

CALIBRAÇÃO AUTOMÁTICA DE PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE  
ELEMENTOS DISCRETOS DE MATERIAIS GRANULARES COM USO DE  
OTIMIZAÇÃO COMPUTACIONAL

Lucas Borges Menezes

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro.

Orientador: Professor Gustavo Rabello dos Anjos

Rio de Janeiro  
Dezembro de 2025



*UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO*

Departamento de Engenharia Mecânica

DEM/POLI/UFRJ



CALIBRAÇÃO AUTOMÁTICA DE PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE  
ELEMENTOS DISCRETOS DE MATERIAIS GRANULARES COM USO DE  
OTIMIZAÇÃO COMPUTACIONAL

Lucas Borges Menezes

PROJETO FINAL SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO DEPARTAMENTO  
DE ENGENHARIA MECÂNICA DA ESCOLA POLITÉCNICA DA  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE  
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE  
ENGENHEIRO MECÂNICO.

Aprovada por:

---

Prof. Professor Gustavo Rabello dos Anjos, Ph.D.

---

Prof. , D.Sc.

---

Prof. , Ph.D.

---

Prof. , D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

DEZEMBRO DE 2025

Lucas Borges Menezes,

Calibração automática de parâmetros para simulação de elementos discretos de materiais granulares com uso de otimização computacional/ Lucas Borges Menezes. – Rio de Janeiro: UFRJ/Escola Politécnica, 2025.

XVII, 39 p.: il.; 29,7cm.

Orientador: Professor Gustavo Rabello dos Anjos

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/  
Curso de Engenharia Mecânica, 2025.

Referências Bibliográficas: p. 36 – 39.

1. Método de Elementos Discretos. 2. Calibração de parâmetros. 3. Materiais granulares. 4. Otimização.  
I. Gustavo Rabello dos Anjos, Professor. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Curso de Engenharia Mecânica. III. Calibração automática de parâmetros para simulação de elementos discretos de materiais granulares com uso de otimização computacional.

*"O homem não é nada além daquilo que a educação faz dele."*

Immanuel Kant.

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, que sempre me ofereceram o suporte, a dedicação e as condições necessárias para que eu pudesse seguir estudando e avançando na minha formação. Sou igualmente grato a todos os professores, amigos e colegas que, de diferentes formas, fizeram parte da minha trajetória até aqui, contribuindo com apoio, conhecimento e incentivo ao longo do caminho.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Mecânico

CALIBRAÇÃO AUTOMÁTICA DE PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE  
ELEMENTOS DISCRETOS DE MATERIAIS GRANULARES COM USO DE  
OTIMIZAÇÃO COMPUTACIONAL

Lucas Borges Menezes

Dezembro/2025

Orientador: Professor Gustavo Rabello dos Anjos

Programa: Engenharia Mecânica

O presente trabalho desenvolve uma metodologia computacional para a calibração automática de parâmetros micromecânicos em modelos baseados no Método dos Elementos Discretos (DEM), utilizando como referência dados experimentais disponíveis na literatura e as diretrizes da norma ABNT NBR 17177:2024. A calibração desses parâmetros é essencial para garantir o caráter preditivo das simulações numéricas de materiais granulares, especialmente em aplicações industriais como o manuseio de minérios. A metodologia proposta integra simulações DEM no software LIGGGHTS, processamento digital de imagens e algoritmos de otimização evolutiva. O procedimento inclui a reprodução virtual dos ensaios de ângulo de repouso e ângulo de descarga, a extração automática das superfícies livres e dos ângulos característicos, e a minimização do erro entre resultados simulados e valores experimentais por meio do método de Evolução Diferencial. Os resultados demonstram que o modelo calibrado reproduz com boa fidelidade os dados experimentais disponíveis para minérios de ferro, validando a eficácia do método. Conclui-se que a integração entre simulação numérica, processamento de imagens e otimização constitui uma

ferramenta eficiente e robusta para calibração DEM baseada exclusivamente em dados da literatura, dispensando infraestrutura experimental própria e apresentando potencial de generalização para outros materiais granulares.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Mechanical Engineer

AUTOMATIC CALIBRATION OF PARAMETERS FOR DISCRETE  
ELEMENT SIMULATION OF GRANULAR MATERIALS USING  
COMPUTATIONAL OPTIMIZATION

Lucas Borges Menezes

December/2025

Advisor: Professor Gustavo Rabello dos Anjos

Department: Mechanical Engineering

This work develops a computational methodology for the automatic calibration of micromechanical parameters in Discrete Element Method (DEM) simulations, using experimental data available in the literature and the guidelines of the Brazilian standard ABNT NBR 17177:2024. Proper calibration of these parameters is essential to ensure the predictive capability of numerical simulations of granular materials, especially in industrial applications such as ore handling. The proposed methodology integrates DEM simulations using the LIGGGHTS software, digital image processing techniques, and evolutionary optimization algorithms. The procedure includes the virtual reproduction of angle-of-repose and drawdown tests, the automatic extraction of free surfaces and characteristic angles, and the minimization of the discrepancy between simulated and experimental values through the Differential Evolution method. Results show that the calibrated model reproduces the experimental data for iron ore with good accuracy, validating the proposed approach. The study concludes that the integration of numerical simulation, image processing, and optimization provides an efficient and robust framework for DEM

calibration based solely on literature data, eliminating the need for dedicated experimental infrastructure and presenting potential for extension to other granular materials.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xiv</b>
<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>xvii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivo . . . . .	2
1.2 Organização . . . . .	3
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>4</b>
2.1 Método dos Elementos Discretos (DEM) . . . . .	4
2.2 O software LIGGGHTS . . . . .	5
2.3 Modelos de contato . . . . .	5
2.3.1 Modelo Hertz–Mindlin . . . . .	6
2.3.2 Modelo de coesão SJKR . . . . .	7
2.3.3 Modelo de resistência ao rolamento EPSD2 . . . . .	8
2.4 Coarse-graining e representações escalonadas . . . . .	9
2.5 Propriedades macroscópicas definidas na norma ABNT NBR 17177:2024 . . . . .	9
2.5.1 Ângulo de repouso . . . . .	9
2.5.2 Ângulo de repouso dinâmico . . . . .	10
2.5.3 Ângulo de descarga . . . . .	11
2.6 Calibração de parâmetros em DEM . . . . .	11
2.7 Problemas inversos e métodos de otimização . . . . .	12

2.8	Differential Evolution e otimização global . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>13</b>
3.1	Configuração numérica no LIGGGHTS . . . . .	13
3.1.1	Equações governantes com modelos de contato integrados . . .	14
3.1.2	Definição das partículas e paredes . . . . .	15
3.2	Representação geométrica dos ensaios de calibração . . . . .	16
3.2.1	Ensaio de ângulo de repouso: representação geométrica . . . .	16
3.2.2	Ensaio de ângulo de descarga: representação geométrica . . .	18
3.3	Processamento de imagem para extração dos ângulos . . . . .	20
3.3.1	Extração do contorno . . . . .	20
3.3.2	Segmentação da superfície livre . . . . .	21
3.3.3	Ajuste linear e cálculo dos ângulos . . . . .	21
3.3.4	Pseudocódigo do processamento . . . . .	22
3.4	Calibração . . . . .	22
3.4.1	Pseudocódigo do procedimento de calibração . . . . .	23
3.4.2	Critérios de parada . . . . .	24
3.5	Visão geral do fluxo metodológico . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussão</b>	<b>26</b>
4.1	Convergência do algoritmo . . . . .	26
4.2	Comparação com resultados experimentais da literatura . . . . .	27
4.2.1	Limitação decorrente do uso exclusivo do ângulo de repouso .	30
4.3	Custo computacional das simulações . . . . .	31
<b>5</b>	<b>Conclusões e Trabalhos Futuros</b>	<b>33</b>
5.1	Conclusões . . . . .	33
5.2	Trabalhos Futuros . . . . .	34
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>36</b>

# Lista de Figuras

2.1	Esquema do modelo Hertz–Mindlin. . . . .	6
2.2	Representação esquemática do ângulo de repouso (AoR). . . . .	10
2.3	Representação esquemática do ângulo de repouso dinâmico. . . . .	10
2.4	Representação esquemática do ângulo de descarga. . . . .	11
3.1	Geometria cilíndrica vazia utilizada para o ensaio de ângulo de repouso.	17
3.2	Cilindro durante o processo de acomodação com partículas - vista inclinada a esquerda e vista frontal a direita. . . . .	17
3.3	Formação da pilha granular após o fim do movimento do cilindro. . . .	18
3.4	Geometria da caixa utilizada no ensaio de ângulo de descarga - vista isométrica. . . . .	19
3.5	Caixa preenchida com partículas antes da remoção da parede frontal - vista isométrica a esquerda e vista frontal a direita. . . . .	19
3.6	Formação dos taludes laterais após a descarga do material granular - vista frontal. . . . .	20
3.7	Contornos extraídos para os ensaios de ângulo de repouso e de descarga.	21
3.8	Segmentação da superfície livre para cálculo dos ângulos. . . . .	21
3.9	Ajuste linear sobre os segmentos identificados da superfície livre e ângulos obtidos em graus ( $^{\circ}$ ). . . . .	22
3.10	Fluxo metodológico da calibração automática DEM. . . . .	25
4.1	Convergência da função objetivo ao longo das iterações. . . . .	27
4.2	Comparação entre o ângulo em graus ( $^{\circ}$ ) das pilhas simuladas com as experimentais de Silva et al. (2025). . . . .	29

# Lista de Tabelas

4.1	Materiais utilizados na comparação (adaptado de Silva et al. 2025) [1].	28
4.2	Parâmetros DEM calibrados para cada material analisado. . . . .	29
4.3	Comparação entre ângulos de repouso simulados e experimentais. . .	30
4.4	Tempo total de simulação para cada caso de calibração. . . . .	32

