

**Engarrafamento e Segregação em
Empilhamentos Abertos de Grãos**

Caio Franca Merelim Magalhães

Julho de 2013

Engarrafamento e Segregação em Empilhamentos Abertos de Grãos

CAIO FRANCA MERELIM MAGALHÃES

Orientador: Prof. José Guilherme Moreira
Co-orientador: Prof. Allbens Atman Picardi Faria

Julho de 2013

Tese apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS
GERAIS como requisito parcial para obtenção do grau de
doutor em física

Agradecimentos

A Allbens e José Guilherme, pela orientação profícua e dedicada durante todo o período do curso de doutorado.

Ao CNPq e à Fapemig, pelo financiamento de minha formação e do projeto que resultou neste trabalho.

A Gael, pela idéia de estudar o atrito de rolamento em conexão com a questão de engarrafamento em meios granulares.

Aos professores e colegas do grupo de Física Estatística e do Departamento de Física que contribuíram de alguma forma para elaboração deste trabalho, em especial aos Professores Ronald e Jafferson pela formação e ao professor Gerald pela ajuda no laboratório.

Aos amigos, pelos momentos de descontração e pelo apoio nos momentos de angústia, típicos dos estudantes de pós-graduação. Em especial, a Daniel, Alexandre, Julio e Felipe.

A Telma Maria, pelo companheirismo, carinho e dedicação durante os dois últimos anos do doutorado.

Sumário

RESUMO	v
ABSTRACT	vi
INTRODUÇÃO	1
1 Simulação de materiais granulares	5
1.1 Dinâmica Molecular	5
1.2 Velocity-Verlet	7
1.3 Modelo	8
1.3.1 Força elástica	9
1.3.2 Amortecimento	11
1.3.3 Atrito coulombiano	11
1.4 Passo de tempo	13
1.5 Lista de vizinhos	15
1.6 Normalização das variáveis do sistema	17
2 Transição de engarramento	18
2.1 Trabalhos experimentais em empilhamentos fechados	20
2.1.1 Funil 2D	20

2.1.2	Silo 2D	22
2.1.3	Silo 3D	25
2.2	Simulação de empilhamentos abertos	25
2.2.1	Descrição da simulação	26
2.2.2	Resultados	28
3	Segregação na formação de arcos	37
3.1	Metodologia	39
3.2	Bidispersão no diâmetro	40
3.3	Bidispersão na densidade	45
4	Resistência ao Rolamento	49
4.1	Motivação	49
4.2	Modelo	51
4.3	Resultados	52
5	Conclusões e perspectivas	54
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	56
A	Códigos das rotinas	62
A.1	Rotina de deposição	62
A.2	Rotina de descarga	78
A.3	Rotina de identificação de arcos	87
B	Artigos publicados	93

Resumo

O estudo das descargas de empilhamentos granulares bidimensionais com fronteiras abertas revelou indícios de uma transição de engarrafamento e um efeito de segregação em misturas de grãos. O estudo foi feito por meio de simulações computacionais, utilizando-se uma técnica de dinâmica molecular, em que os empilhamentos são crescidos sobre uma base de tamanho finito e posteriormente descarregadas por um orifício aberto no centro da base. Tomando a altura final do empilhamento após a descarga como parâmetro de ordem, pode-se divisar uma transição de um regime em que o empilhamento não é perturbado pela abertura do orifício para um regime catastrófico, em que o empilhamento se divide em dois menores. Uma análise de tamanho finito mostra que largura do orifício de transição converge para um valor finito, que corresponde à largura crítica da transição de engarrafamento. Esse resultado foi obtido para um modelo de grão visco-elástico com atrito coulombiano e também para um modelo que, além dessas interações, incorpora atrito de rolamento, responsável, entre outros efeitos, pela maior estabilidade de pilhas de grãos em simulações numéricas. Além de ajudar a entender a transição de engarrafamento, a investigação de descargas de empilhamentos formados por misturas de grãos revelou um efeito de segregação no processo de formação de arcos. Observou-se o efeito tanto em misturas de grãos de tamanhos distintos quanto em misturas de grãos de diferentes densidades. No caso de bidispersão no tamanho, os arcos são predominantemente compostos pelos grãos maiores. No caso de bidispersão na densidade, existem dois regimes, dependendo da largura do orifício: para larguras pequenas, a ocorrência de grãos densos no arco é maior e, para larguras grandes, a ocorrência de grãos densos é menor.

Abstract

The study of discharges of two-dimensional granular piles with open boundaries revealed clues of a jamming transition and an effect of segregation mixtures of grains. The study was carried out by means of computer simulations, using a molecular dynamics technique, where the piles are grown on a finite size base and subsequently discharged through an orifice opened at the center of the base. Taking the final height of the pile after discharge as the order parameter, one can see a transition from a regime in which the pile is not disturbed by the orifice opening to a catastrophic regime, in which the pile is divided into two smaller ones. A finite size analysis shows that the orifice width of transition converge to a finite value, which corresponds to the critical width of the jamming transition. This result was obtained for a model of visco-elastic grain with Coulomb friction and also for a model that incorporates rolling friction besides those interactions. Rolling friction is responsible, among other things, for the stability of grain piles in numerical simulations. Besides its contribution to the understanding of jamming transition, the research of discharges of piles formed by a mixture of grains revealed an effect of segregation in the process of arch formation. The effect was observed both in mixtures of grains of different sizes as in mixtures of grains of different densities. When the grains are bidisperse in size, the arches are predominantly composed of larger grains. In the case of density bidispersion, two regimes are distinguished depending on orifice width: for small widths, the occurrence of denser grains in the arch is greater, for large widths, the occurrence of denser grains is smaller.

Introdução

A compreensão da física dos meios granulares teve um desenvolvimento vertiginoso nas últimas décadas [1, 2, 3]. Antes restrito aos círculos das engenharias, devido ao uso intenso de materiais granulares em diversos setores da indústria, o estudo desses materiais têm despertado grande interesse dos físicos, principalmente pelos desafios tecnológicos postos pela indústria [4], mas também pela ausência de um arcabouço teórico que contemple a vasta gama de fenômenos observados [5] e pelas questões fundamentais subjacentes a esses fenômenos.

Materiais granulares são essencialmente amontoados de sólidos macroscópicos [6] — o tamanho das partículas constituintes pode variar de poucos microns a muitos metros. Cimento, areia, argila, brita, cascalho e arroz são exemplos típicos de materiais granulares comumente encontrados no cotidiano. Materiais granulares são classificados como secos ou úmidos dependendo das características do meio no qual o material está imerso. Se a presença do meio não influencia significativamente o comportamento do material — caso em que as forças de contato entre os grãos são muito mais intensas do que a força de arrasto do meio —, diz-se que o material granular é seco. Caso contrário, o material granular é classificado como úmido — o meio intersticial não precisa ser exatamente água, como o significado usual do termo subentende.

A fenomenologia de materiais granulares é bastante extensa. Formação de padrões [7] e de aglomerados [8], segregação [9], avalanches [10], criticalidade auto-organizada [11, 12], dunas [13], dilatação de Reynolds [14] e bandas de cisalhamento [15] são uma pequena amostra dos fenômenos já reportados na literatura.

A inter-relação da física dos materiais granulares com outros ramos da física e com outras áreas da ciência e da engenharia também é notável. A transição de engarrafamento por exemplo guarda similaridades marcantes com a transição vítrea, exibida por algumas substâncias [16]. Essa transição não é exclusividade de materiais granulares, sendo observada também em espumas [17], emulsões [18], colóides [19], géis [20] e polímeros [21]. É possível também fazer um paralelo entre a dinâmica de escoamento de meios granulares com o tráfego de veículos em cidades [22], onde engarrafamentos de trânsito são análogos ao engarrafamento que ocorre no escoamento de grãos. A criticalidade auto-organizada, que alguns sistemas granulares parecem apresentar [12], é observada em situações que em princípio seriam completamente desconexas, como na dinâmica de placas tectônicas

[23], no mercado de capitais [24], no cérebro humano [25, 26] e no tráfego de veículos em rodovias [27]. Assim, o aprofundamento do entendimento sobre materiais granulares produz impacto significativo em várias áreas do conhecimento. Além disso, há um impacto direto em setores da indústria que fazem uso intenso desses materiais, como é o caso das indústrias de alimentos, de construção e farmacêutica.

Assim como as substâncias comuns, em que os elementos básicos constituintes são moléculas, materiais granulares apresentam diversos estados de ordenamento [28, 29]. É possível provocar uma mudança de fase tipo sólido-líquido ajustando-se certas variáveis do sistema. A transição sólido-líquido em sistemas constituídos de partículas macroscópicas é chamada de modo geral transição de engarrafamento, em alusão ao que ocorre com o tráfego de veículos — há grande similaridade entre o engarrafamento de veículos e o engarrafamento em materiais granulares [22]. Na transição de engarrafamento, as partículas do sistema têm seu movimento bruscamente interrompido pela formação de estruturas coletivas que restringem o espaço livre para os grãos. Além de materiais granulares, colóides, emulsões, espumas são outros exemplos de sistemas que apresentam uma transição de engarrafamento.

No caso de materiais granulares, o papel análogo ao da temperatura geralmente é desempenhado por um agente externo, e.g., vibração [30]. Mas, mesmo na ausência de um agente externo que forneça energia cinética aos grãos — o que corresponderia ao caso $T = 0$ —, a transição de engarrafamento ainda pode ocorrer. A razão é que nessa condição, devido ao caráter exclusivamente repulsivo da interação entre os grãos, materiais granulares ainda podem fluir. A transição é controlada então apenas pela densidade e pela tensão a que é submetido o material. Quando a tensão de cisalhamento ultrapassa um determinado valor, o material passa a escoar.

Há alguns trabalhos teóricos sobre a transição de engarrafamento em meios granulares. Uma teoria de campo médio proposta por Coniglio *et al.* [31], corroborada pela mecânica estatística aplicada a sistemas granulares desenvolvida por Edwards e Oakeshott [32], revela algumas semelhanças com a transição vítrea por que passam algumas substâncias moleculares. Uma outra abordagem sugerida por Cates *et al.* [33], baseada na teoria da elasticidade, relaciona o estado engarrafado ao conceito de fragilidade.

Mais recentemente, alguns estudos experimentais foram feitos usando materiais granulares confinados em silos [34, 35, 36, 37]. A idéia desses experimentos é medir as descargas de grãos por um orifício aberto no fundo do recipiente. O orifício dá origem a uma tensão de cisalhamento, uma vez que parte do material perde a sustentação da base e passa a exercer uma força cisalhante sobre os grãos adjacentes. A abertura do orifício permite então medir indiretamente a rigidez do material.

