

**INSTITUTO TECNOLÓGICO DE AERONÁUTICA**



**Vinícius de Souza Lima**

**SIMULAÇÃO DE ENSAIOS DE RESISTÊNCIA EM  
SOLOS VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS  
(MED)**

Trabalho de Graduação  
2023

**Curso de Engenharia Civil**

**Vinicius de Souza Lima**

**SIMULAÇÃO DE ENSAIOS DE RESISTÊNCIA EM  
SOLOS VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS  
(MED)**

Orientador

Prof. Dr. José Antonio Schiavon (ITA)

**ENGENHARIA CIVIL**

**SÃO JOSÉ DOS CAMPOS  
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE AERONÁUTICA**

2023

**Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)**  
**Divisão de Informação e Documentação**

Lima, Vinícius de Souza  
Simulação de Ensaios de Resistência em Solos via Método dos Elementos Discretos (MED) /  
Vinícius de Souza Lima.  
São José dos Campos, 2023.  
59f.

Trabalho de Graduação – Curso de Engenharia Civil– Instituto Tecnológico de Aeronáutica,  
2023. Orientador: Prof. Dr. José Antonio Schiavon.

1. Mecânica dos solos. 2. Solos. 3. Simulação. 4. Método dos elementos finitos. 5. Cisalhamento.  
6. Atrito. 7. Deformação. 8. Engenharia civil. 9. Engenharia estrutural. I. Instituto Tecnológico  
de Aeronáutica. II. Título.

## **REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA**

LIMA, Vinícius de Souza. **Simulação de Ensaios de Resistência em Solos via Método dos Elementos Discretos (MED)**. 2023. 59f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

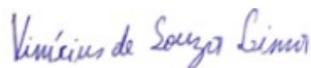
## **CESSÃO DE DIREITOS**

NOME DO AUTOR: Vinícius de Souza Lima

TÍTULO DO TRABALHO: Simulação de Ensaios de Resistência em Solos via Método dos Elementos Discretos (MED).

TIPO DO TRABALHO/ANO: Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) / 2023

É concedida ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica permissão para reproduzir cópias deste trabalho de graduação e para emprestar ou vender cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte deste trabalho de graduação pode ser reproduzida sem a autorização do autor.

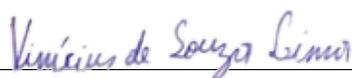


---

Vinícius de Souza Lima  
Rua H8A, 118  
12.228-460 – São José dos Campos–SP

# SIMULAÇÃO DE ENSAIOS DE RESISTÊNCIA EM SOLOS VIA MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS (MED)

Essa publicação foi aceita como Relatório Final de Trabalho de Graduação



---

Vinícius de Souza Lima

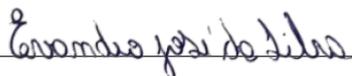
Autor



---

Prof. Dr. José Antonio Schiavon (ITA)

Orientador



---

Prof. Dr. Evandro José da Silva  
Coordenador do Curso de Engenharia Civil

São José dos Campos, 17 de novembro de 2023.

Dedico este trabalho a todos que me ajudaram a chegar até aqui, minha eterna gratidão!

# **Agradecimentos**

Agradeço à minha família por estar sempre presente apoiando meu sonho, à minha namorada por me ajudar em períodos difíceis, aos meus amigos pelo bom humor e ao professor José Antônio Schiavon por possibilitar a introdução desse tema, além de sempre estar disponível para ajudar, com carisma e paciência.

*"A persistência é o caminho do êxito."*

— CHARLES CHAPLIN

# Resumo

A geotecnia é uma área que muito se beneficia por métodos computacionais, pois permitem modelar comportamentos complexos que podem não possuir soluções analíticas, sendo o método dos elementos finitos a metodologia mais usada. O Método dos Elementos Discretos é outra metodologia que tem sido cada vez mais utilizada na simulação de solos. Em especial na área de ensaios de resistência, o MED tem mostrado ser capaz de representar adequadamente o comportamento experimental de solos.

A lacuna de pesquisa percebida nessa área foi na existência de abordagens genéricas que explicassem de forma simplificada como proceder para reproduzir resultados experimentais de ensaios de resistência em solos utilizando partículas esféricas.

O propósito deste trabalho é proporcionar uma linha diretriz inicial para simulações com MED na instituição, pela sugestão e estudo de abordagens para simular ensaios de cisalhamento direto e de compressão triaxial por meio do método dos elementos discretos, bem como pela análise da eficácia dessas abordagens ao comparar os resultados das simulações com curvas experimentais.

O trabalho foi feito com o *framework* de código aberto Yade. As partículas foram consideradas como esféricas com resistência ao rolamento. Os resultados experimentais usados para comparação foram fornecidos pelo orientador e consistiram da areia Hostun HN38.

Foi possível perceber que os modelos conseguiram reproduzir relativamente bem determinados resultados de ensaios experimentais, como tensão de pico, tensão residual e ângulo de atrito. Entretanto, os modelos adotados tendem a apresentar maior divergência com o aumento das pressões utilizadas. Além disso, a consideração de apenas partículas esféricas limita o ajuste fino dos modelos, que apresentaram elevados erros percentuais ao longo das simulações, e afeta considerações de resistência e amortecimento do rolamento.

A principal contribuição desse trabalho foi apresentar um procedimento simplificado para obtenção de resultados qualitativamente de acordo com os obtidos experimentalmente, que podem passar por ajuste fino por meio de considerações de granulometria e angularidade das partículas.

# Abstract

Geotechnics is an area that greatly benefits from computational methods, as they allow for the modeling of complex behaviors that may not have analytical solutions, with the finite element method being the most used methodology. The Discrete Element Method is another methodology that has been increasingly used in soil simulation. Particularly in the area of strength tests, the DEM has proven to be capable of adequately representing the experimental behavior of soils.

The research gap perceived in this area was in the existence of generic approaches that explained in a simplified manner how to proceed to reproduce experimental results of soil strength tests using spherical particles.

The purpose of this work is to provide an initial guideline for DEM simulations at the institution, by suggesting and studying approaches to simulate direct shear and triaxial compression tests through the discrete element method, as well as by analyzing the efficacy of these approaches when comparing the results of the simulations with experimental curves.

The work was done with the open-source framework Yade. The particles were considered spherical with rolling resistance. The experimental results used for comparison were provided by the advisor and consisted of HN38 Hostun sand.

It was possible to perceive that the models managed to reproduce relatively well certain experimental test results, such as peak stress, residual stress, and angle of friction. However, the adopted models tend to show greater divergence with the increase of the pressures used. In addition, the consideration of only spherical particles limits the fine-tuning of the models, which showed high percentage errors throughout the simulations, and affects considerations of strength and rolling damping.

The main contribution of this work was to present a simplified procedure for obtaining qualitatively accurate results compared to those obtained experimentally, which can undergo fine-tuning through considerations of particle size distribution and angularity.

# Lista de Figuras

FIGURA 2.1 – Comparação entre FEM(a) e DEM(b) (O’Sullivan, 2011). . . . .	20
FIGURA 2.2 – Algoritmo de ordenação sendo executado (Šmilauer <i>et al.</i> 2021). . .	30
FIGURA 3.1 – Caixa cisalhante com empacotamento. . . . .	36
FIGURA 3.2 – Arranjo das partículas na simulação do ensaio triaxial. . . . .	38
FIGURA 4.1 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação para 50 kPa. . . . .	41
FIGURA 4.2 – Diferença percentual para tensão normal de 50 kPa. . . . .	42
FIGURA 4.3 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação para 100 kPa. . . . .	42
FIGURA 4.4 – Diferença Percentual para tensão normal de 100 kPa. . . . .	43
FIGURA 4.5 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação para 200 kPa. . . . .	44
FIGURA 4.6 – Diferença percentual para tensão normal de 200 kPa. . . . .	45
FIGURA 4.7 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação. . . .	46
FIGURA 4.8 – Regressão linear para determinação do ângulo de atrito do solo com base na tensão de pico. . . . .	46
FIGURA 4.9 – Regressão linear para determinação do ângulo de atrito do solo com base na tensão residual. . . . .	47
FIGURA 4.10 – Comparativo entre curvas de tensão desviadora por deformação para 50 kPa. . . . .	48
FIGURA 4.11 – Diferença Percentual para pressão confinante de 50 kPa. . . . .	49
FIGURA 4.12 – Comparativo entre curvas de tensão desviatória por deformação para 100 kPa. . . . .	49

---

FIGURA 4.13 –Diferença Percentual para pressão confinante de 100 kPa. . . . .	50
FIGURA 4.14 –Comparativo entre curvas de tensão desviatória por deformação para 200 kPa. . . . .	51
FIGURA 4.15 –Diferença percentual para pressão confinante de 200 kPa. . . . .	51
FIGURA 4.16 –Comparativo entre curvas de tensão desviatória por deformação. . .	52
FIGURA 4.17 –Envoltória de Mohr-Coulomb com base na tensão de pico. . . . .	53
FIGURA 4.18 –Envoltória de Mohr-Coulomb com base na tensão residual. . . . .	53

# Lista de Tabelas

TABELA 3.1 – Características da areia HN38 Hostun, (Schiavon 2016). . . . .	39
TABELA 4.1 – Parâmetros utilizados na simulação dos ensaios de cisalhamento direto.	40
TABELA 4.2 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para tensão normal de 50 kPa. . . . .	41
TABELA 4.3 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para pressão normal de 100 kPa. . . . .	43
TABELA 4.4 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para tensão normal de 200 kPa. . . . .	44
TABELA 4.5 – Parâmetros utilizados nas simulações dos ensaios triaxiais. . . . .	47
TABELA 4.6 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para pressão confinante de 50 kPa. . . . .	48
TABELA 4.7 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para a pressão confinante de 100 kPa. . . . .	50
TABELA 4.8 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para a pressão confinante de 200 kPa. . . . .	51
TABELA A.1 – Primeiros cinco valores da base de dados de cisalhamento direto para cada ensaio . . . . .	57
TABELA A.2 – Últimos cinco valores da base de dados de cisalhamento direto para cada ensaio . . . . .	57
TABELA A.3 – Primeiros cinco valores da base de dados de compressão triaxial para cada ensaio . . . . .	58
TABELA A.4 – Últimos cinco valores da base de dados de compressão triaxial para cada ensaio . . . . .	58

# Lista de Abreviaturas e Siglas

DEM Discrete Element Method

FEM Finite Element Method

Yade Yet Another Dynamical Environment

# Lista de Símbolos

$M$	Matriz inercial
$u$	Vetor Deslocamento
$\dot{u}$	Vetor Velocidade
$\ddot{u}$	Vetor Aceleração
$C$	Matriz de Amortecimento
$K$	Matriz de Rigidez Global
$\Delta F$	Incremento de Força e de Momentos

# Sumário

1	INTRODUÇÃO . . . . .	16
1.1	Contextualização . . . . .	16
1.2	Motivação . . . . .	16
1.3	Objetivo . . . . .	17
1.3.1	Objetivo Geral . . . . .	17
1.3.2	Objetivos Específicos . . . . .	17
1.4	Escopo . . . . .	17
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA . . . . .	19
2.1	Referencial Teórico . . . . .	19
2.1.1	Método dos Elementos Discretos . . . . .	19
2.1.2	Yade . . . . .	29
2.2	Estudos de Casos de modelagem de elementos discretos . . . . .	31
3	METODOLOGIA . . . . .	33
3.1	Modelo Conceitual . . . . .	33
3.2	Modelo Numérico . . . . .	34
3.2.1	Definição do Material . . . . .	34
3.2.2	Definição do Empacotamento . . . . .	34
3.2.3	Definição das Leis físicas . . . . .	35
3.2.4	Detalhes de implementação do aparato . . . . .	35
3.3	Visualização das Simulações . . . . .	38
3.4	Base de dados utilizada . . . . .	38
3.5	Procedimento de análise e comparação dos resultados . . . . .	39

---

4	RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .	40
4.1	<b>Cisalhamento Direto</b> . . . . .	40
4.1.1	Comparativo global . . . . .	45
4.2	<b>Ensaio Triaxial</b> . . . . .	47
4.2.1	Comparativo Global . . . . .	52
5	CONCLUSÃO . . . . .	54
	APÊNDICE A – BASES DE DADOS DOS ENSAIOS . . . . .	57
A.1	<b>Base de dados do ensaio de Cisalhamento Direto</b> . . . . .	57
A.2	<b>Base de dados do ensaio de Compressão Triaxial</b> . . . . .	58

# 1 Introdução

## 1.1 Contextualização

O estudo de solos tem como etapa essencial a sua caracterização por meio de um conjunto de grandezas que quantificam suas propriedades. Para determiná-las, utiliza-se ensaios laboratoriais denominados “ensaios de resistência”, dentre os quais os mais comuns são: ensaio de compressão triaxial e ensaio de cisalhamento direto. A realização desses ensaios exige tempo, estrutura, mão de obra especializada e está sujeita a limitações de reusabilidade e reprodutibilidade dos corpos de prova obtidos. Nessa circunstância, a modelagem computacional do solo e dos ensaios efetuados nele traz consigo a possibilidade de reduzir o impacto de cada um desses fatores no processo de realização dos ensaios, sendo limitado apenas pela qualidade do modelo e pela capacidade computacional disponível.

Esforços nesse sentido já foram feitos, sobretudo, por meio do Método dos Elementos Finitos (FEM - acrônimo em inglês), técnica de análise numérica que busca soluções analíticas ou aproximadas para problemas de engenharia envolvendo equações diferenciais por meio da discretização do contínuo em elementos interligados. Embora esse método seja o mais difundido, não é único capaz de solucionar esse problema. Uma abordagem natural para se modelar esses solos seria considerar partículas em vez de elementos de um meio contínuo, sendo isto o que propõe outra metodologia que tem ganhado relevância na modelagem de solos: O Método dos Elementos Discretos (DEM - acrônimo em inglês).

## 1.2 Motivação

A literatura da área enfoca na definição do arcabouço teórico por trás do DEM e em realizar estudos de caso que, embora necessários, não fornecem uma metodologia para, a partir de um solo particulado genérico que se deseja modelar, realizar sua simulação com o auxílio de um dado software de modelagem. A existência de tal metodologia facilitaria um maior número de pesquisas no domínio da modelagem de solos por método dos elementos discretos, contribuindo para o desenvolvimento de pesquisas no campo.

## 1.3 Objetivo

### 1.3.1 Objetivo Geral

Este trabalho de graduação tem como objetivo estudar abordagens para a realização de simulações pelo Método dos Elementos Discretos dos ensaios de cisalhamento direto e de compressão triaxial para solos particulados genéricos utilizando o *framework* expansível de código aberto Yade e analisar a acurácia dos resultados por comparações com resultados experimentais.

### 1.3.2 Objetivos Específicos

Os objetivos específicos relacionados a este trabalho são:

- Demonstrar modelagem conceitual, aparato da simulação e explicar funcionamento da simulação.
- Realizar comparação entre os resultados obtidos em ensaios laboratoriais e em simulação.

