

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**  
**FACULDADE DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL**

**ESTUDOS DE COMPORTAMENTO MECÂNICO DE  
REJEITO DE MINÉRIO DE FERRO PELO MÉTODO DOS  
ELEMENTOS DISCRETOS**

**FLÁVIA AUGUSTA PADOVANI**

**ORIENTADOR: LEANDRO LIMA RASMUSSEN**  
**COORIENTADORA: MICHÉLE DAL TOÉ CASAGRANDE**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO EM GEOTECNIA**

**PUBLICAÇÃO: G.DM- 393/2023**

**BRASÍLIA / DF: JUNHO / 2023**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL**

**ESTUDOS DE COMPORTAMENTO MECÂNICO DE REJEITO  
DE MINÉRIO DE FERRO PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS  
DISCRETOS**

**FLÁVIA AUGUSTA PADOVANI**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE  
ENGENHARIA CIVIL DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE.**

**APROVADA POR:**

---

**LEANDRO LIMA RASMUSSEN, Dr (UnB)**  
(ORIENTADOR)

---

**MICHÉLE DAL TOÉ CASAGRANDE, Dr (UnB)**  
(COORDINADORA)

---

**ANDRÉ PACHECO ASSIS, Dr (UnB)**  
(EXAMINADOR INTERNO)

---

**PAULO ROBERTO COSTA CELLA, Dr (UnB)**  
(EXAMINADOR EXTERNO)

**DATA: BRASÍLIA/DF, 19 de JUNHO de 2023.**

## FICHA CATALOGRÁFICA

PADOVANI, FLÁVIA AUGUSTA

Estudos de Comportamento Mecânico de Rejeito de Minério de Ferro pelo Método dos Elementos Discretos [Distrito Federal] 2023

xvii, 81 p., 210mm x 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2023)

Dissertação de Mestrado (Mestrado em Geotecnia) – Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia. Departamento de Engenharia Civil e Ambiental.

- |                                    |                            |
|------------------------------------|----------------------------|
| 1. Métodos Elementos Discretos     | 2. Rejeito de mineração    |
| 3. PFC 2D                          | 4. Modelagem computacional |
| 5. Rolling Resistance Linear Model | 5. Análise micro-mecânica  |
| I. ENC/FT/UnB                      | II. Mestre                 |

## REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

PADOVANI, F.A. (2023). Estudos de Comportamento Mecânico de Rejeito de Minério de Ferro pelo Método dos Elementos Discretos. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-393/2023, Departamento de Engenharia Civil, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 80p.

## CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Flávia Augusta Padovani

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Estudos de Comportamento Mecânico de Rejeito de Minério de Ferro pelo Método dos Elementos Discretos.

GRAU / ANO: Mestre / 2023

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

---

Flávia Augusta Padovani  
Rua Levindo Lopes, 74. Savassi.  
30140-170 – Belo Horizonte/MG – Brasil  
flavia.padovani1@gmail.com

# DEDICATÓRIA

*À Deus e à minha família,  
que são a minha fortaleza.*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente à Deus e à intercessão de Nossa Senhora pela saúde e pelas oportunidades providenciadas para que fosse possível a realização deste trabalho.

Ao meu esposo Yan, pelo amor, apoio e por me lembrar constantemente da minha capacidade e que não caminho sozinha.

À minha família e amigos, pela compreensão, carinho, torcida e por não medirem esforços para minha educação e formação.

Ao professor Leandro, pela orientação, contribuição e tempo disponibilizado para o desenvolvimento deste trabalho. Aos professores André Assis e Michéle Casagrande, pelas contribuições para a melhoria deste trabalho. Ao Juan Sotomayor, pela gentileza de disponibilizar os dados dos ensaios de laboratório e pelas trocas de conhecimento.

À BVP Engenharia e aos colegas de trabalho, pelo apoio e parceria. Ao Paulo Cella, pelo incentivo e inspiração pela busca constante por conhecimento.

## RESUMO

O presente trabalho estudou a relação das principais medidas físicas microscópicas no comportamento mecânico de rejeitos de minério de ferro pelo método dos elementos discretos (MED). O programa bidimensional *Particle Flow Code* (PFC2D), da empresa Itasca, foi utilizado para as simulações numéricas da campanha de laboratório no que tange aos ensaios triaxiais drenados em amostras de rejeito arenoso de minério de ferro. No modelo MED, foram simulados ensaios de compressão biaxial drenada em amostras numéricas geradas proporcionalmente com a mesma distribuição granulométrica dos rejeitos e com densidade relativa entre 60-65% para as tensões de confinamento de 100, 200 e 400kPa, que representam as mesmas condições adotadas pelos ensaios de laboratório. A fim de representar o efeito das irregularidades características dos grãos de rejeitos, foi utilizado o modelo de contato *Rolling Resistance Linear Contact Model* (RRLCM). As propriedades micromecânicas da amostra numérica, tais como a rigidez normal, de cisalhamento e de resistência ao rolamento, e o coeficiente de atrito de rolamento, foram selecionadas a partir de uma metodologia proposta para calibração do modelo, a fim de se reproduzir o comportamento mecânico geral observados pelos ensaios de laboratório nos rejeitos. O comportamento mecânico macroscópico foi avaliado no modelo MED a partir da rede de forças de contato, dos vetores de velocidade, da resistência ao rolamento, da rotação das partículas e número de coordenação medidos a partir das interações partícula-partícula e partícula-parede. Durante as simulações dos ensaios biaxiais drenados, também foi possível identificar a localização e a inclinação da banda de cisalhamento formada. Em conclusão, os resultados obtidos a partir do modelo MED utilizando o modelo RRLCM indicam boa concordância entre a resposta tensão-deformação e os dados experimentais dos ensaios de laboratório, embora as curvas de deformação volumétrica não tenham conseguido representar totalmente a deformação volumétrica dos rejeitos devido as hipóteses simplificadoras adotadas para elaboração do modelo. Em suma, o presente trabalho fornece uma base de partida para novas investigações de rejeitos de mineração utilizando o MED.

**Palavras-chave:** Métodos Elementos Discretos; Rejeito de mineração; PFC2D; Modelagem computacional; *Rolling Resistance Linear Contact Model*; Análise Micromecânica.

## ABSTRACT

The present work studied the relationship between the main microscopic physical measurements and the mechanical behavior of iron ore tailings using the discrete element method (DEM). The two-dimensional program Particle Flow Code (PFC2D) from Itasca company was used for the numerical simulations of the laboratory tests that comprised of drained triaxial compression tests on sandy iron ore tailings samples. In the DEM model, drained biaxial compression tests were simulated on numerical samples with a grain size distribution curve proportional to that of the mining tailings and with a relative density between 60-65% for the confining stresses of 100, 200, and 400 kPa, which represent the same conditions adopted in the laboratory tests. In order to represent the effect of the irregularities in the shape of the tailings grains, the Rolling Resistance Linear Contact Model (RRLCM) was used in DEM simulations. The micromechanical properties of the numerical sample, such as the normal and shear rolling stiffness, and the rolling friction coefficient, were selected using a proposed methodology for calibrating the model in order to reproduce the overall mechanical behavior observed in the laboratory tests on mining tailings. The macroscopic mechanical behavior was evaluated in the DEM model based on the contact force network, velocity vectors, rolling resistance, particle rotation, and coordination number measured from the interactions between particle-particle and particle-wall. During the simulations of the drained biaxial tests, it was also possible to identify the location and inclination of the shear band. In conclusion, the results obtained from the DEM model using the RRLCM model indicated good agreement between the stress-strain response and the experimental data from the laboratory tests. However, the volumetric deformation curves were not able to fully represent the volumetric deformation of the tailings due to the simplifying assumptions adopted in the model development. In summary, the present work provides a starting basis for further investigations of mining tailings using DEM.

**Keywords:** Discrete Element Methods; Mining tailings; PFC2D; Numerical modeling; Rolling Resistance Linear Contact Model; Micromechanical Analysis.

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1	MOTIVAÇÃO	1
1.2	OBJETIVOS	2
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	3
<b>2</b>	<b>MÉTODOS DOS ELEMENTOS DISCRETOS</b>	<b>5</b>
2.1	SEQUÊNCIA DO CICLO COMPUTACIONAL	6
2.2	LEI FORÇA – DESLOCAMENTO	9
2.3	LEIS DO MOVIMENTO	13
2.4	FERRAMENTA COMPUTACIONAL – PFC2D	14
2.5	PASSO DE TEMPO	16
2.6	MODELO CONTATO LINEAR COM RESISTÊNCIA AO ROLAMENTO	18
2.7	MODELAGEM MICROMECAÂNICA DISCRETA DE MATERIAIS GRANULARES	21
<b>3</b>	<b>MODELAGEM MICROMECAÂNICA DISCRETA DO REJEITO</b>	<b>24</b>
3.1	DADOS DE REFERÊNCIA – ENSAIOS DE LABORATÓRIO NO REJEITO DE MINÉRIO DE FERRO	25
3.2	GERAÇÃO DA AMOSTRA NUMÉRICA	27
3.2.1	GEOMETRIA	27
3.2.2	GERAÇÃO E EMPACOTAMENTO DAS PARTÍCULAS	28
3.2.3	POROSIDADE	30
3.3	CALIBRAÇÃO DO MODELO	32
3.4	ENSAIOS BIAXIAIS DRENADOS	36
<b>4</b>	<b>ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS</b>	<b>37</b>
4.1	COMPORTAMENTO MACROSCÓPICO	37
4.2	COMPORTAMENTO MICROSCÓPICO	39
4.2.1	FORÇAS DE CONTATO	39
4.2.2	COLUNAS DE CARREGAMENTO	41
4.2.3	ROTAÇÃO DAS PARTÍCULAS	41



4.2.4	VELOCIDADE DAS PARTÍCULAS	46
4.2.5	NÚMERO DE COORDENAÇÃO	47
4.3	ANÁLISES DE SENSIBILIDADE	48
4.3.1	COEFICIENTE DE RESISTÊNCIA AO ROLAMENTO	48
4.3.2	COEFICIENTE DE ATRITO ENTRE PARTÍCULAS	52
4.3.3	TAXA DE CARREGAMENTO	54
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES</b>	<b>56</b>
5.1	CONCLUSÕES	56
5.1.1	COMPORTAMENTO MACROSCÓPICO	56
5.1.2	COMPORTAMENTO MICROSCÓPICO	57
5.1.3	ANÁLISES DE SENSIBILIDADE	58
5.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	59
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>60</b>

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1- Principais propriedades do Modelo de Contato Linear com Resistência ao Rolamento .....	21
Tabela 3.1- Principais propriedades físicas do Rejeito de Minério de Ferro (Sotomayor, 2018) .....	25
Tabela 3.2- Propriedades da amostra virtual .....	32
Tabela 3.3- Parâmetros calibrados .....	34

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1-1: Efeito da microestrutura no comportamento da areia de Kogyuk (Been & Jefferies, 1985 apud Jefferies & Been, 2016).	2
Figura 2-3: Sequência de esquemática de cálculos durante uma simulação em MED (modificado de O’Sullivan, 2011).	6
Figura 2-4: Representação esquemática de dois discos comprimidos por paredes rígidas (modificado de Cundall & Strack, 1979).	7
Figura 2-5: Diagrama esquemático do contato partícula-partícula (modificado de Cundall & Strack, 1979).	10
Figura 2-6: Representação esquemática das molas virtuais de contato.	12
Figura 2-7: Convenção de sinais adotados para $F_n$ e $F_s$ (modificado de Cundall & Strack, 1979).	12
Figura 2-1: Tipos de corpo rígido disponíveis no modelo PFC (modificado de Itasca Consulting Group, 2021b).	15
Figura 2-2: Representação de um sistema de partículas com cimentação (modificado de Itasca Consulting Group, 2021b).	16
Figura 2-8: Sistema único massa-mola (Itasca Consulting Group, 2021a).	17
Figura 2-9: Sistema de múltiplas massa-mola (Itasca Consulting Group, 2021a).	18
Figura 2-10: Representação esquemática da área associada ao ponto de contato (modificado de Itasca Consulting Group, 2021a).	20
Figura 3-1: Curva de distribuição granulométrica típica do rejeito arenoso de minério de ferro (Sotomayor, 2018).	25
Figura 3-2: Imagem MEV do rejeito arenoso de minério de ferro (Sotomayor, 2018).	26
Figura 3-3: Representação das paredes e dimensões da amostra numérica.	27
Figura 3-4: Amostra numérica gerada com curva de distribuição granulométrica 5x maior que a curva do rejeito – Etapa inicial.	29
Figura 3-5: Amostra numérica gerada com curva de distribuição granulométrica 10x maior que a curva do rejeito – Etapa final.	29
Figura 3-6: Curvas de distribuição granulométrica experimental (ensaios de laboratório) x numérica (modelo MED).	30
Figura 3-7: Simulação para determinação do índice de vazios mínimo, quando (a) a deposição gravitacional está ocorrendo e (b) após o sistema atingir o equilíbrio.	31
Figura 3-8: Simulação para determinação do índice de vazios máximo.	32

Figura 3-9: Esquema empregado para calibração das propriedades microscópicas do modelo – metodologia elaborada para esta pesquisa. ....	34
Figura 3-10: Resultados da calibração – Curvas tensão deformação (200 kPa). ....	35
Figura 3-11: Resultados da calibração – Curvas tensão deformação (200 kPa). ....	35
Figura 4-1: Curvas Tensão Desviadora x Deformação axial .....	37
Figura 4-2: Razão das tensões atuantes x Deformação axial .....	37
Figura 4-3: Curvas Deformação volumétrica x Deformação axial .....	38
Figura 4-4: Envoltória de resistência drenada.....	39
Figura 4-5: Evolução das forças de contato durante o ensaio biaxial – 100 kPa .....	40
Figura 4-6: Evolução das forças de contato durante o ensaio biaxial – 200 kPa .....	40
Figura 4-7: Evolução das forças de contato durante o ensaio biaxial – 400 kPa .....	40
Figura 4-8: Verificação das “colunas” de carregamento desenvolvidas durante as simulações numéricas para $\varepsilon_a = 18\%$ .....	41
Figura 4-9: Evolução da rotação de partículas e formação da banda de cisalhamento – 100 kPa .....	42
Figura 4-10: Evolução da rotação de partículas e formação da banda de cisalhamento– 200 kPa .....	42
Figura 4-11: Evolução da rotação de partículas e formação da banda de cisalhamento– 400 kPa .....	43
Figura 4-12: Foto dos corpos de prova após finalização dos ensaios triaxiais drenados no rejeito de minério de ferro (Sotomayor, 2018) .....	43
Figura 4-13: Localização das regiões criadas para monitoramento da porosidade .....	44
Figura 4-14: Variação do índice de vazios na amostra numérica – 100 kPa .....	44
Figura 4-15: Variação do índice de vazios na amostra numérica – 200 kPa .....	45
Figura 4-16: Variação do índice de vazios na amostra numérica – 400 kPa .....	45
Figura 4-17: Evolução do vetor velocidade – 100 kPa .....	46
Figura 4-18: Evolução do vetor velocidade – 200 kPa .....	46
Figura 4-19: Evolução do vetor velocidade – 400 kPa .....	47
Figura 4-20: Evolução do número de coordenação.....	48
Figura 4-21: Influência de $\mu_r$ na resposta drenada tensão-deformação.....	49
Figura 4-22: Influência de $\mu_r$ no índice de vazios .....	50
Figura 4-23: Influência de $\mu_{rol}$ no ângulo de atrito efetivo .....	51
Figura 4-24: Influência de $\mu_r$ no número de coordenação.....	51
Figura 4-25: Influência de $\mu_r$ nas forças de contato .....	52

Figura 4-26: Influência de $\mu$ na resposta drenada da amostra numérica.....	53
Figura 4-27: Influência da taxa de carregamento na curva tensão desviadora x deformação axial (200 kPa) .....	55
Figura 4-28: Influência da taxa de carregamento na deformação volumétrica x deformação axial (200 kPa) .....	55

## LISTA DE SIMBOLOS E ABREVIACÖES

LEC	Linha do Estado Crítico
MED	Método dos Elementos Discretos
PFC2D	<i>Particle Flow Code 2D</i>
PFC	<i>Particle Flow Code</i>
RRLCM	Modelo de Contato Linear com Resistência ao Rolamento / <i>Rolling Resistance Linear Contact Model</i>
HM	Modelo de Contato não-linear Hertz-Mindlin
IR	Índice de redundância
MEV	Microscopia eletrônica de varredura
$R$	Raio
$x_i, y_i$	Coordenadas de posição
$v$	Velocidade
$t$	Tempo
$\Delta n$	Distância de sobreposição/interpenetração
$A, B, C$	Pontos de contato
$D$	Distância entre centros
$A_{(D)}, A_{(w)}$	Pontos de intercessão
$A_{(w)}$	Ponto de intercessão da projeção horizontal do centro das partículas com a parede
$F_n$	Força normal
$F_s$	Força cisalhante
$k$	Constante de rigidez
$k_n$	Constante de rigidez normal
$k^{rot}$	Constante de rigidez rotacional
$k^{tran}$	Constante de rigidez translacional
$k^*$	Razão de rigidez normal-cisalhante
$\dot{x}_i, \dot{y}_i$	Vetor velocidade
$\dot{\theta}_{(x)}, \dot{\theta}_{(y)}$	Velocidade angular
$\ddot{x}_1, \ddot{y}_1$	Aceleração
$\ddot{\theta}_{(x)}$	Aceleração angular da partícula x
$\dot{X}_i$	Velocidade relativa
$\dot{n}$	Componente normal da velocidade relativa

$\dot{s}$	Componente tangencial da velocidade relativa
$m_{(x)}, m_{(y)}$	Massa
$e_i$	Vetor unitário
$\cos \alpha$	Cosseno
$\sin \alpha$	Seno
$\varphi_u$	Ângulo de atrito
$c$	Coesão
$M_{(x)}$	Momento
$\mu$	Coefficiente de atrito
$\mu_r$	Coefficiente de atrito ao rolamento
$F^1$	Força linear
$F^d$	Força de amortecimento
$M^r$	Momento de resistência ao rolamento
$E^*$	Módulo elástico efetivo
$\beta_n$	Razão de amortecimento crítico normal
$\beta_s$	Razão de amortecimento crítico cisalhante
$M_d$	Amortecimento (“dashpot mode”)
$C_u$	Coefficiente de uniformidade
$G_s$	Densidade relativa dos grãos
LI	Limite de Liquidez
LP	Limite de Plasticidade
$D_{10}$	Diâmetro correspondente à 10% de material passante
$D_{50}$	Diâmetro mediano
$D_r$	Densidade relativa
$\Delta u$	Varição da poro pressão
$\Delta \sigma_3$	Varição da tensão total de confinamento
$\sigma'_3, \sigma'_{xx}$	Tensão efetiva de confinamento
$r_{final}$	Raio final
$n$	Porosidade
$e$	Índice de vazios
$\sigma_d$	Tensão desviadora
$\sigma'_1, \sigma'_{yy}$	Tensão axial efetiva

$\varepsilon_a, \varepsilon_{yy}$	Deformação axial
$\varepsilon_{xx}$	Deformação horizontal
$\varepsilon_v$	Deformação volumétrica



# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 MOTIVAÇÃO

Os rejeitos de mineração são constituídos de materiais granulares (areias) e/ou finos não plásticos (siltes), resultantes do processo de lavra e beneficiamento do minério, depositados geralmente em pilhas e barragens. O conhecimento das propriedades e comportamento mecânico dos rejeitos é essencial para a estimativa adequada do desempenho destas estruturas a curto e longo prazo, tendo em vista seu potencial a liquefação.

A partir dos conceitos da teoria do estado crítico, inicialmente abordada por Casagrande (1936) e posteriormente estudada por outros autores (Jefferies & Been, 2016; Lade & Yamamuro, 1996; Verdugo & Ishihara, 1996; Pestana & Whittle, 1995; Been & Jefferies, 1985; Castro, 1969), é possível descrever o fenômeno da liquefação relacionando a resposta tensão-deformação tipo “strain-softening” e a Linha do Estado Crítico (LEC).

Os ensaios de laboratório envolvendo triaxiais drenados e não drenados representam importantes ferramentas para avaliação do comportamento mecânico dos rejeitos em termos de tensão-deformação, variação volumétrica, geração de poro-pressão e, portanto, para a obtenção dos parâmetros relacionados ao estado crítico, como a transformação de fase, instabilidade, dilatância e LEC.

Esta avaliação deve compreender também aspectos relacionados a estrutura das partículas e seus contatos, conforme apontado por alguns autores como Been & Jefferies (1985) apud Jefferies & Been (2016), para o caso da areia de Kogyuk. A partir dos resultados dos ensaios triaxiais drenados executados em duas amostras desta areia moldadas na mesma densidade e submetidas a tensões de confinamento iguais, diferenciando-se apenas pelo método de preparo, foram observadas diferentes curvas de tensão–deformação e variação volumétrica, conforme representado na Figura 1-1.

Neste sentido, a verificação da influência da estrutura no comportamento macroscópico por meio de ensaios de laboratório mostra-se bastante complexa, uma vez que requer o uso de técnicas avançadas de processamento de imagens, como o a técnica fotoelástica e a microfotografia (Yang et al., 2008; Majmudar & Behringer, 2005).

Diante disso, o Método dos Elementos Discretos (MED) tem se destacado por ser uma ferramenta computacional poderosa para avaliar o comportamento macroscópico e analisar a

microestrutura de materiais granulares, devido a sua capacidade de gerar uma amostra virtual composta por um conjunto de partículas com uma distribuição granulométrica e formato desejados. Sob esta amostra podem ser aplicados carregamentos e deformações (incluindo grandes deformações) que simulem as condições de ensaios de laboratório e de campo. O MED tem sido então amplamente empregado para se investigar o comportamento macroscópico de materiais granulares, como rejeitos de mineração, a partir do acompanhamento das interações inter-partículas.

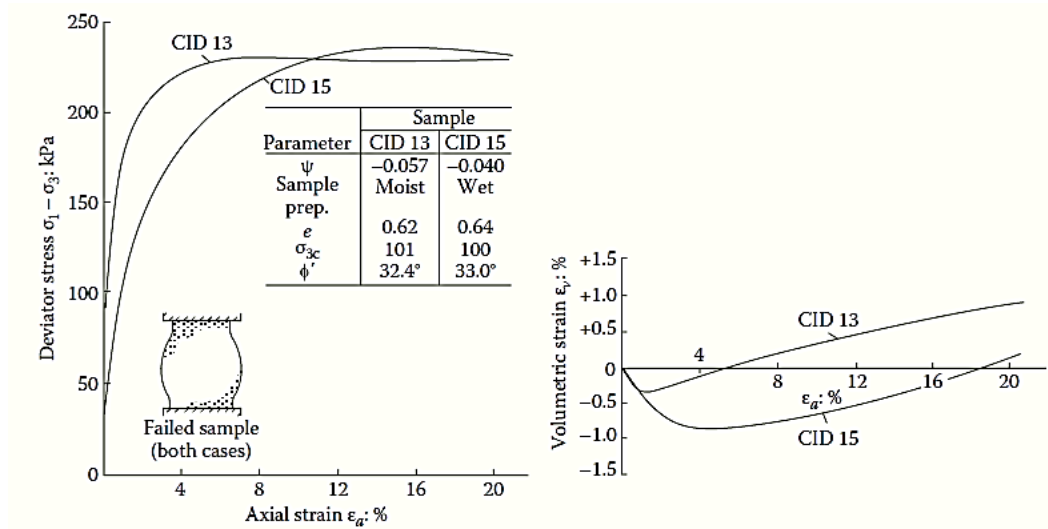


Figura 1-1: Efeito da microestrutura no comportamento da areia de Kogyuk (Been & Jefferies, 1985 apud Jefferies & Been, 2016).

Além disso, na modelagem por MED são eliminadas algumas limitações tipicamente observadas em laboratório relacionadas à condição de perturbação e não uniformidade das amostras, ao surgimento de regiões de concentração de deformações (banda de cisalhamento / “shear bands”) e a capacidade dos equipamentos de se atingir grandes deformações.

Dentro deste contexto, esta pesquisa procura avaliar a influência da microestrutura na resposta mecânica global de rejeitos de minério de ferro, a partir de modelagens numéricas bidimensionais pelo Método dos Elementos Discretos.

## 1.2 OBJETIVOS

O objetivo principal desta dissertação é avaliar o comportamento mecânico de rejeitos de mineração a partir da simulação numérica dos ensaios triaxiais drenados executados em

laboratório por Sotomayor (2018) em amostras de rejeito arenoso de minério de ferro, utilizando o Método dos Elementos Discretos.

Para isso, foram analisados os resultados da rede de forças de contato, dos vetores de velocidade, da rotação das partículas, das colunas de carregamento e do número de coordenação desenvolvidos pelas interações entre partículas durante as simulações numéricas. O programa bidimensional *Particle Flow Code* (PFC2D), da empresa Itasca Consulting Group (2021a), foi empregado para as referidas simulações

Além disso, a pesquisa procura avaliar a utilização do modelo Modelo de Contato Linear com Resistência ao Rolamento (“Rolling Resistance Linear Contact Model” – RRLCM), para representar o efeito das irregularidades tipicamente presentes nos grãos de rejeitos, na amostra numérica constituída por partículas circulares com dimensões proporcionais ao rejeito de minério de ferro. Neste sentido, foi realizada a calibração do modelo MED e posteriormente a comparação entre as curvas tensão-deformação obtidas pelos ensaios de laboratório vs. modelo MED para as tensões de confinamento iguais a 100, 200 e 400 kPa.

### 1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A dissertação está estruturada em cinco capítulos. No Capítulo 1, referente à introdução do trabalho, são apresentados a motivação para o desenvolvimento da pesquisa e seus objetivos.