Um dos objetivos desta tese é dar continuidade à investigação da transição de engarrafamento em materiais granulares. Os trabalhos até então focaram no estudo de sistemas confinados. Para estender a investigação a sistemas abertos, foi proposta uma nova abor-

dagem para descrever o estado engarrafado. Os resultados, obtidos com uma técnica de simulação de dinâmica molecular, geram novos desdobramentos nesse campo de pesquisa.

Outro fenômeno que será abordado nesta tese é a segregação em misturas. Durante o estudo da transição de engarrafamento, foi observado um efeito de segregação local durante a formação dos arcos que se formam sobre o orifício interrompendo o escoamento de grãos. Esse efeito foi investigado em um estudo sistemático e os resultados são apresentados no Capítulo 5.

Segregação é a separação de partículas por similaridade que ocorre quando uma mistura passa por algum processo dinâmico. Existem muitos estudos, tanto experimentais [38, 39] quanto simulacionais [40], sobre segregação em materiais granulares sujeitos a alguma perturbação periódica. Poucos abordam no entanto o problema da segregação no escoamento de grãos. Existem alguns trabalhos [41, 42, 43] que relatam um efeito de estratificação em pilhas devido à dinâmica de avalanches superficiais. Mas, apesar do trabalho de Samadani [43], o entendimento dos mecanismos responsáveis pela segregação no escoamento de grãos ainda é rudimentar. Além disso, excluindo o trabalho de Duran *et al.* [44], não há na literatura qualquer outro estudo que relacione a existência de arcos e o processo de segregação.

O uso de simulações numéricas no estudo de materiais granulares tem se tornado cada vez mais comum por causa da evolução dos computadores. Há várias técnicas de simulação de materiais granulares: Monte Carlo [45, 40], dinâmica de contato [46], dinâmica colisional [47], dinâmica molecular [48, 47]. Esta última é a mais utilizada por se adaptar tanto a situações estáticas quanto a situações dinâmicas e por isso foi a técnica adotada nas investigações relatadas aqui.

A dinâmica molecular consiste em solucionar numericamente as equações de movimento do sistema usando um dos muitos algoritmos existentes, e.g., método de Euler, Runge-Kutta, Verlet, Velocity-Verlet. As equações de movimento, no caso de materiais granulares, são fornecidas pela segunda lei de Newton em conjunto com um modelo para a interação entre os grãos e para a interação entre os grãos e o meio.

Neste trabalho, o material granular é simulado como um conjunto de partículas circulares em duas dimensões. Realizações experimentais desse sistema são um conjunto de discos finos em uma célula de Hele-Shaw [49] ou um empilhamento de cilindros longos [50]. A interação entre as partículas leva em conta um termo de origem elástica, um termo de amortecimento e um termo de atrito estático. Posteriormente, acrescenta-se um termo de resistência ao rolamento com o objetivo de estudar o seu efeito na transição de engarrafamento. A resistência ao rolamento surge devido a diversos fatores, entre os quais o principal é a deformação dos grãos na região em contato. A inclusão desse termo se mostrou importante na reprodução de algumas propriedades de sistemas granulares, como o ângulo de repouso em empilhamentos abertos [51], a ocorrência de bandas de cisalhamento em testes de deformação [15] e os diversos tipos de falhas observadas em materiais

granulares [52].

Esta tese está estruturada da seguinte forma. No Capítulo 1, descreve-se o método usado para simular o material granular, bem como o modelo para a interação entre os grãos. O Capítulo 2 é dedicado ao problema da transição de engarrafamento em empilhamentos abertos. O fenômeno é descrito em detalhes, faz-se uma pequena revisão dos resultados experimentais em empilhamentos fechados, e os resultados das simulações de empilhamentos abertos são apresentados e discutidos. No Capítulo 3, mostram-se os resultados sobre segregação em misturas de grãos de diferentes tamanhos e em misturas de grãos de diferentes densidades. Em ambos os casos, foram observados efeitos de segregação no processo de formação de arcos, sendo variadas as origens desse efeito. No Capítulo 4, discute-se a influência do termo de resistência ao rolamento no processo de engarrafamento. Verificou-se que tanto a adoção de uma resistência realista, seguindo o modelo proposto por Jiang *et al.* [53], quanto a adoção de uma resistência fixa, de modo a simular grãos facetados, não alteraram qualitativamente a transição de engarrafamento. Finalmente, no Capítulo 5 são delineadas as conclusões e algumas questões em aberto.

Capítulo 1

Simulação de materiais granulares

O uso de simulações numéricas no estudo de materiais granulares é bastante intenso. Há várias técnicas de simulação e a escolha de qual técnica usar depende das características do fenômeno investigado.

Simulações de Monte Carlo [45, 40] e Dinâmica de Contatos [46] são mais adequadas para se estudar estados de equilíbrio de sistemas granulares. Essas técnicas não fornecem informações sobre a trajetória do sistema ao longo do tempo, sendo tão somente métodos para se obter a configuração final do sistema sob certas condições.

Dinâmica colisional [47] é muito usada no estudo de sistemas granulares altamente agitados — também chamados gases granulares. Com esse método é possível obter a trajetória de cada partícula do sistema ao longo do tempo. Porém, perde-se informação sobre as forças que atuam nas partículas durante as colisões. O método apresenta limitações ao ser aplicado em sistemas dissipativos [54], e, apesar de haver meios de suplantarem tais limitações, não é apropriado para se estudar sistemas granulares densos no regime estático ou quasi-estático.

A técnica mais utilizada para simular materiais granulares é a Dinâmica Molecular [48, 47]. Ela é adequada a situações tanto estáticas quanto dinâmicas, e por isso será utilizada neste trabalho.

1.1 Dinâmica Molecular

O método consiste em solucionar numericamente as equações de movimento do sistema. Para sistemas clássicos, em que se enquadra o objeto de estudo desta tese, as equações de movimento são obtidas aplicando-se a segunda lei de Newton em conjunto com um modelo para as interações a cada elemento do sistema.

Os sistemas investigados são constituídos basicamente de grãos bidimensionais, isto é, grãos que possuem uma dimensão desprezível em relação às demais, e.g. discos finos em uma célula de Hele-Shaw [50], ou que possuem simetria cilíndrica, e.g. bastões compridos dispostos de tal modo que as rotações do eixo de simetria sejam prevenidas [49]. A simulação desses sistemas é feita assumindo por simplicidade que os grãos têm formato circular e densidade uniforme. Assim, a configuração do sistema fica completamente determinada pela posição e velocidade do centro de massa e pela velocidade angular em torno do centro de massa de cada grão. Um sistema de N grãos satisfaz as seguintes equações diferenciais,

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^N F_{ij,x} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad , \quad (1.1)$$

$$m_i \frac{d^2 y_i}{dt^2} = m_i g + \sum_{j=1, j \neq i}^N F_{ij,y} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad , \quad (1.2)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \tau_{ij} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad . \quad (1.3)$$

As variáveis x_i , y_i e ω_i são respectivamente as coordenadas do centro de massa — que coincide com o centro geométrico — do grão i e a velocidade angular do grão em relação ao centro de massa. A posição angular é omitida porque não influencia a dinâmica do sistema. As quantidades m_i e I_i são respectivamente a massa e o momento de inércia em relação ao centro de massa da partícula, onde d_i é o diâmetro do grão; g é a aceleração da gravidade, considerada constante; $F_{ij,x}$, $F_{ij,y}$ e τ_{ij} são respectivamente as componentes da força e o torque que resultam da interação entre os grãos i e j .

As equações acima são então discretizadas e a evolução temporal das variáveis é obtida de forma iterativa. Os valores de x_i , y_i e ω_i no tempo t são calculados a partir dos valores dessas variáveis no tempo $t = t - \Delta t$, onde Δt é o intervalo de tempo de discretização. Dada então a configuração inicial do sistema, obtém-se a configuração do sistema nos instantes de tempo posteriores.

Existe uma grande variedade de algoritmos desenvolvidos com a finalidade de se obter a trajetória do sistema dessa maneira. Geralmente, esses algoritmos são deduzidos por meio de expansões em série de Taylor das variáveis envolvidas até a ordem desejada ou por meio de aproximações das equações de Hamilton associadas ao sistema (métodos simpléticos). Dessa forma, obtém-se os métodos de Euler, Runge-Kutta, Verlet, Velocity-Verlet *etc.* Será utilizado aqui o método Velocity-Verlet, a ser detalhado na próxima seção.

Toda solução numérica de equações que envolvem variáveis contínuas é aproximada. A cada passo de tempo se comete um erro na avaliação das variáveis, que é proporcional ao

tamanho do passo de tempo Δt . Esses erros vão se acumulando ao longo do tempo, de modo que após alguns passos, a configuração prevista pode ser diferente da configuração real. Como o interesse neste trabalho é o estudo de características médias e o sistema é dissipativo, esses desvios na trajetória do sistema devido a erros de truncamento e arredondamento não são importantes porque produziriam o mesmo efeito das diferenças nas condições iniciais das amostras. É necessário porém um certo cuidado na escolha de Δt e das condições iniciais para evitar a ocorrência de erros grosseiros, que poderiam descaracterizar o estado final da amostra. Esse ponto será melhor discutido na seção 1.4.

1.2 Velocity-Verlet

O algoritmo Velocity-Verlet [55], aplicado às equações de movimento 1.1, 1.2 e 1.3, é definido pelas seguintes relações de recorrência,

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{\vec{F}_i(t)}{2m_i}(\Delta t)^2, \quad (1.4)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \left[\frac{\vec{F}_i(t) + \vec{F}_i(t + \Delta t)}{2m_i} \right] \Delta t, \quad (1.5)$$

$$\omega_i(t + \Delta t) = \omega_i(t) + \left[\frac{\tau_i(t) + \tau_i(t + \Delta t)}{2I_i} \right] \Delta t, \quad (1.6)$$

onde $\vec{F}_i(t)$ e $\tau_i(t)$ são a força e o torque que atuam no grão i no instante de tempo t .

