

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
FACULDADE DE TECNOLOGIA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA DE RECURSOS DA AMAZÔNIA

**APLICAÇÃO DA DINÂMICA MOLECULAR
EM NOVOS MATERIAS PARA PAVIMENTAÇÃO**

MARCOS RAIKER PRINTES FERREIRA

MANAUS
2013

Ficha Catalográfica
(Catalogação realizada pela Biblioteca Central da UFAM)

F383a Ferreira, Marcos Raiker Printes
Aplicação da dinâmica molecular em novos materiais para
pavimentação / Marcos Raiker Printes Ferreira. - Manaus: UFAM,
2013.
129 f.: il. color.
Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos da
Amazônia) — Universidade Federal do Amazonas.
Orientador: Prof. Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota.

1. Agregados (Materiais de construção) 2. Açai – Semente 3.
Pavimentos 4. Elasticidade 5. Dinâmica molecular I. Frota,
Hidembergue Ordozgoith da (Orient.) II. Universidade Federal do
Amazonas III. Título

CDU (1997): 691.3(043.3)

**APLICAÇÃO DA DINÂMICA MOLECULAR
EM NOVOS MATERIAS PARA PAVIMENTAÇÃO**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
FACULDADE DE TECNOLOGIA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA DE RECURSOS DA AMAZÔNIA

**APLICAÇÃO DA DINÂMICA MOLECULAR
EM NOVOS MATERIAS PARA PAVIMENTAÇÃO**

MARCOS RAIKER PRINTES FERREIRA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos da Amazônia da Universidade Federal do Amazonas, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Recursos da Amazônia.

Orientador: Prof. Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota

MANAUS
2013

MARCOS RAIKER PRINTES FERREIRA

**APLICAÇÃO DA DINÂMICA MOLECULAR
EM NOVOS MATERIAS PARA PAVIMENTAÇÃO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos da Amazônia da Universidade Federal do Amazonas, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Recursos da Amazônia.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota, Presidente
Universidade Federal do Amazonas

Prof. Dr. José Pedro Rino, Examinador, Externo
Universidade Federal de São Carlos

Prof^ª. Dr^ª. Consuelo Alves da Frota, Examinador, Interno
Universidade Federal do Amazonas

*A Deus, aos meus pais, ao casal
Frota, aos meus irmãos e amigos,
dedico.*

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus, que sempre cuidou dos meus passos e me guiou pelo o caminho menos tortuoso, colocando nele pessoas que me acolheram e me ajudaram a ser o que hoje sou. É com toda certeza divina a providência que me trouxe até aqui.

À minha Mãe, Sônia Maria Printes Ferreira, que mostrando a forma mais pura do amor na prática, abriu mão de realizações pessoais dedicando-se inteiramente aos filhos. Meu santo anjo.

Ao meu pai, Raimundo Ferro Ferreira, que me mostra todo dia o quão fácil é realizar o impossível, carregando um mundo nas costas e sempre com um sorriso estampado no rosto. Meu herói.

Aos meus irmãos que respeitosamente zelam e completam todo dia a linda família que temos. Meus protetores.

Agradeço ao meu professor orientador Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota que neste período de convívio me foi mais que um orientador: Um grande amigo e alguém a se espelhar tanto como profissional quanto ser humano.

Agradeço à Prof^ª. Dr^ª. Consuelo Alves da Frota que me acolheu como uma mãe acolhe a um filho, me ensinou a ser uma pessoa melhor e me deu forças para continuar na caminhada desde a graduação. Meu segundo santo anjo.

Ao Professor Dr. José Pedro Rino, pela disponibilidade ao participar da banca examinadora e contribuir com sua vasta experiência na área de Dinâmica Molecular.

Aos meus amigos do Grupo de Geotecnia, em particular à Prof^ª Ma Patricia Valença pela a amizade e auxílio valioso em muitas ocasiões.

RESUMO

A busca por novos materiais é de importância vital para a indústria da construção civil no estado do Amazonas, devido à falta de material agregado nesta região. Neste trabalho estudamos as propriedades mecânicas de novos materiais para serem usados como agregados na construção de pavimentos: o ASAC (Agregados Sinterizados de Argila Calcinada) e caroço de Açaí, com a perspectiva de uso sustentável de nossas fontes naturais de matéria prima. Desenvolvemos dois tipos de experimentos para obtermos as propriedades mecânicas desses materiais: o experimento real em laboratório e a sua simulação por Dinâmica Molecular (DM). No laboratório caracterizamos fisicamente ambos os materiais. A partir do teste de compressão não confinada dos grãos de cada material, obtivemos os seus Módulos de Young, e do teste de compressão confinada de uma amostra cilíndrica de cada material, obtivemos o espectro da resistência à tensão como função da deformação. A partir do ajustamento dos resultados da experiência teórica aos resultados da experiência real obtivemos os Módulos de Young de ambos os materiais, que estão em boa concordância com os resultados obtidos do teste de compressão não confinada para os grãos de ASAC e os caroços de Açaí.

PALAVRAS-CHAVE: ASAC, Caroço de Açaí, Pavimentos, Módulo de Young, Dinâmica Molecular, Teste de Compressão não Confinada, Teste de Compressão Confinada.

ABSTRACT

The search for new materials is of vital importance to the civil construction industry in the state of Amazonas, due the lacking of aggregate material in this region. In this work we studied the mechanical properties of two new materials to be used as aggregates in pavement construction: the ASAC (sintered calcinated clay aggregates) and Açaí seed, with the perspective of sustainable use of our natural resources of raw. We performed two kind of experiment to obtain the mechanical properties of these materials: the laboratory real experiment and its simulation by Molecular Dynamics (MD). In laboratory we characterized physically both materials. From the unconfined compression test of the grains of each material, we obtained their Young Modulus, and from the confined compression test of a cylindrical sample of each material we obtained the spectrum of tension strength as a function of the deformation. In the Molecular Dynamics simulation we used a constitutive viscoelastic model to represent the interactions between the grains of the studied materials, which depend on their Young Modulus. We conducted the theoretical experiment (MD) of the confined compression test to obtain the tension strength as a function of the deformation. From the fitting of the results of the theoretical experiment to the real experiment results we obtained the Young Modulus for both materials, which are in good agreement with the results obtained from the unconfined compression test for the grains of ASAC and seeds of Açaí.

KEYWORDS: ASAC, Açaí Seed, Pavements, Young Modulus, Molecular Dynamics, Unconfined Compression Test, Confined Compression Test.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

2-D – Duas Dimensões

3-D – Três Dimensões

ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas

ASAC – Agregado Sinterizado de Argila Calcinada

CA – Concreto Asfáltico

CAP – Cimento Asfáltico de Petróleo

CC – Compressão Confinada

CP – Corpo de Prova

CS – Compressão Simples

DM – Dinâmica Molecular

DNER – Departamento Nacional de Estradas de Rodagem

DNIT – Departamento Nacional de Infraestrutura de Transportes

GEOTEC – Grupo de Geotecnia

IBGE – Instituto Brasileiro de Geografia e Estatísticas

IME – Instituto Militar de Engenharia

IP – Índice de Plasticidade

LL – Limite de Liquidez

LP – Limite de Plasticidade

MED – Método dos Elementos Discretos

MEF – Método dos Elementos Finitos

MM – Mecânica Molecular

NBR – Norma Brasileira Regulamentadora

SUCS – Sistema Unificado de Classificação de Solos

TRB – Transportation Research Board

UFAM – Universidade Federal do Amazonas

UTM – Universal Testing Machine

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Formato esférico ou circular das partículas do sistema.	28
Figura 2 - Formas obtidas a partir da superposição de esferas.	29
Figura 3 – Modelo tridimensional da origem dos potenciais de interação	30
Figura 4 – Esquema das forças e torques agindo na partícula i.	31
Figura 5 – Esquema da origem da energia devido às oscilações no comprimento de equilíbrio da ligação.....	32
Figura 6 – Sobreposição entre dois corpos rígidos simulando as deformações nas partículas.	34
Figura 7 – Plano de contato gerado pela deformação e as forças agindo neste.....	35
Figura 8 – Experimento para visualização das componentes conservativa e dissipativa.	36
Figura 9 – Compressão mútua entre as partículas i e j.	38
Figura 10 – Colisão entre duas partículas e detalhe dos componentes da velocidade tangencial relativa.....	41
Figura 11 – Esquema do atrito estático pelo modelo de Cundall e Starck	43
Figura 12 – ASAC: Agregados produzidos de forma artesanal	49
Figura 13 – ASAC: Agregados produzidos em olaria.....	49
Figura 14 – Processo de identificação, caracterização e preparo da matéria-prima para produção de ASAC.....	50
Figura 15– Estabilidade das misturas em função do teor de asfalto.....	52
Figura 16– Fluência das misturas em função do teor de asfalto.....	52
Figura 17– Estabilidade e fluência em função do envelhecimento para uma mistura com ASAC.....	53
Figura 18 – Creep estático em função do envelhecimento para uma mistura com ASAC.....	54
Figura 19– Pistas experimentais com uso do ASAC.....	55
Figura 20 – Componentes e fotos do açazeiro <i>Euterpe oleracea</i> Martius.	56

Figura 21 – Açaizeiro <i>Euterpe precatoria</i> Martius.	57
Figura 22 – Diagrama dos estratos componentes e microfotografia do fruto do Açaí.....	58
Figura 23 – Caroço do Açaí.....	59
Figura 24 – Partes do processo de compostagem orgânica com aeração por reviramento	60
Figura 25 – Modelo de contato entre as partículas.....	62
Figura 26 – Esquema das forças e vetores unitários (normal e tangencial à superfície).....	64
Figura 27 – Esquema do torque gerado pela força tangencial.....	67
Figura 28 – Orientação angular definida com apenas um valor de ângulo θ_i	68
Figura 29 – Fluxograma para simulação de um sistema de partículas por Dinâmica Molecular.	70
Figura 30 – Localização da jazida do solo matéria-prima para confecção dos ASACs.....	71
Figura 31 – Amostra do Solo matéria-prima para confecção dos ASACs.....	72
Figura 32 – Solo fracionado em pelotas sendo destorroado e peneirado.	72
Figura 33 – Faixa de tamanho do ASAC utilizado.....	73
Figura 34 – Localização do município de Codajás-Am.	74
Figura 35 – Configuração do Caroço de Açaí após a retirada da fibra que recobre o endocarpo.	74
Figura 36 – Ensaio de Compressão Simples – CS.....	76
Figura 37 – Ensaio de Compressão Confinada – CC.	76
Figura 38 – Máquina universal de ensaios com capacidade de carga de 14 kN.....	77
Figura 39 – Resultado do ensaio de compressão simples em um grão e sua modelagem.....	78
Figura 40 – Plano de contato com o grão considerado como uma esfera de raio infinito.....	79
Figura 41 – Distribuição granulométrica do solo matéria-prima do ASAC.....	82
Figura 42 – Resumo da Granulometria.....	83
Figura 43 – Distribuição Granulométrica do ASAC.	84

Figura 44 – Distribuição Granulométrica do ASAC.	85
Figura 45 – Distribuição Granulométrica do ASAC.	86
Figura 46 – Esquema dos Tipos de Ensaios Mecânicos.	87
Figura 47 – Ensaio de Compressão Simples do ASAC.	88
Figura 48 – Ensaios de Compressão Confinada (CC) para o ASAC.	91
Figura 49 – Aspecto visual do Caroço de Açai (a e b) e dos grãos de ASAC (c e d) após a realização dos ensaios de Compressão Simples. O ASAC comporta-se como material quebradiço, devido a sua natureza cerâmica.	92
Figura 50 – Ensaio de Compressão Simples para seis Caroços do Açai com diâmetros diferentes.	93
Figura 51– Ensaios de Compressão Confinada (CC) para três corpos de prova constituídos com caroços de Açai.	94
Figura 52 – Cilindro no qual foram confeccionadas as amostras de ASAC e de Caroço de Açai e realizado o ensaio de Compressão Confinada.	97
Figura 53 – Diferentes distribuições granulométricas utilizando a função β com os parâmetros “a” e “b” descritos na figura, entre o menor diâmetro de 0.001 m e o maior diâmetro de 0.008 m.	99
Figura 54 – Processo de confecção dos corpos de prova (CP). (a) Os grãos são suspensos, pendurados nos sites de uma rede retangular no plano vertical a uma distância $13R_{max}$ da base do cilindro; (b) A partir do início dos tempos deixamos os grãos caírem, um a um, por gravidade, sobre a base do cilindro; (c) Corpo de Prova pronto para ser submetido aos ensaios de Compressão Confinada.	101
Figura 55 – Sequência do processo de confecção dos corpos de prova (CP). Após os grãos serem suspensos nos sítios de uma rede retangular no plano vertical, a uma distância	

13R _{max} da base do cilindro, são soltos e caem sobre a base do cilindro, formando o Corpo de Prova que será utilizado no ensaio de Compressão Confinada.	102
Figura 56 – Ensaio de Compressão Confinada. (a) O pistão (azul claro) é posicionado na superfície da amostra a ser comprimida; (b) Inicia-se o processo de compressão confinada, imprimindo-se ao cilindro uma velocidade vertical constante no sentido descendente; (c) Para cada tempo <i>t</i> , mede-se a deformação específica e a tensão que o pistão exerce sobre a amostra.	104
Figura 57 – Esquema representativo das forças de contato entre uma esfera <i>i</i> do pistão (azul claro) e um grão esférico <i>j</i> da amostra estudada.	105
Figura 58 – Tensão em função da deformação de duas esferas de raios iguais a 0.01 m, tomando o Módulo de Young igual a 1,2x10 ⁹ Pa e o coeficiente de Poisson igual a 0.3. A esfera em azul representa o pistão e a esfera em amarelo representa um grão da amostra estudada. Nesse caso definimos como tensão a força agindo na interface de contato das esferas dividida pela área da secção transversal da esfera do pistão. A linha em vermelho mostra as medidas pela simulação de DM e os pontos em preto os resultados obtidos aplicando-se diretamente a função de H. Hertz (Equação 60).	107
Figura 59 – Tensão em função da deformação de quatro corpos de prova confeccionados de acordo com o procedimento mostrado na Figura 55, com os respectivos Módulo de Young <i>Y</i> mostrados na figura.	110
Figura 60 – Reacomodação dos grãos pela ocupação dos vazios deixados pelo processo de empacotamento por gravidade, responsável pelos ruídos que aparecem nas curvas de tensão em função da deformação apresentadas na Figura 59. As setas indicam a mudança dos vazios com o tempo por deslocamento dos grãos, e não simplesmente pela deformação dos mesmos.	110

Figura 61 – Tensão em função da deformação para o ASAC. A linha em preto representa os resultados da experiência real do ensaio de Compressão Confinada e a linha em vermelho a experiência teórica com Dinâmica Molecular. A inserção mostra um instantâneo do Corpo de Prova durante o processo de simulação por DM. Os grãos (em amarelo) ocupam a largura do recipiente cilíndrico (em azul) que, assim como a altura, foram tomadas como aproximadamente as mesmas dimensões do cilindro utilizado na experiência real. O pistão (em azul claro) comprime os grãos para baixo, deslocando-se verticalmente com velocidade constante $v = 0.001$ m/s, gerando as tensões e as deformações apresentadas. Verifica-se uma boa concordância entre as duas curvas tomando-se o coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$ e o Módulo de Young $Y = 3,4 \times 10^9$ Pa..... 114

Figura 62 – Tensão em função da deformação obtida do ensaio de Compressão Confinada para os caroços de Açaí. A linha em preto representa os resultados da experiência real e a linha em vermelho a experiência teórica com Dinâmica Molecular. A inserção é um instantâneo do Corpo de Prova durante o processo de compressão, onde se observa as colunas constituídas por esferas representando os caroços de Açaí, obedecendo a mesma distribuição granulométrica. O melhor ajustamento ocorreu para o Módulo de Young $Y = 1,6 \times 10^9$ Pa, com coeficiente de Poisson $\mu = 0.3$ 115

Figura 63 – Comparação da suavização pelo método “Adjacent-Averaging” (em vermelho), da curva obtida da experiência teórica de Dinâmica Molecular, utilizando uma amostra empacotada por gravidade (em verde), com a curva obtida usando a Dinâmica Molecular em uma amostra empacotada por colunas (em azul)..... 117

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Produção do Açaí por Estado e Região	59
Tabela 2 – Limites de Atterberg.....	83
Tabela 3 – Densidade e Absorção do ASAC.....	85
Tabela 4 – Densidade e Absorção do Caroço do Açaí.....	86
Tabela 5 – Valores dos parâmetros B e $Reff$ para o ASAC, com os quais se obtém $Y/(1-\nu^2)$. Adotando o coeficiente de Poisson $\nu=0.3$, obtém-se o módulo de Young Y apresentado na última coluna.....	89
Tabela 6 – Valor do Parâmetro do Módulo de Young com Base nos Ensaio de CS para o Caroço do Açaí.....	92
Tabela 7 – Parâmetros das forças entre os grãos e entre estes e as paredes do recipiente cilíndrico e o pistão, utilizados na simulação do ensaio de Compressão Confinada por Dinâmica Molecular. O Módulo de Young Y é variado até o melhor ajuste com os resultados da experiência real.	112
Tabela 8 – Módulo de Young do ASAC e do caroço de Açaí, obtidos pelo ensaio de Compressão Simples de um grão em experiência real (laboratório) e pela simulação do ensaio de Compressão Confinada de um conjunto de grãos por Dinâmica Molecular...	116

SUMÁRIO

Capítulo 1	21
1 INTRODUÇÃO.....	21
1.1 Objetivo	23
1.1.1 Objetivo Geral	23
1.1.2 Objetivos Específicos	23
1.2 Organização do Trabalho.....	24
Capítulo 2	25
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1 Dinâmica Molecular	25
2.1.1 Modelo de Contato	27
2.1.2 As Forças Agindo Sobre as Partículas.....	29
2.1.3 Expressão para os Potenciais de Interação (DM Clássica).....	31
2.1.4 Expressão para as Forças de Interação (MED).....	34
2.1.5 Solução das equações de movimento de Newton.....	44
2.2 Agregados Sinterizados de Argila Calcinada	48
2.2.1 O ASAC e seus Processos de Produção	48
2.2.2 Pesquisas para Validação do ASAC	50
2.3 Carvão do Açai	55
2.3.1 A Palmeira do Açai.....	55
2.3.2 O Fruto do Açai	57
2.3.3 O Carvão do Açai e suas Aplicações.....	59
Capítulo 3	62
3 MATERIAIS E MÉTODOS.....	62

3.1 Simulação por Dinâmica Molecular	62
3.1.1 Modelagem de Contato.....	62
3.1.2 As Forças Agindo Sobre as Partículas.....	63
3.1.3 Expressões para a Força Normal e Força Tangencial.....	64
3.1.4 Solução das equações de movimento de Newton.....	67
3.1.5 Desenvolvimento da simulação por Dinâmica Molecular.....	69
3.2 Agregados Sinterizados de Argila Calcificada	70
3.2.1 Solo Natural.....	71
3.2.2 Caracterização dos ASAC	73
3.3 Carvão do Açai	74
3.4 Ensaios Mecânicos	75
3.5 Obtenção das Propriedades Mecânicas.....	77
Capítulo 4	81
4 CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS MATERIAIS	81
4.1 Caracterização Física do ASAC	82
4.1.1 Solo Natural.....	82
4.1.2 Agregados Sinterizados de Argila Calcificada	84
4.2 Caracterização Física do Carvão do Açai.....	85
4.3 Ensaios Mecânicos	86
4.3.1 ASAC – Compressão Simples.....	87
4.3.2 ASAC – Compressão Confinada	90
4.3.3 Carvão do Açai – Compressão Simples	91
4.3.4 Carvão do Açai – Compressão Confinada.....	94
Capítulo 5	95
5 SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR	95

5.1 Confeção do Recipiente Cilíndrico.....	97
5.2 Distribuição Ganulométrica.....	97
5.3 Confeção dos Corpos de Prova (CP)	99
5.4 Simulação do Ensaio de Compressão Confinada por DM	103
5.4.1 Média da Tensão em Função da Deformação	103
5.4.2 Comparação da Simulação por DM com a Função de H. Hertz.....	105
5.4.3 Simulação do Ensaio de Compressão Confinada por Dinâmica Molecular	107
5.4.4 Comparação dos Resultados Experimentais com a Simulação DM.....	111
Capítulo 6	118
6 CONCLUSÕES	118
6.1 Caracterização Física do ASAC	118
6.2 Caracterização Física do Carço do Açai.....	118
6.3 Ensaio Mecânicos – ASAC.....	119
6.4 Ensaio Mecânicos – Carço do Açai	119
6.5 Simulação por Dinâmica Molecular	120
7 BIBLIOGRAFIA	121

O impossível não é uma variável constante no tempo.

Capítulo 1

1 INTRODUÇÃO

O uso indiscriminado dos recursos naturais, ou mesmo a carência destes em determinadas regiões, tem levado pesquisadores a apontar e validar novos materiais que servirão como alternativos aos tradicionalmente empregados na construção civil. Tais materiais servirão de aporte ao desenvolvimento sustentável nos mais diversos setores da construção, apresentando vantagem na questão econômica, em relação aos convencionais, pois geralmente são resíduos de algum processo industrial ou se apresentam em abundância na natureza, o que reduz seu custo ao consumidor final.

O desenvolvimento regional depende sobremaneira dos meios de transportes, seja urbano ou interurbano, e é do conhecimento de todos a precariedade dos nossos pavimentos, o que tem exigido do poder público uma grande demanda de recursos financeiros para a sua manutenção anual, por meio das famosas operações “tapa buraco”. A esta precariedade nos pavimentos, podemos associar a falta de um tratamento adequado às camadas de base e sub-base bem como à composição do revestimento asfáltico, que apresenta em seu esqueleto mineral ausência de agregado graúdo, condição imposta devido à falta de material pétreo na região do município de Manaus-AM. Neste contexto, utiliza-se o seixo rolado como material alternativo, porém seu uso acarreta impactos ambientais negativos, tais como: instabilidade das encostas nas margens do rio, alteração dos cursos d’água, destruição do fundo dos rios, alteração do pH e aumento do teor do material sedimentado em suspensão promovendo assoreamento (Xavier, 2008).

Um considerável esforço tem sido realizado pelo grupo de Geotecnia – GEOTEC em pesquisa e produção de novos materiais voltados para a construção civil, em particular para

pavimentos rodoviários. Entre estes materiais estudados experimentalmente estão os agregados sinterizados de argila calcinada – ASAC, que tem se mostrado eficiente e bom substituto ao seixo rolado no que diz respeito às propriedades mecânicas, principalmente quando solicitadas a elevadas temperaturas, fator preponderante na região, pois, na cidade de Manaus, no período da tarde, a temperatura do revestimento chega, em média, a 49 °C (Cunha, 2011). Mais recentemente, o GEOTEC passou a estudar o comportamento mecânico de resíduos orgânicos, como o caroço do açaí, visando a sua utilização como agregado graúdo na mistura asfáltica, tendo obtido bons resultados mecânicos, o que passou a motivar mais as pesquisas em torno deste tipo de material.

Classicamente, os estudos teóricos sobre pavimentos rodoviários o consideram como um meio contínuo, sobre o qual são aplicadas as metodologias da mecânica dos sólidos. Entretanto, o pavimento é um compósito constituído por diversos materiais, com diferentes escalas de comprimento, como o asfalto, o cimento, a areia e o pedregulho, o que motiva o seu tratamento teórico como um meio discreto, de acordo com seus constituintes. O estudo das propriedades mecânicas do pavimento, a partir dos seus constituintes, é um complexo problema de muitos corpos, de difícil solução analítica. As dificuldades teóricas de tratar os pavimentos como meios contínuos levaram-nos a propor o desenvolvimento de um programa computacional para simular o comportamento mecânico desses materiais por meio do método da Dinâmica Molecular – DM.

Para dar um tratamento teórico adequado no sentido de melhor compreender os resultados experimentais obtidos nos laboratórios do GEOTEC, o presente trabalho tem como objetivo aplicar a Dinâmica Molecular para simular um sistema de partículas granulares com dois materiais diferentes: ASAC e o Caroço (endocarpo mais amêndoa) do Açaí, sendo cada um simulado separadamente. A partir de leis constitutivas das forças agindo entre os grãos, obteremos as propriedades macroscópicas relacionadas com os carregamentos estáticos

aplicados. Assim, os resultados obtidos na simulação computacional serão comparados com os resultados experimentais obtidos nos laboratórios do GEOTEC, o que irá permitir a determinação de dois parâmetros mecânicos necessários para o dimensionamento adequado dos pavimentos constituídos por esses materiais: Módulo de Elasticidade (ou módulo de Young) e o coeficiente de Poisson (ou razão de Poisson).

1.1 Objetivo

1.1.1 Objetivo Geral

Determinar o Módulo de Elasticidade e o coeficiente de Poisson do agregado sinterizado de argila calcinada e do caroço do Açaí através do desenvolvimento de um programa computacional capaz de realizar simulações por Dinâmica Molecular, método utilizado em problemas de muitos corpos na área da física da matéria condensada. As simulações serão realizadas com o intuito de oferecer suporte teórico às experiências desenvolvidas nos laboratórios do GEOTEC com os citados materiais, visando apontá-los como alternativos para a melhoria na eficiência dos pavimentos rodoviários de nossa região.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Fazer levantamento do estado da arte referente à aplicação da Dinâmica Molecular a sistemas granulares de dimensões macroscópicas;
- Desenvolver um programa em linguagem FORTRAN capaz de realizar simulações por Dinâmica Molecular de partículas submetidas a carregamento estático;
- Fazer um levantamento do potencial do caroço do Açaí e sua disponibilidade para uso como agregado na pavimentação;
- Caracterizar fisicamente os materiais empregados na pesquisa segundo sua distribuição granulométrica, massa específica e absorção;

- Realizar a caracterização do solo que servirá de matéria prima para confecção dos agregados sinterizados de argila calcinada segundo ensaios corriqueiros na pavimentação.

1.2 Organização do Trabalho

O presente trabalho encontra-se dividido da seguinte forma:

O Capítulo 1 aborda a introdução relatando ao que se propõem a pesquisa e os objetivos gerais e específicos a serem alcançados.

O Capítulo 2 aborda a Revisão Bibliográfica, relatando o uso da Dinâmica Molecular como ferramenta em simulações de sistemas atômicos e granulares. Trás um rol dos modelos de força de interação entre as partículas. Apresenta o método mais difundido de integração das equações de movimento bem como os algoritmos mais utilizados.

O Capítulo 3 apresenta os Materiais e Métodos de caracterização dos agregados utilizados na pesquisa, os modelos de força e o algoritmo utilizado para integração das equações de movimento de Newton. Apresenta também, de modo sucinto, o Método utilizado para obtenção das propriedades mecânicas do ASAC e do Caroço do Açaí.

O Capítulo 4 discute os resultados obtidos concernentes aos ensaios de caracterização nos materiais estudados: ASAC e Caroço de Açaí.

O Capítulo 5 discute os resultados obtidos concernentes à simulação por Dinâmica Molecular.

O Capítulo 6 apresenta as conclusões tomadas em relação aos resultados obtidos.

A formatação deste trabalho foi orientada conforme estabelece Barbalho e Moraes (2003), segundo decisão da Reunião Ordinária do Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, em 22 de julho de 2008.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Dinâmica Molecular

A Dinâmica Molecular considera que os corpos a serem estudados são constituídos por partículas que interagem umas com as outras segundo um determinado padrão. Deste modo, tanto o solo como uma barra de metal (considerado na engenharia como contínuo – sem vazios) são sistemas particulados, a diferença está nas forças de interação entre as partículas. Na barra de metal existem forças de atração e repulsão agindo nos átomos enquanto que no solo granular, como, por exemplo, a areia, apenas as forças de repulsão são consideradas. Forças eletrostáticas (de longo alcance) e de ligação atômica fazem com que os átomos interajam uns com os outros mesmo sem existir contato, enquanto que no solo, ou qualquer sistema granular, só haverá interação se existir contato.

As simulações por Dinâmica Molecular vêm dando suporte às mais diversas áreas de estudo, seja na indústria de fármacos, medicina, biologia, nutrição, química, engenharia etc., mostrando-se ser uma poderosa ferramenta, seja no estudo de macromoléculas biológicas (Hansson *et al.*, 2002), no planejamento racional de potenciais compostos bioativos, particularmente com atividade anti-HIV (Namba *et al.*, 2008) ou em simulações do comportamento de materiais granulares (Garcia-Rojo *et al.*, 2004; Neves 2008; Sykut *et al.*, 2007; etc.).

Quando se deseja simular interações atômicas, a fase inicial tem como base a Mecânica Molecular (MM), que trata as moléculas como uma coleção de átomos que pode ser descrita por forças newtonianas, ou seja, são tratados como uma coleção de partículas mantidas unidas por forças eletrostáticas (Namba *et al.*, 2008). A Mecânica Molecular

trabalha a modelagem dos potenciais de forma mais simples, comparadas aos métodos quânticos, pois estes últimos necessitariam de um esforço computacional maior, uma vez que o movimento dos elétrons será quantificado. Por trabalhar com o modelo atômico de Bohr, a MM leva em consideração apenas o potencial resultante da movimentação das nuvens eletrônicas, o que facilita demasiadamente a simulação.

Quando aplicada a sistema granulares, que apresentam interação de curto alcance, ou seja, as partículas apenas interagem umas com as outras via contato, a Dinâmica Molecular é também chamada de Método dos Elementos Discretos (MED), e foi apresentada por Cundall e Strack em 1979 (Cundall, 1979). O MED compreende basicamente dois estágios: O cálculo das forças de contato e posteriormente o cálculo do movimento das partículas por meio das equações de Newton. Neste contexto, dada uma configuração inicial (posição das partículas) o sistema desenvolve-se primeiramente com o cálculo da força de interação (que será descrita mais a frente) e, por meio da integração das equações de movimento de Newton, obtém-se a nova configuração do sistema. Esse procedimento é realizado até que o sistema atinja o equilíbrio ou então a condição dada pelo programa.

A necessidade de compreender o comportamento de materiais granulares não vem somente da geotecnia. Segundo Sykut *et al.* (2007), esta necessidade torna-se cada vez mais importante e está associada ao rápido desenvolvimento de indústrias, tais como: alimentos, produtos químicos, farmacêutica, cosméticos etc., onde materiais na forma granular são processados.

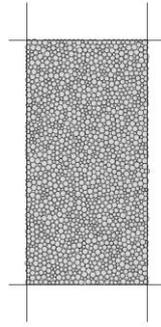
Na geotecnia e na pavimentação, a Dinâmica Molecular mostra-se eficiente, por tratar os materiais como um conjunto de partículas e não como um meio contínuo, como é feito corriqueiramente ao se empregar ferramentas de cálculo como o Método dos Elementos Finitos (MEF) onde, por exemplo, a mistura asfáltica, compósito que apresenta materiais com faixas bem distintas de tamanho, é tratada como um meio contínuo. No dimensionamento de

pavimentos, softwares de simulação dos esforços referente ao tráfego como o FEPAVE, o SISPAVE, o RIOPAWE, por exemplo, também utilizam o MEF para previsão do comportamento mecânico da estrutura analisada.

2.1.1 Modelo de Contato

Quando se está simulando um sistema de partículas, para retirar informações sobre suas propriedades, é necessário que os dados sobre o sistema sejam os mais próximos ao real possível. Assim, a forma da partícula, entre outras propriedades físicas, é uma informação que precisa ser definida. É muito comum encontrarmos trabalhos cujos quais as partículas foram consideradas de forma esférica, quando a simulação é realizada em três dimensões (3-D), ou discos circulares, caso em que a simulação foi desenvolvida em duas dimensões (2-D). Esta simplificação acarreta, como resultado, minimização dos requisitos de memória e tempo de processamento do computador, além disso, pode ser analisado um grande número de partículas (Donzé *et al.*, 2009).