O Capítulo 2 trata-se da revisão bibliográfica acerca da utilização do Método dos Elementos Discretos, em especial, para materiais granulares. São apresentados também os conceitos básicos das formulações da Lei Força-Deslocamento e da Lei de Movimentos, as quais subsidiam a sequência de cálculos no tempo dos ciclos computacionais que envolvem as simulações MED. A revisão bibliográfica abrange ainda sobre a ferramenta computacional PFC2D e o modelo de contato RRLCM adotados para realizar a modelagem numérica.

No Capítulo 3, descreve-se a metodologia empregada neste trabalho, que engloba os processos de geração e verificação dos índices de vazios máximo e mínimo da amostra numérica. Além disso, são apresentados os resultados dos ensaios laboratório, envolvendo ensaios de caracterização e ensaios triaxiais drenados, no rejeito arenoso de minério de ferro executados por Sotomayor (2018), utilizados como referência para elaboração do modelo. Neste capítulo, mostra-se ainda o procedimento adotado para calibração das propriedades

microscópicas do modelo e como foram simulados os ensaios triaxiais drenados do rejeito pelo modelo MED bidimensional (ensaios biaxiais drenados).

No Capítulo 4, encontram-se os resultados e discussões sobre o comportamento macroscópico, comportamento microscópico e as análises de sensibilidade variando o coeficiente de resistência ao rolamento, coeficiente de atrito e a taxa de carregamento para o modelo numérico desenvolvido.

No Capítulo 5, são apresentadas as conclusões decorrentes dos resultados e discussões mencionadas no capítulo 4. Além disso, são feitas sugestões para pesquisas futuras de modelagem numérica de rejeitos de mineração utilizando o MED.

## 2 MÉTODOS DOS ELEMENTOS DISCRETOS

O Método dos Elementos Discretos (MED) foi inicialmente desenvolvido por Peter Cundall para análises de problemas mecânicos de rochas (sólidos 2D) e posteriormente estendido para partículas granulares tipo circulares e esféricas (Cundall & Strack, 1979).

O MED é uma técnica de modelamento numérico ou simulação computacional capaz de simular o comportamento de solos, rochas e outros materiais granulares, sem, contudo, assumir na abordagem que o meio é contínuo. Ao contrário do modelo de meio contínuo, não são empregadas relações constitutivas, em geral sofisticadas (baseadas em equações que relacionam tensão-deformação), para reproduzir o comportamento complexo que se origina da natureza particulada dos materiais.

Para o solucionamento matemático, o MED emprega formulações explícitas, envolvendo a discretização dos cálculos (de força, aceleração, mudança de posicionamento das partículas, entre outros) de forma linear, em passos de tempo muito pequenos, integrando-se as leis de Newton.

Mesmo para os modelos mais simples MED, que adotam formas simplificadas para as partículas e modelos de contatos mais básicos, os trabalhos nesta área indicam ser possível reproduzir o comportamento de materiais granulares, simulando os deslocamentos e rotações de corpos rígidos que interagem com as fronteiras e entre si nos pontos de contato. Nestes pontos, ocorre a transmissão das forças de tração e compressão na direção normal ao plano de contato, bem como força tangencial ou cisalhante na direção ortogonal ao plano de contato.

Baseado no conceito de Contatos Moles, a deformação é interpretada pelo movimento relativo de interpenetração das partículas, cuja magnitude estaria relacionada à força atuando sobre estas no contato e, portanto, não se deformam geometricamente. Conforme destacado por Reeves (2013), esta mesma tendência é verificada para materiais arenosos, cuja deformação ocorre em sua maior parcela devido ao movimento relativo dos grãos.

O Método dos Elementos Discretos tem se mostrado, assim, uma ferramenta importante para estudar o comportamento macroscópico de materiais granulares com base na análise das interações micromecânicas das partículas durante seu cisalhamento ao longo do tempo.

## 2.1 SEQUÊNCIA DO CICLO COMPUTACIONAL

O método de Elementos Discretos tem como base em um conjunto de equações de equilíbrio de forças e momentos resultantes entre os contatos das partículas, cujos cálculos alternam entre a segunda Lei de Newton e a Lei Força-Deslocamento (Cundall & Strack, 1979). Na Figura 2-1 é apresentado de forma esquemática a sequência de cálculos envolvendo as simulações via MED, adaptado de O’Sullivan (2011).

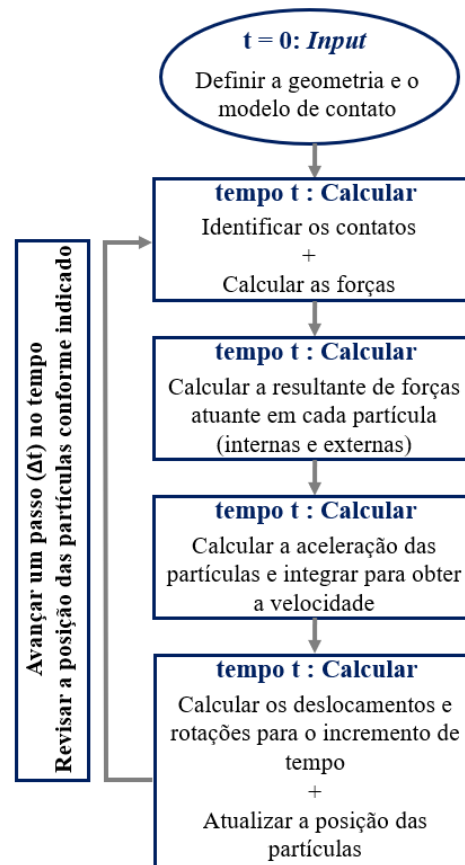


Figura 2-1: Sequência de esquemática de cálculos durante uma simulação em MED (modificado de O’Sullivan, 2011).

Na primeira etapa das simulações MED, é definida a geometria do modelo, incluindo a forma das partículas e as condições de contorno (como tipo de fronteiras) a serem adotados. As propriedades microscópicas, como módulos de rigidez e coeficientes de atrito, são então especificadas para o modelo de contato empregado para as simulações. O processo de geração das partículas é iniciado utilizando a técnica de empacotamento selecionada. Por fim, são definidas as condições de carregamento ou deformação a serem impostas ao sistema de partículas.

O processo de resolução do modelo MED inicia pela identificação individual de contatos entre as partículas em cada incremento de tempo (ou passo de tempo) e o cálculo das forças de interação ou contato, cuja magnitude está diretamente relacionada com a distância entre partículas no ponto de contato (2ª etapa). A saber, a detecção dos contatos representa a etapa de maior esforço computacional, a qual depende do número de partículas e da complexidade geométrica dos elementos.

A partir das forças inter-partículas, podem ser determinados a força resultante e o momento de inércia que atuam em cada partícula com base na lei Força-Deslocamento, para o modelo de contato selecionado na etapa anterior. Conhecendo então o momento de inércia, os movimentos translacionais e rotacionais de aceleração das partículas podem ser calculados, e a velocidade e posição das partículas atualizadas, aplicando a Lei de Movimento baseada na Segunda Lei de Newton. As velocidades são obtidas, por sua vez, pela integração das acelerações.

Na Figura 2-2 está representado o caso básico apresentado por Cundall & Strack (1979) para o entendimento de como as forças e deslocamentos são determinados durante um ciclo de cálculo.

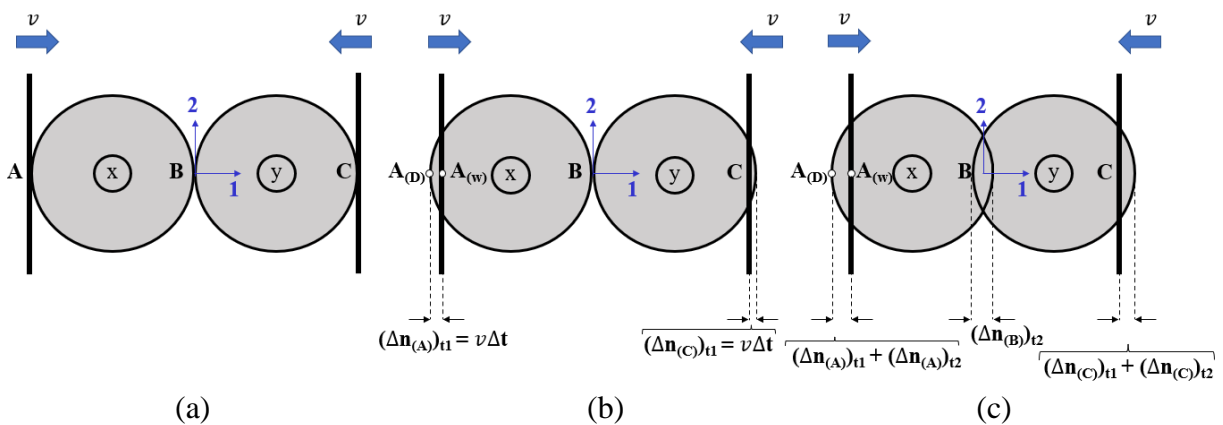


Figura 2-2: Representação esquemática de dois discos comprimidos por paredes rígidas (modificado de Cundall & Strack, 1979).

Na Figura 2-2a, duas partículas em formato de discos, denominados disco x e disco y, estão sendo comprimidos por um par de paredes rígidas, que se movem em direção as partículas com uma velocidade constante  $v$ . No tempo inicial  $t = t_0$ , as paredes e discos se encostam, porém, sem existir força nos contatos. No instante  $\Delta t$  seguinte, as paredes se movem para dentro dos discos, em uma distância de  $v\Delta t$ . Considerando a hipótese que as perturbações não podem se propagar para a vizinhança durante um passo de tempo, assume-se que ambos os discos (x e

y) mantêm sua posição inicial durante o intervalo de tempo entre  $t = t_0$  e  $t = t_0 + \Delta t$ . A sobreposição parede-partícula ocorre, portanto, no momento  $t_1 = t_0 + \Delta t$  nos pontos de contato A e C, cuja magnitude é dada por  $\Delta n = v\Delta t$ , conforme representado na Figura 2-2b.

Os pontos  $A_{(D)}$  e  $A_{(w)}$  (Figura 2-2b) estão localizados na intercessão da projeção horizontal do centro das partículas com as linhas verticais geradas no limite do disco e na parede, respectivamente. Na metade da distância entre  $A_{(D)}$  e  $A_{(w)}$  encontra-se o ponto A. O deslocamento relativo  $(\Delta n_{(A)})_{t_1}$  no contato é definido como sendo igual ao deslocamento de  $A_{(w)}$  em relação a  $A_{(D)}$  que ocorre em um incremento de tempo, onde o subscrito  $t_1$  se refere ao tempo  $t_1$ .

Os deslocamentos relativos que ocorrem nos pontos de contato A e C no instante  $t_1 = t_0 + \Delta t$  são utilizados na Lei Força-deslocamento para calcular as forças de contato. A força de deslocamento incremental,  $\Delta F_n$ , é expressa por:

$$\Delta F_n = k_n(\Delta n)_{t_1} = k_n v \Delta t \quad (2.1)$$

Onde  $k_n$  é a rigidez normal.

Definindo a direção 1 como positiva para os discos x e y (Figura 2-2b), o somatório das forças  $F_{(x)1}$  e  $F_{(y)1}$  (consideradas como sendo positivas na direção 1) no instante  $t_1$  é obtida por:

$$F_{(x)1} = k_n(\Delta n)_{t_1}, \quad F_{(y)1} = -k_n(\Delta n)_{t_1} \quad (2.2)$$

Estas forças são então empregadas para obter as novas acelerações dos discos, a partir da Segunda Lei de Newton:

$$\ddot{x}_1 = F_{(x)1}/m_{(x)}, \quad \ddot{y}_1 = F_{(y)1}/m_{(y)} \quad (2.3)$$

Onde,  $\ddot{x}_1$  e  $\ddot{y}_1$  representam as respectivas acelerações no disco x e y na direção 1 e os subscritos (x) e (y) nas massas  $m_{(x)}$  e  $m_{(y)}$  se referem aos discos x e y.

As acelerações  $\ddot{x}_1$  e  $\ddot{y}_1$  são assumidas constantes durante o intervalo de tempo entre  $t_1 = t_0 + \Delta t$  e  $t_2 = t_0 + 2\Delta t$ , as velocidades podem ser obtidas a partir da integração das primeiras:

$$[\dot{x}_1]_{t_2} = [F_{(x)1}/m_{(x)}]\Delta t, \quad [\dot{y}_1]_{t_2} = [F_{(y)1}/m_{(y)}]\Delta t \quad (2.4)$$



Logo, o incremento de deslocamento relativo nos contatos  $A$ ,  $B$  e  $C$ , no instante  $t_2$  são dados por:

$$(\Delta n_{(A)})_{t_2} = (v - [F_{(x)1}/m_{(x)}]\Delta t)\Delta t \quad (2.5)$$

$$(\Delta n_{(B)})_{t_2} = ([F_{(x)1}/m_{(x)}]\Delta t - [F_{(y)1}/m_{(y)}]\Delta t)\Delta t \quad (2.6)$$

$$(\Delta n_{(C)})_{t_2} = ([F_{(y)1}/m_{(y)}]\Delta t - [-v])\Delta t \quad (2.7)$$

Onde,  $\Delta n_{(A)}$ ,  $\Delta n_{(B)}$  e  $\Delta n_{(C)}$ , os deslocamentos são positivos para compressão.

Este ciclo é então repetido várias vezes, de modo que as forças correspondentes aos deslocamentos são obtidas usando a Lei força-deslocamento, a Equação 2.2, e o somatório de forças para os dois discos são substituídos na segunda Lei de Newton, Equação 2.3, para obter os deslocamentos.

Para o caso geral em que se tem um conjunto de discos, a lei força-deslocamento é aplicada em cada ponto de contato de cada disco e o somatório vetorial destas forças de contato são determinadas para obter a resultante de forças atuando no disco. Ao se realizar esta avaliação para cada disco, novas acelerações são calculadas pela Segunda Lei de Newton. As equações utilizadas para o cálculo dos ciclos neste caso geral são apresentadas nos itens a seguir.

## 2.2 LEI FORÇA – DESLOCAMENTO

A lei força-deslocamento está relacionada ao movimento relativo no contato entre duas partículas ou entre uma partícula e uma parede, sendo empregada para obter as forças de contato a partir dos deslocamentos. No programa PFC, a lei força-deslocamento entre partículas somente é executada durante um ponto do ciclo caso se trate de um contato ativo. Caso contrário, a força interna e o momento são definidos como zero e os cálculos da lei força-deslocamento são ignorados.

Na Figura 2-3 são representados de forma esquemática a geometria de contato entre as partículas x e y, de raios  $R_{(x)}$  e  $R_{(y)}$ , e massas  $m_{(x)}$  e  $m_{(y)}$ , respectivamente. As coordenadas dos centros destas são representadas como  $x_i = (x_1, x_2)$  e  $y_i = (y_1, y_2)$ , onde os índices 1 e 2 são referentes ao sistema de coordenadas Cartesianas. Os pontos  $P_{(x)}$  e  $P_{(y)}$  se localizam na intercessão da linha que conecta o centro dos discos com os contornos das partículas x e y, respectivamente.

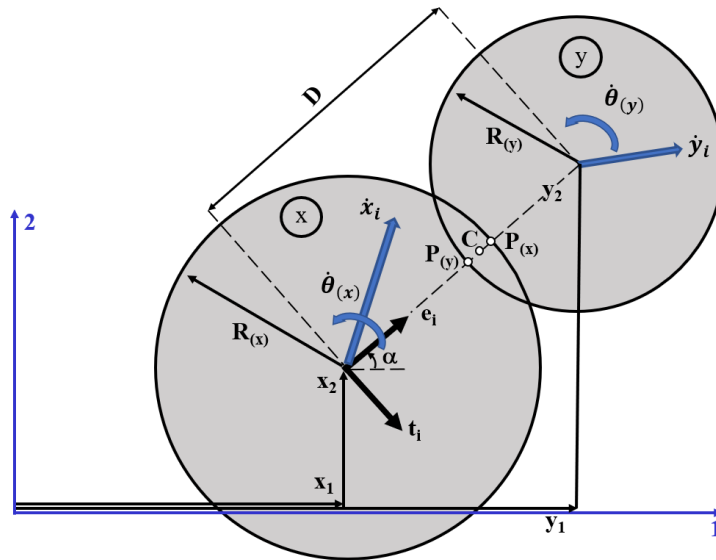


Figura 2-3: Diagrama esquemático do contato partícula-partícula (modificado de Cundall & Strack, 1979).

As componentes dos vetores de velocidade para os discos x e y são  $\dot{x}_i = (\dot{x}_1, \dot{x}_2)$  e  $\dot{y}_i = (\dot{y}_1, \dot{y}_2)$ , enquanto as velocidades angulares são  $\dot{\theta}_{(x)}$  e  $\dot{\theta}_{(y)}$ , considerando como positivo a direção anti-horária.

Considera-se que os dois discos estão em contato somente quando a distância  $D$  entre os centros é menor que a soma dos raios, isto é:

$$D < R_{(x)} + R_{(y)} \quad (2.8)$$

Nesta condição, o deslocamento relativo no ponto de contato  $C$  é determinado integrando a velocidade relativa, a qual é definida como a velocidade no ponto  $P_{(x)}$  em relação à  $P_{(y)}$ . O vetor unitário  $e_i = (\cos \alpha, \sin \alpha)$  surge então no centro do disco x em direção ao centro do disco y:

$$e_i = \frac{y_i - x_i}{D} = (\cos \alpha, \sin \alpha) \quad (2.9)$$

O vetor unitário  $t_i$  pode ser obtido a partir da rotação do vetor  $e_i$  no sentido horário em  $90^\circ$ :

$$t_i = (e_2 - e_1) \quad (2.10)$$

A velocidade relativa do ponto  $P_{(x)}$  em relação a  $P_{(y)}$  é então expressa por  $\dot{X}_i$ , em que:

$$\dot{X}_i = (\dot{x}_i - \dot{y}_i) - (\dot{\theta}_{(x)}R_{(x)} + \dot{\theta}_{(y)}R_{(y)})t_i \quad (2.11)$$

A componente normal ( $\dot{n}$ ) e tangencial ( $\dot{s}$ ) das velocidades relativas são projeções de  $\dot{X}_i$  em  $e_i$  e  $t_i$ , respectivamente:

$$\dot{n} = \dot{X}_i e_i = (\dot{x}_i - \dot{y}_i)e_i - (\dot{\theta}_{(x)}R_{(x)} + \dot{\theta}_{(y)}R_{(y)})t_i e_i = (\dot{x}_i - \dot{y}_i)e_i \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \dot{s} &= \dot{X}_i t_i = (\dot{x}_i - \dot{y}_i)t_i - (\dot{\theta}_{(x)}R_{(x)} + \dot{\theta}_{(y)}R_{(y)})t_i t_i \\ &= (\dot{x}_i - \dot{y}_i)t_i - (\dot{\theta}_{(x)}R_{(x)} + \dot{\theta}_{(y)}R_{(y)}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Onde a notação de Einstein é adotada para o index  $i$ , isto é, o somatório é aplicado aos índices que ocorrem duas vezes em cada expressão (os índices em parênteses não são considerados). A Integração do componente de velocidade relativa em relação ao tempo fornece as componentes  $\Delta n$  e  $\Delta s$  do incremento de deslocamento relativo.

$$\Delta n = (\dot{n})\Delta t = \{(\dot{x}_i - \dot{y}_i)e_i\}\Delta t \quad (2.14)$$

$$\Delta s = (\dot{s})\Delta t = \{(\dot{x}_i - \dot{y}_i)t_i - (\dot{\theta}_{(x)}R_{(x)} + \dot{\theta}_{(y)}R_{(y)})\}\Delta t \quad (2.15)$$

As forças normal e cisalhante são obtidas pela Lei força-deslocamento em função dos incrementos de deslocamento:

$$\Delta F_n = k_n \Delta n = k_n \{(\dot{x}_i - \dot{y}_i)e_i\}\Delta t \quad (2.16)$$

$$\Delta F_s = k_s \Delta s = k_s \{ (\dot{x}_i - \dot{y}_i) t_i - (\dot{\theta}_{(x)} R_{(x)} + \dot{\theta}_{(y)} R_{(y)}) \} \Delta t \quad (2.17)$$

Onde  $k_n$  e  $k_s$  são a rigidez normal e cisalhante, respectivamente, representadas pelo MED pela introdução de duas molas virtuais no ponto de contato: uma mola normal ( $k_n$ ) e uma mola de cisalhamento ( $k_s$ ), que produzem a rigidez e a troca de interação entre as partículas, conforme representação esquemática da Figura 2-4.

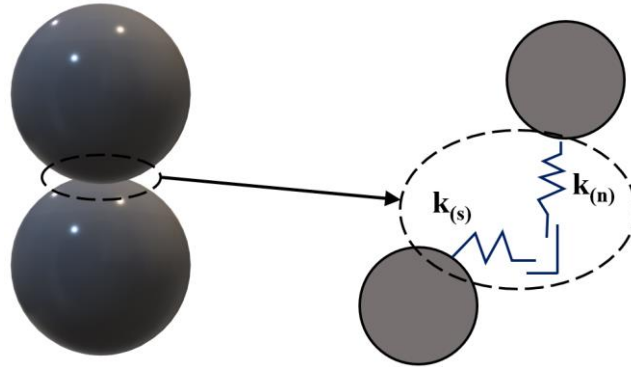


Figura 2-4: Representação esquemática das molas virtuais de contato.

Finalmente, em cada passo de tempo os incrementos de força  $\Delta F_n$  e  $\Delta F_s$  são incluídos ao somatório de todas as forças de incrementos,  $F_n$  e  $F_s$ , determinados nos passos de tempo anteriores:

$$(F_n)_N = (F_n)_{N-1} + \Delta F_n \quad , \quad (F_s)_N = (F_s)_{N-1} + \Delta F_s \quad (2.18)$$

Onde os índices  $N$  e  $N - 1$  correspondem aos instantes  $t_N$  e  $t_{N-1}$ , tal que  $t_N - t_{N-1} = \Delta t$ . A convenção de sinais para as forças normal e cisalhante atuantes no disco  $x$  é representada na Figura 2-5, em que  $F_n$  e  $F_s$  são consideradas positivas quando apresentam direção oposta a  $e_i$  e  $t_i$ .

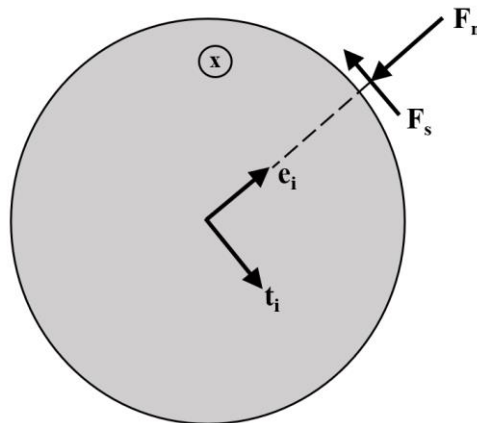


Figura 2-5: Convenção de sinais adotados para  $F_n$  e  $F_s$  (modificado de Cundall & Strack, 1979).

A magnitude da força cisalhante  $F_s$  obtida a partir da Equação 2.18 é comparada a máxima força cisalhante  $(F_s)_{m\acute{a}x}$ , determinada com base na lei de atrito tipo Coulomb:

$$(F_s)_{m\acute{a}x} = F_n \tan \varphi_u + c$$

Onde  $\varphi_u$  é o menor ângulo de atrito e  $c$  é a menor coesão inter-partículas (discos x-y). Caso o valor absoluto  $F_s$  obtido pela Equação 2.18 for maior que  $(F_s)_{m\acute{a}x}$ ,  $(F_s)_N$  é considerado igual a  $(F_s)_{m\acute{a}x}$ , e o sinal resultante da Equação 2.18 é mantido.

Uma vez que as forças normal e cisalhante foram determinadas para cada ponto de contato de um disco, por exemplo disco x, estas são solucionadas nos componentes das direções 1 e 2. O somatório dos componentes destas forças de contato fornecem a resultante de forças  $\sum F_{(x)1}$  e  $\sum F_{(x)2}$ . O momento resultante atuante no disco x,  $\sum M_{(x)}$ , é considerado com sinal positivo quando atua na direção anti-horária, sendo calculado como  $\sum M_{(x)} = \sum F_s R_{(x)}$ , onde o somatório deve ser feito para todos os contatos do disco x.

As resultantes de força e momento atuantes no disco x são utilizados para determinar as novas acelerações  $\ddot{x}_i$  e  $\ddot{\theta}_{(x)}$  com base na Segunda Lei de Newton.

### 2.3 LEIS DO MOVIMENTO

Conhecendo as forças de contato, é possível determinar o movimento das partículas pela Segunda Lei de Newton. As velocidades  $\dot{x}_i$  e  $\dot{\theta}_{(x)}$  utilizadas para a Lei Força-deslocamento nas Equações 2.16 e 2.17 podem, então, ser determinadas.

A força resultante atual e o momento no instante  $t_N$  são assumidos atuando no disco x durante o intervalo  $\Delta t$ , entre  $t_{N-1/2}$  e  $t_{N+1/2}$ . Aplicando a Segunda Lei de Newton para o disco x:

$$m_{(x)}\ddot{x}_i = \sum F_{(x)i} \quad (2.19)$$

$$I_{(x)}\ddot{\theta}_{(x)} = \sum M_{(x)} \quad (2.20)$$

Onde  $I_{(x)}$  representa o momento de inércia no disco x. Tomando  $\ddot{x}_i$  e  $\ddot{\theta}_{(x)}$  constantes durante todo o passo de tempo  $\Delta t$ , as Equações 2.19 e 2.20 resultam nas seguintes expressões para as velocidades:

$$(\dot{x}_i)_{N+1/2} = (\dot{x}_i)_{N-1/2} + \left[ \sum F_{(x)i}/m_{(x)} \right]_N \Delta t \quad (2.21)$$

$$(\dot{\theta}_{(x)})_{N+1/2} = (\dot{\theta}_i)_{N-1/2} + \left[ \sum M_{(x)}/I_{(x)} \right]_N \Delta t \quad (2.22)$$

Estas equações são aplicadas para cada disco por vez. Os novos valores de velocidade podem ser então utilizados na Lei Força-Deslocamento e o ciclo se repete a cada próximo incremento de tempo.