A equação 1.4 é simplesmente a expansão em série de Taylor de \vec{r}_i em torno de t até segunda ordem. Para se obter as equações 1.5 e 1.6, primeiro calcula-se as velocidades em $t + \Delta t/2$ usando a aproximação linear em torno de t , com a força e o torque obtidos da configuração no instante t ,

$$\vec{v}_i(t + \Delta t/2) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} \frac{\Delta t}{2},$$

$$\omega_i(t + \Delta t/2) = \omega_i(t) + \frac{\tau_i(t)}{I_i} \frac{\Delta t}{2}.$$

Obtém-se então as forças e os torques na nova configuração, que serão usados no cálculo das velocidades no instante $t + \Delta t$, a partir das velocidades em $t + \Delta t/2$,

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t + \Delta t/2) + \frac{\vec{F}_i(t + \Delta t)}{m_i} \frac{\Delta t}{2},$$

$$\omega_i(t + \Delta t) = \omega_i(t + \Delta t/2) + \frac{\tau_i(t + \Delta t)}{I_i} \frac{\Delta t}{2} .$$

Eliminando-se os termos no instante intermediário $t + \Delta t/2$, recupera-se as equações 1.5 e 1.6.

Em síntese, o algoritmo funciona da seguinte forma: primeiro, calcula-se as posições e velocidades no tempo $t + \Delta t$ usando as expansões de Taylor em torno de t até segunda ordem; em seguida, obtém-se as forças e torques na nova configuração; finalmente, corrige-se as velocidades usando os novos valores das forças e dos torques.

O diagrama da Figura 1.1 representa esquematicamente as etapas envolvidas no algoritmo Velocity-Verlet.

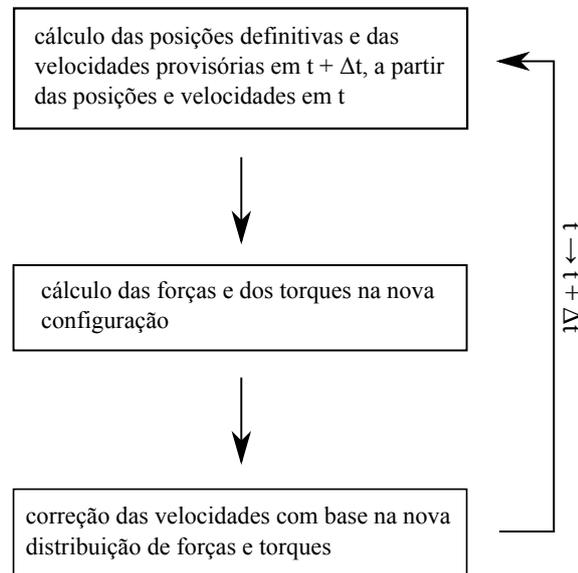


Figura 1.1: Representação esquemática do algoritmo Velocity-Verlet.

O algoritmo Velocity-Verlet, além de incorporar a conservação dos momentos linear e angular, possui a propriedade de gerar soluções invariantes por inversão temporal [56], que são características das soluções das equações de movimento.

1.3 Modelo

O material granular simulado consiste de grãos de formato circular e densidade uniforme tais que sua espessura é desprezível comparada às outras dimensões. São desconsideradas interações de longo alcance — na prática, podem surgir acúmulos de cargas nas superfícies dos grãos devido ao atrito entre eles —, e a influência do meio intersticial, estando os grãos

sujeitos apenas à gravidade e a forças de contato. Os grãos são depositados sobre uma base de tamanho finito e posteriormente descarregados por um orifício aberto no centro da base.

Forças de contato entre sólidos são bastante complexas. Um tratamento completo dessas interações, além de dispendioso do ponto de vista computacional, não necessariamente seria útil neste estudo. Ademais, não se conhecem todos os detalhes da interação entre sólidos macroscópicos.

Será considerado aqui que os grãos se deformam sempre elasticamente. Além da força de natureza elástica \vec{f}_{el} , o modelo usado para descrever a interação entre os grãos leva em consideração uma força de amortecimento \vec{f}_{am} e uma força de atrito estático \vec{f}_{ac} . A força \vec{F}_{ij} e o torque $\vec{\tau}_{ij}$ que atuam no grão i devido à interação com o grão j se expressam então como

$$\vec{F}_{ij} = \vec{f}_{el} + \vec{f}_{am} + \vec{f}_{ac} , \quad (1.7)$$

$$\vec{\tau}_{ij} = \vec{r} \times \vec{F}_{ij} . \quad (1.8)$$

Na equação 1.8, o vetor \vec{r} é a posição do ponto de aplicação de \vec{F}_{ij} na superfície do grão i em relação ao seu centro. Cada uma dessas contribuições à força de contato será detalhada a seguir.

1.3.1 Força elástica

O termo de natureza elástica na interação entre dois corpos esféricos é obtido de uma análise baseada na teoria da elasticidade. Hertz [57] demonstrou que a força que surge da deformação de duas esferas elásticas e homogêneas em contato varia com a deformação da seguinte forma,

$$F \propto \delta_{\perp}^{3/2} ,$$

em que F é a força provocada pela deformação e δ_{\perp} é a deformação — o símbolo \perp se refere à direção da deformação, que é normal à superfície de contato. Esse resultado é reproduzido de forma mais didática por Landau e Lifshitz [58].

Hertz obteve o expoente $3/2$ para esferas em três dimensões. Em duas dimensões, é possível mostrar, usando argumentos análogos àqueles apresentados por Duran [6], que a expressão da força elástica possui uma dependência linear em δ_{\perp} .

Seja l_c o comprimento de contato (Figura 1.2), isto é, a medida da extensão da circunferência dos discos em contato. Supondo que a deformação esteja circunscrita a um círculo de raio igual a l_c , uma relação linear entre F e δ_\perp emerge da relação tensão-deformação $p = E\delta_\perp/l_c$, onde p é a pressão e E é o módulo de Young,

$$F \sim pl_c = \frac{E\delta_\perp}{l_c}l_c = E\delta_\perp .$$

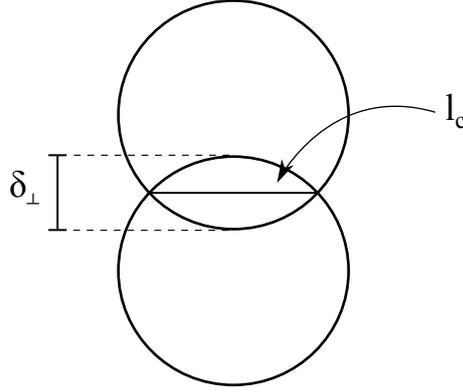


Figura 1.2: Ilustração que mostra a região deformada, caracterizada por δ_\perp , e o comprimento de contato l_c entre dois corpos esféricos em 2D.

Então, a força elástica que atua no grão i devido ao contato com o grão j pode ser escrita como

$$\vec{f}_{el} = -k_n\delta_\perp\vec{n}_{ij} . \quad (1.9)$$

O parâmetro k_n é uma constante que caracteriza a resistência do material e \vec{n}_{ij} é o vetor unitário na direção que liga os centros dos grãos e que aponta do grão j para o grão i (Figura 1.3).

A deformação normal δ_\perp devido ao contato dos grãos i e j é dada por

$$\delta_\perp = \begin{cases} r_{ij} - \frac{d_i+d_j}{2}, & 2r_{ij} \leq d_i + d_j \\ 0, & 2r_{ij} > d_i + d_j \end{cases} . \quad (1.10)$$

A variável $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ é a distância entre os centros dos grãos, e d_i e d_j são os respectivos diâmetros. A força elástica assim definida é exclusivamente repulsiva.

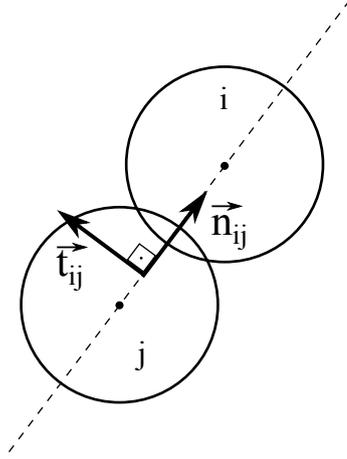


Figura 1.3: Ilustração dos vetores \vec{n}_{ij} e \vec{t}_{ij} . O vetor \vec{n}_{ij} é o unitário na direção que liga os centros dos grãos e que aponta do grão j para o grão i . O vetor \vec{t}_{ij} é o unitário tangente à superfície de contato entre os grãos i e j , e é obtido de \vec{n}_{ij} por meio de uma rotação de 90° no sentido anti-horário.

1.3.2 Amortecimento

Uma característica essencial de sistemas granulares é a natureza dissipativa das interações entre os grãos. A energia mecânica é dissipada por meio de vários mecanismos. Parte da energia se perde nos impactos como deformações permanentes dos grãos e parte é transferida para graus de liberdade internos dos grãos, aumentando sua temperatura. No modelo que está sendo apresentado, a dissipação é inserida pelos termos de amortecimento e atrito estático.

Para dois grãos i e j em contato, será assumido que a força de amortecimento que atua no grão i devido ao grão j é dada por

$$\vec{f}_{am} = -\gamma (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}) \vec{n}_{ij} . \quad (1.11)$$

Na equação acima, $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$ é a velocidade relativa entre os grãos e γ é a constante de amortecimento. A força de amortecimento é, portanto, normal ao segmento de contato e proporcional à velocidade relativa. Nas simulações, é usado um valor de γ correspondente a um amortecimento crítico durante as colisões.

1.3.3 Atrito coulombiano

Atrito é a resistência ao movimento de deslizamento entre duas superfícies em contato. A força de atrito é descrita empiricamente pelo gráfico de Coulomb (Figura 1.4).

Como se nota, a força de atrito é indeterminada quando não há movimento, e assume um

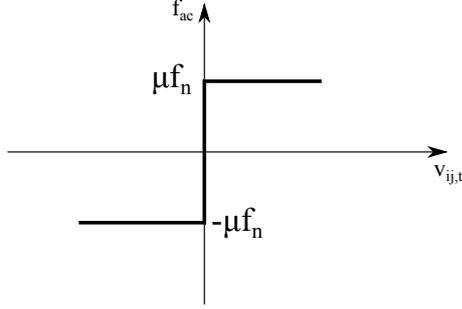


Figura 1.4: Gráfico da força de atrito estático f_{ac} em função da velocidade relativa $v_{ij,t}$ entre as superfícies em contato - gráfico de Coulomb.

valor constante caso contrário. Esse valor depende apenas da força de compressão normal entre as duas superfícies.

Para se eliminar essa indeterminação e tornar possível um tratamento do atrito no contexto da dinâmica molecular, elimina-se a descontinuidade em $v = 0$ no gráfico de Coulomb (Figura 1.5).