## 1.4 Escopo

Na perspectiva escrita, o presente trabalho será estruturado da seguinte maneira:

### Capítulo 1 - Introdução

São apresentadas a motivação do estudo, sua importância e objetivo, além de uma breve descrição das atividades realizadas e a definição do escopo do trabalho.

### Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica

Trata de uma breve revisão da literatura relacionada ao assunto do trabalho, subdividida em referencial teórico e estudos de caso de modelagem de elementos discretos.

### Capítulo 3 - Metodologia

Descreve-se a metodologia adotada para a realização das simulações, organizada em modelo conceitual, modelo numérico, base de dados utilizada e procedimento de análise e comparação dos resultados.

### Capítulo 4 - Resultados e Discussões

Apresenta-se os resultados das simulações realizadas comparações com os resultados experimentais e discussões a respeito desses resultados.

**Capítulo 5 - Conclusão**

Apresenta as conclusões a respeito do método utilizado, dos resultados obtidos e das discussões realizadas.

## 2 Revisão Bibliográfica

### 2.1 Referencial Teórico

#### 2.1.1 Método dos Elementos Discretos

O Método dos Elementos Discretos, do inglês *Discrete Element Method* (DEM), consiste em uma técnica de modelagem numérica do comportamento mecânico de materiais particulados que considera partículas ideais independentes com propriedades físicas e de interação próprias capazes de interagirem entre si e com o ambiente. De acordo com Duran (2000) e Zhu et al. (2007), as técnicas do DEM podem ser divididas em duas categorias, chamadas *hard spheres*, que não permitem interpenetração entre esferas, e *soft spheres*, que permitem interpenetração. Segundo O'Sullivan (2011), a categoria mais utilizada para o estudo de geotecnia é a de *soft spheres*, cujo princípio é resolver em incrementos discretos de tempo as equações que governam o equilíbrio linear e angular de partículas em colisão ou em contato, permitindo assim determinar informações como a velocidade e a posição de cada partícula a cada instante, podendo assim caracterizar o sistema. O modelo mais amplamente utilizado dentre os de *soft spheres*, que iniciou a utilização de DEM em problemas de geotecnia e o utilizado neste trabalho, com adaptações, é o de Cundall e Strack (1979a).

Bharadwaj (2012) faz uma breve revisão de literatura dos principais conceitos do método dos elementos discretos aplicados ao estudo de materiais granulares, bem como faz um compilado das principais implementações comerciais e *open source* disponíveis, trazendo vantagens e desvantagens relacionadas a cada grupo.

O'Sullivan (2011) apresentou um dos primeiros textos extensivos dedicado ao uso particular de DEM em geomecânica, tratando-se de uma das principais referências usadas neste trabalho para o entendimento dos fundamentos do método dos elementos discretos. A obra contempla, mas não se limita a: uma introdução à teoria e aplicabilidade do método dos elementos discretos dentro e fora da geomecânica; estudo do movimento das partículas, considerações feitas na integração das equações de equilíbrio e relações com energia e amortecimento; cálculo das forças de contato, que aborda a idealização

do contato em simulações DEM, resposta de contato baseada em elasticidade linear, modelagem reológica, modelos de contato normal, cálculo de forças tangenciais, resistência ao rolamento e detecção de contato; tipos de partículas e suas características, incluindo disco e esferas, aglomerados de esferas, poligonais, poliédricas, superquádricas e partículas potenciais.

Segundo O’Sullivan (2011), a análise de elementos discretos contempla um sistema ideal de partículas com capacidade de movimentação. A interação entre tais partículas, ao estarem em contato, pode ser modelada por meio da introdução de uma mola rígida interparticular. Essa metodologia permite a execução de análises tanto dinâmicas quanto transientes. As interações são estabelecidas de acordo com a proximidade entre as partículas e são removidas à medida que estas se afastam. Tal característica implica em uma variação na rigidez do sistema, introduzindo uma não-linearidade geométrica. Paralelamente, o modelo constitutivo é responsável por conferir uma não-linearidade material ao sistema.

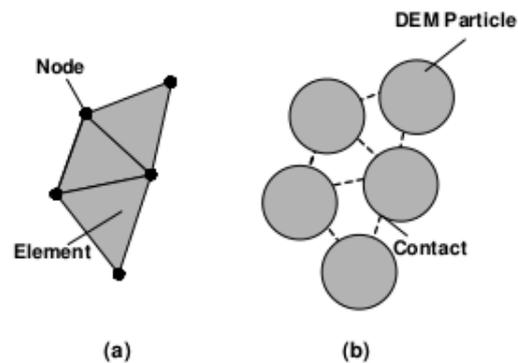


FIGURA 2.1 – Comparação entre FEM(a) e DEM(b) (O’Sullivan, 2011).

No contexto da Análise por Elementos Discretos (DEM), é fundamental considerar o equilíbrio dinâmico de cada partícula de forma individualizada, solucionando um sistema típico de análise dinâmica em estruturas, amplamente aplicado na engenharia civil, expresso como:

$$M\ddot{u} + C\dot{u} + K(u) = \Delta F \quad (2.1)$$

Nesta equação:

- $M$  representa a matriz inercial, contabilizando tanto a inércia mássica quanto a rotacional.
- $C$  é a matriz de amortecimento.
- $u$  é o vetor de deslocamento para um determinado instante temporal.
- $\Delta F$  simboliza o incremento de força e momentos.

-  $K(u)$  é a matriz de rigidez global, detalhada por Zienkiewicz e Taylor (2000), que embora a defina para o método dos elementos finitos, esta ainda é válida para o método dos elementos discretos.

O principal objetivo na resolução deste sistema é determinar o vetor  $u$ . Para solucioná-lo, pode-se optar por abordagens implícitas ou explícitas.

A elaboração da matriz de rigidez e as operações associadas a ela podem ser notavelmente custosas e subótimas, tanto em termos de operações computacionais quanto de demanda de memória, devido à geração de uma matriz extensa e majoritariamente esparsa. Para mitigar essa questão, Cundall e Strack (1979a) optaram por resolver o equilíbrio dinâmico de cada partícula individualmente, em vez de tentar solucionar o sistema global para todas as partículas de forma concomitante.

A evolução temporal da posição das partículas é determinada pelas forças resultantes atuando sobre elas. Em uma instância particular da equação anterior, encontramos que o produto da matriz de inércia  $\mathbf{I}$  pela aceleração  $\mathbf{a}$  é equivalente ao vetor de força incremental  $\Delta\mathbf{F}$ . Matematicamente, temos:

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{a} = \Delta\mathbf{F} \quad (2.2)$$

Resolvendo esse sistema linear, derivamos os valores de  $\mathbf{a}$ . Tais acelerações são então empregadas no refinamento da posição das partículas utilizando um algoritmo inspirado no método da diferença central. Este método é mencionado por Munjiza (2010) como “esquema de integração no tempo de Verlet”. Uma metodologia análoga é adotada para determinar a velocidade angular das partículas.

Na integração temporal, a determinação adequada do intervalo de tempo ( $\Delta t$ ) é crucial para garantir a convergência e estabilidade do sistema. O modelo delineado por Cundall e Strack (1979a) demonstra que há estabilidade somente quando  $\Delta t$  é suficientemente reduzido. Além das especificidades deste modelo, a seleção de um intervalo de tempo pequeno é necessária para adequadamente representar as características não lineares intrínsecas ao problema.

Como método computacional, a projeção do estado futuro de um sistema com base em seu estado presente inevitavelmente introduz erros numéricos no modelo. Estes erros podem ser atribuídos tanto às imprecisões de arredondamento intrínsecas ao processamento computacional quanto aos erros decorrentes das simplificações adotadas no modelo, conhecidos como erros de truncamento. Um exemplo clássico dessa situação é a aproximação de uma função considerando apenas um número finito de termos em sua série de Taylor.

Segundo O’Sullivan (2011), no domínio da geomecânica, é frequente a adoção tanto do método de integração temporal de diferença central quanto de variações ligeiramente alteradas deste. Estas representações, podem ser manifestadas de diversas maneiras, tal

como na formulação das equações de Verlet. Independentemente da forma escolhida, a precisão do método é proporcional ao quadrado do intervalo de tempo. A seleção do método obedece a três critérios fundamentais:

1. Consistência: O erro de truncamento deve convergir para zero à medida que  $\Delta t$  aproxima-se de zero.
2. Convergência: O erro absoluto entre a solução computacional obtida e a solução exata deve convergir para zero.
3. Estabilidade: Variações mínimas nas entradas do sistema devem resultar em alterações proporcionalmente pequenas na saída do método.

Um critério de estabilidade associado ao método de integração temporal de diferença central é que há um intervalo de tempo crítico, além do qual o sistema se torna instável, resultando em soluções que rapidamente divergem para valores não representativos. Este intervalo de tempo crítico pode ser deduzido, conforme proposto por Zienkiewicz e Taylor (2000), mediante a análise de estabilidade linear do sistema. Esta análise emprega a matriz de amplificação, definida como a matriz que mapeia a posição das partículas em um determinado instante  $t$  para sua posição em  $t + \Delta t$ . Caso esta matriz apresente qualquer autovalor cuja magnitude seja maior que um, o sistema é categorizado como instável. Nesse contexto, perturbações pequenas nas entradas se magnificam ao longo das iterações, gerando respostas incoerentes. Para monitorar tais instabilidades, O'Sullivan e Bray (2003b) sugerem que se avalie incoerências no balanço energético do sistema.

De acordo com O'Sullivan (2011) o intervalo de tempo crítico varia de acordo com diversos parâmetros do modelo. Um desses parâmetros é a rigidez das molas implementadas no sistema: quanto maior a rigidez, menor deve ser o intervalo de tempo considerado para manter a estabilidade. Além disso, em modelos de contato não linear, a rigidez pode não ser constante ao longo da simulação. A variabilidade da rigidez implica uma variação correspondente no intervalo de tempo crítico ao longo do processo de integração. Outros fatores que influenciam o intervalo de tempo crítico incluem a densidade das partículas e o número total de partículas no sistema. Enquanto uma densidade elevada das partículas permite um intervalo de tempo ampliado, um aumento no número de partículas tende a exigir um intervalo de tempo mais restritivo. Uma estratégia que explora a relação entre o intervalo de tempo crítico e a densidade é a “escala de densidade”. Nesta abordagem, a densidade das partículas é intencionalmente aumentada acima de seu valor real. Ao fazer isso, o modelo opera sob a premissa de que a inércia não é uma variável dominante, permitindo a adoção de intervalos de tempo mais generosos. Esta técnica visa, portanto, reduzir o custo computacional, embora com uma representação menos fiel da física real do sistema.

A conservação de energia é um princípio fundamental na análise de qualquer sistema

físico, e no Método de Elementos Discretos (DEM) não seria diferente. Estudos por O'Sullivan e Bray (2003b) elucidam este aspecto dentro do DEM. Em um panorama simplificado, a energia é introduzida e administrada no sistema da seguinte forma:

1. Fontes de Energia: A energia é introduzida no sistema predominantemente por duas vias:

- Forças de Contato: Estas são as forças que surgem quando duas partículas entram em contato direto.
- Forças de Ligação: Essas forças atuam à distância, sem necessidade de contato direto entre as partículas.

2. Dissipação de Energia: A energia no sistema é dissipada principalmente por dois mecanismos:

- Atrito: Durante o contato entre as partículas, o atrito entre elas leva à perda de energia.
- Ruptura dos Contatos: Isso é simulado pela quebra das molas de contato, que representam ligações entre as partículas. Quando uma mola se rompe, há dissipação de energia.

3. Transferência de Energia: Existe uma interconversão contínua de energia entre:

- Energia Potencial Elástica das Molas: Armazenada nas molas quando são deformadas.
- Energia Cinética das Partículas: Associada ao movimento das partículas.

4. Mecanismo de Dissipação: A dissipação de energia está intrinsecamente ligada à força de atrito. Quando essa força alcança um valor limite, ocorre uma dissipação energética.

5. Injeção de Energia: Além das fontes já mencionadas, a energia pode ser adicionada ao sistema por:

- Interação com Paredes Rígidas: Quando partículas colidem com paredes fixas ou limites, ocorre uma troca energética.
- Forças de Corpo: Como, por exemplo, a gravidade, que atua sobre as partículas devido ao seu peso.

A temática da energia é intrínseca à implementação de modelos elásticos no Método de Elementos Discretos (DEM). Embora tais modelos possam adequadamente simular a resposta de contatos até o ponto de ruptura das ligações, uma vez ocorrida a ruptura, deformações plásticas emergem, tornando o modelo elástico insuficiente para uma representação realista. Em consequência, torna-se imperativo integrar algum mecanismo de amortecimento ao sistema. Dentre as estratégias predominantes para esse propósito, duas se destacam: o amortecimento mássico e o amortecimento não viscoso local.

1. Amortecimento Mássico: Proposto originalmente por Cundall e Strack (1979a), este método consiste em conferir um amortecimento a cada partícula no sistema, sendo este proporcional à sua massa. Em termos computacionais, isso se traduz na matriz de amortecimento  $C$  sendo proporcional à matriz de inércia  $M$ . No entanto, esta abordagem apresenta limitações, tais como:

- A presença de forças de corpo pode alterar os padrões de falha.
- Determinar a proporção ideal entre as matrizes requer conhecimento dos autovalores da matriz de rigidez.
- Uma constante única significa que o mesmo amortecimento é aplicado uniformemente, o que pode não refletir cenários onde diferentes regiões necessitem de distintos níveis de amortecimento.

2. Amortecimento Não Viscoso Local: Esta técnica, introduzida por Cundall (1987), emprega uma força de amortecimento diretamente proporcional à força responsável por desalojar a partícula do estado de repouso, garantindo que modos de vibração sejam adequadamente amortecidos.

Dada a influência significativa do amortecimento na resposta das simulações, pode ser prudente considerar, em certos cenários, baixos valores de amortecimento ou até mesmo sua completa ausência, a fim de evitar superestimções ou representações distorcidas dos fenômenos físicos.

Na análise de rotação de corpos tridimensionais não esféricos utilizando o Método de Elementos Discretos (DEM), conforme apontado por O'Sullivan (2011), há uma crescente convergência na comunidade científica em torno da ideia de que a utilização de quatérnions seria a abordagem mais apropriada para tratar das rotações tridimensionais. Esta perspectiva, promovida por trabalhos como os de Zienkiewicz e Taylor (2000b), Sutmann (2002), sugere que quatérnions proporcionam uma modelagem mais precisa e computacionalmente eficiente das rotações em 3D. Independentemente da técnica adotada, é crucial destacar que a solução derivada pertence ao sistema de coordenadas locais individual de

cada partícula. Dessa forma, cabe à implementação do DEM manter um registro consistente da orientação do sistema de eixos locais para cada entidade modelada, garantindo assim a correta interpretação dos resultados e a coerência nas subseqüentes interações entre partículas.