# Lista de Símbolos

$A_{\text{cont}}$	área de contato entre partículas, p. 8
$AoR_{\text{ref}}$	ângulo de repouso de referência, p. 22
$AoR_{\text{sim}}$	ângulo de repouso simulado, p. 22
$CR$	taxa de cruzamento, p. 12
$E$	módulo de Young, p. 15
$F$	fator de mutação, p. 12
$F_n$	força normal de contato, p. 7
$F_t$	força tangencial no contato, p. 7
$F_{\text{adh}}$	força coesiva entre partículas, p. 8
$I_i$	momento de inércia, p. 5
$J(\mathbf{p})$	função objetivo da calibração, p. 11
$Q_i^{\text{ref}}$	valor de referência da propriedade $i$ , p. 11
$Q_i^{\text{sim}}$	valor simulado da propriedade $i$ , p. 11
$R_{\text{eq}}$	raio efetivo equivalente, p. 8
$\omega_i$	velocidade angular, p. 5
$\omega_{\text{rel}}$	velocidade angular relativa, p. 8
$\theta_r$	deslocamento angular acumulado, p. 8
$\delta_n$	deformação normal, p. 7

$\delta_t$	deslocamento tangencial acumulado, p. 7
$\gamma_n$	coeficiente de amortecimento normal, p. 7
$\gamma_r$	amortecimento rotacional, p. 8
$\gamma_t$	coeficiente de amortecimento tangencial, p. 7
$\mathbf{F}_i^{\text{ext}}$	forças externas, p. 4
$\mathbf{F}_{ij}$	força de contato entre partículas, p. 4
$\mathbf{M}_r$	momento resistente ao rolamento, p. 8
$\mathbf{M}_{ij}$	momentos de contato, p. 5
$\mathbf{p}$	vetor de parâmetros micromecânicos, p. 11
$\mathbf{p}_{r1}, \mathbf{p}_{r2}, \mathbf{p}_{r3}$	indivíduos selecionados aleatoriamente, p. 12
$\mathbf{v}_i$	vetor mutante, p. 12
$\mathbf{x}_i$	posição da partícula $i$ , p. 4
$\mu_r$	coeficiente de atrito de rolamento, p. 8
$\mu_s$	coeficiente de atrito estático, p. 7
$\nu$	coeficiente de Poisson, p. 15
$\rho$	densidade das partículas, p. 15
$\sigma_c$	tensão coesiva efetiva, p. 8
$d_p$	diâmetro das partículas, p. 15
$k_n$	rigidez normal equivalente, p. 7
$k_r$	rigidez rotacional, p. 8
$k_t$	rigidez tangencial, p. 7
$m_i$	massa da partícula $i$ , p. 4
$u_{i,j}$	componente do vetor de teste, p. 12

$w_i$  peso associado à propriedade  $i$ , p. 11

# Lista de Abreviaturas

AoR	Ângulo de repouso, p. 9
DEM	Método dos Elementos Discretos, p. 1, 4
DE	Differential Evolution, p. 12
EPD2	Modelo de resistência ao rolamento elastic-plastic spring-dashpot 2, p. 8
HM	Modelo de contato Hertz-Mindlin, p. 8
SJKR	Modelo de coesão Simplified Johnson-Kendall-Roberts, p. 8

# Capítulo 1

## Introdução

O manuseio, transporte e armazenamento de materiais granulares desempenham papel essencial em diversos setores industriais, como mineração, siderurgia, agromercado, cimento e indústria química. Nesses processos, o comportamento do material particulado influencia diretamente a eficiência operacional, a segurança e o desempenho de equipamentos como silos, chutes, correias transportadoras e moegas. Fenômenos como segregação, entupimento, instabilidades de fluxo e desgaste abrasivo constituem desafios recorrentes e motivam o estudo detalhado das propriedades de escoamento de granulados.

Com o avanço da capacidade computacional, o Método dos Elementos Discretos (DEM) consolidou-se como uma das principais ferramentas numéricas para modelagem do comportamento dinâmico de partículas. Sua formulação permite descrever interações individuais entre partículas e destas com as superfícies dos equipamentos, possibilitando análises que dificilmente poderiam ser realizadas apenas por ensaios físicos. No entanto, a aplicação confiável do DEM depende de uma etapa crítica: a calibração dos parâmetros micromecânicos de contato, como coeficientes de atrito, coeficiente de restituição, rigidez normal e tangencial, resistência ao rolamento e, quando aplicável, parâmetros coesivos.

Esses parâmetros não são diretamente mensuráveis na escala idealizada utilizada pelo modelo numérico e, portanto, devem ser ajustados de modo que a resposta macroscópica do sistema simulado reproduza comportamentos observados experimentalmente. Quando são utilizadas estratégias de *coarse-graining*, nas quais partículas numericamente maiores substituem as partículas reais para reduzir o custo com-

putacional, os parâmetros deixam de representar propriedades físicas intrínsecas e passam a atuar como parâmetros efetivos. Nesse caso, a calibração torna-se ainda mais indispensável para assegurar a coerência do comportamento global do escoamento [2].

No contexto brasileiro, a publicação da ABNT NBR 17177:2024 [3] estabelece procedimentos padronizados para a caracterização de propriedades de escoamento de materiais granulares, como ensaios de formação de pilha, ângulo de descarga, plano inclinado e tambor rotativo. A normatização cria uma base técnica capaz de favorecer o desenvolvimento de metodologias de calibração DEM mais sistemáticas e comparáveis. Contudo, por ser uma norma recente, ainda existe quantidade limitada de dados experimentais disponíveis na literatura que sigam rigorosamente seus procedimentos, o que impacta diretamente o processo de calibração, especialmente no uso de ensaios múltiplos.

Paralelamente, cresce o interesse em metodologias automáticas de calibração. A combinação de softwares de código aberto, como o LIGGGHTS, com linguagens de alto nível, como Python, oferece um ambiente versátil para construir *pipelines* completos que executem simulações, processem imagens e ajustem parâmetros de modo totalmente automatizado.

Este trabalho insere-se nesse cenário, propondo o desenvolvimento de um código para calibração automática dos parâmetros DEM utilizando simulações no LIGGGHTS [4] acopladas ao processamento digital de imagens e a métodos de otimização populacionais. Devido à limitação de dados experimentais compatíveis com a NBR 17177:2024 [3], a calibração foi conduzida principalmente com base no ângulo de repouso, indicador amplamente disponível na literatura e de forte relevância para caracterização do escoamento. As técnicas aplicadas permitem ajustar parâmetros de contato de forma reprodutível, sistemática e alinhada às práticas recomendadas em estudos recentes de materiais granulares.

## 1.1 Objetivo

O objetivo geral deste trabalho é desenvolver e aplicar um código computacional para calibração automática dos parâmetros de contato utilizados em si-

mulações DEM no software LIGGGHTS, tomando como referência propriedades macroscópicas obtidas por ensaios experimentais descritos na literatura, com ênfase no ângulo de repouso conforme os princípios estabelecidos pela ABNT NBR 17177:2024 [3].

Os objetivos específicos são:

- Implementar rotinas automatizadas, em Python, para geração de simulações DEM dos ensaios de formação de pilha;
- Desenvolver algoritmos de processamento de imagens para identificação do contorno e extração dos ângulos característicos;
- Integrar algoritmos de otimização numérica ao processo de calibração, permitindo ajuste automático dos parâmetros DEM;
- Validar a metodologia por meio da comparação entre resultados numéricos calibrados e dados experimentais independentes.

## 1.2 Organização

Este projeto está organizado conforme segue:

- **Capítulo 1:** introduz o problema, apresenta a motivação e os objetivos;
- **Capítulo 2:** apresenta a revisão bibliográfica sobre DEM, modelos de contato, métodos de calibração e técnicas de otimização;
- **Capítulo 3:** descreve detalhadamente a metodologia proposta, incluindo modelagem numérica, processamento de imagem e formulação da calibração;
- **Capítulo 4:** apresenta os resultados obtidos e discute a qualidade e consistência dos parâmetros calibrados;
- **Capítulo 5:** apresenta as conclusões gerais e propostas de trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

A modelagem do comportamento de materiais granulares exige a representação explícita de fenômenos como colisões, atrito, coesão, dissipação de energia e interação geométrica entre partículas. Entre as técnicas numéricas disponíveis, o Método dos Elementos Discretos (DEM) destaca-se como a abordagem mais difundida para simulações em nível de partícula, permitindo que propriedades macroscópicas de escoamento emergem naturalmente das interações micromecânicas.

Este capítulo apresenta os fundamentos do DEM, os principais modelos de contato utilizados, estratégias de escalonamento para simulações de grande porte, propriedades macroscópicas descritas na norma ABNT NBR 17177:2024 [3] e os métodos de calibração automática empregados na literatura. Por fim, discute-se a formulação do problema de calibração como um problema inverso e o uso de algoritmos evolutivos, com destaque para o *Differential Evolution*.

### 2.1 Método dos Elementos Discretos (DEM)

O DEM, introduzido por Cundall e Strack em 1979 [5], representa um meio granular como um conjunto de partículas discretas com graus de liberdade translacionais e rotacionais. A evolução temporal é calculada pela integração explícita das equações de movimento:

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = \sum \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_i^{\text{ext}} \quad (2.1)$$

$$I_i \ddot{\omega}_i = \sum \mathbf{M}_{ij} + \mathbf{M}_i^{\text{ext}} \quad (2.2)$$

A formulação DEM permite que mecanismos locais, como atrito, rolamento, adesão e amortecimento, se traduzam em propriedades macroscópicas como ângulo de repouso, compactação, densidade aparente e resistência ao escoamento. A precisão do método, portanto, depende diretamente da modelagem adotada para as forças de contato e dos valores de parâmetros micromecânicos.

## 2.2 O software LIGGGHTS

O LIGGGHTS é um software de código aberto especializado na simulação de materiais particulados pelo Método dos Elementos Discretos, desenvolvido como uma extensão do *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) [4].

Originalmente, O LAMMPS é um código concebido para simulações de dinâmica molecular em larga escala. A partir dessa base, o LIGGGHTS foi adaptado e estendido para aplicações materiais granulares, incorporando modelos específicos para contatos normal, tangencial, rotacional e coesivo, bem como rotinas otimizadas para o tratamento de colisões e detecção de vizinhança em sistemas com milhões de partículas.