Trabalhos como os de Neves (2009) – Figura 1a, Sykut *et al.* (2007) – Figura 1b, Khanal *et al.* (2005) – Figura 1c, Odagi *et al.* (2002) – Figura 1d, entre outros, utilizaram como forma da partícula a esférica ou circular. A maioria dos códigos computacionais disponíveis também utilizam os citados formatos no intuito de facilitar, até mesmo, os dados de entrada, uma vez que para esse tipo de forma, o simples valor de um raio é necessário para definir a geometria da partícula.



a) Neves (2009)

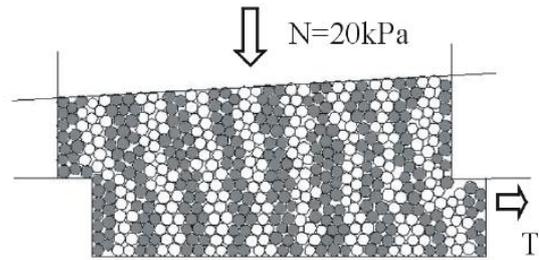
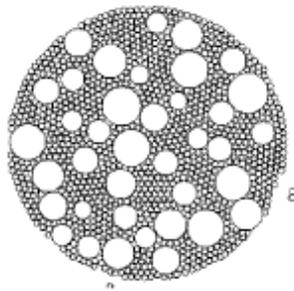
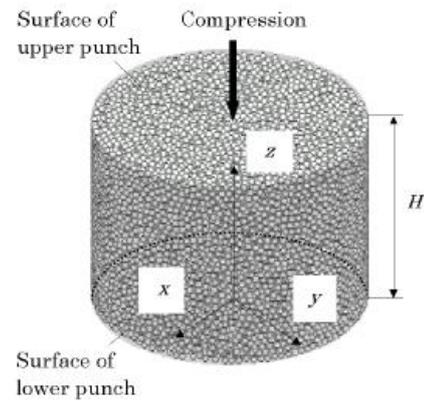
b) Sykut *et al.* (2007)c) Khanal *et al.* (2005)d) Odagi *et al.* (2007)

Figura 1 – Formato esférico ou circular das partículas do sistema.
 Fonte: Autores Variados

Em alguns casos, quando não se pode manipular o formato das partículas do sistema real, é necessário lançar mão de técnicas de modelagem ou outros formatos para melhor representação durante a simulação. Formatos mais complexos para os grãos como elipses, elipsoides, polígonos, poliedros e elipsoides generalizados, podem fornecer mais flexibilidade e um comportamento mais realistas para os grãos no MED (Neves (2009)). Diferentes formas podem ser obtidas por meio da superposição de formas mais simples como esferas que podem ser visualizadas na Figura 2 (Mesquita *et al.*, 2012).

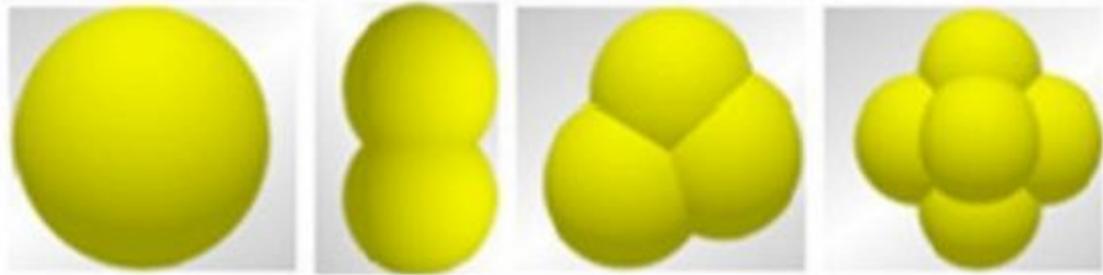


Figura 2 - Formas obtidas a partir da superposição de esferas.
 Fonte: Mesquita *et al* (2012).

No entanto, essas geometrias complexas, como polígonos e poliedros podem ser problemáticas porque a detecção dos contatos e o cálculo das forças e torque em casos de contato ponta-ponta, ponta-canto e canto-canto, e a extensão de 2-D para 3-D pode ser complicada e computacionalmente cara (Wang e Mora, 2008 *apud* Donzé, 2009).

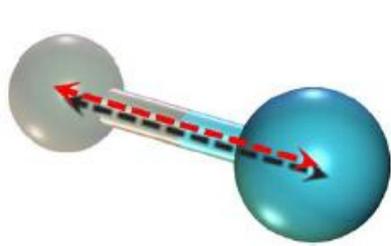
2.1.2 As Forças Agindo Sobre as Partículas

Na Dinâmica Molecular clássica cujas interações atômicas e moleculares são simuladas, a força agindo no átomo é uma função da energia potencial total do sistema $V(r)$, que é descrita como a soma de vários termos de energia, incluindo os termos para átomos ligados (comprimentos e ângulos de ligação, ângulos diedros) e os termos para átomos não ligados (interação de van der Waals e de Coulomb). Um conjunto completo dos potenciais de interação entre as partículas é definido como “campo de força”. Um típico campo de força é representado pela Equação 1.

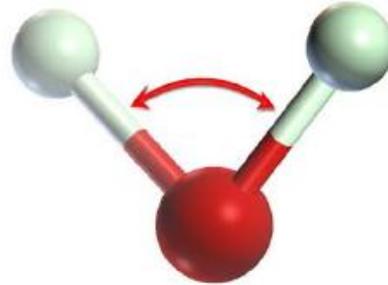
$$V(r) = \sum V_l + \sum V_\theta + \sum V_{vdW} + \sum V_{elet} \quad (1)$$

Onde, V_l é a energia de estiramento da ligação em relação ao seu valor de equilíbrio (Figura 3a), V_θ é a energia de deformação do ângulo de ligação em relação a seu valor de equilíbrio (Figura 3b), V_{vdW} representa a energia das interações de van der Waals (Figura 3c)

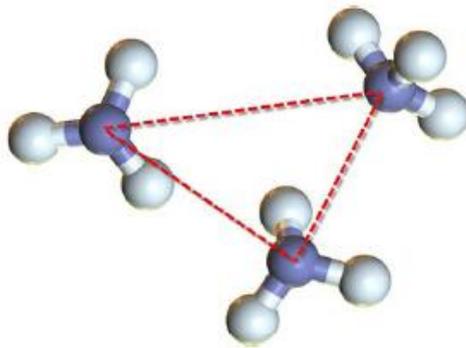
e V_{elet} representa as energias de atração ou repulsão eletrostática entre duas cargas (Figura 3d) (Namba, 2008).



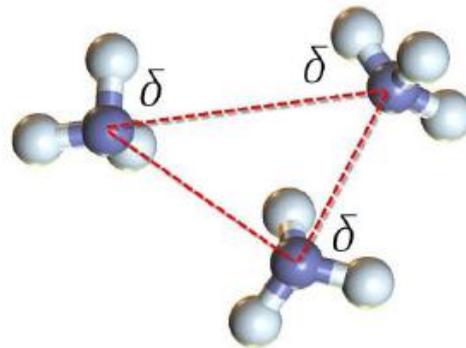
a) Energia de Estiramento da Ligação



b) Energia de Deformação do Ângulo de Ligação



c) Energia de Interação de van der Waals



d) Energia de Atração ou Repulsão Eletrostática

Figura 3 – Modelo tridimensional da origem dos potenciais de interação

Fonte: Frazão (2009).

Quantificados os potenciais de interação e obtida a energia potencial total do sistema, o passo seguinte resulta na obtenção da força total agindo na partícula i , dada pela Equação 2

$$F_i(t) = -\frac{\partial V(r_i)}{\partial \vec{r}_i} \quad (2)$$

No Método dos Elementos Discretos (Dinâmica Molecular aplicada a sistemas granulares), as forças e momentos externos agindo em cada partícula são devidos a choques com outras partículas, com as superfícies de contorno do escoamento, força gravitacional e também devido à influência de ondas provocadas por outras partículas que não estão em contato e devido ao fluido no qual às partículas estão contidas. Portanto, no MED as equações

governantes do movimento, de acordo com 2ª lei de Newton para movimento de translação (Equação 3) e rotação (Equação 4), são:

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_j \vec{F}_{ij}^c + \sum_k \vec{F}_{ij}^{nc} + \vec{F}_i^f + \vec{F}_i^g \quad (3)$$

$$I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = \sum_j \vec{M}_{ij} \quad (4)$$

Sendo m_i e I_i a massa e o momento de inércia da partícula i , respectivamente; \vec{v}_i e $\vec{\omega}_i$ as velocidades translacional e angular da partícula i , respectivamente; \vec{F}_{ij}^c e \vec{M}_{ij} a força de contato e torque agindo na partícula i pela partícula j ou pelas paredes; \vec{F}_{ij}^{nc} é a força de não contato atuando na partícula i pela partícula k ou por outras fontes; \vec{F}_i^f a força de interação partícula-fluido na partícula i ; e \vec{F}_i^g é a força gravitacional (Zhu *et al.*, 2007). A Figura 4 mostra esquematicamente as forças e os torques descritos.

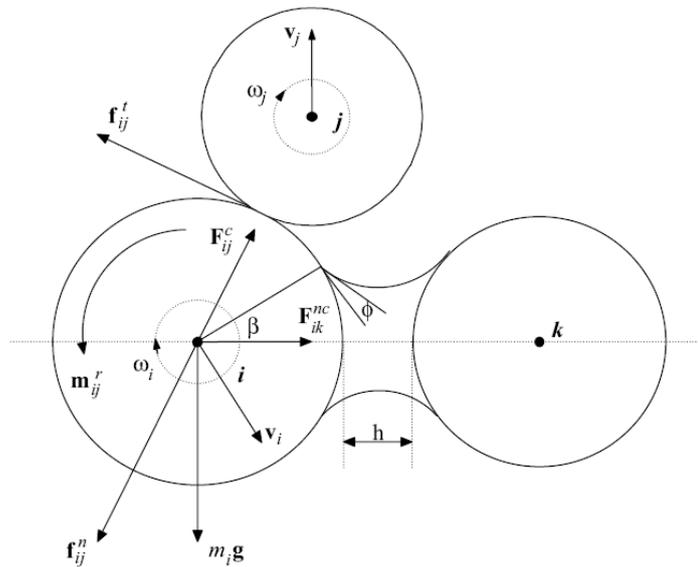


Figura 4 – Esquema das forças e torques agindo na partícula i .
Fonte: Zhu *et al.* (2007).

2.1.3 Expressão para os Potenciais de Interação (DM Clássica)

Os dois primeiros termos da Equação 1 referem-se aos potenciais gerados devido às forças de atração ou repulsão agindo sobre os átomos a fim de mantê-los numa posição de equilíbrio. A forma padrão para representar os potenciais harmônicos devido às oscilações dos comprimentos e ângulos de ligação com relação aos valores de equilíbrio é a utilização da Lei de Hooke, mostrada nas Equações 5 e 6, respectivamente.

$$V_l = k_l(l - l_0)^2 \quad (5)$$

$$V_\theta = k_\theta(\theta - \theta_0)^2 \quad (6)$$

Em que l e θ são, respectivamente os comprimentos e os ângulos de ligação. l_0 e θ_0 são os correspondentes valores de equilíbrio e k_l e k_θ as constantes de força para restituição com relação aos valores de equilíbrio. Ou seja, dada uma posição de equilíbrio l_0 entre dois átomos, podemos dizer que ao tentar separá-los à distância l , uma força de restituição, contrária à direção da separação irá aparecer e o sistema funcionará como uma mola ao ser estirada, conforme nos mostra a Figura 5.

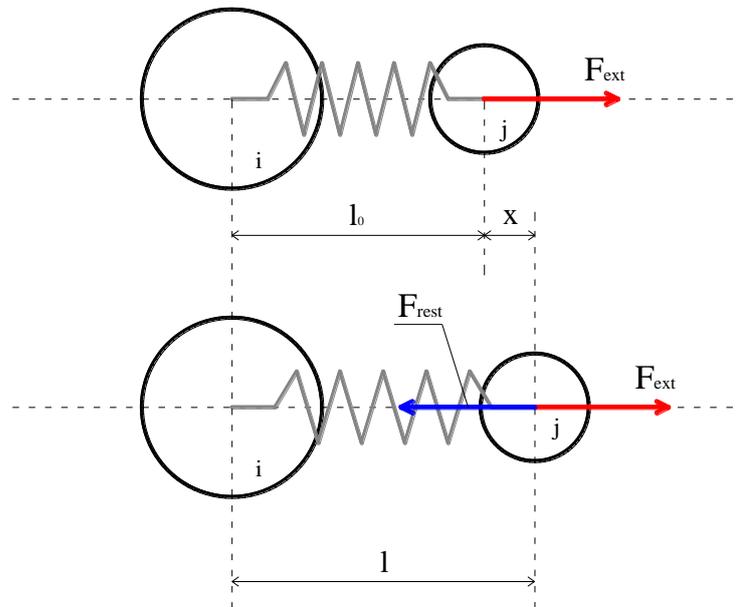


Figura 5 – Esquema da origem da energia devido às oscilações no comprimento de equilíbrio da ligação.

Na medida em que o átomo j se separa do átomo i , uma força de restituição (atração ou repulsão) tende a manter a posição de equilíbrio com módulo dado pela Equação 7, de acordo com a Lei de Hooke.

$$F_{ji} = -k_l x \quad (7)$$

Onde F_{ji} é a força em j devido à ligação com i , e x a distância deslocada. Este deslocamento irá gerar uma energia potencial dada pela Equação 8.

$$V_l = \frac{1}{2} k_l x^2 \quad (8)$$

Pela Figura 5 pode-se deduzir que $x = l - l_0$, assim a Equação 7 ganha a mesma configuração da Equação 5, já descrita. O mesmo raciocínio é utilizado para deduzir a Equação 6. A diferença encontra-se no tipo de deslocamento, que neste caso seria angular e não translacional.

Os dois últimos termos da Equação 1, que complementam um típico campo de força, são referentes às forças entre os átomos não-ligados covalentemente. Segundo Namba (2008), as interações entre paredes de átomos não ligados covalentemente (i, j) são descritas por potenciais compostos pelos termos de van der Waals e eletrostático, representado respectivamente pelos potenciais de Lenard-Jones ou potencial 6-12 (Equação 9) e de Coulomb (Equação 2.10).

$$V_{vdW} = 4 \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (9)$$

$$V_{elet} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}} \quad (10)$$

Na Equação 9, ϵ_{ij} é a profundidade do potencial entre a barreira atrativa e a repulsiva, σ_{ij} é a distância finita na qual o potencial inter-partícula é zero. Ambos são parâmetros

ajustados experimentalmente ou por cálculos teóricos. Na Equação 10, q_i e q_j correspondem à magnitude das cargas pontuais de cada átomo, r_{ij} a distância entre as cargas, ϵ_0 a permissividade do espaço livre e ϵ_r a constante dielétrica relativa do meio.

2.1.4 Expressão para as Forças de Interação (MED)

Força de Contato Entre as Partículas

No MED, em geral, o contacto entre duas partículas não se dá em um único ponto, mas em uma área finita devido à deformação das partículas, o que é equivalente ao contacto entre dois corpos rígidos sobrepondo-se ligeiramente (Zhu *et al.*, 2007). Na figura 6 podemos visualizar o que acontece nas simulações, sendo a sobreposição ‘e’ entre dois corpos rígidos busca representar as deformações sofridas pelas duas partículas.

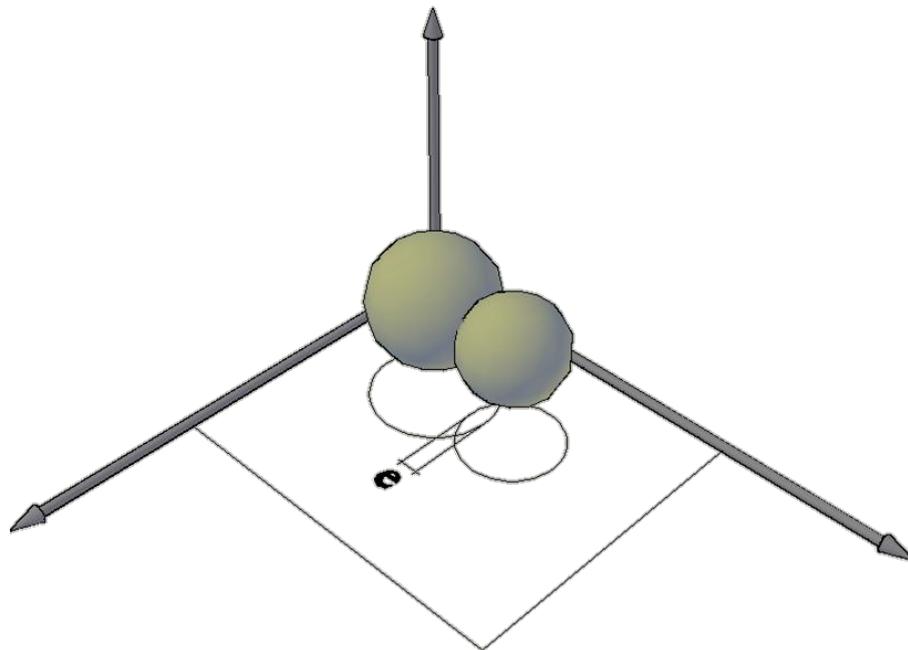


Figura 6 – Sobreposição entre dois corpos rígidos simulando as deformações nas partículas.

Uma vez deformadas as partículas, a interação se dá em um plano de contato onde nele irá agir uma tensão devido a uma força que será decomposta em duas: uma no próprio plano de contato, chamada de componente tangencial, e outra perpendicular ao plano de contato,

assim chamada de componente normal. Na Figura 7 podemos visualizar o plano de contato gerado pela deformação bem como as componentes da força que está atuando sobre a partícula devido ao contato com sua vizinha.

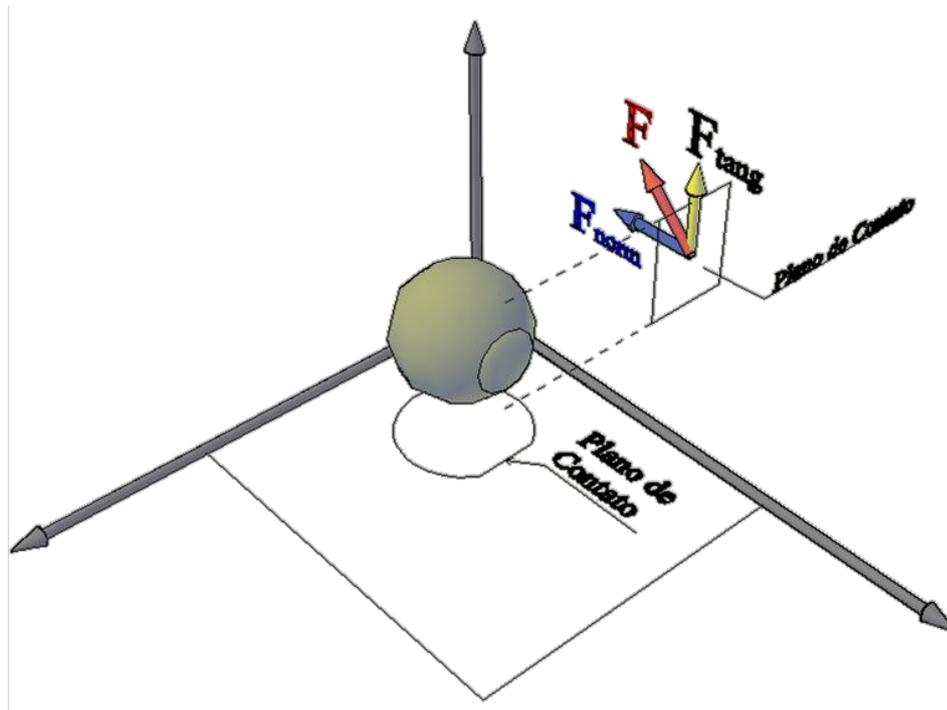


Figura 7 – Plano de contato gerado pela deformação e as forças agindo neste.

A força normal, componente perpendicular ao plano de contato, segundo Pöschel e Schwarger (2005) possui uma parte dissipativa e outra conservativa. Estas características são intrínsecas dos materiais.

Para corroborar e visualizar a parte conservativa e dissipativa dos materiais, apresentamos na Figura 8 um experimento no qual foram confeccionadas duas esferas, cada uma com um material diferente. A esfera 1 (à esquerda) apresenta a componente conservativa maior que a dissipativa, enquanto que na esfera 2 (à direita), a componente dissipativa é a maior. Do tempo t_1 ao tempo t_4 as duas esferas caem ao mesmo tempo e, as únicas forças agindo são a da aceleração da gravidade e da resistência do ar. Ao tocarem no chão (t_5), a força na esfera da esquerda é conservada e, como uma mola elástica, continua a se

movimentar para cima, enquanto que na esfera da direita, a energia cinética foi dissipada e transformada em calor. Sem força resultante, ela para seu movimento no tempo t_7 , enquanto que a esfera 1 continua a movimentar-se para cima e depois para baixo, até que toda a energia seja absorvida pela pequena componente dissipativa.

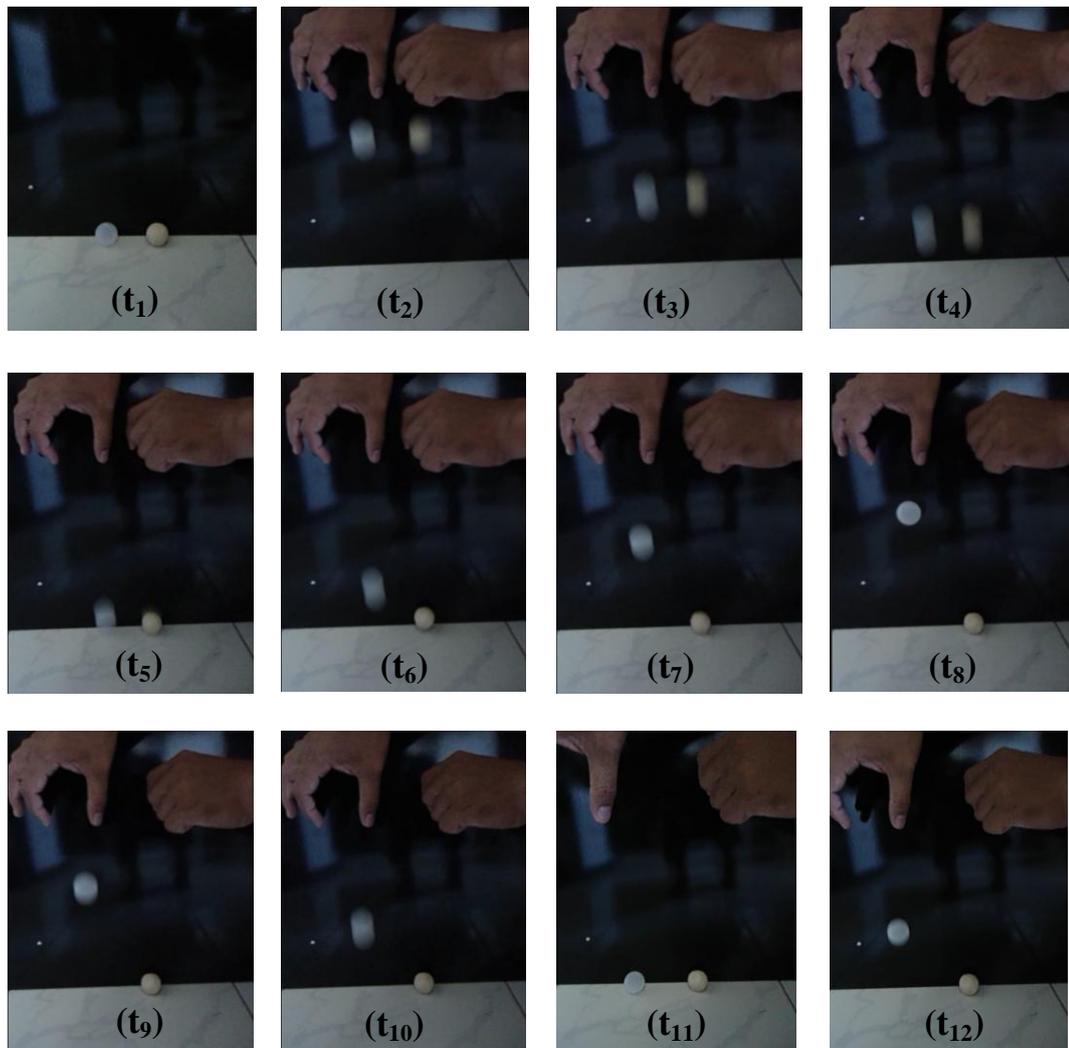


Figura 8 – Experimento para visualização das componentes conservativa e dissipativa.

Força Normal-Modelo Linear Mola-Amortecedor

O modelo mais simples para representar a força normal, é aquele que considera a linearidade entre a força e o deslocamento gerado na partícula. Segundo Hu *et al.* (2011), o modelo linear, proposto por Cundall and Strack (1979), é o mais amplamente utilizado. A Equação 11 nos mostra o citado modelo.

$$F^n = -k_n \xi_n - c_n \dot{\xi}_n \quad (11)$$

Sendo k_n é a rigidez da mola ou constante elástica, c_n é o coeficiente de amortecimento ξ_n e $\dot{\xi}_n$ denotam o deslocamento relativo e da velocidade de partícula i e j , respectivamente. O coeficiente de amortecimento c_n é definido pela Equação 12.

$$c_n = \alpha \cdot c_n^c = \alpha \cdot 2\sqrt{m^* k_n} \quad (12)$$

Em que α é o chamado coeficiente de amortecimento adimensional, c_n^c é o coeficiente de amortecimento crítico, e m^* representa a massa equivalente das partículas i e j , dada pela Equação 13.

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \quad (13)$$

Força Normal-Modelo Elástico Não Linear

Em 1882 Von Herr Heinrich Hertz (1882) propôs uma teoria para descrever o contato elástico entre duas esferas na direção normal. Ele considerou que a relação entre a força e o deslocamento na direção normal fosse não linear. Os resultados experimentais obtidos na presente pesquisa mostram que o modelo não linear para força-deslocamento é o mais indicado para compressão em esferas. Assim, a Equação 14 mostra o modelo de contato elástico deduzido por H. Hertz.

$$F_{el}^n = \left(\frac{4}{3} Y^* \sqrt{R^{eff}} \right) \xi^{3/2} \quad (14)$$

Sendo Y^* o módulo de elasticidade equivalente, dado de forma generalizada, para um contato entre esferas de materiais diferentes, pela Equação 15. E R^{eff} , o raio efetivo do contato, dado pela Equação 16.

$$Y^* = \left(\frac{1-\nu_i^2}{Y_i} + \frac{1-\nu_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \quad (15)$$

Em que Y_i e ν_i são respectivamente o módulo de Young e o coeficiente de Poisson da partícula i , enquanto que Y_j e ν_j o módulo de Young e o coeficiente de Poisson da partícula j .

$$\frac{1}{R^{eff}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (16)$$

Na Equação 16, R_i e R_j são os raios das partículas i e j , respectivamente.

A porção ξ , chamada de compressão mútua entre as partículas, descrita na Equação 17 pode ser visualizada esquematicamente na Figura 9.

$$\xi_{ij} = R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i| \quad (17)$$

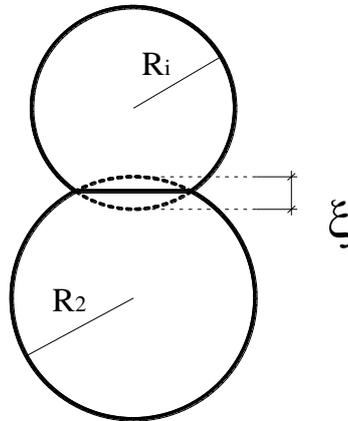


Figura 9 – Compressão mútua entre as partículas i e j .

Para um contato entre duas esferas de mesmo material, a Equação 14 ganha uma nova configuração, descrita pela Equação 18.

$$F_{el}^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \xi^{3/2} \quad (18)$$

Força Normal-Modelo Visco-Elástico Não Linear

Como dito anteriormente, a força normal possui uma componente conservativa e outra dissipativa. Hertz, ao propor o modelo de contato entre duas partículas esféricas, estudou apenas a componente elástica. Contudo, Brilliantov *et al.* (1994) deduziram uma expressão para a componente dissipativa da força normal, dada pela Equação 19.

$$F_{dis}^n = \frac{Y\sqrt{R^{eff}}}{(1-\nu^2)} A\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \quad (19)$$

Com a constante A sendo uma função da viscosidade η do material componente das esferas, dada pela Equação 20.

$$A = \frac{1}{3} \frac{(3\eta_2 - \eta_1)^2}{(3\eta_2 + \eta_1)} \left[\frac{(1-\nu^2)(1-2\nu)}{Y\nu^2} \right] \quad (20)$$

Assim, a força normal que atua entre os corpos esféricos viscoelásticos, no regime quase-estático de colisão, é dada pela Equação 21. (Brilliantov *et al.*, 1994).

$$F^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad (21)$$

As equações 18 e 21 são para o caso de colisões entre partículas de mesmo material. No caso de materiais com diferentes propriedades, a situação é mais complicada e a parte elástica é dada pela Equação 22 (Pöschel e Schwarger, 2005).

$$F_{el}^n = \frac{4\sqrt{R^{eff}}}{3} \left(\frac{1-\nu_i^2}{Y_i} + \frac{1-\nu_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \xi^{3/2} \quad (22)$$

A parte dissipativa da interação não pode ser resolvida tão simples como a parte elástica. Em geral, não existe um caminho fácil para adicionar combinações das propriedades dissipativas para obter o parâmetro de amortecimento A na lei da força, como foi mostrado para a lei elástica. Uma ideia seria tratarmos a combinação $YA/(1-\nu^2)$ como uma analogia dissipativa de $Y/(1-\nu^2)$ e desempenhar de forma recíproca a mesma adição. Contudo, mesmo se uma das partículas deforme conservativamente ($A = 0$) a colisão também será conservativa,

isto é, não existe uma perda de energia devido à deformação dissipativa da colisão vizinha. Para evitar este problema, Pöschel e Schwager (2005) propuseram, usando a média aritmética de A , como uma constante de amortecimento, produzindo:

$$F^n = \frac{4\sqrt{R^{eff}}}{3} \left(\frac{1-v_i^2}{Y_i} + \frac{1-v_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \left(\xi^{3/2} + \frac{A_i + A_j}{2} \sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad (23)$$

Força Normal-Modelo de Walton e Braun

Segundo Bordignon (2010), o modelo proposto por Walton e Braun leva em conta se o material está sendo comprimido ou descomprimido. Isso é, se os centros dos grãos estão se aproximando, $\frac{d\xi}{dt} > 0$, ou estão se afastando, $\frac{d\xi}{dt} < 0$. Neste contexto, o modelo assume que o material se comporta de forma distinta quando está sendo comprimido ou descomprimido. A Equação 24 nos mostra o citado modelo, dadas as condições.

$$F^n = \begin{cases} Y_l \xi & \text{se } d\xi / dt \geq 0 \\ Y_u (\xi - \xi_0) & \text{se } d\xi / dt < 0. \end{cases} \quad (24)$$

Sendo Y_l e Y_u representam o módulo de Young de compressão e descompressão, respectivamente, admitindo assim que Y assuma diferentes valores, dependendo da situação em que se encontra a colisão.

Força Tangencial

Como dito anteriormente, numa colisão entre duas partículas, no plano de contate age uma força (como exemplo tomemos a força que a partícula j faz sobre partícula i), que devido ao choque oblíquo, é dividida em duas componentes. Descreveremos agora a componente perpendicular ao plano de contato, chamada de força tangencial. Imaginemos o esquema mostrado pela Figura 10, que mostra a colisão entre duas partículas e detalha cada componente para determinar a velocidade relativa na direção tangencial v_{rel}^t . A partícula i

possui um raio R_i , velocidade translacional \vec{v}_i e velocidade angular ω_i . A partícula j possui, por sua vez, R_j , \vec{v}_j e ω_j , respectivamente o raio, velocidades translacional e angular.

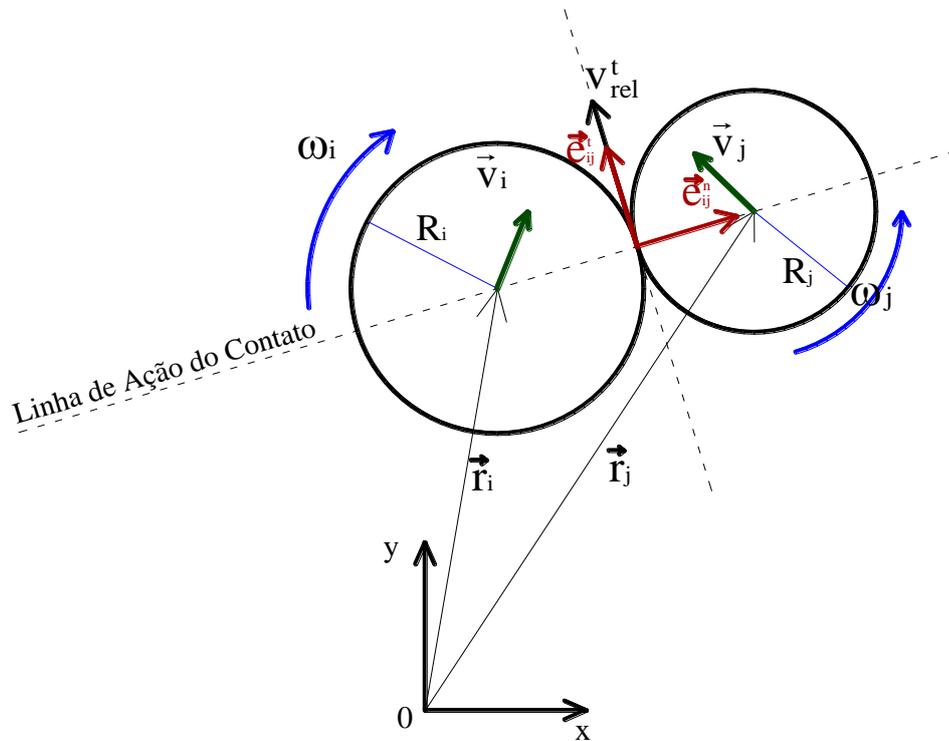


Figura 10 – Colisão entre duas partículas e detalhe dos componentes da velocidade tangencial relativa

Com o modelo da Figura 10, podemos definir a velocidade tangencial relativa, resultante da colisão, pela Equação 25. Esta grandeza será útil para descrever a força tangencial em alguns modelos encontrados nas bibliografias.

$$v_{rel}^t = (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \vec{e}_{ij}^t + R_i \omega_i + R_j \omega_j \quad (25)$$

Segundo Pöschel e Schwager (2005), a força tangencial é determinada principalmente pelas propriedades da superfície das partículas granulares e é de suma importância para a simulação realística de um sistema granular.