Sobre métodos explícitos para integração temporal da posição, embora o método de Verlet seja o mais utilizado, existem alternativas à essa abordagem, da qual se destaca o uso de implementações do método Predictor-Corretor. Esse método é também dependente do quadrado do intervalo de tempo, mas possui o diferencial de utilizar não apenas o estado do sistema no intervalo de tempo anterior, mas em múltiplos intervalos. Um exemplo de implementação é a de Pöschel e Schwager (2005), que afirmam que, embora o tempo de computação seja maior comparado ao método de Verlet, o método justifica-se por permitir um maior intervalo de tempo para atingir a mesma precisão.

A determinação das forças de contato entre partículas envolve duas etapas principais, conforme elucidado por Hogue (1988): “detecção de contato” e “resolução de contato”. A etapa de “detecção de contato” visa identificar quais partículas estão atualmente em interação ou têm potencial para interagir em um futuro próximo. Para atingir esse objetivo, cria-se uma “lista de vizinhos”, que mapeia as partículas em proximidade de uma determinada partícula. Essa lista é fundamental para identificar e prever possíveis contatos, otimizando a eficiência do método. Por outro lado, a “resolução de contato” concentra-se nas características geométricas e cinemáticas das interações entre partículas. Especificamente, esta fase analisa a extensão da sobreposição ou separação entre pares de partículas que estão em contato. Esta análise é crucial, pois define a natureza e a magnitude das forças atuantes entre as partículas. É vital destacar a relevância deste procedimento no contexto do DEM. De acordo com Sutmann (2002), aproximadamente 90% do tempo de simulação é consumido no cálculo das forças de contato. Assim, a eficiência e precisão nessa etapa são cruciais para a performance geral do método.

Sobre a idealização do contato para simulações de partículas do DEM, utilizam-se molas virtuais, não obrigatoriamente elásticas-lineares, para simular o contato entre partículas, que apesar de serem consideradas completamente rígidas, tem pequenas sobreposições permitidas para simular a deformação que ocorre para partículas em compressão. À equação que define o comportamento da tensão-deformação dessas molas, denomina-se modelo de contato constitutivo, que será responsável por reger os dois conjuntos de molas, deslizadores e amortecedores, um para a direção normal e outro para a direção tangencial.

Com o uso dessas molas e de deslizadores, é possível simular, por exemplo, um valor limite a partir do qual surge uma força de atrito na direção tangencial, ou até que ponto agem forças de tração entre partículas na direção normal. Na geomecânica, entretanto, a tensão entre partículas é frequentemente considerada nula.

A abordagem mais utilizada pra modelar o contato no DEM é a de “mola de penalidade”, em que uma mola bastante rígida é colocada no ponto de contato, a qual utiliza principalmente a magnitude da sobreposição entre as partículas para calcular a força de contato normal. Existem, porém, outras abordagens para modelar o contato, que são o método dos multiplicadores de Lagrange e o método de Lagrange melhorado.

Sobre as mecânicas de contato, segundo Johnson (1985) *apud* O’Sullivan (2011), existem os contatos conformantes e não conformantes, sendo que o primeiro se refere a superfícies que se encaixam, enquanto o outro tipo não possui tal propriedade, como esferas e discos. Como a maioria dos modelos de DEM utilizam partículas esféricas ou discos, modelos de contato não conformantes são os mais comuns, sendo que dentre eles destaca-se o modelo de contato Hertziano, que consiste na aplicação da teoria elástica à corpos esféricos não conformantes. É importante notar que partículas conformantes vão fornecer maior resistência à rotação e transmitem tanto momento quanto força normal compressiva.

Quanto à resposta de contato baseada na elasticidade linear, a resposta normal ao contato é dada pelo modelo Hertziano que assume um ponto de contato entre sólidos e então descreve o crescimento da área de contato, como variam as tensões de superfície, suas deformações e tensões dentro das partículas, através da resolução de um problema de valor de contorno, com cada corpo em contato sendo um meio espaço elástico e com a área de contato sendo elíptica.

Sobre a resposta elástica de contato tangencial, O’Sullivan (2011) menciona que as principais referências são o trabalho de Mindlin(1949) e Mindlin e Deresiewicz (1953), os quais consideram que a tensão tangencial não exerce influência sobre a tensão normal, que é Hertziana. As tensões tangencial e normal são nesse caso dependentes da distância do centro da área de contato circular e relacionadas por uma constante. Segundo a teoria Hertziana, a expressão para a força tangencial será ainda dependente do raio da área de contato e do raio da área aderida ou presa quando nos referimos ao carregamento tangencial inicial.

Quanto ao descarregamento, pelo processo de deslizamento ser dissipativo, surge uma região de contra escorregamento que também passa a influenciar o valor da força tangencial ao longo do raio do contato, ocorrendo também um diferente valor da força no carregamento. Entretanto, a maioria das implementações do DEM não diferenciam entre os processos de carregamento, descarregamento e recarregamento.

Sobre a aplicabilidade do contato Hertziano ao solo, segundo Cavaretta et al. (2010), mesmo partículas relativamente simples e não esféricas não seguem a teoria elástica, o que torna necessária a inclusão de outros modelos para capturar características como dissipação de energia e plasticidade na resposta, são eles: linear elástico, não linear elástico, ideal viscoso, rígido perfeitamente plástico, os quais podem ainda ser combinados para a

formação de sistemas mais complexos, como o modelo linear de Maxwell, modelo linear de Kelvin e modelo de Burger.

Assim, esses modelos reológicos podem ser utilizados para modelar tanto o contato normal quanto o tangencial, inclusive com modificações como a inclusão de uma tensão de ruptura que faz com que o carregamento seja distinto do descarregamento, além de poderem ser combinados em série no modelo de ligação paralelo.

Sobre a resistência ao rolamento, partículas esféricas e discos, por possuírem apenas um ponto de contato e não sofrerem momento de forças normais, não são ideais para a modelagem de dessa resistência, mas alternativas foram adotadas para levá-la em conta, sem ter de modificar o formato das partículas, pela inclusão de considerações ao cálculo do momento radial, como feito por Belheine et al (2009).

Sobre a modelagem de reposta dependente do tempo, são utilizadas associações de molas e amortecedores como, por exemplo, no uso do modelo de Burger nos códigos do programa PFC. Uma motivação para esse tópico é a simulação de asfalto betuminoso, embora uma implementação em DEM ainda não exista.

Sobre a resposta do solo não saturado, existem estudos em DEM para regime pendular, ou seja, com grau de saturação menor que 20%, como por exemplo os de Jiang et al. (2004), as quais consideram uma ponte líquida de formato toroidal entre as partículas e consideram a força de tensão da ponte líquida como função da geometria da ponte e da tensão superficial, enquanto essa se relaciona com a sucção matricial.

Sobre a detecção de contato, a identificação de partículas vizinhas que estão ou possuem potencial de estar em contato pode ser feita de variadas formas, Poschel e Schawager (2005) por exemplo definem a “distância de Verlet”, abaixo da qual duas partículas são adicionadas a uma lista de partículas em contato, sendo que a detecção desse contato pode considerar uma esfera ou paralelepípedo em volta da partícula caso essa possua geometria altamente irregular. Quanto às estratégias de detecção de contato, podem ser usados algoritmos de armazenamento em que a uma malha de células é grande o bastante para conter a a maior das partículas, ou, como proposto por Poschel e Schawager (2005), uma em que o tamanho da célula é determinada pela menor partícula e o espaço de busca do contato é ditado pelas dimensões da maior partícula.

#### **2.1.1.1 Tipos de partículas**

A resolução de contato é comumente a etapa mais computacionalmente custosa no DEM e por isso a utilização de geometrias simples como esferas e discos pode ser bastante vantajosa. Entretanto, essa abordagem tem limitações como mudanças na força tangencial, na resposta dilatativa durante deformação e na distribuição de espaço vazio,

tanto que ao usar essa modelagem nos estudos de geomecânica as rotações das partículas superam as rotações observadas experimentalmente. Para contrapor essas desvantagens uma possibilidade é o uso de elipsoides.

Esferas e discos podem ainda serem utilizados para modelagem de partículas mais complexas e com geometria mais irregular pela aglomeração de partículas de forma tangencial ou com sobreposição. Esses aglomerados pode ainda serem utilizados para modelar aglomerados quebráveis a partir de ligações entre partículas do aglomerados que quebram sob certo esforço, como utilizados por Thornton e Liu(2004), área particularmente útil em estudos de geomecânica.

Outros formatos podem ainda ser utilizados, como superquadráticas em duas dimensões, que inclui circunferências e elipses, e superquádricas em três dimensões, grupo que inclui esferas e elipsoides, além desses, outros formatos possíveis são de partículas potenciais e partículas poligonais ou poliédricas.

#### **2.1.1.2 Condições de contorno**

Assim como no método dos elementos finitos, as condições de contorno são de maior importância no método dos elementos discretos, dentre as quais quatro são mais significativas: paredes rígidas, condições de contorno periódicas, contorno de membrana e contorno axissimétrico.

Paredes rígidas é o tipo de condição de contorno mais utilizado no DEM e consistem em superfícies analiticamente descritas, planas ou curvadas que podem ser impostas velocidades e que não possuem inércia. Essas paredes podem ser usadas para modelar penetrações, como utilizado por Kinlock e O'Sullivan (2007) para um ensaio de penetração de cone. Além disso, a partir de seis paredes rígidas planas, consegue-se estabelecer um estado de tensão tridimensional plenamente anisotrópico.

Contorno periódico é outro tipo de condição de contorno em que uma célula representativa das propriedades do sistema é repetida em torno dela. A região repetida é comumente a de um paralelogramo em duas dimensões e um paralelepípedo em três dimensões. Esse tipo de condição de contorno pode ser utilizado em simulação de ensaios triaxiais, entretanto, é preciso atentar que em condições reais surgem tensões não homogêneas, o que não é possível com o uso de células periódicas.

Em se tratando de ensaio triaxial, uma melhor aproximação da realidade, quando comparada com contorno periódico, é a do contorno de membrana, que possui uma lateral flexível que não impede tanto a formação de não uniformidades durante a compressão.

### 2.1.2 Yade

No estudo de Smilauer et al. (2021), é apresentada uma abordagem detalhada sobre a implementação e formulação do Método de Elementos Discretos (DEM) aplicada no framework Yade. O Yade representa uma ferramenta importante na área de modelagem DEM e foi amplamente utilizado na condução do trabalho em questão, assim como em muitas outras pesquisas que formaram a base teórica desta investigação.

O Yade fornece uma documentação rica e extensa, que engloba funções e classes em Python, tornando a interface do framework acessível. Além disso, um manual do usuário está incluído, que não apenas introduz os fundamentos do Yade, mas também fornece exemplos práticos de aplicação e sugestões de melhores práticas para simulações.

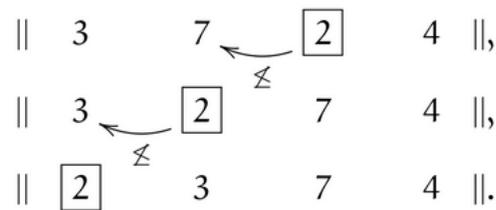
Quando se trata de detecção de colisão, o Yade se destaca pela escolha de seus algoritmos. Os algoritmos para detecção de colisão são divididos principalmente em dois grupos:

1. Hierárquicos: Estes algoritmos subdividem o espaço de forma recursiva. Apenas as partículas no mesmo subespaço são verificadas quanto ao contato, otimizando a eficiência do processo.

2. Algoritmos Planos: Usados pelo Yade, estes algoritmos lidam diretamente com os volumes de contato das partículas. Um algoritmo notável dessa categoria é o “*Sweep and Prune*” (Varrer e Podar, em tradução livre). Este algoritmo emprega caixas limitantes alinhadas a eixos para determinar se as partículas estão sobrepostas. A sobreposição é confirmada apenas se todas as coordenadas das caixas estiverem sobrepostas.

Dentro do framework Yade, esse algoritmo é parte da classe “*InsertionSortCollider*”. A classe faz uso das caixas limitantes alinhadas aos eixos para rastrear a proximidade das partículas. Uma lista ordenada é mantida para cada eixo, detalhando as coordenadas máxima e mínima das caixas, junto com identificações das respectivas partículas e se são limites superiores ou inferiores.

O processo inicial de ordenação emprega o algoritmo “*quicksort*”, com uma complexidade  $O(n \log(n))$ . Uma checagem é feita primeiramente em um eixo e, caso haja sobreposições, os outros eixos são verificados. Inversões ocorrem quando uma coordenada de uma partícula ultrapassa outra, e neste caso, a complexidade do algoritmo de ordenação pode chegar a  $O(n^2)$ .

FIGURA 2.2 – Algoritmo de ordenação sendo executado (Šmilauer *et al.* 2021).

Dentro do *framework* Yade, os agregados são modelados utilizando a classe “*Clump*”. Na prática, os agregados funcionam de maneira semelhante às partículas individuais, com a diferença notável de que contatos entre partículas individuais dentro de um agregado não são computados. Esta é uma consideração importante, uma vez que evita cálculos desnecessários e otimiza a simulação.

Para uma representação mais realista da dinâmica dos agregados, forças e torques individuais associados a cada partícula são convertidos e consolidados para representar o agregado como um todo. Isso é feito somando-se todas as forças individuais para obter a força total atuando sobre o agregado. De forma similar, o torque total sobre o agregado é obtido somando-se todos os torques individuais e considerando o momento que cada força exerce em relação ao centroide do agregado.

O procedimento padrão de simulação no Yade segue uma sequência lógica de etapas:

1. Reinicialização das Forças: As forças atuantes sobre os corpos discretos são reiniciadas no início de cada ciclo de simulação.
2. Identificação de Interações Potenciais: O programa identifica quais elementos têm potencial para interagir com base em sua proximidade e outras métricas.
3. Detecção do Tipo de Colisão: O tipo de colisão ou interação é determinado, o que pode influenciar os cálculos subsequentes.
4. Detecção Precisa da Colisão: Uma análise detalhada da colisão é feita para entender a extensão e a natureza da interação.
5. Imposição de Condições ao Modelo: Condições externas, como a gravidade, são aplicadas ao sistema.
6. Cálculo das Forças: Com base nas interações identificadas, o programa calcula as forças que atuam sobre os elementos em interação.
7. Modificação das Posições dos Elementos: As equações de movimento são integradas para determinar as novas posições e velocidades dos elementos, com base nas forças aplicadas sobre eles.

## 2.2 Estudos de Casos de modelagem de elementos discretos

Hazzar et al. (2008) modelou com DEM ensaios triaxiais drenados em contas de vidro e analisou a influência de diversos micro parâmetros, como coeficiente de atrito, rigidez normal e cisalhante no comportamento das curvas tensão-deformação. Foi possível perceber que tais parâmetros influenciam consideravelmente o comportamento macro do modelo. Além disso, sugeriu um processo de calibração do modelo com resultados experimentais. O estudo mostrou que o modelo era preditivo para grandezas macroscópicas como módulo de Young, coeficiente de Poisson e ângulo de atrito.