Além disso, integra-se diretamente com rotinas em Python para automação de simulações e processamento e é amplamente utilizado na literatura, especialmente em estudos de calibração DEM.

Essas características justificam sua adoção como plataforma principal neste trabalho.

## 2.3 Modelos de contato

Modelos micromecânicos são responsáveis por traduzir interações entre partículas. Os mais utilizados na literatura incluem:

- (i) o modelo Hertz–Mindlin (contato elástico viscoelástico) [6, 7];
- (ii) modelos adesivos, como o SJKR [8];

(iii) modelos de resistência ao rolamento, como o EPSD2 [8].

Cada um deles captura um aspecto específico do comportamento de partículas reais.

### 2.3.1 Modelo Hertz–Mindlin

O modelo Hertz–Mindlin é uma das formulações de contato mais amplamente utilizadas em simulações DEM, sendo derivado da teoria clássica de Hertz (1882) para o contato elástico entre esferas [6] e estendido por Mindlin e Deresiewicz (1953) para incluir efeitos tangenciais e dependência do histórico de carregamento [7]. Essas teorias servem como base para grande parte das implementações contemporâneas de modelos micromecânicos em códigos DEM.

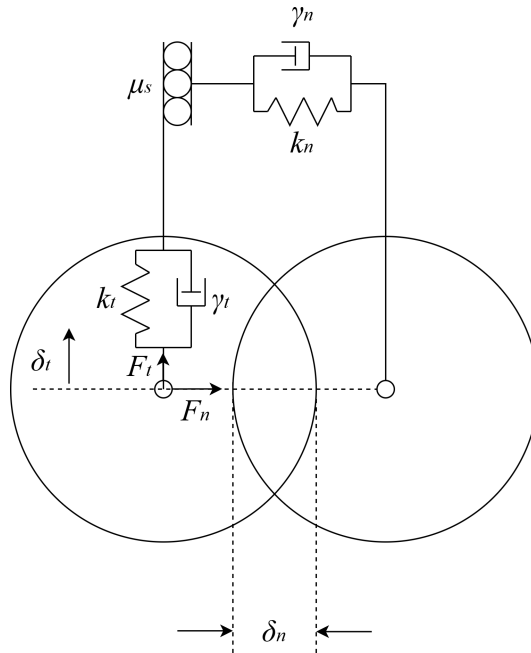


Figura 2.1: Esquema do modelo Hertz–Mindlin.

Sob as hipóteses de que as partículas são esféricas, isotrópicas e apresentam pequenas deformações, Hertz demonstrou que a força normal elástica depende da área de contato, que cresce com a profundidade de penetração. Em implementações numéricas, essa relação é frequentemente linearizada na forma:

$$F_n = k_n \delta_n - \gamma_n \dot{\delta}_n \quad (2.3)$$

O modelo de Mindlin–Deresiewicz, por sua vez, descreve a resposta tangencial levando em conta o histórico de carregamento. O deslocamento tangencial acumulado  $\delta_t$  é atualizado a cada passo de tempo, permitindo a transição realista entre regimes de aderência parcial e deslizamento. A força tangencial é dada por:

$$F_t = -k_t \delta_t - \gamma_t \dot{\delta}_t, \quad (2.4)$$

Com limitação imposta pela condição de Coulomb:

$$\|F_t\| \leq \mu_s F_n. \quad (2.5)$$

A formulação Hertz–Mindlin é amplamente reconhecida por sua fundamentação física, capacidade de capturar dissipações energéticas associadas ao amortecimento viscoelástico e boa eficiência computacional. Revisões como as de Thornton (1997) e Di Renzo e Di Maio (2004) [9, 10] destacam sua adequação para uma grande variedade de materiais granulares. Contudo, o modelo assume partículas perfeitamente esféricas e ausência de plasticidade, o que frequentemente exige a incorporação de modelos complementares, como SJKR e EPSD2, para representar fenômenos não cobertos pela teoria elástica.

### 2.3.2 Modelo de coesão SJKR

O comportamento adesivo entre partículas finas pode desempenhar papel significativo no escoamento de materiais granulares, especialmente quando efeitos como umidade, forças de capilaridade, atração eletrostática ou tensão superficial estão presentes. A formulação clássica para descrever forças adesivas entre corpos elásticos em contato foi proposta por Johnson, Kendall e Roberts (JKR) em 1971 [11], estabelecendo uma relação entre a área de contato, a energia de superfície e a força normal aplicada.

A versão completa do modelo JKR, embora fisicamente rigorosa, é complexa e computacionalmente custosa, envolvendo relações implícitas para o cálculo da área de contato. Para aplicações DEM em larga escala, versões simplificadas são preferidas. Entre elas destaca-se o modelo *Simplified JKR* (SJKR), presente no LIGGGHTS [8], o qual representa a força adesiva como proporcional à área estimada de contato entre partículas:

$$F_{\text{adh}} = \sigma_c A_{\text{cont}} \quad (2.6)$$

Estudos como os de El-Kassem et al. [12] demonstram que a inclusão do termo adesivo melhora significativamente a capacidade de reproduzir propriedades macroscópicas como densidade aparente, formação de aglomerados e ângulo de repouso. As limitações do SJKR incluem a ausência de histerese adesiva e a suposição de proporcionalidade linear entre coesão e área de contato, características aceitáveis para muitos casos industriais, mas restritivas em fenômenos mais complexos.

### 2.3.3 Modelo de resistência ao rolamento EPSD2

A resistência ao rolamento é essencial para representar perdas energéticas associadas à rugosidade superficial e à irregularidade geométrica das partículas. A formulação clássica considera o torque resistente proporcional à força normal e ao raio efetivo das partículas [13, 14]:

$$\mathbf{M}_r = -\mu_r F_n R_{\text{eq}} \frac{\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}}}{\|\boldsymbol{\omega}_{\text{rel}}\|} \quad (2.7)$$

Embora útil, esse modelo fenomenológico não captura adequadamente regimes elásticos e plásticos do contato rotacional. Para aumentar o realismo da simulação, o modelo *Elastic-Plastic Spring-Dashpot 2* (EPSD2) estende a formulação incorporando termos elásticos e dissipativos no espaço rotacional:

$$\mathbf{M}_r = -k_r \boldsymbol{\theta}_r - \gamma_r \dot{\boldsymbol{\theta}}_r, \quad (2.8)$$

Sujeito à limitação:

$$\|\mathbf{M}_r\| \leq \mu_r F_n R_{\text{eq}}. \quad (2.9)$$

Essa modelagem permite representar de forma mais realista partículas não esféricas ou com asperezas. Estudos como os de Ai et al. [14] confirmam que a inclusão de resistência ao rolamento melhora substancialmente a concordância entre DEM e experimentos em materiais com formas irregulares.

## 2.4 Coarse-graining e representações escalonadas

Sistemas industriais podem conter bilhões de partículas, tornando inviável sua simulação direta. Técnicas de *coarse-graining* reduzem o número de partículas substituindo grupos reais por partículas maiores, diminuindo o custo computacional.

Zhang et al. [2] destacam que essas estratégias alteram a dinâmica local das interações, de modo que os parâmetros de contato passam a assumir caráter efetivo, exigindo calibração cuidadosa para preservar propriedades macroscópicas como ângulo de repouso e densidade aparente.

## 2.5 Propriedades macroscópicas definidas na norma ABNT NBR 17177:2024

No Brasil, a ABNT NBR 17177:2024 [3] estabelece procedimentos padronizados para a medição de propriedades granulares associadas ao fluxo de partículas, fornecendo parâmetros reprodutíveis e comparáveis que servem como referência para calibração de simulações DEM.

A norma contempla diferentes ensaios laboratoriais destinados a quantificar a resposta de um material granular sob condições estáticas ou dinâmicas. Entre esses ensaios destacam-se a pilha estática para determinação do ângulo de repouso, o plano inclinado, o tambor rotativo e o ensaio de descarga por orifício. Cada um deles está associado a fenômenos físicos específicos e apresenta sensibilidade distinta a atrito, rolamento e coesão, o que os torna especialmente relevantes para calibração numérica.

### 2.5.1 Ângulo de repouso

O ângulo de repouso é definido como o maior ângulo que um talude granular pode assumir antes de entrar em colapso espontâneo. Ele é determinado pela geometria da pilha formada quando um material flui livremente sob ação da gravidade. A NBR 17177:2024 [3] especifica condições padronizadas para geração dessa pilha e cálculo do ângulo a partir de imagens ou medições geométricas.

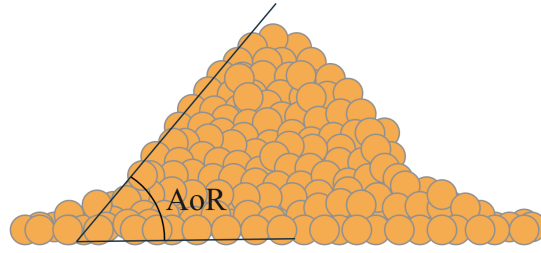


Figura 2.2: Representação esquemática do ângulo de repouso (AoR).

Esse parâmetro reflete mecanismos dissipativos como atrito estático, resistência ao rolamento e, para alguns materiais, efeitos coesivos.

### 2.5.2 Ângulo de repouso dinâmico

Em materiais submetidos a fluxo contínuo, como em tambores rotativos, define-se o ângulo de repouso dinâmico como o ângulo médio da superfície livre em regime permanente. Esse parâmetro é sensível ao atrito dinâmico e à resistência ao rolamento, apresentando valores superiores ao ângulo de repouso estático. Sua relevância para calibração reside no fato de capturar comportamentos característicos de regimes dinâmicos de escoamento.