Os valores de velocidade são empregados também para atualizar a posição e rotação de cada disco a partir da integração numérica:

$$(x_i)_{N+1} = (x_i)_N + (\dot{x}_i)_{N+1/2} \Delta t \quad (2.23)$$

$$(\theta_{(x)})_{N+1} = (\theta_{(x)})_N + (\dot{\theta}_{(x)})_{N+1/2} \Delta t \quad (2.24)$$

As diferenças finitas entre as Equações 2.21 a 2.24 representam o sistema central de tempo.

As forças de corpo livre, como a força gravitacional, podem ser incorporadas, se necessário.

Neste caso, o termo  $m_{(x)}g_i$  é adicionado ao somatório de forças  $\sum F_{(x)i}$  na Equação 2.21, onde  $g_i = (g_1, g_2)$  representa as duas componentes do vetor aceleração.

## 2.4 FERRAMENTA COMPUTACIONAL – PFC2D

Para modelagem numérica dos ensaios de laboratório no rejeito de minério de ferro foi utilizado o programa bidimensional “Particle Flow Code” (PFC2D), versão 7.0, desenvolvido pela empresa Itasca Consulting Group (2021a) e com codificação nas linguagens *fish* e *python* fundamentada pelo MED. O PFC2D tem se destacado em relação aos outros programas disponíveis no mercado em função de da sua interface mais amigável, que facilita a manipulação e geração de novos códigos pelos usuários. Além de ser amplamente adotado para as pesquisas devolvidas na área do MED (Kodicherla, 2021; Fang et al., 2021; Barnett et al., 2020; Ding et al., 2019; De Bono & McDowell, 2018; Chang & Chen, 2018; Wang et al., 2014; Reeves, 2013; Ai et al., 2011)

O PFC2D permite simular o movimento independente (translação e rotação) e interação de inúmeras partículas rígidas, com base em na força e momento nos contatos, a partir de formulação explícita considerando as leis de movimento de Newton, para representar tanto materiais granulares quanto sólidos, com codificação fundamentada no MED.

No referido programa, cada partícula é denominada como um corpo rígido de tamanho e massa finitos, o qual pode ser classificado em três tipos: discos(2D)/esferas(3D), aglomerados (“clumps”) e paredes, conforme representado na Figura 2-6 (Itasca Consulting Group, 2021b).

Um disco/esfera consiste em uma única peça, que pode ser um disco de espessura unitária rígido (2D) ou uma esfera (3D).

Um aglomerado, por sua vez, é uma coleção de partículas tipo “pebbles”, com formato de discos de espessura unitária rígidos ou esferas que podem se sobrepor, mas sem formar contatos entre si. Os aglomerados representam corpos rígidos com formas arbitrariamente definidas cujo conjunto forma o “clump”. Nos pontos de contato dos “clump” se formam contatos.

Por fim, uma parede é um conjunto de facetas que formam segmentos lineares (2D) ou triangulares (3D). A parede representa uma superfície orientável (onde pode ser aplicada uma velocidade) e contínua da amostra numérica. Ao contrário dos discos e “clumps”, as paredes não seguem a lei de movimento.

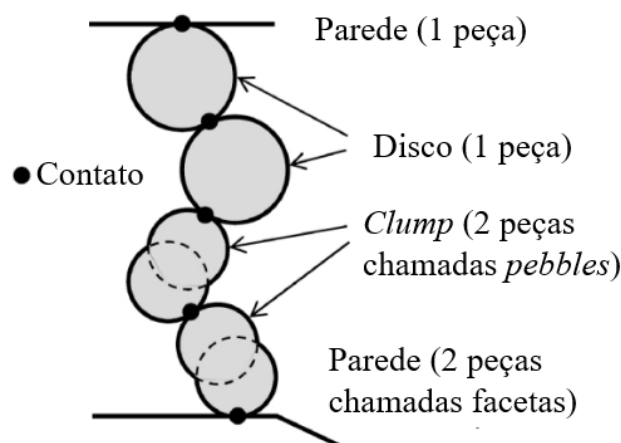


Figura 2-6: Tipos de corpo rígido disponíveis no modelo PFC (modificado de Itasca Consulting Group, 2021b).

A versão mais atualizada do PFC (7.0) disponibiliza as seguintes categorias de modelo de contato: linear (incluindo *adhesive rolling resistance linear* e *rolling resistance linear*), hertz, bilinear, burger, *termal*, *contact-bonded*, *parallel-bonded*, *soft-bonded*, *smooth-jointed*,

e *flat-jointed*. Estes modelos permitem simular materiais granulares e maciços rochosos, sendo que:

- As partículas rígidas podem ser unidas por “cola”/cimentação deformável e quebrável;
- Os grãos podem ser representados por discos/esferas ou “clumps”;
- A “cola”/cimentação podem ser : contatos do tipo: *contact-bonded*, *parallel-bonded*, *soft-bonded* e *flat-jointed*, que quando se quebram, comportam-se como contatos lineares. A Figura 2-7 contém a representação de um sistema de partículas com cimentação.

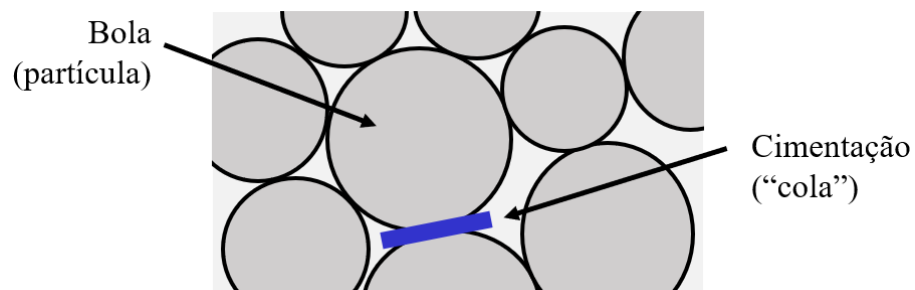


Figura 2-7: Representação de um sistema de partículas com cimentação (modificado de Itasca Consulting Group, 2021b).

## 2.5 PASSO DE TEMPO

O MED baseia-se no conceito de contatos moles, segundo o qual as partículas são consideradas infinitamente rígidas, ou seja, não se deformam. Logo, ocorre a interpenetração entre partículas, de modo que se permite a invasão do espaço físico de uma partícula em relação a outra. Neste momento, é calculada a força que se propaga entre duas partículas, por meio de um coeficiente de mola.

A atualização adequada do modelo pelo método explícito de integração de numérica das leis de Newton no tempo requer a seleção de um passo de tempo muito pequeno, a fim de que as propagações não possam atingir as partículas vizinhas a cada passo e gerar instabilidades no modelo. Conforme demonstrado por O’Sullivan & Bray (2003), que as simulações que apresentaram instabilidades estavam associadas a erros significativos do balanço de energia do sistema. Desse modo, a partir do monitoramento da conservação de energia de energia do



sistema de partículas, é possível avaliar se o  $\Delta t$  adotado é suficientemente pequeno e, portanto, adequado.

O programa PFC oferece um procedimento simplificado e automatizado para estimativa do passo de tempo, a partir da determinação de um passo de tempo crítico,  $t_{crit}$ , calculado no início de cada ciclo da simulação. Desse modo, o passo de tempo atual é tomado como uma fração de  $t_{crit}$ , que por *default* é igual a  $0,8t_{crit}$ .

De acordo com a documentação do PFC 7.0 (Itasca Consulting Group, 2021a), o passo de tempo crítico é estimado a partir da massa pontual e rigidez de mola do sistema unidimensional massa-mola representado na Figura 2-8.

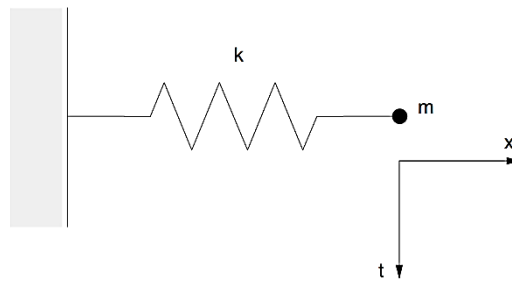


Figura 2-8: Sistema único massa-mola (Itasca Consulting Group, 2021a).

Considera para isso que o movimento do ponto de massa é governado pela equação diferencial  $-kx = m\ddot{x}$ . Com base na equação de diferenças finitas de segunda ordem proposta por Bathe & Wilson (1976), o tempo crítico é expresso por:

$$t_{crit} = \frac{T}{\pi}; \quad T = 2\pi\sqrt{m/k} \quad (2.25)$$

Onde  $T$  é o período do sistema.

Considerando a série infinita de massas pontuais e molas representada na Figura 2-9(a), o menor período desse sistema ocorre quando as massas estiverem se deslocando de modo sincronizado e em movimento oposto, sem qualquer movimento no centro de cada mola. O movimento de uma única massa pontual pode ser descrito pelos dois sistemas equivalentes mostrados na Figura 2-9(b) e Figura 2-9(c). O tempo crítico para este sistema que caracteriza o movimento translacional é dado por:

$$t_{crit} = 2\sqrt{m/(4k)} = \sqrt{m/k} \quad (2.26)$$

Onde  $k$  é a rigidez de cada mola na Figura 2-9.

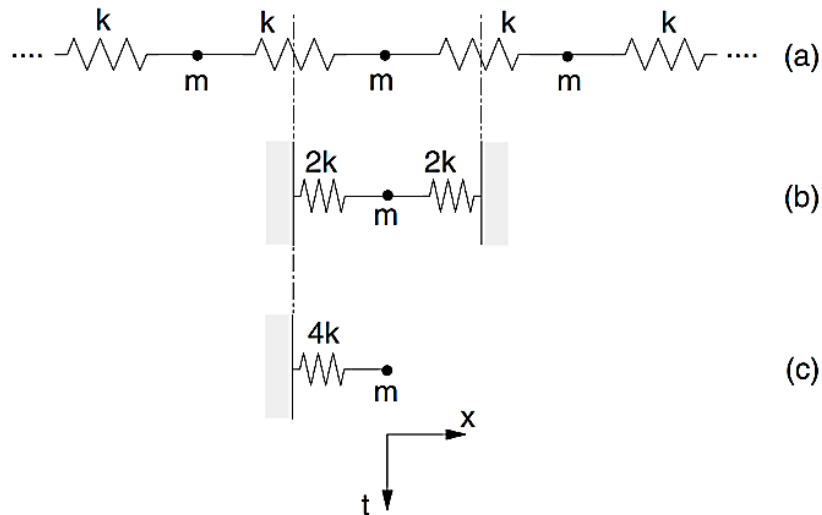


Figura 2-9: Sistema de múltiplas massa-mola (Itasca Consulting Group, 2021a).

O movimento rotacional é caracterizado pelos mesmos dois sistemas (Figura 2-9(b) e Figura 2-9(c)), porém a massa  $m$  é substituída pelo momento de inércia  $I$  de uma partícula de tamanho finito, e a rigidez é substituída pela rigidez rotacional  $k^{rot}$ . Assim, o intervalo de tempo crítico para o sistema generalizado de múltiplas massa-mola de cada tipo de movimento pode ser expresso como:

$$t_{crit} = \begin{cases} \sqrt{m/k^{tran}} & (\text{movimento translacional}) \\ \sqrt{I/k^{rot}} & (\text{movimento rotacional}) \end{cases} \quad (2.27)$$

Onde  $k^{tran}$  é a rigidez translacional.

## 2.6 MODELO CONTATO LINEAR COM RESISTÊNCIA AO ROLAMENTO

A atualização da força interna e do momento depende do modelo de contato atribuído aos elementos do modelo (partículas e parede). Para as simulações desta dissertação, foi utilizado o modelo linear de rolamento de contato (RRLCM), o qual se baseia no Modelo de Contato Linear desenvolvido por Cundall & Strack (1979), porém adicionalmente considera molas de rolamento (“rolling springs”) e amortecimento (“dashpots”) nos pontos de contato.

A saber, no Modelo de Contato Linear a rigidez normal e a rigidez cisalhante são calculadas admitindo que ambas atuam como sistema de molas em série. Além disso, no contato não ocorre resistência à rotação e, portanto, o momento de contato é igual nulo.

No modelo de contato RRLCM, o efeito da resistência ao rolamento adicionado nos contatos entre partículas pelo coeficiente de atrito ao rolamento  $\mu_r$  e a dissipação de energia associada a este permitem representar mecanismos de diferentes origens micromecânicas em sistemas granulares reais, como o efeito das irregularidades da superfície dos grãos.

Oda & Kazama (1998) e Oda et al., (1982) verificaram experimentalmente por meio das técnicas de raio-X e fotoelástica que o movimento de rolamento das partículas é um mecanismo de micro-deformação dominante que controla o comportamento de dilatação e da resistência ao cisalhamento de pico em materiais granulares. Os resultados dos ensaios desenvolvidos por estes autores indicam que a resistência ao rolamento permite representar o formato e a textura dos grãos de materiais granulares.

No programa PFC, o modelo RRLCM foi desenvolvido com base nos trabalhos de Wensrich & Katterfeld (2012) e Ai et al., (2011). A força de contato  $F_c$  e o momento  $M_c$  no contato são atualizados segundo a lei força-deslocamento, sendo:

$$F_c = F^1 + F^d, \quad M_c = M^r \quad (2.28)$$

Onde  $F^1$  é a força linear,  $F^d$  é a força de amortecimento e  $M^r$  é o momento de resistência ao rolamento.

A  $F^d$  força relaciona-se com o momento de amortecimento  $M_d$ , cujo valor depende se no ponto de contato ocorrem momentos tipo:

- Normal e cisalhante:  $M_d = 0$ ;
- Cisalhante:  $M_d = 1$ ;
- Normal e cisalhante por deslizamento:  $M_d = 2$ ;
- Cisalhante por deslizamento:  $M_d = 3$ ;

O incremento do momento  $M^r$  é calculado conforme equação a seguir:

$$M^r := M^r - k_r \Delta \theta_b \quad (2.29)$$

Onde  $\theta_b$  é o incremento relativo de flexo-rotação e  $k_r$  é a rigidez à resistência ao rolamento, sendo:

$$k_r = k_s + \bar{R}^2 \quad (2.30)$$

Em que  $k_s$  é a rigidez cisalhante e  $\bar{R}$  é o raio efetivo de contato, definido como:

$$\frac{1}{\bar{R}} = \frac{1}{R^{(x)}} + \frac{1}{R^{(y)}} \quad (2.31)$$

No que tange aos cálculos relacionados à deformabilidade no contato, o RRLCM sendo um modelo de contato linear apresenta propriedades relacionadas ao módulo de Young ( $E$ ) e ao coeficiente de Poisson ( $\nu$ ).

Assim,  $E$  relaciona-se com o módulo elástico efetivo  $E^*$ , e  $\nu$  relaciona-se com a razão de rigidez normal-cisalhante  $k^*$ , conforme equações a seguir.

$$k_n = AE^*/L, \quad k_s := k_n/k^* \quad (2.32)$$

Em que  $A$  é a área de contato entre as partículas  $x$  e  $y$  (constante), e  $L$  é a distância linear entre os centros, conforme representado na Figura 2-10 e equações a seguir.

$$A = 2rt, \quad (t = 1) \text{ Modelo 2D} \quad (2.33)$$

$$r = \begin{cases} \min(R^{(x)}, R^{(y)}), & \text{partícula - partícula} \\ R^{(x)}, & \text{partícula - parede} \end{cases} \quad (2.34)$$

$$L = \begin{cases} R^{(x)} + R^{(y)}, & \text{partícula - partícula} \\ R^{(x)}, & \text{partícula - parede} \end{cases} \quad (2.35)$$

Onde  $2r$  é o comprimento da área de contato.

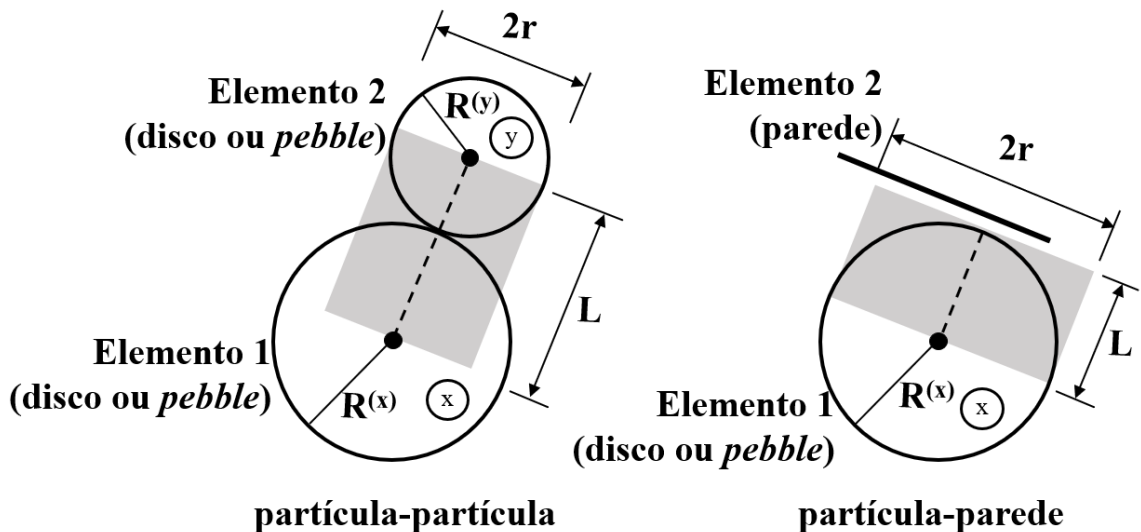


Figura 2-10: Representação esquemática da área associada ao ponto de contato (modificado de Itasca Consulting Group, 2021a).

As principais propriedades do Modelo de Contato Linear com Resistência ao Rolamento que foram utilizadas como *input* para as simulações aqui apresentadas são listadas na Tabela 2.1.

Tabela 2.1- Principais propriedades do Modelo de Contato Linear com Resistência ao Rolamento

Símbolo	Descrição
<b>Grupo 1 – Modelo de Contato Linear</b>	
$k_n$	Rigidez normal
$k_s$	Rigidez cisalhante
$\mu$	Coefficiente de atrito
$E^*$	Módulo elástico efetivo
$k^* (\equiv k_n/k_s)$	Razão de rigidez normal-cisalhante
<b>Grupo 2 – Amortecimento</b>	
$\beta_n$	Razão de amortecimento crítico normal
$\beta_s$	Razão de amortecimento crítico cisalhante
$M_d$	Amortecimento (“dashpot mode”)
<b>Grupo 3 – Modelo de Resistência ao rolamento</b>	
$\mu_r$	Coefficiente de atrito ao rolamento

## 2.7 MODELAGEM MICROMECAÂNICA DISCRETA DE MATERIAIS GRANULARES

Materiais granulares são conjuntos de partículas discretas que se movimentam independente umas das outras, interagindo-se nos pontos de contato (Cundall & Strack, 1979). A microestrutura destes materiais, como o número de contatos, a força de contato e sua rede de distribuição, desempenha um papel importante em sua resposta mecânica macroscópica.

A interpretação de ensaios de laboratório visando entender aspectos da microestrutura, como aqueles relacionados à preparação das amostras e sua evolução durante as fases de adensamento e o cisalhamento de ensaios triaxiais, requer o uso de técnicas avançadas e complexas de processamento de imagens, como a técnica fotoelástica e a microfotografia (Yang et al., 2008; Majmudar & Behringer, 2005). Estas, porém, apresentam limitações, em especial a estimativa das tensões internas (nos pontos de contato) na amostra e a obtenção de novas relações constitutivas a partir dos resultados de laboratório (Cundall & Strack, 1979).

O método dos elementos discretos representa uma ferramenta computacional poderosa para avaliar o comportamento macroscópico e analisar a microestrutura, utilizando uma amostra virtual na qual podem ser aplicados carregamentos e deformações (incluindo grandes deformações) que simulem as condições de ensaios de laboratório e de campo. O MED tem

sido então amplamente empregado para se investigar o comportamento macroscópico a nível micromecânico de materiais granulares. Os principais trabalhos nesta área são destacados a seguir.

Ng & Dobry (1994) avaliaram a resposta a carregamentos monotônico e cíclico de uma areia de Quartzo uniforme, utilizando o programa CONBAL, desenvolvidos pelos autores a partir do código TRUBAL proposto por Strack & Cundall (1984).

Yang et al. (2011) simularam uma série de triaxiais não drenados em um agregado gráudo representado por um partículas alongadas (“clumps”) utilizando o modelo de contato não-linear Hertz-Mindlin (HM) no programa PFC. Este modelo envolve formulações matemáticas mais complexas, se comparadas ao modelo linear, e foi utilizado também por Shi et al. (2010). Estes últimos, entretanto, tiveram como foco principal dos trabalhos simulações de triaxiais cíclicos para estudo da liquefação dinâmica da areia Fujian, cuja geometria das partículas foi representada por elementos circulares. As simulações avaliaram os efeitos da amplitude de deformação cíclica e da tensão confinante na resistência à liquefação. Os resultados obtidos indicaram que o modelo numérico conseguiu reproduzir o comportamento geral de liquefação da areia quando saturada sob carregamentos cíclicos em laboratório.

As linhas mais recentes de trabalho envolvendo o estudo do comportamento de materiais granulares quanto a teoria dos estados críticos, como Nguyen et al. (2021), Rahman et al. (2021) e Kodicherla (2021), Nguyen et al. (2020) e Nguyen et al. (2018), têm adotado o Modelo de Contato Linear para o cálculo das forças e momentos de contato.

Entretanto, estas pesquisas ressaltam que nenhum dos modelos linear ou não-linear de contato são perfeitamente capazes de representar a complexidade do comportamento de areias. Em função disso, tem se adotado artifícios como o uso de partículas em formato elipsoide ou a resistência ao rolamento, conforme adotado por alguns pesquisadores (Barnett et al., 2020; Gu et al., 2020; Ai et al., 2010).

Ai et al., (2010) destacam duas funções da resistência ao rolamento num sistema de partículas: dissipar a energia durante a rotação relativa; e fornecer maior estabilidade geométrica no processo de empacotamento das partículas.

Barnett et al., (2020) dedicaram seu trabalho na avaliação da relação da resistência ao rolamento no comportamento mecânico de areias a luz da teoria do estado crítico. As simulações numéricas buscaram reproduzir ensaios triaxiais drenado e não drenado em uma

amostra formada por partículas esféricas, cujas forças e deslocamentos foram calculadas utilizando o modelo RRLCM. As conclusões deste trabalho apontam a influência da resistência ao rolamento no ponto de transformação de fase (condição não-drenada) e no estado característico (condição drenada); bem como na posição e curvatura da Linha do Estado Crítico.

Gu et al., (2020), a partir de uma série de simulações de ensaios de cisalhamento triaxial monotônicos e cíclicos incorporando a resistência ao rolamento, observaram a mudança no padrão de comportamento dominante no contato das partículas durante o fenômeno da liquefação. Os resultados sugerem a predominância do movimento de rolamento em detrimento do deslizamento entre partículas, sendo proposto o índice de redundância (IR) para identificar a mudança do estado sólido para líquido do material.

Os resultados destes trabalhos reúnem contribuições para o entendimento do efeito da resistência ao rolamento e sua relação com a rotação das partículas quando se avalia o comportamento de materiais granulares.

Finalmente, foram verificados esforços para simular, por meio do MED, a irregularidade geométrica e quebra de grãos representadas por um agregado composto por poliedros de Voronoi ligados por uma “cola”, conforme estudos desenvolvidos por Fang et al. (2021).

Além disso, pesquisas brasileiras têm buscado avaliar a influência da adição de fibras no comportamento de solos granulares reforçados utilizando o MED, conforme Velloso et al. (2012), Ferreira (2010) e Pinedo (2019), além dos trabalhos internacionais de Gong et al. (2020) e Diambra et al., (2010).

### 3 MODELAGEM MICROMECAÂNICA DISCRETA DO REJEITO

Neste capítulo serão abordados aspectos sobre as simulações numéricas realizadas, tais como empacotamento das partículas, geração do modelo e calibração com os dados experimentais dos ensaios de compressão triaxial drenado executados em rejeito arenoso de minério de ferro.

Como metodologia adotada para a presente dissertação, foi gerada uma amostra numérica composta por 5468 partículas circulares utilizando a técnica *up-scaling*. Desse modo, as partículas apresentaram uma curva de distribuição granulométrica proporcional a do rejeito de minério de ferro, porém 10 vezes maior, para maior eficiência computacional.

Em função da diferença dos diâmetros das partículas que compõem a amostra virtual x real, esta primeira foi cuidadosamente gerada com uma densidade relativa entre 60-65 %, conforme faixa empregada para os ensaios de laboratório no rejeito de mineração. Para isso, foi necessário obter o índice de vazios máximo e mínimo da amostra numérica a partir de simulações específicas.

O modelo de contato *Rolling Resistance Linear Contact Model* (RRLCM) foi adotado para permitir adicionar uma resistência ao rolamento entre as partículas. Assim, foi possível representar o efeito da irregularidade tipicamente existente nos grãos do rejeito de minério de ferro, mesmo utilizando amostra numérica composta por partículas de formato circular.

A etapa de calibração do modelo foi realizada para seleção adequada dos valores adequados para as propriedades micromecânicas da amostra numérica, tais como a rigidez normal, de cisalhamento, resistência ao rolamento, e o coeficiente de atrito de rolamento, de modo que o modelo seja capaz de reproduzir as respostas observadas pelos resultados de ensaios de laboratório. Trata-se de etapa trabalhosa e sem um procedimento padrão estabelecido na literatura. Portanto, para esta pesquisa foi necessário desenvolver uma metodologia própria para calibração de simulações MED de rejeitos utilizando o RRLCM.