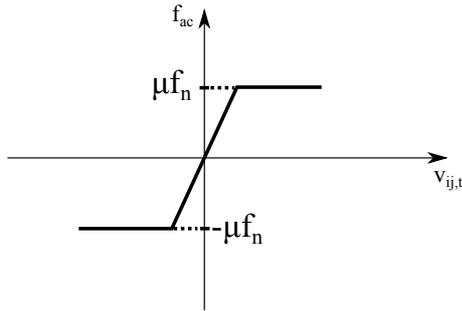


Figura 1.5: Gráfico de Coulomb regularizado.

Cundall e Strack [59] usaram essa abordagem, mas calcularam o atrito em função do deslocamento em relação ao ponto de contato e não à velocidade relativa. Dessa forma, a interação, no regime estático, pode ser representada por uma mola orientada na direção da superfície de contato (Figura 1.6). Com essa implementação, eles reproduziram algumas propriedades mecânicas de materiais granulares. Neste trabalho, será adotada essa estratégia para modelar o atrito.

A força de atrito no grão i devido à interação com o grão j é escrita então como

$$\vec{f}_{ac} = \begin{cases} -k_t \delta_{\parallel} \vec{t}_{ij}, & k_t |\delta_{\parallel}| \leq \mu f_{el} \\ \frac{\delta_{\parallel}}{|\delta_{\parallel}|} \mu f_n \vec{t}_{ij}, & k_t |\delta_{\parallel}| > \mu f_{el} \end{cases} . \quad (1.12)$$

O vetor \vec{t}_{ij} é o unitário na direção tangente ao ponto de contato, e é obtido fazendo-se

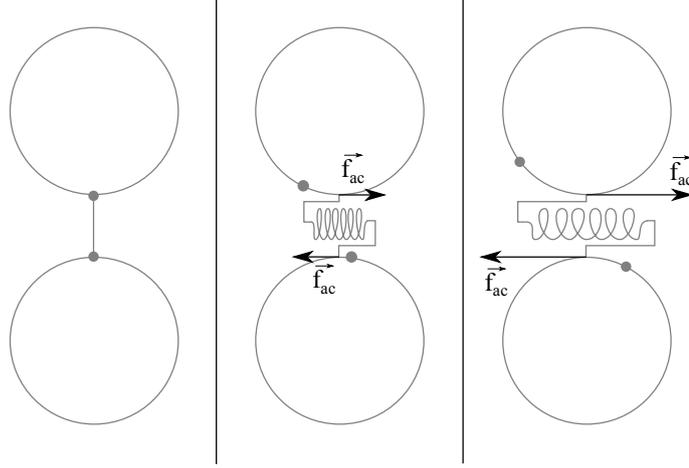


Figura 1.6: Representação esquemática do atrito como modelado por Cundall e Strack [59]. Quando ocorre o contato entre dois grãos, uma mola orientada na direção tangencial passa a atuar sobre elas. Durante a existência do contato, a deformação da mola é determinada pelo deslocamento relativo dos pontos que geraram o contato. Quando a deformação da mola atinge um determinado valor, correspondente ao atrito estático máximo, a força exercida pela mola satura, dando início ao regime cinético do atrito.

uma rotação de 90° em sentido anti-horário do vetor \vec{n}_{ij} (Figura 1.3). A quantidade δ_{\parallel} é deformação tangencial, dada pelo deslocamento relativo dos pontos que se tocaram quando o contato se formou. Esse deslocamento é devido ao movimento de rotação dos grãos, como mostrado na Figura 1.6, e ao movimento de translação dos grãos (Figura 1.7). O parâmetro k_t é uma constante relacionada à rigidez do contato na direção de \vec{t}_{ij} , e μ é o coeficiente de atrito.

A deformação tangencial δ_{\parallel} depende da posição em que o contato se estabeleceu. Dessa forma, é necessário guardar essa informação durante o tempo em que os grãos estão em contato. O que se faz é acumular as contribuições a \vec{f}_{ac} em cada passo de tempo desde a formação do contato até sua extinção, lembrando que a força de atrito está restrita ao intervalo $[-\mu f_{el}, \mu f_{el}]$:

$$\vec{f}_{ac}(t + \Delta t) = \vec{f}_{ac}(t) - k_t \left(\vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}_{ij} - \frac{d_i \omega_i + d_j \omega_j}{2} \right) \Delta t \vec{t}_{ij}, \quad f_{ac} \leq \mu f_{el}. \quad (1.13)$$

Nessa equação, $[\vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}_{ij} - (d_i \omega_i + d_j \omega_j)/2] \Delta t$ é a expressão que fornece a deformação tangencial ocasionada entre o instante t e o instante $t + \Delta t$.

1.4 Passo de tempo

O critério usado na escolha do intervalo de tempo de discretização Δt é que este seja muito menor que a duração do contato mais breve. Dessa forma, consegue-se capturar

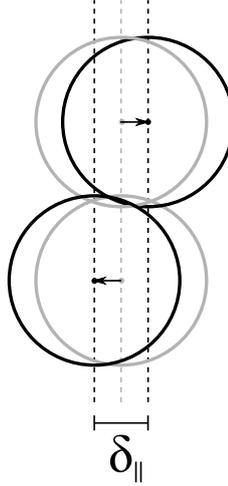


Figura 1.7: Deslocamento relativo δ_{\parallel} devido ao movimento de translação de dois grãos em contato.

eventos na escala das colisões entre os grãos.

A equação que descreve a evolução da deformação durante a colisão entre dois grãos do sistema é a mesma que descreve o movimento de um oscilador harmônico criticamente amortecido [60],

$$m_{ij} \frac{d^2 \delta_{\perp}}{dt^2} + \gamma_c \frac{d\delta_{\perp}}{dt} + k_n \delta_{\perp} = 0 .$$

Na equação acima, $m_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ é a massa reduzida dos grãos, e $\gamma_c = 2\sqrt{m_{ij} k_n}$ é o valor da constante de amortecimento crítico.

A solução dessa equação, com as condições $\delta_{\perp} = 0$ e $d\delta_{\perp}/dt = v_{\perp,0}$ em $t = 0$ (Figura 1.8), é dada por

$$\delta_{\perp}(t) = v_{\perp,0} t e^{-\sqrt{\frac{k_n}{m_{ij}}} t} .$$

A duração do contato é determinada pelo instante de tempo em que a deformação se anula novamente. No entanto, a função não possui outro zero, mas decai exponencialmente, após atingir um valor máximo. Na prática, devido ao caráter discreto do método, o contato se desfaz quando a deformação atinge um valor muito pequeno, momento que depende da velocidade relativa inicial $v_{\perp,0}$. O intervalo de tempo até a deformação máxima no entanto não depende de $v_{\perp,0}$ e fornece uma estimativa da duração do contato.

O passo de tempo de discretização é definido então em termos do tempo transcorrido até

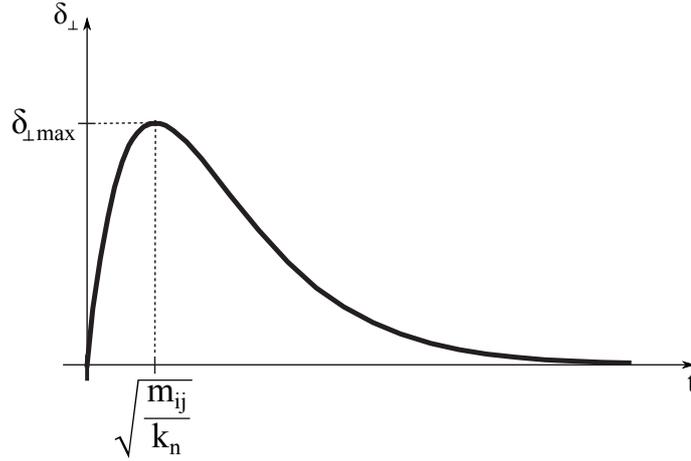


Figura 1.8: Solução da equação que descreve a deformação de dois grãos ao colidirem.

a deformação máxima,

$$\Delta t \equiv \frac{1}{50} \sqrt{\frac{m_{ij,min}}{k_n}} .$$

Com isso, a velocidade $v_{\perp,0}$ deve ser limitada de forma que a deformação ocorrida um passo de tempo após a formação do contato,

$$\delta_{\perp}(\Delta t) \simeq \frac{v_{\perp,0}}{50} \sqrt{\frac{m_{ij,min}}{k_n}} ,$$

não deve ultrapassar duas vezes o valor do diâmetro do grão. De outra forma, o período em que os grãos interagem seria completamente ignorado no processo de integração. Na verdade, é desejável que a deformação fique restrita a uma fração do diâmetro dos grãos para que o sistema corresponda a um material granular típico. Como a deformação máxima depende da velocidade $v_{\perp,0}$ com que os grãos colidem, deve haver restrições nas condições iniciais das simulações, o que significa limitar a energia do sistema.

Poder-se-ia reduzir o valor de Δt para permitir a simulação de sistemas mais agitados, mas isso ocasionaria um maior custo computacional sem acrescentar resultados relevantes ao presente estudo.

1.5 Lista de vizinhos

O cálculo das forças é realizado a cada passo de tempo e é a etapa mais pesada do algoritmo, na qual se verifica, para cada par de grãos, a força \vec{F}_{ij} e o torque τ_{ij} da interação

entre eles. Mas não é necessário fazer essa verificação a todo momento para todos os pares porque os grãos interagem apenas quando em contato. Pares suficientemente afastados não precisam ser submetidos a essa avaliação.

Lança-se mão então da chamada lista de vizinhos (Figura 1.9). A idéia, sugerida por Verlet [61] para tornar as simulações mais eficientes, consiste em manter uma lista dos grãos vizinhos. O cálculo das forças e dos torques é realizado levando-se em consideração apenas os grãos da lista, que é atualizada com frequência menor do que a frequência com que são calculadas as forças.

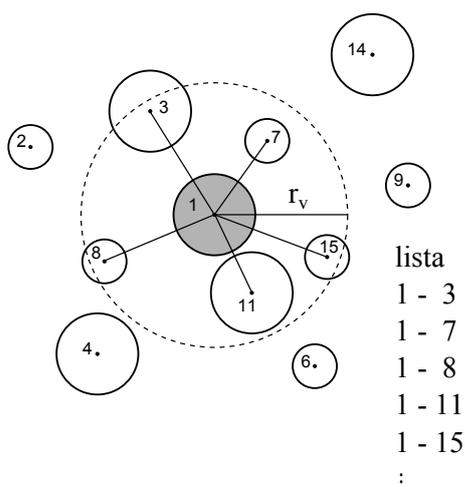


Figura 1.9: Ilustração que mostra como a lista de vizinhos é construída. A circunferência tracejada delimita a região de vizinhança do grão 1, e r_v representa o raio de vizinhança.