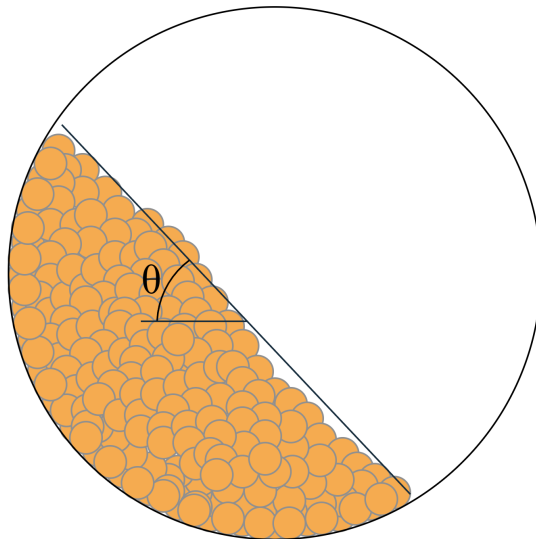


Figura 2.3: Representação esquemática do ângulo de repouso dinâmico.

Embora o ângulo de repouso dinâmico seja amplamente estudado em pesquisas científicas envolvendo tambores rotativos e escoamentos contínuos [15, 16], seu

uso ainda é limitado na prática industrial. Estudos técnicos apontam que ensaios estáticos, como o ângulo de repouso e o ângulo de descarga, permanecem preferidos devido à simplicidade e ao menor custo experimental [17, 18].

### 2.5.3 Ângulo de descarga

O ângulo de descarga está associado ao escoamento de material granular através de um orifício ou comporta. Ele pode ser definido pela inclinação da superfície livre durante o escoamento ou pela abertura crítica na qual ocorre o início da descarga. A NBR 17177:2024 [3] padroniza o procedimento, garantindo a repetibilidade das medições.

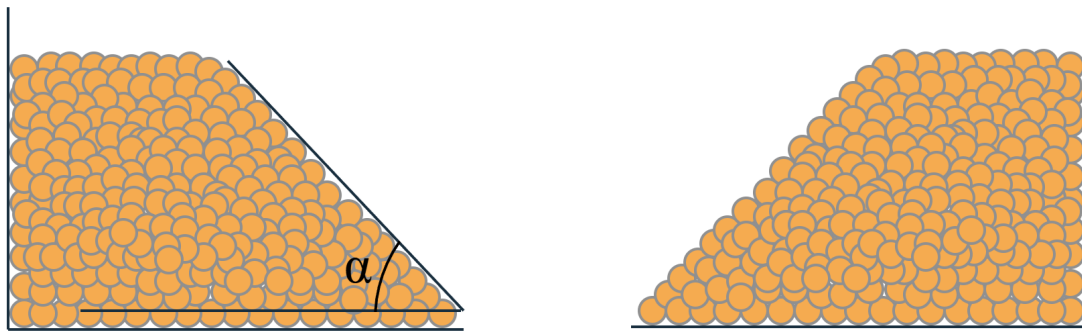


Figura 2.4: Representação esquemática do ângulo de descarga.

Materiais coesivos tendem a apresentar ângulos de descarga elevados devido à formação de pontes estáveis que retardam o início do fluxo [17, 18, 19, 20]. Por esse motivo, esse parâmetro é especialmente útil para calibração de modelos que incluem adesão entre partículas, como o modelo SJKR.

## 2.6 Calibração de parâmetros em DEM

A calibração consiste em determinar parâmetros que reproduzam propriedades macroscópicas observadas. Para um conjunto de grandezas  $Q_i$  define-se a função objetivo:

$$J(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N w_i [Q_i^{\text{sim}}(\mathbf{p}) - Q_i^{\text{ref}}]^2 \quad (2.10)$$

Abordagens manuais de calibração apresentam baixa reprodutibilidade, incentivando o uso de métodos automáticos.

## 2.7 Problemas inversos e métodos de otimização

A calibração DEM pode ser vista como um problema inverso mal-posto, segundo Özisik e Orlande [21], frequentemente caracterizado por instabilidades numéricas, ruído e múltiplos mínimos locais. Métodos de gradiente tradicionalmente não lidam bem com tais superfícies de erro, tornando algoritmos evolutivos alternativas mais robustas [22, 23, 12].

## 2.8 Differential Evolution e otimização global

O algoritmo *Differential Evolution* (DE), de Storn e Price [24], é um método populacional robusto para otimização contínua. Sua fase de mutação é dada por:

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{p}_{r1} + F(\mathbf{p}_{r2} - \mathbf{p}_{r3}) \quad (2.11)$$

E a recombinação por:

$$u_{i,j} = \begin{cases} v_{i,j}, & \text{se } rand_j < CR, \\ p_{i,j}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.12)$$

O DE lida bem com superfícies multimodais, ruído e acoplamento entre parâmetros, tornando-se adequado para calibração DEM de alta complexidade.

# Capítulo 3

## Metodologia

Este capítulo descreve o procedimento metodológico adotado para a calibração automática de parâmetros de interação em simulações DEM. A abordagem integra:

- (i) a configuração numérica das simulações no LIGGGHTS [4];
- (ii) a representação geométrica dos ensaios de ângulo de repouso e ângulo de descarga;
- (iii) o processamento de imagens para extração dos ângulos característicos;
- (iv) a formulação do problema de calibração;
- (v) a aplicação do algoritmo *Differential Evolution* [24] para estimação dos parâmetros.

Embora a metodologia seja geral e suporte o uso simultâneo de múltiplos ensaios, neste trabalho a calibração numérica foi conduzida com base apenas no ângulo de repouso, em função da disponibilidade de dados experimentais compatíveis na literatura. O ensaio de descarga é, ainda assim, modelado e processado, sendo utilizado como ferramenta complementar de análise qualitativa do comportamento do escoamento.

### 3.1 Configuração numérica no LIGGGHTS

As simulações foram realizadas com o software LIGGGHTS [4], no qual o problema dinâmico é resolvido por integração explícita das equações de movimento para

cada partícula.

O LIGGGHTS é um código DEM nativamente tridimensional, no qual tanto as partículas quanto as geometrias de contorno são representadas em espaço 3D. Dessa forma, todas as interações de contato, forças, momentos e movimentos são calculados considerando as três componentes espaciais, permitindo a análise correta das estruturas tridimensionais da pilha granular.

A cada passo de tempo, as seguintes etapas fundamentais são realizadas:

- (i) detecção de vizinhança entre partículas e paredes;
- (ii) cálculo das forças e momentos de contato a partir dos modelos constitutivos;
- (iii) soma das contribuições de contato e forças externas;
- (iv) integração explícita das equações de movimento.

### 3.1.1 Equações governantes com modelos de contato integrais

A partir das equações de Newton para translação e rotação, é incorporado no LIGGGHTS as equações dos modelos de contato. A equação do movimento translacional da partícula  $i$  passa a ser dada por:

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = \sum_j \left[ \left( k_n \delta_n^{ij} - \gamma_n \dot{\delta}_n^{ij} \right) \mathbf{n}_{ij} - \left( k_t \boldsymbol{\delta}_t^{ij} + \gamma_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_t^{ij} \right) + F_{\text{adh}}^{ij} \mathbf{n}_{ij} \right] + m_i \mathbf{g}, \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{n}_{ij}$  é o vetor normal unitário no contato entre as partículas  $i$  e  $j$ ,  $\delta_n^{ij}$  e  $\boldsymbol{\delta}_t^{ij}$  representam, respectivamente, as deformações normal e tangencial, e  $\mathbf{g}$  é o vetor aceleração da gravidade. O termo adesivo  $F_{\text{adh}}^{ij}$  é definido pelo modelo SJKR como:

$$F_{\text{adh}}^{ij} = c_{pp} A_{\text{cont}}^{ij}. \quad (3.2)$$

A força tangencial é limitada pelo critério de Coulomb:

$$\left\| k_t \boldsymbol{\delta}_t^{ij} + \gamma_t \dot{\boldsymbol{\delta}}_t^{ij} \right\| \leq \mu_{pp} \left( k_n \delta_n^{ij} - \gamma_n \dot{\delta}_n^{ij} + F_{\text{adh}}^{ij} \right). \quad (3.3)$$

O movimento rotacional da partícula é governado por:

$$I_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \sum_j \left[ \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{F}_t^{ij} - k_r \boldsymbol{\theta}_r^{ij} - \gamma_r \dot{\boldsymbol{\theta}}_r^{ij} \right], \quad (3.4)$$

onde  $\mathbf{r}_{ij}$  é o vetor posição do ponto de contato em relação ao centro da partícula e  $\boldsymbol{\theta}_r^{ij}$  representa o deslocamento angular acumulado no contato, conforme o modelo de resistência ao rolamento EPSD2. O momento resistente é limitado por:

$$\left\| k_r \boldsymbol{\theta}_r^{ij} + \gamma_r \dot{\boldsymbol{\theta}}_r^{ij} \right\| \leq \mu_{r,pp} \left( k_n \delta_n^{ij} - \gamma_n \dot{\delta}_n^{ij} + F_{\text{adh}}^{ij} \right) R. \quad (3.5)$$

Essas equações são integradas explicitamente no tempo pelo LIGGGHTS, sendo o passo de tempo selecionado a partir de um critério de estabilidade associado ao período natural de oscilação do contato, mantendo uma fração típica desse período para garantir estabilidade numérica e resolução adequada das interações.

### 3.1.2 Definição das partículas e paredes

As partículas são modeladas como esferas de diâmetro fixo, empregadas como estratégia de *coarse-graining*. As propriedades básicas consideradas são:

- densidade  $\rho$ ;
- módulo de Young  $E$ ;
- coeficiente de Poisson  $\nu$ ;
- diâmetro das partículas  $d_p$ .

Essas propriedades condicionam as rigidezes equivalentes utilizadas nos modelos de contato e definem, em conjunto com a massa das partículas, as escalas de tempo relevantes do problema.

No presente trabalho, os parâmetros de contato das partículas:  $e_{pp}$ ,  $\mu_{pp}$ ,  $\mu_{r,pp}$  e  $c_{pp}$ , são tratados como variáveis de calibração, enquanto propriedades como  $\rho$ ,  $E$ ,  $\nu$  e  $d_p$  são mantidas fixas com base em dados de material e em considerações de *coarse-graining*. Adotou-se um diâmetro de partícula constante de  $d_p = 40$  mm, como estratégia de *coarse-graining*, módulo de elasticidade  $E = 200$  MPa e coeficiente de Poisson  $\nu = 0,30$  para todas as simulações em conformidade com o minério de ferro. A densidade das partículas, por sua vez, foi definida de forma específica para

cada caso analisado, a partir da densidade aparente reportada para cada estágio do minério de ferro considerado.