Por fim, foram realizadas as simulações dos ensaios a compressão biaxial drenado por meio do MED para as tensões de confinamento de 100, 200 e 400 kPa, sendo os resultados avaliados em termos de comportamento macroscópico e microscópico. Análises de sensibilidade também foram desenvolvidas a fim de melhor compreender o efeito do coeficiente de resistência ao rolamento, coeficiente de atrito e taxa de carregamento no comportamento mecânico do rejeito.



### 3.1 DADOS DE REFERÊNCIA – ENSAIOS DE LABORATÓRIO NO REJEITO DE MINÉRIO DE FERRO

Os ensaios de laboratório utilizados como referência foram executados por Sotomayor (2018) em uma amostra de rejeito arenoso de minério de ferro. A Figura 3-1 mostra a curva de distribuição granulométrica do rejeito, caracterizado como silte arenoso sem plasticidade.

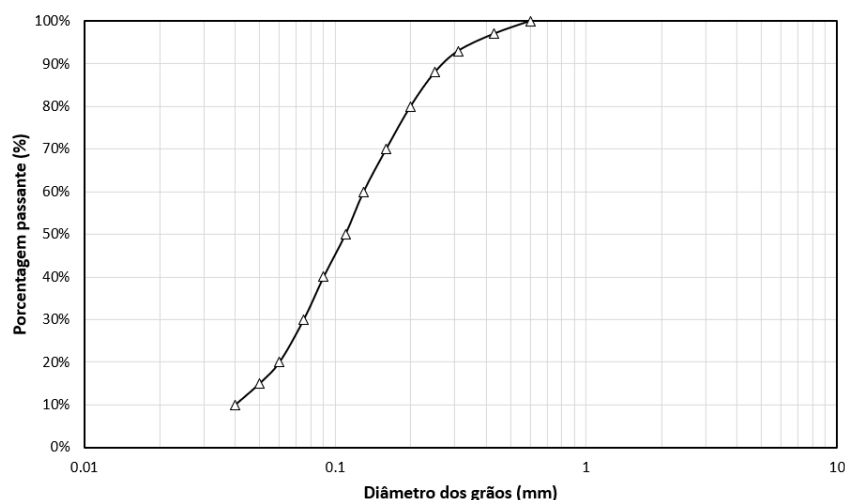


Figura 3-1: Curva de distribuição granulométrica típica do rejeito arenoso de minério de ferro (Sotomayor, 2018).

O coeficiente de uniformidade ( $C_u$ ) e a densidade relativa dos grãos ( $G_s$ ) obtidos para a amostra de rejeitos foram, respectivamente, 3,5 e 2,89. As propriedades físicas da amostra de rejeito estão resumidas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1- Principais propriedades físicas do Rejeito de Minério de Ferro (Sotomayor, 2018)

Item	Unidade	Valor
Argila	%	1,70
Silte	%	16,03
Areia	%	70,56
Densidade relativa dos grãos ( $G_s$ )	-	2,89
Limite de Liquidez ( $LI$ )	%	NL
Limite de Plasticidade ( $LP$ )	%	NP
Diâmetro mediano ( $D_{50}$ )	mm	0,10
Coeficiente de Uniformidade ( $C_u$ )	-	3,5
Densidade Relativa ( $D_r$ )	%	65

A análise de fluorescência (XRF) por sinais de raios-X realizada por Sotomayor (2018) indica que o rejeito de minério de ferro é composto predominantemente por quartzo ( $SiO_2$ ), 82,7 %, além de hematita ( $Fe_2O_3$ ), 12,9 % e óxido de alumínio ( $Al_2O_3$ ), 4,4 %.

Os ensaios de microscopia eletrônica de varredura (MEV) mostraram que o arranjo dos grãos é composto por partículas de formato angular a subangular, conforme representado na Figura 3-2. Nota-se ainda a presença de fibras de polipropileno adicionada por Sotomayor (2018) em parte das amostras ensaiadas. Importante mencionar que para as simulações numéricas desenvolvidas para a presente dissertação, foram considerados apenas os ensaios realizados em amostras sem reforço de fibra.

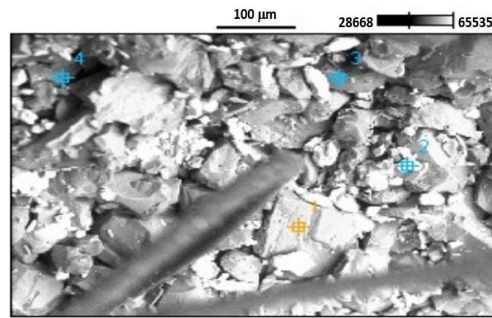


Figura 3-2: Imagem MEV do rejeito arenoso de minério de ferro (Sotomayor, 2018).

Para os ensaios triaxiais, as amostras foram preparadas pelo método *moist tamping* (Lambe, 1951) para atingir um índice de vazios de aproximadamente 0,65, correspondendo a uma densidade relativa ( $D_r$ ) de 65 % e a uma condição medianamente compacta. Os índices de vazios máximo e mínimo obtidos em laboratório para o rejeito foram 0,84 e 0,55, respectivamente. A dimensão adotada dos corpos de prova foi de 38 mm de diâmetro e 80 mm de altura.

O processo de saturação foi iniciado com a percolação de água destilada cujo fluxo foi realizado da base para o topo do corpo de prova, mantendo uma diferença de 5 kPa para evitar perturbações na estrutura da amostra. Como pequenas bolhas de ar podem permanecer após o processo de percolação, foi feita a aplicação de incrementos de pressão confinante e contrapressão com acréscimos de 20 kPa, mantendo a diferença entre as pressões de 5 kPa até se atingir um valor de parâmetro B de 0,70. A partir disso, os acréscimos subsequentes passaram a ser de 50 kPa. Skempton (1954) define o parâmetro B como a razão entre a variação de poro pressão em um corpo na condição não drenada e a variação da tensão total confinante ou hidrostática ( $= \Delta u / \Delta \sigma_3$ ).

O grau de saturação foi verificado ao final de estágio pela medição do parâmetro B. O processo de saturação foi interrompido quando  $B \geq 0,98$ , indicando que as amostras estavam completamente saturadas.

Após a saturação, as amostras foram adensadas isotropicamente sob as tensões efetivas de confinamento ( $\sigma'_3$ ) de 50, 100, 200 e 400 kPa, dependendo do valor de  $\sigma'_3$  alvo para cada teste. Durante as fases de cisalhamento drenado e não drenado, os corpos de prova foram carregados a uma taxa de deformação axial de aproximadamente 0,032 mm/min, mantendo a pressão da célula constante. Para os testes drenados, a velocidade de deformação axial adotada foi baixa o suficiente para permitir a dissipação completa do excesso de poro pressão. Para os testes não drenados, a taxa de deformação axial de referência permitiu a equalização dos excessos de poro pressão produzidos durante a deformação cisalhante da amostra.

## 3.2 GERAÇÃO DA AMOSTRA NUMÉRICA

### 3.2.1 GEOMETRIA

Nesta dissertação, a amostra numérica foi gerada em formato retangular, com dimensões (base e altura) idênticas aos corpos de prova ensaiados por Sotomayor (2018), cujas laterais, base e topo são compostas por paredes rígidas independentes, conforme representado na Figura 3-3.

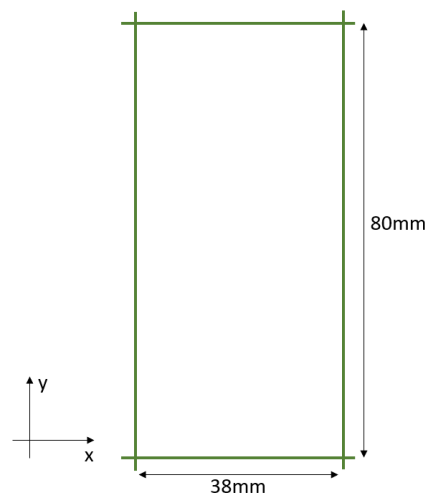


Figura 3-3: Representação das paredes e dimensões da amostra numérica.

Paredes rígidas são fronteiras-limites que não apresentam inércia, diferenciando-se assim das paredes periódicas que proporcionam o efeito de extensão infinita à amostra. Ambos os tipos de paredes têm sido amplamente adotados e se mostraram adequadas para simulações MED de materiais granulares. Autores como Kodicherla (2021), Barnett et al., (2020), Gu et al., (2020), Gu et al., (2017), Huang et al., (2014) e Kodicherla et al., (2013) podem ser mencionados como exemplos de trabalhos que adotaram a parede tipo rígida, enquanto autores como Rahman et al., (2021), Nguyen et al., (2018) e Nguyen et al., (2018) ilustram casos de

aplicação de parede tipo periódica. As paredes rígidas destacam-se a princípio pela facilidade do entendimento de seu conceito e da manipulação numérica.

### 3.2.2 GERAÇÃO E EMPACOTAMENTO DAS PARTÍCULAS

Neste item é apresentada a metodologia empregada para geração e empacotamento das partículas que compõem a amostra numérica. A sequência de processos adotada permitiu obter uma amostra cuja curva de distribuição granulométrica é proporcionalmente igual àquela do rejeito arenoso de minério de ferro, porém 10 vezes maior, de modo a reduzir a quantidade total de partículas do modelo.

Esta técnica de geração ampliada dos diâmetros, denominada “up-scaling”, tem sido aplicada em diversos estudos MED em materiais granulares a partir dos quais foram obtidos resultados satisfatórios (Wang et al., 2014; Lin et al., 2013; e Wang & Leung, 2008;). Desse modo, são geradas simulações de menor custo computacional, sem, no entanto, afetar a resposta macro mecânica do material (Jensen, 2001).

No Método dos Elementos Discretos, as partículas ser representadas em quaisquer formatos, tais como circulares e esféricas (Gong et al., 2020; Barnett et al., 2020; Gu, 2014; Velloso et al., 2012; Yan et al., 2011), elipsoides (Nguyen et al., 2021; e Nguyen et al., 2018), alongadas (Kodicherla, 2021) ou irregulares (Frang et al., 2021), para representar os grãos dos materiais.

Para representar os grãos dos rejeitos, foram consideradas partículas de formato circular, as quais foram geradas a partir de um mecanismo que realiza o posicionamento destas de modo a se atingir uma distribuição uniforme dos raios (conforme critério especificado pelo usuário) ao longo de toda a amostra. Tal mecanismo disponível no programa PFC tem seu comando denominado como “ball distribute”.

Na etapa inicial, as partículas foram geradas com diâmetros proporcionalmente iguais à distribuição granulométrica obtida em laboratório, porém aumentados em 5 vezes. Após a geração das partículas, a amostra foi submetida a diversos ciclos até que o sistema tivesse atingido o estado de equilíbrio (velocidade nula das partículas), conforme representado na Figura 3-4.

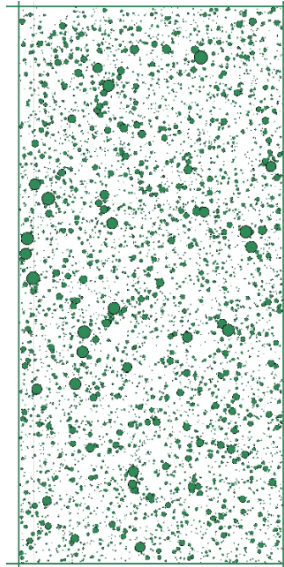


Figura 3-4: Amostra numérica gerada com curva de distribuição granulométrica 5x maior que a curva do rejeito – Etapa inicial.

Em seguida, foi realizada a expansão gradual do raio das partículas empregando o método “radius-expansion” (RE), o qual utiliza um fator  $\alpha$  para se atingir o raio final desejado das partículas ( $r_{final}$ ). Assim, as partículas de raio atual igual a  $0,5r_{final}$ , foram expandidas aplicando um fator  $\alpha = 2,0$ . Em seguida, a amostra foi submetida a diversos ciclos até que o sistema tivesse atingido o estado de equilíbrio. A configuração da amostra ao final de todo o processo é apresentada na Figura 3-5.

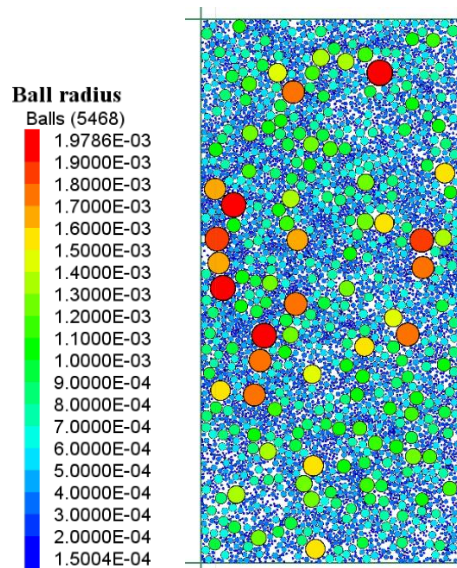


Figura 3-5: Amostra numérica gerada com curva de distribuição granulométrica 10x maior que a curva do rejeito – Etapa final.

Nesta condição final, a amostra tem uma porosidade de 0,24, que corresponde a um índice de vazios ( $e$ ) de 0,31 e uma  $D_r = 65\%$ . Gu et al., (2020) observaram que o método RE

produz uma fábrica próxima aquela obtida para amostras preparadas por meio da técnica “moist tamping”, a qual foi empregada na campanha de ensaios de laboratório do rejeito de minério de ferro (Sotomayor, 2018).

A Figura 3-6 apresenta a curva de distribuição granulométrica obtida ao final do processo de geração e empacotamento da amostra numérica, cujas partículas são proporcionalmente 10 vezes maiores aos grãos do rejeito.

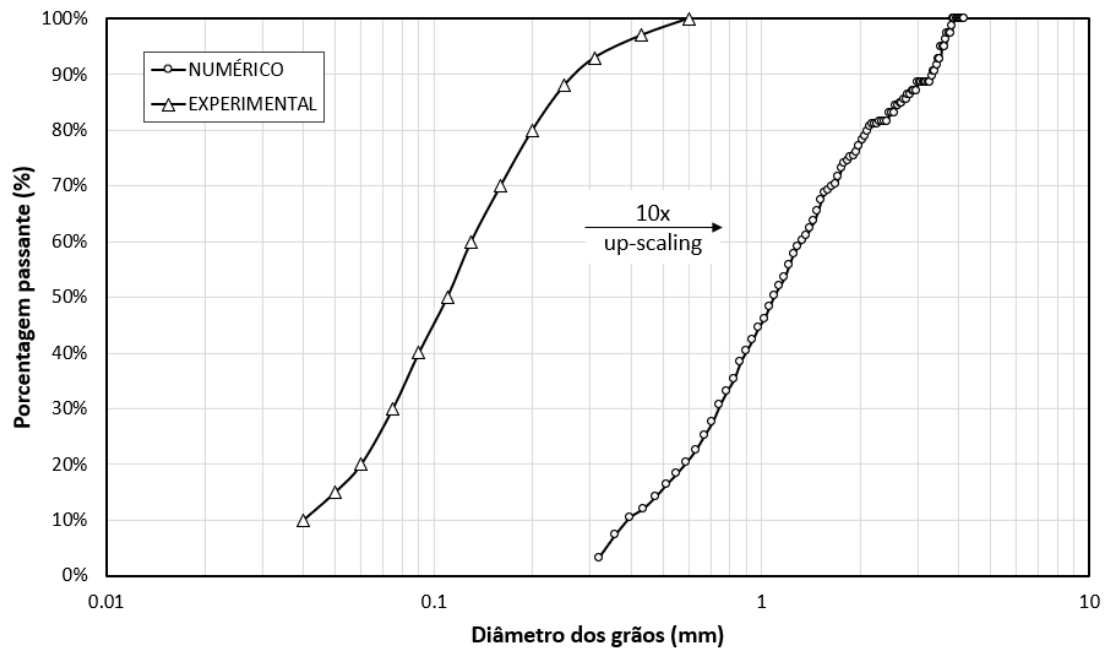


Figura 3-6: Curvas de distribuição granulométrica experimental (ensaios de laboratório) x numérica (modelo MED).

Para a geração da amostra virtual, as partículas tiveram seu menor diâmetro limitado ao diâmetro correspondente à 10% de material passante ( $D_{10}$ ) do rejeito, ou seja, para o modelo numérico foi desconsiderada a parcela com dimensão inferior ao  $D_{10}$ .

O diâmetro mediano e coeficiente de uniformidade obtidos da amostra numérica são 1,1 e 3,4, respectivamente. A densidade das partículas é igual a 2890 kg/m<sup>3</sup>. Estes valores são, portanto, iguais aos valores reais do rejeito de minério de ferro.

### 3.2.3 POROSIDADE

Em virtude da amostra numérica ser composta por partículas proporcionalmente 10 vezes maiores que o rejeito de minério de ferro, para a equivalência entre a amostra MED x experimental precisou ser considerada a densidade relativa ( $D_r$ ), já que os índices de vazios ou porosidade destas não se correlacionam diretamente.

Para assegurar que a amostra numérica seja gerada com  $D_r$  igual à 60-65 %, adotada para os ensaios de laboratório do rejeito, foi necessário determinar os índices de vazios máximo ( $e_{max}$ ) e mínimo ( $e_{min}$ ) da amostra virtual.

A densidade relativa é dada pela equação a seguir.

$$D_r = \frac{e_{max} - e_{atual}}{e_{max} - e_{min}} \quad (3.1)$$

Onde o  $e_{atual}$  representa o índice de vazios do material para a  $D_r$  desejada.

Na simulação para a obtenção do índice de vazios mínimo, após a geração e empacotamento da amostra numérica (conforme procedimentos do item 3.2.2), o coeficiente de atrito ( $\mu$ ) foi alterado para zero e a gravidade foi ativada. As partículas começaram então a depositarem-se no fundo da amostra, junto à parede (Figura 3-7a). Assim que o sistema atingiu o equilíbrio (Figura 3-7b), a porosidade de  $n = 0,05$  foi medida na região de concentração das partículas, sendo obtido um índice de vazios de  $e = 0,05$ . A correlação utilizada para obter  $e$  partir de  $n$  é apresentada a seguir.

$$e = \frac{n}{1 - n} \quad (3.2)$$

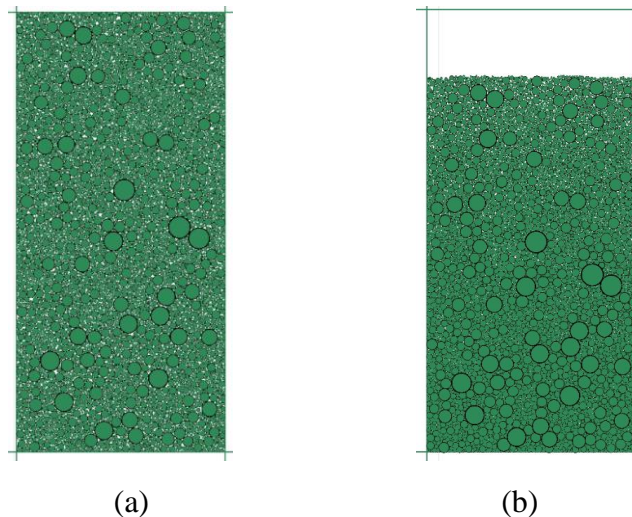


Figura 3-7: Simulação para determinação do índice de vazios mínimo, quando (a) a deposição gravitacional está ocorrendo e (b) após o sistema atingir o equilíbrio.

Para conseguir gerar a amostra mais fofa possível, visando a obtenção do índice da vazios máximo, foi utilizada uma porosidade inicial mais alta possível, a qual foi definida de modo a atender os seguintes critérios: i) curva de distribuição granulométrica

proporcionalmente igual àquela do rejeito arenoso de minério de ferro, porém 10 vezes maior (Figura 3-6); e ii) número total de partículas próximo igual a 5000. Logo, foi adotada uma porosidade inicial (*input*) de 0,4 e o valor máximo para o coeficiente de atrito, isto é,  $\mu = 1,0$  para geração da amostra, a qual gerou um sistema formado de 4326 partículas. Após o sistema atingir seu equilíbrio, foi obtida uma porosidade máxima  $n = 0,441$ , correspondente a  $e_{max} = 0,79$ , conforme representado na Figura 3-8.

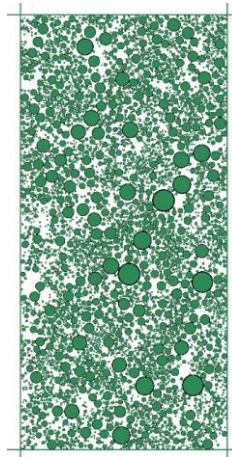


Figura 3-8: Simulação para determinação do índice de vazios máximo.

Por fim, conhecendo os valores de  $e_{max}$  e  $e_{min}$ , a amostra numérica foi gerada de modo a se atingir uma porosidade inicial (pré-adensamento) igual a 0,24 (ou índice de vazios igual a 0,31), correspondente a uma densidade relativa de 65 % (similar a amostra experimental), composta por 5468 partículas circulares.

Na Tabela 3.2 são resumidas as propriedades da amostra MED.

Tabela 3.2- Propriedades da amostra virtual

Item	Unidade	Valor
Número de partículas	-	5.468
Densidade das partículas	kg/m <sup>3</sup>	2890
Diâmetro mediano ( $D_{50}$ )	mm	1,1
Coefficiente de Uniformidade ( $C_u$ )	-	3,4
Índice de vazios máximo ( $e_{max}$ )	-	0,79
Índice de vazios mínimo ( $e_{min}$ )	-	0,05
Densidade relativa ( $D_r$ )	%	65

### 3.3 CALIBRAÇÃO DO MODELO

Estudos utilizando o MED tem demonstrado a capacidade dos modelos de representar características intrínsecas de materiais granulares (como dilatância, comportamento mecânico



tensão-deformação e formação de bandas de cisalhamento), apesar de simplificarem a complexidade de sistemas físicos complexos reais por meio de modelos de contato, geometria e número de partículas envolvidos, conforme citado por O’Sullivan (2020).

O objetivo da calibração do modelo MED é, sabendo destas simplificações, reproduzir a resposta observada pelos ensaios de laboratório a partir da seleção adequada das propriedades microscópicas, já que estas últimas não se relacionam diretamente com os parâmetros elasto-plásticos (módulo de elasticidade, módulo de rigidez e coeficiente de Poisson) da amostra física.

Logo, as propriedades microscópicas utilizadas para o modelo de contato RRLCM adotado (apresentadas na Tabela 2.1 do item 2.6) foram calibradas de modo a convergir a resposta em macro escala (em termos de módulo de elasticidade, máxima tensão desviadora, ângulo de atrito, entre outros) verificada pelos ensaios de laboratório no rejeito de minério de ferro (Sotomayor, 2018).

No processo de calibração adotado, buscou-se a partir de uma metodologia própria calibrar primeiramente os parâmetros relacionados à elasticidade e rigidez:  $k^*$  e  $E^*$ , relacionados a curva tensão-deformação. Em seguida, focou-se na seleção dos coeficientes de atrito:  $\mu$  e  $\mu_r$ , relacionados à resistência ao cisalhamento. E por fim, foram ajustadas as propriedades de amortecimento:  $\beta_n$ ,  $\beta_s$  e  $M_d$ .

Cabe ressaltar que estas três etapas representam apenas o ponto de partida do processo de calibração, não sendo executadas em uma ordem fixa, uma vez que foi necessário muitas vezes retornar uma ou duas etapas anteriores ou avançar etapas subsequentes para se chegar no resultado final da calibração. A representação esquemática do processo de calibração proposta e considerada nesta pesquisa é indicada na Figura 3-9.

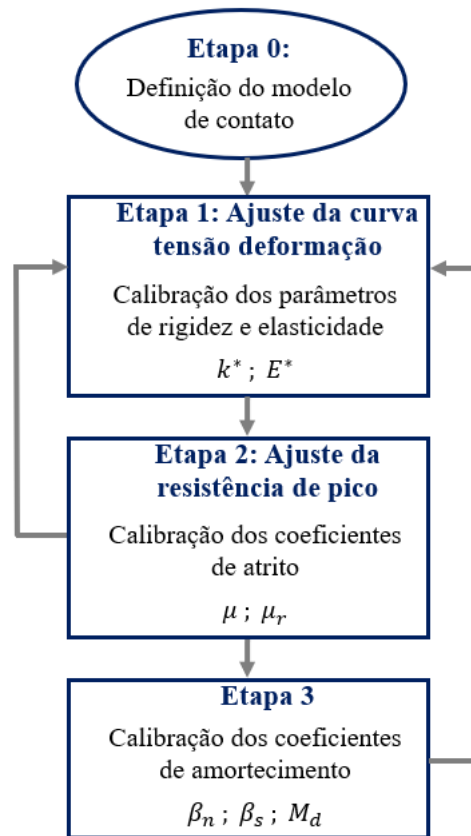


Figura 3-9: Esquema empregado para calibração das propriedades microscópicas do modelo – metodologia elaborada para esta pesquisa.

Além disso, a calibração do modelo MED foi realizada tendo como referência o ensaio triaxial drenado executado com tensão confinante de 200 kPa. Os valores obtidos são indicados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3- Parâmetros calibrados

Propriedade	Unidade	Valor calibrado
$\mu$	-	0,4
$E^*$	Pa	$2,8 \times 10^8$
$k^* (\equiv k_n/k_s)$	-	2,5
$\beta_n$	-	0,1
$\beta_s$	-	0,1
$M_d$	-	3,0
$\mu_r$	-	0,25
Damping	-	0,7

A partir dos parâmetros calibrados foram simuladas os outros três ensaios CID: 100 kPa, 400 kPa e 800 kPa. Esta mesma metodologia foi empregada por Lee et al., (2012) para simulações MED de ensaios de compressão triaxial drenado e não drenado.