Wang e Li (2014) desenvolveram um modelo DEM modificado que leva em conta o efeito do rolamento das partículas utilizando o programa de código aberto Yade, para examinar o comportamento macroscópico de materiais granulares a partir de ensaios triaxiais. O autor foi capaz de reduzir os parâmetros microscópicos a quatro fatores adimensionais e descrever seus efeitos sobre o coeficiente de Poisson, módulo de Young, ângulo de atrito de pico e ângulo de dilatância do material. O estudo sugere ainda um procedimento de calibração do modelo a ser aplicado para solos não coesivos.

Belheine et al. (2009) utiliza um modelo de elementos discretos com resistência ao rolamento para simular a rugosidade dos grãos de areia de Labenne em ensaios triaxiais drenados. Foram feitas calibrações do modelo com resultados experimentais e percebeu-se que o pico de tensão depende não somente de parâmetros de atrito local, mas também da resistência ao rolamento. Os resultados das simulações foram percebidos como estando qualitativamente em acordo com os resultados experimentais.

Tejada e Antolin (2014) utilizaram simulações DEM para criar um framework orientado a dados capaz de prever propriedades mecânicas de empacotamentos densos de materiais granulares polidispersos. Para tal, foram simulados cerca de 92 mil empacotamentos de esferas que abrangiam diversos tipos de distribuições de tamanhos de partículas, os quais foram então sujeitos a ensaios de compressão triaxial e ajustados a modelos hiperbólicos de Duncan-Chang usados para treinar redes neurais capazes de preverem as propriedades do empacotamento.

Moravia (2020) fez a modelagem da interação entre camadas de reforço de geogrelha e solos granulares por meio de elementos discretos com o Yade. Foi possível simular o efeito da retirada da geogrelha para amostras com diferentes quantidades de partículas esféricas e não esféricas. O estudo obteve resultados consistentes e foi capaz de correlacionar características como angularidade das partículas e tamanho em comparativo com a abertura da geogrelha com a mobilização das forças do reforço. Outra correlação percebida foi a maior mobilização de tensões na direção transversal do que na longitudinal dos membros da geogrelha na retirada.

Xu et al (2020) fez a modelagem de ensaio de cisalhamento direto, usando o Yade, de um solo com partículas sedimentares e de rocha. Para simular as partículas de rocha, agrupou partículas esféricas em formas poliédricas convexas, enquanto as partículas de solo foram simuladas como partículas esféricas. A granulometria das partículas de rocha e de solo seguiu uma distribuição semelhante ao do conjunto real. Construiu ainda caixas de cisalhamento a partir de elementos em forma do paralelepípedo, que serviram de base para o aparato utilizado nesse trabalho.

## 3 Metodologia

O presente trabalho estuda o comportamento de materiais particulados compostos de partículas esféricas via método dos elementos discretos. Por meio do *framework* Yade, ensaios de cisalhamento direto e ensaios de compressão triaxial foram simulados a fim de comparar seus resultados com aqueles obtidos por meio de experimentos em laboratório. Foi considerada areia para os estudos dos ensaios de cisalhamento direto e triaxial.

Foram utilizados conjuntos de dados experimentais para cada um dos ensaios de resistência com o intuito de calibrar, testar e generalizar as abordagens usadas para a modelagem dos solos. Esses resultados experimentais fazem parte do banco de dados do orientador e da bibliografia.

### 3.1 Modelo Conceitual

Para a realização das simulações, foram primeiramente criadas abstrações simplificadas da realidade, na forma de modelos conceituais, para os dois ensaios.

Para os ensaios, as etapas consideradas fundamentais foram:

- Definição das propriedades dos materiais simulados, incluindo geometria, propriedades físicas e propriedades mecânicas;
- Definição da geometria dos aparatos cisalhante e triaxial, como uma caixa bipartida e uma membrana flexível com tampa e pistão, respectivamente;
- Definição do empacotamento do material;
- Condições de contorno aplicadas ao movimento dos aparatos;
- Monitoramento dos deslocamentos e da tensão cisalhante;
- Análise dos resultados e comparação com os resultados experimentais, visando a calibração e validação dos modelos;

- Visualização do modelo 3D criado, com o intuito de verificar a correta representação dos ensaios.

Considerando o que foi exposto, a próxima seção detalha como o modelo conceitual foi traduzido para um modelo numérico de simulação.

## 3.2 Modelo Numérico

### 3.2.1 Definição do Material

O comportamento mecânico das partículas foi definido como elástico-linear friccional, por meio do tipo de material *CohFrictMat* que está disponível na biblioteca do Yade. As propriedades consideradas mínimas para este estudo para tais materiais são módulo de elasticidade, coeficiente de Poisson, densidade, ângulo de atrito, coesão normal e coesão tangencial. Os valores de tais propriedades foram definidos a partir de valores da literatura e com base na característica mineralógica das partículas dos geomateriais estudados.

### 3.2.2 Definição do Empacotamento

Foram utilizados empacotamentos de partículas esféricas representado pela função *randomDensePack()* do módulo *pack* do Yade. Tal função permite armazenar o empacotamento criado em um arquivo “.*sqlite*”, para reutilização e reprodutibilidade. Além disso, também permite fixar o empacotamento usado entre simulações por meio do argumento *seed* que controla a geração de número aleatórios na função. Os parâmetros de entrada da função de empacotamento acima descritas são as coordenadas do empacotamento (predicado), o raio médio das partículas, o desvio padrão da distribuição de raios dessas esferas e a quantidade de esferas em cada célula periódica.

Para o ensaio de compressão triaxial, as coordenadas do empacotamento corresponderão às coordenadas de um cilindro, com altura aproximadamente igual ao dobro do diâmetro do cilindro, uma vez que tal procedimento é adotado experimentalmente para impedir interferência da geometria do corpo no resultado do ensaio. Por outro lado, para o ensaio de cisalhamento direto, as coordenadas corresponderão àquelas de um cubo. Os tamanhos das partículas não poderão ser variados em uma ordem de grandeza relevante, em função do custo computacional.. Neste trabalho considerou-se apenas partículas esféricas com diferentes distribuições de tamanhos, uma vez que a consideração de agregados precisa considerar fatores como angularidade das partículas que fogem ao escopo deste trabalho.

### 3.2.3 Definição das Leis físicas

A lei constitutiva usada neste trabalho e representada pela classe *Law2\_ScGeom6D\_CohFrictPhys\_CohesionMoment*. Essa lei constitutiva é primariamente usada para simular materiais coesivos, entretanto, pode representar materiais não coesivos simplesmente assumindo os parâmetros de coesão normal e tangencial como nulos. A vantagem de se utilizar essa classe é que ela permite o controle da rigidez e do amortecimento do rolamento e da torsão, podendo assim agregar ao modelo, ainda que de forma simplificada, efeitos de angularidade das partículas enquanto somente são usadas partículas esféricas.

O funcionamento das classes pode ser entendido pela análise das partes que compõe sua nomenclatura, o termo “*ScGeom6D*” refere-se à detecção de colisão nas três dimensões cartesianas além de considerar os três graus de liberdade de rolamento, enquanto “*CohFrictPhys*” considera atrito e coesão no modelo, por outro lado, “*CohesionMoment*” indica a consideração do momento de coesão.

É usada a função *Ig2\_Sphere\_Sphere\_ScGeom6D()* que determina que os tipos de contato a serem considerados na simulação são entre esferas, ou seja, as propriedades geométricas da interação. A função *Ip2\_CohFrictMat\_CohFrictMat\_CohFrictPhys()* definem a interação física entre as partículas que deve ser utilizada na simulação, em que “*CohFrictPhys*” representa considerações de interações de fricção com coesão com momentos.

### 3.2.4 Detalhes de implementação do aparato

#### 3.2.4.1 Ensaio de Cisalhamento Direto

O aparato cisalhante foi construído a partir do elemento *box* do Yade que permite a criação de corpos em formato de paralelepípedo, as quais pode-se atribuir todas as propriedades necessárias de inércia e movimentação. Foram feitas duas caixas, sendo que a caixa superior permite a movimentação de sua face superior para exercer a compressão necessária até que se atinja o valor de pressão confinante necessário, enquanto a caixa inferior mantém-se imóvel durante todo o ensaio. A face superior da caixa superior possui os graus de liberdade de rotação bloqueados pela função *blockedDOFs()* do módulo *state* do Yade, para garantir o comportamento correto do elemento como um pistão, não permitindo o tombamento do elemento durante seu movimento descendente.

O movimento da placa é regido pela atribuição de acréscimos e decréscimos de velocidade de modo a garantir que a pressão da placa se mantenha com o valor de pressão confinante determinado.

É importante notar que, para evitar que a saída de partículas das caixas atrapalhasse o decorrer da simulação, foram inseridas duas abas às caixas, uma pertencente à caixa

superior que impede que as partículas sofram movimento de ascensão na porção livre da caixa inferior, outra pertencente à caixa inferior, que impede que partículas presentes na caixa superior caiam na porção livre.

Foram estabelecidas duas condições necessárias ao início da fase de cisalhamento: que o sistema tenha atingido uma condição de equilíbrio numérico, dado pela função do Yade *unbalancedForce()*, que quantifica a razão entre o somatório médio das forças nos corpos e a magnitude da força média nas interações; que o número de iterações tenha passado um valor mínimo estabelecido, com o intuito de permitir a estabilização do sistema.

A partir de então, toda a caixa superior move-se à velocidade constante e mede-se a tensão cisalhante por meio do cálculo do somatório das forças nas faces da caixa, na direção do movimento, dividido pela área de cisalhamento. São medidos também o deslocamento vertical da placa superior e o deslocamento horizontal da caixa superior, representando o resultado graficamente em uma curva tensão cisalhante por deformação.

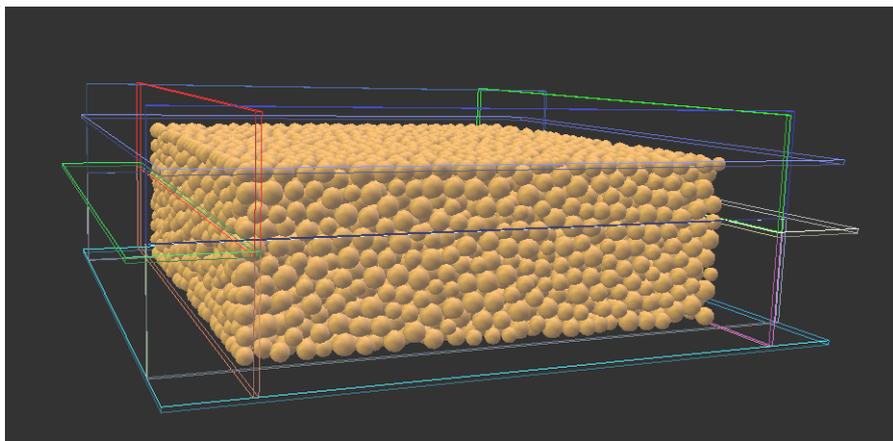


FIGURA 3.1 – Caixa cisalhante com empacotamento.

#### 3.2.4.2 Ensaio Triaxial

O aparato do ensaio triaxial constitui-se de três elementos principais: a membrana flexível, responsável por exercer a pressão confinante na lateral do cilindro; a tampa superior, responsável por exercer a mesma pressão confinante no eixo vertical do corpo de prova; o pistão descendente à velocidade constante, responsável por exercer a pressão adicional ao corpo de prova na direção vertical.

A membrana flexível foi modelada através de elementos *facet* que distribuem-se radialmente, fazendo uma envoltória cilíndrica em torno do corpo de prova. A quantidade de *facet* criados é determinada pela divisão da área lateral do cilindro em camadas horizontais e verticais, formando uma malha com retângulos de mesma área. Cada elemento de *facet* é criado a partir de de quatro vetores, os três primeiros definindo a posição dos vértices no espaço da primeira metade do elemento e cuja sequência de inserção define a

orientação do vetor normal do corpo de acordo com a regra da mão direita. Após a criação de um elemento *facet*, é criado um segundo, adjacente ao primeiro e compartilhando dois vértices, sendo ambos anexados à coleção de *facet* como uma tupla. A movimentação da membrana é limitada aos planos x e y, retirando todos os graus de liberdade de rotação e limitando os graus de liberdade de translação a esses eixos, por meio da função *blockedDOFs*, do módulo *state* do Yade.

A aplicação da pressão confinante na área lateral do cilindro é feita por meio do controle de velocidade da membrana de forma a manter os valores pré determinados.

A tampa superior foi modelada através de elemento *facet* pela disposição radial deles no plano perpendicular ao eixo. Essa tampa fica logo acima do empacotamento, e para garantir que esse elemento exerça pressão de forma correta, são feitos acréscimos e decréscimos de velocidade de acordo com a necessidade.

O pistão descendente foi modelado também utilizando a tampa superior, mas com todos os graus de liberdade bloqueados à aplicação de forças, sendo então submetido a uma velocidade constante na direção z, para baixo. Esse procedimento, de bloquear os graus de liberdade fazem parte das boas práticas de simulação propostas pela documentação do Yade, e garante que forças externas não afetem à velocidade constante desejada para o corpo.

A execução do programa é dividida em 4 partes, sendo elas:

- Criação da amostra: Nessa etapa a membrana é mantida imóvel e as tampas superiores e inferiores comprimem a amostra até que esta atinja a porosidade desejada.
- Estabilização da amostra: Nessa etapa tanto a membrana quanto as tampas inferiores e superiores são mantidas imóveis, de forma a permitir que a sistema atinja equilíbrio. Tal controle é feito a partir do uso da função *unbalancedForce* do Yade, que computa a força não balanceada, que representa a razão entre interações existentes e funciona como uma métrica de estabilidade, fazendo com que essa etapa pare ao se atingir um valor inferior a 5%.
- Compressão isotrópica: Nessa etapa tanto a membrana lateral quanto as tampas superiores e inferiores possuem velocidade que são controladas de forma a se atingir a pressão confinante desejada.
- Pressão confinante adicional: Quando a diferença entre as pressões nos três eixos principais e valores alvo admitidos for menor que uma dada tolerância, tomada igual a 1% neste trabalho, e a força não balanceada também for inferior a esse valor, a tampa inferior fica imóvel, enquanto a tampa superior move-se com velocidade descendente constante, de forma a simular a pressão adicional.