Essas escolhas permitem estabelecer uma correspondência direta entre os materiais experimentais e suas respectivas representações numéricas, garantindo consistência entre os resultados simulados e os dados de referência utilizados na análise comparativa apresentada no Capítulo 4.

## **3.2 Representação geométrica dos ensaios de calibração**

Os ensaios de ângulo de repouso e ângulo de descarga foram descritos no Capítulo 2 quanto aos seus princípios físicos e grandezas medidas. Nesta seção, detalha-se a forma como esses ensaios foram representados no ambiente DEM, incluindo geometria dos domínios, processo de preenchimento, condições de contorno e estados utilizados para análise.

### **3.2.1 Ensaio de ângulo de repouso: representação geométrica**

O domínio geométrico do ensaio foi modelado como um cilindro rígido, conforme ilustrado na Figura 3.1. As dimensões do cilindro foram definidas com base no diâmetro característico das partículas, adotando-se tanto o diâmetro quanto a altura do recipiente iguais a  $30 d_p$ , onde  $d_p$  representa o diâmetro da partícula. Esse dimensionamento garante extensão suficiente da pilha para minimizar efeitos de confinamento geométrico e assegurar que o ângulo de repouso obtido seja representativo do comportamento macroscópico do material.

Dessa forma, o cilindro é preenchido com um total de 11 637 partículas. Após o preenchimento, é realizada uma etapa de acomodação, na qual o sistema evolui livremente até que a energia cinética específica média das partículas atinja um valor inferior a  $1 \times 10^{-3}$  J/kg, caracterizando a condição de equilíbrio estático antes da remoção do recipiente.

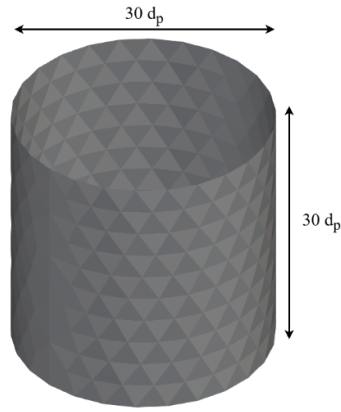


Figura 3.1: Geometria cilíndrica vazia utilizada para o ensaio de ângulo de repouso.

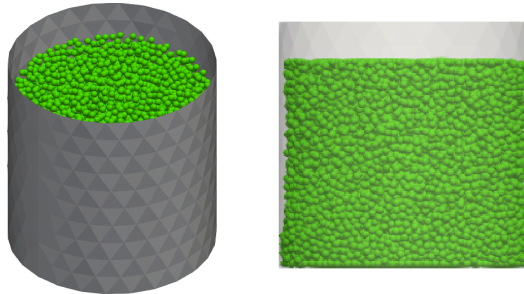


Figura 3.2: Cilindro durante o processo de acomodação com partículas - vista inclinada a esquerda e vista frontal a direita.

Após a etapa de acomodação, o cilindro é levantado verticalmente com velocidade suficientemente baixa para não induzir perturbações dinâmicas significativas, permitindo que o material granular forme espontaneamente o talude natural exibido na Figura 3.3 e assim que a energia cinética específica média atinje um valor inferior a  $1 \times 10^{-3} \text{ J/kg}$ , é realizado o processamento de imagem para o cálculo do ângulo de repouso.

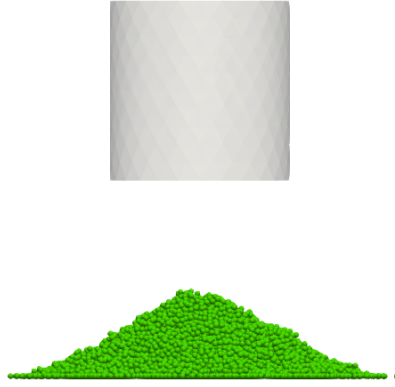


Figura 3.3: Formação da pilha granular após o fim do movimento do cilindro.

### 3.2.2 Ensaio de ângulo de descarga: representação geométrica

Para o ensaio de ângulo de descarga, o domínio é representado por uma caixa retangular rígida, conforme ilustrado na Figura 3.4. As dimensões da geometria foram definidas com base no diâmetro característico das partículas, adotando-se comprimento igual a  $90 d_p$ , largura de  $30 d_p$  e altura de  $30 d_p$ , onde  $d_p$  representa o diâmetro da partícula. Esse dimensionamento garante volume suficiente para o desenvolvimento do escoamento e reduz a influência de efeitos de confinamento lateral sobre a formação dos taludes.

Dessa forma, O volume é preenchido com um total de 45 245, como mostrado na Figura 3.5. Após o preenchimento, o sistema é submetido a uma etapa de acomodação, na qual as partículas evoluem livremente até que a energia cinética específica média atinja um valor inferior a  $1 \times 10^{-3}$  J/kg, caracterizando a condição de equilíbrio estático inicial.

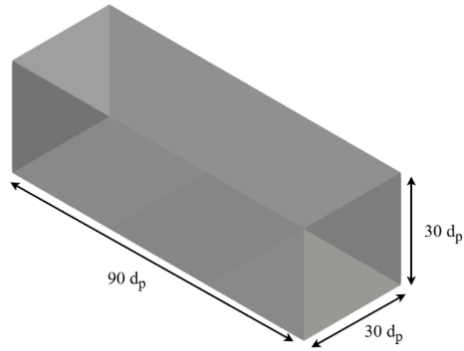


Figura 3.4: Geometria da caixa utilizada no ensaio de ângulo de descarga - vista isométrica.

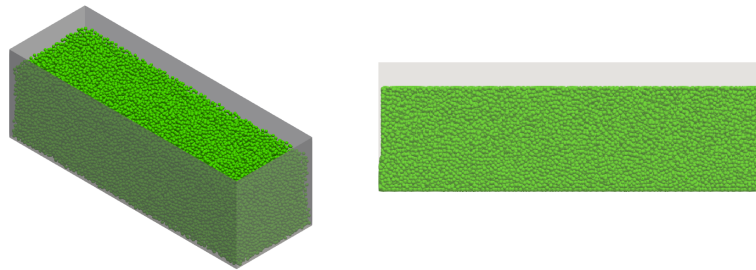


Figura 3.5: Caixa preenchida com partículas antes da remoção da parede frontal - vista isométrica a esquerda e vista frontal a direita.

Uma vez atingido o estado de acomodação, remove-se instantaneamente uma seção da parede inferior da caixa, permitindo o escoamento livre do material através do orifício. Com a remoção da parede, duas pilhas aproximadamente simétricas se formam devido à separação central do fluxo Figura 3.6. Assim que a energia cinética específica média atinge um valor inferior a  $1 \times 10^{-3}$  J/kg, as superfícies laterais dessas pilhas podem então ser processadas para a determinação do ângulo de descarga, conforme especificado na NBR 17177:2024 [3], ainda que, no presente trabalho, esse ângulo não seja utilizado diretamente na função objetivo de calibração.

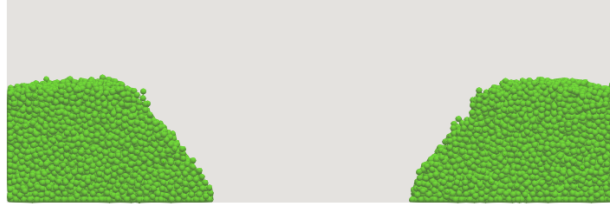


Figura 3.6: Formação dos taludes laterais após a descarga do material granular - vista frontal.

### 3.3 Processamento de imagem para extração dos ângulos

A avaliação dos ensaios simulados de ângulo de repouso e de descarga é realizada por meio de um procedimento automático de processamento de imagens. O objetivo é identificar a superfície livre do material, segmentar cada porção relevante da pilha e calcular o ângulo médio associado a cada face. Esse processo garante repetibilidade, reduz a subjetividade e permite acoplar diretamente as medidas ao algoritmo de calibração.

A metodologia consiste em quatro etapas principais:

- (i) geração das imagens a partir da simulação DEM;
- (ii) extração do contorno externo da pilha;
- (iii) segmentação da superfície livre em trechos ascendentes e descendentes;
- (iv) ajuste de retas para obtenção dos ângulos medidos.

#### 3.3.1 Extração do contorno

A partir da imagem binária da simulação, obtém-se o contorno externo da pilha por meio de operações morfológicas e algoritmos de detecção de bordas. Esse procedimento foi implementado em linguagem Python utilizando a biblioteca *OpenCV* [25]. A Figura 3.7 apresenta exemplos dos contornos identificados para os ensaios de repouso e descarga.

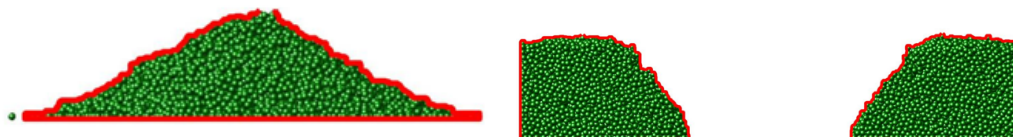


Figura 3.7: Contornos extraídos para os ensaios de ângulo de repouso e de descarga.

### 3.3.2 Segmentação da superfície livre

Com o contorno definido, o próximo passo é isolar apenas a região correspondente à superfície livre. A segmentação é realizada por critérios geométricos baseados na inclinação local da curva, descartando regiões próximas às paredes ou à base, onde a geometria é fortemente influenciada pelas condições de contorno.

A Figura 3.8 ilustra o processo de segmentação para pilhas resultantes dos ensaios de repouso e descarga.