A Figura 3-10 e Figura 3-11 apresentam os resultados comparativos da calibração do modelo em termos de tensão desviadora e deformação volumétrica, respectivamente, para o ensaio de 200 kPa de tensão confinante. Na Figura 3-11 é representado também a amostra numérica em termos da magnitude de deslocamento das partículas.

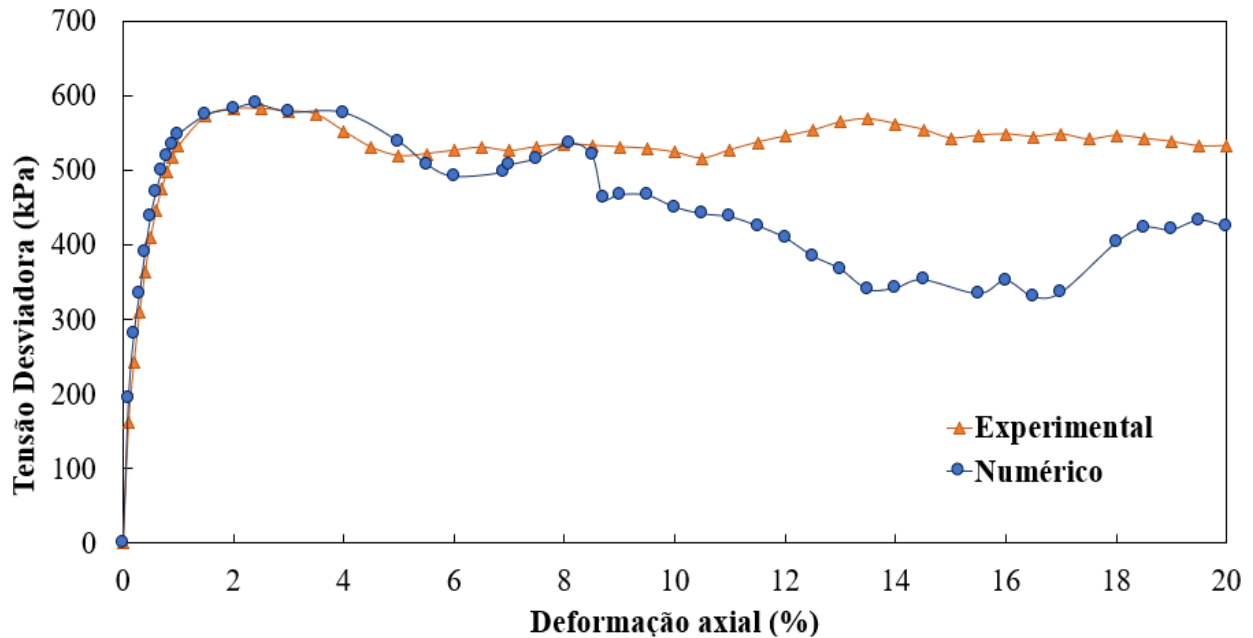


Figura 3-10: Resultados da calibração – Curvas tensão deformação (200 kPa).

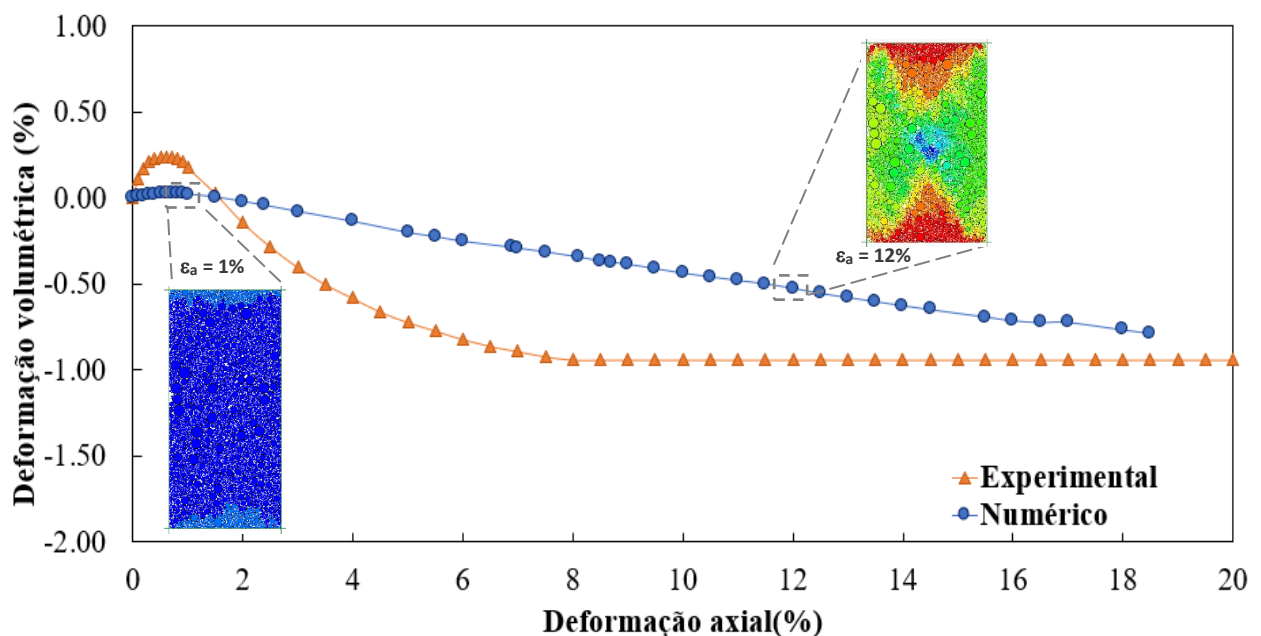


Figura 3-11: Resultados da calibração – Curvas tensão deformação (200 kPa).

Os resultados da calibração numérica utilizando o RRLCM mostraram uma boa concordância com os dados experimentais. Em geral, são esperadas algumas diferenças que

podem estar associadas as simplificações adotadas para o modelo, como o uso de modelo bidimensional, fronteiras rígidas e partículas de forma circular.

Além disso, cabe mencionar que o modelo numérico não é capaz de reproduzir todas as condições de contorno presentes nos ensaios de laboratório, como a deformabilidade da membrana que envolve os corpos de prova.

### 3.4 ENSAIOS BIAXIAIS DRENADOS

Após a geração das partículas e calibração do modelo, buscou-se reproduzir os ensaios triaxiais na condição drenada do rejeito de minério de ferro pela simulação numérica de ensaios biaxiais (2D) das partículas circulares.

A amostra numérica é composta por quatro paredes rígidas independentes, que representam as placas de carregamento dos ensaios triaxiais.

Na primeira etapa, referente ao adensamento isotrópico, as paredes são movidas a uma velocidade máxima de 0,1m/s, até as tensões atuantes nos planos xx e yy atinjam o valor alvo para a simulação (100, 200 ou 400 kPa). Em seguida, o valor das tensões nas paredes é mantido constante utilizando um mecanismo de servo-controle.

Na etapa seguinte, correspondente ao cisalhamento drenado, o mecanismo de servo-controle é desativado para as paredes de topo e base, as quais passam a mover-se a uma velocidade constante de 0,1 m/s, comprimindo a amostra.

A taxa de deformação de 3,0 /s adotada mostrou ser suficientemente pequena para garantir o estado de tensão quase-estático. O passo de tempo, habilitado para ser definido automaticamente pelo PFC (ver item 2.5), foi monitorado durante a simulação e apresentou valores na ordem de  $10^{-7}$  s durante todas as simulações.

Cabe mencionar que, as simulações desenvolvidas na presente pesquisa contemplaram apenas ensaios triaxiais tipo drenado para que fosse possível a finalização desta no prazo previsto. Desse modo, os ensaios triaxiais não drenados existentes para o rejeito de minério de ferro (Sotomayor, 2018) não foram considerados para o modelo numérico.

## 4 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

### 4.1 COMPORTAMENTO MACROSCÓPICO

Neste item são apresentados os resultados das simulações numéricas dos ensaios biaxiais drenados, em termos de comportamento em macro escala, e sua comparação com os resultados obtidos a partir dos ensaios de laboratório triaxiais drenados realizados no rejeito de minério de ferro.

A Figura 4-1 apresenta as curvas da tensão desviadora  $\sigma_d = (\sigma'_1 - \sigma'_3) = (\sigma'_{yy} - \sigma'_{xx})$  pela deformação axial  $\varepsilon_a = \varepsilon_{yy}$ , enquanto a Figura 4-2 mostra as curvas da razão das tensões efetivas  $(\sigma'_1/\sigma'_3) = (\sigma'_{yy}/\sigma'_{xx})$  por  $\varepsilon_a$ .

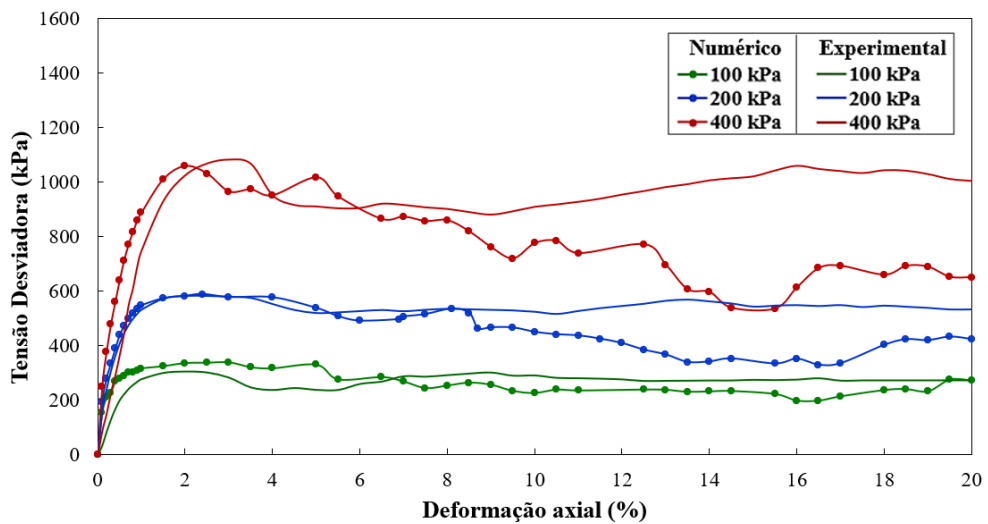


Figura 4-1: Curvas Tensão Desviadora x Deformação axial

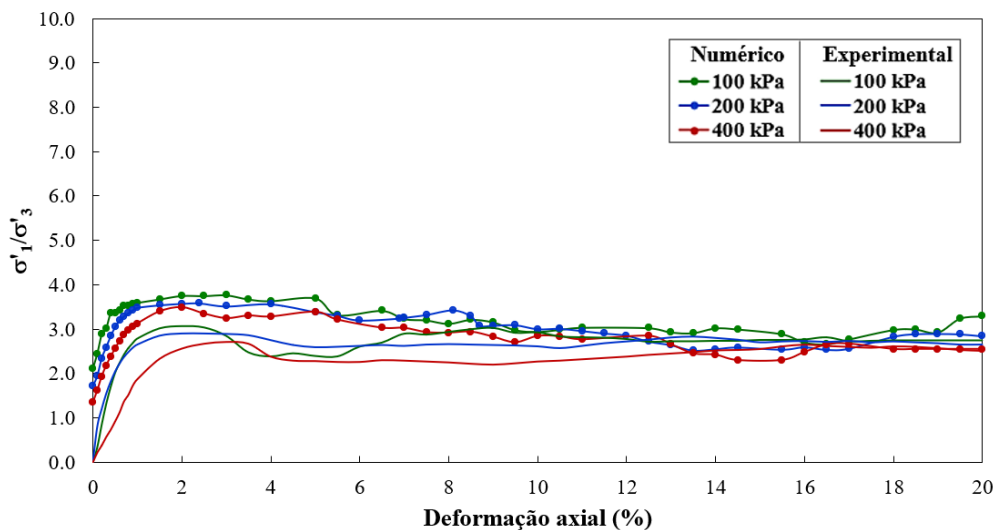


Figura 4-2: Razão das tensões atuantes x Deformação axial

A comparação dos resultados das curvas tensão-deformação indica que o modelo conseguiu, em geral, reproduzir os picos de tensão desviadora.

Importante mencionar que algumas limitações foram observadas para o modelo, a representação do comportamento frágil apresentado pelo rejeito na faixa de 3,0 a 5,0 % da deformação axial (Figura 4-2) e o estado crítico atingido em grandes deformações pelas amostras experimentais. As curvas tensão-deformação do modelo MED não mostraram uma estabilização da deformação volumétrica  $\varepsilon_v = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$  e da  $\sigma_d$  à medida que a amostra atingia grandes deformações. As curvas da deformação volumétrica  $\varepsilon_v$  por  $\varepsilon_d$  são representadas na Figura 4-3.

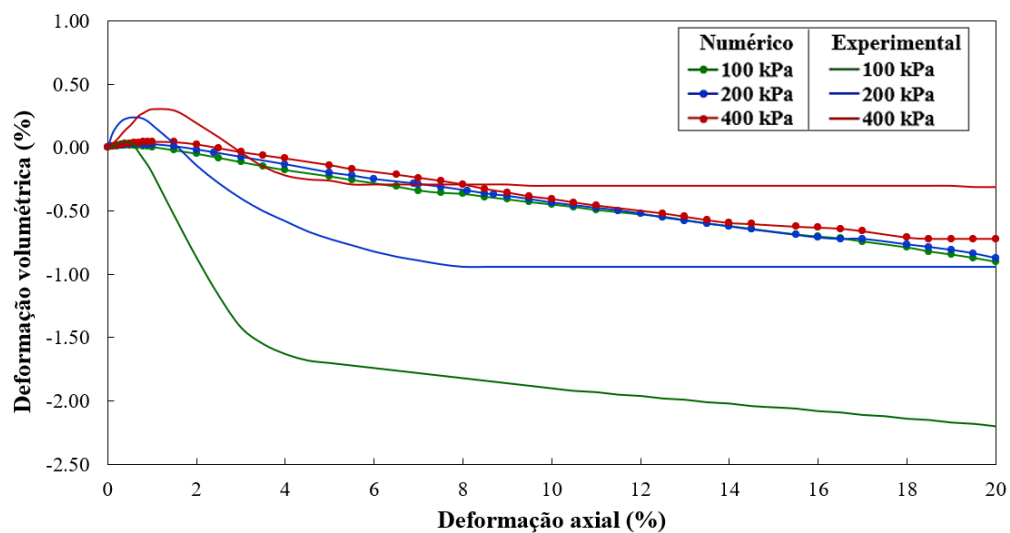


Figura 4-3: Curvas Deformação volumétrica x Deformação axial

Com o intuito de verificar se as diferenças supramencionadas influenciaram a resistência ao cisalhamento, os parâmetros resistência efetiva obtidos via modelo MED foram calculados. Na Figura 4-4 é apresentado os pares  $s'$  vs.  $t'$  selecionadas para o critério de ruptura da máxima tensão desviadora, sendo  $s' = (\sigma'_1 + \sigma'_2)/2$  e  $t' = (\sigma'_1 - \sigma'_2)/2$ , conforme notação do MIT.

Observou um bom ajuste dos dados numéricos à envoltória de resistência efetiva definida por Sotomayor (2018) para o rejeito de minério de ferro, a qual retorna valores de coesão e ângulo de atrito efetivos iguais a 28 kPa e 33°. Os resultados sugerem, portanto, que o modelo foi capaz de reproduzir a resposta mecânica do rejeito em termos de resistência ao cisalhamento, apesar das diferenças verificadas para a variação volumétrica e tensão desviadora a grandes deformações.

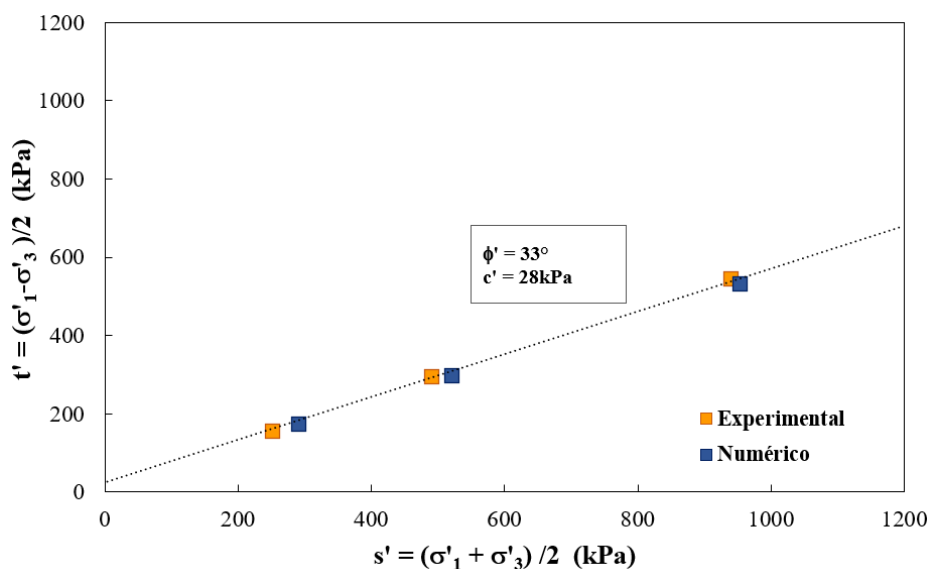


Figura 4-4: Envoltória de resistência drenada

## 4.2 COMPORTAMENTO MICROSCÓPICO

Neste item são apresentados os resultados do monitoramento dos principais parâmetros microscópicos fornecidos pelo modelo MED, uma vez que as simulações permitem obter a informação da interação das partículas e forças de contato.

### 4.2.1 FORÇAS DE CONTATO

As forças de contato em geral são representadas por linhas localizadas entre os centróides do contato entre partículas, cuja espessura é proporcional à magnitude da força. Logo, as linhas mais espessas representam as maiores forças de contato atuantes nos pontos de contato (O'Sullivan, 2018).

A Figura 4-5, Figura 4-6 e Figura 4-7 apresentam a rede de forças de contato produzida para a amostra numérica durante os ensaios biaxiais para as deformações axiais de 0,1-0,45 %, 3,0-5,5 % e 18 %. No estado inicial dos ensaios ( $\varepsilon_a = 0,1\%$ ), foi verificado que não existe uma orientação preferencial para as forças de contato de maior magnitude, as quais estão distribuídas ao longo de toda a área da amostra. À medida que o nível de deformação aumenta e a deformação volumétrica começa a ficar negativa (ou seja, a amostra dilata), as forças de contato reduzem em quantidade e em espessura. Além disso, a distribuição das forças de contato de maior magnitude fica mais alinhada à direção da tensão principal, que atua verticalmente e se concentra na zona central.

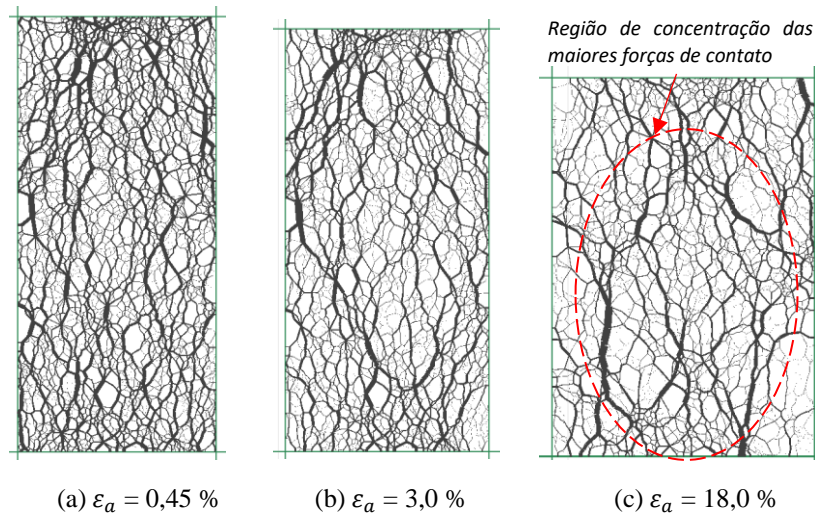


Figura 4-5: Evolução das forças de contato durante o ensaio biaxial – 100 kPa

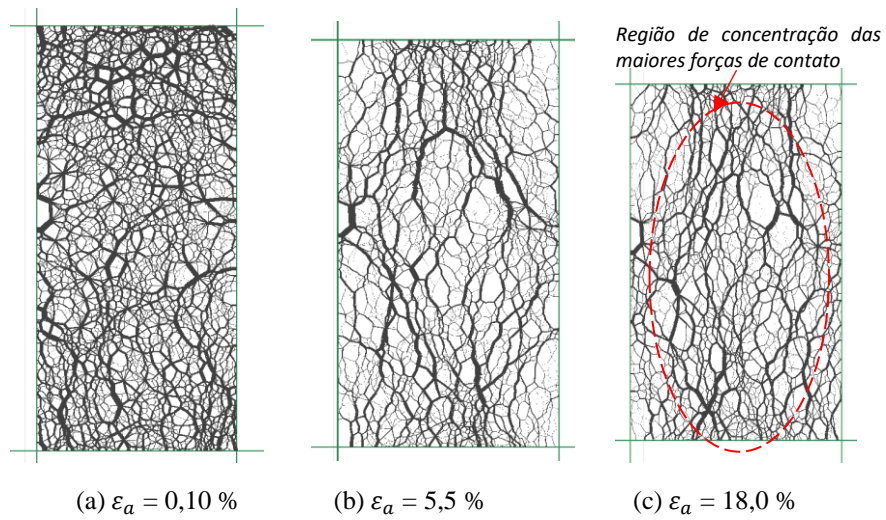


Figura 4-6: Evolução das forças de contato durante o ensaio biaxial – 200 kPa

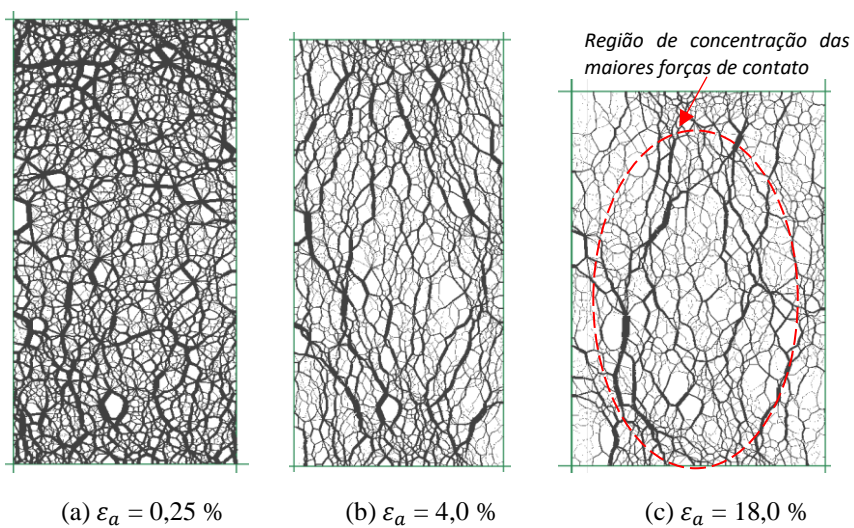


Figura 4-7: Evolução das forças de contato durante o ensaio biaxial – 400 kPa



#### 4.2.2 COLUNAS DE CARREGAMENTO

Durante o carregamento da amostra, a tensão principal (axial) é transmitida, em sua maior parcela, para algumas partículas. Ensaios de microscopia eletrônica por diversos autores (Oda et al., 1982; Drescher, 1976; Oda, 1972; e Wakabayashi, 1957) indicam que estas partículas submetidas a um maior nível de tensão que as partículas da vizinhança, posicionam-se alinhadas e paralelas à direção vertical, como “colunas” de carregamento. Observou-se que estas colunas se correlacionam com a cadeia de força de contato de maior magnitude da amostra, conforme trabalhos publicados por Tordesillas & Muthuswamy (2009) e Behringer et al., (2008).

Na Figura 4-8 são representados os resultados da verificação das “colunas” de carregamento desenvolvidas em cada simulação para  $\varepsilon_a=18\%$ . Na escala de cores, as partículas submetidas aos maiores valores de tensão axial estão coloridas de preto. Observa que a rede de colunas está alinhada com a direção das forças de contato de maior magnitude (Figura 4-5c, Figura 4-6c, e Figura 4-7c). Além disso, a rede mostra-se mais intensa com o aumento do confinamento, isto é, é composta por um menor número de colunas e estas estão submetidas a uma maior tensão axial.

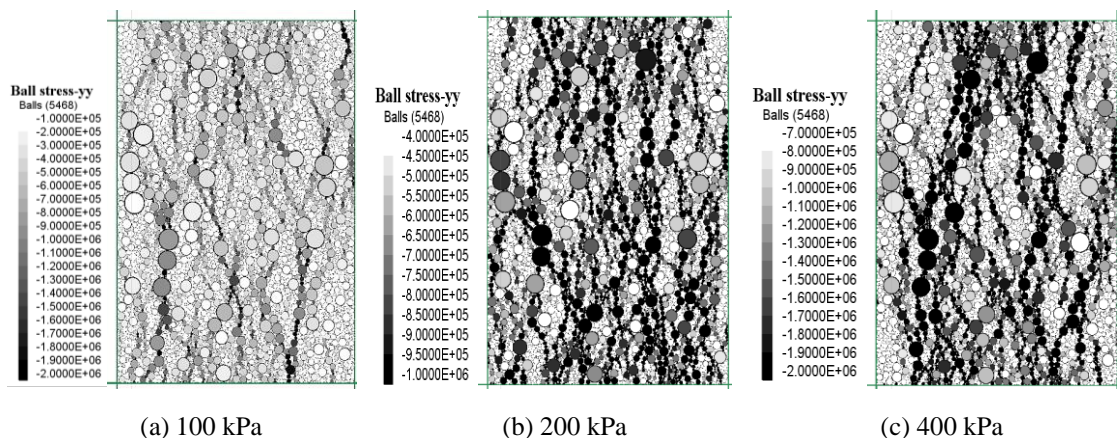


Figura 4-8: Verificação das “colunas” de carregamento desenvolvidas durante as simulações numéricas para  $\varepsilon_a = 18\%$

#### 4.2.3 ROTAÇÃO DAS PARTÍCULAS

Para a avaliação do comportamento mecânico de rejeitos de mineração ou materiais arenosos submetidos ao cisalhamento drenado é importante considerar o efeito da formação de banda de cisalhamento quando se utilizam amostras compactas ou a medianamente compactadas. Nestas condições, as deformações tendem a se concentra em uma zona específica

da amostra, onde são produzidas maiores deformações volumétricas e, portanto, índice de vazios maiores que o restante do corpo de prova.