Força Tangencial-Modelo de Haff e Werner

No modelo proposto por Haff e Werner (Equação 26), a força tangencial vai depender do módulo da velocidade tangencial relativa ou da força normal agindo nas partículas. Assim,

para pequenas velocidades relativas ou grandes forças normais, a força tangencial é representada por um amortecimento cisalhante e varia linearmente com a velocidade tangencial relativa.

$$F^t = -\text{sign}(v_{rel}^t) \cdot \min(\gamma^t |v_{rel}^t|, \mu |F^n|) \quad (26)$$

Sendo F^t , a força tangencial, γ^t o coeficiente de rugosidade tangente e μ o coeficiente de atrito de Coulomb. Contudo, para grandes velocidades relativas e pequenas forças normais, ou seja, quando $\gamma^t |v_{rel}^t|$ exceder $\mu |F^n|$ a força tangencial assume o valor $F^t = \mu |F^n|$, repetindo assim a lei de atrito de Coulomb e sendo sempre limitada por ela, conforme a Equação 27 nos mostra.

$$|F^t| \leq \mu |F^n| \quad (27)$$

O parâmetro γ^t é determinado pela textura da superfície do grão, tornando um problema determiná-lo a partir da textura do tipo do material. Em geral, esse coeficiente é ajustado à posteriori, comparando os resultados da simulação com experimentos em laboratórios, (Bordignon, 2010). Contudo, Pöschel e Schwarger (2005) afirmam que este modelo tem sido usado com sucesso em muitas simulações.

Força Tangencial-Modelo de Cundall e Strack

Este modelo tem a vantagem de comprometer um esforço computacional relativamente pequeno e boa concordância com os experimentos para a simulação do comportamento estático (Pöschel e Schwarger, 2005). O atrito estático é descrito por uma mola atuando na direção tangencial ao plano de contato. Imagine as partículas como sendo engrenagens com dentes flexíveis. Na Figura 11 mostramos um esquema de como funciona o atrito estático pelo modelo de Cundall e Strack. No tempo t_1 inicia-se o contato, e os dentes flexíveis, como se fossem de borracha, deformam-se impedindo parcialmente o movimento

(tempos t_2 e t_3). Após o tempo t_4 , momento em que não estão mais se tocando, podemos definir o alongamento $\zeta(t)$, para um caso geral pela Equação 28.

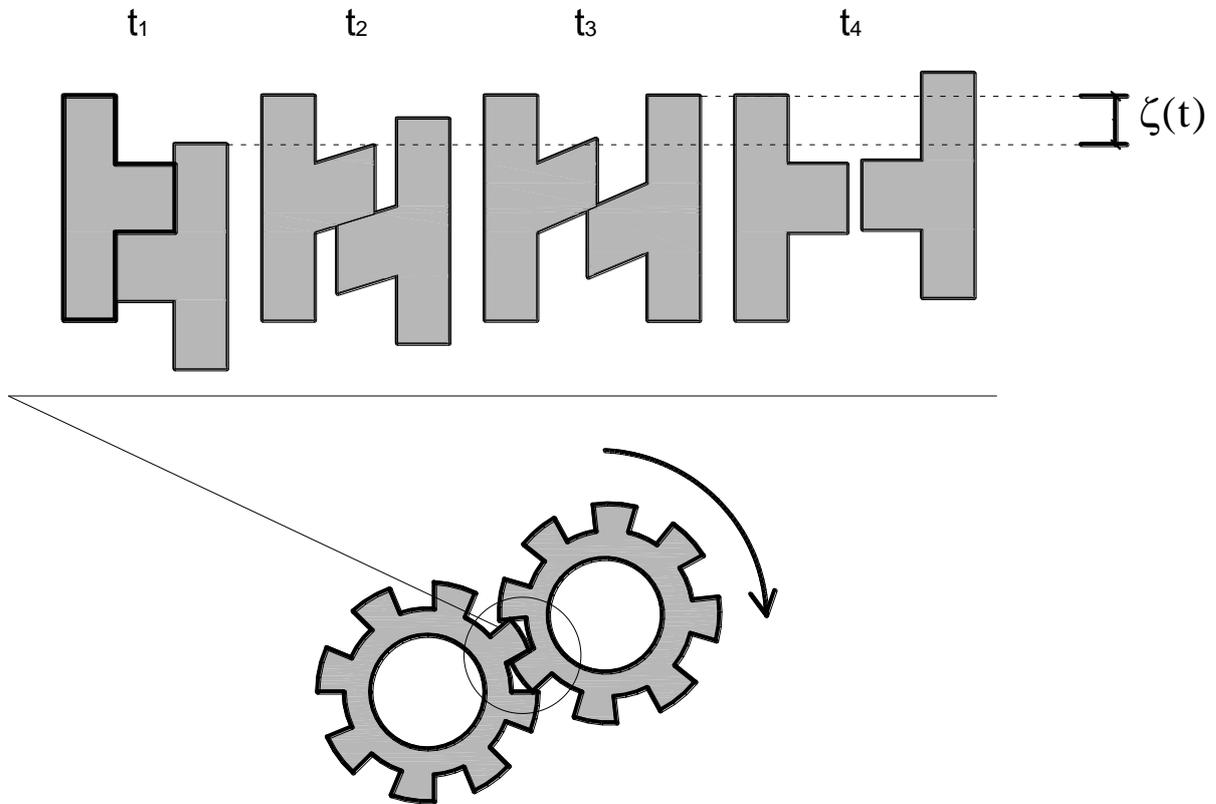


Figura 11 – Esquema do atrito estático pelo modelo de Cundall e Starck

$$\zeta(t) = \int_{t_{ij}^c}^t v_{ij}^t(x) dx \quad (28)$$

Em que t_{ij}^c é o tempo em que as partículas se tocam (igual a t_1 no exemplo da Figura 11) e $\zeta(t)$ é o comprimento da mola. Esta quantidade determina a força tangencial, novamente limitada pela lei de Coulomb e descrita pela Equação 29.

$$F^t = -\text{sign}(v_{rel}^t) \cdot \min(|k^t \zeta|, \mu |F^n|) \quad (29)$$

Sendo k^t uma constante determinada a partir da comparação dos resultados experimentais com a simulação. Assim, o termo $\gamma^t |v_{rel}^t|$ da Equação 26, foi substituído por $|k^t \zeta|$.

Segundo Bordignon (2010), Outros modelos são encontrados na literatura, por exemplo, Walton e Braun definem a força tangencial não dependente somente do estado atual da simulação, utilizando informação do passo de tempo anterior.

Força de não Contato e de Interação Partícula-Fluido

O sistema simulado na presente pesquisa consiste de um conjunto de partículas secas, confinadas em um cilindro sob a ação de uma força externa (pistão). Deste modo, descrever as forças de interação das partículas que não estão em contato umas com as outras foge do foco da pesquisa, uma vez que não haverá existência de água suficiente para transmitir ondas de choque devido a colisões vizinhas ou para gerar o efeito da capilaridade.

2.1.5 Solução das equações de movimento de Newton

Segundo Pöschel e Schwarger (2005) A dinâmica de um material granular é governada pelas equações de movimento de Newton para o centro de massa coordenado e ângulo de Euler das partículas i ($i=1,\dots,N$). No caso de sistemas granulares sem água suficiente para gerar ondas de choque ou forças capilares, a Equação 30 nos mostra a segunda lei de Newton para o movimento de translação e a Equação 31 para o movimento de rotação.

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\theta}_j, \vec{\omega}_j) \quad (30)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{\theta}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\hat{J}_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\theta}_j, \vec{\omega}_j) \quad (31)$$

A força \vec{F}_i e o torque \vec{M}_i que atuam sobre a partícula i de massa m_i e momento tensorial de inércia \hat{J}_i , estão em função das posições \vec{r}_j e da orientação angular $\vec{\theta}_j$ das partículas vizinhas, e suas correspondentes velocidades \vec{v}_j e $\vec{\omega}_j$.

Assim, dadas as condições iniciais, como a posição e a velocidade inicial a um tempo t e definidos os modelos de contatos para cálculo das forças, o passo seguinte consiste na integração das equações de movimento descritas pelas Equações 30 e 31 para um tempo $t + \Delta t$, sendo o incremento Δt será muitas vezes menor do que o tempo feito para uma partícula viajar seu próprio comprimento.

Conforme Allen e Tildesley (1987), um método padrão para solução de equações diferenciais ordinárias, como as Equações 30 e 31, é a abordagem das diferenças finitas. Corroborando o afirmado pelos citados autores, Namba (2008) disserta que a integração das equações de movimento é realizada através de algoritmos baseados nos métodos das diferenças finitas, nos quais a integração é dividida em pequenos intervalos de tempo (passos de integração).

Existe uma variedade de algoritmos para a integração numérica de sistemas de equações diferenciais acopladas, sendo que alguns se destacam mais, devido a suas características de estabilidade numérica. Dois algoritmos merecem destaque devido ao uso em simulações por Dinâmica Molecular Clássica (Namba *et al*, 2008; Gonçalves e Martins, 2009; Donzé *et al*, 2009 etc.) e por Elementos Discretos (Pöschel e Schwarger, 2005; Brilliantov *et al*, 1996 etc.) que serão descritos a seguir.

Algoritmo de Verlet

Talvez o método mais utilizado de integração das equações de movimento, o algoritmo proposto por Loup Verlet (Verlet, 1967) é um método de solução direta das equações de segunda ordem que se baseia em posições $[\vec{r}(t)]$ e acelerações $[\vec{a}(t)]$ do passo atual e as posições do passo anterior $[\vec{r}(t - \Delta t)]$. A expressão para o avanço das posições é descrita pela Equação 32 (Allen e Tildesley, 1987).

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \vec{a}(t) \quad (32)$$

Observa-se na Equação 32 que as velocidades não aparecem. Elas foram suprimidas por adição das equações obtidas pela expansão em série de Taylor em torno de $\vec{r}(t)$. As Equações 33a e 33b mostram a citada adição.

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) + \dots \quad (33a)$$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) - \dots \quad (33b)$$

A soma das Equações 33a e 33b bem como o isolamento do termo $\vec{r}(t + \Delta t)$ recai na Equação 32. As velocidades podem ser obtidas a partir da Equação 34. Elas não são necessárias no cálculo das trajetórias, mas são úteis para a estimativa da energia cinética e consequentemente a energia total.

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (34)$$

O algoritmo de Verlet tem sido bastante utilizado em simulações por Dinâmica Molecular a sistemas atômicos (Namba *et al*, 2008; Gonçalves e Martins, 2009), porém ele também pode ser utilizado em sistema de partículas macroscópicas (Donzé *et al*, 2009, por exemplo).

Algoritmo de Gear predictor-corretor

A integração das equações de movimento de Newton (Equações 30 e 31) para sistemas de partículas granulares é numericamente difícil, devido à interação de curto alcance com gradientes extremamente íngremes. O algoritmo de Gear é particularmente adequado para este problema, principalmente por causa da sua estabilidade numérica (Pöschel e Schwarger, 2005).

Segundo Bordignon (2010), este algoritmo é uma boa opção para integrar as equações de movimento, pois ele consegue lidar com o fato da alta frequência que aparece nas

acelerações, desde que seja escolhida uma ordem relativamente grande do método. Outro ponto que o citado autor levanta, é também a maior vantagem deste método, pois apenas uma avaliação das forças é necessária por passo de tempo.

O algoritmo de Gear é um método de integração do tipo preditor-corretor (do inglês *predictor-corrector*). No primeiro passo, o preditor, são aproximadas as posições das partículas, velocidades, e derivadas de ordem superior no tempo $t + \Delta t$ extrapolando os valores atuais utilizando uma expansão de Taylor em torno do ponto t .

$$\begin{aligned}\vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \vec{r}_i(t) + \Delta t \frac{d}{dt} \vec{r}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i(t) + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i(t) + \dots \\ \frac{d}{dt} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \frac{d}{dt} \vec{r}_i(t) + \Delta t \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i(t) + \dots \\ \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i(t) + \Delta t \frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i(t) + \dots \\ \frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i(t) + \dots \\ &\vdots\end{aligned}$$

O sobrescrito *pr* marca estes valores como preditor. As coordenadas previstas e as derivadas no tempo são agora usadas para o cálculo das forças $\vec{F}_i(\vec{r}_j^{pr}, \vec{v}_j^{pr}, \omega_j^{pr})$ e dos torques $M_i(\vec{r}_j^{pr}, \vec{v}_j^{pr}, \omega_j^{pr})$. Com auxílio das equações de movimento de Newton (Equações 30 e 31) e das forças e dos torques obtidos, são calculadas as acelerações linear $\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t)$ e angular $\frac{d^2}{dt^2} \vec{\varphi}_i^{corr}(t + \Delta t)$ de cada partícula. Com isto, é definido o erro de predição para a aceleração como sendo a diferença entre a corrigida e a prevista, conforme mostra a Equação 35.

$$\Delta \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t + \Delta t) \equiv \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t) - \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) \quad (35)$$

A computação das acelerações corrigidas bem como o erro de predição destas faz parte da primeira etapa do passo corretor. Na segunda etapa, a predição sofre uma correção com o auxílio do erro obtido pela Equação 35. As expressões abaixo descrevem as novas posições corrigidas (Equações 36a-d).

$$\vec{r}^{corr}(t + \Delta t) = \vec{r}^{pr}(t + \Delta t) + c_0 \Delta \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t + \Delta t) \quad (36a)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t) = \frac{d}{dt} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) + c_1 \Delta \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t + \Delta t) \quad (36b)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t) = \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) + c_2 \Delta \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t + \Delta t) \quad (36c)$$

$$\frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t) = \frac{d^3}{dt^3} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) + c_2 \Delta \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t + \Delta t) \quad (36d)$$

Com isto, $\vec{r}^{corr}(t + \Delta t)$ passa a representar uma melhor aproximação da posição verdadeira. O mesmo raciocínio deve ser feito para a velocidade $\frac{d}{dt} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t)$ e aceleração

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i^{corr}(t + \Delta t).$$

Os valores dos coeficientes c_i irão depender da ordem do algoritmo, bem como do tipo da equação diferencial.

Ao final deste processo, avança-se o contador de tempo $t := t + \Delta t$ e o algoritmo de Dinâmica Molecular procede novamente com o passo preditor (Pöschel e Schwarger, 2005).

2.2 Agregados Sinterizados de Argila Calcinada

2.2.1 O ASAC e seus Processos de Produção

Os Agregados Sinterizados de Argila Calcinada são um produto resultante da queima da argila, processo que confere uma rigidez considerada. O citado processo é similar ao de confecção dos tijolos cerâmicos utilizados na construção de parede de vedação (alvenaria de vedação). A forma final de agregado é obtida de duas formas: (a) processo artesanal (Figura 12), que é lento e resulta em pequenas quantidades de material com granulometria descontínua, o que dificulta o enquadramento das misturas asfálticas nas faixas granulométricas utilizadas (Silva *et al.*, 2009) comentam ser; (b) processo de queima de tijolos com dimensão previamente definida, seguido da britagem destes e separação por granulometria (Figura 13).



Figura 12 – ASAC: Agregados produzidos de forma artesanal
Fonte: Silva *et al.*, 2009.



Figura 13 – ASAC: Agregados produzidos em olaria
Fonte: Silva *et al.*, 2009.

Em Agosto de 2006 o Instituto Militar de Engenharia – IME (BR/RJ) recebeu a patente número PI 0405979-4ª referente a um processo de produção do agregado artificial de argila calcinada, conforme o diagrama apresentado na Figura 14.

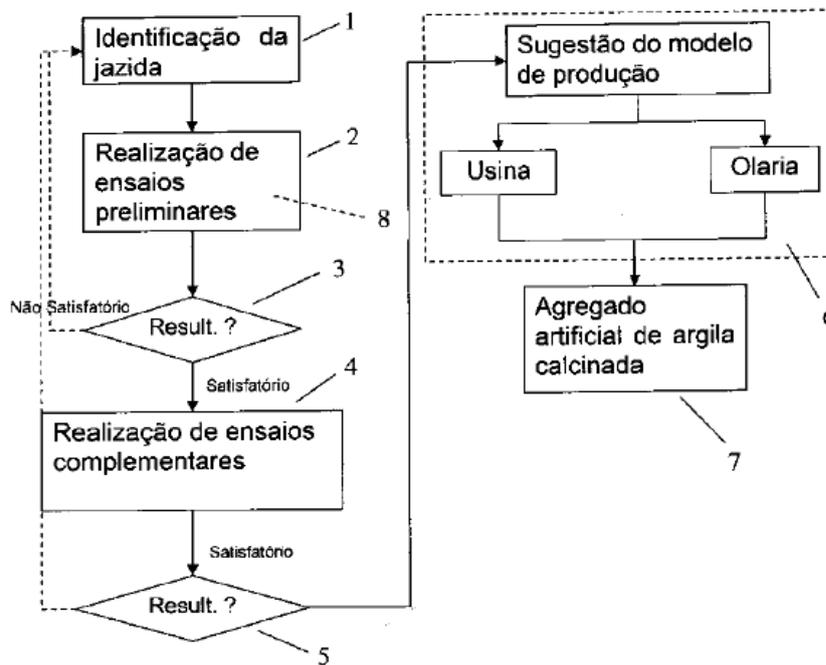


Figura 14 – Processo de identificação, caracterização e preparo da matéria-prima para produção de ASAC.

Fonte: Patente PI 0405979-4ª

Trabalhos realizados apontam características que um solo deve apresentar para ser utilizado na fabricação do ASAC. A granulometria e a plasticidade devem ser levadas em conta, porém a constituição mineralógica do solo exerce forte influência nas características do agregado (Silva, 2006). Solos com mesmas características de plasticidade e elevados teores de argila produzem agregados com propriedades totalmente diferentes se os argilo-minerais forem diferentes. Deste modo, segundo Cabral (2005), para se obter um agregado com qualidade satisfatória, é necessário que o solo apresente em sua constituição mineralógica a illita, caulinita ou a montimorilonita, independente do percentual.

2.2.2 Pesquisas para Validação do ASAC

A utilização do ASAC na construção civil, em particular na pavimentação, se deu pela carência de material pétreo na região amazônica que, por outro lado, apresenta em sua camada superficial de material predominantemente argiloso. As pesquisas voltadas para esse tipo de

agregado, principalmente os de argila expandida, começaram nos Estados Unidos na década de 1920, onde podemos destacar os estudos realizados pelo *Texas Highway Department* e pela *Louisiana Department of Highways* no final dos anos de 1960 (BATISTA, 2004).

Segundo Silva (2006), os estudos de agregado artificial de argila iniciaram-se com a tentativa de produção de argila expandida. Esse material possui um custo elevado, pois necessita de altas temperaturas (em torno de 1100°C) para sua fabricação, ao mesmo tempo que as argilas para sua fabricação precisam ter características piroexpansivas. Com isso, a utilização dos agregados sinterizados apresentava-se mais viável economicamente e suas jazidas para matéria prima de bem mais fácil obtenção.

No Amazonas, muitos trabalhos têm sido publicados pelo Grupo de Pesquisas em Geotecnia da Universidade Federal do Amazonas – UFAM no intuito de validar tecnicamente o ASAC. Tais pesquisas vão desde estudos de exploração de jazidas de argila para fins de calcinação e caracterização destas (Frota *et al.*, 2004 e Frota *et al.*, 2006b) passando por métodos de produção dos agregados em escala industrial (Silva *et al.*, 2009), chegando ao estudo das propriedades mecânicas de misturas asfálticas confeccionadas com ASAC como agregado graúdo. Dois exemplos são mostrados a seguir.

Frota *et al.* (2003) estudaram duas misturas asfálticas do tipo Concreto Asfáltico – CA, onde apenas os agregados graúdos variavam. Na Mistura 1 foi utilizado o seixo rolado e na Mistura 2 o ASAC. O objetivo principal do estudo era mostrar o desempenho das duas misturas quando submetidas a ensaios para determinação da estabilidade (Figura 15) e fluência (Figura 16), ensaios básicos de avaliação de misturas asfálticas na pavimentação.

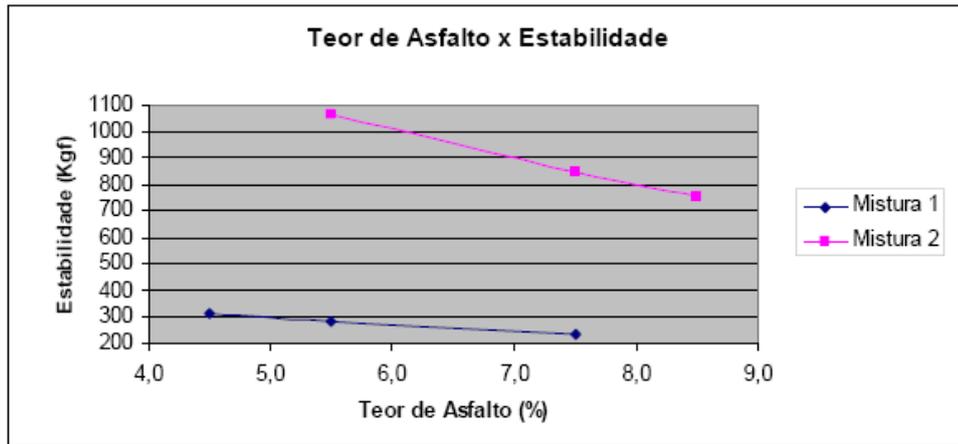


Figura 15– Estabilidade das misturas em função do teor de asfalto.
Fonte: Frota *et al.* (2003)

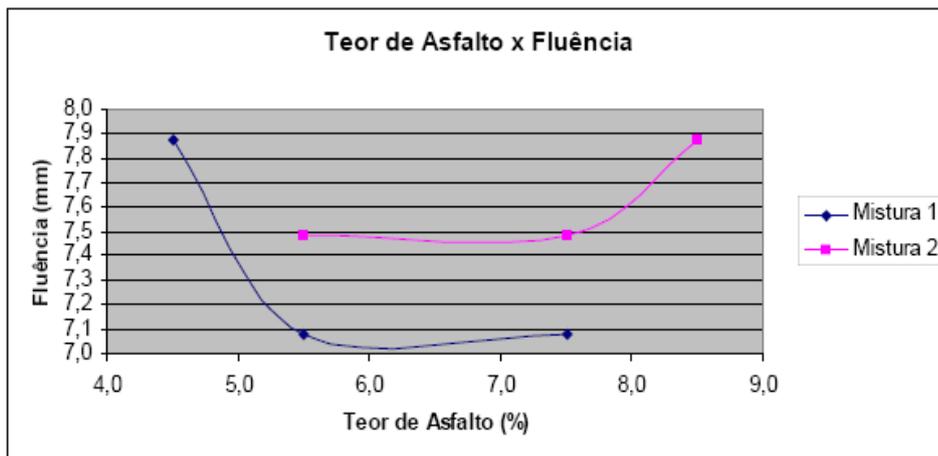


Figura 16– Fluência das misturas em função do teor de asfalto.
Fonte: Frota *et al.* (2003)

A conclusão foi satisfatória em favor do ASAC, comparado com o seixo, e os seguintes comentários foram levantados pelos autores:

- *A utilização do seixo, como agregado graúdo, com superfície lisa e forma arredondada acarretou a diminuição da resistência ao cisalhamento interno da Misturas 1;*
- *A Mistura 2 apesar de utilizar teores de ligante mais elevados que o da Mistura 1, apresentou as maiores estabilidades devido a angulosidade da argila calcinada;*

• A argila encontrada em todo o estado do Amazonas, depois de passar por um processo de calcinação, mostrou viabilidade técnica ao substituir o seixo, além de reduzir impactos ambientais.

Outro estudo realizado por Frota *et al.* (2006a) submetia uma mistura asfáltica confeccionada com ASAC ao envelhecimento nas condições de 0h (zero hora), 8h (oito horas) e 24h (vinte e quatro horas) em estufa à 60°C. Para cada condição, foram realizados ensaios de estabilidade e fluência bem como uma compressão estática a fim de verificar o comportamento viscoelástico da mistura segundo o ensaio de *creep* estático. A Figura 17 mostra o gráfico com os resultados obtidos concernentes aos ensaios de estabilidade e fluência em função do tempo de envelhecimento.

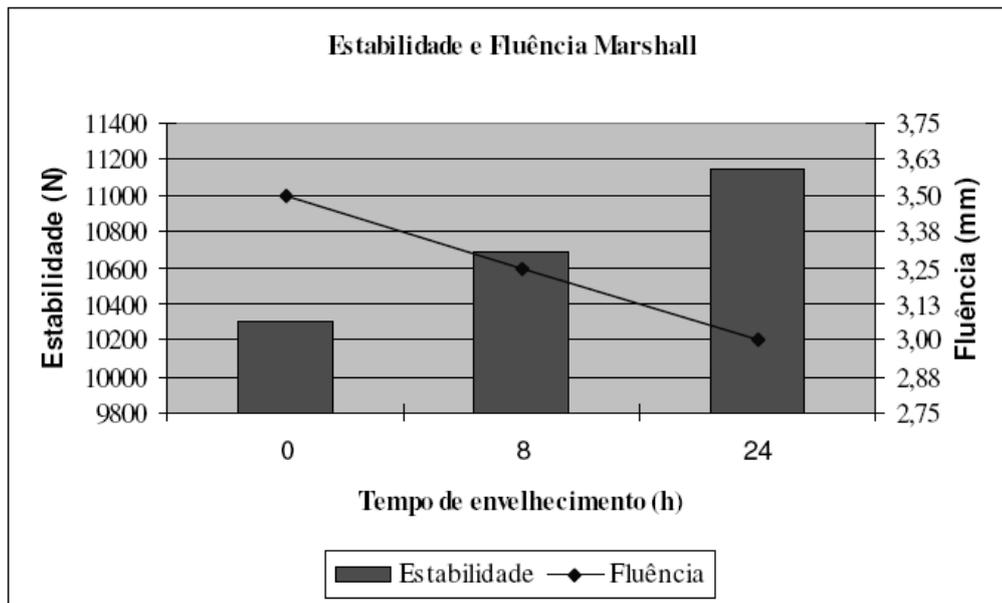


Figura 17– Estabilidade e fluência em função do envelhecimento para uma mistura com ASAC.
Fonte: Frota *et al.* (2006a)

A Figura 18 mostra os resultados do ensaio de compressão estática (*creep*) em função do tempo.

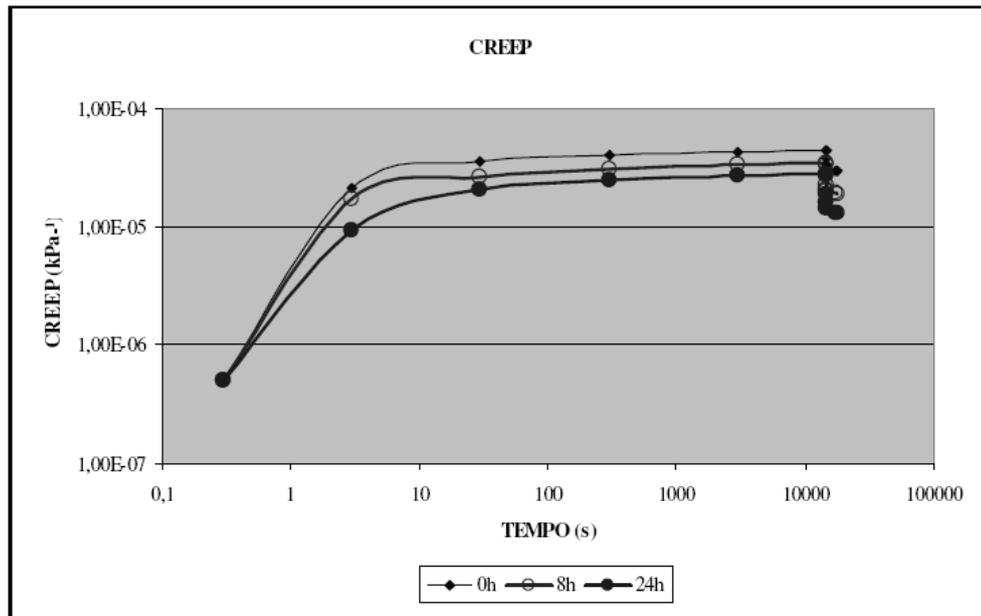


Figura 18 – Creep estático em função do envelhecimento para uma mistura com ASAC.
Fonte: Frota *et al.* (2006a)

Segue a conclusão dos autores:

- *O aumento do tempo de envelhecimento contribui para o aumento da rigidez da mistura, por meio da perda de voláteis do ligante;*
- *O aumento da rigidez proporciona a diminuição das deformações específicas e consequentemente dos valores de creep;*
- *A vida de fadiga é reduzida devido ao aumento da rigidez, facilitando assim o aparecimento de trincas no revestimento em serviço.*

O Instituto Militar de Engenharia, através do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Transportes, também tem publicado estudos sobre o processo de produção, bem como o comportamento mecânico do ASAC empregado na pavimentação (Batista, 2004; Cabral, 2005; Silva, 2006) e na confecção de concreto de cimento Portland (Mattos Júnior, 2007). Em um trabalho mais recente, Santos (2008) estudou a aplicação de misturas asfálticas confeccionadas com ASAC em um trecho experimental. A Figura 19a mostra a pista aplicada

com concreto asfáltico enquanto que a 19b apresenta a pista aplicada com micro-revestimento.



a) Concreto Asfáltico



a) Micro-Revestimento

Figura 19– Pistas experimentais com uso do ASAC.
Fonte: Santos (2008)

As pesquisas realizadas na busca pela validação do ASAC, na maioria, são relativas às propriedades como partícipe em compósitos asfálticos ou em concreto de cimento Portland. O estudo de uma propriedade como o Módulo de Elasticidade ajudará na busca pela caracterização do citado material e assim defini-lo como agregado da construção civil.

2.3 Caroco do Açaí

2.3.1 A Palmeira do Açaí

O Açaizeiro é uma palmeira endêmica da região amazônica, encontrado naturalmente em solos de várzea, igapó e terra firme, sendo predominante em solos de várzea baixa. Dentre as dez espécies do gênero *Euterpe* registradas no Brasil e as sete que ocorrem na amazônica (Oliveira *et al.*,2002), duas merecem destaque: A *Euterpe oleracea* Martius. (também conhecido por açaí, açaí-do-pará, juçara, açaí-verdadeiro etc.) e a *Euterpe precatoria* Martius. (açaí de Codajás, açaí do mato ou açaí solteiro).

A *Euterpe oleracea* Martius é uma palmeira da Amazônia Oriental. É nativo do Pará, com maior ocorrência no estuário do rio Amazonas. Ocorre também no Amapá, Amazonas, Maranhão, Guianas e Venezuela. Os açazais densos ocorrem naturalmente em áreas de várzea e igapó (Shanley e Medina, 2005). Segundo Calzavara (1972 *apud* Reis *et al.*, 2002) uma característica importante desta palmeira é seu crescimento em touceiras, composta por várias estipes que pode chegar até 25 pés em cada touceira, sendo que cada estipe produz anualmente de cinco a oito cachos de fruto. A Figura 20 ilustra os elementos citados, componentes do açazeiro bem como imagens da palmeira.