A Figura 3.2 mostra o aparato do ensaio triaxial

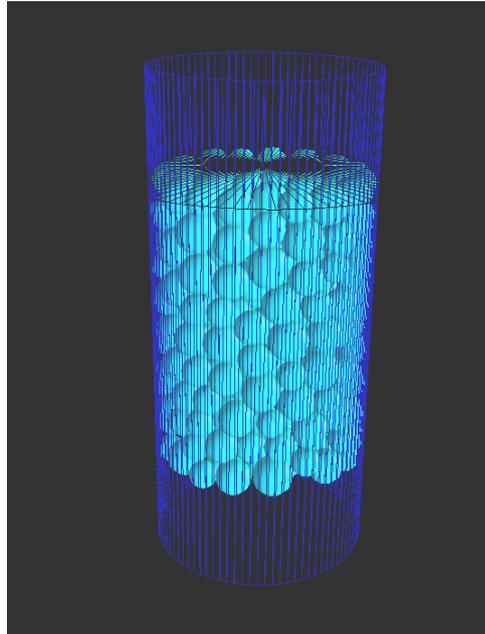


FIGURA 3.2 – Arranjo das partículas na simulação do ensaio triaxial.

### 3.3 Visualização das Simulações

O próprio *framework* do Yade possui uma interface do usuário que permite a visualização 3D da simulação enquanto esta é executada. Outra alternativa, que não foi utilizada neste trabalho, é a de realizar gravações das propriedades das partículas e corpos da simulação em formato “VTK”, que podem ser utilizados para posterior análise 3D em programas especializados, como o software *Paraview*.

### 3.4 Base de dados utilizada

A base de dados utilizada foi obtida de ensaios laboratoriais obtidos pelo professor orientador. Quanto aos ensaios de laboratório da compressão triaxial, a aplicação da carga do pistão foi feita em ciclos de carga e descarga, que provocaram um comportamento de “laço” na curva tensão deformação que não foi considerado na execução da simulação.

Essa base representa os resultados experimentais obtidos por Schiavon (2016) para uma amostra de areia HN38 Hostun. As características dessa areia são sumarizadas na tabela abaixo:

TABELA 3.1 – Características da areia HN38 Hostun, (Schiavon 2016).

Propriedade	Símbolo	Valor
Massa específica das partículas sólidas	$G_s$	2.64
Massa específica aparente seca máxima (kg/m <sup>3</sup> )	$\rho_{d(max)}$	1554
Massa específica aparente seca mínima (kg/m <sup>3</sup> )	$\rho_{d(min)}$	1186
Índice de vazios máximo	$e_{max}$	1.226
Índice de vazios mínimo	$e_{min}$	0.699
Tamanho médio do grão (mm)	$d_{50}$	0.12
Coefficiente de uniformidade	$C_U$	1.97
Coefficiente de curvatura	$C_C$	0.99

### 3.5 Procedimento de análise e comparação dos resultados

Os parâmetros a serem variados em cada simulação para comparação e calibração com os resultados experimentais serão, no máximo, cinco, sendo eles: ângulo de atrito das partículas, coesão (normal e tangencial), módulo de elasticidade, porosidade e a medida de dispersão do tamanho das partículas (desvio padrão).

É importante notar que, para otimização do custo computacional do algoritmo que calcula as interações do Yade, o intervalo de tempo entre passos consecutivos é calculado enquanto o algoritmo é executado e, portanto, as curvas obtidas dos ensaios de laboratório e as obtidas pelas simulações geralmente não vão possuir o mesmo número de pontos. Para que fosse possível obter métricas importantes de proximidade entre as curvas, foi utilizada a biblioteca de análise numérica *Numpy* da linguagem Python, para interpolar a curva simulada por meio da função *interp*, uma função linear dividida por partes, que então recebe os valores de deformação da curva experimental e obtém os valores interpolados de tensão. Dessa forma, a comparação com os resultados experimentais será feita tanto por meio da análise qualitativa da curva obtida pela simulação em relação à curva experimental quanto pela raiz do erro quadrático médio, cuja fórmula é apresentada na Equação 3.1, na qual  $y$  representa as medidas obtidas experimentalmente,  $\hat{y}$  representa os dados obtidos por interpolação da simulação e  $n$  representa o número de medidas disponíveis.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y} - y)^2}, \quad (3.1)$$

A partir dessa métrica, será possível estabelecer um parâmetro aproximado de proximidade entre as curvas experimental e simulada interpolada.

## 4 Resultados e Discussões

Seguindo todas as recomendações até então listadas, foram produzidos os resultados das simulações de ambos os ensaios. Percebeu-se que a função *randomDensePack()* não gera empacotamentos suficientemente compactos, sendo necessário admitir uma fase de compactação anterior à fase de consolidação, com altura inicial superior à altura do corpo de prova real. Por tentativa e erro, admitiu-se que uma altura 90% maior que a altura pretendida apresentava resultados satisfatórios para o cisalhamento direto, enquanto 70% foi suficiente para o traxial.

### 4.1 Cisalhamento Direto

A Tabela 4.1 mostra os parâmetros utilizados para as três simulações após obtenção de razoável similaridade com as curvas experimentais.

TABELA 4.1 – Parâmetros utilizados na simulação dos ensaios de cisalhamento direto.

Parâmetros	Símbolo	Valor
Módulo de Young (MPa)	E	50
Coefficiente de Poisson	$\nu$	0.4
Coesão normal	$C_N$	0
Coesão Tangencial	$C_T$	0
Resistência ao rolamento	$\alpha K_r$	2
Resistência à torção	$\alpha K_{tw}$	2
Amortecimento do rolamento	$\eta_{Rol}$	0.01
Amortecimento da torção	$\eta_{tw}$	0.01
Raio das partículas (mm)	R	2
Variação percentual do Raio	$\Delta\%R$	20

Conforme mostrado na Figura 4.1, para a tensão normal de 50 kPa, o modelo apresentou conformidade razoável aos dados experimentais até por volta de 9% de deformação axial, a partir do qual a tensão cisalhante da curva experimental estabiliza no valor por

volta de 50 kPa, enquanto a curva experimental cai até 35 kPa. Além disso, a curva da simulação atingiu praticamente o mesmo valor de pico da curva experimental.

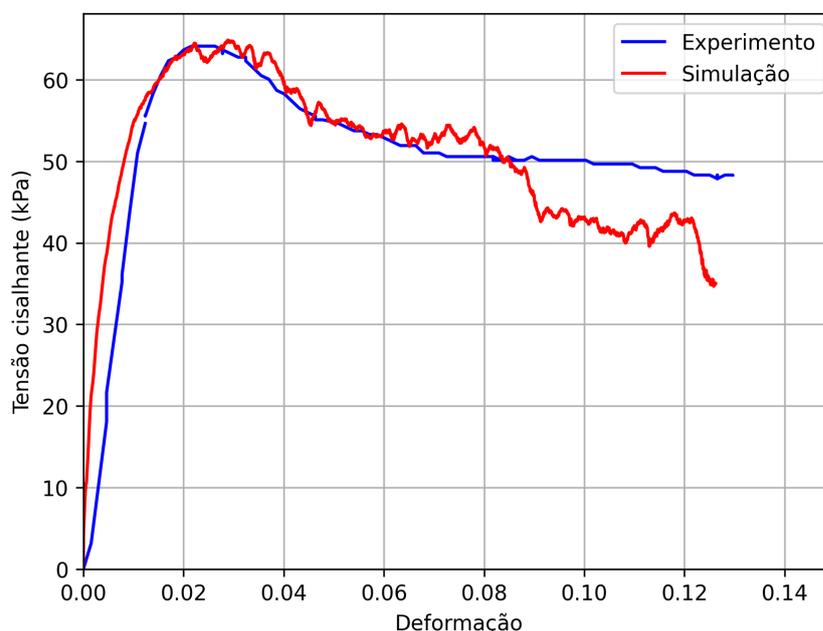


FIGURA 4.1 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação para 50 kPa.

Usando a função *interp* da biblioteca *numpy* da linguagem *Python*, foi feita a interpolação linear da curva simulada para os pontos da curva experimental. Dessa forma foi possível obter, de forma aproximada, um comparativo de proximidade entre as curvas por meio da raiz quadrada do erro quadrático médio. A Tabela 4.2 sumariza o comparativo entre as curvas experimentais e simulada para a pressão normal de 50 kPa. Percebe-se que, apesar de aproximar bem a tensão de pico, o modelo tem alto erro percentual para a tensão residual.

TABELA 4.2 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para tensão normal de 50 kPa.

Propriedade	Experimental (kPa)	Simulação (kPa)	Diferença percentual
Tensão de Pico	64.11	64.85	1.15%
Tensão Residual	48.31	34.98	-27.58%
RMSE	5.77		

Usando de interpolação dos valores para a curva simulada, podemos estimar como varia a diferença percentual ponto a ponto ao longo do deslocamento. Os valores de diferença percentual para os deslocamento iniciais foram desconsiderados, visto que uma pequena diferença em valores de baixa magnitude gera uma grande diferença percentual. A Figura 4.2 mostra como varia a diferença percentual ao longo da deformação axial. Percebe-se que a partir de 1% de deformação a diferença percentual fica no intervalo de -25% a 25%,

apresentando maior diferença até 1% e após 9% de deformação, como também pôde ser observado na Figura 4.1

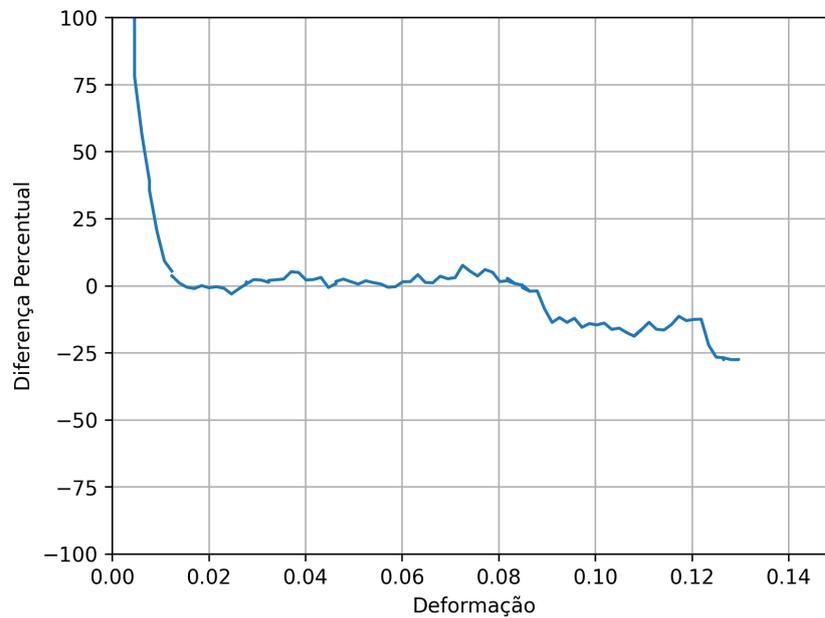


FIGURA 4.2 – Diferença percentual para tensão normal de 50 kPa.

Para a tensão normal de 100 kPa, a curva simulada reproduz aproximadamente a tensão de pico e a tensão residual da curva experimental, mas não possui o formato bem definido de “sino”. O comparativo dos gráficos é mostrado na Figura 4.3.

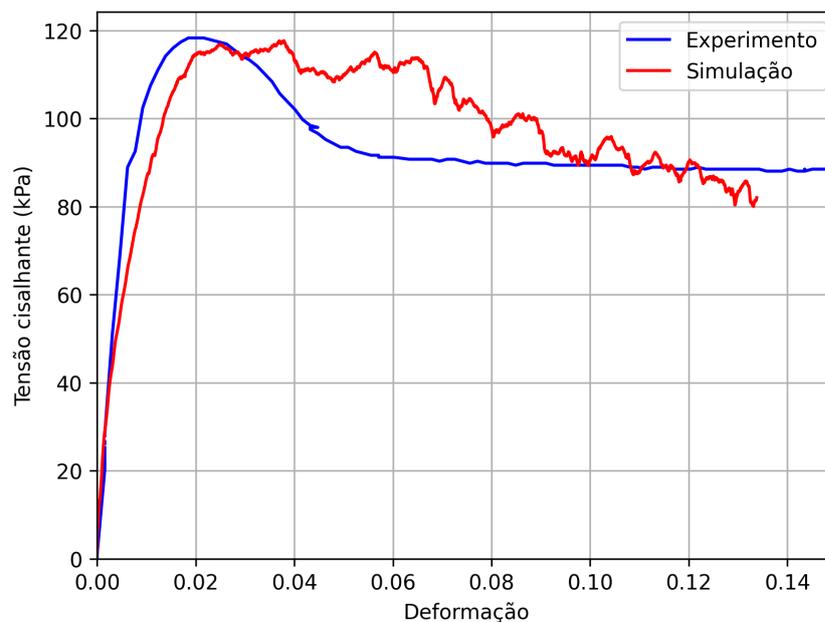


FIGURA 4.3 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação para 100 kPa.

A Tabela 4.3 sumariza o comparativo entre as curvas experimentais e simulada. Os

valores de diferença percentual evidenciam uma maior proximidade do entre os valores de tensão de pico e residual, simuladas e experimentais, do que se mostrou para o caso de 50 kPa.

TABELA 4.3 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para pressão normal de 100 kPa.

Propriedade	Experimental (kPa)	Simulação (kPa)	Diferença percentual
Tensão de Pico	118.3	117.66	-0.54%
Tensão Residual	83.08	82.02	-1.28%
RMSE	9.08		

A Figura 4.4 mostra como varia a diferença percentual ao longo da deformação axial. Percebe-se que com exceção do início, a maior parte da diferença percentual da curva se encontra entre -25% e 25%, com o modelo superestimando a tensão durante a maior parte do ensaio.

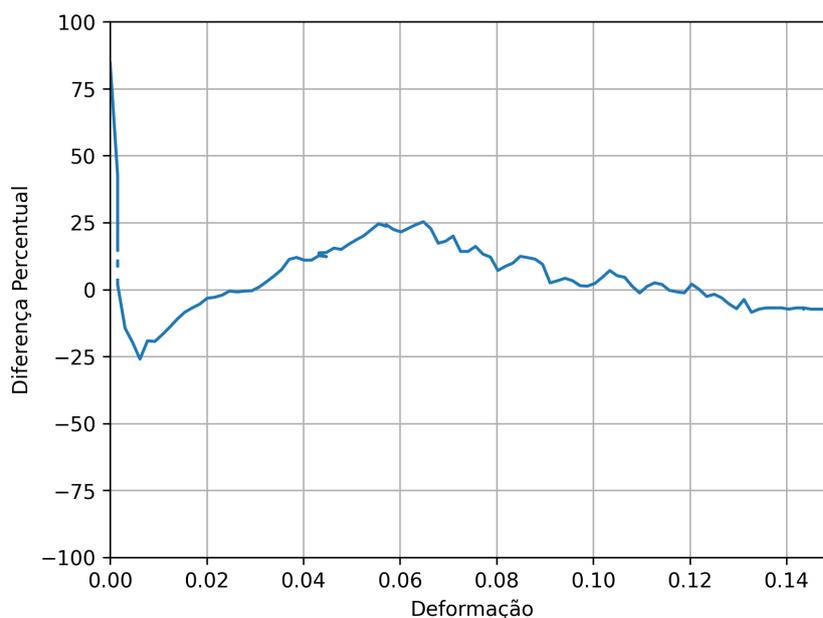


FIGURA 4.4 – Diferença Percentual para tensão normal de 100 kPa.