O monitoramento da rotação das partículas vem sendo adotado em trabalhos utilizando o MED por se correlacionar com a região da formação da banda de cisalhamento (O'Sullivan, 2011; Iwashita & Oda, 1998; Oda, 1997; e Bardet & Proubet, 1991). A localização da banda de cisalhamento e direção é definida pela zona onde ocorrem as maiores rotações nas partículas.

A Figura 4-9, Figura 4-10 e Figura 4-11 apresentam a evolução da rotação das partículas para as mesmas deformações axiais de 0,1-0,45 %, 3,0-5,5 % e 18 %. Nas figuras, apenas as partículas com rotações no sentido anti-horário e de magnitude superior ao valor médio estão representadas em cores.

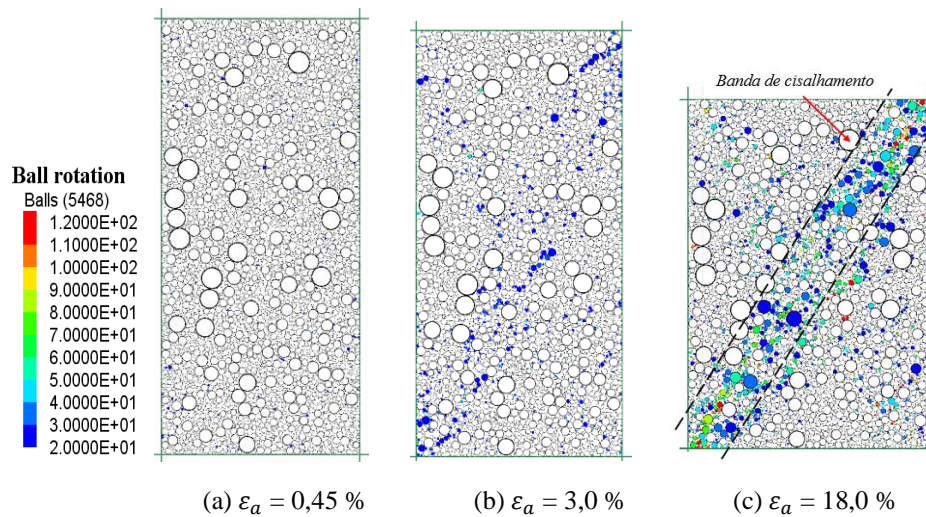


Figura 4-9: Evolução da rotação de partículas e formação da banda de cisalhamento – 100 kPa

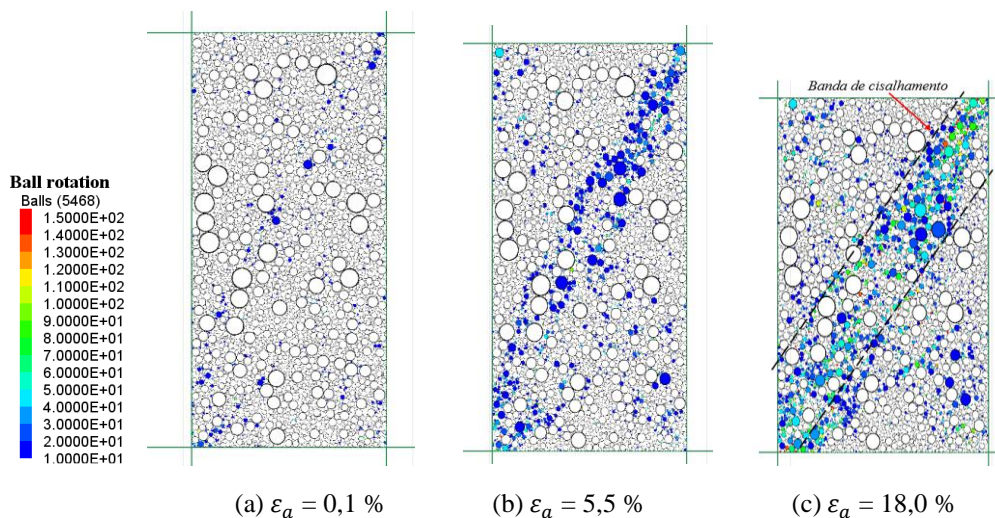


Figura 4-10: Evolução da rotação de partículas e formação da banda de cisalhamento – 200 kPa

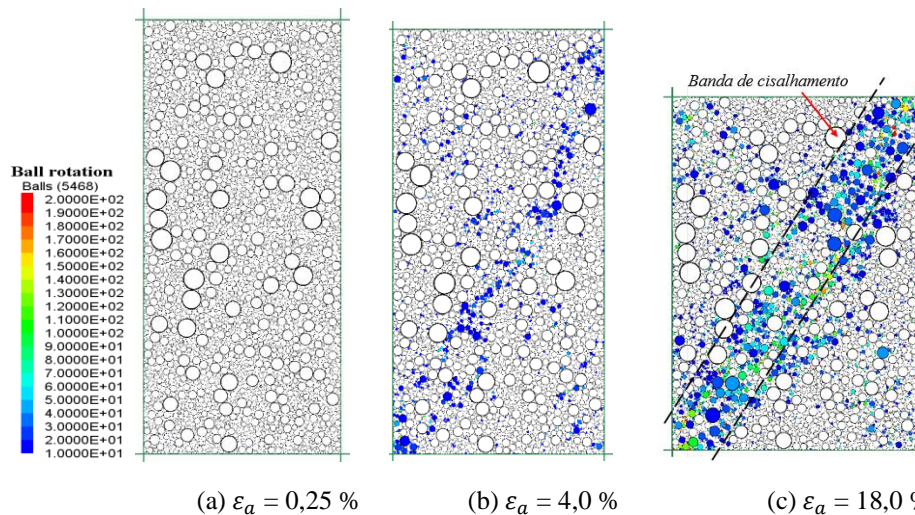


Figura 4-11: Evolução da rotação de partículas e formação da banda de cisalhamento– 400 kPa

Os resultados sugerem que a partir da faixa  $\varepsilon_a = 3,0-5,5 \%$ , quando a tensão  $\sigma_d$  atinge seu pico (Figura 4-1), a formação da banda de cisalhamento é iniciada. Com o aumento da tensão confinante, ocorre o aumento da magnitude de rotação das partículas e fica mais evidente a zona da banda de cisalhamento.

A comparação dos resultados da evolução da rotação das partículas com os registros fotográficos dos corpos de prova rompidos (pós ensaios triaxiais drenados) do rejeito de minério de ferro sugere certa similaridade da localização da banda de cisalhamento numérica vs. experimental. Portanto, o modelo MED mostrou-se uma ferramenta capaz de auxiliar na avaliação do comportamento em microescala das interações inter-partículas.

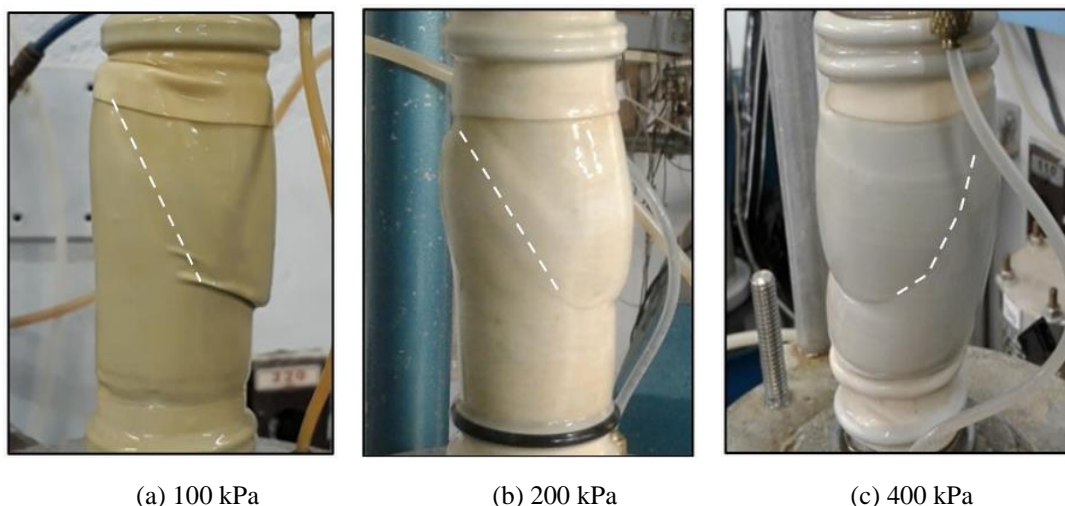


Figura 4-12: Foto dos corpos de prova após finalização dos ensaios triaxiais drenados no rejeito de minério de ferro (Sotomayor, 2018)

A fim de se avaliar o efeito provocada pela banda de cisalhamento no comportamento do rejeito, a porosidade foi monitorada em três regiões distintas da amostra numérica, a qual foi correlacionada posteriormente ao índice de vazios: na banda de cisalhamento ( $e_{banda}$ ), em uma região situada próxima à banda, mas onde a rotação é constantemente nula ( $e_{local}$ ) e na área completa da amostra ( $e_{global}$ ), conforme representado na Figura 4-13.

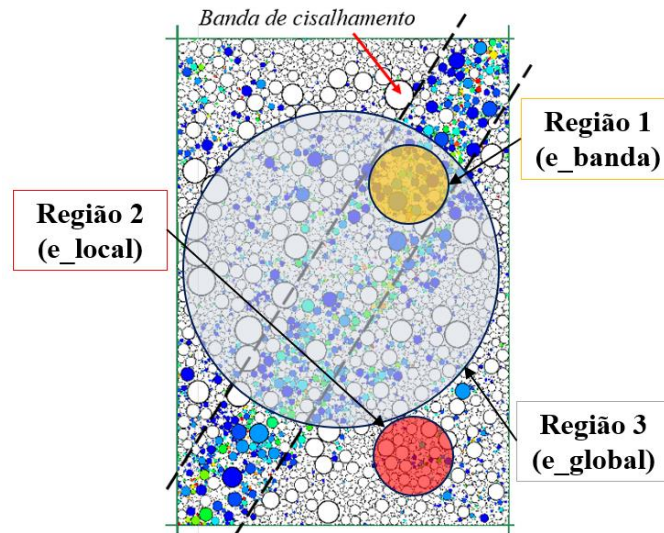


Figura 4-13: Localização das regiões criadas para monitoramento da porosidade

A Figura 4-14, Figura 4-15 e Figura 4-16 apresentam a variação do índice de vazios nas referidas regiões para os ensaios biaxiais drenados nas tensões 100, 200 e 400 kPa, respectivamente.

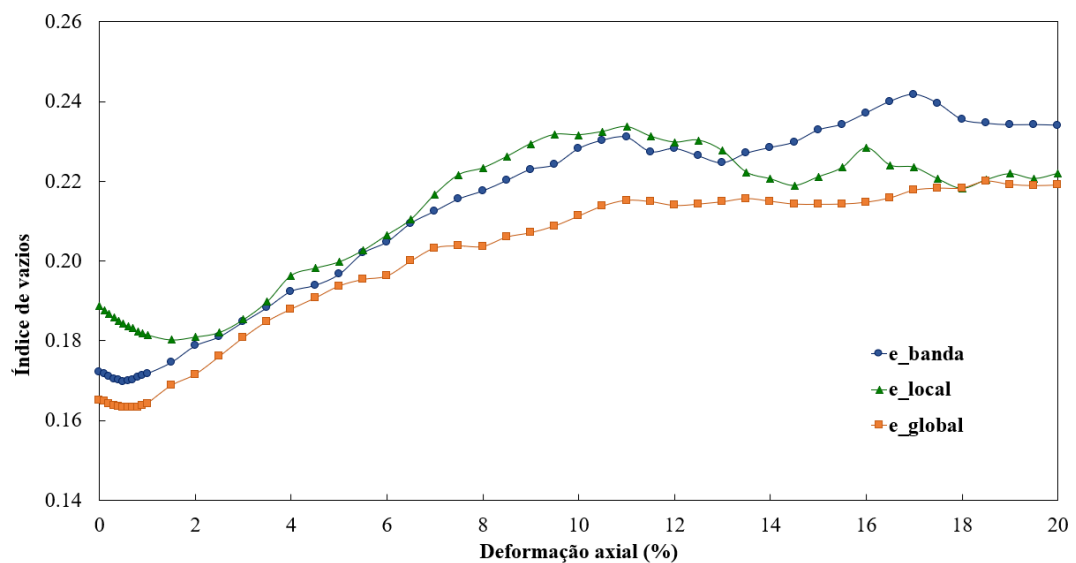


Figura 4-14: Variação do índice de vazios na amostra numérica – 100 kPa

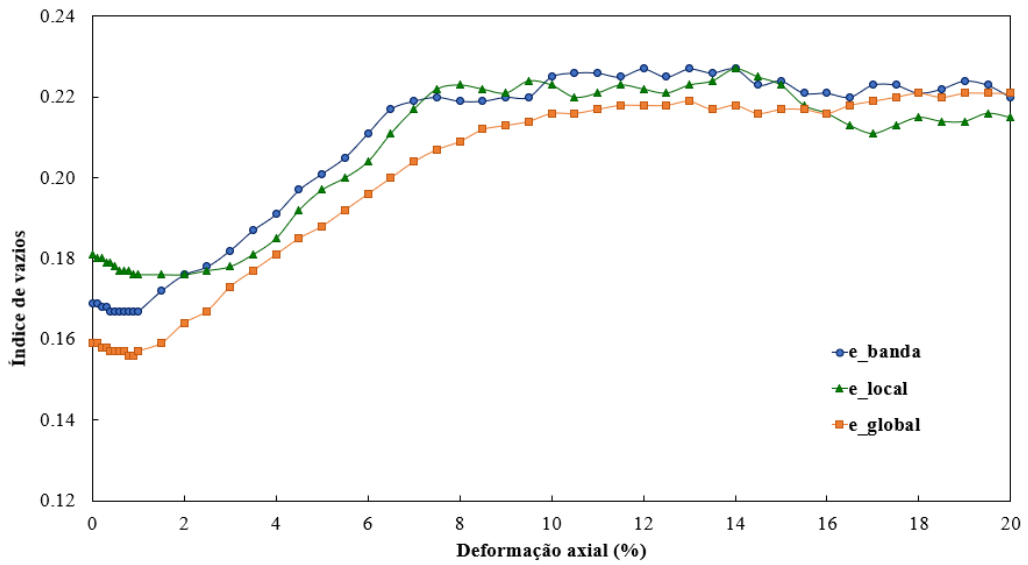


Figura 4-15: Variação do índice de vazios na amostra numérica – 200 kPa

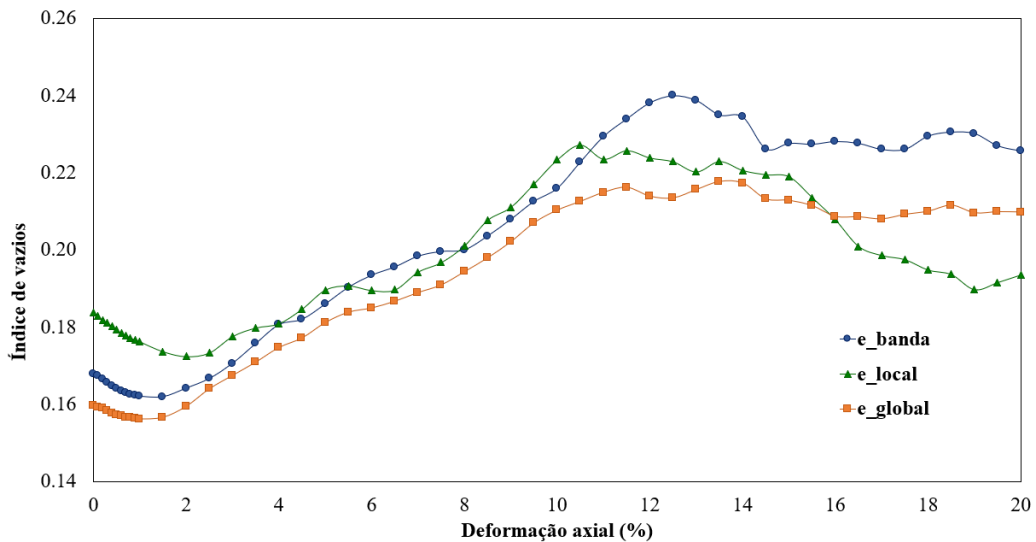


Figura 4-16: Variação do índice de vazios na amostra numérica – 400 kPa

Após a formação da banda de cisalhamento – deformação axial superior a 12% no ensaio 100 kPa e 4,0% para os demais ensaios – os resultados indicaram que o  $e_{banda}$  é superior ao  $e_{local}$ , o que significa que o material é mais fofo na região da banda de cisalhamento do que na vizinhança e que, portanto, nesta região é concentrada uma maior deformação volumétrica associada à dilatância. O  $e_{global}$ , por sua vez, é inferior ao  $e_{local}$  e, portanto, ao  $e_{banda}$ .

Na prática, o  $e_{global}$  representa o índice de vazios calculado (em laboratório) pelos ensaios triaxiais drenados. Logo, a utilização de ensaio triaxiais drenados em amostras em estado compacto a medianamente compacto deve ser evitada quando se tem como objetivo a

definição da Linha do Estado Crítico (LEC), uma vez que o índice de vazios calculado não representa o índice de vazios crítico ( $= e_{banda}$ ).

Neste caso, é importante que sejam adotados preferencialmente os ensaios triaxiais não drenados, ou triaxiais drenados em amostras fofas, como ponto de partida para determinação da LEC, conforme considerado por Cella & Padovani (2021), Jefferies & Been (2016), Castro (1969), e outros autores.

#### 4.2.4 VELOCIDADE DAS PARTÍCULAS

Nas simulações numéricas foi avaliada a evolução do vetor velocidade, a partir da qual é possível verificar o movimento desenvolvido pelas partículas durante o cisalhamento biaxial, conforme representado na Figura 4-17, Figura 4-18 e Figura 4-19.

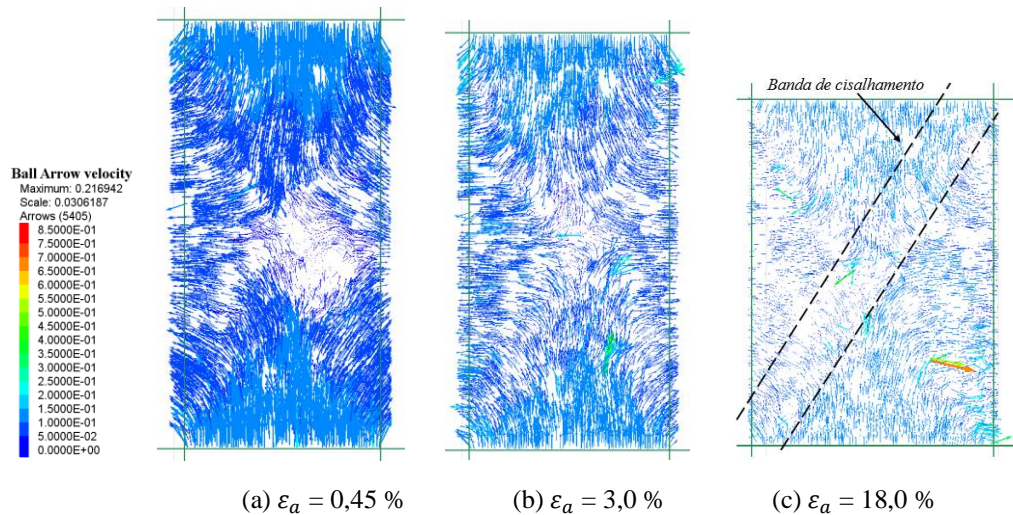


Figura 4-17: Evolução do vetor velocidade – 100 kPa

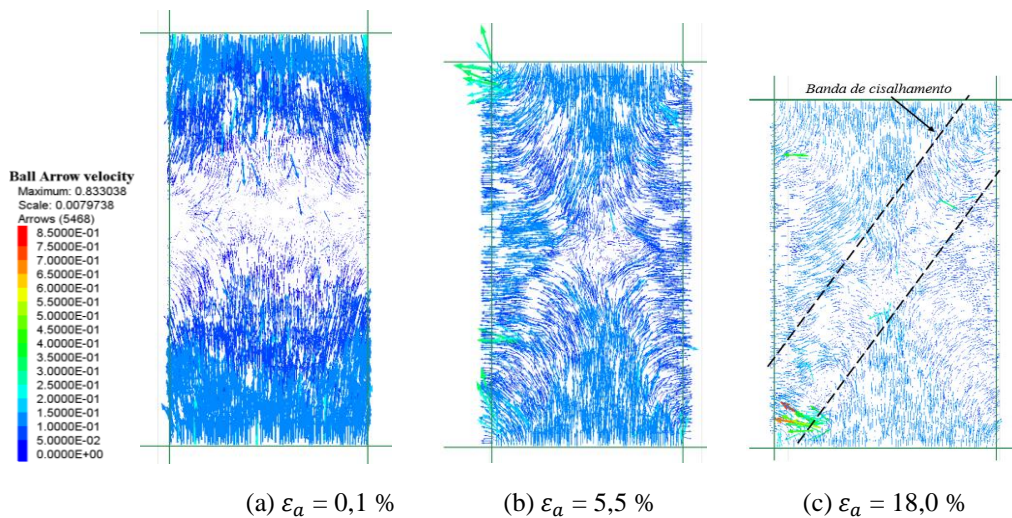


Figura 4-18: Evolução do vetor velocidade – 200 kPa

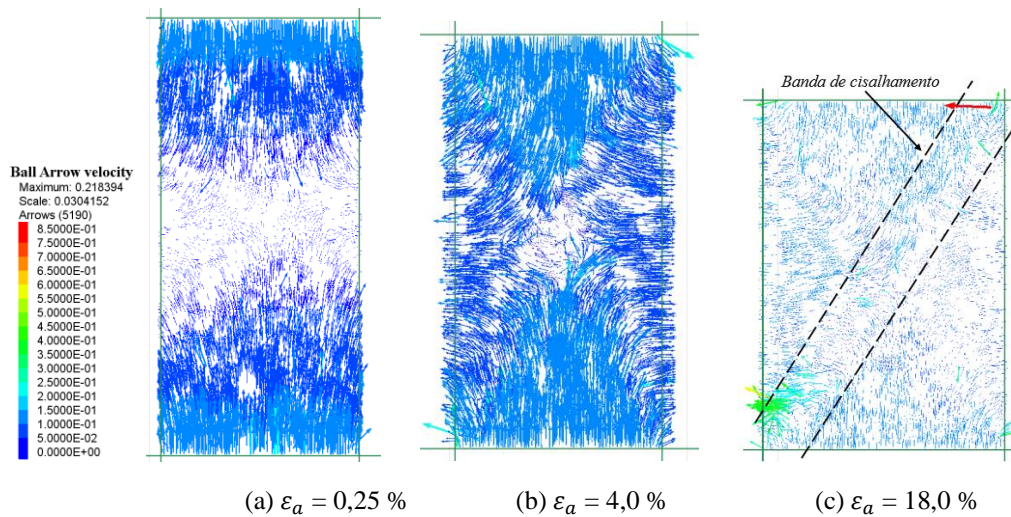


Figura 4-19: Evolução do vetor velocidade – 400 kPa

Para deformação axial de 0,1%, as partículas tendem a deslocarem-se para a zona central da amostra, acompanhando a redução inicial volumétrica (contração) que a amostra apresenta (Figura 4-3). A partir de 2,0 % da deformação axial, a amostra começa a dilatar-se. À medida que a deformação volumétrica aumenta em módulo, os vetores de velocidade tendem a direcionarem-se para as paredes.

Com a formação da banda de cisalhamento, é verificado em geral duas tendências para dos vetores de velocidade, como se fossem dois grandes blocos de deslocamento: i) acima da banda de cisalhamento: os vetores direcionam-se em sentido à parede esquerda; enquanto ii) abaixo da banda de cisalhamento: os vetores estão posicionados em direção a parede direita.

Desse modo, os dois blocos de vetores atuam em direções opostas e estão “separados” pela banda de cisalhamento.

#### 4.2.5 NÚMERO DE COORDENAÇÃO

O número de coordenação ( $Z$ ) é um parâmetro microscópico que permite quantificar o número de contato por partículas e indicar o estado de densidade (fofo ou denso) do sistema de partículas, sendo dado por:

$$Z = \frac{2N_c}{N_p} \quad (4.1)$$

Onde,  $N_c$  é o número total de contatos e  $N_p$  é o número total de partículas. Uma vez que cada ponto de contato é dividido entre duas partículas, o número de contato é multiplicado por 2.

Na Figura 4-20 são apresentados os resultados da evolução do número de coordenação obtidos para os ensaios biaxiais 100, 200 e 400 kPa, os quais indicaram o aumento do número de coordenação com o aumento da tensão confinante aplicada. Portanto, é verificada a maior formação de contatos entre as partículas quando o material é submetido a maiores tensões de confinamento.

