEL_PARAMS::createMyGeff);

83         registry.connect("coeffFrict", coeffFrict, "tangential_model
            history_zheng");
        registry.connect("Yeff", Yeff, "tangential_model history_zheng");
85         registry.connect("vEff", vEff, "tangential_model history_zheng");
        registry.connect("Etaleff", Etaleff, "tangential_model
            history_zheng");
87         registry.connect("Geff", Geff, "tangential_model history_zheng");
    }

    inline void collision(const CollisionData & cdata, ForceData &
        i_forces, ForceData & j_forces)
91     {
        // normal forces = Hookian contact + normal velocity damping
93         const double enx = cdata.en[0];
        const double eny = cdata.en[1];
95         const double enz = cdata.en[2];

97         // shear history effects
        if(cdata.touch) *cdata.touch |= TOUCH_TANGENTIAL_MODEL;
99         double * const shear = &cdata.contact_history[history_offset];

        // S para lembrar: shear = deltaT !!!
103        if (cdata.shearupdate && cdata.computeflag) {
            const double dt = update->dt;
105            shear[0] += cdata.vtr1 * dt;
            shear[1] += cdata.vtr2 * dt;
107            shear[2] += cdata.vtr3 * dt;

```

```

109         // rotate shear displacements

111         double rsht = shear[0]*enx + shear[1]*eny + shear[2]*enz;
        shear[0] -= rsht * enx;
113         shear[1] -= rsht * eny;
        shear[2] -= rsht * enz;
115     }

117     const double shrmag = sqrt(shear[0]*shear[0] + shear[1]*shear[1]
        + shear[2]*shear[2]);
    const double kt = cdata.kt;
119     const double xmu = coeffFrict[cdata.itype][cdata.jtype];

121     // tangential forces = shear + tangential velocity damping
    /*double Ft1 = -(kt * shear[0]);
123     double Ft2 = -(kt * shear[1]);
    double Ft3 = -(kt * shear[2]);*/

    // C lculo do m dulo de FT

    double Ft1 = 0.0; // Componente X
129     double Ft2 = 0.0; // Componente Y
    double Ft3 = 0.0; // Componente Z

    double Fmd = 0.0;
133     double Ftd = 0.0;

135     double deltaT = 0.0;
    double deltaTmax = 0.0;
137     double d_deltaT = 0.0;

139     double FT = 0.0;
    double Fcoulomb = 0.0;

    double h = 0.0;

    deltaT = shrmag; // M dulo de deltaT
145     deltaTmax = 0.5 * xmu * fabs(cdata.deltan) * (2.0 - vEff[cdata.
        itype][cdata.jtype])/(1.0 - vEff[cdata.itype][cdata.jtype]);
    d_deltaT = sqrt(cdata.vtr1*cdata.vtr1 + cdata.vtr2*cdata.vtr2 +
        cdata.vtr3*cdata.vtr3);

    Fmd = (deltaTmax >= 1.0e-20) ? xmu * fabs(cdata.Fn) * ( 1.0 - pow
        ( 1.0 - fmin(deltaT, deltaTmax)/deltaTmax , 1.5) ) : 0.0;
        // M dulo !!!

    Ft1 = (deltaT >= 1.0e-20) ? -Fmd * shear[0]/deltaT : 0.0;

```

```

151   Ft2 = (deltaT >= 1.0e-20) ? -Fmd * shear[1]/deltaT : 0.0;
      Ft3 = (deltaT >= 1.0e-20) ? -Fmd * shear[2]/deltaT : 0.0;

      h = ( (deltaTmax >= 1.0e-20) && (Geff[cdata.itype][cdata.jtype]
        >= 1.0e-20) ) ? 1.0 - 0.4*Etaleff[cdata.itype][cdata.jtype]*
        d_deltaT/(2.0 * Geff[cdata.itype][cdata.jtype] * deltaTmax) :
        1.0;

      Ftd = ( (deltaTmax >= 1.0e-20) && (Geff[cdata.itype][cdata.jtype]
        >= 1.0e-20) ) ? (Etaleff[cdata.itype][cdata.jtype] *
        d_deltaT/(2.0 * Geff[cdata.itype][cdata.jtype] * deltaTmax))
        * (1.5*xmu*fabs(cdata.Fn)*sqrt(1.0 - fmin(deltaT, deltaTmax)/
        deltaTmax)) : 0.0;      // M dulo !!!