A definição da região de vizinhança é uma escolha importante, que irá determinar a redução do gasto computacional no cálculo de forças. Se o raio de vizinhança r_v (Figura 1.9) for pequeno, a frequência de atualização deverá ser alta, porque quando dois grãos se tornam vizinhos eles já podem estar prestes a colidir. Por outro lado, se o raio de vizinhança for grande, a frequência de atualização poderá ser mais baixa, mas a lista conterá muitos pares, o que a tornaria ineficaz. Ao dimensionar a vizinhança, é preciso então ajustar a frequência de atualização de modo a se obter um desempenho ótimo.

Ao raio de vizinhança é atribuído o valor $r_v = 1,1d_{max}$, onde d_{max} é o diâmetro do maior grão do sistema. Assim, dois grãos serão consideradas vizinhos se estiverem a uma distância inferior a $1,1d_{max}$. A lista é atualizada uma vez a cada cem passos de tempo, o que corresponde a uma frequência de atualização $f_{lista} = 1/(100\Delta t)$. Testes mostraram que os valores escolhidos levaram a um menor tempo simulacional, sem comprometer o processo de integração.

Dados o valor escolhido para a frequência de atualização da lista de vizinhos e as condições iniciais do sistema, a distância percorrida durante o lapso de tempo entre duas atualizações

subsequentes é sempre menor do que $v_{max} \times 100\Delta t \simeq 0,1d$. Nessa expressão, v_{max} é uma cota superior para as velocidades dos grãos. A escolha de $r_v = 1,1d_{max}$ implica que, quando um grão entra na vizinhança de outro, ele precisa percorrer no mínimo uma distância igual a $0,1d_{max}$ para que os dois se encostem. Até que essa distância tenha sido percorrida, a lista terá sofrido pelo menos uma atualização. Portanto, para os valores escolhidos de r_v e f_{lista} , garante-se que no momento em que dois grãos entram em contato, eles já estão na lista como vizinhos.

1.6 Normalização das variáveis do sistema

Todos os comprimentos no sistema, como os diâmetros dos grãos, a altura da pilha, altura de deposição, etc, são normalizados pelo comprimento L da base. A base é constituída de grãos fixos cujo diâmetro é $d_{base} = 0,1d$, onde d é o diâmetro médio dos grãos que compõem a pilha. A razão para a escolha de uma base composta de grãos menores que os grãos a serem depositados é simular uma base lisa e possibilitar a abertura de orifícios de tamanho intermediário entre múltiplos inteiros de d . Uma boa resolução da largura do orifício é importante para o estudo da transição de engarrafamento.

As massas dos grãos são normalizadas por $\pi d_{max}^2/4$, que é a massa de um grão de diâmetro máximo com densidade unitária.

A aceleração da gravidade g é definida de tal modo que o peso da maior pilha geometricamente possível composta apenas por grãos de massa unitária seja igual a um,

$$g \equiv \frac{2}{L(L+1)}, \quad (1.14)$$

onde L é o número de grãos livres que cobrem a base.

Há duas razões para se restringir o peso das pilhas. A primeira é limitar a deformação dos grãos à medida que bases maiores são consideradas. A segunda, e mais importante, é padronizar a intensidade média das tensões no interior das pilhas para os diversos tamanhos estudados.

Essas normalizações foram adaptadas daquelas utilizadas por Atman *et al.* [62] em simulações de camadas de grãos. Naquele caso, os parâmetros foram todos ajustados para uma pilha de peso $P = 1$. Neste estudo, são utilizados os mesmos valores para os parâmetros do modelo, mas, pelo fato do sistema ser aberto, o peso da pilha não pode ser fixado a priori. Por isso a imposição da unidade como um limite superior ao peso, implícita na Equação 1.14. Na média, o peso das pilhas é um pouco menor do que 1.

Capítulo 2

Transição de engarrafamento

Muitos materiais possuem uma certa rigidez, mas fluem sob ação de tensões relativamente pequenas, se comportando assim ora como sólidos ora como líquidos. É o caso por exemplo de materiais granulares, colóides, emulsões, espumas, etc. Esses materiais consistem basicamente de coleções de partículas macroscópicas e se enquadram na classe dos sólidos amorfos. São classificados também como fluidos não-newtonianos uma vez que a tensão de cisalhamento não é proporcional à taxa de cisalhamento. Ajustando o valor de certas variáveis termodinâmicas, como temperatura e densidade, pode-se mudar drasticamente propriedades macroscópicas de tais sistemas, fazendo que um material que antes escoava como um líquido passe a apresentar uma resistência finita a tensões cisalhantes. A essa mudança, dá-se o nome de transição de engarrafamento.

A transição vítrea, que ocorre ao se resfriar rapidamente certas substâncias a uma temperatura abaixo do ponto de fusão, guarda muitas semelhanças com a transição de engarrafamento, tendo sido a conexão entre os dois fenômenos, especialmente no caso de materiais granulares, amplamente explorada na literatura [16, 31, 33]. Os vidros também são classificados como sólidos amorfos pois não possuem ordenamento espacial nem possuem a fluidez dos líquidos. No entanto, sólidos cristalinos também podem exibir estados engarrafados [63]. As deformações plásticas, devido à existência de defeitos topológicos, se assemelham ao escoamento observado em materiais amorfos. A interrupção dessa dinâmica lenta e heterogênea dos defeitos pode ser entendida como uma transição de engarrafamento.

A Figura 2.1 exibe um diagrama de fases geral proposto por Liu e Nagel [64] para guiar o estudo da transição de engarrafamento. Segundo os autores, tal diagrama deveria envolver pelo menos três parâmetros: densidade, tensão externa e temperatura.

No caso de materiais granulares, a temperatura não é um parâmetro relevante porque as flutuações térmicas são muito pequenas quando comparadas à energia gravitacional de uma partícula. Porém, outros parâmetros, e.g. vibração externa, rotação do recipiente que contém o material ou a abertura de um orifício no fundo do recipiente, podem desempenhar papel similar àquele que a temperatura assume em sistemas térmicos.

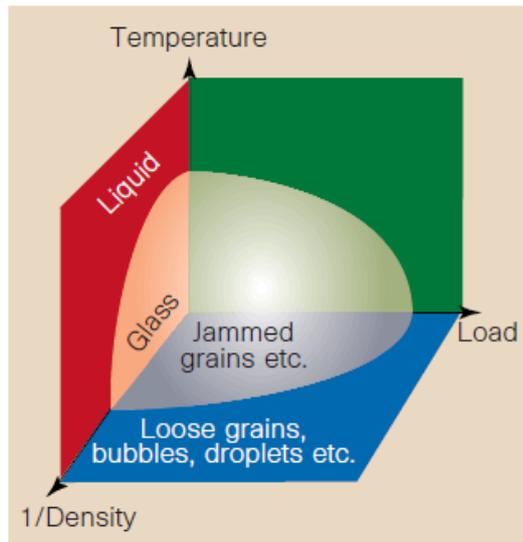


Figura 2.1: Diagrama de fases geral sugerido por Liu e Nagel para guiar o estudo da transição de engarrafamento. Retirado de Liu e Nagel [64].

Há alguns trabalhos teóricos sobre a transição de engarrafamento em meios granulares. Coniglio *et al.* [31] utilizaram uma teoria de campo médio para obter o diagrama de fases de um sistema de esferas duras sujeitas a um campo gravitacional e a perturbações externas periódicas. O estudo se baseia na mecânica estatística desenvolvida por Edwards e Oakeshott [32] para a descrição de materiais granulares. Variando a amplitude da perturbação externa verifica-se uma transição de fase análoga à transição líquido-vidro.

Um estudo analítico da transição usando a teoria da elasticidade e relações constitutivas apropriadas sobre o tensor de tensões foi feito por Cates *et al.* [33]. Eles associaram sistemas engarrafados a materiais frágeis que se caracterizam por exibir uma estrutura interna auto-organizada que, ao ser submetida a uma tensão de cisalhamento, evolui para uma nova configuração capaz de suportar a tensão. As relações constitutivas impõem então a existência de direções preferenciais para a transmissão da tensão e a solução precisa conciliar essas relações com as condições de contorno. Essa abordagem mostrou resultados compatíveis com a distribuição de tensões observada em experimentos.

Alguns estudos experimentais [65, 35, 36, 37] foram realizados na tentativa de confirmar e caracterizar a transição de engarrafamento em materiais granulares. A ideia desses experimentos é medir as descargas de grãos em um recipiente contendo material granular. Por meio da análise da estatística de descargas, obtém-se a probabilidade de engarrafamento em função da largura do orifício.

O orifício dá origem a uma tensão de cisalhamento uma vez que parte do material perde a sustentação da base e passa a exercer uma força cisalhante sobre os grãos adjacentes. A abertura de um orifício na base de um empilhamento de grãos permite então medir indiretamente a rigidez do material. Quanto maior a largura do orifício, maior a tensão de cisalhamento a que a coluna de grãos é submetida.

2.1 Trabalhos experimentais em empilhamentos fechados

Nesta seção, são descritas as abordagens usadas para se investigar experimentalmente a transição de engarrafamento em meios granulares. Os estudos [65, 35, 36, 37] consistem basicamente em analisar descargas de grãos contidos em um recipiente através de um orifício aberto no fundo. Uma ampla variedade de parâmetros foram investigados, como a geometria do recipiente, o formato do grão, coeficiente de atrito, etc. Os resultados ainda não são conclusivos mas apontam na direção de que, em silos bidimensionais, empilhamentos granulares não apresentam a transição, isto é, não importa quão largo seja o orifício, em algum momento após sua abertura o sistema engarrafa. Por outro lado, serão apresentados resultados que indicam a existência da transição em sistemas com fronteiras abertas.

2.1.1 Funil 2D

To *et al.* [65] estudaram o fenômeno de engarrafamento em um funil bidimensional. O funil é feito com duas placas de alumínio separadas por uma distância de 4mm e é preenchido com 200 discos de 3mm de espessura e 5mm de diâmetro, todos do mesmo tamanho. Dessa forma, os discos não podem virar dentro do funil. Além disso, as superfícies dos discos e das paredes do funil são polidas de modo a reduzir o atrito entre eles. Nessa geometria, existem dois parâmetros importantes: o ângulo de abertura do funil ϕ e a largura do orifício de saída d (Figura 2.2).