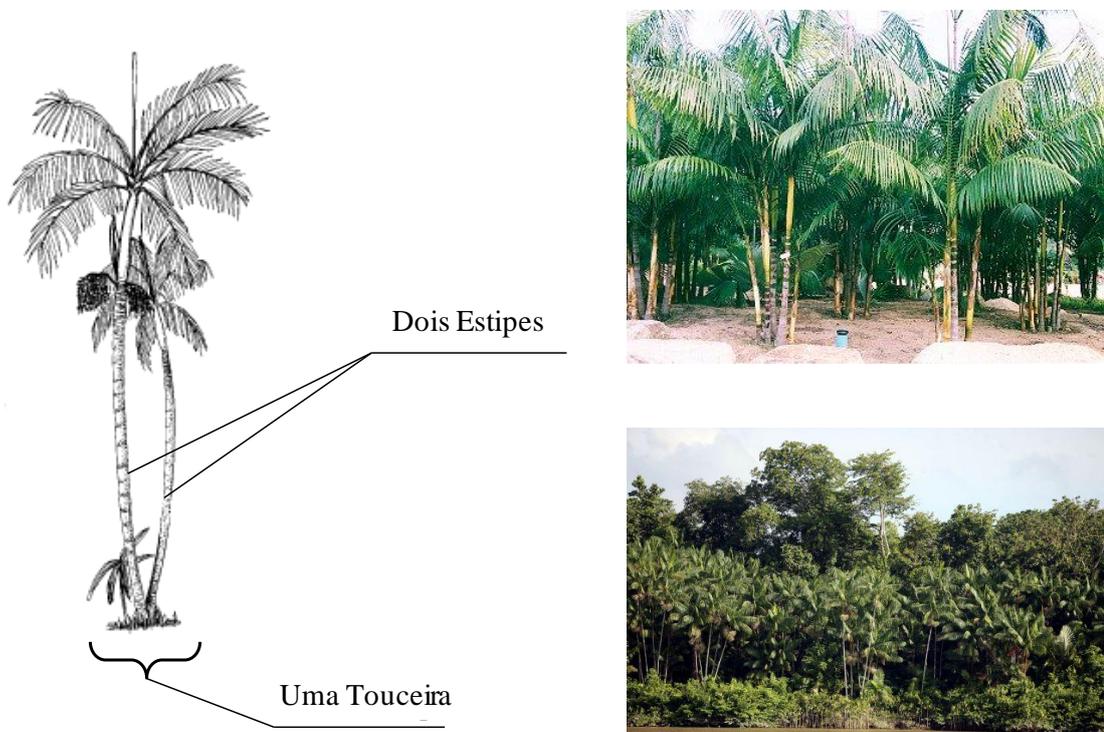


Figura 20 – Componentes e fotos do açazeiro *Euterpe oleracea* Martius.
Fonte: adaptada de Shanley e Medina (2005)

Já a *Euterpe precatoria* Martius, que ocorre na Amazônia oriental é diferente da espécie de açaí que ocorre no Pará (açaí de touceiras). O açaí solteiro, como o nome já diz, possui apenas 1 estipe (tronco) e é geralmente maior do que o açazeiro paraense (pode atingir mais de 23 metros de altura). Ele é nativo do oeste da Amazônia brasileira, típico de florestas

maduras, e ocorre tanto nas áreas inundadas como na terra firme. É pouco resistente ao fogo e raramente ocorre em áreas desmatadas. Os frutos são utilizados para preparar o “vinho”, em processo similar ao do “vinho” do açaí do Pará (Shanley e Medina, 2005). A Figura 21 nos mostra um esquema bem como imagens da *Euterpe precatoria* Martius.

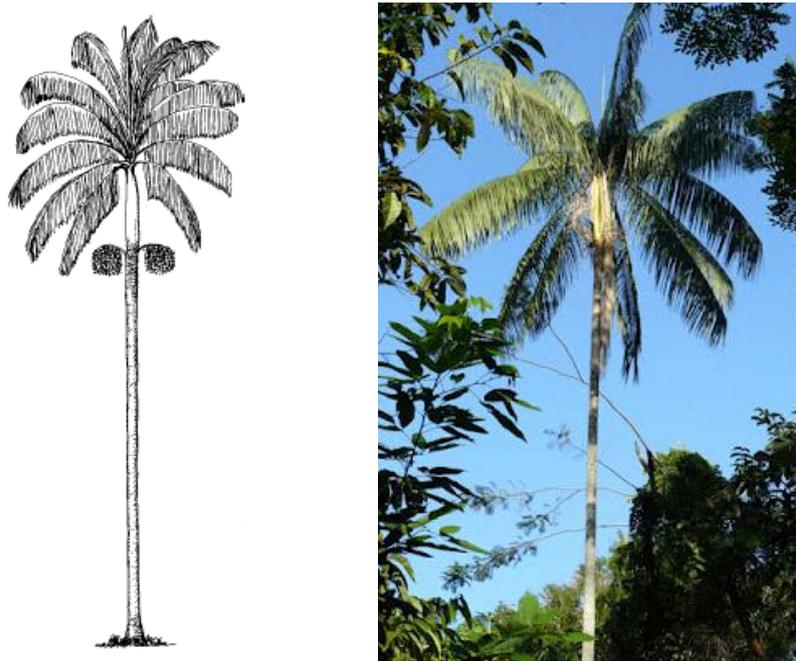


Figura 21 – Açaizeiro *Euterpe precatoria* Martius.
Fonte: adaptada de Shanley e Medina (2005)

2.3.2 O Fruto do Açaí

Segundo Rogéz (2000 *apud* Reis *et al.*, 2002) o fruto do açaí é arredondado, de 1 a 2 cm de diâmetro e um peso médio de 0,8 a 2,3g seu epicarpo é de cor violáceo – púrpura quase negro e muito fino. O mesocarpo também é bastante fino, tem apenas 1 a 2mm de espessura. O epicarpo e o mesocarpo constituem a parte comestível do fruto. O epicarpo e o mesocarpo são a parte nobre do açaí e muitos estudos na área da medicina e nutrição têm sido desenvolvidos no intuito de caracterizar e determinar suas propriedades como fonte de alimento.

O caroço é formado por um pequeno endosperma sólido ligado a um tegumento que na maturidade é rico em celulose, hemicelulose e cristais de inulina e antes é rico em lipídios. Um pericarpo fibroso, rico em sílica e um endocarpo pouco lenhoso (Rogéz, 2000 *apud* Reis *et al.*, 2002). A Figura 22, retirada do trabalho de Pessoa *et al.*(2010) ilustra os componentes citados do fruto do Açaí.

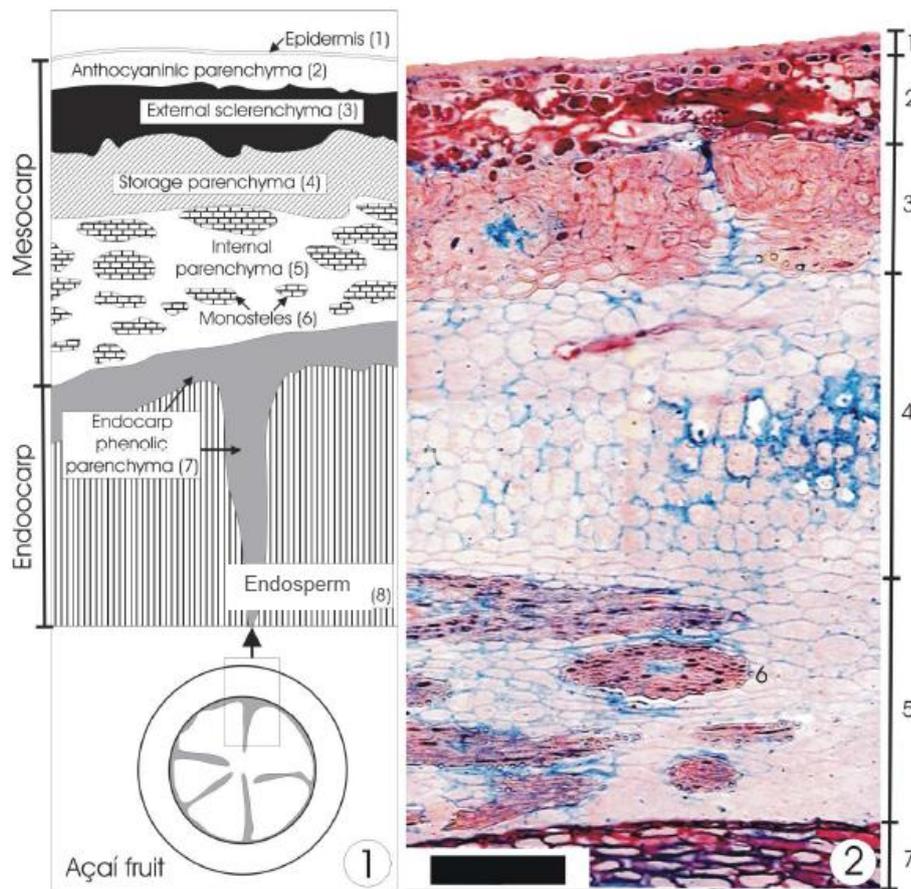


Figura 22 – Diagrama dos estratos componentes e microfotografia do fruto do Açaí
Fonte: Pessoa *et al.* (2010)

Devido ao sabor característico e suas propriedades, o açaí tornou-se popular e hoje tem como consumidor não só o mercado local, mas também o mercado internacional. Segundo o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatísticas – IBGE, no Brasil o estado do Pará responde por maior parte da produção, colocando a região norte como líder com pouco mais de 91% de

tudo que foi produzido (IBGE, 2010). A Tabela 1 nos mostra a produção do açaí no Brasil em 2010, dividindo a resposta desta por estado e região.

Estado	Quantidade (t)	Porcentagem (%)	Região	Quantidade (t)	Porcentagem (%)
Acre	1674	1.35%	Norte	113330	91.09%
Amapá	1427	1.15%			
Amazonas	3256	2.62%			
Pará	106562	85.65%			
Rondônia	408	0.33%			
Tocantins	3	0.002%			
Bahia	160	0.13%	Nordeste	11090	8.91%
Maranhão	10930	8.78%			
Total (Brasil)	124420	100.00%	-	-	-

Tabela 1 – Produção do Açaí por Estado e Região
Fonte: IBGE (2010)

2.3.3 O Carço do Açaí e suas Aplicações

O caroço do açaí constitui 83% do fruto (Chaves, 1948). Segundo dados do IBGE, em 2010 a região norte produziu aproximadamente 94.064 toneladas de resíduos, que é composto pelas fibras e o caroço propriamente dito (Figura 23). Este fato, que é um grave problema ambiental e de saúde pública (Martins, 2009), tem encorajado pesquisadores a estudarem uma utilidade para o caroço do açaí e as suas fibras.



Figura 23 – Caroço do Açaí

Gomes *et al.* (2009) estudaram a influência da adição do caroço do açaí em diferentes porcentagens (0, 5, 10 e 15%) na dieta de ovinos a fim de avaliar o desempenho destes. Segundo os autores, A substituição do feno *coast cross* pelo caroço do açaí promove aumento no consumo de todos os componentes da dieta, bem como, melhorou o desempenho dos animais, sem comprometer a conversão alimentar, para os níveis estudados. Concluíram também que o caroço do açaí, nas condições avaliadas, favorece a elevação na intensidade de produção do sistema, logo, de acordo com as características de cada região, pode ser uma alternativa a ser considerada.

O resíduo em pauta também tem sido utilizado como adubo orgânico. O processo de compostagem orgânica constitui, além de uma alternativa ao uso de nutrientes sintetizados, essenciais ao desenvolvimento das plantas, uma utilização ambientalmente correta. Teixeira *et al.* (2002) publicaram, através da Circular Técnica 29, informações sobre o processo de compostagem a partir de lixo orgânico urbano, caroço de açaí e capim, em leira com aeração por reviramento (Figura 24), em unidades de compostagem e reciclagem de lixo urbano, para municípios com até 80 mil habitantes.



Figura 24 – Partes do processo de compostagem orgânica com aeração por reviramento
Fonte: Teixeira *et al.* (2002)

Outro fim bastante estudado ao caroço do açai é como fonte de energia calorífica. Segundo Silva *et al.* (2004) o poder calorífico do caroço, obtido em laboratório, foi em média 4.505 kcal/kg e o potencial energético em torno de 40.800 MWh/mês. A composição química mostra que o caroço tem uma boa quantidade de celulose, lignina e um baixo teor de cinza e umidade que são de grande importância para a produção de briquetes, conhecidos como lenha ecológica (Reis, 2002).

Apesar das grandes possibilidades de utilização do caroço do açai, existe a necessidade de estudar suas propriedades, como material alternativo, uma vez que se sabe do caráter não renovável dos materiais convencionais.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Simulação por Dinâmica Molecular

3.1.1 Modelagem de Contato

O modelo de contato mais simples para partículas granulares é obtido ao considerá-las no formato de uma esfera (Pöschel e Schwager , 2005). Na Figura 25 visualizamos o contato entre duas partículas esféricas i e j , de massas m_i e m_j e raios R_i e R_j , respectivamente. Deste modo, podemos dizer que haverá contato se e somente se o módulo da diferença entre os vetores posição \vec{r}_i e \vec{r}_j for menor ou igual à soma dos raios das partículas (Equação 37). Ou seja,

$$R_i + R_j \geq |\vec{r}_j - \vec{r}_i| \quad (37)$$

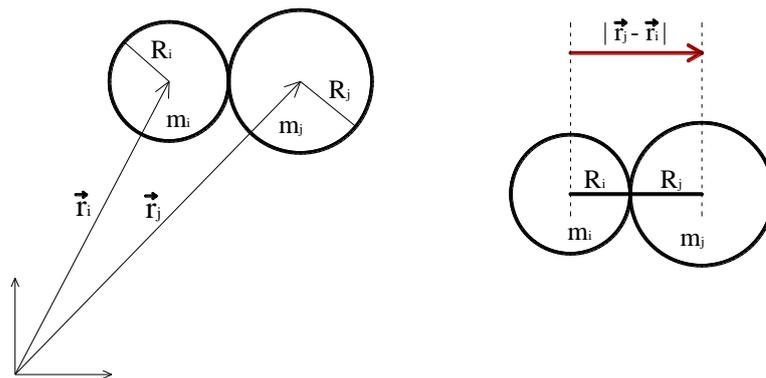


Figura 25 – Modelo de contato entre as partículas.

Escolheu-se este formato por duas razões: a) o custo computacional, uma vez que a esfera é a forma que apresenta simetria radial, o que simplifica as equações que regem os contatos entre esferas com diferentes diâmetros; b) os materiais granulares utilizados na

presente pesquisa possuem a forma aproximadamente esférica, como o Agregado Sinterizado de Argila Calcinada (ASAC) e o Carvão do Açai.

Definimos a compressão mútua ξ_{ij} entre as partículas i e j como sendo (Equação 38):

$$\xi_{ij} = R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i|, \quad (38)$$

utilizada para definir as forças de contato entre as partículas. Assim, conforme a Equação (38) haverá contato entre as partículas quando $\xi_{ij} \geq 0$. Para $\xi_{ij} = 0$ as partículas estão em contato, porém sem deformação. Para $\xi_{ij} > 0$ as partículas estão em contato e diametralmente deformadas, comprimidas uma contra a outra, o que gera fortes forças de repulsão entre elas.

3.1.2 As Forças Agindo Sobre as Partículas

Na simulação pelo Método Dinâmica Molecular o fator mais importante é a força de interação entre os grãos que constituem o material granular, que consideraremos neste trabalho com forma esférica. Os grãos ao interagirem entre si ficam sujeitos a dois tipos de forças: as forças internas do sistema, representadas pelas forças de contato \vec{F}_{ij} entre os grãos i e j , e as forças externas, \vec{F}_{ext} , como é o caso do próprio peso dos grãos. Considerando as forças internas e externas, a força total agindo sobre a partícula i é dada por

$$\vec{F}_i = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \vec{F}_{ij} + \vec{F}_{ext,i} \quad (39)$$

A força externa, em geral, é a força da gravidade, $\vec{F}_{ext,i} = m_i \vec{g}$, sendo m_i , a massa da partícula i e \vec{g} a aceleração da gravidade agindo sobre ela. A força de contato \vec{F}_{ij} entre as partículas tem seu módulo dependente da compressão mútua ξ_{ij} , conforme a Equação 40.

$$\vec{F}_{ij} = \begin{cases} \vec{F}_{ij}^n + \vec{F}_{ij}^t & \text{se } \xi_{ij} > 0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (40)$$

Sendo, $\vec{F}_{ij}^n = F_{ij}^n \vec{e}_{ij}^n$ e $\vec{F}_{ij}^t = F_{ij}^t \vec{e}_{ij}^t$.

Em que \vec{F}_{ij}^n e \vec{F}_{ij}^t são as componentes normal e tangencial, respectivamente, e \vec{e}_{ij}^n e \vec{e}_{ij}^t são vetores unitários na direção normal e tangencial às superfícies no ponto de contato, conforme podemos visualizar na Figura 26.

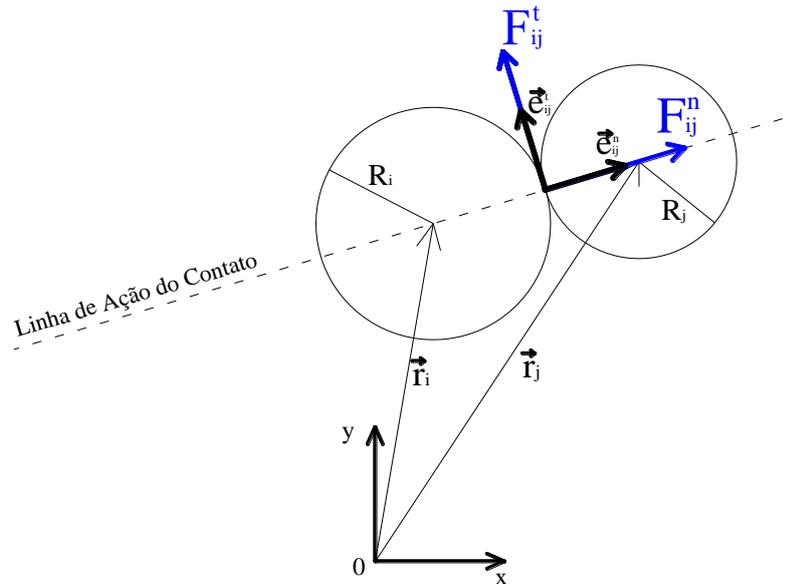


Figura 26 – Esquema das forças e vetores unitários (normal e tangencial à superfície).

Os vetores unitários, normal (\vec{e}_{ij}^n) e tangencial (\vec{e}_{ij}^t), são descritos conforme as expressões 41 e 42, respectivamente.

$$\vec{e}_{ij}^n = \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \quad (41)$$

$$\vec{e}_{ij}^t = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \vec{e}_{ij}^n \quad (42)$$

3.1.3 Expressões para a Força Normal e Força Tangencial

Quando os grãos do sistema entram em contato um com o outro, ambos sofrem deformações, produzindo uma força de interação entre eles. Considerando que essa deformação seja muito pequena, a forma dos grãos praticamente não muda, permanecendo

circular. A força é determinada em função da distância de superposição dos grãos. Um dos modelos para a componente normal da força entre os grãos, de forma esférica, mais utilizado na literatura e utilizado na pesquisa é o modelo viscoelástico generalizado deduzido inicialmente por Hertz (1882), descrito na Equação 43.

$$F_{ij}^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad (43)$$

Sendo o primeiro termo, proporcional a $\xi^{3/2}$, corresponde à parte elástica do modelo, e o segundo termo, proporcional à velocidade da deformação, $\frac{d\xi}{dt}$, está associado com a viscosidade do material. Na Equação 43, Y é o módulo de elasticidade, também conhecido como módulo de Young do material, ν é o coeficiente (ou razão) de Poisson e R^{eff} é o raio efetivo das partículas, dado pela Equação 44.

$$R^{eff} = \frac{R_i R_j}{R_i + R_j} \quad (44)$$

A constante A representa a componente viscosa do material, dada pela Equação 45,

$$A = \frac{1}{2} \frac{(3\eta_2 - \eta_1)^2}{3\eta_2 + 2\eta_1} \left[\frac{(1-\nu^2)(1-2\nu)}{Y\nu^2} \right] \quad (45)$$

em que são consideradas características pertinentes do material, como o coeficiente de viscosidade η , o coeficiente de Poisson ν e o módulo de Young Y .

Em certas circunstâncias a velocidade relativa $\frac{d\xi}{dt}$ com que as partículas se afastam uma da outra, durante o tempo em que estão em contato, pode se tornar negativa. Quando isso ocorre é possível que o termo $\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt}$ na Equação 43 torne-se negativo, de modo que a força normal também fique negativa. Em outras palavras, nesse caso, o modelo proposto

para as forças entre partículas granulares permite, por algum intervalo de tempo, força de atração entre elas, o que contraria um fato real de que entre partículas granulares este tipo de força não existe. Para contornar esta situação, definiu-se, pela Equação 46, a componente da força normal ente as partículas.

$$F^n = \text{máx} \left\{ 0, \left[\frac{2Y\sqrt{R}^{\text{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A \sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \right] \right\} \quad (46)$$

A expressão acima significa que a partir de um certo momento, durante o relaxamento, isto é, quando as partículas continuam em contato, porém se afastando uma da outra, em que o termo $\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A \sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt}$ passa a ser negativo, toma-se a força normal dada pela Equação 46 como nula. Isso assegura que a força entre elas será sempre positiva, isto é, força de repulsão, como ocorre na realidade.

O atrito entre as partículas aqui é considerado variante no tempo, assim para que isto se verifique, a componente tangencial é modelada por meio da Equação 47.

$$F_{ij}^t = -\text{sign}(v_{rel}^t) \cdot \min(\gamma^t | \vec{v}_{rel}^t |, \mu F_{ij}^n) \quad (47)$$

Sendo γ^t é a constante de amortecimento tangencial, μ é o coeficiente de atrito entre as partículas e \vec{v}_{rel}^t é a velocidade tangencial da partícula j em relação à partícula i . A força tangencial \vec{F}_{ij}^t gera um torque \vec{M}_{ij} entre as partículas, dado por $\vec{M}_{ij} = R_i \vec{e}_{ij}^n \times F_{ij}^t \vec{e}_{ij}^t$, produzindo a aceleração angular $\ddot{\theta}_i(t) = \vec{M}_{ij} / J_i$ que determina o movimento rotacional das partículas, sendo J_i o momento de inércia da partícula j . Na Figura 27 mostra-se um esquema do torque gerado pela força tangencial.

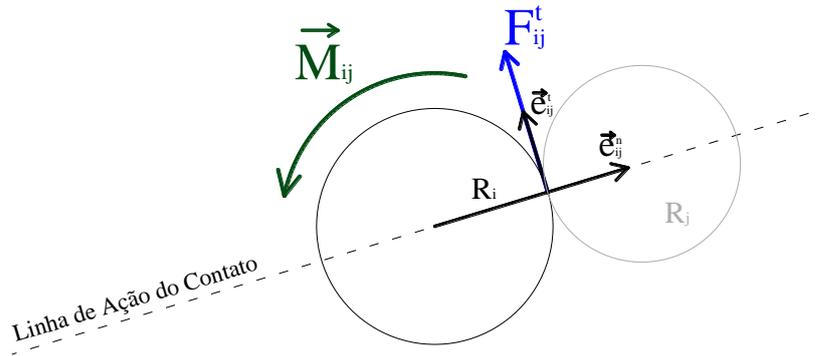


Figura 27 – Esquema do torque gerado pela força tangencial.

3.1.4 Solução das equações de movimento de Newton

No estudo em pauta, considera-se uma amostra do material granular constituída de N grãos, que interagem entre si por forças de contato, além do próprio peso, cuja dinâmica é descrita pela segunda Lei de Newton para as coordenadas dos centros de massa e pelos ângulos de Euler que descrevem a orientação de cada grão, cujas equações são escritas conforme as Equações 48 e 49.

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\theta}_j, \vec{\omega}_j) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (48)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{\theta}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{J_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\theta}_j, \vec{\omega}_j) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (49)$$

Como será analisado um plano vertical de um corpo de prova, em que se reduz o presente estudo a um sistema bidimensional, basta apenas o valor (escalar) de um ângulo θ_i para definir a orientação angular da partícula (Figura 28). Portanto, o momento de inércia reduz-se a um valor escalar J_i . Assim, a Equação 48 e 49 passam a ficar com a configuração descrita pelas Equações 50 e 51, respectivamente.

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \theta_j, \omega_j) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (50)$$

$$\frac{\partial^2 \theta_i}{\partial t^2} = \frac{1}{J_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \theta_j, \omega_j) \quad (j = 1, \dots, N) \quad (51)$$

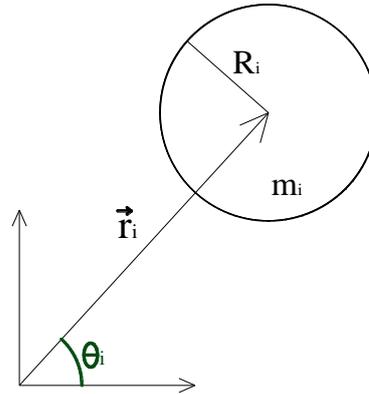


Figura 28 – Orientação angular definida com apenas um valor de ângulo θ_i .

Existe uma variedade de métodos para a integração numérica de sistemas de equações diferenciais acopladas, porém, em se tratando de sistema de partículas granulares, o algoritmo de Gear é o mais adequado devido a sua estabilidade numérica (Pöschel e Schwarger, 2005). Pelo exposto, utilizaremos esta ferramenta que consiste de dois passos: o *predictor* e o *corrector*. No primeiro passo, são calculadas as posições das partículas e suas velocidades e derivadas temporais de ordem superior no tempo $t + \Delta t$, a partir da expansão em série de Taylor no tempo t . A integração dos graus de liberdade de translação e rotação está descrita nas Equações 52 e 53 respectivamente.

$$\begin{aligned} \vec{r}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \vec{r}_i(t) + \Delta t \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \ddot{\vec{r}}_i(t) + \frac{1}{6} \Delta t^3 \dddot{\vec{r}}_i(t) + \dots \\ \vec{v}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \vec{v}_i(t) + \Delta t \ddot{\vec{v}}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \dddot{\vec{v}}_i(t) + \dots \\ \ddot{\vec{r}}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \ddot{\vec{r}}_i(t) + \Delta t \dddot{\vec{r}}_i(t) + \dots \\ &\vdots \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned}
\vec{\theta}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \vec{\theta}_i(t) + \Delta t \vec{\omega}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \ddot{\theta}_i(t) + \frac{1}{6} \Delta t^3 \dddot{\theta}_i(t) + \dots \\
\vec{\omega}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \vec{\omega}_i(t) + \Delta t \ddot{\theta}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \dddot{\theta}_i(t) + \dots \\
\ddot{\theta}_i^{pr}(t + \Delta t) &= \ddot{\theta}_i(t) + \Delta t \dddot{\theta}_i(t) + \dots \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{53}$$

Os resultados obtidos no passo *predictor*, ou seja, as coordenadas e as derivadas temporais são usadas para calcular as forças $\vec{F}_i(\vec{r}_j^{pr}, \vec{v}_j^{pr}, \omega_j^{pr})$ e os torques $\vec{M}_i(\vec{r}_j^{pr}, \vec{v}_j^{pr}, \omega_j^{pr})$, com os quais se obtém no segundo passo (*corrector*) as novas acelerações: linear e angular corrigidas, $\ddot{r}_i^{cor}(t + \Delta t)$ e $\ddot{\theta}_i^{cor}(t + \Delta t)$, respectivamente. Após a correção, as novas posições e velocidades das partículas são determinadas para o tempo $(t + \Delta t)$ e o processo de solução das equações de movimento de Newton prossegue iterativamente, determinando-se essas quantidades no tempo $(t + 2\Delta t)$ e assim sucessivamente.

3.1.5 Desenvolvimento da simulação por Dinâmica Molecular

Utilizando-se o método da dinâmica molecular, desenvolveu-se um programa computacional em linguagem Fortran que seguirá a seguinte metodologia:

- 1) Inicialmente faz-se a leitura dos parâmetros representativos da experiência que se pretende simular: o número de partículas, os raios dos grãos que constituem o sistema (de acordo com uma distribuição granulométrica previamente especificada) e as condições de contorno em que os grãos estão sujeitos.
- 2) Definem-se as coordenadas e velocidades (linear e angular) iniciais das partículas e inicia-se o processo iterativo.
- 3) Para cada incremento de tempo Δt , calcula-se as forças que atuam nas partículas, usando-se modelos constitutivos para as forças de interação de contato entre elas.

- 4) Integram-se numericamente as equações de movimento de Newton usando-se o algoritmo *predictor-corrector* de Gear. Este passo e o anterior constituem-se no ponto central da simulação pelo Método dos Elementos Discretos. Esses passos são repetidos até se atingir o tempo de evolução do sistema para as exigências da experiência simulada que está sendo realizada
- 5) Após um ciclo completo, passa-se à fase final, que consiste na obtenção das propriedades de interesse.

Em síntese, apresenta-se na Figura 29 um fluxograma do programa desenvolvido para simular o comportamento dinâmico de N partículas granulares.

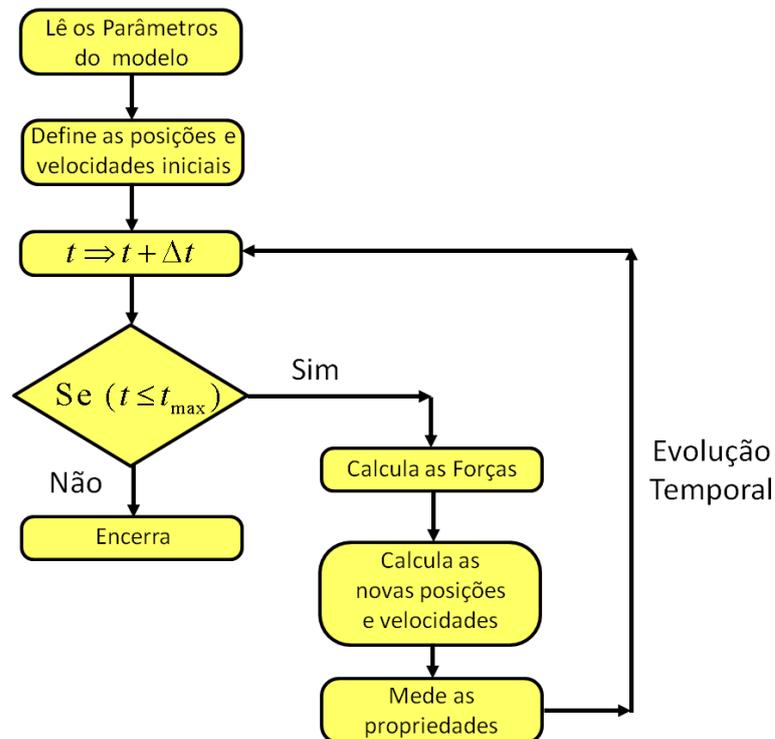


Figura 29 – Fluxograma para simulação de um sistema de partículas por Dinâmica Molecular.

3.2 Agregados Sinterizados de Argila Calcinada

Os Agregados Sinterizados de Argila Calcinada empregados na pesquisa foram utilizados em trabalhos realizados pelo grupo de Pesquisas em Geotecnia, cujos quais obtiveram resultados satisfatórios, tanto em requisitos como agregado (Frota *et al.*, 2004)

quanto em resposta positiva como partícipe em mistura asfáltica (Frota 2003 e Nunes, 2006). Tais resultados encorajaram a obtenção de mais duas propriedades mecânicas, quais sejam: Módulo de Young e Coeficiente de Poisson, alvo da presente pesquisa.

3.2.1 Solo Natural

O solo empregado na confecção dos agregados sinterizados é uma argila proveniente de uma jazida situada no bairro do Puraquequara, no município de Manaus, nas coordenadas S 03° 05' 3,54" e W 59° 51' 48,60" (Figura 30).