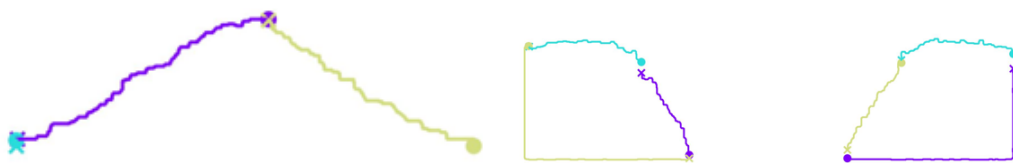


Figura 3.8: Segmentação da superfície livre para cálculo dos ângulos.

### 3.3.3 Ajuste linear e cálculo dos ângulos

Após isoladas as regiões relevantes, cada segmento é ajustado por uma regressão linear. O coeficiente angular resultante define o ângulo da face da pilha em relação à horizontal:

$$\theta = \arctan(m), \quad (3.6)$$

Onde  $m$  é o coeficiente angular da reta ajustada. A Figura 3.9 mostra o ajuste e os ângulos obtidos para exemplos de ensaios simulados.



Figura 3.9: Ajuste linear sobre os segmentos identificados da superfície livre e ângulos obtidos em graus ( $^{\circ}$ ).

### 3.3.4 Pseudocódigo do processamento

O fluxo completo do processamento de imagem é apresentado no Algoritmo 1.

---

**Algorithm 1** Processamento de imagem para cálculo dos ângulos

---

- 1: **Input:** Imagem simulada  $I$
  - 2: Converter  $I$  em binário e aplicar suavização
  - 3: Extrair contorno externo  $C$
  - 4: Remover regiões verticais/horizontais do contorno
  - 5: Segmentar  $C$  em regiões ascendentes e descendentes
  - 6: **for** cada segmento  $S$  **do**
  - 7: Ajustar regressão linear  $\ell$  sobre  $S$
  - 8: Calcular  $\theta = \arctan(m_{\ell})$
  - 9: **end for**
  - 10: **Output:** Ângulos  $\theta_{\text{esq}}$  e  $\theta_{\text{dir}}$
- 

## 3.4 Calibração

A calibração consiste em determinar o vetor de parâmetros micromecânicos  $p$  que minimiza a diferença entre propriedades simuladas e propriedades de referência. A metodologia desenvolvida é suficientemente geral para incorporar múltiplos ensaios.

Entretanto, devido à disponibilidade limitada de dados experimentais compatíveis com a NBR 17177:2024 [3], neste trabalho a calibração numérica foi conduzida com base apenas no ângulo de repouso. A função objetivo adotada é, portanto:

$$J(\mathbf{p}) = [AoR_{\text{sim}}(\mathbf{p}) - AoR_{\text{ref}}]^2. \quad (3.7)$$

A inclusão de outros termos, como o ângulo de descarga ou o ângulo dinâmico, na função objetivo é direta do ponto de vista numérico, bastando acrescentar novos termos quadráticos ponderados. Contudo, essa extensão é deixada como proposta para trabalhos futuros.

### **3.4.1 Pseudocódigo do procedimento de calibração**

O algoritmo de calibração é baseado no *Differential Evolution* [24] e segue o fluxo descrito no Algoritmo 2.

---

**Algorithm 2** Calibração DEM via Differential Evolution

---

```
1: Definir limites inferiores e superiores dos parâmetros ( $p_{\min}, p_{\max}$ )
2: Inicializar população  $P$  com  $NP$  vetores uniformemente distribuídos em
    $[p_{\min}, p_{\max}]$ 
3: for geração  $g = 1$  até  $G_{\max}$  do
4:   for cada indivíduo  $i$  na população do
5:     Selecionar índices distintos  $r1, r2, r3$ 
6:     Mutação:  $\mathbf{v}_i = \mathbf{p}_{r1} + F(\mathbf{p}_{r2} - \mathbf{p}_{r3})$ 
7:     Recombinação:
8:     for cada componente  $j$  do
9:       if  $rand_j < CR$  then
10:         $u_{i,j} = v_{i,j}$ 
11:       else
12:         $u_{i,j} = p_{i,j}$ 
13:       end if
14:     end for
15:     Executar simulação DEM com parâmetros  $\mathbf{u}_i$ 
16:     Processar imagem e calcular  $AoR_{\text{sim}}(\mathbf{u}_i)$ 
17:     Calcular  $J(\mathbf{u}_i)$ 
18:     if  $J(\mathbf{u}_i) < J(\mathbf{p}_i)$  then
19:        $\mathbf{p}_i \leftarrow \mathbf{u}_i$  ▷ Seleção
20:     end if
21:   end for
22: end for
23: return melhor vetor  $\mathbf{p}^*$ 
```

---

### 3.4.2 Critérios de parada

O algoritmo é finalizado quando:

- atinge-se o número máximo de gerações  $G_{\max}$ , ou
- a variação média do valor da função objetivo ao longo de um conjunto de gerações consecutivas torna-se inferior a um limiar pré-estabelecido.

### 3.5 Visão geral do fluxo metodológico

A Figura 3.10 apresenta uma visão integrada do processo completo de calibração, abrangendo desde a definição dos parâmetros e execução das simulações até o processamento das imagens e atualização dos parâmetros pelo otimizador.

O diagrama evidencia o caráter iterativo do procedimento, no qual cada novo conjunto de parâmetros gera novas simulações, cujos resultados alimentam a função objetivo responsável por guiar a busca no espaço de parâmetros.

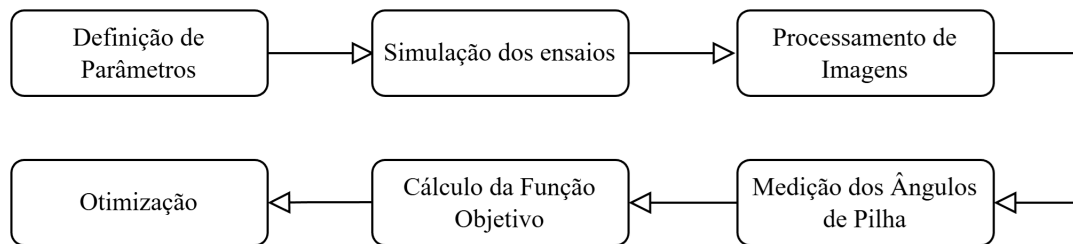


Figura 3.10: Fluxo metodológico da calibração automática DEM.

# Capítulo 4

## Resultados e Discussão

Este capítulo apresenta os resultados obtidos a partir do procedimento de calibração descrito no Capítulo 3. São avaliados:

- (i) o comportamento de convergência do algoritmo *Differential Evolution* [24];
- (ii) a comparação entre os ângulos simulados e os valores experimentais de referência;
- (iii) a análise crítica dos parâmetros calibrados, incluindo limitações e considerações sobre sua interpretação física;
- (iv) o custo computacional.

### 4.1 Convergência do algoritmo

A Figura 4.1 apresenta a evolução do valor mínimo da função objetivo ao longo das avaliações realizadas pelo algoritmo *Differential Evolution* [24].

Observa-se uma tendência claramente decrescente, indicando que o método reduziu progressivamente o erro global até atingir um regime de estabilização compatível com o critério de parada estabelecido.

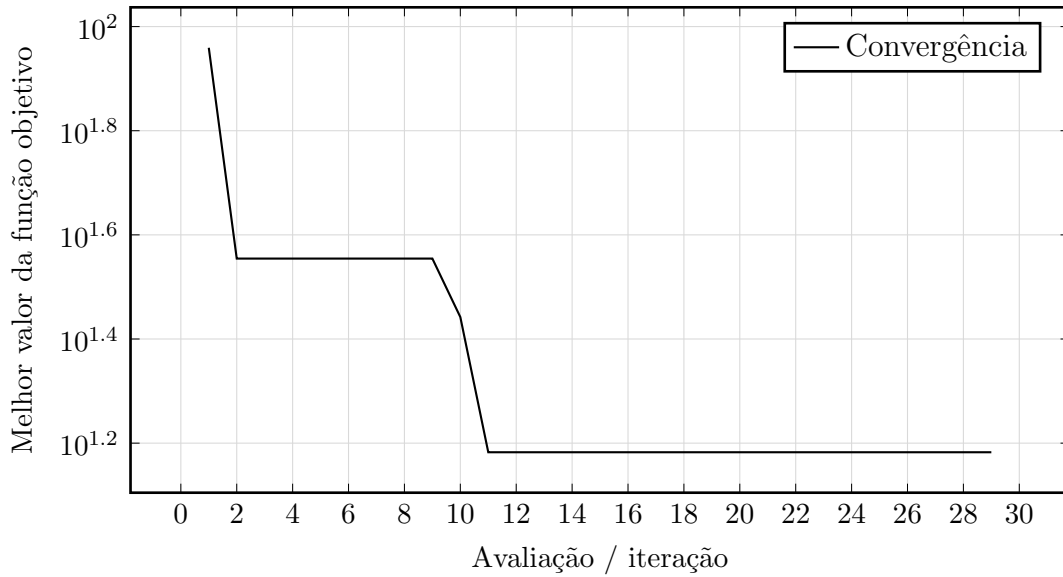


Figura 4.1: Convergência da função objetivo ao longo das iterações.

O comportamento observado é típico de algoritmos evolutivos: rápida redução inicial da função objetivo, seguida por um regime de refino lento próximo ao ótimo. A estabilização final confirma que o critério de parada baseado na variação média entre gerações foi adequadamente atendido.

## 4.2 Comparação com resultados experimentais da literatura

A fim de avaliar a aderência do modelo calibrado a dados independentes, realizou-se a comparação entre as pilhas simuladas e imagens experimentais publicadas por Silva et al. (2025) [1]. A Tabela 4.1 apresenta os materiais utilizados na comparação, juntamente com suas densidades aparentes.