Para a tensão normal de 200 kPa, a Figura 4.5 demonstra que tanto a tensão de pico quanto a tensão residual da curva simulada superam a curva experimental. Entretanto, é possível perceber facilmente a formação de uma tensão de pico e de uma tensão residual.

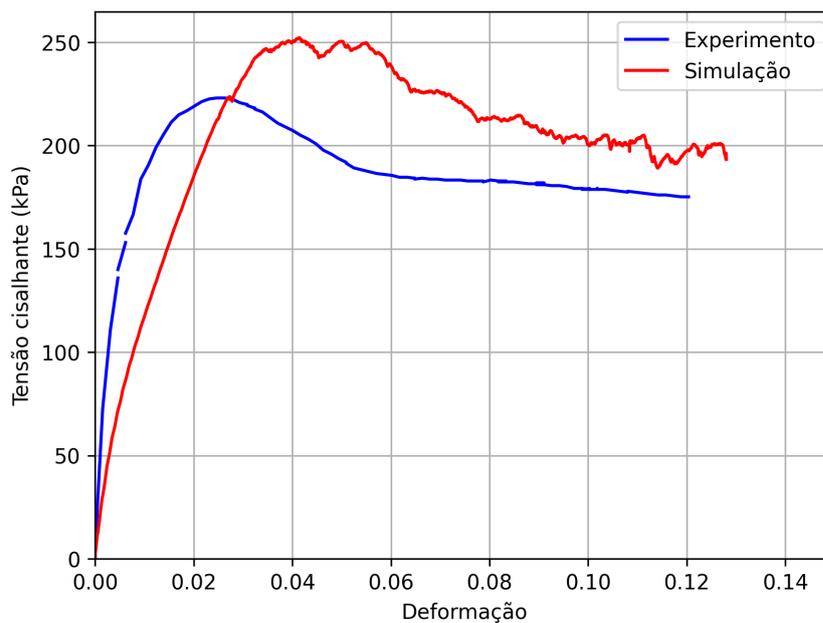


FIGURA 4.5 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação para 200 kPa.

A Tabela 4.4 sumariza o comparativo entre as curvas experimentais e simulada. Percebe-se maior divergência tanto na tensão de pico quanto na residual, do que nos casos anteriores.

TABELA 4.4 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para tensão normal de 200 kPa.

Propriedade	Experimental (kPa)	Simulação (kPa)	Diferença percentual
Tensão de Pico	223.05	252.19	13.06%
Tensão Residual	175.19	193.31	10.34%
RMSE	36.36		

A Figura 4.6 mostra como varia a diferença percentual ao longo da deformação axial. Percebe-se a tendência do modelo de superestimar a tensão cisalhante, visto a partir de cerca de 3% de deformação a diferença percentual é positiva.

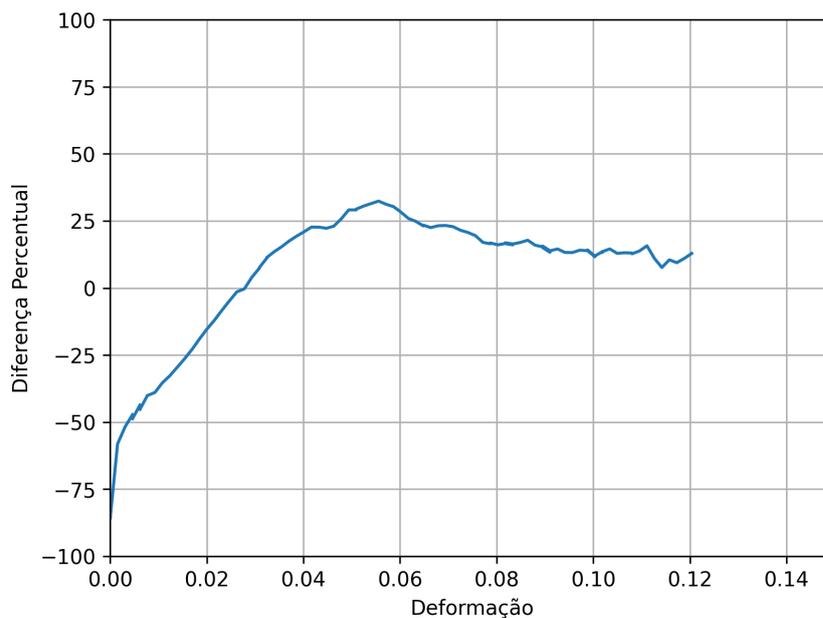


FIGURA 4.6 – Diferença percentual para tensão normal de 200 kPa.

### 4.1.1 Comparativo global

A Figura 4.7 traz o comparativo entre as curvas simuladas e as curvas experimentais de modo global. Percebe-se que as curvas para tensão normal de 50 kPa e 100 kPa assemelham-se mais às curvas experimentais em questão de tensão de pico e tensão residual quando comparadas à curva de 200 kPa. Isso evidencia que o modelo possui tendência de distanciamento da realidade com o aumento da tensão normal. Quanto ao tempo de simulação, foram necessárias cerca de 3 horas para cada ensaio.

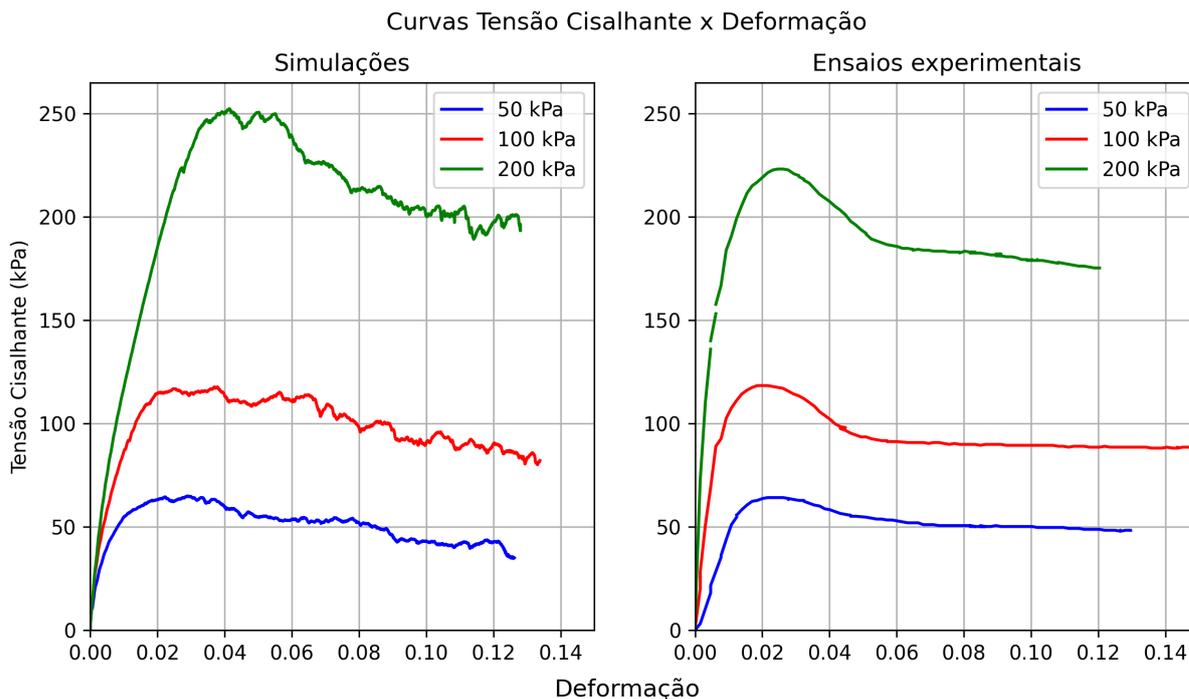


FIGURA 4.7 – Comparativo entre curvas de tensão cisalhante por deformação.

A Figura 4.8 mostra a determinação do ângulo de atrito a partir da tensão de pico. Nela é possível perceber que ocorre sobreposição entre os valores de resistência ao cisalhamento para as pressões normais de 50 e 100 KPa, mas ocorre uma divergência perceptível entre os valores de tensão cisalhante para a pressão normal de 200 kPa. Isso demonstra que a modelagem adotada consegue representar aproximadamente bem os resultados de tensão de pico para valores mais baixos, porém houve alguma divergência para o caso da maior tensão normal.

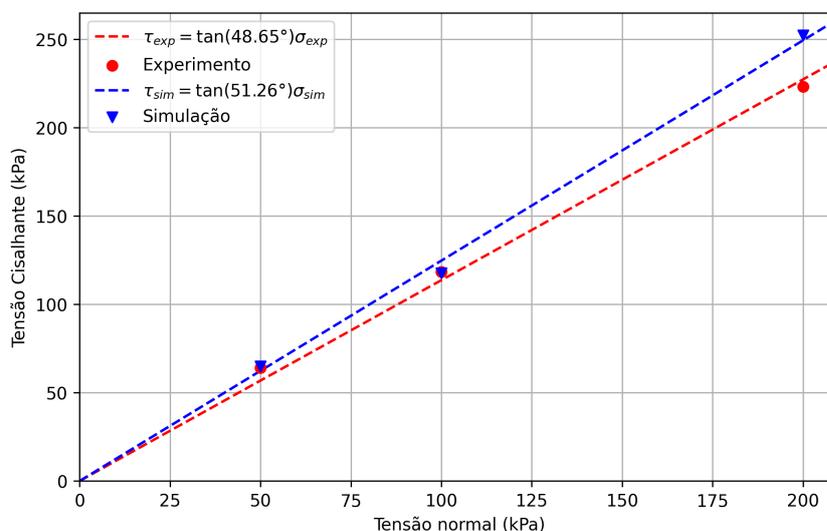


FIGURA 4.8 – Regressão linear para determinação do ângulo de atrito do solo com base na tensão de pico.

A Figura 4.9, mostra a determinação do ângulo de atrito do solo a partir da tensão residual. Ocorre aproximada sobreposição dos pontos para a pressão normal de 100 kPa, entretanto, como o modelo superestima a tensão cisalhante para as pressões de de 50 e 200 kPa, existe uma diferença entre os valores de ângulo de atrito determinados, sendo maior para a o modelo simulado.

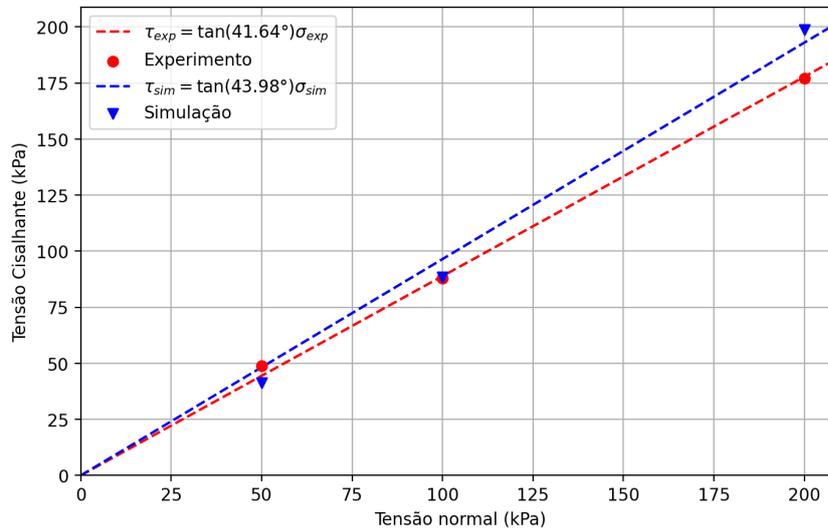


FIGURA 4.9 – Regressão linear para determinação do ângulo de atrito do solo com base na tensão residual.

## 4.2 Ensaio Triaxial

A Tabela 4.1 mostra os parâmetros utilizados para as três simulações.

TABELA 4.5 – Parâmetros utilizados nas simulações dos ensaios triaxiais.

Parâmetros	Símbolo	Valor
Módulo de Young (MPa)	$E$	200
Coefficiente de Poisson	$\nu$	0.4
Coesão normal	$C_N$	0
Coesão Tangencial	$C_T$	0
Resistência ao rolamento	$\alpha K_r$	2
Resistência à torção	$\alpha K_{tw}$	2
Amortecimento do rolamento	$\eta_{Rol}$	0.11
Amortecimento da torção	$\eta_{tw}$	0.11
Raio das partículas (mm)	$R$	7
Variação percentual do Raio	$\Delta\%R$	20

O modelo subestima a tensão de pico, mas obtém aproximadamente o mesmo valor de

tensão residual, como pode ser visto na Figura 4.10.

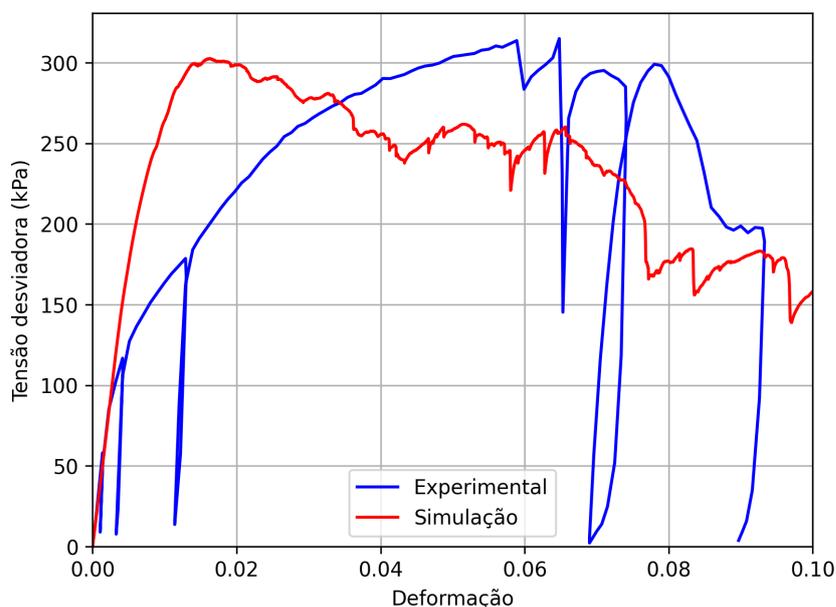


FIGURA 4.10 – Comparativo entre curvas de tensão desviadora por deformação para 50 kPa.

A Tabela 4.10 sumariza a comparação entre as curvas experimental e simulada. Percebe-se que o modelo subestima a tensão de pico e a tensão residual.

TABELA 4.6 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para pressão confinante de 50 kPa.

Propriedade	Experimental (kPa)	Simulação (kPa)	Diferença percentual
Tensão de Pico	324.9	294.95	-9.22%
Tensão Residual	200	158.23	-20.88%
RMSE		79.34	

A Figura 4.11 mostra a variação da diferença percentual entre as curvas simulada e experimental ao longo da deformação axial. Percebe-se que a Figura 4.11 mostra como varia a diferença percentual ao longo da deformação axial, que foi em torno de 25% durante a maior parte do ensaio, mas com maior divergência antes de 2% e próximo de 8%.