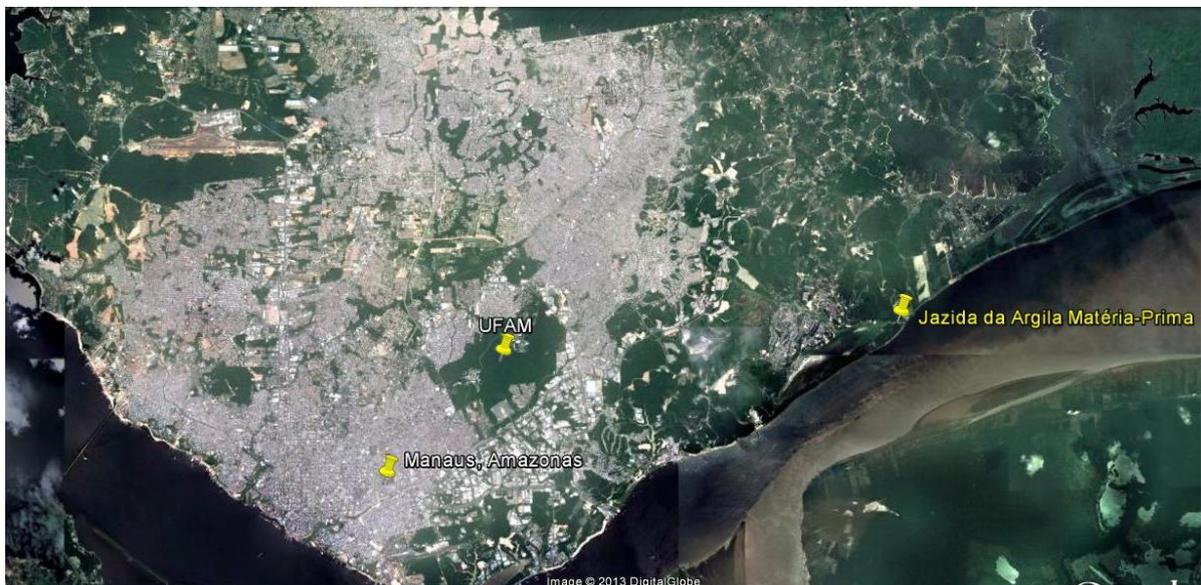


Figura 30 – Localização da jazida do solo matéria-prima para confecção dos ASACs.
Fonte: Google Earth, 2013.

O solo (Figura 31) foi coletado e levado ao laboratório de Mecânica dos Solos da Universidade Federal do Amazonas e exposto ao ar livre, no intuito de secá-lo para que se pudesse realizar a caracterização.



Figura 31 – Amostra do Solo matéria-prima para confecção dos ASACs.
Fonte: Nunes, 2006.

Por apresentar elevada umidade e ser altamente plástico, inicialmente o solo foi fracionado na forma de pelotas, para acelerar a sua secagem, posteriormente destorroadado e peneirado (Figura 32) de acordo com as especificações que determinam as dimensões necessárias para realização de ensaios para sua caracterização.



Figura 32 – Solo fracionado em pelotas sendo destorroadado e peneirado.
Fonte: Frota, 2004.

Em seguida procedeu-se com a caracterização do solo para verificação da potencialidade à calcinação. Tal caracterização se deu através dos ensaios normatizados pela Associação Brasileira de Normas Técnicas – ABNT, através das: NBR 7181/84 (Solo – Análise Granulométrica); NBR 6459/84 (Solo – Determinação do Limite de Liquidez) e NBR 7180/84 (Solo – Determinação do Limite de Plasticidade).

Com os resultados dos ensaios acima citados foi possível também classificar o solo segundo o Sistema Unificado de Classificação (SUC) e *Highway Research Board* (HRB), sistemas amplamente conhecidos e difundidos na pavimentação.

3.2.2 Caracterização dos ASAC

Na etapa de pré-calcinação foram realizados alguns testes com o objetivo de determinar a velocidade de aquecimento. Após algumas tentativas falhas devido à pequena resistência à queda livre (de uma altura de aproximadamente 1,20 m), chegou-se a uma velocidade de aquecimento dita ideal e igual a 3°C/min, até atingir a temperatura de, aproximadamente, 900°C. Os agregados foram calcinados em duas faixas de tamanho, porém, na presente pesquisa, optou-se por trabalhar com o agregado de menor tamanho (em destaque na Figura 33), o que facilitou o manuseio em alguns ensaios mecânicos.



Figura 33 – Faixa de tamanho do ASAC utilizado.

Depois de calcinados, os agregados foram submetidos a ensaios de caracterização normatizados pelo Departamento Nacional de Infraestrutura de Transportes – DNIT, de acordo com as: DNER-ME 083/98 (Agregados – Análise Granulométrica) e DNER-ME 081/98 (Agregados – Determinação da Absorção e Densidade de Agregado Graúdo).

3.3 Caroco do Açaí

Os corocos de açaí utilizados na pesquisa são considerados resíduos do processo de produção da polpa extraída do fruto proveniente da palmeira conhecida vulgarmente como açaí do mato ou açaí solteiro (*Euterpe precatória*). O fruto é advindo do município de Codajás-Am, situado a 240 km da capital amazonense (Figura 34).



Figura 34 – Localização do município de Codajás-Am.

Fonte: adaptado de http://pt.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Amazonas_Municip_Codajas.jpg

Os caroços chegaram ao laboratório do Grupo de Pesquisas em Geotecnia em sacos e foram colocados ao ar livre para secar. Após secos, as fibras que recobrem o endocarpo foram retiradas no intuito de se estudar um material mais estável em termos de deformações. Outro ponto que levou a retirada das fibras foi o fato de haver, no citado grupo de pesquisa, uma vertente de estudo voltada para análise da influência da fibra no composto asfáltico Valença *et al.* (2011). A Figura 35 nos mostra a configuração dos caroços após a retirada da fibra.



Figura 35 – Configuração do Caroco de Açaí após a retirada da fibra que recobre o endocarpo.

Com os caroços sem as fibras, o material estava pronto para os testes. Assim, procedeu-se inicialmente com a caracterização física, segundo ensaios empregados na pavimentação e normatizados pelo Departamento Nacional de Infraestrutura de Transportes – DNIT, de acordo com as: DNER-ME 083/98 (Agregados – Análise Granulométrica) e DNER-ME 081/98 (Agregados – Determinação da Absorção e Densidade de Agregado Graúdo).

Para determinar a quantidade de água de composição no caroço do açai, uma amostra representativa foi colocada em estufa à 110° C até constância de massa. Esta informação foi necessária para dar um tratamento diferenciado na caracterização física, pois no item 6.1.1 da DNER-ME 083/98 e no 6.1 da DNER-ME 081/98, pede-se que se proceda com a secagem em estufa até constância de massa, o que não foi feito pois a perda da água mudaria a estrutura do açai. Vale ressaltar que as especificações dadas nas duas normas são referentes a agregados minerais, sendo o açai um agregado orgânico.

3.4 Ensaios Mecânicos

Os materiais foram submetidos a dois tipos de compressão com velocidade constante. O primeiro consistia em comprimir esferas isoladas, denominado ensaio de Compressão Simples – CS (Figura 36) e o segundo se descrevia comprimindo um grupo de esferas confinadas, denominado ensaio de Compressão Confinada – CC (Figura 37a). O confinamento das esferas se deu em um cilindro metálico (Figura 37b). A velocidade de deslocamento do pistão foi dada pela Associação Brasileira de Normas Técnicas – ABNT em sua NBR 12770 (Solo Coesivo – Determinação da Resistência a Compressão não Confinada), igual a 2%/min.

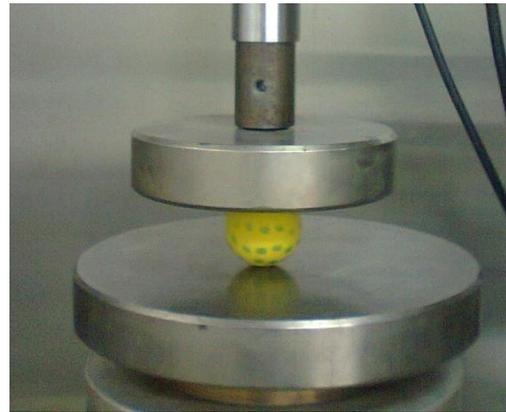
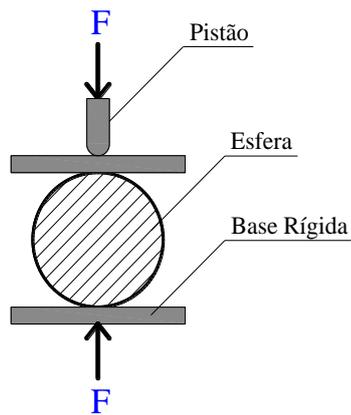
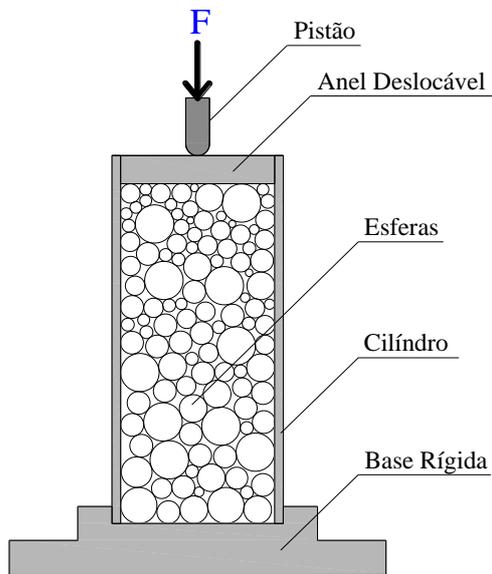


Figura 36 – Ensaio de Compressão Simples – CS



a) Esquema de Confinamento das Esferas

b) Cilindro Utilizado como Recipiente para Confinamento das Esferas

Figura 37 – Ensaio de Compressão Confinada – CC.

Os ensaios de compressão foram realizados com auxílio da máquina universal de ensaios (do inglês UTM – *Universal Testing Machine*) com capacidade de carga de 14 kN (Figura 38), pertencente ao Grupo de Pesquisas em Geotecnia da Universidade Federal do Amazonas – UFAM.



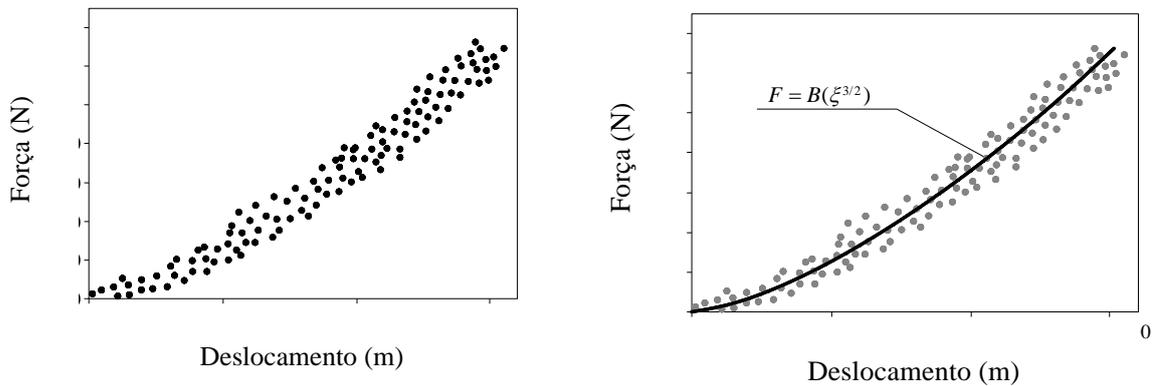
Figura 38 – Máquina universal de ensaios com capacidade de carga de 14 kN.

A máquina possui uma interface digital capaz de registrar a força e o respectivo deslocamento gerado a cada 50ms (cinquenta milissegundo), dados que foram utilizados na determinação das propriedades mecânicas, quando comparados com a simulação.

3.5 Obtenção das Propriedades Mecânicas

Com os resultados dos ensaios de CS, obteremos, para cada grão, um conjunto de pontos com uma tendência que pode ser visualizada na Figura 39a. No regime elástico, o modelo de contato entre duas esferas, deduzido por Hertz $\left(F^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \xi^{3/2} \right)$, pode ser utilizado para a regressão. Deste modo, a Figura 39b ilustra os pontos com a respectiva curva de tendência. A constante B do modelo é dada pela Equação 54.

$$B = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \quad (54)$$



a) Gráfico de força versus deslocamento para um corpo esférico comprimido b) Regressão a partir do Modelo de Hertz

Figura 39 – Resultado do ensaio de compressão simples em um grão e sua modelagem.

Para cada grão, obteremos um valor B_i e, por conseguinte, um valor de B_i' , dado pela relação da Equação 55, uma vez que o raio efetivo é conhecido. O valor de B_i' será um dos pontos principais do presente estudo, pois seu valor nos indica uma relação entre o Módulo de Elasticidade e o Coeficiente de Poisson.

$$B_i' = \frac{3B_i}{2\sqrt{R^{eff}}} = \frac{Y}{(1-\nu^2)} \quad (55)$$

A expressão para o raio efetivo, dada pela Equação 16, irá sofrer uma mudança ao considerarmos o plano de contato com o grão comprimido como uma esfera de raio tendendo ao infinito (Figura 40). Isto fará com que a expressão $\frac{1}{R_j}$, concernente ao raio do plano de contato com o grão, tenda a um valor muito pequeno, que poderá ser considerado zero, anulando este termo. Assim, a nova configuração para representar o raio efetivo resume-se na Equação 56.

$$\frac{1}{R^{eff}} = \frac{1}{R_{gr\tilde{a}o}} \quad (56)$$

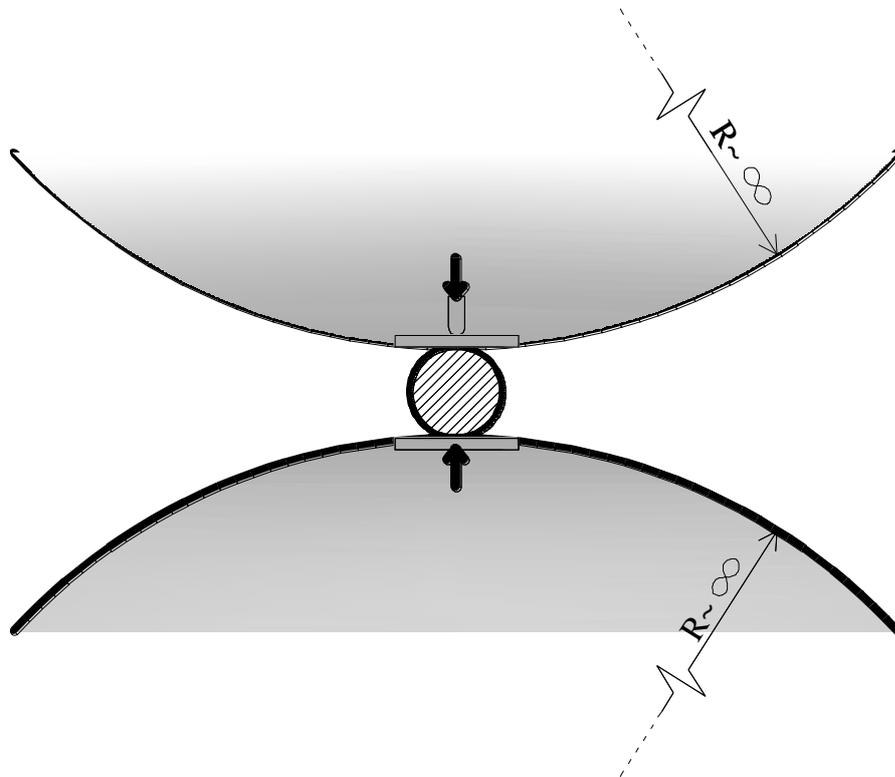


Figura 40 – Plano de contato com o grão considerado como uma esfera de raio infinito.

Com os vários valores de B_i' , tiraremos um valor médio \bar{B}' , representado pela Equação 57.

$$\bar{B}' = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n B_i' = \frac{Y}{(1-\nu^2)} \quad (57)$$

Em que n é igual ao número de ensaios representativos, ou seja, aqueles ensaios que tenderam a valores menos dispersos.

Obtido o valor de \bar{B}' e assim, o valor da relação entre o Módulo de Elasticidade e o Coeficiente de Poisson, o passo seguinte consiste em atribuir valores à ν para conseguir Y . De posse dos citados valores, simularemos, através do programa desenvolvido por Dinâmica

Molecular, um conjunto de partículas comprimidas em um cilindro e analisaremos seu comportamento Tensão versus Deformação. Os valores serão comparados com os obtidos experimentalmente no ensaio de CC e o conjunto de valores (ν, Y) que representarem uma curva simulada sobrepondo-se a experimental, representarão também o valor real do Módulo de Elasticidade e Coeficiente de Poisson.

Capítulo 4

4 CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS MATERIAIS

Neste capítulo apresentaremos os resultados da caracterização física do ASAC e do caroço de açaí, bem como dos ensaios mecânicos obtidos nos Laboratórios do Grupo de Geotecnia – GEOTEC. Os ensaios mecânicos realizados nesta Dissertação referem-se aos ensaios de compressão simples de uma única partícula e o ensaio de compressão simples confinado de um conjunto de partículas interagentes.

Do ensaio de compressão simples de uma partícula obteremos a relação entre a força aplicada e a deformação diametral da partícula. Consideraremos que as partículas de ASAC e os caroços de açaí tenham aproximadamente a forma esférica. Dentro dessa aproximação compararemos os resultados experimentais para a força aplicada em função da deformação com a lei de potência obtida por H. Hertz para partículas esféricas elásticas, representada pela Equação 14, da qual obteremos a relação $Y/(1-\nu^2)$, onde Y é o módulo de Young ou módulo de elasticidade do material, e ν o seu coeficiente de Poisson.

Por outro lado realizaremos o teste de compressão simples de um conjunto de partículas confinadas em um cilindro de aço, considerado indeformável para a escala de tensões utilizadas neste trabalho. Os resultados da tensão em função da deformação obtidos experimentalmente serão ajustados pela simulação de dinâmica molecular, de onde obteremos a relação $Y/(1-\nu^2)$ do material simulado, que será comparada com aquela obtida diretamente do ensaio de compressão simples de uma única partícula.

4.1 Caracterização Física do ASAC

A caracterização física do ASAC foi dividida em duas partes. Na primeira, apresentaremos os resultados referentes ao solo matéria-prima, na segunda, os resultados referentes ao próprio ASAC.

4.1.1 Solo Natural

As Figuras 41 e 42 apresentam, respectivamente, a distribuição granulométrica do solo natural utilizado na confecção do ASAC e um resumo da granulometria, segundo a NBR 6502/95 – Rochas e Solos. Trata-se de um solo com bastantes finos (NBR 6502, 1995), mais precisamente uma argila siltosa. A fração areia é quase inexistente, perfazendo um total de 5,6%.

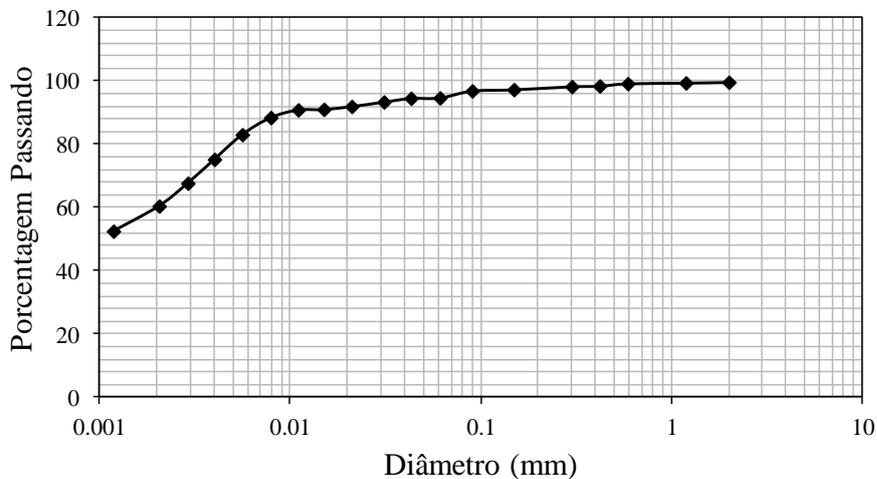


Figura 41 – Distribuição granulométrica do solo matéria-prima do ASAC.

Segundo a NBR 6502 (1995) os finos de um solo são as partículas com diâmetro equivalente inferiores a 0,075mm. Pela curva granulométrica podemos visualizar a quantidade de finos, igual a aproximadamente 96%. Deste modo e segundo o Departamento Nacional de Estradas de Rodagem – DNER (1981), atual DNIT, o solo em questão atende às

especificações de um material indicado para confecção de ASAC, que requer um mínimo de 85% de finos presentes no solo.

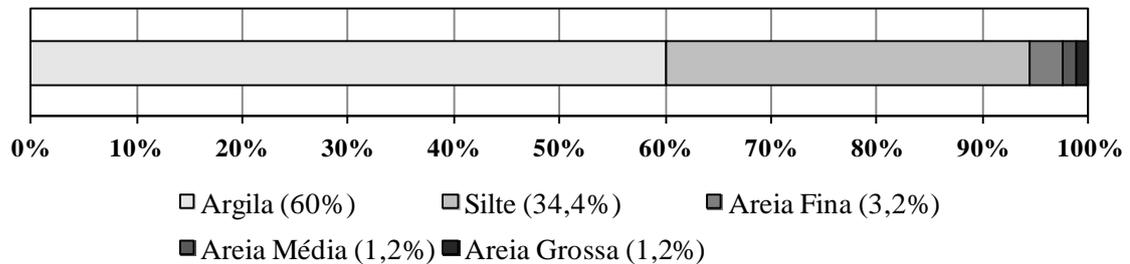


Figura 42 – Resumo da Granulometria.

A Tabela 2 nos mostra os resultados referentes aos ensaios de Limites de Atterberg, que são muito úteis, pois informam sobre o comportamento da argila quando sofre mudanças em seu teor de umidade. Conforme visualizamos, o solo, segundo a plasticidade, mostra-se recomendável para confecção dos ASAC, uma vez que estudos realizados pelo DNER (1981) mostraram que para obter um agregado de boa qualidade é necessário que o Índice de Plasticidade – IP seja maior que 20 ($IP > 20$). Fisicamente, o IP representa a quantidade de água que se pode adicionar, a partir do seu Limite de Plasticidade – LP, sem alterar suas propriedades plásticas, ou seja, sem perder a capacidade de ser moldável.

LL (%)	LP (%)	IP (%)	
		Recomendado (DNER, 1981)	Obtido
56	28	>20	28

Tabela 2 – Limites de Atterberg.

Com os resultados dos limites de Atterberg (Limite de Liquidez e Limite de Plasticidade), a caracterização do solo seguiu-se com a classificação segundo o Sistema Unificado de Classificação de Solos – SUCS. Conforme mostra a Figura 43, o solo é classificado como uma Argila de Alta Compressibilidade (CH).

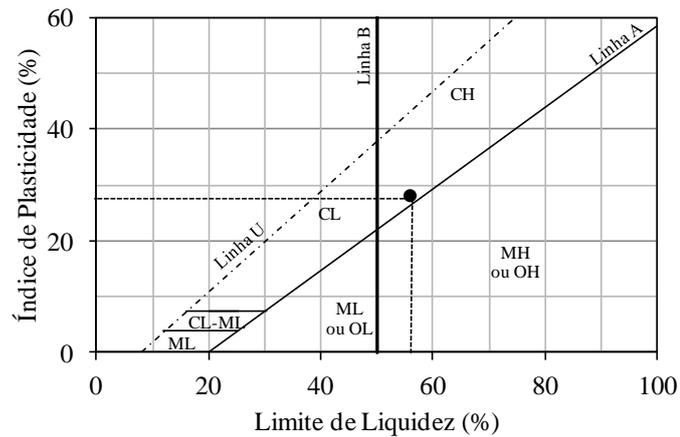


Figura 43 – Distribuição Granulométrica do ASAC.

As Equações 58 e 59 mostram, respectivamente, as expressões para a Linha A e a Linha U.

$$IP = 0,73(LL - 20) \quad (58)$$

$$IP = 0,9(LL - 8) \quad (59)$$

4.1.2 Agregados Sinterizados de Argila Calcinada

Na Figura 44, podemos ver a curva granulométrica do ASAC. Percebe-se que os agregados ensaiados estão dentro de uma faixa restrita de diâmetro (entre 9,5 mm e 20 mm). Verifica-se também que aproximadamente 84% do material passou na peneira 12,5mm e praticamente nada passou na de abertura 9,5mm, ficando assim retido os 84% nesta. Pela Figura 44 verificamos também que a distribuição granulométrica do ASAC mostra-se uniforme dentro da faixa anteriormente citada (9,5 mm a 20 mm).

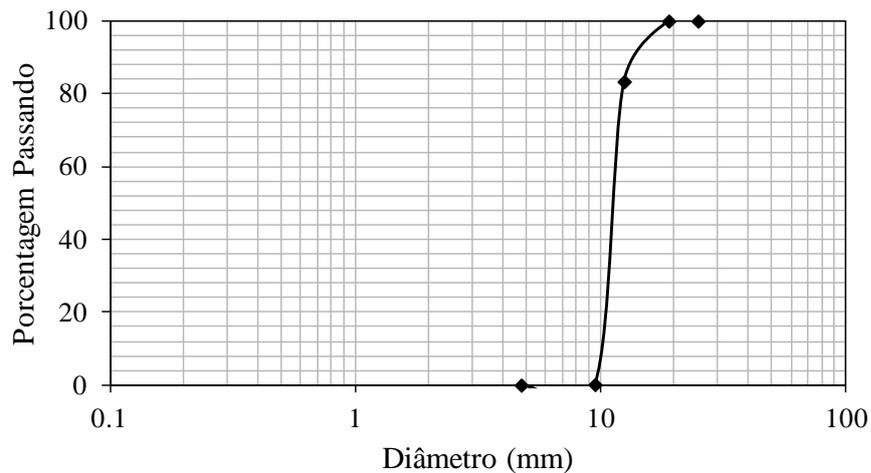


Figura 44 – Distribuição Granulométrica do ASAC.

A Tabela 3 lista duas propriedades físicas muito importantes. A densidade é um parâmetro necessário na dosagem das misturas asfálticas e a absorção ditará o comportamento com relação ao teor de asfalto de projeto.

Propriedade Física	Unidade	Valor
Densidade	g/cm ³	2,658
Absorção	%	17,70

Tabela 3 – Densidade e Absorção do ASAC.

4.2 Caracterização Física do Caroço do Açai

O resultado da análise granulométrica do Caroço de Açai pode ser visualizado na Figura 45. O comportamento da distribuição granulométrica Caroço do Açai mostra-se similar ao do ASAC, estando limitado por uma estreita faixa de tamanho variando de 4,75mm a 9,5mm. Aproximadamente 100% dos grãos passaram na peneira com abertura de malha igual a 9,5mm e 98% destes ficaram retidos na peneira com abertura de malha igual a 4,75mm. A distribuição mostra-se então uniforme.

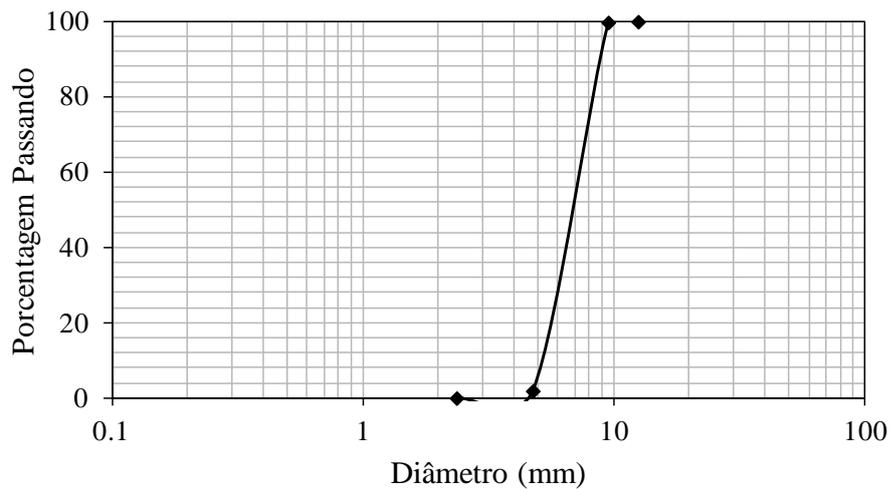


Figura 45 – Distribuição Granulométrica do ASAC.

Na Tabela 4 podemos visualizar os valores da densidade e da absorção do Caroço do Açai. A alta absorção pode figurar-se uma desvantagem em relação aos agregados convencionais, uma vez que a utilização de agregados absorvivos na mistura asfáltica gera um teor de asfalto de projeto alto.

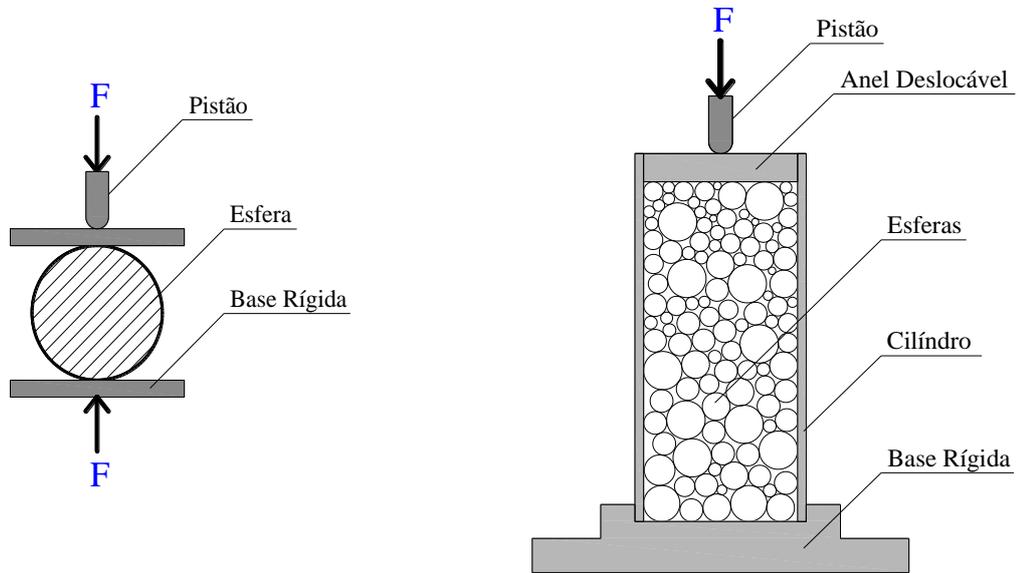
Propriedade Física	Unidade	Valor
Densidade	g/cm ³	1,038
Absorção	%	19,40

Tabela 4 – Densidade e Absorção do Caroço do Açai.

4.3 Ensaios Mecânicos

Neste trabalho foram realizados dois tipos de ensaios mecânicos: o ensaio de Compressão Simples – CS de uma única partícula, mostrado esquematicamente na Figura 46a, e o ensaio de Compressão Confinada – CC de um conjunto de partículas, mostrado na Figura 46b. Assim, após a realização de cada ensaio, foram confeccionados os gráficos para posterior análise. Em ambos os ensaios é imprimida ao êmbolo uma velocidade vertical para baixo, constante, o que confere forças de compressão à partícula isolada e ao conjunto de

partículas confinadas no cilindro, que crescem com a deformação vertical. As forças e as deformações assim obtidas são digitalizadas e registradas pelo computador para posterior análise..



a) Esquema da Compressão Simples

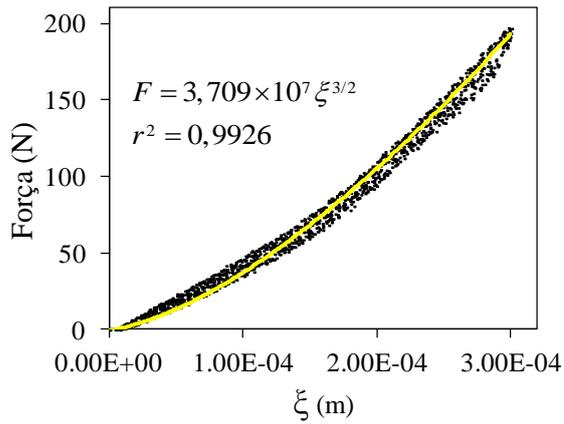
b) Esquema da Compressão Confinada

Figura 46 – Esquema dos Tipos de Ensaio Mecânicos.

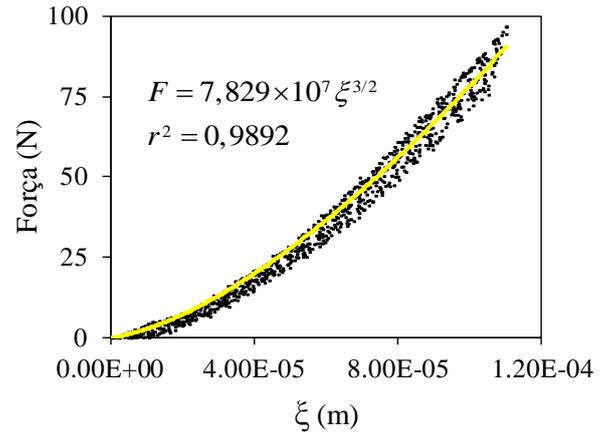
4.3.1 ASAC – Compressão Simples

Na Figura 47 apresentamos os resultados do ensaio de Compressão Simples realizados individualmente em seis grãos de ASAC tomados de uma série produzida manualmente, o que não garante uma uniformidade perfeita nem de tamanho e nem de resistência mecânica. Os pontos pretos representam os resultados experimentais para a força aplicada em função do deslocamento diametral. A linha amarela representa o ajuste desses resultados com a expressão dada pela Equação 14, obtida por H. Hertz, representado pela Equação 60.