Os códigos dos materiais seguem a nomenclatura adotada por Silva et al. (2025) [1] e referem-se a diferentes estágios do processamento do minério de ferro. O material identificado como *Ultrafines* (S.6) corresponde à fração ultrafina do minério, caracterizada por partículas de pequeno diâmetro e elevada área superficial. O *Pellet feed concentrate* (S.7) consiste em um concentrado fino destinado à produção de pelotas. Os *Pellet tailings* (S.8) são os rejeitos gerados durante o processo de concentração do pellet feed. O *Coarse concentrate* (S.9) refere-se a um concentrado

de granulometria mais grossa, enquanto os *Coarse tailings* (S.10) correspondem aos rejeitos associados às frações mais grosseiras do processo de beneficiamento.

Tabela 4.1: Materiais utilizados na comparação (adaptado de Silva et al. 2025) [1].

ID	Material	Densidade Aparente (kg/m <sup>3</sup> )
S.6	Ultrafines	920
S.7	Pellet feed concentrate	2514
S.8	Pellet tailings	1521
S.9	Coarse concentrate	2408
S.10	Coarse tailings	2254

Desse modo, todos os materiais correspondem a minérios de ferro em diferentes estágios de beneficiamento, variando desde ultrafinos até concentrados grossos. A inclusão da densidade aparente permite correlacionar as diferenças geométricas entre pilhas experimentais e simuladas.

A Figura 4.2 apresenta a comparação direta entre as pilhas simuladas após calibração e as imagens experimentais reportadas.

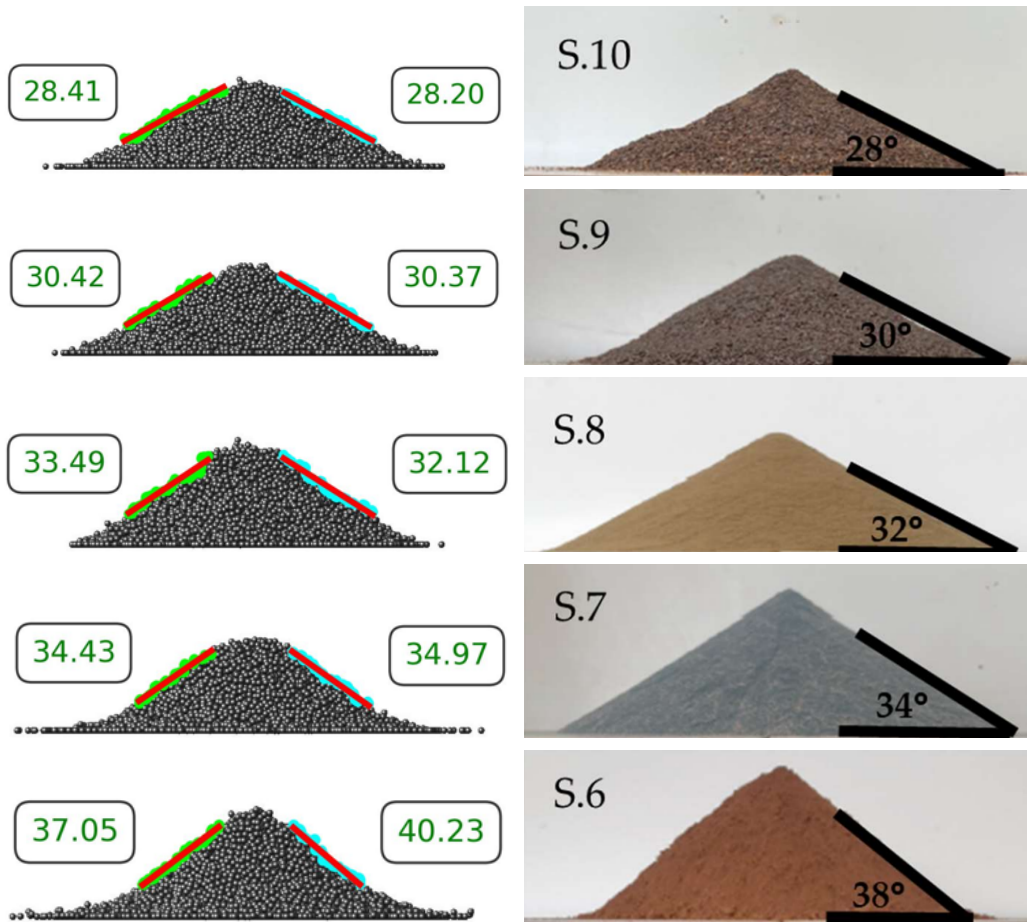


Figura 4.2: Comparação entre o ângulo em graus ( $^{\circ}$ ) das pilhas simuladas com as experimentais de Silva et al. (2025).

A Tabela 4.2 apresenta os parâmetros calibrados para cada material.

Tabela 4.2: Parâmetros DEM calibrados para cada material analisado.

ID	Material	$\epsilon_{pp}$	$\mu_{pp}$	$\mu_{r,pp}$	$c_{pp}$ (N)
S.6	Ultrafines	0,1993	0,7943	0,4293	6,09e+4
S.7	Pellet feed concentrate	0,0926	1,1283	0,7499	2,33e+4
S.8	Pellet tailings	0,4625	0,9581	1,3654	4,05e+4
S.9	Coarse concentrate	0,8595	0,2098	0,6145	9,68e+4
S.10	Coarse tailings	0,9833	0,8279	1,8365	5,36e+4

A comparação quantitativa entre ângulos simulados e experimentais é apresentada na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Comparação entre ângulos de repouso simulados e experimentais.

Caso	Simulado (°)	Experimental (°)	Diferença Relativa
1	28,30	28	1,07%
2	30,39	30	1,30%
3	32,80	32	2,50%
4	34,70	34	2,06%
5	38,64	38	2,13%

Os resultados demonstram excelente concordância entre simulação e experimento, com desvios inferiores a 3% em todos os casos. A tendência crescente do ângulo de repouso entre materiais mais coesivos ou de maior atrito também é corretamente reproduzida pelo modelo calibrado.

#### 4.2.1 Limitação decorrente do uso exclusivo do ângulo de repouso

Devido à recente adoção da NBR 17177:2024 [3], ainda há escassez de resultados experimentais publicados que sigam rigorosamente a mesma metodologia. Assim, a validação externa do modelo foi realizada exclusivamente com base no ângulo de repouso, por ser o indicador mais amplamente documentado.

O uso de um único ensaio global introduz uma limitação fundamental: diversos conjuntos de parâmetros podem reproduzir o mesmo ângulo de repouso. Essa não-unicidade é típica em problemas inversos envolvendo materiais granulares, pois o ângulo depende simultaneamente de atrito, coesão, resistência ao rolamento e rigidez. Diferentes combinações desses parâmetros podem gerar superfícies livres praticamente idênticas.

Em termos práticos, isso significa que os valores obtidos não devem ser interpretados como propriedades micromecânicas intrínsecas do material, mas sim como um conjunto equivalente capaz de reproduzir sua resposta macroscópica sob condições específicas. Em aplicações industriais, esse enfoque é adequado, pois o objetivo central é prever o comportamento global do fluxo granular; no entanto, do ponto de vista da identificação física, trata-se de uma limitação importante.

Além da não-unicidade mencionada, outras limitações do método devem ser consideradas:

- **Dependência do modelo de contato:** O modelo Hertz–Mindlin [6, 7], complementado por SJKR e EPSD2 [8], pode não capturar fenômenos associados à plasticidade, rugosidade elevada ou agregação superficial.
- **Simplificações geométricas e granulométricas:** A utilização de partículas esféricas e distribuição monodispersa não representa a angularidade e a granulometria real dos minérios.
- **Sensibilidade ao processamento de imagem:** Embora robusto, o método pode apresentar discrepâncias em pilhas irregulares ou imagens com ruído.
- **Natureza estocástica do otimizador:** O *Differential Evolution* [24] tende a evitar mínimos locais, mas não há garantia de obtenção do ótimo global.
- **Uso de poucos indicadores globais:** Ensaaios adicionais, como o de descarga ou tambor rotativo, poderiam restringir o espaço de soluções e tornar os parâmetros mais identificáveis.

Em conjunto, essas limitações reforçam que os parâmetros calibrados devem ser interpretados como representações efetivas do comportamento granular, e não como propriedades físicas fundamentais.

### 4.3 Custo computacional das simulações

Como o processo de calibração automática envolve a execução repetida de simulações DEM completas para cada avaliação da função objetivo, o custo computacional associado a cada caso torna-se um aspecto relevante para a análise da viabilidade prática da metodologia proposta.

Todas as simulações foram executadas em um computador equipado com processador AMD Ryzen 9 7900X (12 núcleos, frequência base de 4,70 GHz) e 48 GB de memória RAM. O critério de término das simulações foi baseado na energia cinética específica média das partículas, adotando-se o valor de  $10^{-3}$  J/kg tanto para a etapa de acomodação quanto para a determinação do estado final da pilha.

A Tabela 4.4 apresenta o tempo total de calibração requerido para cada caso analisado, considerando todo o processo de otimização via *Differential Evolution*.

Tabela 4.4: Tempo total de simulação para cada caso de calibração.

<b>Caso</b>	<b>Material</b>	<b>Tempo total de simulação</b>
1	Ultrafines	6 h 31 min
2	Pellet feed concentrate	6 h 44 min
3	Pellet tailings	14 h 01 min
4	Coarse concentrate	9 h 21 min
5	Coarse tailings	13 h 28 min

Observa-se que o tempo total de simulação varia significativamente entre os casos, com um valor médio de 10 h 01 min com desvio padrão de 36%. Sendo os principais fatores relacionados à essa variabilidade a coesão e a resistência ao rolamento, já que quanto maiores maior o tempo de acomodação demandado, o que se traduz em maior duração da simulação.

Apesar disso, os tempos observados permanecem compatíveis com aplicações de engenharia, especialmente considerando que o processo de calibração é realizado uma única vez para cada material e que os parâmetros calibrados podem ser posteriormente reutilizados em simulações de maior escala ou em estudos paramétricos.

# Capítulo 5

## Conclusões e Trabalhos Futuros

Este capítulo apresenta as principais conclusões obtidas a partir do desenvolvimento e aplicação da metodologia de calibração automática para modelos DEM, bem como direções de pesquisa que podem aprofundar e ampliar os resultados alcançados.