O experimento é conduzido da seguinte forma: o funil, inicialmente com a saída voltada para cima, é virado rapidamente de modo que os discos caem em direção ao orifício de saída, eventualmente bloqueando o escoamento e produzindo um estado engarrafado. Esse procedimento é repetido várias vezes, e o número de eventos de engarrafamento são registrados.

A probabilidade de engarrafamento $J(d)$ é definida simplesmente como sendo a razão entre o número de eventos em que houve engarrafamento N_j e o número total de eventos N_t , para um dado d ,

$$J(d) \equiv \frac{N_j}{N_t}$$

O engarrafamento ocorre como resultado da formação de um arco acima do orifício de saída (Figura 2.2). Baseado nisso, foi proposto um modelo para a formação do arco que conseguisse reproduzir a estatística obtida nos experimentos. No modelo, supõe-se que o arco seja a trajetória de um caminhante aleatório restrita por alguns vínculos: (1) a

trajetória do caminhante é sempre no sentido da esquerda para a direita; (2) o arco é sempre convexo, isto é, o ângulo definido por três partículas consecutivas é menor do que 180° - hipótese razoável quando não há atrito; (3) uma partícula não pode estar no volume ocupado pelas outras partículas; (4) projeção horizontal do arco deve ser maior que d .

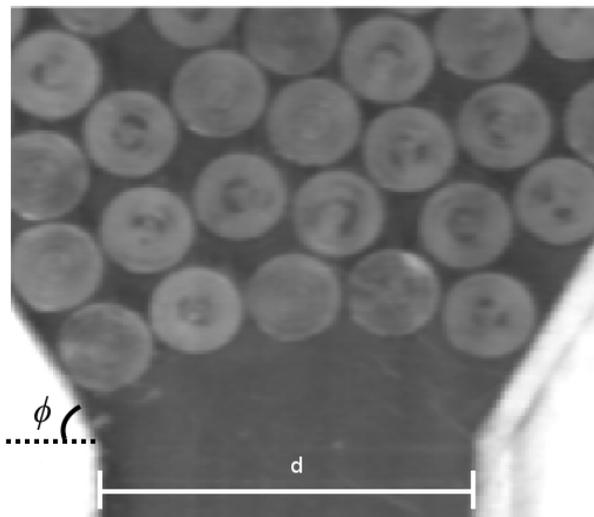


Figura 2.2: Fotografia de um evento típico em que houve engarrafamento. Retirado de To et al. [65].

Nesse contexto, e com a hipótese de que $J(d)$ é proporcional à probabilidade de formação de um arco sobre a saída, os autores encontraram uma expressão analítica para a probabilidade de engarrafamento. A Figura 2.3 mostra os gráficos de J em função de d para $\phi = 34^\circ, 60^\circ, 75^\circ$ confrontados com os gráficos da expressão analítica. Nota-se que há uma diferença entre os gráficos para ângulos menores, $\phi = 34^\circ$ e $\phi = 60^\circ$, que apresentam uma queda abrupta no intervalo $3,3D < d < 4,3D$ (D é o diâmetro do disco), e o gráfico de $\phi = 75^\circ$, em que a queda ocorre em uma região anterior. Ademais, há um bom ajuste para os ângulos menores, mas para $\phi = 75^\circ$ o modelo falha.

A explicação dos autores para essa mudança de comportamento à medida que ϕ aumenta é que, para $\phi = 75^\circ$, a maioria dos eventos em que ocorre engarrafamento apresenta uma descarga de discos antes do engarrafamento acontecer. O contrário é observado para $\phi = 34^\circ$ e $\phi = 60^\circ$, isto é, a maioria dos eventos de engarrafamento não apresenta um fluxo inicial de discos através do orifício de saída. A dinâmica inicial do sistema se reflete então na probabilidade de engarrafamento, revelando ser um aspecto essencial do fenômeno. O fato do modelo proposto não explicar os dados para $\phi = 75^\circ$ corrobora essa visão, uma vez que o modelo leva em conta apenas informações geométricas dos arcos em sua formulação.

Resumindo, os resultados acima indicam a existência da transição de engarrafamento no intervalo entre $d = 3,3D$ e $d = 4,3D$ e que a transição depende da dinâmica inicial do

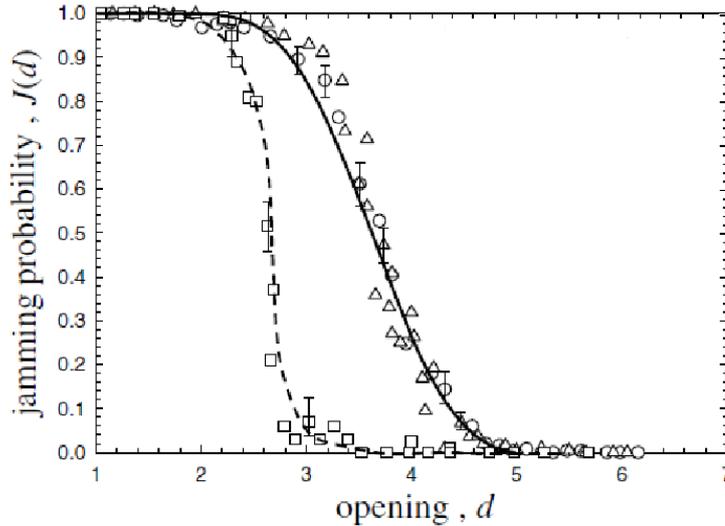


Figura 2.3: Gráficos da probabilidade de engarrafamento J em função de d para $\phi = 34^\circ(\circ)$, $60^\circ(\triangle)$, $75^\circ(\square)$. A linha sólida é o gráfico de $J(d)$ previsto pelo modelo do caminhante aleatório, e a linha tracejada é apenas um guia para os pontos experimentais de $\phi = 75^\circ$. Retirado de To et al. [65].

escoamento nas proximidades do orifício.

2.1.2 Silo 2D

Janda et al [35] investigaram a transição de engarrafamento utilizando uma metodologia um pouco diferente daquela usada no experimento descrito na subseção anterior. Como naquele trabalho, investiga-se as interrupções no escoamento através de um orifício feito no fundo de uma pilha de grãos. A geometria do recipiente, no entanto, é diferente e adota-se uma definição mais criteriosa para a probabilidade de engarrafamento.

Os grãos — esferas de aço de $(1,00 \pm 0,01)$ mm de diâmetro e $(4,00 \pm 0,01)$ mg, todas do mesmo tamanho — são confinados em um silo bidimensional em que é possível controlar a largura de um orifício localizado na base. A largura do orifício em unidades de diâmetro do grão é representada por d . A largura da base é equivalente a 200 diâmetros de grão. Após cada evento de engarrafamento, o escoamento é restabelecido por meio de um jato de ar lançado no sentido oposto ao escoamento.

O silo é preenchido com uma quantidade da ordem de 10^5 grãos, que são depositados de maneira uniforme sobre toda a extensão da base. Ao longo do experimento, o silo vai sendo recarregado para manter inalterada a pressão próximo ao orifício.

A distribuição $n_d(s)$ do tamanho das avalanches s , definida como a descarga entre dois engarrafamentos consecutivos, para $d = 2,17D$ (D é o diâmetro do grão), é exibida na Figura 2.4. O gráfico apresenta um máximo na região de pequenas avalanches e depois

decai exponencialmente à medida que s aumenta. As distribuições para os outros valores de d apresentam as mesmas características.

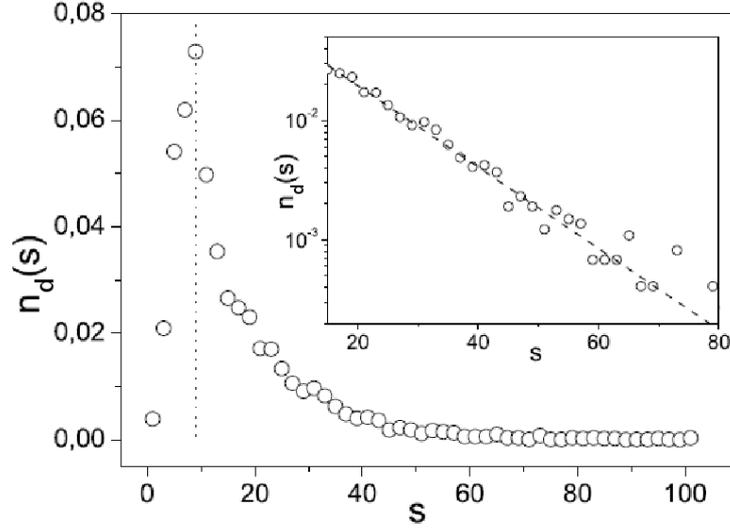


Figura 2.4: Distribuição do tamanho das avalanches, definida como a descarga entre dois engarrafamentos consecutivos, para $d = 2,17$ obtida por Janda et al. [35]. O “inset” é o mesmo gráfico em escala semi-logarítmica, evidenciando o decaimento exponencial.

A probabilidade de engarrafamento $J(d)$ é definida levando em conta a distribuição de avalanches, uma informação negligenciada na definição utilizada por To *et al.* [65]. Esse dado é essencial pois o que caracteriza o estado não-engarrafado é o escoamento livre em um período de tempo indefinidamente longo. $J(d)$ é então definida como o limite da $J_N(d)$ quando $N \rightarrow \infty$, onde $J_N(d)$ é a probabilidade do sistema engarrafar antes que N grãos atravessem o orifício,

$$J_N(d) \equiv 1 - \sum_{s=N}^{\infty} n_d(s) .$$

A Figura 2.5 mostra gráficos de $J_N(d)$ para vários valores de N . Os símbolos representam os dados obtidos do experimento e as linhas representam um modelo probabilístico proposto pelos autores para a formação de arcos. Em todos os gráficos é possível observar uma queda acentuada de $J_N(d)$ em uma determinada região do domínio. A região em que ocorre a queda se desloca para a direita à medida que N aumenta. Se for possível mostrar que os gráficos de $J_N(d)$ estão tendendo para uma função degrau, a existência de uma largura crítica separando uma fase engarrafada de uma fase fluida se confirmaria. Se, no entanto, os gráficos estiverem se deslocando indefinidamente no sentido de d positivo, convergindo para $J(d) = 1$, não haverá transição e com certeza o escoamento será interrompido em um tempo finito — haverá uma configuração estável compatível com orifício de qualquer largura.