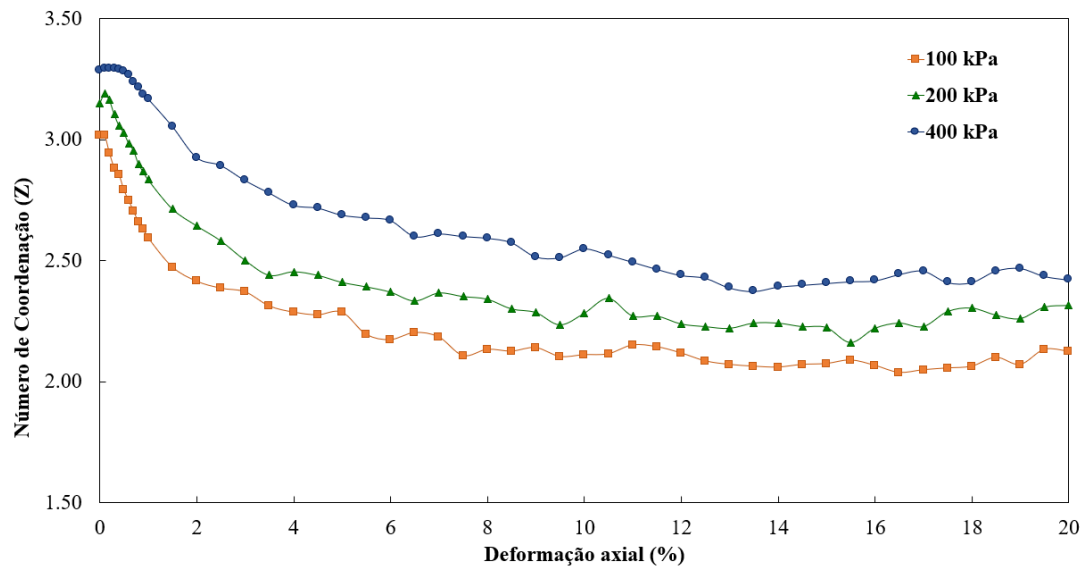


Figura 4-20: Evolução do número de coordenação

### 4.3 ANÁLISES DE SENSIBILIDADE

Para se avaliar a influência de fatores como da resistência ao rolamento, da taxa de carregamento, das fronteiras (paredes) nas simulações MED, foram desenvolvidas análises de sensibilidade para a condição do ensaio biaxial drenado em tensão confinante igual a 200 kPa, conforme descrito nos itens a seguir.

#### 4.3.1 COEFICIENTE DE RESISTÊNCIA AO ROLAMENTO

A influência do coeficiente de resistência ao rolamento  $\mu_r$ , incluído no modelo MED para representar o efeito das irregularidades das partículas, foi avaliada a partir de simulações variando este coeficiente na faixa de 0,1 – onde as partículas apresentam uma maior liberdade de rotação – à 0,8 – onde a rotação é dificultada. A Figura 4-21 apresenta os resultados obtidos em termos de tensão-deformação.

A partir das curvas  $\sigma_d$  vs.  $\varepsilon_a$  (Figura 4-21a), verifica que o aumento de  $\mu_r$  gerou picos mais pronunciados de tensão máxima desviadora ( $\sigma_{d,max}$ ), a qual é atingida sob deformações



axiais maiores. Além disso, os resultados indicaram maior perda de resistência pós pico quando se aumenta a resistência ao rolamento das partículas, embora as perdas de resistência ocorram a deformações axiais médias a grandes.

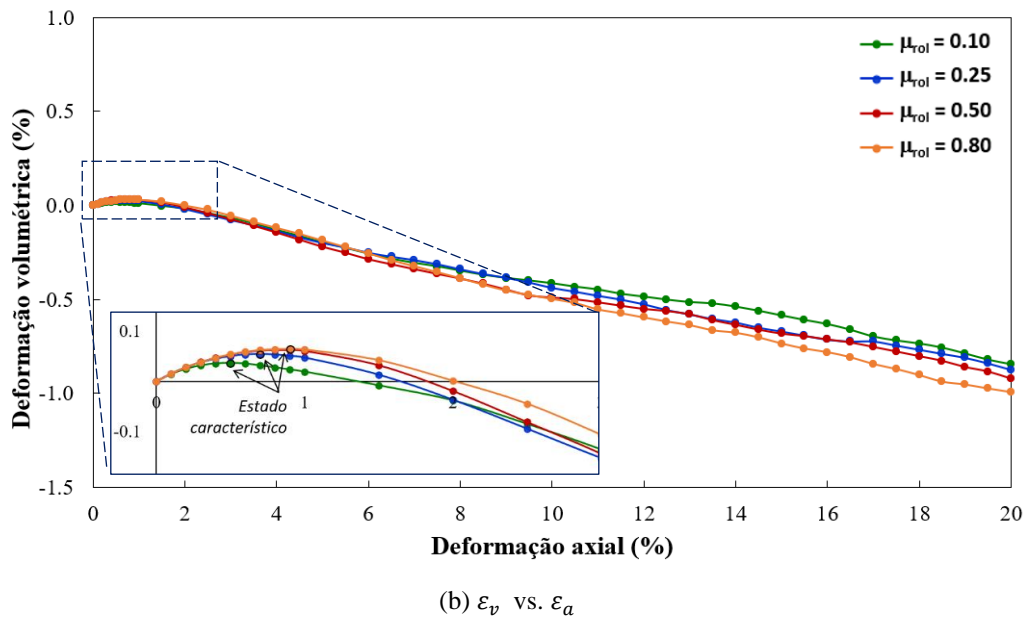
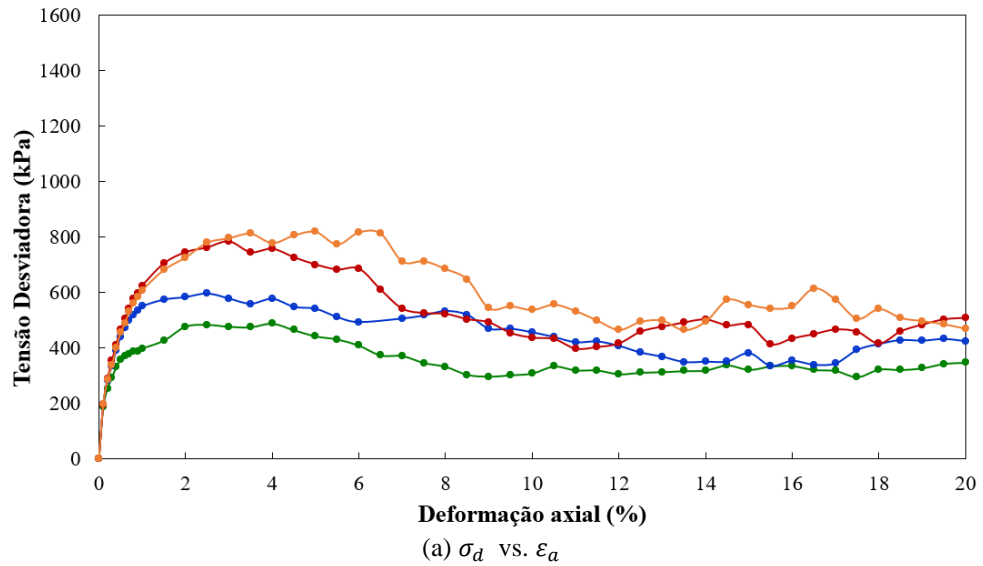


Figura 4-21: Influência de  $\mu_r$  na resposta drenada tensão-deformação

Os resultados da deformação volumétrica (Figura 4-21b) sugerem, com o aumento de  $\mu_r$ , uma contração volumétrica inicial maior e mais prolongada, seguida de uma maior dilatação. Tal comportamento é refletido no índice de vazios da amostra, cuja variação é representada na Figura 4-22, onde a curva  $e$  vs.  $\varepsilon_a$  correspondente a maior resistência ao rolamento apresenta o menor e o maior valores de índice de vazios observados para as simulações desenvolvidas.

Portanto, foi verificado que a variação volumétrica da amostra, em especial a tendência à dilatação, pode se correlacionar diretamente com a resistência ao rolamento.

Os resultados obtidos mostram-se coerentes aqueles verificados experimentalmente por Oda & Kazama (1998) e Oda et al., (1982), os quais concluíram que o comportamento de dilatação e da resistência ao cisalhamento de pico em materiais granulares são controlados de modo dominante pelo rolamento das partículas.

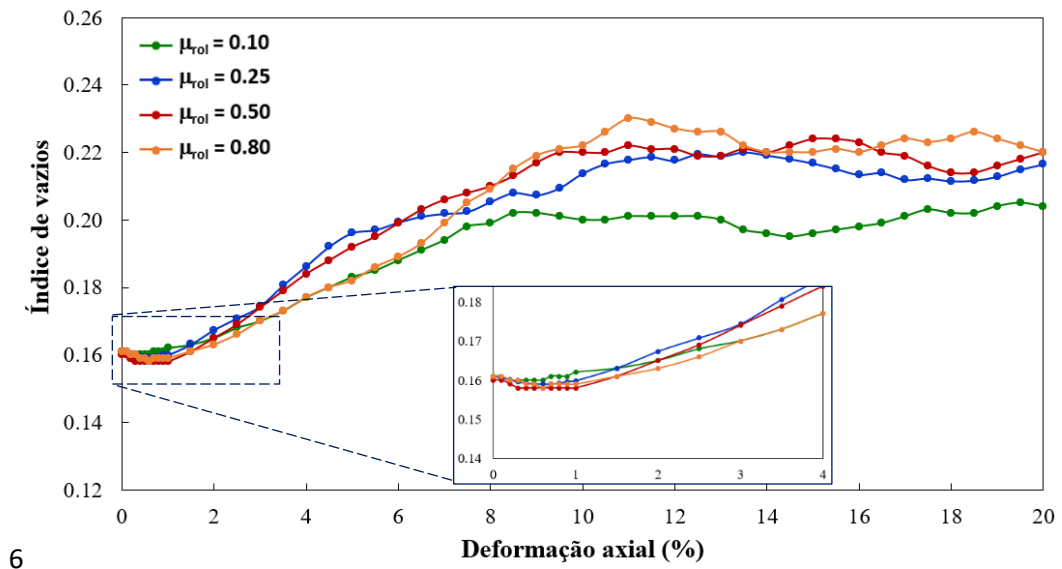


Figura 4-22: Influência de  $\mu_r$  no índice de vazios

Os resultados de  $\varepsilon_v$  vs.  $\varepsilon_a$  indicaram ainda uma mudança do estado característico, representado pelos círculos pretos na Figura 4-21b, com a variação da resistência ao rolamento. O estado característico representa o ponto de transição entre a contração e a dilatação do material, onde a variação volumétrica é nula, conforme identificado experimentalmente por Lade & Ibsen (1997) e Loung (1980).

Em termos de resistência ao cisalhamento, foi verificado o aumento do ângulo de atrito efetivo ( $\phi'$ ) da amostra por efeito do aumento de  $\sigma_{d,máx}$  com o aumento de  $\mu_r$ , conforme representado na Figura 4-23. Entretanto, o ganho de resistência mostrou-se menos significativo para valores elevados de  $\mu_r$ , isto é,  $\mu_r > 0,5$ . Neste caso, para  $\mu_r = 0,5$  e  $\mu_r = 0,8$  ocorre uma menor diferença entre  $\sigma_{d,máx}$  atingido pelas curvas  $\sigma_d$  vs.  $\varepsilon_a$ , que pode ser justificado pelo fato das partículas já estarem submetidas a uma resistência ao rolamento significativamente elevada a partir de valores de  $\mu_r > 0,5$ .

A Figura 4-23 mostra que a curva de resistência efetiva tende a uma assíntota a partir de  $\mu_r = 0,5$ .

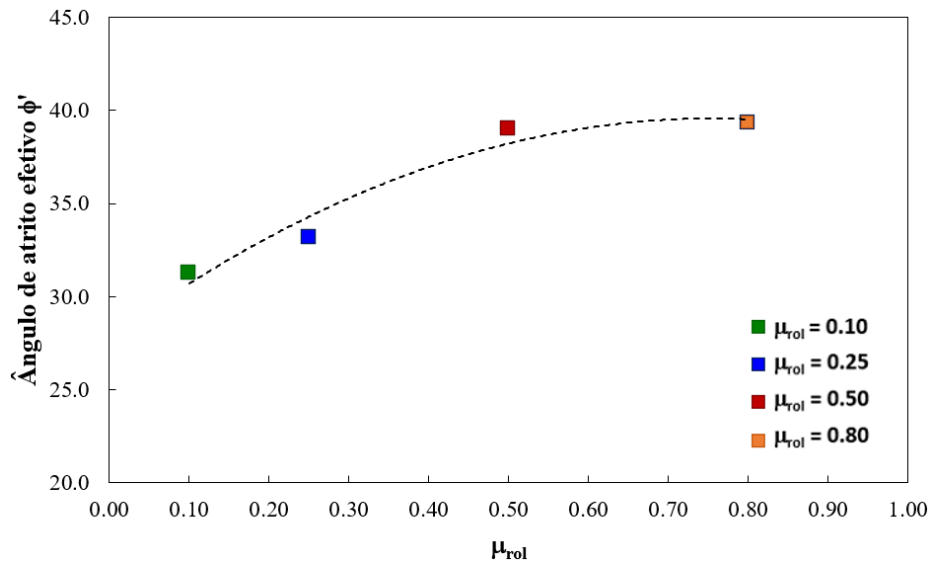


Figura 4-23: Influência de  $\mu_{rol}$  no ângulo de atrito efetivo

Os resultados obtidos para o número de coordenação, Figura 4-24, e a força de contato, Figura 4-25, indicaram a redução do número de pontos contatos (já que reduz  $Z$ ), com o aumento da resistência ao rolamento.

Porém, observa-se que nestes são formadas interações mais fortes entre partículas, isto é, forças de maior magnitude, representadas na Figura 4-24 pelas linhas mais espessas e de coloração mais quente (laranja à vermelho) na escala de cores.

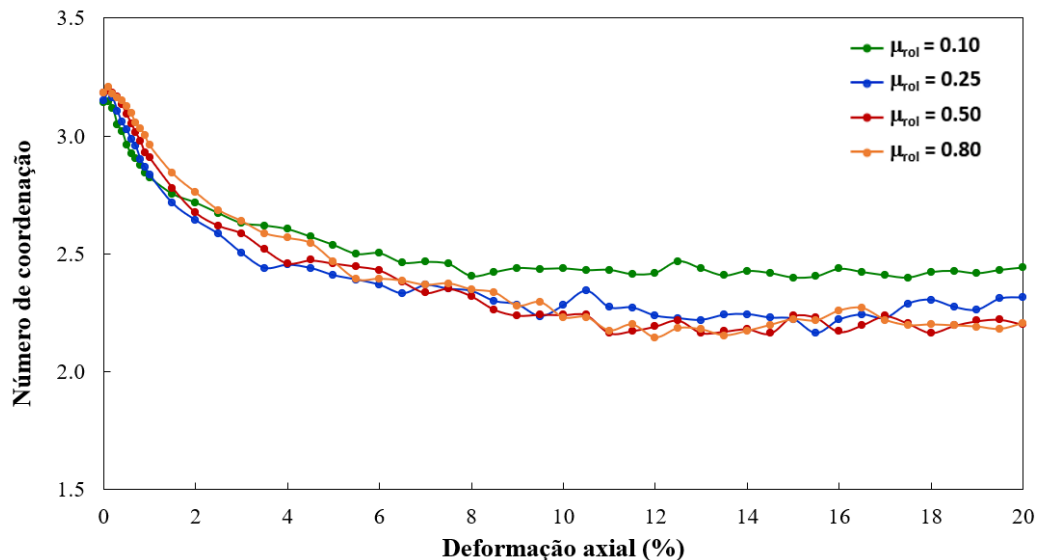


Figura 4-24: Influência de  $\mu_r$  no número de coordenação

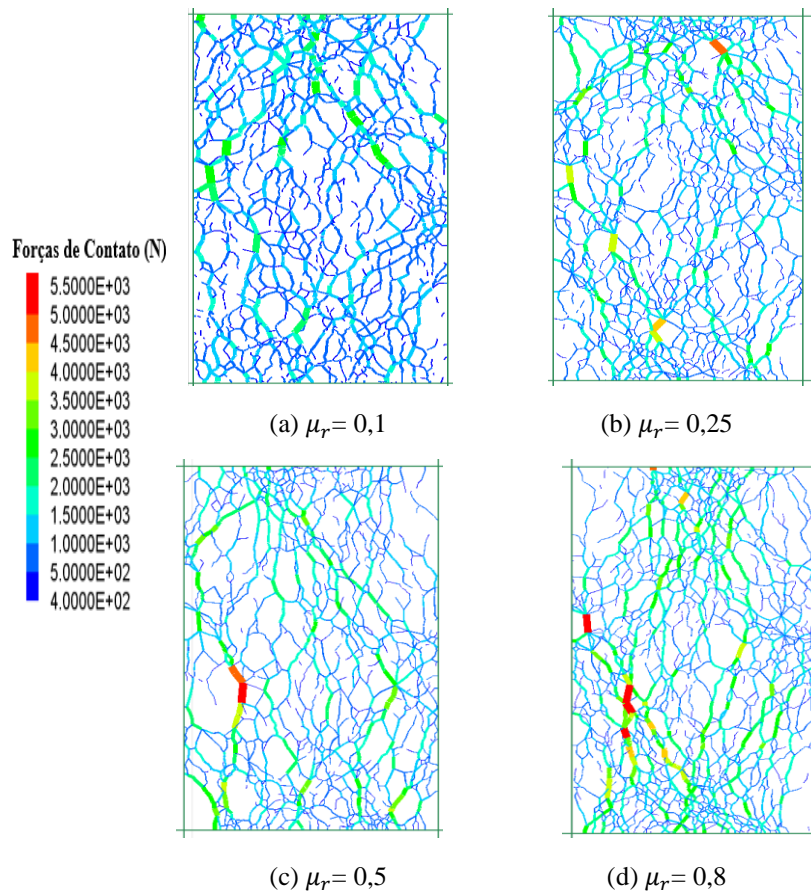


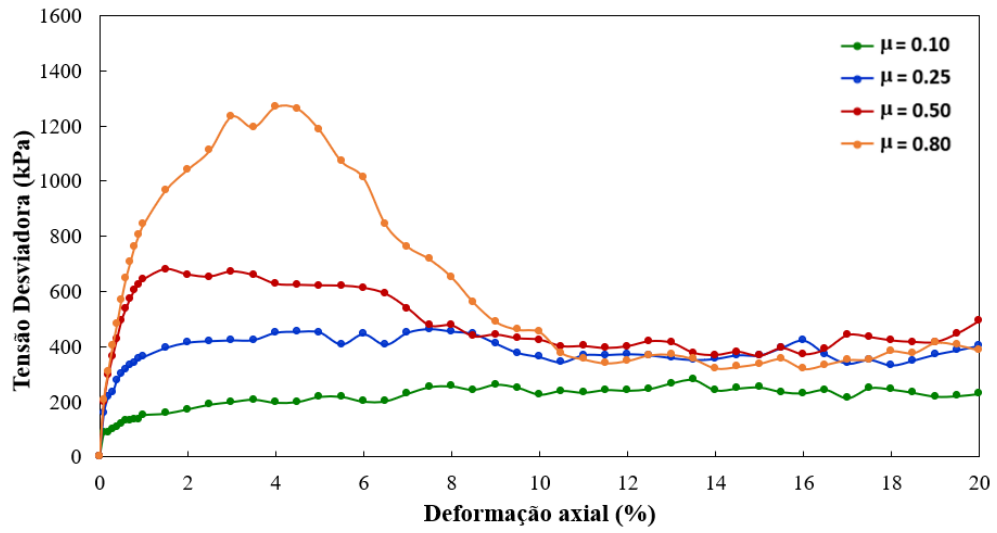
Figura 4-25: Influência de  $\mu_r$  nas forças de contato

#### 4.3.2 COEFICIENTE DE ATRITO ENTRE PARTÍCULAS

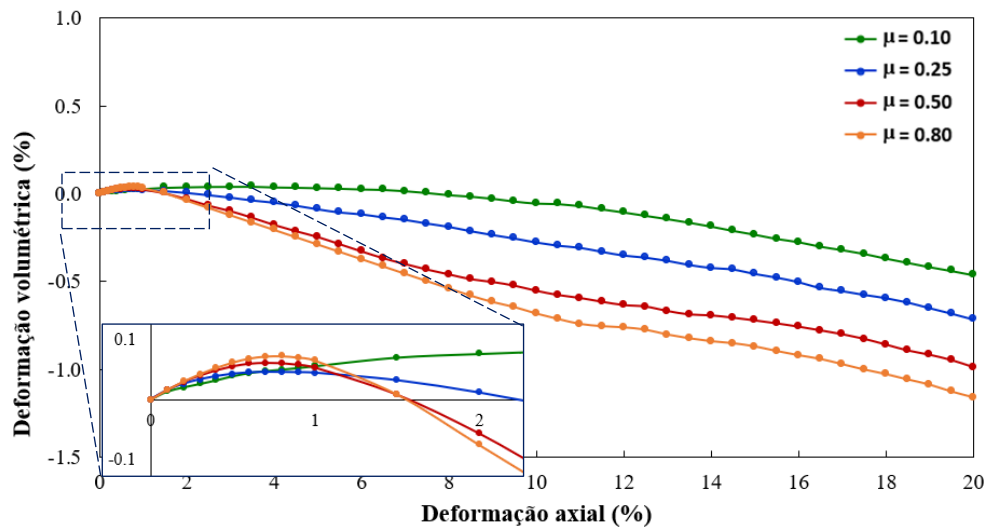
A influência do coeficiente de atrito  $\mu$ , relacionado a resistência ao atrito quando ocorre o deslizamento de uma partícula em relação a outra, foi avaliada a partir de simulações variando este coeficiente na faixa de 0,1 – onde as partículas apresentam uma menor resistência ao deslizamento – à 0,8 – onde o deslizamento entre partículas é mais dificultado.

A Figura 4-26 apresenta o efeito de  $\mu$  no comportamento macroscópico da amostra.

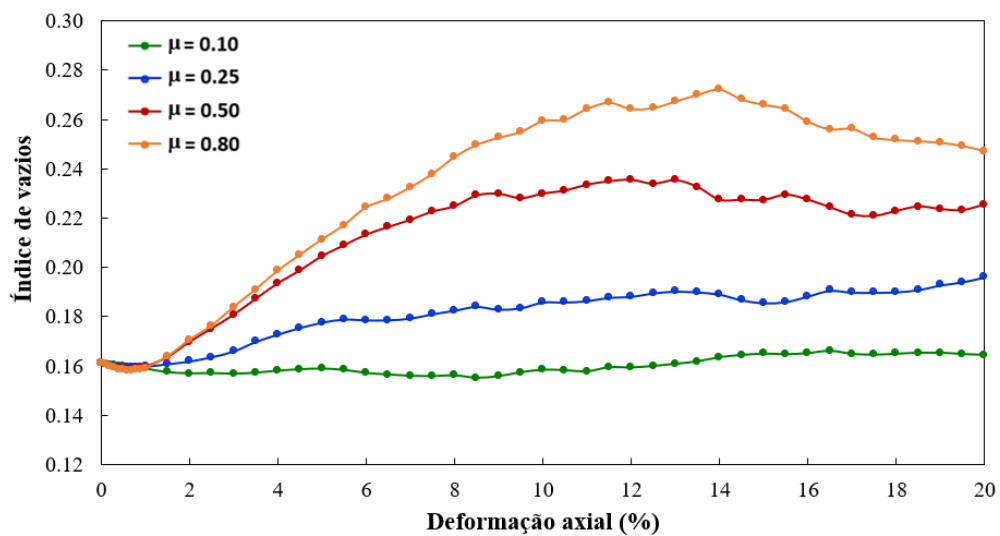
Importante mencionar que para as simulações, a variação do coeficiente de atrito contemplou apenas a etapa de cisalhamento drenado, visto que a modificação deste parâmetro na fase de empacotamento das partículas implicaria na geração de amostras mais fofas ou mais densas, com densidade relativa fora da faixa adotada para este trabalho (60-65 %). Conforme descrito por Cundall (1998), o coeficiente de atrito representa um parâmetro microscópico utilizado para controlar a porosidade final das amostras numéricas, onde  $\mu=0$  gera amostras mais densas, enquanto  $\mu=1$  produz amostras mais fofas.



(a)  $\sigma_d$  vs  $\varepsilon_a$



(b)  $\varepsilon_v$  vs  $\varepsilon_a$



(c)  $e$  vs  $\varepsilon_a$

Figura 4-26: Influência de  $\mu$  na resposta drenada da amostra numérica

A partir dos resultados obtidos verificou-se que, ao se aumentar a resistência ao deslizamento ( $\mu$ ), as partículas tendem a ficar mais afastadas uma relação à outra, gerando uma maior tendência à dilatação volumétrica e o consequente aumento do índice de vazios.

Desse modo, são mobilizados valores maiores de  $\sigma_{d,máx}$  e, portanto, uma maior resistência ao cisalhamento e tendência a maiores perdas de resistência pós-pico. Ao passo que, quando se utiliza valores mais baixos para  $\mu$ , que gera maior facilidade de deslizamento e aproximação das partículas, verifica-se uma menor tendência a expansão volumétrica e, portanto, índice de vazios mais baixos.

Com isso, são verificadas curvas  $\sigma_d$  vs.  $\varepsilon_a$  com picos menos pronunciados e com comportamento tipicamente dúctil (com perdas de resistência pós pico pouco significativas).

### 4.3.3 TAXA DE CARREGAMENTO

Nas simulações MED, a seleção da taxa de carregamento a ser adotada representa um fator-chave para conseguir reproduzir adequadamente a resposta mecânica de materiais granulares. Segundo O'Sullivan (2011), esta deve ser suficientemente pequena para se assegurar a condição quase-estática do estado de tesões da amostra. Entretanto, taxas muito pequenas podem implicar em grandes esforços computacionais.

Para se avaliar a sensibilidade dos resultados em relação a variação da taxa de carregamento, uma série de simulações foram realizadas para a faixa de valores de  $0,75 \text{ s}^{-1}$  à  $6,0 \text{ s}^{-1}$ .