### 5.1 Conclusões

O objetivo central deste trabalho foi desenvolver um procedimento sistemático, automatizado e reprodutível para calibração de propriedades de interação utilizadas em simulações pelo *Discrete Element Method* (DEM). A abordagem integrada, composta pela modelagem computacional dos ensaios normativos, extração automática de ângulos por processamento de imagem e otimização global via *Differential Evolution* [24], demonstrou ser eficaz na identificação de parâmetros que reproduzem com boa precisão o comportamento macroscópico observado experimentalmente.

Os principais resultados obtidos podem ser sintetizados da seguinte forma:

- A metodologia foi capaz de reproduzir ângulos de repouso com erros inferiores a 3% quando comparados a dados independentes da literatura, demonstrando a consistência física e computacional do modelo calibrado.
- O *pipeline* desenvolvido, desde a execução das simulações até a análise geométrica automatizada, mostrou-se robusto e adequado para integração com algoritmos de calibração baseados em populações.

- A combinação dos modelos de contato Hertz–Mindlin [6, 7], SJKR e EPSD2 [8], juntamente com a representação geométrica consistente dos ensaios definidos na NBR 17177:2024 [3], produziu resultados coerentes com o comportamento granular observado para diferentes materiais de minério de ferro.
- A comparação visual entre pilhas simuladas e imagens experimentais reforça a adequação do conjunto de parâmetros efetivos identificados, confirmando que a metodologia é capaz de capturar tendências geométricas mesmo em materiais com características distintas.

Apesar desses avanços, deve-se reconhecer limitações intrínsecas ao processo de calibração:

- A identificação baseou-se majoritariamente no ângulo de repouso, devido à limitada disponibilidade de resultados experimentais compatíveis com a norma utilizada. Como o ângulo é uma medida global, múltiplos conjuntos de parâmetros podem reproduzi-lo, caracterizando um problema inverso não-identificável de forma única.
- As simplificações geométricas e a utilização de partículas esféricas, ainda que adequadas para estudos paramétricos, não capturam aspectos relevantes da forma real de partículas de minério de ferro, como angularidade, rugosidade superficial e distribuição granulométrica.

No conjunto, os resultados demonstram que a metodologia proposta fornece um caminho estruturado para calibração DEM, produzindo parâmetros efetivos adequados para análises de engenharia e modelagem preditiva de materiais granulares.

## 5.2 Trabalhos Futuros

Diversos desdobramentos podem ampliar o escopo e a precisão do procedimento desenvolvido. Destacam-se:

- **Substituição das partículas esféricas por geometrias não esféricas ou poliédricas**, o que tende a melhorar significativamente a representação física

do comportamento de minérios de ferro e reduzir a necessidade de parâmetros artificiais, como coeficientes elevados de resistência ao rolamento.

- **Aplicação de técnicas de *machine learning*** para predição de parâmetros ótimos a partir de bases de dados construídas por barridos sistemáticos ou processos de calibração múltiplos. Modelos regressivos ou redes neurais podem acelerar a etapa de otimização, reduzindo drasticamente o custo computacional.
- **Análise de sensibilidade global** para quantificar a influência de cada parâmetro no comportamento simulado, identificando quais grandezas são mais críticas para os ensaios considerados e orientando o uso de pesos diferenciados na função objetivo.
- **Extensão do estudo para equipamentos industriais reais**, tais como chutes, silos e transportadores, utilizando os parâmetros calibrados como ponto de partida para simulações mais complexas que envolvem regimes transientes ou fluxos confinados.

Em síntese, o trabalho estabelece uma base sólida para calibração automatizada de simulações DEM, abrindo caminho para metodologias cada vez mais precisas, reproduzíveis e integradas à rotina de engenharia em aplicações envolvendo materiais granulares.

# Referências Bibliográficas

- [1] SILVA, B. B., SOARES, A. D. A., VIEIRA, M. G., et al., “Dry Iron Ore Fluidization, Flowability, and Handling: Supporting Dry Processing of Iron Ores and Guiding Industrial Designing”, *Minerals*, v. 15, n. 9, pp. 998, 2025.
- [2] ZHANG, S., TEKESTE, M. Z., LI, Y., et al., “Scaled-up rice grain modelling for DEM calibration and the validation of hopper flow”, *Biosystems Engineering*, v. 194, pp. 196–212, 2020.
- [3] *ABNT NBR 17177: Caracterização do escoamento de materiais granulares*, Tech. rep., Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT), Rio de Janeiro, 2024, Norma Brasileira.
- [4] CFDEM PROJECT, “LIGGGHTS: Open Source Discrete Element Method – Official Documentation”, <https://www.cfdem.com/liggghts-open-source-discrete-element-method>, 2023, Acessado em: 10 dez. 2025.
- [5] CUNDALL, P. A., STRACK, O. D. L., “A discrete numerical model for granular assemblies”, *Géotechnique*, v. 29, n. 1, pp. 47–65, 1979.
- [6] HERTZ, H., “Über die Berührung fester elastischer Körper”, *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, v. 92, pp. 156–171, 1882.
- [7] MINDLIN, R. D., DERESIEWICZ, H., “Elastic spheres in contact under varying oblique forces”, *Journal of Applied Mechanics*, v. 20, pp. 327–344, 1953.

- [8] CFDEM PROJECT, “Granular contact models in LIGGGHTS”, [https://www.cfdem.com/media/DEM/docu/Section\\_gran\\_models.html](https://www.cfdem.com/media/DEM/docu/Section_gran_models.html), Acesso em: 10 dez. 2025.
- [9] THORNTON, C., “Coefficient of restitution for collinear collisions of elastic-perfectly plastic spheres”, *Journal of Applied Mechanics*, v. 64, pp. 383–386, 1997.
- [10] RENZO, A. D., MAIO, F. D., “Comparison between different contact force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes”, *Chemical Engineering Science*, v. 59, pp. 525–541, 2004.
- [11] JOHNSON, K. L., KENDALL, K., ROBERTS, A. D., “Surface energy and the contact of elastic solids”, *Proceedings of the Royal Society A*, v. 324, pp. 301–313, 1971.
- [12] EL-KASSEM, B., SALLOUM, N., BRINZ, T., et al., “A multivariate regression parametric study on DEM input parameters of free-flowing and cohesive powders with experimental data-based validation”, *Computational Particle Mechanics*, v. 8, pp. 87–111, 2021.
- [13] ZHOU, Y. C., WRIGHT, B. D., YANG, R. Y., et al., “Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation”, *Physica A*, v. 269, pp. 536–553, 1999.
- [14] AI, J., CHEN, J., ROTTER, J. M., et al., “Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations”, *Powder Technology*, v. 206, pp. 269–282, 2011.
- [15] MELLMANN, J., “The Transverse Motion of Solids in Rotating Cylinders—Forms of Motion and Transition Behavior”, *Powder Technology*, v. 118, n. 3, pp. 251–270, 2001.
- [16] RAJCHENBACH, J., “Flow in Powders and Granular Materials”, *Journal de Physique*, v. 1, n. 3, pp. 649–660, 1990.
- [17] SCHULZE, D., “Powder and Bulk Solids: Behavior, Characterization, Storage and Flow”, 2008.

- [18] NEDDERMAN, R., *Statics and Kinematics of Granular Materials*. Cambridge University Press: Cambridge, 1992.
- [19] JENIKE, A. W., *Storage and Flow of Solids*, Tech. Rep. Bulletin No. 123, University of Utah Engineering Experiment Station, 1964.
- [20] CARSON, J. W., PRESCOTT, J. K., “Powder and Bulk Solids Behavior: The Influence of Particle Cohesion”, *Chemical Engineering Progress*, v. 98, n. 11, pp. 38–45, 2002.
- [21] ÖZISIK, M. N., ORLANDE, H. R. B., *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. 2nd ed. Taylor & Francis, 2021.
- [22] THAKUR, S. C., AHMADIAN, H., SUN, J., et al., “Calibration and Validation of DEM Parameters for Simulating Granular Flow”, *Powder Technology*, v. 274, pp. 420–437, 2014.
- [23] COETZEE, C., “Review: Calibration of the Discrete Element Method”, *Powder Technology*, v. 310, pp. 104–142, 2017.
- [24] STORN, R., PRICE, K., “Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces”, *Journal of Global Optimization*, v. 11, n. 4, pp. 341–359, 1997.
- [25] OPENCV TEAM, “Open Source Computer Vision Library”, <https://opencv.org>, 2023, Acessado em: 20 jan. 2026.
- [26] BECK, J. V., BLACKWELL, B., ST. CLAIR, C. R., “Inverse and Optimization Problems in Heat Transfer”, 1996.
- [27] BEN TURKIA, S., WILKE, D. N., PIZETTE, P., et al., “Benefits of virtual calibration for discrete element parameter estimation from bulk experiments”, *Granular Matter*, v. 21, n. 110, 2019.
- [28] BESCH, M., OTHERS, “Optimization of DEM parameters using multi-objective reinforcement learning”, *Powder Technology*, v. 379, pp. 602–616, 2021.

- [29] BOIKOV, A. V., SAVELEV, R. V., PAYOR, V. A., “DEM Calibration Approach: design of experiment”, *Journal of Physics: Conference Series*, v. 1015, pp. 032017, 2018.
- [30] HENEIN, H., BRIMACOMBE, J., WATKINSON, A., *Experimental and Numerical Studies of Granular Flow in Rotary Drums*. The Metallurgical Society of CIM: Montreal, 2012.
- [31] OLIVEIRA, G. P. D., *Chutes de Transferência no Manuseio de Minérios: Do Empirismo às Simulações Avançadas Aplicando o Método dos Elementos Discretos*. Editora Dialética, 2023.
- [32] ROBERTS, A., *Bulk Solids Handling: Equipment Selection and Operation*. TUNRA: Newcastle, Australia, 1999.
- [33] SALGOTRA, R., SHARMA, P., RAJU, S., et al., “A Contemporary Systematic Review on Meta-Heuristic Optimization Algorithms with Their MATLAB and Python Code Reference”, *Archives of Computational Methods in Engineering*, v. 31, pp. 1749–1822, 2024.