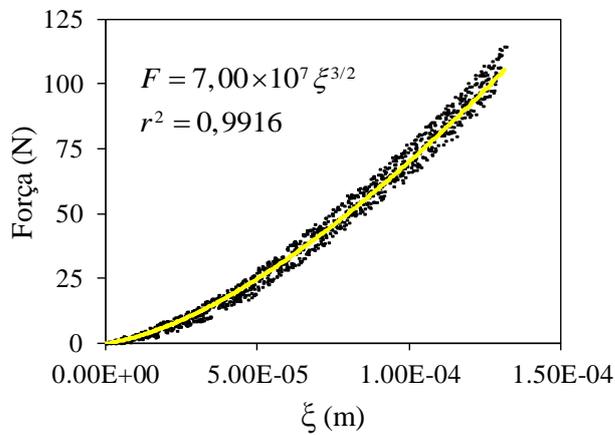
$$F^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \xi^{3/2} \quad (60)$$



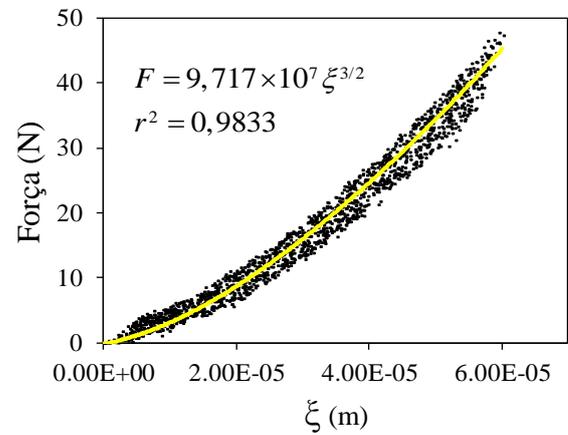
a) – Ensaio de CS do Teste 1.



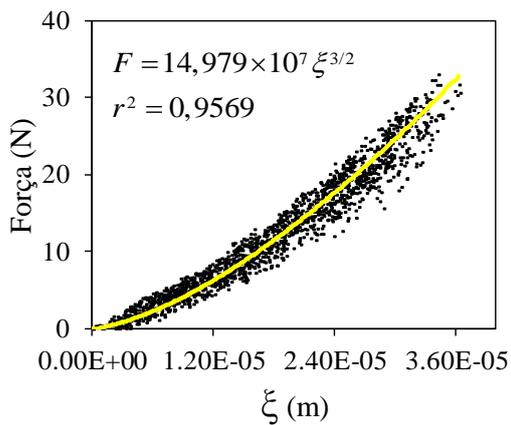
b) – Ensaio de CS do Teste 2.



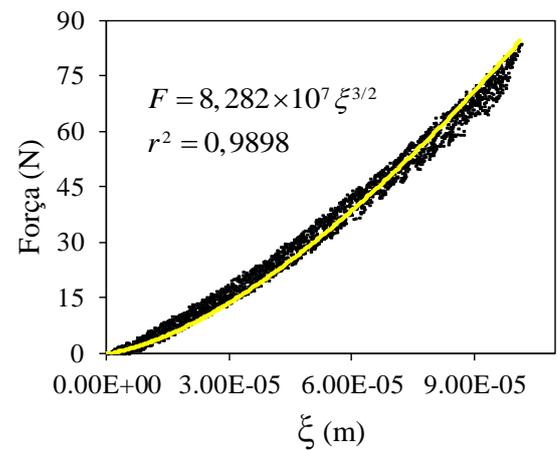
c) – Ensaio de CS do Teste 3.



d) – Ensaio de CS do Teste 4.



e) – Ensaio de CS do Teste 5.



f) – Ensaio de CS do Teste 6.

Figura 47 – Ensaio de Compressão Simples do ASAC.

Os valores de ξ apresentados na Figura 47 correspondem à metade dos valores experimentais. Isso porque no teste de CS o grão de ASAC está sendo comprimido tanto pela base metálica superior como pela base metálica inferior. Portanto, as deformações registradas são a soma das duas deformações. Assumindo-se que as duas deformações são aproximadamente iguais, justifica tomarmos os valores de ξ na Equação 60 como sendo a metade dos valores experimentais.

O parâmetro B (Equação 54) é obtido do ajuste dos resultados experimentais com a função $F^n = B\xi^{3/2}$. Observamos que todos os resultados da Figura 47 obedecem à lei de potência, conforme a função obtida por Hertz para esferas elásticas.

Por se tratar de um material artificial, a não uniformidade resultante da forma como os grãos foram obtidos é verificada pela variação nos valores do parâmetro B obtido para cada grão.

Com base no valor do parâmetro B e do raio efetivo do grão R^{eff} , obtidos em cada teste, confeccionou-se a Tabela 5, cujas últimas duas colunas representam $Y/(1-\nu^2)$ e Y, tomando-se 0.3 para valor do coeficiente de Poisson.

Teste	$B(\text{Pa}\cdot\text{m}^{1/2})$	$R^{\text{eff}} (\text{m})$	$\frac{Y}{(1-\nu^2)} (\text{Pa})$	Y (Pa)	$\bar{Y} (\text{Pa})$
1	$1,05 \times 10^8$	0.00895	$1,66 \times 10^9$	1.51×10^9	3.79x10 ⁹
2	$2,21 \times 10^8$	0.00905	$3,49 \times 10^9$	3.18×10^9	
3	$1,98 \times 10^8$	0.00870	$3,18 \times 10^9$	2.90×10^9	
4	$2,75 \times 10^8$	0.00670	$5,04 \times 10^9$	4.58×10^9	
5	$0,425 \times 10^8$	0.00755	$7,34 \times 10^9$	6.68×10^9	
6	$2,34 \times 10^8$	0.00680	$4,26 \times 10^9$	3.88×10^9	

Tabela 5 – Valores dos parâmetros B e R^{eff} para o ASAC, com os quais se obtém $Y/(1-\nu^2)$. Adotando o coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$, obtém-se o módulo de Young Y apresentado na última coluna.

4.3.2 ASAC – Compressão Confinada

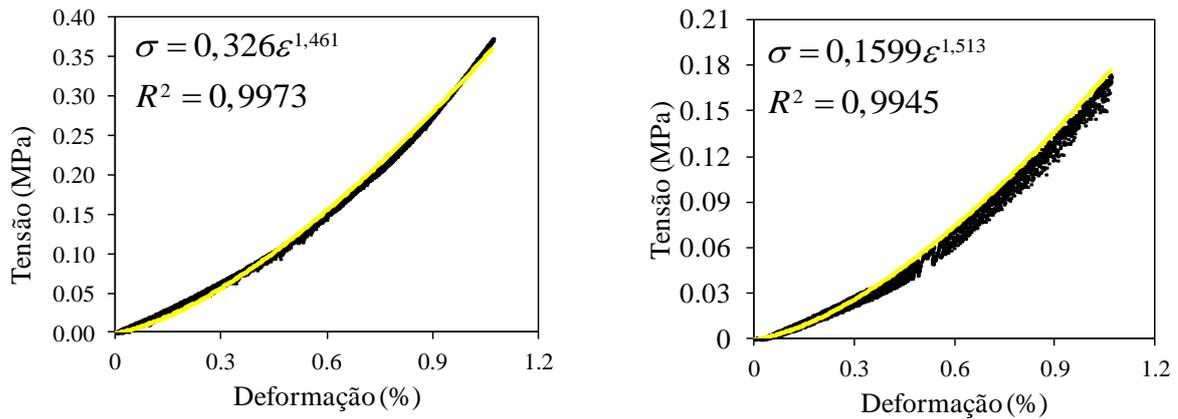
Apresentamos na Figura 48 os gráficos da Tensão em função da Deformação Específica do ensaio de CC para três corpos de prova constituídos com grãos de ASAC. Os corpos de prova foram confeccionados em um cilindro metálico com cinco cm de diâmetro e 10 cm de altura, de maneira que a tensão aplicada, dentro dos limites de carga da UTM, que é de 14 kN, o que limitou bastante o número de grãos envolvidos no processo de compressão confinada.

Para consecução do ensaio de Compressão Confinada, imprimimos ao êmbolo uma velocidade constante de 2 mm/min. À medida que aumenta a deformação do corpo de prova, uma maior tensão deve ser aplicada para manter essa velocidade constante. Esse controle é feito automaticamente por meio de uma interface digital capaz de registrar a força e o respectivo deslocamento gerado a cada 50ms (cinquenta milissegundo).

Observamos que, assim como no ensaio de Compressão Simples, a curva segue uma lei de potência em relação à deformação. Os pontos pretos representam os resultados experimentais e a linha cheia amarela representa o ajuste com a lei de potência

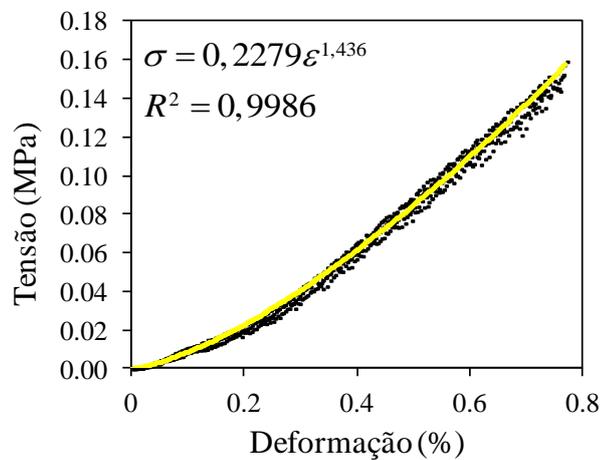
$$\sigma = C\varepsilon^\alpha, \quad (61)$$

onde σ é a tensão aplicada, ε é a deformação específica e C e α são constantes a serem determinadas pelo ajuste dessa função aos pontos experimentais. Nos resultados observados, o expoente α é próximo de $3/2$, que é o expoente que aparece na fórmula deduzida por Hertz para a força normal na superfície de uma esfera elástica em função da deformação diametral.



a) – Ensaio 1 de CC para o ASAC.

b) – Ensaio 2 de CC para o ASAC.



c) – Ensaio 3 de CC para o ASAC.

Figura 48 – Ensaio de Compressão Confinada (CC) para o ASAC.

4.3.3 Carço do Açai – Compressão Simples

Observamos durante os ensaios que o Carço de Açai comporta-se como um material dúctil, em que o processo de falência do material ocorre lenta e continuamente, à medida que a carga aplicada aumenta. Comportamento esse diferente do ASAC, que por ser um material cerâmico, apresenta um comportamento quebradiço, isto é, ele atinge a tensão de ruptura abruptamente quando alcança a força de ruptura. Na Figura 49 visualizamos essas observações, apresentando o estado visual de ambos os grãos após o processo de compressão simples.

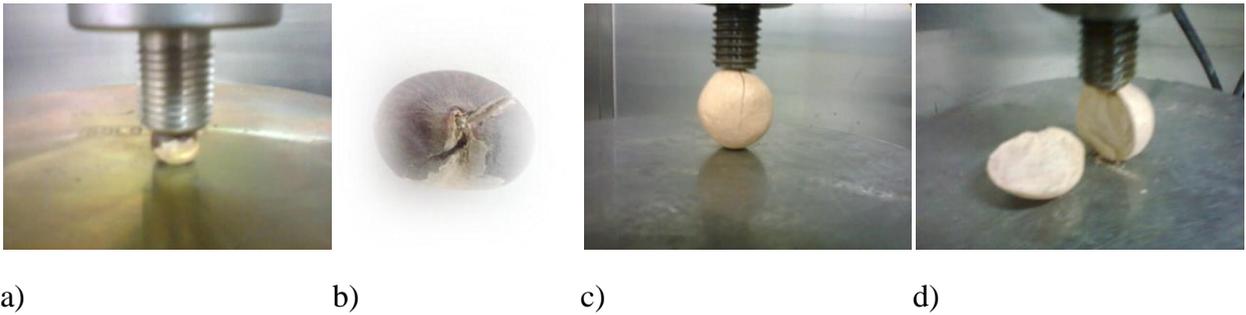


Figura 49 – Aspecto visual do Caroço de Açai (a e b) e dos grãos de ASAC (c e d) após a realização dos ensaios de Compressão Simples. O ASAC comporta-se como material quebradiço, devido a sua natureza cerâmica.

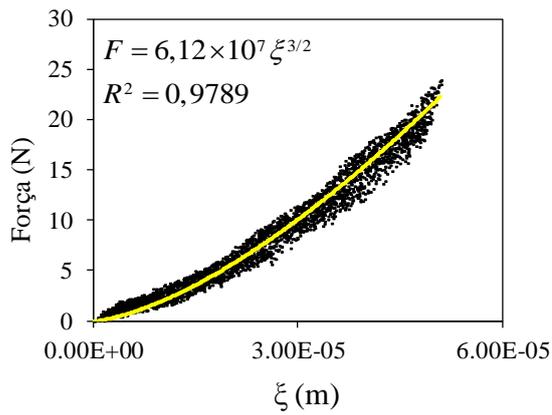
Como se pode observar na Figura 49b, o açai tem a tendência de romper ao longo do eixo paralelo ao sulco característico no seu endocarpo. Por essa razão os ensaios de Compressão Simples com os Caroços de Açai foram realizados com a força externa aplicada ao longo do eixo perpendicular à direção natural daqueles sulcos.

A Figura 50 mostra os resultados da força aplicada em função do deslocamento diametral para seis testes de Compressão Simples com o Caroço de Açai. Os ensaios foram realizados sempre aplicando a carga perpendicular ao sulco existente na superfície do caroço, direção em que apresenta maior resistência.

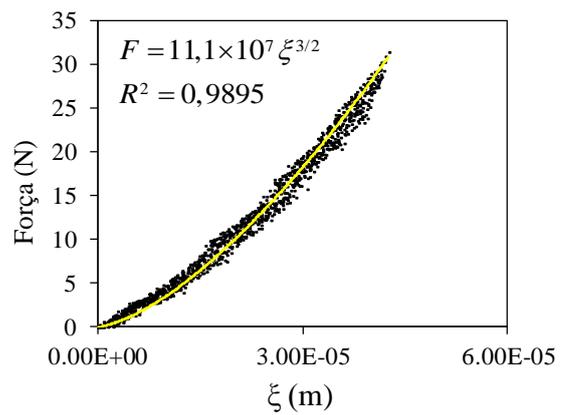
Na Tabela 6 sintetizamos os resultados do Módulo de Elasticidade ou Módulo de Young Y para o Caroço de Açai, onde observamos um valor médio inferior ao do ASAC.

Teste	B	R^{eff} (m)	$\frac{Y}{(1-\nu^2)}$ (Pa)	Y (Pa)	\bar{Y} (Pa)
1	$6,12 \times 10^7$	0.00680	$1,11 \times 10^9$	$1,01 \times 10^9$	1,85 x 10 ⁹
2	$11,10 \times 10^7$	0.00415	$2,58 \times 10^9$	$2,35 \times 10^9$	
3	$12,60 \times 10^7$	0.00450	$2,81 \times 10^9$	$2,56 \times 10^9$	
4	$9,89 \times 10^7$	0.00395	$2,36 \times 10^9$	$2,15 \times 10^9$	
5	$10,20 \times 10^7$	0.00435	$2,31 \times 10^9$	$2,10 \times 10^9$	
6	$3,85 \times 10^7$	0.00385	$0,93 \times 10^9$	$0,846 \times 10^9$	

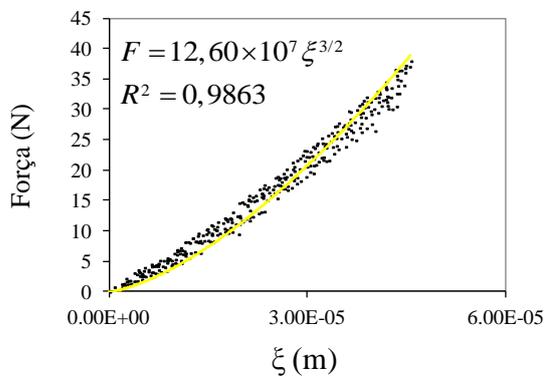
Tabela 6 – Valor do Parâmetro do Módulo de Young com Base nos Ensaio de CS para o Caróço do Açai.



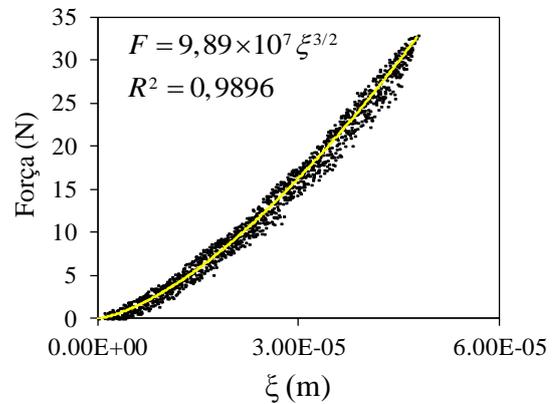
a) – Ensaio de CS do Teste 1.



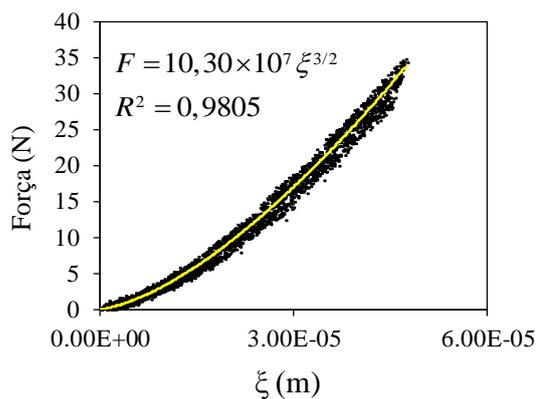
b) – Ensaio de CS do Teste 2.



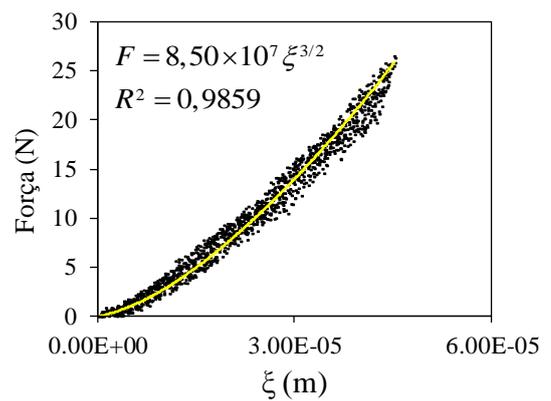
c) – Ensaio de CS do Teste 3.



d) – Ensaio de CS do Teste 4.



e) – Ensaio de CS do Teste 5.

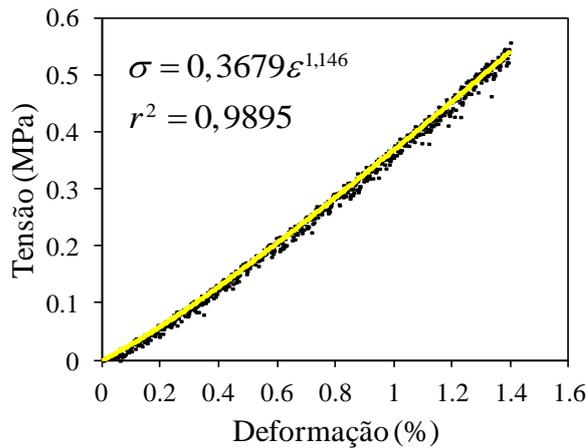


f) – Ensaio de CS do Teste 6.

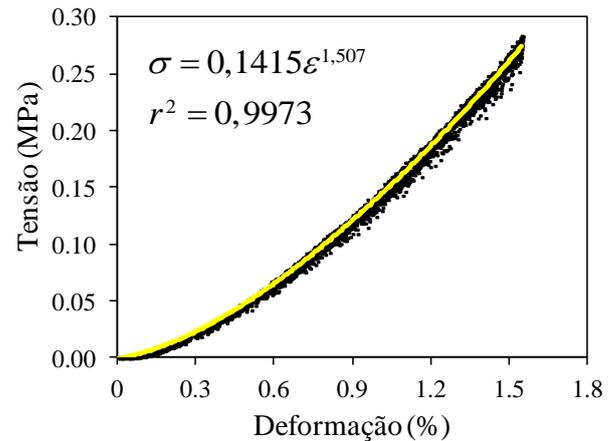
Figura 50 – Ensaio de Compressão Simples para seis Carços do Açai com diâmetros diferentes.

4.3.4 Caroço do Açaí – Compressão Confinada

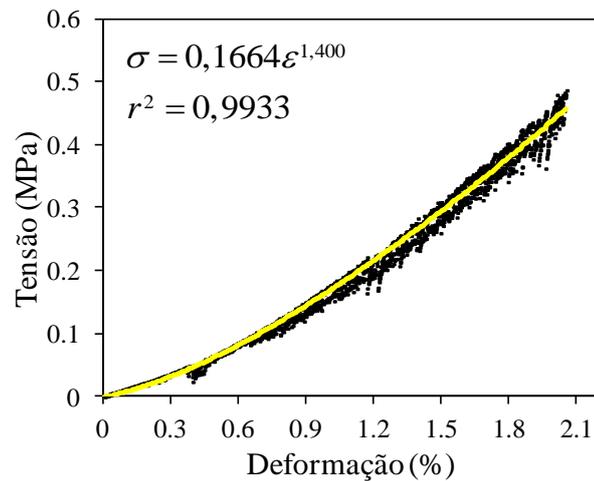
Na Figura 51 apresentamos a tensão em função da deformação específica dos ensaios de Compressão Confinada realizados com o Caroço de Açaí. Os pontos em preto representam os resultados experimentais e a linha amarela o ajuste com a lei de potência $\sigma = C\varepsilon^\alpha$.



(a) Ensaio 1 de CC: Caroço do Açaí.



(b) Ensaio 2 de CC: Caroço do Açaí.



(c) Ensaio 3 de CC: Caroço do Açaí

Figura 51– Ensaios de Compressão Confinada (CC) para três corpos de prova constituídos com caroços de Açaí.

Capítulo 5

5 SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR

No presente capítulo apresentaremos a simulação por Dinâmica Molecular do ensaio de Compressão Confinada para um conjunto de grãos de ASAC e de Caroço de Açaí. Para realizar os referidos ensaios seguiremos os mesmos procedimentos realizados pelos testes laboratoriais, na seguinte sequência: a) primeiramente prepararemos amostras de grãos cujos componentes possuem a mesma densidade de sólidos e a mesma granulometria dos grãos de ASAC e dos caroços de açaí; b) em seguida confeccionaremos corpos de prova a serem utilizados na simulação por Dinâmica Molecular derramando esses grãos em um recipiente cilíndrico, com as dimensões do cilindro utilizado na experiência real, até atingir a altura utilizada nos testes no laboratório; c) tendo preparado o corpo de prova, taparemos o cilindro com um pistão apoiado sobre a superfície superior da amostra, cuja área de sua base é igual a área da secção transversal do cilindro; d) executamos o teste de Compressão Confinada imprimindo ao êmbolo uma velocidade vertical descendente constante, medindo concomitantemente o deslocamento do pistão e a força sobre o mesmo necessária para manter a velocidade constante.

Neste trabalho consideraremos o cilindro e a amostra dos grãos a serem estudados embebidos em um espaço bidimensional. Consideraremos os grãos de forma esférica para melhor aproximar as experiências simulacionais das condições ocorrentes nas experiências reais. Essa escolha pelo espaço em duas dimensões veio da necessidade de acompanharmos visualmente o processo de desenvolvimento do método da Dinâmica Molecular. Como vimos no Capítulo 3, nesta simulação os grãos interagem uns com os outros apenas quando existe contato entre eles, onde a força de interação depende da deformação e da taxa de deformação. Ou seja, para haver interação é necessário que exista uma superposição geométrica dos grãos,

ao mesmo tempo em que os mesmos não podem simplesmente transpassar um ao outro, o que depende do incremento (*step*) de tempo adotado na evolução temporal da simulação. Em duas dimensões podemos observar a dinâmica dos grãos no vídeo do computador e fazer as devidas correções quando necessário. Por outro lado, testes realizados com o mesmo programa computacional utilizado na presente simulação, para estudar o fluxo de grãos sujeitos a um movimento vertical periódico, conhecido como “Brazil nut”, mostraram-se em concordância qualitativa com o observado em experiências reais produzidas em laboratório, o que nos encorajou a estendê-lo para a simulação de propriedades mecânicas de um sistema granular (Frota, 2012).

Na simulação por Dinâmica Molecular da experiência real conhecida como “Brazil nut”, utilizando-se este programa computacional com o qual simulamos o ensaio de Compressão Confinada, coloca-se no fundo de um recipiente um grão esférico com um certo diâmetro, representando a castanha do Brasil, e sobre ele é despejado um punhado de grãos, também esféricos, com diâmetros menores do que aquele. Em seguida, faz-se o recipiente vibrar na direção vertical, como por exemplo, com uma vibração senoidal. Com a vibração, observa-se o grão “castanha do Brasil” subir ao longo da vertical que passa pelo centro do cilindro, até alcançar à superfície constituída pelos grãos menores. Continuando o processo vibratório, o grão “castanha do Brasil” desloca-se para a esquerda ou para a direita e penetra no seio dos grãos menores, passando a girar em torno de dois vórtices, um à esquerda e outro á direita do eixo do recipiente. Ao realizar-se no laboratório a experiência real do efeito “Brazil nut”, observou-se o mesmo comportamento verificado na experiência de Dinâmica Molecular, com a “castanha do Brasil” girando em torno de um dos vórtices. Ao repetir-se essa experiência com duas “castanhas do Brasil”, usando a Dinâmica Molecular e o laboratório, verificou-se em ambas as experiências, que as “castanhas” passaram a girar em torno dos dois vórtices, uma em cada vórtices.

5.1 Confeção do Recipiente Cilíndrico

O cilindro utilizado para confeccionar a amostra de grãos e para a realização do ensaio de Compressão Confinada é constituído de esferas cujos diâmetros foram escolhidos iguais a um quarto do diâmetro máximo do material granular testado. Consideramos o sistema cartesiano de referência, tomando como origem do sistema o canto inferior esquerdo do cilindro. A partir da origem, colocamos lado a lado esferas de diâmetros iguais, formando a base e as laterais do cilindro, como mostramos na Figura 52.

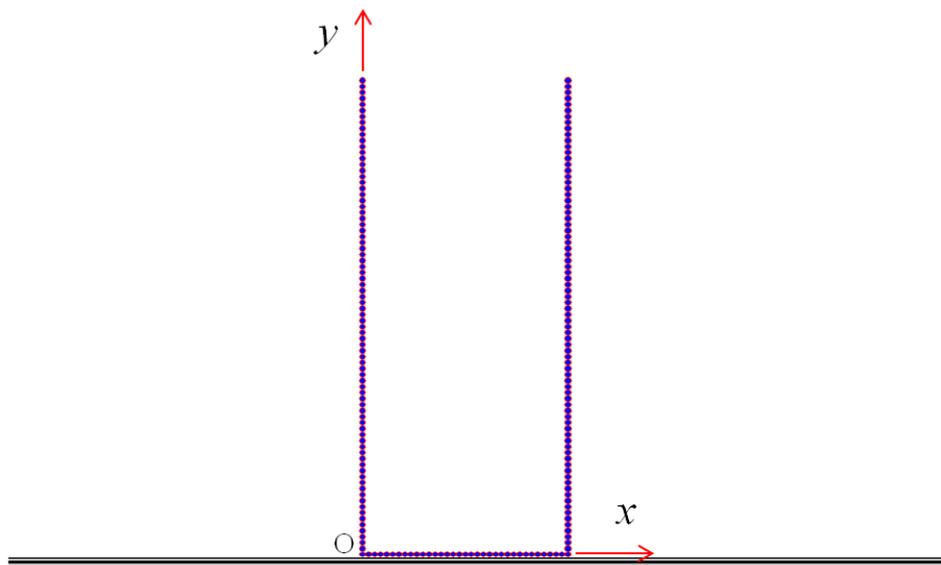


Figura 52 – Cilindro no qual foram confeccionadas as amostras de ASAC e de Carço de Açá e realizado o ensaio de Compressão Confinada.

5.2 Distribuição Granulométrica

Conforme apresentamos no Capítulo 4, os materiais estudados, os grãos de ASAC e de caroço de Açá, apresentam uma granulometria aproximadamente uniforme. No ASAC os grãos encontram-se distribuídos uniformemente entre os diâmetros de 10 mm a 20 mm e no Açá os diâmetros dos grãos estão distribuídos no intervalo de 5 mm a 10 mm.

Na simulação do ensaio de Compressão Simples aproximaremos os grãos de ASAC e de Açai por esferas cujos diâmetros estão dentro dos intervalos acima especificados para cada material, assim como dotaremos essas esferas de uma distribuição granulométrica uniforme, para melhor representar a experiência real. Para simular as curvas granulométricas dos materiais a serem utilizados na Dinâmica Molecular, vamos seguir os procedimentos de Voivret et al. (Voivret, 2007). Com esse procedimento deseja-se gerar distribuição granulométrica de várias formas, como monodispersa, bidispersa (como observado nos materiais geotécnicos), uniforme ou lei de potência, dependendo do material a ser estudado. Uma função que satisfaz essas formas é a *Função* β na forma acumulativa, descrita como

$$\beta(a,b,x) = \frac{1}{B(a,b)} \int_0^x t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt, \quad (62)$$

sendo $a > 0$ e $b > 0$ são parâmetros da distribuição e $B(a,b)$ é dado por

$$B(a,b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}, \quad (63)$$

Sendo Γ a função Gama

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt. \quad (64)$$

A função B é bem definida e normalizada no intervalo $[0,1]$, de maneira que $\beta(0)=0$ e $\beta(1)=1$. Os parâmetros “a” e “b” estão associados com a forma da distribuição granulométrica. Para diferentes valores de “a” e “b” teremos diferentes formas de distribuição. Na Figura 53 apresentamos alguns exemplos de distribuição granulométrica gerada pela função β , com diâmetros no intervalo de 0,001 m e 0,008 m. A curva em cor vermelha ($a = 1$ e $b = 1$) representa uma distribuição uniforme de grãos; a curva em preto ($a = 4$ e $b = 4$) representa o que se denomina em geotecnia de distribuição bem graduada; a curva

em azul ($a = 3$ e $b = 1$) representa um material granular não homogêneo, com grande quantidade de grãos graúdos; a curva em verde ($a = 1$ e $b = 3$) caracteriza um material com distribuição não homogênea, com grande teor de finos.

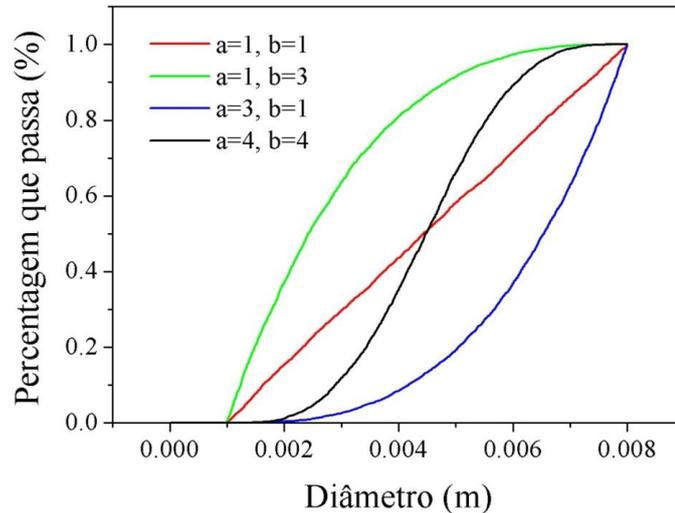


Figura 53 – Diferentes distribuições granulométricas utilizando a função β com os parâmetros “a” e “b” descritos na figura, entre o menor diâmetro de 0.001 m e o maior diâmetro de 0.008 m.

Para representar a distribuição granulométrica dos grãos de ASAC e de Açai utilizamos a distribuição uniforme gerada pela função β , tomando-se $a=1$ e $b=1$, dentro dos seguintes limites: de 10 mm a 20 mm para o ASAC e de 5 mm a 10 mm para o Açai. Com a utilização da sub-rotina “ZBQLBET1()”, geramos um conjunto de grãos cujos diâmetros estão randomicamente distribuídos de acordo com a função β da pela Equação 62 e os parâmetros retro especificados.