A Figura 4-27 apresentam os resultados obtidos em termos da curva tensão desviadora  $\sigma_d$  pela deformação axial  $\varepsilon_a$ . Estes indicaram o aumento de  $\sigma_{d,máx}$  e, portanto, da resistência ao cisalhamento com o aumento da taxa de carregamento. Observou também que  $\sigma_{d,max}$  apresentou valores entre 510 e 590 kPa, exceto para o ensaio executado a taxa de  $6,0 \text{ s}^{-1}$ , em que foram atingidos valores superiores a 600 kPa (aprox. 650 kPa).

Os resultados da deformação volumétrica versus  $\varepsilon_a$ , são representados na Figura 4-28. Ao contrário da resistência ao cisalhamento, foi verificada uma menor sensibilidade da deformação volumétrica da amostra devido variação da taxa de carregamento.

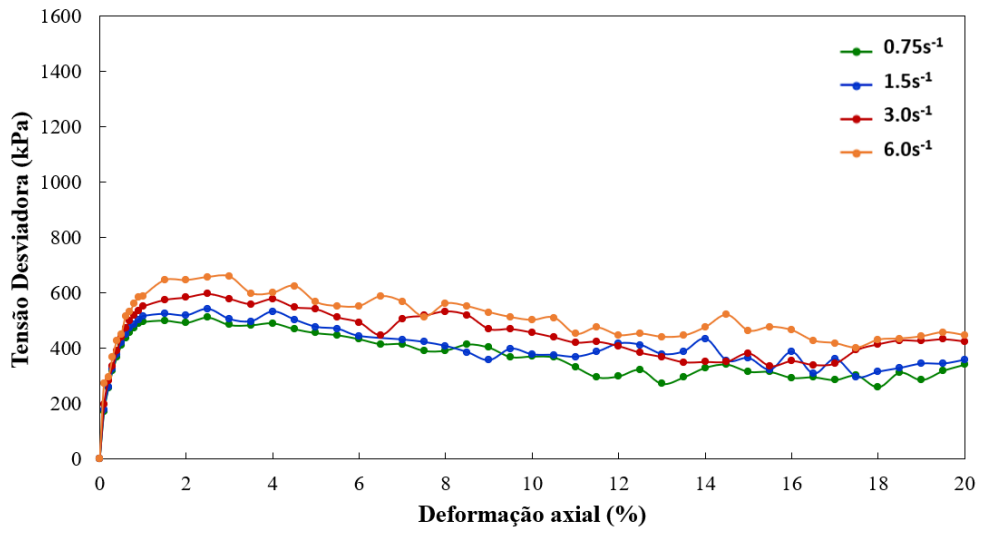


Figura 4-27: Influência da taxa de carregamento na curva tensão desviadora x deformação axial (200 kPa)

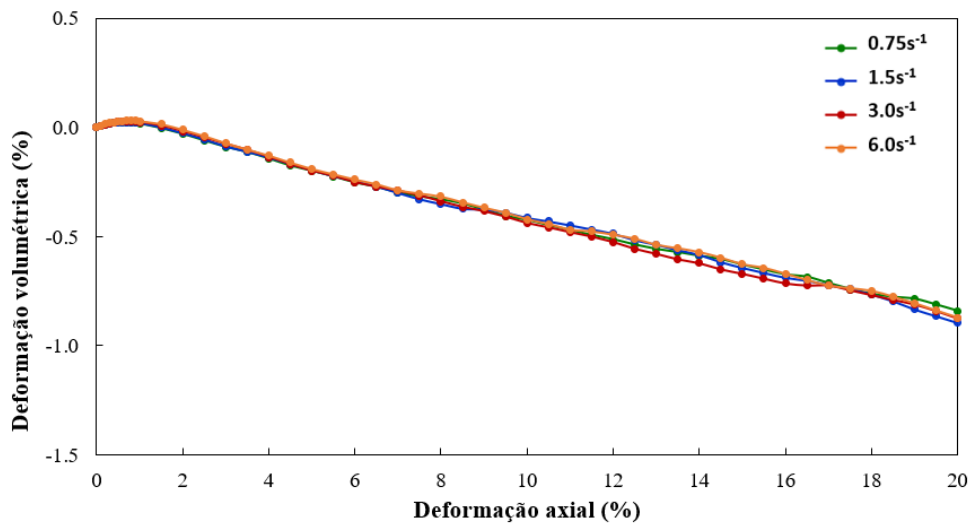


Figura 4-28: Influência da taxa de carregamento na deformação volumétrica x deformação axial (200 kPa)

## 5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O presente trabalho visou avaliar o comportamento mecânico de rejeitos de mineração a partir da simulação numérica de ensaios triaxiais drenados executados em laboratório em amostras de rejeito arenoso de minério de ferro, utilizando o Método dos Elementos Discretos. O modelo bidimensional foi desenvolvido com o auxílio da ferramenta computacional *Particle Flow Code* (PFC2D), versão 7.0, da empresa Itasca Consulting Group (2021a).

Para a simulação dos ensaios de compressão biaxial drenada para as tensões de confinamento de 100, 200 e 400 kPa, foi gerada uma amostra numérica composta por 5468 partículas circulares utilizando a técnica *up-scaling*. Desse modo, as partículas apresentam uma curva de distribuição granulométrica proporcional a do rejeito de minério de ferro, porém 10 vezes maior, para maior eficiência computacional, sem, contudo, influenciar na resposta macroscópica do modelo. Além disso, a amostra numérica foi gerada com uma densidade relativa entre 60-65 %, conforme faixa de valores empregada para os ensaios de laboratório no rejeito de mineração.

Embora as simulações realizadas considerem amostra formada por partículas circulares, a utilização do modelo de contato *Rolling Resistance Linear Contact Model* (RRLCM) permitiu representar o efeito da irregularidade tipicamente existente nos grãos do rejeito de minério de ferro. Para isso, foi necessário realizar a calibração do modelo, em que as propriedades micromecânicas da amostra numérica, tais como a rigidez normal, de cisalhamento, resistência ao rolamento, e o coeficiente de atrito de rolamento. Por representar uma etapa trabalhosa e sem um procedimento padrão estabelecido por trabalhos nesta área, a pesquisa adotou uma metodologia própria a qual está sendo sugerida para calibração de simulações MED de rejeitos utilizando o RRLCM.

A seguir são apresentadas as principais considerações acerca dos resultados obtidos a partir das simulações desenvolvidas para este trabalho.

### 5.1 CONCLUSÕES

#### 5.1.1 COMPORTAMENTO MACROSCÓPICO

- Os resultados obtidos indicam que o modelo conseguiu reproduzir uma resposta tensão-deformação coerente aos dados experimentais dos ensaios de laboratório. Além disso, foi observado um bom ajuste dos valores de resistência ao cisalhamento



(pico) obtidos numericamente à envoltória de resistência efetiva definida por Sotomayor (2018) para o rejeito de minério de ferro;

- Algumas limitações foram verificadas para o modelo, como: i) a reprodução da variação da deformação volumétrica e ii) a representação da taxa de perda de resistência pós-pico apresentadas pelas amostras experimentais. Fatores relacionados às simplificações adotadas para elaboração do modelo, como o uso de modelo bidimensional (2D) e fronteiras rígidas, além das diferentes condições de contorno presentes em ensaios de laboratório, podem ter contribuído para estas diferenças de resultados;

### 5.1.2 COMPORTAMENTO MICROSCÓPICO

- Para a avaliação das interações entre partículas existentes durante as simulações dos ensaios, foram utilizadas medidas físicas microscópicas, como a rede de forças de contato, o sistema de colunas de carregamento, a rotação das partículas, os vetores de velocidade e o número de coordenação, os quais foram relacionados à resposta macroscópica do rejeito;
- Em relação as forças de contato, verificou-se que à medida que o nível de deformação aumenta e a amostra se dilata, as forças de contato reduzem em quantidade e magnitude. Além disso, a distribuição das forças de contato de maior magnitude começa a ficar mais alinhada à direção da tensão principal, que atua verticalmente, e majoritariamente concentrada na porção central da amostra;
- A partir dos resultados obtidos para as colunas de carregamento, que representam as partículas que recebem a maior parcela do carregamento sob o qual a amostra está sendo imposta, observa-se a formação de uma rede de colunas alinhadas à mesma direção das forças de contato de maior magnitude. Com o aumento da tensão de confinamento (100-400 kPa), esta rede fica mais intensa, isto é, é formada por um menor número de colunas e estas estão submetidas a uma maior tensão axial;
- Foi possível identificar a formação de bandas de cisalhamento, bem como sua posição, inclinação e evolução durante o cisalhamento da amostra, a partir da associação com a região de ocorrência das maiores rotações das partículas. A comparação dos resultados obtidos com os registros fotográficos dos corpos de prova rompidos dos ensaios de laboratório sugere similaridade nas localizações indicadas pelo modelo;

- Os vetores velocidade indicaram que, com a formação da banda de cisalhamento, as partículas tendem a deslocar em duas direções diferentes e com sentidos opostos, formando uma espécie de dois blocos de deslocamento separados pela região da banda de cisalhamento;
- Além do efeito no vetor velocidade, verificou-se que a formação da banda de cisalhamento gera uma região onde a amostra está em um estado mais fofo, isto é, com índice de vazios mais altos que o restante da amostra. Estes resultados reforça o cuidado necessário da especificação adequada da campanha de ensaios de laboratório quando se tem como objetivo a determinação da Linha do Estado Crítico (LEC). Isto porque, a utilização de amostras em estado denso ou medianamente compacto (susceptíveis a formação de banda de cisalhamento) pode mascarar o índice de vazios crítico e, gerar um traçado inadequado da LEC;
- O número de coordenação ( $Z$ ) foi utilizado para verificar os contatos que foram gerados ou “perdidos” pela interação das partículas durante as simulações numéricas. Foi observado o aumento de  $Z$  com o aumento da tensão confinante aplicada, o que sugere uma maior formação de contatos entre as partículas quando o material é submetido a maiores tensões de confinamento. Além disso, para uma mesma tensão de confinamento, foi verificado que o número de contatos tende a se reduzir com a expansão volumétrica da amostra.

### 5.1.3 ANÁLISES DE SENSIBILIDADE

- As simulações realizadas variando o coeficiente de resistência ao rolamento,  $\mu_r$ , entre 0,1 e 0,8 indicaram o aumento da tensão máxima desviadora e, conseqüentemente, aumento da resistência ao cisalhamento (pico) quando se tem uma menor facilidade de rotação das partículas (maior  $\mu_r$ ). Além disso, uma maior perda de resistência pós-pico do material foi observada. As simulações sugerem ainda que a variação volumétrica da amostra, em especial a tendência à dilatação, correlaciona-se diretamente com a resistência ao rolamento, isto é, quanto maior  $\mu_r$ , maior a expansão volumétrica sofrida pela amostra. O estado característico do material também é alterado com a variação do coeficiente de resistência ao rolamento. Os resultados obtidos para o número de coordenação, e a força de contato indicaram a redução do número de pontos de contatos, sendo formadas, porém interações mais fortes entre partículas, com o aumento da resistência ao rolamento;

- As análises de sensibilidade para o coeficiente de atrito,  $\mu$ , sugerem que ao se aumentar  $\mu$ , as partículas tendem a ficar mais afastadas uma relação à outra, gerando: i) maior tendência à dilatação volumétrica; ii) maiores índices de vazios; iii) mobilização de valores maiores de  $\sigma_{d,máx}$ ; iv) maior resistência ao cisalhamento; e v) tendência a apresentar maior perda de resistência pós-pico;
- As simulações realizadas variando a taxa de carregamento indicaram como consequente efeito o aumento da tensão  $\sigma_{d,max}$  e da resistência ao cisalhamento quando se aumenta a taxa de carregamento.

## 5.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para realização de futuras pesquisas, são apresentadas as seguintes recomendações:

- Realizar simulações empregando amostras numéricas com diferentes densidades relativas;
- Realizar simulações para ensaios em condição não drenada;
- Realizar simulações para ensaios em condição cíclica para estudo de liquefação dinâmica;
- Comparar os resultados obtidos pelo modelo com simulações que utilizem amostra de rejeito reforçado com a adição de fibras;
- Comparar os resultados obtidos pelo modelo para o rejeito de minério de ferro com simulações que considerem amostras numéricas representativas de rejeitos finos;
- Comparar os resultados obtidos pelo modelo de paredes rígidas com um modelo que utilize fronteiras periódicas;
- Comparar os resultados obtidos para o modelo 2D com um modelo 3D;

## REFERÊNCIAS

- AI, J., CHEN, J. F., ROTTER, J. M., & OOI, J. Y. (2011). Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technology*, 206(3), 269-282.
- AJAMZADEH, M. R., SARFARAZI, V., HAERI, H., & DEHGHANI, H. (2018). The effect of micro parameters of PFC software on the model calibration. *Smart Struct. Syst*, 22(6), 643-662.
- BARDET, J. AND J. PROUBET. (1991). A numerical investigation of the structure of persistent shear bands in idealized granular material. *Géotechnique* 41, 599–613.
- BARNETT, N., RAHMAN, M. M., KARIM, M. R., & NGUYEN, H. B. K. (2020). Evaluating the particle rolling effect on the characteristic features of granular material under the critical state soil mechanics framework. *Granular Matter*, 22, 1-24.
- BATHE, K. J., & WILSON, E. L. (1976). *Numerical methods in finite element analysis*. Englewood Cliffs, NJ, 2.
- BEEN, K., & JEFFERIES, M. G. (1985). A state parameter for sands. *Géotechnique*, 35(2), 99-112.
- BEHRINGER, R. P., DANIELS, K. E., MAJMUDAR, T. S., & SPERL, M. (2008). Fluctuations, correlations and transitions in granular materials: statistical mechanics for a non-conventional system. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 366(1865), 493-504.
- CASAGRANDE, A. (1936). Characteristics of cohesionless soils affecting the stability of slopes and earth fills. *J. Boston Society of Civil Engineers*, 23(1), 13-32.
- CASTRO, G. (1969). *Liquefaction of sands*. Ph. D. Thesis, Harvard University, Mass.
- CELLA, P.R.C., PADOVANI, F.A. 2021. Five Brazilian tailings – from laboratory and field data towards safer design criteria. *Tailings 2021*.
- CHANG, L. Y., & CHEN, Q. (2018). An efficient approach to generating DEM samples having coincident void ratios with actual sand. *Geomechanics and Geoengineering*, 13(3), 159-167.
- CUNDALL, P. A. (1988). Computer simulations of dense sphere assemblies. In *Studies in Applied Mechanics* (Vol. 20, pp. 113-123). Elsevier.
- CUNDALL, P. A., & STRACK, O. D. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, 29(1), 47-65.
- DE BONO, J. P., & MCDOWELL, G. R. (2018). Micro mechanics of drained and undrained shearing of compacted and overconsolidated crushable sand. *Géotechnique*, 68(7), 575-589.

- DESRUES, J., CHAMBON, R., MOKNI, M., & MAZEROLLE, F. (1996). Void ratio evolution inside shear bands in triaxial sand specimens studied by computed tomography. *Géotechnique*, 46(3), 529-546.
- DIAMBRA, A., IBRAIM, E., WOOD, D. M., & RUSSELL, A. R. (2010). Fibre reinforced sands: experiments and modelling. *Geotextiles and geomembranes*, 28(3), 238-250.
- DING, X., MA, T., & HUANG, X. (2019). Discrete-element contour-filling modeling method for micromechanical and macromechanical analysis of aggregate skeleton of asphalt mixture. *Journal of Transportation Engineering, Part B: Pavements*, 145(1), 04018056.
- DRESCHER, A. (1976). An experimental investigation of flow rules for granular materials using optically sensitive glass particles. *Géotechnique*, 26(4), 591-601.
- FANG, C., GONG, J., NIE, Z., LI, B., & LI, X. (2021). DEM study on the microscale and macroscale shear behaviours of granular materials with breakable and irregularly shaped particles. *Computers and Geotechnics*, 137, 104271.
- FERREIRA, C. A. (2010). Estudo do Comportamento Mecânico de Solos Reforçados com Fibras empregando o Método de Elementos Discretos. Dissertação de Mestrado, PUC, Rio de Janeiro, RJ, 108p.
- GONG, L., NIE, L., LIU, C., & XU, Y. (2020). Modelling triaxial tests on fibre-reinforced sands with different fibre orientations using the discrete element method. *KSCE Journal of Civil Engineering*, 24, 2268-2280.
- GU, X., HU, J., & HUANG, M. (2017). Anisotropy of elasticity and fabric of granular soils. *Granular Matter*, 19, 1-15.
- GU, X., HUANG, M., & QIAN, J. (2013). DEM investigation on the evolution of microstructure in granular soils under shearing. *Springer*, 16:91-106.
- GU, X., ZHANG, J., & HUANG, X. (2020). DEM analysis of monotonic and cyclic behaviors of sand based on critical state soil mechanics framework. *Computers and Geotechnics*, 128: 103787.
- HUANG, X., HANLEY, K. J., O'SULLIVAN, C. & KWOK, C. Y. (2014). Exploring the influence of interparticle friction on critical state behaviour using DEM. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 38(12): 1276-1297.
- Itasca (2021a). Itasca's Particle Flow Code Documentation PFC 7.0.
- Itasca Consulting Group (2021b). Memorandum: Material-Modeling Support for PFC [fistPkg7.2]. Minneapolis.

- IWASHITA, K., & ODA, M. (1998). Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM. *Journal of engineering mechanics*, 124(3), 285-292.
- JEFFERIES, M., & KEN B. (2016). *Soil Liquefaction: A Critical State Approach*. CRC Press, 2, 713p.
- JENSEN, R. P., EDIL, T. B., BOSSCHER, P. J., PLESHA, M. E., & KAHLA, N. B. (2001). Effect of particle shape on interface behavior of DEM-simulated granular materials. *International Journal of Geomechanics*, 1(1), 1-19.
- KODICHERLA, S. K. (2021). Exploring the mechanical behaviour of granular materials considering particle shape characteristics: a discrete element investigation. PhD Thesis, The University of Liverpool, Liverpool, United Kingdom, 243 p.
- KODICHERLA, S. P. K., GONG, G., WILKINSON, S. (2023). DEM simulations of critical state behaviour of granular materials under various drained triaxial stress path tests. *Particuology*.
- LADE, P. V. & YAMAMURO, J. A. (1996). Undrained sand behaviour in axisymmetric tests at high pressures. *Journal Geotech. & Geoenviron. ASCE*. 122 (2): 120-129.
- LADE, P.V., IBSEN, L.B. (1997) A study of the phase transformation and characteristic lines of sand.
- LADE, P. V., & YAMAMURO, J. A. (1996). Undrained sand behavior in axisymmetric tests at high pressures. *Journal of Geotechnical Engineering*, 122(2), 120-129.
- LAMBE, T. W. (1951). *Soil testing for engineers* (Vol. 72, No. 5, p. 406). LWW.
- LEE, S. J., HASHASH, Y. M., & Nezami, E. G. (2012). Simulation of triaxial compression tests with polyhedral discrete elements. *Computers and Geotechnics*, 43, 92-100.
- LUONG, M. P. (1980). Stress-strain aspects of cohesionless soils under cyclic and transient loading. In *Proc., Int. Symp. on Soils under Cyclic and Transient Loading*, 1, 315-324. Rotterdam, The Netherlands: Balkema.
- MAJMUDAR, T.S. & BEHRINGER, R. P. (2005). Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, vol 435, 1079-1082.
- NG, T., & DOBRY, R. (1994). Numerical simulations of monotonic and cyclic loading of granular soil. *Journal Geotechnical of Engineering*, 1994, 120:388-403.
- NGUYEN, H. B. K., RAHMAN, M. M., & FOURIE, A. B. (2020). Effect of particle shape on constitutive relation: DEM study. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, ASCE*, 146(7): 04020058.

- NGUYEN, H. B. K., RAHMAN, M. M., & FOURIE, A. B. (2021). The critical state behavior of granular material in triaxial and direct simple shear condition: a DEM approach. *Computers and Geotechnics*, 138, 104325.
- NGUYEN, H.B.K., RAHMAN, M.M., & FOURIE, A.B. (2018). Characteristic behavior of drained and undrained triaxial compression tests: DEM study. *Journal Geotechnical of Engineering*, 144(9): 04018060-12.
- O'SULLIVAN, C., & BRAY, J. D. (2004). Selecting a suitable time step for discrete element simulations that use the central difference time integration scheme. *Engineering Computations*, 21, 278–303.
- O'SULLIVAN, C. (2011). *Particulate discrete element modelling: a geomechanics perspective*. CRC Press, (4), 574 p.
- ODA, M. (1972). Initial fabrics and their relations to the mechanical properties of granular materials. *Soils and Foundations* 12 (4), 45–63
- ODA, M. (1997). A micro-deformation model for dilatancy of granular materials. In *ASCE/ASME Symposium on: Mechanics of Deformation and Flow of Particulate Materials*, 1997, 24-37.
- ODA, M., KAZAMA, M. (1998). Microstructure of shear bands and its relation to the mechanisms of dilatancy and failure of dense granular soils. *Geotechnique* 48(4), 465–481
- ODA, M., KONISHI, J., & NEMAT-NASSER, S. (1982). Experimental micromechanical evaluation of strength of granular materials: effects of particle rolling. *Mechanics of materials*, 1(4), 269-283.
- ODA, M., TAKEMURA, T., & TAKAHASHI, M. (2004). Microstructure in shear band observed by microfocus X-ray computed tomography. *Géotechnique* 54, 539–542.
- PESTANA, J. M. & WHITTLE, A. J. (1995). Compression model for cohesionless soils. *Géotechnique*, 45: 611–631.
- PESTANA, J. M., & WHITTLE, A. J. (1995). Compression model for cohesionless soils. *Géotechnique* 45, 611–631.
- PINEDO, F. K. C. (2019). Implementação e avaliação de um modelo constitutivo de solo reforçado com fibra. *Dissertação de Mestrado, PUC, Rio de Janeiro, RJ*, 104p.
- POTYONDY, D. O., & CUNDALL, P. A. (2004). A bonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(8), 1329-1364.

- QU, T., WANG, M., & FENG, Y. (2022). Applicability of discrete element method with spherical and clumped particles for constitutive study of granular materials. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 14(1), 240-251.
- RAHMAN, M. M., NGUYEN, H. B. K., FOURIE, A. B., & KUHN, M. R. (2021). Critical state soil mechanics for cyclic liquefaction and postliquefaction behavior: DEM study. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 147(2): 04020166.
- RAHMAN, M. M., NGUYEN, H.B.K., WANG, H., & SHARIAR, M.A. (2021). Critical state behavior of granular materials. *Proceedings of the 8th International Conference on Discrete Element Methods (DEM8)*.
- REEVES, T. (2013). Prediction of discrete element parameters for modeling the strength of sandy soils in wheel/soil traction applications. Doctor of Philosophy dissertation. Clemson University, Clemson, South Carolina, 187 p.
- SHI, D., ZHOU, J., XUE, J., & ZHANG, J. (2010). A micro-mechanical simulation of sand liquefaction behavior by DEM. AESC, GeoShanghai 2010 International Conference, Soil Behavior and Geo-Micromechanics.
- SKEMPTON, A. W. (1954). The pore-pressure coefficients A and B. *Geotechnique*, 4(4), 143-147.
- SOTOMAYOR, J. M. G., ALELVAN, G. M., & CASAGRANDE, M. D. T. (2021). Influence of Polypropylene Fiber-Reinforcement on the Mechanical Behavior of Gold Ore Tailings through Direct Shear Tests. *AESC, J. Mater. Civ. Eng.*, 33(10): 04021256.
- SOTOMAYOR, J.M.G. (2018). Avaliação do comportamento mecânico drenado e não drenado de rejeitos de minérios e ferro e de ouro reforçados com fibras de polipropileno. Tese de Doutorado, PUC, Rio de Janeiro, RJ, 184p.
- STRACK, O., & CUNDALL, P. A. (1984). Fundamental studies of fabric in granular materials. Department of Civil and Mineral Engineering, University of Minnesota.
- TORDESILLAS, A., & MUTHUSWAMY, M. (2009). On the modeling of confined buckling of force chains. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(4), 706-727.
- VELLOSO, R. Q., CASAGRANDE, M. D. T., VARGAS JUNIOR, E. A., & CONSOLI, N. C. (2012). Simulation of the mechanical behavior of fiber reinforced sand using the discrete element method. *Soil and Rocks*, São Paulo, 35(2).
- VERDUGO, R. & ISHIHARA, K. (1996). The Steady State of Sandy Soils. *Soils Found*, 36, 81-91.
- WAKABAYASHI, T. (1950). Photo-elastic method for determination of stress in powdered mass. *Journal of the Physical Society of Japan*, 5(5), 383-385.



- WENSRICH, C. M., & KATTERFELD, A. (2012). Rolling friction as a technique for modelling particle shape in DEM. *Powder Technology*, 217, 409-417.
- WANG, Y. H., & LEUNG, S. C. (2008). A particulate-scale investigation of cemented sand behavior. *Canadian Geotechnical Journal*, 45(1), 29-44.
- LIN, Y. L., ZHANG, M. X., JAVADI, A. A., LU, Y., & ZHANG, S. L. (2013). Experimental and DEM simulation of sandy soil reinforced with H–V inclusions in plane strain tests. *Geosynthetics International*, 20(3), 162-173.
- YANG, G., YU, T., & HANLONG, L. (2011). Numerical simulation of undrained triaxial test using 3D discrete element modeling. In *Instrumentation, Testing, and Modeling of Soil and Rock Behavior*, 99-106.
- YANG, Z. X., LI, X. S., & YANG, J. (2008). Quantifying and modelling fabric anisotropy of granular soils. *Géotechnique*, 58(4), 237-248.
- WANG, Z., JACOBS, F., & ZIEGLER, M. (2014). Visualization of load transfer behaviour between geogrid and sand using PFC2D. *Geotextiles and Geomembranes*, 42(2), 83-90.