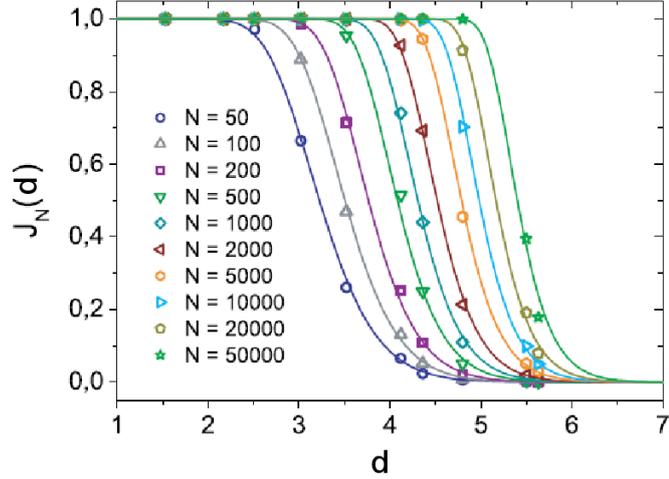


Figura 2.5: Gráficos da probabilidade de engarrafamento $J_N(d)$ em função de d obtidos por Janda et al. [35]. Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas representam o modelo probabilístico da formação de arcos proposto pelos autores. Retirado de Janda et al. [35].

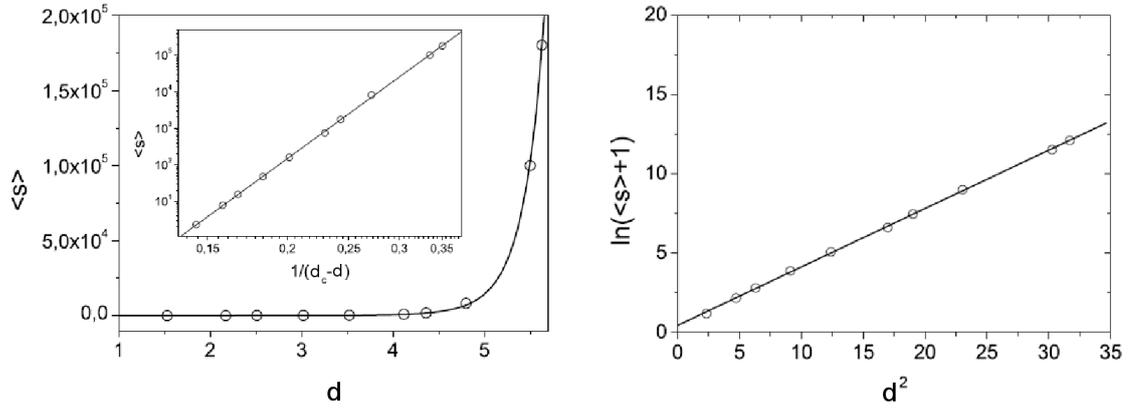


Figura 2.6: Ajustes do tamanho médio das avalanches medido no experimento realizado por Janda et al. [35]. O diagrama à esquerda mostra um ajuste pela função $\langle s \rangle = C/(d_c - d)^\gamma$ e o diagrama à direita mostra um ajuste pela função $\langle s \rangle = \exp(\gamma d^2)$. Retirado de Janda et al. [35].

O modelo para a formação de arcos pensado pelos autores possui um carácter semi-empírico e se baseia na hipótese de que os eventos que consistem na passagem de um grão pelo orifício são independentes e possuem a mesma probabilidade. Com isso, obtém-se uma relação entre a probabilidade de engarrafamento e o tamanho médio das descargas $\langle s \rangle$. Nesse ponto, o modelo precisa ser alimentado com uma expressão para $\langle s \rangle$, e é aí que reside seu carácter empírico. A expressão para $\langle s \rangle$ é obtida dos dados experimentais. Estes entretanto podem ser descritos com a mesma precisão tanto por uma lei de potência $\langle s \rangle = C/(d_c - d)^\gamma$ quanto por uma exponencial quadrada $\langle s \rangle = C \exp(\gamma d^2)$. A Figura 2.6 mostra ajustes dessas funções aos dados experimentais. A primeira possui uma divergência em $d = d_c = 8,5$, enquanto a segunda é contínua para todo d . A divergência de $\langle s \rangle$ para um valor finito de d demonstraria a existência da transição de engarrafamento. De fato, para um fluxo de grãos limitado, $\langle s \rangle \rightarrow \infty$ significa um tempo de relaxação infinito.

Contudo, $d_c = 8,5$ está fora da região explorada e a exponencial quadrada forneceu uma descrição melhor de $J_N(d)$ quando inserida no modelo probabilístico proposto pelos autores. Portanto, ainda que não haja uma confirmação direta e definitiva, as evidências indiretas apontam no sentido de que a transição de engarrafamento não existe em sistemas granulares bidimensionais confinados.

2.1.3 Silo 3D

Experimentos em silos cilíndricos realizados por Zuriguel *et al.* [37] mostram um comportamento distinto daquele observado em sistemas bidimensionais. A mesma distribuição do tamanho das avalanches s , com decaimento exponencial, é encontrada. O gráfico de $\langle s \rangle$, porém, revela uma divergência mais robusta. O ajuste pela função $C/(d_c - d)^\gamma$ fornece uma largura crítica menor, $d_c = 4,94$, o que é natural pois para o mesmo valor de d uma estrutura tridimensional capaz de bloquear o orifício envolve um número maior de grãos do que uma estrutura bidimensional.

No trabalho citado, investigou-se também a influência de propriedades dos grãos no engarrafamento. Não foi observada mudança significativa no comportamento de $\langle s \rangle$ ao se variar a densidade, a rigidez ou a rugosidade da superfície dos grãos. No entanto, o comportamento de $\langle s \rangle$ se mostrou bastante sensível à geometria dos grãos. Os autores realizaram o experimento de descarga usando partículas esféricas, grãos aproximadamente cilíndricos e grãos de arroz. Eles relataram, em todos os casos, o comportamento divergente descrito pela lei de potência mencionada no parágrafo anterior (Figura 2.7). Para grãos cilíndricos, encontrou-se $d_c = 5.03$ e para grãos de arroz, $d_c = 6.15$. Esses resultados indicam que quanto mais distante do formato esférico maior o valor do diâmetro crítico.

2.2 Simulação de empilhamentos abertos

De acordo com o que foi apresentado na seção anterior, percebe-se que o estudo da transição de engarrafamento em materiais granulares é ainda incipiente e não existe pleno consenso nem mesmo sobre a existência da transição. Nos experimentos, a extensão do parâmetro de controle que foi explorada é bastante restrita — dados para orifícios de largura superior a 5 diâmetros são escassos —, o que compromete a extrapolação dos resultados experimentais. Outra questão importante se refere ao papel das paredes do recipiente, que mesmo afastadas por uma distância significativa podem exercer alguma influência no fenômeno. A existência de paredes produz um efeito nas propriedades mecânicas da pilha, uma vez que parte da tensão é transmitida a elas.

Nesse sentido, a investigação da transição de engarrafamento em empilhamentos abertos fornece informações importantes para o entendimento do fenômeno. Esta seção apresenta

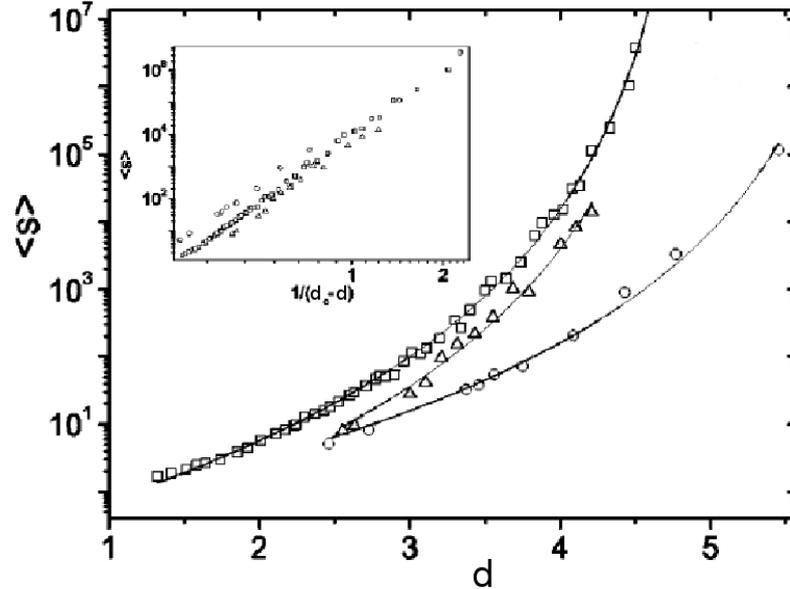


Figura 2.7: Gráficos do tamanho médio das avalanches $\langle s \rangle$ em função do diâmetro do orifício d em escala semilogarítmica para grãos de diferentes formatos. Os símbolos representam os dados experimentais: (\square) esferas, (\triangle) grãos cilíndricos, (\circ) grãos de arroz. As linhas sólidas são ajustes pela equação $\langle s \rangle = A/(d_c - d)^\gamma$. O “inset” mostra o gráfico de $\langle s \rangle$ contra $1/(d_c - d)$ em escala logarítmica para evidenciar a variação de d_c com o formato. Retirado de Zuriguel et al. [37].

uma análise de dados extraídos de simulações numéricas de descargas de empilhamentos abertos bidimensionais. As simulações são realizadas usando-se o método da dinâmica molecular e o modelo para as forças apresentados no capítulo anterior. Os resultados apresentados neste capítulo foram publicados em 2010 [66].

2.2.1 Descrição da simulação

As simulações numéricas são divididas em duas etapas: primeiro, a pilha é construída depositando-se partículas sobre uma base de tamanho finito; em seguida, um orifício é aberto no centro da base, por meio do qual as partículas poderão escoar. As configurações dos empilhamentos antes e após a descarga bem como informações sobre o processo de descarga, são armazenados para posterior análise.