      Ft1 += ( (d_deltaT >= 1.0e-20) ? -h * Ftd * cdata.vtr1/d_deltaT :
        0.0);
159   Ft2 += ( (d_deltaT >= 1.0e-20) ? -h * Ftd * cdata.vtr2/d_deltaT :
        0.0);
      Ft3 += ( (d_deltaT >= 1.0e-20) ? -h * Ftd * cdata.vtr3/d_deltaT :
        0.0);

      FT = sqrt(Ft1*Ft1 + Ft2*Ft2 + Ft3*Ft3);      // M dulo de FT !!
165   Fcoulomb = xmu * fabs(cdata.Fn);      // M dulo de Fcoulomb !!

167   if( FT >= Fcoulomb )
      {
169       Ft1 = ( fabs(Ft1) >= 1.0e-20 ) ? Fcoulomb * Ft1/fabs(Ft1) :
        0.0;
        Ft2 = ( fabs(Ft2) >= 1.0e-20 ) ? Fcoulomb * Ft2/fabs(Ft2) :
        0.0;
171       Ft1 = ( fabs(Ft3) >= 1.0e-20 ) ? Fcoulomb * Ft3/fabs(Ft3) :
        0.0;
      }

175   /*// rescale frictional displacements and forces if needed
      const double Ft_shear = kt * shrmag; // sqrt(Ft1 * Ft1 + Ft2 *
        Ft2 + Ft3 * Ft3);
177   const double Ft_friction = xmu * fabs(cdata.Fn);

179   // energy loss from sliding or damping
      if (Ft_shear > Ft_friction) {
181       if (shrmag != 0.0) {
        const double ratio = Ft_friction / Ft_shear;
183       Ft1 *= ratio;

```

```

    Ft2 *= ratio;
185    Ft3 *= ratio;
        shear[0] = -Ft1/kt;
187    shear[1] = -Ft2/kt;
        shear[2] = -Ft3/kt;
189    }
    else Ft1 = Ft2 = Ft3 = 0.0;
191    }
else
193    {
        const double gammat = cdata.gammat;
195    Ft1 -= (gammat*cdata.vtr1);
        Ft2 -= (gammat*cdata.vtr2);
197    Ft3 -= (gammat*cdata.vtr3);
    }*/

// forces & torques
201    const double tor1 = eny * Ft3 - enz * Ft2;
    const double tor2 = enz * Ft1 - enx * Ft3;
203    const double tor3 = enx * Ft2 - eny * Ft1;

// return resulting forces
205    if(cdata.is_wall) {
207        const double area_ratio = cdata.area_ratio;
        i_forces.delta_F[0] += Ft1 * area_ratio;
209        i_forces.delta_F[1] += Ft2 * area_ratio;
        i_forces.delta_F[2] += Ft3 * area_ratio;
211        i_forces.delta_torque[0] = -cdata.cri * tor1 * area_ratio;
        i_forces.delta_torque[1] = -cdata.cri * tor2 * area_ratio;
213        i_forces.delta_torque[2] = -cdata.cri * tor3 * area_ratio;
    } else {
215        i_forces.delta_F[0] += Ft1;
        i_forces.delta_F[1] += Ft2;
217        i_forces.delta_F[2] += Ft3;
        i_forces.delta_torque[0] = -cdata.cri * tor1;
219        i_forces.delta_torque[1] = -cdata.cri * tor2;
        i_forces.delta_torque[2] = -cdata.cri * tor3;

        j_forces.delta_F[0] += -Ft1;
223        j_forces.delta_F[1] += -Ft2;
        j_forces.delta_F[2] += -Ft3;
225        j_forces.delta_torque[0] = -cdata.crj * tor1;
        j_forces.delta_torque[1] = -cdata.crj * tor2;
227        j_forces.delta_torque[2] = -cdata.crj * tor3;
    }
229 }

```

```

231     inline void noCollision(ContactData & cdata, ForceData&, ForceData
        &)
    {
233         // unset non-touching neighbors
        // TODO even if shearupdate == false?
235         if(cdata.touch) *cdata.touch &= ~TOUCH_TANGENTIAL_MODEL;
        double * const shear = &cdata.contact_history[history_offset];
237         shear[0] = 0.0;
        shear[1] = 0.0;
239         shear[2] = 0.0;
    }

    inline void beginPass(CollisionData&, ForceData&, ForceData&){}
243     inline void endPass(CollisionData&, ForceData&, ForceData&){}
    };
245 }
    }
247 #endif // TANGENTIAL_MODEL_HISTORY_H_
    #endif

```