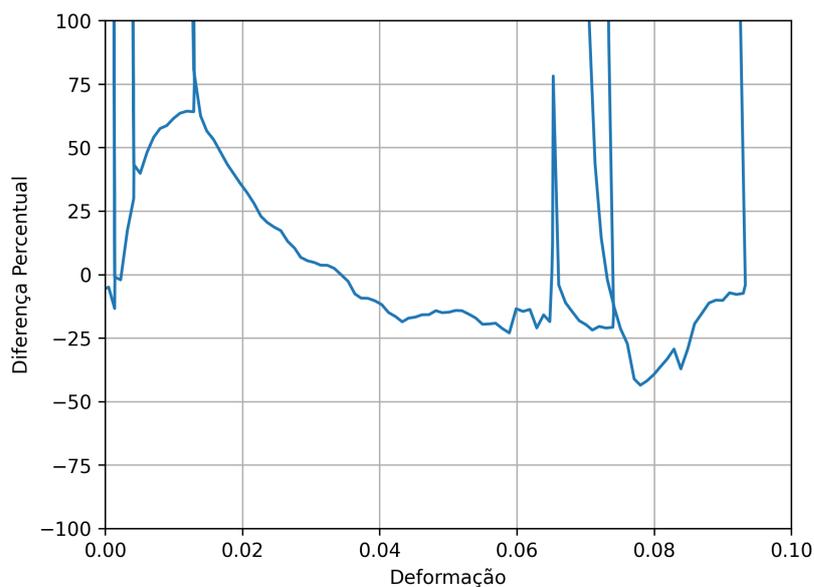


FIGURA 4.11 – Diferença Percentual para pressão confinante de 50 kPa.

Para o caso de pressão confinante de 100 kPa, o modelo superestima a tensão de pico e subestima a tensão residual. A resposta tensão-deformação da simulação e do experimento é mostrada na Figura 4.12. A Tabela 4.7 sumariza as características das curvas experimental e simulada, permitindo quantificar tanto a distância entre as curvas, pelo RMSE, quanto de suas tensões de pico e residual, com variação acima de 15%. A Figura 4.13 mostra como varia a diferença percentual ao longo da deformação axial. Assim como para o caso da pressão confinante de 50 kPa, a diferença percentual foi de 25% aproximadamente para a maior parte do ensaio.

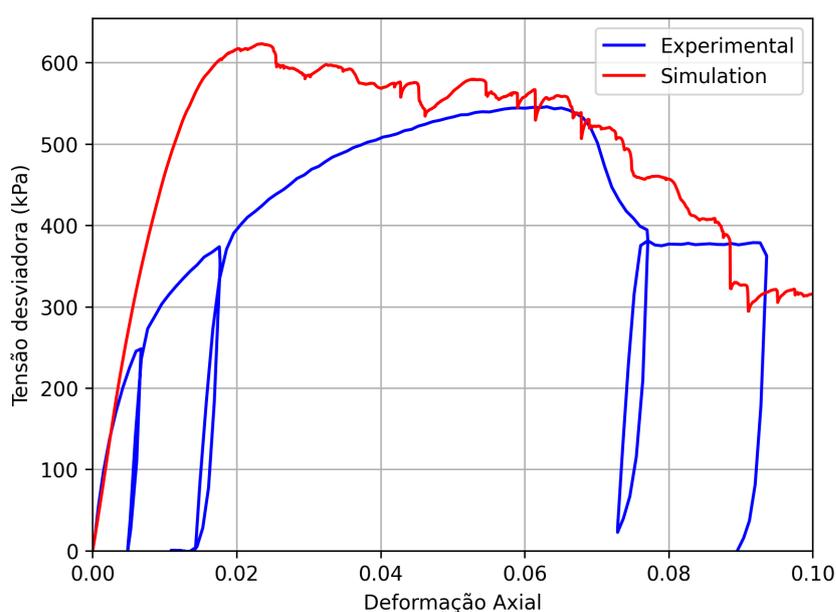


FIGURA 4.12 – Comparativo entre curvas de tensão desviatória por deformação para 100 kPa.

TABELA 4.7 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para a pressão confinante de 100 kPa.

Propriedade	Experimental (kPa)	Simulação (kPa)	Diferença percentual
Tensão de Pico	552.8	643.8	16.46%
Tensão Residual	375	315.5	-15.87%
RMSE	186.16		

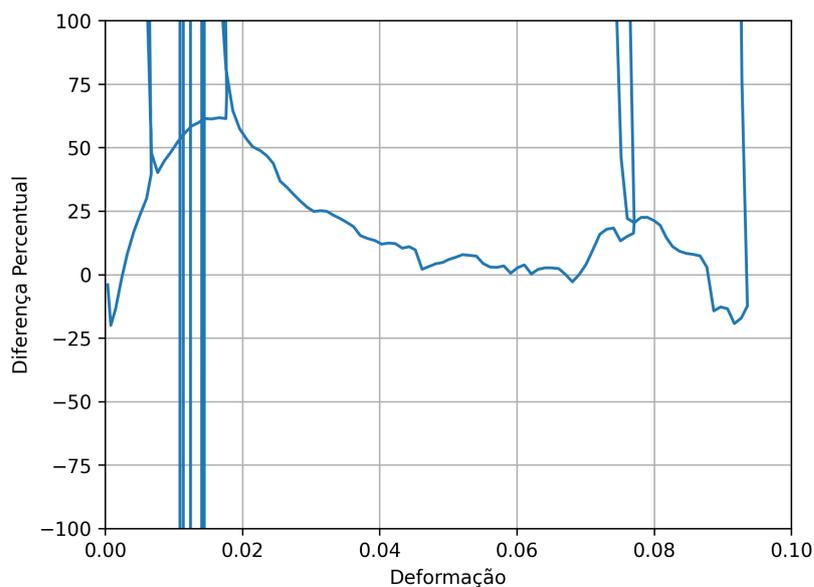


FIGURA 4.13 – Diferença Percentual para pressão confinante de 100 kPa.

Para a simulação do ensaio triaxial a 200 kPa de pressão confinante, o modelo superestima a tensão de pico enquanto subestima a tensão residual. Além disso, a máxima tensão desviadora é alcançada antes da curva experimental. A Tabela 4.8 sumariza as características das curvas experimental e simulada, mostrando erros superiores a 17% para as tensões. A Figura 4.15 mostra como varia a diferença percentual ao longo da deformação axial, que foi de 25% a 50% na maior parte do ensaio, diferentemente dos dois casos anteriores.

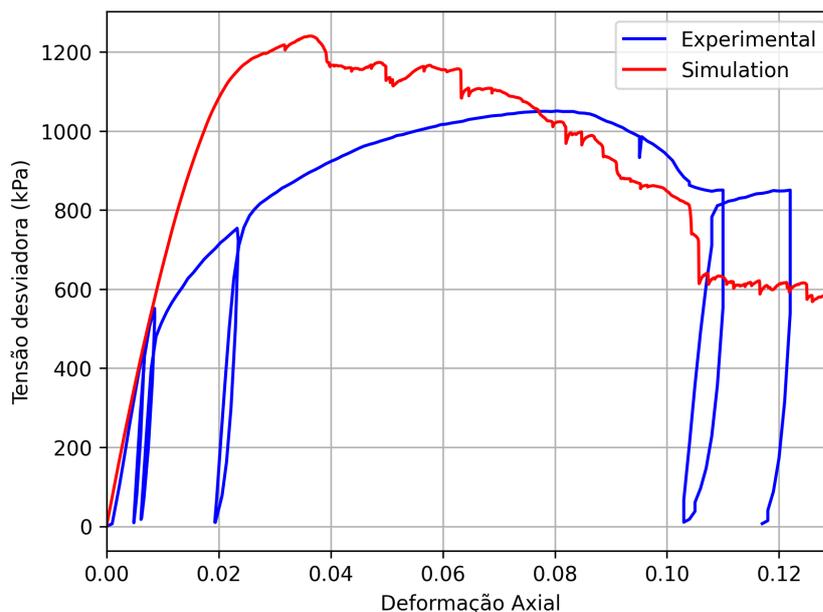


FIGURA 4.14 – Comparativo entre curvas de tensão desviadora por deformação para 200 kPa.

TABELA 4.8 – Comparativo entre propriedades da curva experimental e simulada para a pressão confinante de 200 kPa.

Propriedade	Experimental (kPa)	Simulação (kPa)	Diferença percentual
Tensão de Pico	1055.9	1240.26	17.46%
Tensão Residual	850	577.77	-32.03%
RMSE	344.9		

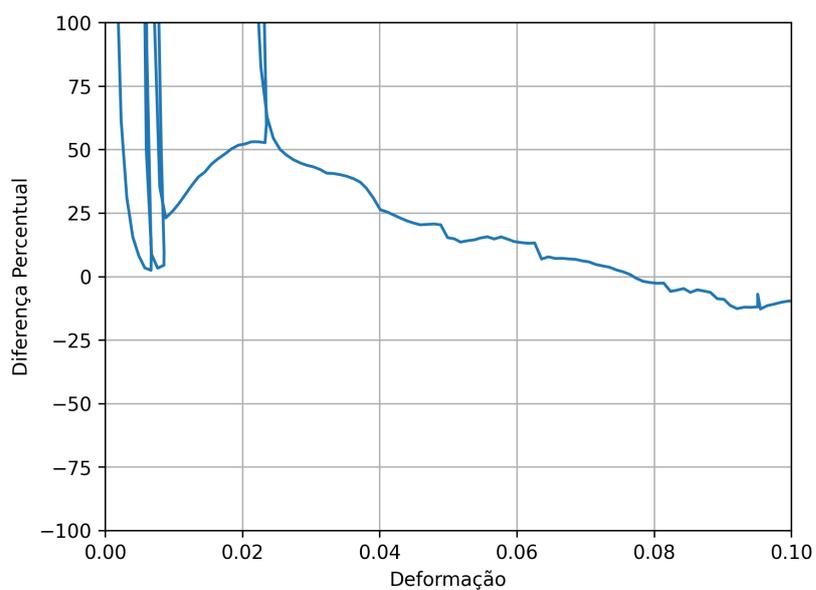


FIGURA 4.15 – Diferença percentual para pressão confinante de 200 kPa.

### 4.2.1 Comparativo Global

A Figura 4.16 traz o comparativo das três curvas experimentais e das três curvas simuladas. Observa-se que o formato das curvas da simulação apresentou maior discordância das curvas experimentais quando comparadas ao caso do ensaio de cisalhamento direto. Contudo, vale ressaltar que os parâmetros utilizados na simulação dos ensaios de cisalhamento direto foram significativamente diferentes dos parâmetros da simulação do ensaio triaxial, a começar pelo raio das partículas, que foi simulado de 7 mm na simulação do ensaio triaxial e de 2 mm no cisalhamento direto. Além disso, para o ensaio triaxial, o módulo de Young foi cerca de 4 vezes maior, o amortecimento do rolamento e da torção foram 11 vezes maiores. Quanto ao tempo de simulação, foram necessários cerca de 3,5 horas para os ensaios de 50 e 100 kPa e de 4,5 horas para o de 200 kPa.

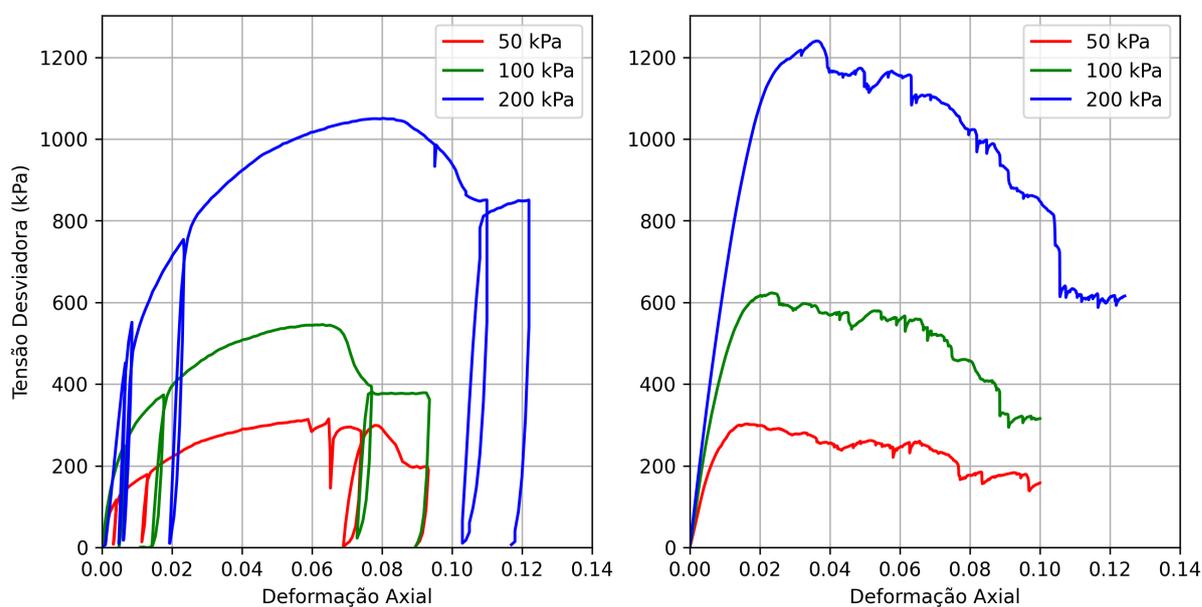


FIGURA 4.16 – Comparativo entre curvas de tensão desviadora por deformação.

A Figura 4.17 mostra o traçado das circunferências de Mohr de cada uma das curvas, experimentais e simuladas, e das envoltória de Mohr-Coulomb obtida por regressão linear dos pontos de tangência das circunferências, admitindo coesão nula, considerando a tensão de ruptura. Assim como os resultados experimentais, o ângulo de atrito obtido das simulações foi maior para o ensaio triaxial, em comparação com o ensaio de cisalhamento direto.

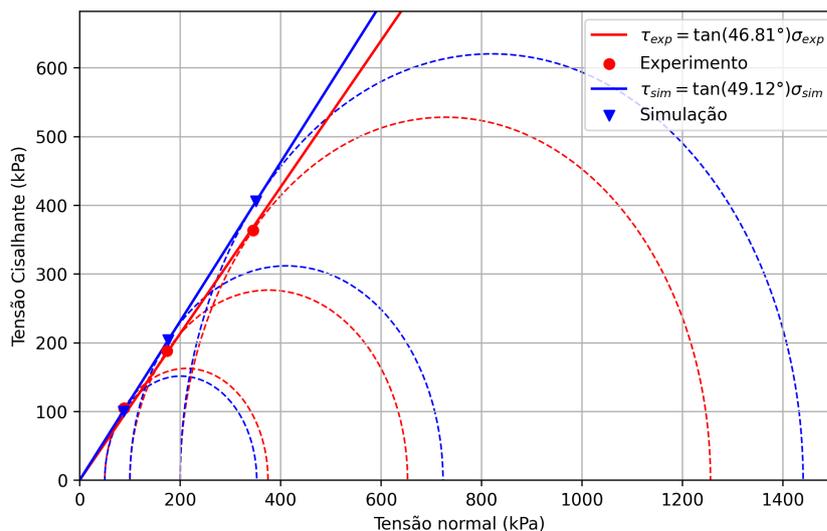


FIGURA 4.17 – Envoltória de Mohr-Coulomb com base na tensão de pico.