5.3 Confeção dos Corpos de Prova (CP)

Tendo-se definido a distribuição granulométrica dos materiais a serem simulados, representando os grãos de ASAC e o Carçoço de Açai, que aproximamos por esferas viscoelásticas, passamos a confeccionar os corpos de prova que serão submetidos ao ensaio de Compressão Confinada. Iniciamos o processo de preparação do corpo de prova

penduramos N partículas, tiradas do conjunto de partículas com distribuição diametral pré-definida, nos sítios de uma rede retangular, no plano vertical, separados por uma distância igual ao diâmetro máximo da distribuição, ou seja, $2R_{\max}$, onde R_{\max} corresponde ao raio máximo dos grãos esféricos, com a primeira linhada da rede, contando de baixo para cima, situada a uma altura de $13R_{\max}$ em relação ao fundo do recipiente cilíndrico, conforme representado na Figura 54a. A largura da rede é igual ao diâmetro do cilindro menos $2R_{\max}$ e a altura depende do número de N de grãos da amostra.

No início da contagem dos tempos, em $t = 0$, os grãos encontram-se em repouso em seus respectivo sítios. A partir de então os soltamos de suas posições iniciais, um a um, a partir do canto esquerdo inferior da rede, e os deixamos cair livremente sobre o fundo do recipiente cilíndrico, como ilustra a Figura 54b. A escolha de deixar cair um a um, e não todos ao mesmo tempo, é para que os grãos tenham tempo suficiente para encontrarem as suas respectivas posições correspondentes ao estado de menor energia. Com isso se busca um empacotamento com o menor teor possível de vazios, o que é importante para a aplicação do teste de Compressão Confinada. Durante o tempo em que os grãos estão caindo atuam sobre eles apenas a força da gravidade $m_i g$, onde m_i é a massa do grão e g é a aceleração da gravidade, não havendo, portanto, contato entre os mesmos. A partir do momento em que os primeiros grãos chocam-se com a base do cilindro e suas paredes laterais, ou com os grão que se encontram sobre a base do cilindro, passa a haver interações de contato entre aqueles e os grãos que formam o cilindro, bem como interações entre os grãos da amostra do material estudado, de acordo com as Equações 21 (força normal) e 26 (força tangencial) apresentadas no Capítulo 2:

$$F^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad (21)$$

$$F^t = -sign(v_{rel}^t) \cdot \min(\gamma^t |v_{rel}^t|, \mu |F^n|) \quad (26)$$

Esse processo de queda livre de grão em grão continua até que todos tenham se juntado para formar o corpo de prova, como apresentado na Figura 54c. Assim, temos um CP preparado para ser submetido ao ensaio de Compressão Confinada. Durante o processo de construção do corpo de prova, consideramos que as partículas que constituem a base e as paredes do cilindro sejam do mesmo material da amostra. Entretanto, podemos generalizar, considerando os grãos do cilindro de material diferente, utilizando a Equação 23 em lugar da Equação 21 para as forças normais entre os grãos do material estudado e os grãos da base e das paredes do cilindro,

$$F^n = \frac{4\sqrt{R^{eff}}}{3} \left(\frac{1-\nu_i^2}{Y_i} + \frac{1-\nu_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \left(\xi^{3/2} + \frac{A_i + A_j}{2} \sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad (23)$$

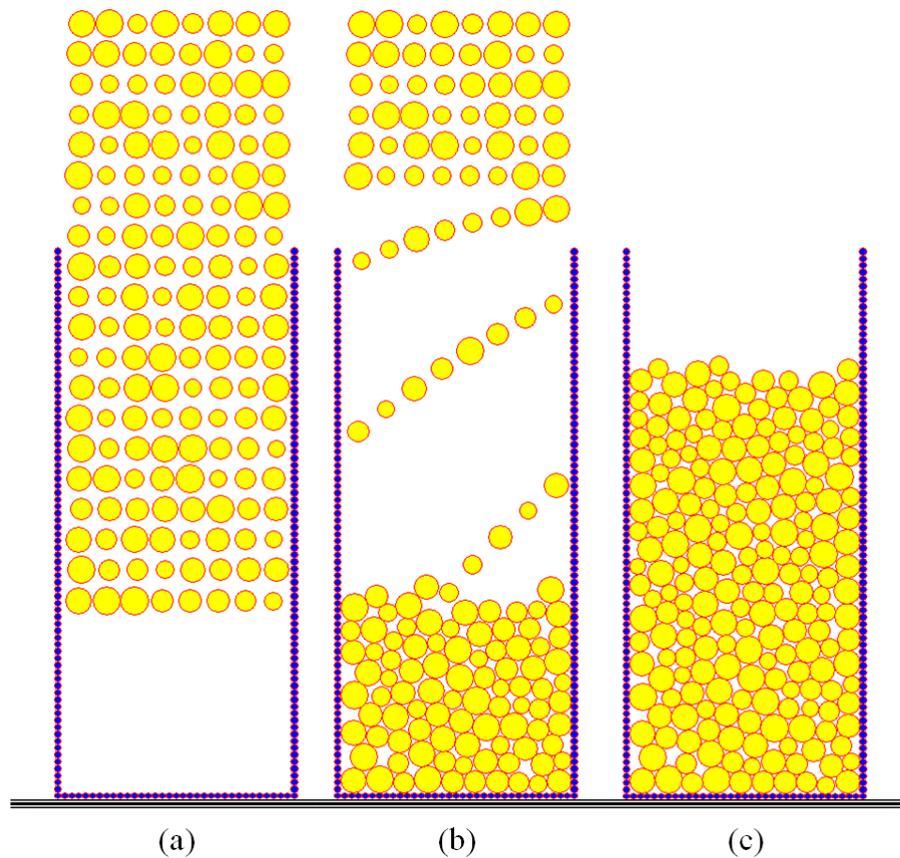


Figura 54 – Processo de confecção dos corpos de prova (CP). (a) Os grãos são suspensos, pendurados nos sites de uma rede retangular no plano vertical a uma distância $13R_{max}$ da base do cilindro; (b) A partir do início dos tempos deixamos os grãos caírem, um a um, por gravidade, sobre a base do cilindro; (c) Corpo de Prova pronto para ser submetido aos ensaios de Compressão Confinada.

Na Figura 55 apresentamos uma sequência temporal, da esquerda para a direita, de intervalos de tempo iguais, a começar pela figura no canto superior esquerdo, da construção de um corpo de prova, iniciando com os grãos suspensos nos sítios de uma rede retangular, deixando-os cair sobre a base do cilindro até todos estejam em repouso.

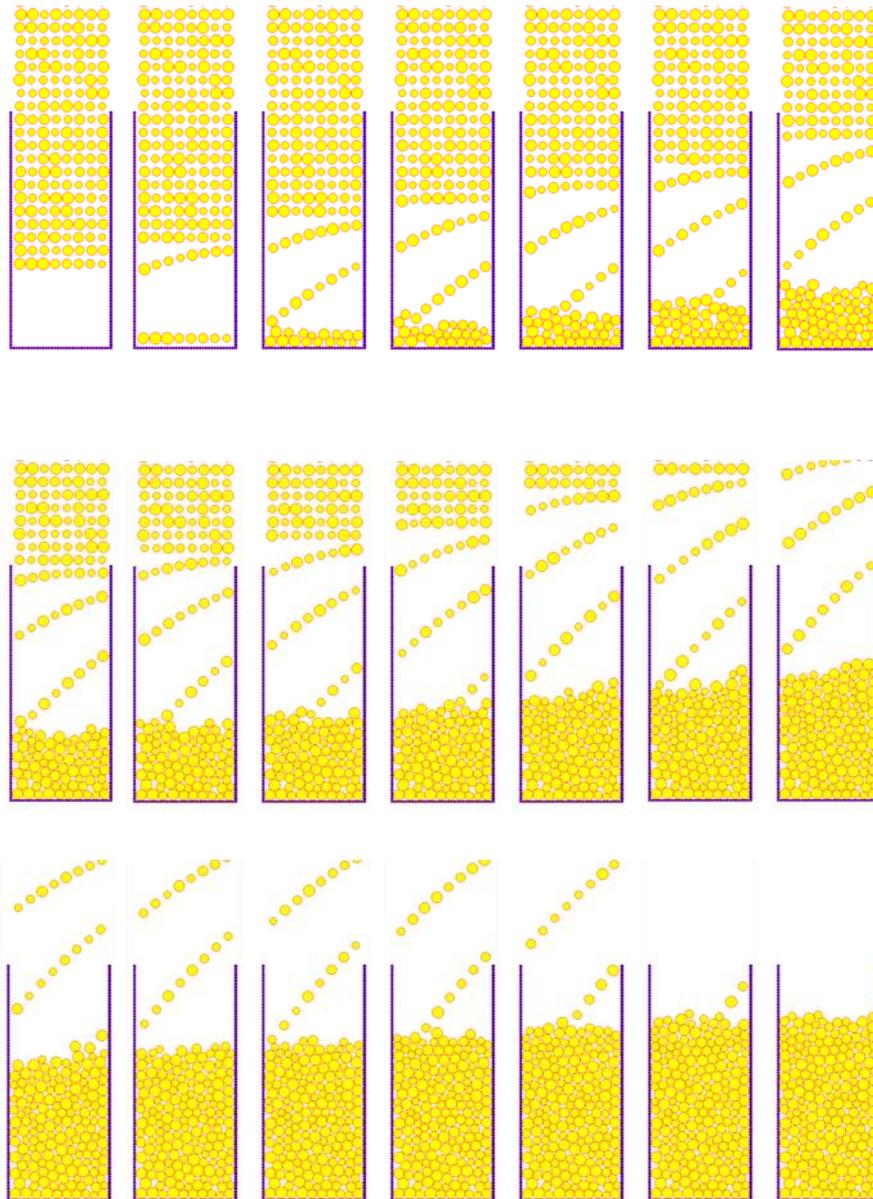


Figura 55 – Sequência do processo de confecção dos corpos de prova (CP). Após os grãos serem suspensos nos sítios de uma rede retangular no plano vertical, a uma distância $13R_{\max}$ da base do cilindro, são soltos e caem sobre a base do cilindro, formando o Corpo de Prova que será utilizado no ensaio de Compressão Confinada.

5.4 Simulação do Ensaio de Compressão Confinada por DM

5.4.1 Média da Tensão em Função da Deformação

Com o corpo de prova preparado conforme descrito na seção anterior, passamos à execução do ensaio de Compressão Confinada. Para isso, inicialmente, repousamos um pistão sobre a superfície dos grãos, que estão acomodados no interior do recipiente cilíndrico, usando o mesmo processo construtivo utilizado na confecção do cilindro. O diâmetro do disco que representa a base do pistão, constituído por esferas com o mesmo diâmetro dos grãos que formam o cilindro, é igual ao diâmetro interno do cilindro, como representado por esferas em cor azul claro na Figura 56.

Inicialmente posicionamos o pistão em contato com os grãos da superfície do corpo de prova, a uma altura h_0 em relação à base do cilindro (Figura 56a). Em seguida, semelhante ao procedimento da experiência real do teste de Compressão Confinada, imprimimos ao cilindro uma velocidade vertical constante, no sentido descendente, cujo módulo tomamos como sendo igual a 1,0 mm/s. À medida que o cilindro se desloca para baixo com velocidade constante (Figura 56b), os grãos da superfície superior da amostra passam a interagir por contato com as esferas que constituem o disco do pistão, segundo as Equações 21 e 26. Nesse processo, embora as esferas que constituem o pistão estejam submetidas a forças diferentes devido à interação com os diferentes grãos da amostra, todas se deslocam para baixo com a mesma velocidade constante inicialmente estabelecida para o ensaio. Portanto, por construção, as esferas que constituem o pistão não estão submetidas às leis de Newton.

Em um determinado tempo t o pistão encontra-se na posição $h(t)$, conforme a Figura 56c. A deformação específica $\varepsilon(t)$ é definida como

$$\varepsilon(t) = \frac{h_0 - h(t)}{h_0} \quad (65)$$

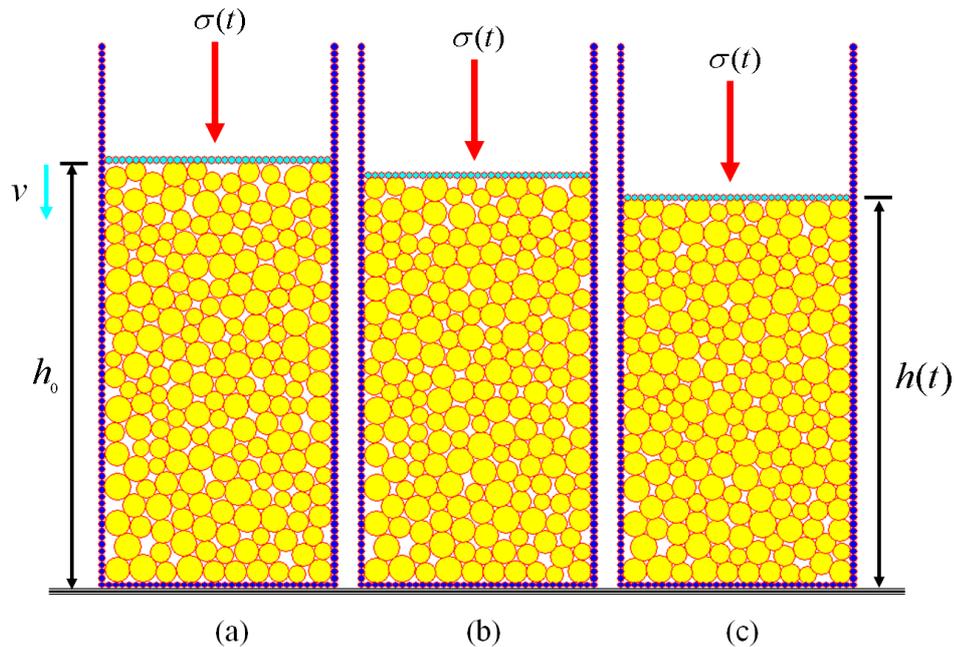


Figura 56 – Ensaio de Compressão Confinada. (a) O pistão (azul claro) é posicionado na superfície da amostra a ser comprimida; (b) Inicia-se o processo de compressão confinada, imprimindo-se ao cilindro uma velocidade vertical constante no sentido descendente; (c) Para cada tempo t , mede-se a deformação específica e a tensão que o pistão exerce sobre a amostra.

Para medir a tensão transmitida pelo pistão aos grãos da amostra do material estudado, precisamos medir as componentes verticais (na direção y) das forças que os grãos j da amostra exercem sobre as esferas i do pistão, que chamaremos de F_{ijy} . Da observação da Figura 57 deduzimos que

$$F_{ijy} = \frac{F_{ijn}\Delta y_{ij} + F_{ijt}\Delta x_{ij}}{\Delta_{ij}} \quad (66)$$

em que

$$\Delta x_{ij} = x_i - x_j \quad (67)$$

$$\Delta y_{ij} = y_i - y_j \quad (68)$$

e

$$\Delta_{ij} = \sqrt{\Delta x_{ij}^2 + \Delta y_{ij}^2} \quad (69)$$

A componente na direção y da força total sobre a esfera i do pistão, exercidas pelos grãos j da amostra é obtida fazendo-se:

$$F_{iy} = \sum_{j \text{ em contato com } i} \frac{F_{ijn}\Delta y_{ij} + F_{ijt}\Delta x_{ij}}{\Delta_{ij}}. \quad (70)$$

A tensão do pistão sobre a amostra é medida a partir da expressão

$$\sigma = \frac{\sum_i F_{iy}}{\sum_i \pi R_i^2}, \quad (71)$$

sendo $\sum_i \pi R_i^2$ é a área total do pistão. Assim, para cada instante t medimos a deformação específica, dada pela Equação (65), e a tensão, dada pela Equação (71).

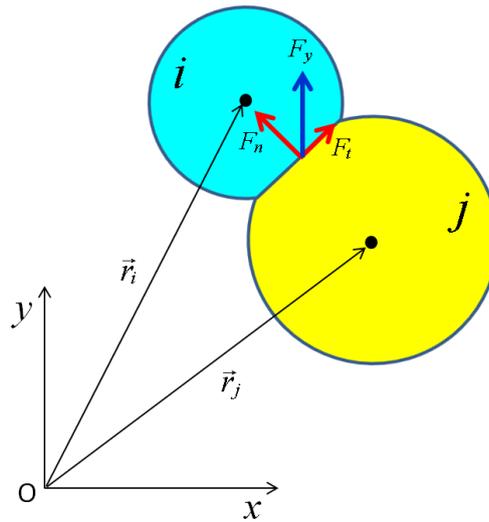


Figura 57 – Esquema representativo das forças de contato entre uma esfera i do pistão (azul claro) e um grão esférico j da amostra estudada.

5.4.2 Comparação da Simulação por DM com a Função de H. Hertz

Com o objetivo de verificar a precisão do programa computacional desenvolvido para simular a relação tensão *versus* deformação para sistemas granulares em duas dimensões, na Figura 58 comparamos os resultados da força F entre duas esferas em função da deformação ξ que ela produz, por um lado, usando a simulação por dinâmica molecular, e por outro lado,

calculando aquela força usando diretamente a função H. Hertz, representada pela Equação 60 a seguir.

$$F^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \xi^{3/2}. \quad (60)$$

Na Figura 58 a linha em cor vermelha representa os resultados da simulação por Dinâmica Molecular (DM) e os pontos em preto os resultados obtidos da Equação 60. Observamos que existe uma boa concordância da simulação por DM com a utilização direta da função de H. Hertz. Na inserção daquela figura mostramos a disposição das duas esferas no interior do cilindro cuja largura se ajusta aos diâmetros das mesmas. Para realizar a simulação por DM, inicialmente repousamos uma esfera em cor amarela sobre a base do cilindro (em cor azul). Em seguida, colocamos sobre ela uma esfera em cor azul, de mesmo diâmetro, e imprimimos a esta uma velocidade descendente constante $\nu = 0.001\text{m/s}$. À medida que a esfera em azul desce, condicionada pela velocidade constante imprimida à mesma, aumenta a deformação na interface das duas esferas, aumentando a força de interação entre elas. A esfera em amarelo, além de se deformar no seu polo superior, devido ao contato com a esfera em azul, deforma-se também em seu polo inferior, devido ao contato com a base do cilindro. Assim, para medir a deformação na interface das duas esferas, não tomamos diretamente o deslocamento vertical do centro da esfera azul, pois não levaria em consideração a deformação sofrida pela esfera em amarelo no seu polo inferior. Em vez disso, determinamos a deformação na interface das duas esferas pela expressão:

$$\xi = R_{\text{azul}} + R_{\text{amarelo}} - (y_{\text{azul}} - y_{\text{amaarelo}}), \quad (72)$$

onde R_{azul} e y_{azul} são o raio da esfera em azul e a posição vertical de seu centro, e R_{amarelo} e y_{amarelo} são os correspondentes raio e centro da esfera em amarelo. Para realizar a experiência

de DM consideramos que as duas esferas possuem raio de 0.01 m, Módulo de Young de $1,2 \times 10^9$ Pa e coeficiente de Poisson 0.3.

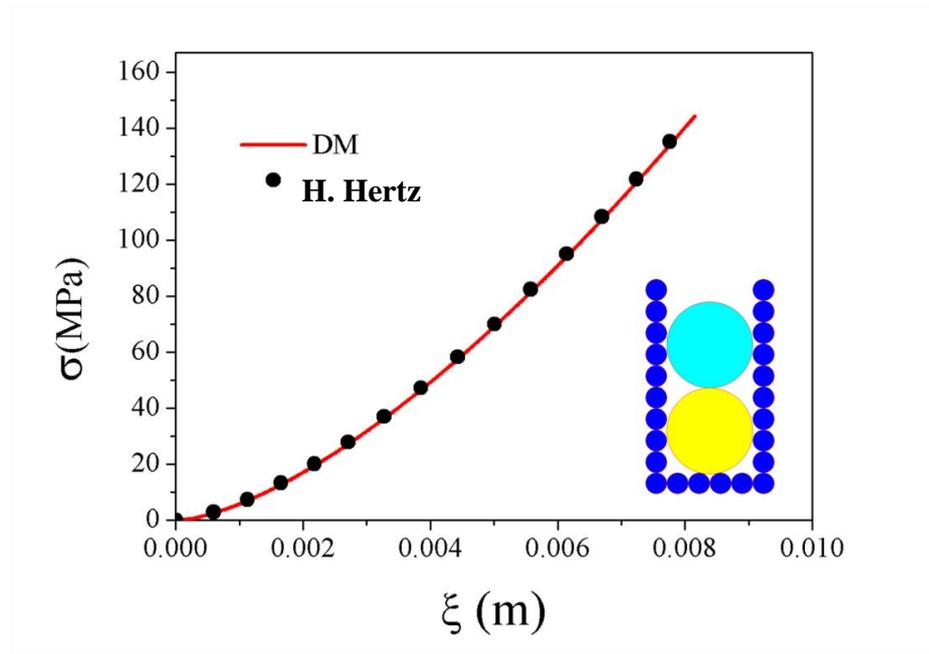


Figura 58 – Tensão em função da deformação de duas esferas de raios iguais a 0.01 m, tomando o Módulo de Young igual a $1,2 \times 10^9$ Pa e o coeficiente de Poisson igual a 0.3. A esfera em azul representa o pistão e a esfera em amarelo representa um grão da amostra estudada. Nesse caso definimos como tensão a força agindo na interface de contato das esferas dividida pela área da secção transversal da esfera do pistão. A linha em vermelho mostra as medidas pela simulação de DM e os pontos em preto os resultados obtidos aplicando-se diretamente a função de H. Hertz (Equação 60).

5.4.3 Simulação do Ensaio de Compressão Confinada por Dinâmica Molecular

Antes de apresentarmos os resultados referentes à simulação por DM das propriedades mecânicas do ASAC e do Carço de Açaí, mostramos na Figura 59 a tensão σ em mega Pascal (MPa) em função da deformação ε (m/m) de quatro corpos de prova, com distribuição granulométrica uniforme, coeficiente de Poisson igual a 0,3 e diferentes Módulos de Young. A preparação dos corpos de prova (CP) foi conduzida de acordo com o prescrito na seção 5.3. As dimensões dos corpos de prova são as mesmas daqueles usados nas experiências em laboratório. Usando a Função β , dada pela Equação 62, geramos uma distribuição granulométrica uniforme, com grãos representados por esferas com diâmetros dentro do

intervalo de 12 mm a 20 mm. Os grãos (esferas) foram compactados por gravidade, deixando-os caírem a partir dos sítios de uma rede retangular, no plano vertical. Com os CPs assim constituídos, submetemo-los a uma tensão normal à sua superfície por meio de um pistão, de diâmetro igual ao diâmetro interno do recipiente cilíndrico, que fizemos se movimentar na direção vertical com velocidade constante descendente $v = 0.001$ m/s.

Observamos que todas as curvas obedecem a uma lei de potência, cuja intensidade cresce com o Módulo de Young, como foi observado tanto no caso do ASAC como no caso do Caroco de Açaí. Ou seja, as curvas obtidas por meio da simulação por Dinâmica Molecular, qualitativamente, assemelham-se aos resultados experimentais para os citados materiais. Verificamos também que todas as curvas apresentam ruídos, que são mais perceptíveis nas escalas de comprimento menores, como as escalas correspondentes das medidas de laboratório.

Na inserção da Figura 59 mostramos esses ruídos em uma escala menor. A origem dos ruídos está associada à reorganização espacial dos grãos ao longo do ensaio de Compressão Confinada, devido originariamente ao processo de empacotamento por gravidade. Durante esse processo são deixados vazios entre os grãos que, ao serem submetidos à tensão externa, deformam-se elasticamente e se reorganizam espacialmente, migrando para aqueles vazios. No momento em que um grão migra e se acomoda em uma região de vazio, ocorre uma diminuição brusca do teor de vazios da amostra e, com isso, um relaxamento das tensões sobre as partículas da superfície do pistão, produzidas pelos grãos da superfície do corpo de prova.

As setas na Figura 60 indicam a diminuição de vazio entre dois determinados tempos, no sentido da esquerda para a direita. Em (a), por exemplo, um grão no canto superior direito do CP, em contato com o pistão, portanto transmitindo força diretamente às partículas do

pistão, migra para um vazio imediatamente abaixo. Esse movimento instantaneamente alivia as forças que os grãos fazem sobre o pistão, tendo como resultado uma diminuição abrupta na medida da tensão neste instante. Após essa acomodação da redistribuição espacial dos grãos, a tensão volta a crescer até que uma nova migração de grãos ocorra, quando a tensão cai novamente. Esse processo de relaxamento seguido de um crescimento da tensão se repete durante todo o ensaio, como é mostrado em detalhes na inserção da figura abaixo.

Como estamos simulando um corpo de prova de forma cilíndrica com as dimensões iguais as utilizadas no laboratório, de aproximadamente 5,0 cm de diâmetro e 10,0 cm de altura, e os grãos têm dimensão que variam de 1,2 cm a 20,0 cm para o ASAC e de 6,0 cm a 10,0 cm para o Carço de Açaí, o número de grãos utilizados na simulação bidimensional é pequeno. Para o ASAC, que possui grãos maiores para se acomodarem dentro daquele cilindro, utilizamos $3 \times 8 = 24$ grãos. Para o Carço de Açaí, que possui grãos menores, trabalhamos com $8 \times 26 = 204$ grãos. Esse número pequeno de grãos acarreta uma maior sensibilidade, em relação à distribuição de vazios da amostra, das medidas da tensão em função da deformação. Para esse número pequeno de grãos, os ruídos são significativos para pequena escala da tensão *versus* deformação, como mostraram os resultados apresentados na inserção da Figura 59.

Para efeito de comparação dos resultados experimentais da tensão *versus* deformação, apresentados no Capítulo 4, com os obtidos da simulação por Dinâmica Molecular, que ocorrem na região de menor escala da Figura 59, precisamos obter curvas mais suáveis. Para esses procedimentos, reportamo-nos à subseção seguinte.

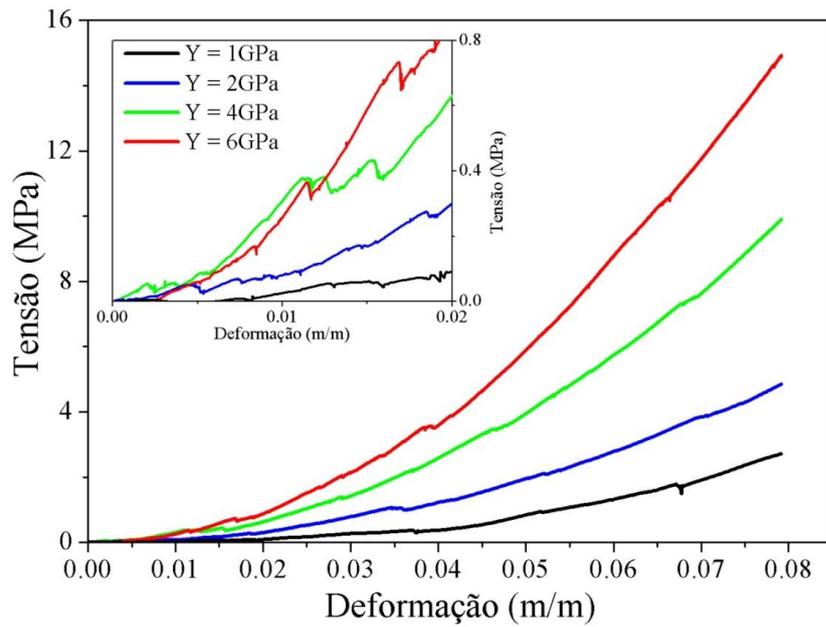


Figura 59 – Tensão em função da deformação de quatro corpos de prova confeccionados de acordo com o procedimento mostrado na Figura 55, com os respectivos Módulo de Young Y mostrados na figura.

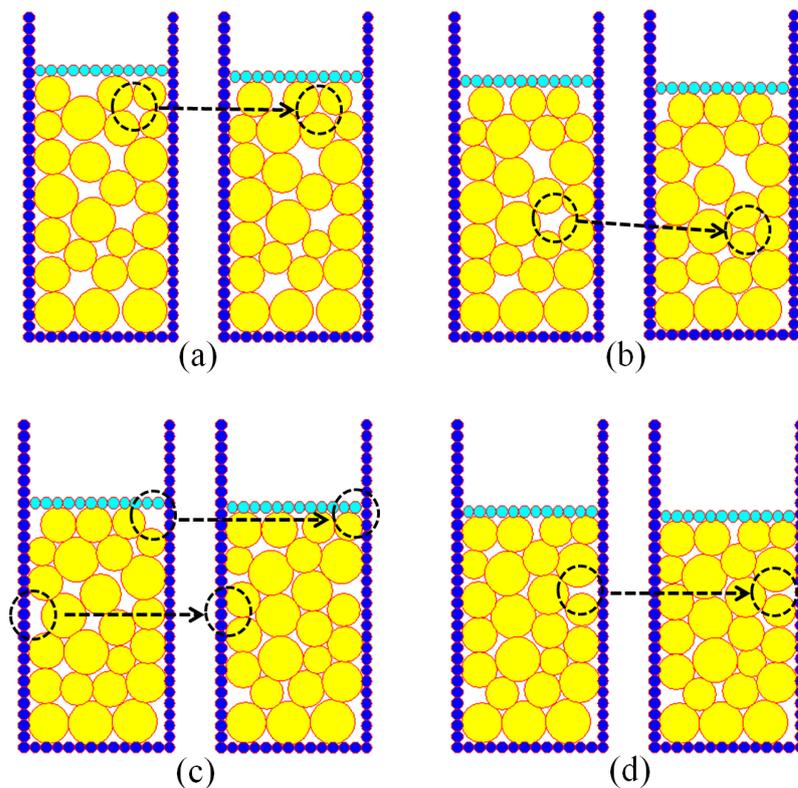


Figura 60 – Reacomodação dos grãos pela ocupação dos vazios deixados pelo processo de empacotamento por gravidade, responsável pelos ruídos que aparecem nas curvas de tensão em função da deformação apresentadas na Figura 59. As setas indicam a mudança dos vazios com o tempo por deslocamento dos grãos, e não simplesmente pela deformação dos mesmos.

5.4.4 Comparação dos Resultados Experimentais com a Simulação DM

Na secção anterior apresentamos simulações por Dinâmica Molecular para quatro Corpos de Prova com diferentes Módulos de Young Y , onde observamos que, qualitativamente, as curvas da tensão em função da deformação comportam-se de maneira semelhante ao aspecto das curvas obtidas para os CPs constituídos de grãos de ASAC e de Carços de Açáí. Para grandes escalas de tensão e deformação, observamos que as curvas mantêm uma boa suavidade. Entretanto, em escalas menores, verificamos a presença de ruídos, que foram associados com o rearranjo dos grãos nos espaços vazios após sofrerem um processo de compressão grão-grão. Ocorre que as medidas em laboratório da tensão *versus* deformação são obtidas nas escalas menores, região em que os ruídos são mais perceptíveis, o que exige um procedimento que permita medir com mais suavidade os resultados provenientes da Dinâmica Molecular.

Para obter curvas suaves sem o concurso de métodos numéricos de suavização, tipo “Adjacent-Averaging”, constituímos Corpos de Prova com os grãos superpostos, formando colunas paralelas, cuja distribuição granulométrica segue aquelas dos Corpos de Prova utilizados nas experiências reais (experiências do laboratório). O número de colunas utilizadas foi escolhido de maneira que, colocadas em paralelo, tenham a mesma altura ($\cong 10,0$ cm) e ocupem o espaço igual ao diâmetro ($\cong 5,0$ cm) do recipiente cilindro usado no laboratório. Com essa disposição espacial dos grãos, não haverá migração para os vazios entre os mesmos, uma vez que as forças agindo entre eles e entre eles e o pistão serão sempre na direção vertical.

Com os corpos de Prova confeccionados da maneira acima exposta, realizamos experiências teóricas com o programa computacional baseado no método da Dinâmica

Molecular, variando os parâmetros do modelo constitutivo para as forças de interação entre os grãos, e entre os grãos e a parede do recipiente cilíndrico e entre os grãos e o pistão. O modelo constitutivo para essas forças é dado pelas Equações apresentadas no Capítulo 3, abaixo repetidas,

$$F_{ij}^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A \sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad (43)$$

$$F_{ij}^t = -sign(v_{rel}^t) \cdot \min(\gamma^t | \vec{v}_{rel}^t |, \mu F_{ij}^n) \quad (47)$$

em que F_{ij}^n representa as forças normais e F_{ij}^t as forças tangenciais à superfície de contato. Nas equações acima aparecem os seguintes parâmetros que são característicos do material estudado: Y , o Módulo de Young; R^{eff} , o raio efetivo dos grãos em contato; ν , o coeficiente de Poisson; A , uma constante de amortecimento do material, que depende da viscosidade, do Módulo e Young e do coeficiente de Poisson; γ^t , coeficiente de amortecimento tangencial; μ , o coeficiente de atrito de Coulomb.