A Figura 4.18 mostra o traçado das circunferências de Mohr-Coulomb obtidas usando as tensões residuais. Assim como foi possível perceber na Figura 4.16 há elevada discordância entre os valores de tensão residual, o que ocasiona considerável diferença no valor do ângulo de atrito obtido.

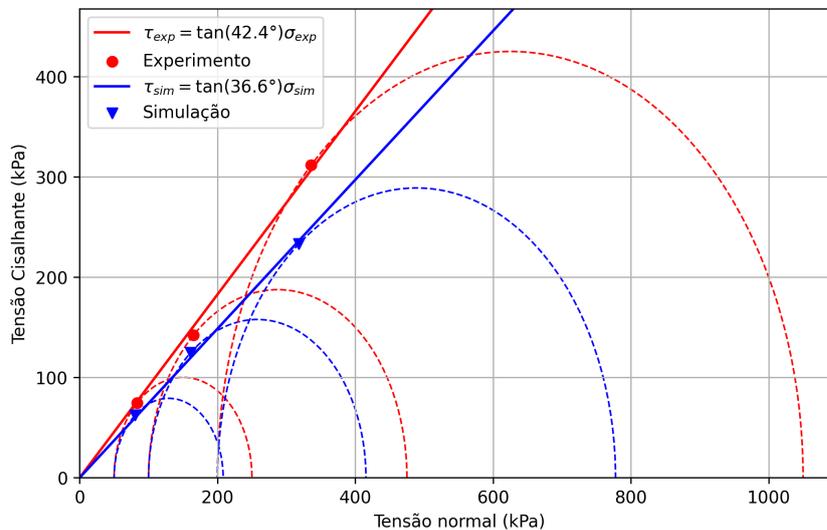


FIGURA 4.18 – Envoltória de Mohr-Coulomb com base na tensão residual.

## 5 Conclusão

O presente trabalho apresentou um estudo numérico com base no método dos elementos discretos (MED) que, com o auxílio do *framework* Yade, comparou os resultados numéricos de ensaios típicos de resistência dos solos com resultados obtidos experimentalmente. O propósito do estudo foi o de proporcionar uma linha diretriz inicial para o desenvolvimento de simulações com MED na instituição. Para tal, além de analisar a acurácia dos resultados, apresentou-se o conceito da modelagem e o funcionamento da simulação.

Com base nos resultados do presente estudo, foi possível perceber que os modelos computacionais criados com o Yade conseguem representar com relativa acurácia o comportamento observado nos ensaios simulados para pressões baixas, como 50 e 100 kPa, mas possui resultados consideravelmente divergentes para pressões mais altas, como 200 kPa.

Ficou evidente que a consideração apenas de partículas esféricas com resistência ao rolamento limitaram a capacidade do modelo de reproduzir os resultados experimentais. Além disso, observa-se que a limitação do tamanho das partículas para a modelagem, em função da capacidade e custo computacional, pode influenciar na determinação dos parâmetros mecânicos das partículas, como módulo de elasticidade, e resistência e amortecimento do rolamento e da torção.

Para trabalhos futuros, sugere-se a consideração de geometrias não esféricas para as partículas, a consideração da curva granulométrica, o aprimoramento dos aparatos e o teste de um número maior de pressões para determinar se os comportamentos observados permanecem nas amostras.

# Referências

- BELHEINE, N.; PLASSIARD, J.-P.; DONZE, F.-V.; DARVE, F.; SERIDI, A. Numerical simulation of drained triaxial test using 3d discrete element modeling. **Computers and Geotechnics**, v. 36, p. 320–331, 2009.
- BHARADWAJ, R. Using dem to solve bulk material handling problems. **Chemical Engineering Progress**, v. 108, n. 9, p. 54–58, 2012.
- BOURRIER, R.; KNEIB, F.; CHAREYRE, B.; FOURCAD, T. Discrete element modelling of granular soils reinforcement by plant roots. **Ecological Engineering**, v. 61, p. 646–657, 2013.
- CAVARRETTA, I.; COOP, M. R.; O’SULLIVAN, C. The influence of particle characteristics on the behaviour of coarse grained soils. **Géotechnique**, v. 60, n. 5, p. 413–424, 2010.
- CUNDALL; STRACK. Discrete element modelling of granular soils reinforcement by plant roots. **Ecological Engineering**, v. 61, p. 646–657, 2013.
- CUNDALL, P. A. Distinct element models of rock and soil structure. *In*: BROWN, E. (Ed.). **Analytical and Computational Methods in Engineering Rock Mechanics**. [*S.l.*]: Allen and Unwin, 1987.
- DURAN, J. **Sands, powders, and grains : An introduction to the physics of granular materials**. [*S.l.*]: Springer, 2000.
- HAZZAR, L.; NUTH, M.; CHEKIREL, M. DEM simulation of drained triaxial tests for glass-beads. **Powder Technology**, v. 364, p. 123–134, 2020.
- HOGUE, C. Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries. **Engineering Computations**, v. 15, n. 10, p. 374–389, 1998.
- KINLOCK, H.; O’SULLIVAN, C. A micro-mechanical study of the influence of penetrometer geometry on failure mechanisms in granular soils. *In*: OLSON, H. (Ed.). **Geo-Denver 2007: New Peaks in Geotechnics, Proceedings ASCE Geo Congress 2007. Proceedings** [...]. [*S.l.*: *s.n.*], 2007.

- MINDLIN, R. D. Compliance of elastic bodies in contact. **ASME Journal of Applied Mechanics**, v. 16, p. 259–269, 1949.
- MORAVIA, M. G. **Geogrid-Reinforced Layer Approach Using DEM Modelling**. 152 pp. Thesis (Of Doctor of Science) — Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 2020.
- MUNJIZA, A. Discrete element methods simulation of discontinua: Theory and applications. p. 214, 2010.
- O’SULLIVAN, C. **Particulate discrete Element method**. [S.l.]: Spoon Press, 2011.
- PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. **Computational Granular Dynamics**. [S.l.]: Springer-Verlag, 2005.
- SCHIAVON, J. A. **Behaviour of Helical Anchors Subjected to Cyclic Loadings**. 300 p. Thesis (Doutorado) — University of Sao Paulo and Nantes Angers and Le Mans University, Sao Paulo, Sao Carlos, SP, 2016. xi, 39
- SUTMANN, G. Classical molecular dynamics. *In*: GROTENDORST, J.; MARX, D.; MURAMATSU, A. (Ed.). **Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms**. Jülich: John von Neumann Institute for Computing, 2002, (NIC Series, v. 10). p. 211–254.
- TEJADA, I. G.; ANTOLIN, P. Use of machine learning for unraveling hidden correlations between particle size distributions and the mechanical behavior of granular materials. **Acta Geotechnica**, v. 17, n. 11–13, p. 1443–1461, 2021.
- THORNTON, C.; LIU, L. How do agglomerates break? **Powder Technology**, v. 143-144, p. 110–116, 2004.
- WANG, X.; LI, J. Simulation of triaxial response of granular materials by modified DEM. **Science China**, v. 57, n. 2297–2308, p. 1043–1061, 2014.
- ZHU, Z.; ZHU, H.; YU, A.; WRIGHT, B.; ZULLI, P. Discrete particle simulation of gas solid flow in a blast furnace. **Computers and Chemical Engineering**, v. 10, n. 11–13, p. 1043–1061, 2007.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. **The Finite Element Method: Volume 1**. [S.l.: s.n.], 2000. 7–12 p.
- ŠMILAUER, V. *et al.* **Yade Documentation 3rd ed**. [S.l.]: The Yade Project, 2021. [Http://yade-dem.org/doc/](http://yade-dem.org/doc/). ix, 30

# Apêndice A - Bases de dados dos ensaios

As bases de dados fornecidas pelo orientador são representadas abaixo

## A.1 Base de dados do ensaio de Cisalhamento Direto

$S_3 = 50 \text{ kPa}$		$S_3 = 100 \text{ kPa}$		$S_3 = 200 \text{ kPa}$	
dH/D	$\tau$ (kPa)	dH/D	$\tau$ (kPa)	dH/D	$\tau$ (kPa)
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0,00	0,00	0,00	0,903039243	0,00	3,16063735
0,00	0,00	0,00	0,903039243	0,00	3,16063735
0,00	0,00	0,00	0,903039243	0,00	3,16063735
0,00	0,00	0,00	0,903039243	0,00	3,16063735

TABELA A.1 – Primeiros cinco valores da base de dados de cisalhamento direto para cada ensaio

$S_3 = 50 \text{ kPa}$		$S_3 = 100 \text{ kPa}$		$S_3 = 200 \text{ kPa}$	
dH/D	$\tau$ (kPa)	dH/D	$\tau$ (kPa)	dH/D	$\tau$ (kPa)
0,129656208	48,3154188	0,217623498	83,08774813	0,118841789	175,1989836
0,129656208	48,3154188	0,217623498	83,08774813	0,12037717	175,1991047
0,129656208	48,3154188	0,217623498	83,08774813	0,12037717	175,1991047
0,129656208	48,31545219	0,217623498	83,08774813	0,12037717	175,1991047
0,129656208	48,3154188	0,217623498	83,08774813	0,12037717	175,1991047

TABELA A.2 – Últimos cinco valores da base de dados de cisalhamento direto para cada ensaio

## A.2 Base de dados do ensaio de Compressão Triaxial

$S_3 = 50 \text{ kPa}$		$S_3 = 100 \text{ kPa}$		$S_3 = 200 \text{ kPa}$	
$e_1$	q (kPa)	$e_1$	q (kPa)	$e_1$	q (kPa)
0,00E+00	0,00	0,00E+00	0,00	0,00E+00	0,00
0,00E+00	0,00	3,67E-04	20,50	0,00E+00	0,00
1,96E-05	1,28	8,23E-04	55,76	0,00E+00	0,00
5,00E-04	19,14	1,52E-03	98,13	0,00E+00	0,00
1,38E-03	58,14	2,37E-03	138,06	0,00E+00	0,00

TABELA A.3 – Primeiros cinco valores da base de dados de compressão triaxial para cada ensaio

$S_3 = 50 \text{ kPa}$		$S_3 = 100 \text{ kPa}$		$S_3 = 200 \text{ kPa}$	
$e_1$	q (kPa)	$e_1$	q (kPa)	$e_1$	q (kPa)
9,26E-02	92,18	9,28E-02	178,00	1,20E-01	172,80
9,16E-02	34,69	9,20E-02	81,32	1,19E-01	88,19
9,08E-02	15,80	9,12E-02	36,84	1,18E-01	40,24
9,02E-02	9,02	9,04E-02	15,76	1,18E-01	14,41
8,97E-02	3,75	8,96E-02	1,50	1,17E-01	6,82

TABELA A.4 – Últimos cinco valores da base de dados de compressão triaxial para cada ensaio

## FOLHA DE REGISTRO DO DOCUMENTO

1. CLASSIFICAÇÃO/TIPO TC	2. DATA 13 de novembro de 2023	3. DOCUMENTO Nº DCTA/ITA/TC-087/2023	4. Nº DE PÁGINAS 59
5. TÍTULO E SUBTÍTULO: Simulação de Ensaios de Resistência em Solos via Método dos Elementos Discretos (MED)			
6. AUTOR(ES): <b>Vinícius de Souza Lima</b>			
7. INSTITUIÇÃO(ÕES)/ÓRGÃO(S) INTERNO(S)/DIVISÃO(ÕES): Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA			
8. PALAVRAS-CHAVE SUGERIDAS PELO AUTOR: DEM, Simulação, Cisalhamento, Triaxial, Ângulo de atrito, Deformação			
9. PALAVRAS-CHAVE RESULTANTES DE INDEXAÇÃO: Mecânica dos solos; Solos; Simulação; Métodos de elementos finitos; Cisalhamento; Atrito; Deformação; Engenharia civil; Engenharia estrutural.			
10. APRESENTAÇÃO: <span style="float: right;">(X) Nacional    ( ) Internacional</span> ITA, São José de Campos. Curso de Graduação em Engenharia Civil-Aeronáutica. Orientador: José Antonio Schiavon. Publicado em 2023.			
11. RESUMO: <p>A geotecnia é uma área que muito se beneficia por métodos computacionais, pois permitem modelar comportamentos complexos que podem não possuir soluções analíticas, sendo o método dos elementos finitos a metodologia mais usada. O Método dos Elementos Discretos é outra metodologia que tem sido cada vez mais utilizada na simulação de solos. Em especial na área de ensaios de resistência, o MED tem mostrado ser capaz de representar adequadamente o comportamento experimental de solos.</p> <p>A lacuna de pesquisa percebida nessa área foi na existência de abordagens genéricas que explicassem de forma simplificada como proceder para reproduzir resultados experimentais de ensaios de resistência em solos utilizando partículas esféricas.</p> <p>O propósito deste trabalho é proporcionar uma linha diretriz inicial para simulações com MED na instituição, pela sugestão e estudo de abordagens para simular ensaios de cisalhamento direto e de compressão triaxial por meio do método dos elementos discretos, bem como pela análise da eficácia dessas abordagens ao comparar os resultados das simulações com curvas experimentais.</p> <p>O trabalho foi feito com o <i>framework</i> de código aberto Yade. As partículas foram consideradas como esféricas com resistência ao rolamento. Os resultados experimentais usados para comparação foram fornecidos pelo orientador e consistiram da areia Hostun HN38.</p> <p>Foi possível perceber que os modelos conseguiram reproduzir relativamente bem determinados resultados de ensaios experimentais, como tensão de pico, tensão residual e ângulo de atrito. Entretanto, os modelos adotados tendem a apresentar maior divergência com o aumento das pressões utilizadas. Além disso, a consideração de apenas partículas esféricas limita o ajuste fino dos modelos, que apresentaram elevados erros percentuais ao longo das simulações, e afeta considerações de resistência e amortecimento do rolamento.</p> <p>A principal contribuição desse trabalho foi apresentar um procedimento simplificado para obtenção de resultados qualitativamente de acordo com os obtidos experimentalmente, que podem passar por ajuste fino por meio de considerações de granulometria e angularidade das partículas.</p>			
12. GRAU DE SIGILO: <div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <span>(X) OSTENSIVO</span> <span>( ) RESERVADO</span> <span>( ) SECRETO</span> </div>			