Para as experiências teóricas de simulação por Dinâmica Molecular do ensaio de Compressão Confinada para o ASAC e o Carvão de Açai, utilizamos os parâmetros descritos na Tabela 7, a seguir.

Parâmetros	ASAC	Carvão de Açai
Módulo de Young (Y)	Variado	Variado
Raio dos grãos (R)	0.012 m – 0.020 m	0.006 m – 0.010 m
Coeficiente de atrito (μ)	0.5	0.5
Constante de amortecimento (A)	0.01 s	0.01 s
Amortecimento tangencial (γ^t)	10 Ns/m	10 Ns/m
Densidade do material (ρ)	2.658,0 g/cm ³	1.038,0 g/cm ³
Intervalo de Integração temporal (Δt)	10 ⁻⁶ s	10 ⁻⁶ s
Número de grãos (N)	24	60

Tabela 7 – Parâmetros das forças entre os grãos e entre estes e as paredes do recipiente cilíndrico e o pistão, utilizados na simulação do ensaio de Compressão Confinada por Dinâmica Molecular. O Módulo de Young Y é variado até o melhor ajuste com os resultados da experiência real.

Na Figura 61 apresentamos os resultados do experimento real para a tensão em função da deformação para o ASAC e os resultados da simulação por Dinâmica Molecular. A linha em preto representa os resultados da experiência real e a linha em vermelho os resultados da Dinâmica Molecular. Observamos ruídos nos resultados experimentais reais, mais acentuados nas escalas menores, provavelmente originados do rearranjo nos espaços vazios dos grãos de ASAC durante o processo de compressão. Na inserção da citada figura, apresentamos um instantâneo do corpo de prova durante o ensaio de Compressão Confinada por Dinâmica Molecular. Nela aparecem as três colunas de grãos de ASAC (esferas em amarelo), ocupando a largura do recipiente cilíndrico (esferas em azul), comprimidas pelo pistão (esferas em azul claro), que desce com velocidade constante $v = 0.001$ m/s. Realizamos vários experimentos teóricos (Dinâmica Molecular), variando os valores do Módulo de Young Y e mantendo constantes os demais parâmetros descritos na Tabela 7, até obtermos o melhor ajuste entre a experiência real (laboratorial) e a experiência teórica (Dinâmica Molecular). Verificamos na referida figura um bom ajuste entre os dois resultados, da experiência real e da experiência teórica.

Do melhor ajuste da experiência teórica à experiência real obtivemos o Módulo de Young Y dos grãos de ASAC como sendo $Y = 3,4 \times 10^9$ Pa, tomando o coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$, conforme mostrado na Figura 59. No capítulo anterior apresentamos os resultados do Módulo de Young medidos diretamente por meio do ensaio de Compressão Simples de seis grãos de ASAC, mostrados na Tabela 5, de onde tiramos a média $\bar{Y} = 3,79 \times 10^9$ Pa. Ressaltamos que os grãos de ASAC carecem de uniformidade em sua resistência mecânica, uma vez foram confeccionados manualmente, sem o controle perfeito das pressões utilizadas durante esse processo, o que influencia no seu Módulo de Young, conforme o descrito na Figura 47 para os seis grãos testados individualmente. Pelo exposto, a experiência com a

Dinâmica Molecular obteve um resultado razoável para o Módulo de Young do ASAC, dentro do intervalo dos resultados obtidos na experiência real para os seis grãos testados.

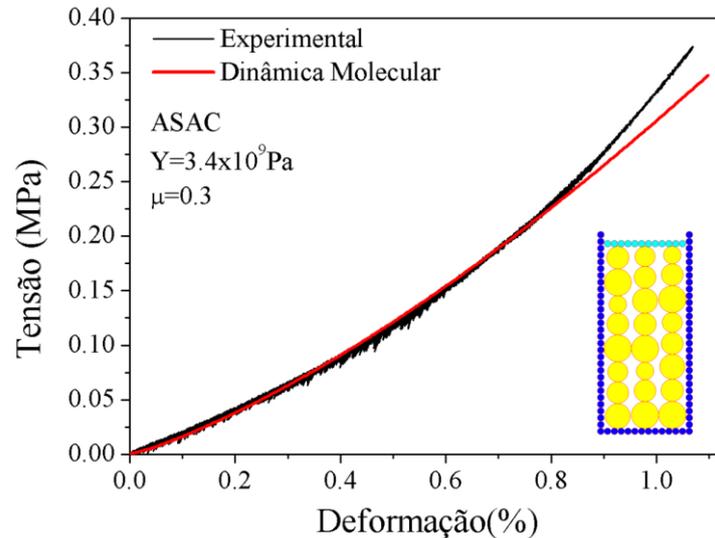


Figura 61 – Tensão em função da deformação para o ASAC. A linha em preto representa os resultados da experiência real do ensaio de Compressão Confinada e a linha em vermelho a experiência teórica com Dinâmica Molecular. A inserção mostra um instantâneo do Corpo de Prova durante o processo de simulação por DM. Os grãos (em amarelo) ocupam a largura do recipiente cilíndrico (em azul) que, assim como a altura, foram tomadas como aproximadamente as mesmas dimensões do cilindro utilizado na experiência real. O pistão (em azul claro) comprime os grãos para baixo, deslocando-se verticalmente com velocidade constante $v = 0.001$ m/s, gerando as tensões e as deformações apresentadas. Verifica-se uma boa concordância entre as duas curvas tomando-se o coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$ e o Módulo de Young $Y = 3,4 \times 10^9$ Pa.

Na Figura 62 mostramos os resultados do ensaio de Compressão Confiada para o caroço de Açaí. A linha em preto representa os resultados da experiência real e a linha em vermelho os resultados obtidos pela simulação com Dinâmica Molecular. O procedimento da experiência teórica foi o mesmo adotado para o ASAC, descrito anteriormente. A inserção na citada figura representa um instantâneo do Corpo de Prova com caroço de Açaí durante o processo de compressão. Os caroços de Açaí são representados por esferas (em amarelo) em cinco colunas, com a mesma distribuição granulométrica, de maneira a ocuparem um recipiente cilíndrico com as mesmas dimensões do cilindro utilizado na experiência real.

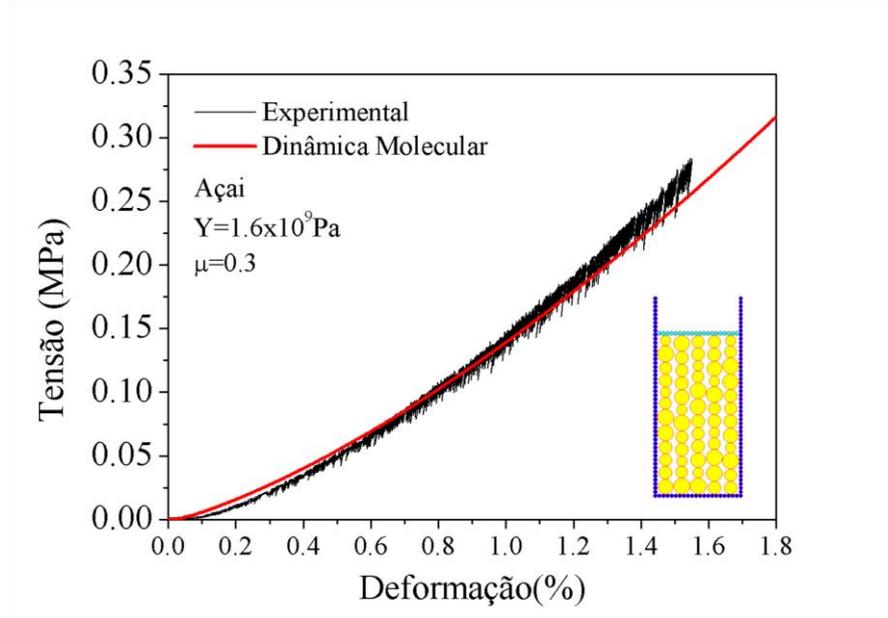


Figura 62 – Tensão em função da deformação obtida do ensaio de Compressão Confinada para os caroços de Açaí. A linha em preto representa os resultados da experiência real e a linha em vermelho a experiência teórica com Dinâmica Molecular. A inserção é um instantâneo do Corpo de Prova durante o processo de compressão, onde se observa as colunas constituídas por esferas representando os caroços de Açaí, obedecendo a mesma distribuição granulométrica. O melhor ajustamento ocorreu para o Módulo de Young $Y = 1,6 \times 10^9$ Pa, com coeficiente de Poisson $\mu = 0.3$.

Verificamos também para os caroços de Açaí uma boa concordância dos resultados obtidos da simulação por Dinâmica Molecular com os resultados da experiência real. Considerando o coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$, encontramos, após o processo de ajustamento, o Módulo de Young $Y = 1,6 \times 10^9$ Pa para o caroço de Açaí, conforme descrito na referida figura. Esse resultado está dentro do intervalo daqueles obtidos na experiência real do ensaio de compressão simples para seis caroços de Açaí, individualmente, apresentados na Tabela 6, cujo valor médio do Módulo de Young é $\bar{Y} = 1,85 \times 10^9$ Pa. Observa-se, neste caso, conforme aquela tabela, uma maior uniformidade dos grãos de Açaí, comparados com os grãos de ASAC, pela razão daqueles se tratarem de um produto natural.

Na Tabela 8 apresentamos um resumo dos Módulos de Young para o ASAC e para o Açaí, obtidos pela simulação por Dinâmica Molecular dos resultados dos ensaios de Compressão Confinada realizados com experiências reais nos laboratórios do Grupo

Geotecnia (GEOTEC). Esses resultados para o Módulo de Young são comparados, na mesma tabela, com aqueles obtidos medindo-se diretamente o Módulo de Young por Compressão Simples de um grão individual de ASAC ou de Açai.

Tipo de Experiência	ASAC		Açai	
	Real (Laboratório)	Dinâmica Molecular	Real (Laboratório)	Dinâmica Molecular
Módulo de Young Y	$3,79 \times 10^9$ Pa	$3,4 \times 10^9$ Pa	$1,85 \times 10^9$ Pa	$1,6 \times 10^9$ Pa

Tabela 8 – Módulo de Young do ASAC e do caroço de Açai, obtidos pelo ensaio de Compressão Simples de um grão em experiência real (laboratório) e pela simulação do ensaio de Compressão Confinada de um conjunto de grãos por Dinâmica Molecular.

Para concluir, vamos tomar um Corpo de Prova constituído por caroços de Açai, construído por empacotamento por gravidade, conforme explicado nas seções anteriores, e medir a tensão *versus* deformação. Como para baixas escalas de tensão e deformação existe um acentuado ruído devido ao rearranjo dos grãos nos vazios, vamos suavizar o espectro da tensão usando o método “Adjacent-Averaging” e compará-lo com os resultados obtidos fazendo o empacotamento por coluna.

Na Figura 63 apresentamos o resultado experimental para a tensão em função da deformação quando a medimos por meio da simulação por Dinâmica Molecular, tomando um corpo de prova confeccionado deixando-se os grãos caírem por gravidade no fundo do recipiente cilíndrico. Na inserção dessa figura mostramos um instantâneo do Corpo de Prova, onde os grãos (em amarelo) estão distribuídos sem obedecerem a uma organização pré-definida. Nesse caso, ao ser aplicada a tensão vertical, por meio do pistão que se desloca para baixo com velocidade constante, os grãos vão se deslocar e migrar para os vazios adjacentes, produzindo ruídos no espectro da tensão.

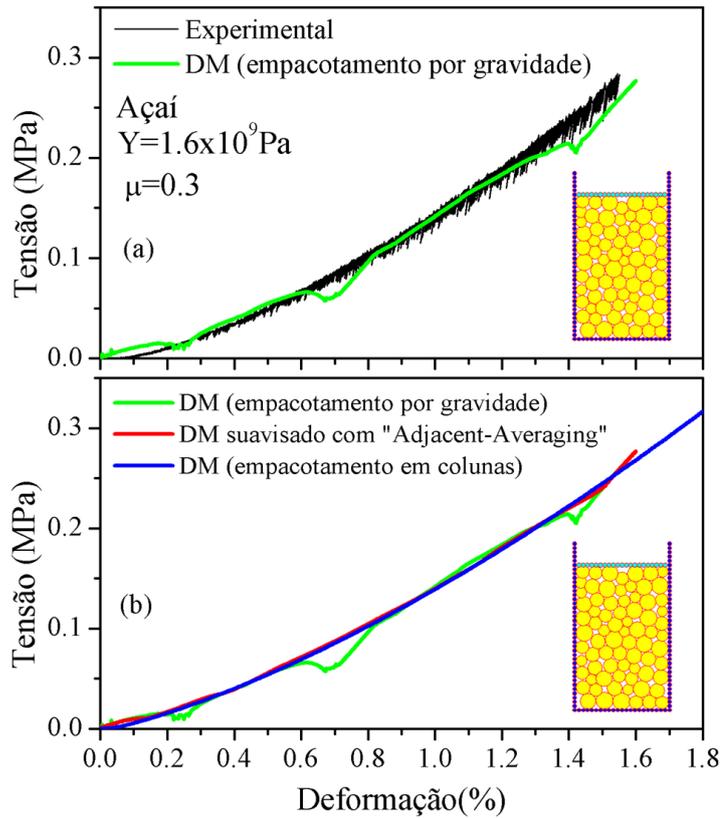


Figura 63 – Comparação da suavização pelo método “Adjacent-Averaging” (em vermelho), da curva obtida da experiência teórica de Dinâmica Molecular, utilizando uma amostra empacotada por gravidade (em verde), com a curva obtida usando a Dinâmica Molecular em uma amostra empacotada por colunas (em azul).

Na Figura 63a mostramos os resultados experimentais reais (em preto) e a simulação por Dinâmica Molecular (em verde), onde observamos as flutuações nos valores da tensão pelas razões acima expostas. Na Figura 63b apresentamos os resultados da experiência com Dinâmica Molecular (em verde), a suavização dessa curva usando o método “Adjacent-Averaging” (em vermelho), utilizando o software “Origin”, e a medida de Dinâmica Molecular (em azul), considerando o empacotamento por coluna. Verificamos uma perfeita coincidência da curva suavizada, representativa do empacotamento por gravidade (em vermelho), com a curva obtida diretamente da simulação por Dinâmica Molecular usando o empacotamento em colunas.

Capítulo 6

6 CONCLUSÕES

A seguir, serão tratadas as conclusões obtidas ao longo do desenvolvimento desta dissertação.

6.1 Caracterização Física do ASAC

- a) Segundo os valores obtidos da curva granulométrica e dos ensaios de limites de Atterberg, bem como as indicações do Departamento Nacional de Estradas de Rodagem – DNER (1981), o solo matéria-prima se apresentou indicado à calcinação para confecção dos agregados artificial de argila.
- b) Pela granulometria do ASAC e segundo a NBR 7211 (1993), podemos designá-lo como BRITA 1, de acordo com o seu tamanho e as porcentagens em massa retidas.
- c) Apesar da alta densidade ($2,658 \text{ g/cm}^3$), a literatura define o ASAC como agregado leve. Este fato é explicado pela alta absorção (17,70%) que também representa a quantidade de poros em relação a um volume total. Assim, definimos o ASAC como agregado leve.

6.2 Caracterização Física do Carçoço do Açai

- a) Pela granulometria do Carçoço do Açai e segundo a NBR 7211 (1993), podemos designá-lo como BRITA 0, de acordo com o seu tamanho e as porcentagens retidas.
- b) A baixa densidade ($1,038 \text{ g/cm}^3$) e a alta absorção (19,40%) nos permitem designá-lo como agregado leve.

6.3 Ensaios Mecânicos – ASAC

- a) Para os ensaios de Compressão Simples, em que o grão é submetido a um carregamento estático, em todos os testes, o comportamento da força em relação à deformação seguiu a tendência proposta por Hertz (1882), sendo a força proporcional à deformação elevada à potência de três meios ($3/2$), para um contato elástico entre dois corpos esféricos.
- b) Por se tratar de um material artificial, em que muitos fatores no processo de produção influenciam no produto final, os coeficientes B do modelo sofreram variação de até 400% um em relação ao outro.
- c) Concernente ao ensaio de Compressão Confinada, em que um conjunto de grãos são confinados em um cilindro metálico e submetidos a um carregamento estático, o comportamento da tensão em relação a deformação específica não seguiu o normalmente obtido, apresentando em seu estágio elástico de carregamento uma curva e não uma reta.

6.4 Ensaios Mecânicos – Carço do Açáí

- a) Para os ensaios de Compressão Simples, em todos os testes, o comportamento da força em relação à deformação seguiu a tendência proposta por Hertz (1882), igualmente ao ASAC, sendo a força proporcional à deformação elevada à potência de três meios ($3/2$), para um contato elástico entre dois corpos esféricos.
- b) Diferente do ASAC, para o Carço do Açáí os coeficientes B do modelo não sofreram discrepâncias acentuadas um em relação ao outro. Isto se deve ao fato de o material em questão ser utilizado praticamente como encontrado na natureza, sofrendo assim poucos interferências em sua composição.

- c) Concernente ao ensaio de Compressão Confinada, em geral todos os gráficos de tensão *versus* deformação apresentaram a mesma configuração obtida no ensaio com o ASAC, em que, no carregamento referente ao estágio elástico, a Tensão é proporcional à deformação elevada a uma potência com valor próximo de 1,5.

6.5 Simulação por Dinâmica Molecular

- a) Os resultados da simulação do Ensaio de Compressão Simples por Dinâmica Molecular obteve uma concordância muito boa com a função de Hertz para a força de contato entre duas esferas elásticas.
- b) A simulação do Ensaio de Compressão Confinada para amostras cilíndricas, com diferentes valores do Módulo de Young, mostra que a compressão varia com a deformação segundo uma lei de potência.
- c) Para os corpos de Prova estudados, com pequeno número de grãos, para se assemelhar aos usados na experiência real, o empacotamento por gravidade deixa as amostras com muitos vazios, em um estado fofo, o que origina flutuações no espectro da resistência à tensão, principalmente na região de menor escala.
- d) Os espectros da resistência à tensão são suavizados quando se confecciona Corpos de Prova com o empacotamento em colunas, mantendo-se a mesma distribuição granulométrica dos Corpos de Prova empacotados por gravidade.
- e) Os espectros da resistência a tensão do Ensaio de Compressão Confinada obtidos pela simulação por Dinâmica Molecular se ajustam bem àqueles obtidos da experiência real.
- f) Os Módulos de Elasticidade do ASAC e do Açaí, medidos pela experiência teórica (DM), estão dentro da média daquelas obtidas a partir da experiência real do Ensaio de Compressão Simples de grãos individuais. Ressalte-se que as amostras dos grãos de

ASAC e de Açai não são uniformes, resultado em valores para o Módulo de Young dentro de uma certa faixa, que é mais larga para o ASAC, por razão do mesmo ser menos uniforme.

7 BIBLIOGRAFIA

ABNT – ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR 6954: lastro padrão: determinação da forma do material. Rio de Janeiro, 1989

_____.NBR 9935: agregados: terminologia. Rio de Janeiro, 2005.

ALLEN, M. P. and TILDESLEY, D. J.: Computer Simulations of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.

B. J. ALDER and T. E. WAINWRIGHT, Phase Transition for a Hard Sphere System. J. Chem. Phys. 27, 1208 (1957).

BARBALHO, C.R.S; MORAES, S.O. Guia para Normalização de Trabalhos Técnicos Científicos: Versão Final. Universidade Federal do Amazonas. Manaus, 2003. 103p.

BATISTA, F. G. S.: Caracterização Física e Mecânica dos Agregados de Argila Calcina da Produzidos com Solos Finos Da BR-163/PA – Dissertação de Mestrado em Engenharia de Transporte – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro – RJ, 2009.

BERNUCCI, L.B.; MOTTA, L.M.G.; CERATTI, J.A.P.; SOARES, J.B.: Pavimentação Asfáltica - Formação Básica para Engenheiros. 1ª. Ed. ABEDA e Petrobras, Rio de Janeiro, 2008.

BORDIGNON, A. L.: GBPM: Um novo Método de Elementos Discretos – Tese de Doutorado – Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, 2010.

BRILLIANTOV, N. V., SPAHN, F. J.-M. HERTZSCH, J.-M. and PÖSCHEL, T.: A model for collisions in granular gases. Phys. Rev. E, 53:5382, 1996.

CABRAL, G. L. L., Metodologia de produção e emprego de agregado de argila calcinada em pavimentação. 2005. Dissertação de Mestrado em Engenharia de Transportes – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro – RJ, 2005.

CALZAVARA, B.B.G.: As possibilidades do Estuário Amazônico. Belém: FCAP, 1972. (Boletim Técnico, n.º 5).

CAVALCANTE, P.B.: Frutas comestíveis da Amazônia. 6ª Ed. Belém: CNPQ/ Museu Paraense Emílio Goeld, 1996.

CHAVES, J.M., PECHNIK, E.: O Assaí, um dos Alimentos Básicos da Amazônia, Anais do 4º Congresso da Associação de Química do Brasil, pp. 169 – 172, 1948.

CUNHA, M. J. A., CARTAXO, E. F., SILVA, C. L. e FROTA, C. A.: Levantamento de Temperatura em Função do Ambiente nos Revestimentos da Cidade de Manaus – 17ª RPU – Reunião de Pavimentação Urbana, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, 2011.

CUNHA, M. J. A.; CARTAXO, E. F.; SILVA, C. L. e FROTA, C. A.: Levantamento de Temperatura em Função do Ambiente nos Revestimentos da Cidade de Manaus – 17ª RPU – Reunião de Pavimentação Urbana, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, 2011.

D. C. RAPAPORT, The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press, 2001.

DANTONA, D. M. ; FROTA, C. A. . Estudo de misturas asfálticas com ligante modificado pelo polímero EVA para pavimentos urbanos de Manaus - AM. Polímeros (São Carlos. Impresso) , v. 21, p. 13-18, 2011.

DNER – DEPARTAMENTO NACIONAL DE ESTRADAS E RODAGEM: Pesquisa de Viabilidade de Implantação da Fábrica de Argila Expandida na Região Amazônica – Relatório Final. Instituto de Pesquisas Rodoviárias – Divisão de Pesquisa. Rio de Janeiro, RJ, 1981.

DNIT – DEPARTAMENTO NACIONAL DE INFRA-ESTRUTURA DE TRANSPORTES.
DNERIE 006/94: materiais rochosos usados em rodovias: análise petrográfica. Rio de Janeiro, 1994.

DNIT 031/04-ES: pavimentos flexíveis: concreto asfáltico. Rio de Janeiro, 2004.

DONZÉ, F.V., RICHEFEU, V. and MAGNIER, S-A.: Advances in Discrete Element Method applied to Soil, Rock and Concrete Mechanics, in: State of the art of geotechnical engineering, Electronic Journal of Geotechnical Engineering, p. 44, 2009.

FRAZÃO, N. F.: Estudo de Estrutura Eletrônica de Nanofitas de Nitreto de Boro utilizando Cálculos de Primeiros Princípios – Dissertação de Mestrado em Física – Universidade Federal do Maranhão, 2009.

FROTA, C. A., NUNES, F. R. G. e SILVA, C. L.: Estudo da Substituição do Seixo por Agregados Sintéticos de Argila Calcinação em Misturas Asfálticas – 12ª RPU – Reunião de Pavimentação Urbana, Aracaju – SE, 2003.

FROTA, C. A., SILVA, C. L. e NUNES, F. R. G.: Análise do Comportamento Mecânico de Misturas Asfálticas Confeccionadas com Agregados Sintéticos de Argila Calcinação – 5ª Jornada Luso-Brasileira de Pavimentos: Políticas e Tecnologias, Recife – PE, 2006a.

FROTA, C. A., SILVA, C. L. e NUNES, F. R. G.: Estudo da Exploração de Argila para Fins de Calcinação, Visando a Construção de Pavimentos na Província Petrolífera de Urucu-Am-Brasil – 5ª Jornada Luso-Brasileira de Pavimentos: Políticas e Tecnologias, Recife – PE, 2006b.

FROTA, C. A., SILVA, C. L., SANTOS, M. G. R. e SILVA, R. V. P.: Caracterização de Solos para Obtenção de Agregados Sintéticos de Argila Calcinação – 35ª RAPv – Reunião Anual de Pavimentação, Rio de Janeiro, 2004.

FROTA H. O., Palestra: Simulação de Materiais Granulares por Dinâmica Molecular. Seminários do Departamento de Física da UFAM, abril/2012.

GARCIA-ROJO, R. T., MCNAMARA, C. and HERRMANN, H. J.: Discrete Element Methods for the Micro-Mechanical Investigation of Granular Ratcheting – European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering – Finland, 24–28, July 2004.

GOMES, I. D., ALVES, K. S., VÉRAS, R. M. L., DETMANN, E., SILVA, V. C. A., OLIVEIRA, L. R. S. BARCELOS, S. S.: Utilização do Caroco de Açaí em Diferentes Níveis na Dieta Sobre o Desempenho de Ovinos em Crescimento. Anais da Associação Brasileira de Zootecnia 2009 – São Paulo, 2009.

GONÇALVES, T. S. e MARTINS, D. C.: Simulação do Polímero PPV por Dinâmica Molecular – 9º Encontro Interno e 13º Seminário de Iniciação Científica – ISSN 2177-1731, Uberlândia-MG, 2009.

H. HERTZ. :Über die Berührung Fester Elastischer Körper. J. f. Reine U. Angewandte Math., 92:156, 1882.

HANSSOM, T., OOSTENBRINK, C. and GUNSTEREN, W. V.: Molecular Dynamics Simulations: Current Opinion in Structural Biology – Elsevier Science, 2002, 12:190–196.

HU, G., HU, Z., JIAN, B., LIU, L. and WAN, H.: On the Determination of the Damping Coefficient of Non-linear Spring-dashpot System to Model Hertz Contact for Simulation by Discrete Element Method. Journal of Computers, v. 6, no. 5, 2011.

KHANAL, M., SCHUBERT, W. and TOMAS, J.: DEM Simulation of diametral compression test on particle compounds: Springer-Verlag – Granular Matter, Published online: 2005, p. 44, 2009.

MARTINS, M. A., MATTOSO, L. H. C. e PESSOA, J. D. C.: Comportamento Térmico e Caracterização Morfológica das Fibras de Mesocarpo e Caroco do Açaí (*Euterpe oleracea* Mart.). Revista Brasileira de Fruticultura, 2009.

MATTOS JUNIOR, E.: Caracterização de concreto com agregado de argila calcinada. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Transportes) – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2007.

MESQUITA, A. L. A., MESQUITA, A. L. A., SANTOS, E. G., CARVALHO, L. C. S., FAGURY, E. N. e MAFRA, M. P. A.: Uso do Método dos Elementos Discretos no Manuseio de Minério e sua Contribuição para a Pós-Graduação e Graduação no Curso de Engenharia Mecânica da UFPA – 40º COBENGE – Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, Belém, Pará, 2012.

NAMBA, A. M., DA SILVA V. B., e DA SILVA, C. H. T. P.: Dinâmica Molecular: Teoria e Aplicações em Planejamento de Fármacos – Eclética Química, 2008, Vol. 33, No. 4, p 13-24.

NEVES, C. E. V.: Comportamento de Materiais Granulares Usando o Método dos Elementos Discretos – Dissertação de Mestrado em Geotecnia – Universidade de Brasília, 2009.

NEVES, C. E. V.: Comportamento de Materiais Granulares Usando o Método dos Elementos Discretos – Dissertação de Mestrado em Geotecnia – Universidade de Brasília, Brasília – DF, 2009.

NUNES, F. R. G. ; SILVA, C. L. ; FROTA, C. A. . Obtenção do módulo dinâmico de misturas asfálticas com agregados sintéticos de argila calcinada, utilizando o ensaio de compressão diametral. Transportes (Rio de Janeiro), v. XVII, p. 5-13, 2009.

NUNES, F. R. G.: Caracterização Mecânica de Misturas Asfálticas Confeccionadas com Agregados Sintéticos de Argila Calcinada Quanto a Deformação Permanente – Dissertação de Mestrado em Engenharia de Transportes – Universidade Federal do Ceará, 2009.

ODAGI, K., TANAKA, T. and YAMANE, K.: DEM Simulation of Compression Test of Particles – Proceeding of World Congress on Particle Technology, Sydney - Australia (2002), Paper nº 172.

OLIVEIRA, M. S. P., CARVALHO, J.E.U.; NASCIMENTO, W.M.O.; MÜLLER, C.H.: Cultivo de Açazeiro para Produção de Frutos. Circular Técnica 26 – EMPRAPA. ISSN 1517-211X, Belém-PA, 2002.

P. A. CUNDALL and O. D. L. STRACK. A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies. *Géotectonique* 29, 47 (1979).

PESSOA, J. D. C., ARDUIM, M., MARTINS, M. A. and CARVALHO, J. E. U.: Characterization of Açai (*E. oleracea*) Fruits and its Processing Residues. *Brazilian Archives of Biology and Technology*. ISSN 1516-8913. 2010.

REIS, B. O.; SILVA, I. T.; SILVA, I. M. O. e ROCHA, B. R. P.: Produção de Briquetes Energéticos a Partir de Caroços do Açai – Anais do 4º Encontro de Energia no Meio Rural, 2002 – SciELO Proceedings.

SANTOS, R. A.: Avaliação do Emprego de Agregado Artificial de Argila Calcinada em Pavimentação. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Transportes) – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2008.

SANTOS, R. R. M.: Aproveitamento do Caroço do Açai como Substrato para Produção de Enzimas por Fermentação em Estado Sólido. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de São Carlos, 2010.

SHANLEY, P., MEDINA, G.: Frutíferas e Plantas Úteis na Vida Amazônica. Belém: CIFOR, Imazon, 2005.

SILVA, C. L., SILVA, C. L., REBELO, E. P. e FROTA, C. A.: Processo Produtivo de Agregados Sinterizados de Argila Calcinada para a Região Amazônica. *Estudos Tecnológicos (Online)*, v. 5, p. 374-388, 2010.

SILVA, I. T., ALMEIDA, A. C., MONTEIRO, J. H. A., DA SILVA, I. M. O. e ROCHA, B. R. P.: Uso do Caroço de Açai como Possibilidade de Desenvolvimento Sustentável do Meio

Rural, da Agricultura Familiar e de Eletrificação Rural no Estado do Pará. Anais do V Encontro de Energia do Meio Rural – São Paulo, 2004.

SILVA, M. A. V.: Comportamento de Misturas Asfálticas a Quente Utilizando Agregado de Argila Calcinada. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Transportes) – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2006.

SYKUT, J., MOLEND, M. and HORABIK, J.: Discrete Element Method (DEM) as a Tool for Investigating Properties of Granular Materials – Polish Journal of Food and Nutrition Sciences, 2007, Vol. 57, No. 2(A), pp. 169-173.

T. PÖSCHEL and T. SCHWARGER, Computational Granular Dynamics, Models and Algorithms. Springer-Verlag, 2005.

TEXEIRA, L. B., GERMANO, V. L. C., OLIVEIRA, R. F., FURLAN J.J.: Processo de Compostagem a Partir de Lixo Orgânico Urbano e Caroço de Açaí. Circular Técnica 29 – EMBRAPA, ISSN 1517-211X. Belém, 2002.

VALENÇA, P. M. A.; FROTA, C. A.; BERTOLDO, R. A. B. e CUNHA, T. M. F.: Estudo de Misturas Areia-Asfalto com Areia de Resíduo de Construção e Demolição, Fibra do Açaí e Polímeros para a Cidade de Manaus, Am – 17ª Ciência e Engenharia (Science & Engineering Journal) 20 (2): 11 – 19, jul. – dez. 2011 – ISSN 1983-4071.

VERLET, L.: Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lenard-Jones Molecules – Physical. Review.165 (1967) 201.

VOIVRET, C., RADJAÏ, F., DELENNE, J.-Y. and El YOUSOUFI, M. S., Space-filling properties of polydisperse granular media. Physical Review E, 76, 021301 (2007).

VU-QUOC, L., ZHANG, X.: An Accurate and Efficient Tangential Force–Displacement Model for Elastic Frictional Contact in Particle-Flow Simulations. Mechanics of Materials, v. 31, 235–269, 1999.

XAVIER, A. C. R., MARTINS, L. D., ENGELHARDT, M, N. e DIAS, J. C.: Gestão Ambiental na PETROBRÁS e CVRD – IV Congresso Nacional de Excelência em Gestão, Niterói, Rio de Janeiro, 2008.

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