A etapa envolvendo a construção da pilha começa com a definição de uma base horizontal fixa de grãos justapostos de diâmetro $0,1d$, onde d é o valor médio do diâmetro dos grãos a serem depositados. A deposição é distribuída uniformemente ao longo de toda a extensão da base e ocorre da seguinte forma: a cada período de tempo, determinado pela frequência de deposição, um conjunto de partículas dispostas em uma linha horizontal é “abandonado” de uma altura fixa H ; por abandonado se entende que as partículas, passam a ser consideradas no processo de integração. As posições e velocidades iniciais das partículas são definidas da seguinte forma: a coordenada horizontal é escolhida ao

acaso dentro do intervalo determinado pela base, evitando superposição de partículas do mesmo conjunto — isto é, entre partículas que serão depositadas no mesmo instante de tempo — e de forma que estas ocupem 50% da extensão da base. À coordenada vertical de todas as partículas é atribuído o valor da altura de deposição H , que é definido como sendo igual ao comprimento da base L . A velocidade inicial das partículas é nula. A frequência de deposição f_{dep} é definida como a frequência máxima compatível com a não-superposição de partículas entre camadas consecutivas na ordem de deposição,

$$f_{dep} = \sqrt{g/2d_{max}} .$$

À medida que a deposição acontece, há perda de partículas pelas extremidades da base pois o sistema é aberto. O fim do processo de deposição ocorre quando o sistema atinge um estado estacionário, caracterizado pela estabilidade do número de partículas da pilha — partículas com pelo menos um contato. A Figura 2.8 mostra a evolução do número de partículas da pilha ao longo do processo de construção de uma amostra sobre uma base de largura $L = 75d$. Após cessar o processo de deposição, a simulação continua até que a pilha alcance um estado de equilíbrio. A configuração final é então salva em um arquivo que armazena as posições, velocidades, forças de contato e parâmetros da simulação, para uso e análise futuros. Seguindo Atman *et al.* [62], os critérios de equilíbrio são:

- existência de pelo menos dois contatos para cada partícula;
- ausência de contatos deslizantes;
- força exercida sobre a base igual ao peso da pilha dentro de uma tolerância: $|F_{base} - P| < 10^{-6} m_{min}g$;
- energia cinética translacional abaixo de uma tolerância — $K_{trans} < 10^{-6} m_{min}gd$.

Partindo da configuração final que resulta do processo de deposição, dá-se início à segunda etapa da simulação. Um orifício é aberto no centro da base, por meio da remoção de uma quantidade de partículas correspondente à largura do orifício w . Após a abertura do orifício, as partículas antes sustentadas por aquelas que foram removidas ficam instáveis, provocando uma reorganização de toda a estrutura e eventualmente um fluxo de partículas através do orifício. Durante o processo de descarga, as partículas que deixam a pilha, seja pelo orifício ou pelas extremidades, são eliminadas do sistema. Para esse fim, de tempos em tempos é feita uma verificação na coordenada y de cada partícula. Se o valor de y for menor do que zero, que é o nível da base, a partícula não entra mais nos cálculos — a subrotina “AtualizaSistema” presente no código do programa de deposição e no programa de descarga, ambos transcritos no Apêndice A, é responsável por esse procedimento. A simulação prossegue até que um novo estado de equilíbrio seja alcançado. O número de partículas que atravessam o orifício é contabilizado ao longo da descarga verificando-se se a partícula, ao ser eliminada, está próximo ao orifício. Essa quantidade é o tamanho da descarga s .

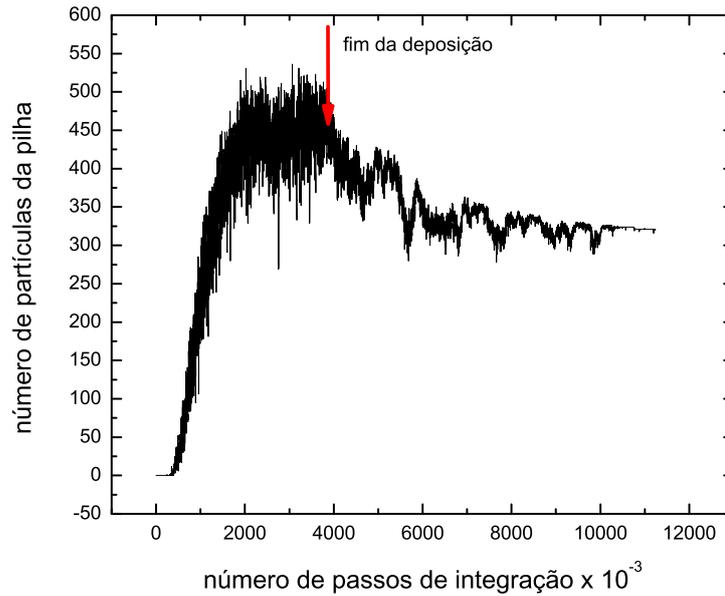


Figura 2.8: *Evolução do número de partículas da pilha ao longo do processo de construção de uma amostra feita com grãos bidispersos sobre uma base de largura $L = 75d$.*

2.2.2 Resultados

A Figura 2.9 apresenta os perfis médios das pilhas após o procedimento de construção para todos os tamanhos. Para se obter os perfis, o sistema foi dividido verticalmente em faixas de espessura igual a d . Calcula-se então a altura média da pilha em cada faixa, isto é, o valor médio da coordenada vertical da partícula mais elevada dentro da faixa.

Um fato interessante chama a atenção ao se observar os perfis. Principalmente para os tamanhos maiores, a pilha parece ficar mais saliente à medida que se aproxima do topo. Em outras palavras, a região central da pilha é mais íngreme quando comparada às bordas. Esse efeito se torna evidente quando se olha para os gráficos da inclinação local em função da posição horizontal na pilha (Figura 2.10). Observa-se um platô da inclinação próximo à borda e um aumento gradual quando se aproxima do centro. Esse aumento é mais pronunciado nas pilhas maiores: $L = 75d$, $L = 100d$ e $L = 125d$.

Possivelmente, esse efeito se deve a uma mudança na forma como as partículas se acomodam à medida que a pilha cresce. Essa mudança seria devido ao aparecimento de um ordenamento emergente devido à perda de influência da base no processo de deposição. No início da deposição, as partículas caem sobre uma base constituída de partículas muito menores, imitando uma superfície lisa. À medida que a deposição avança, as partículas depositadas não entram em contato com a base mas com uma camada de partículas que forma a superfície da pilha e que possui propriedades que diferem das propriedades da base. No início da deposição, essa camada é mais instável e a base ainda exerce uma

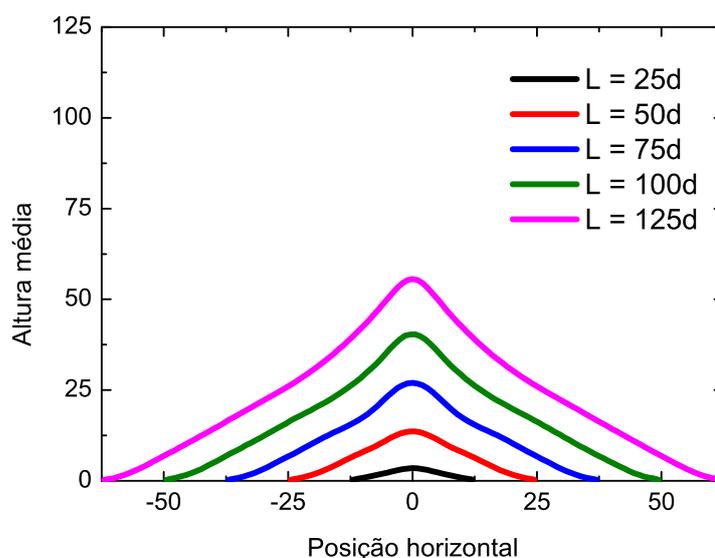


Figura 2.9: Perfis médios das pilhas após o procedimento de construção para todos os tamanhos estudados. Os perfis foram construídos a partir de um conjunto de 5000 amostras.

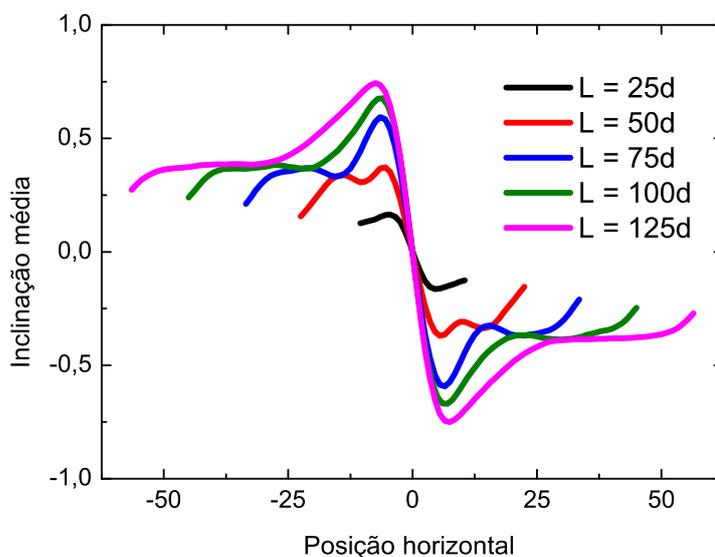


Figura 2.10: Inclinação local média em função da posição horizontal para os diversos tamanhos de pilha estudados. A inclinação é calculada a partir do perfil médio em uma escala $l = 10d$.

influência significativa na maneira como as partículas se acomodam. Tão logo se forme uma estrutura estável, a camada superficial age como uma nova base que favorece o crescimento de uma estrutura mais ordenada. Isso porque a superfície livre se torna mais rugosa, o que proporciona uma estabilidade maior para as partículas depositadas. Outro fator que contribui para esse efeito de afinamento é o fato da altura de deposição ser fixa. O impacto das partículas depositadas se torna menor à medida que a pilha cresce.

Assim o processo de deposição perturba cada vez menos a pilha à medida que ela cresce, favorecendo um ordenamento maior.

A Figura 2.11 mostra os perfis médios das pilhas construídas sobre a base de tamanho $L = 75d$ após a descarga, para alguns valores de w . Para valores pequenos de w , a pilha permanece praticamente inalterada após a abertura do orifício. À medida que w aumenta, a região desestabilizada se torna cada vez maior, o que provoca um fluxo cada vez mais intenso de partículas através do orifício e conseqüentemente uma mudança cada vez maior na estrutura da pilha. Se w é superior a um certo valor, o fluxo de partículas só cessa quando a pilha inicial é completamente destruída, dando origem a duas pilhas menores. A essa configuração dá-se o nome de estado catastrófico. A mudança de comportamento provocada pela variação de w , em que a pilha passa de um regime em que permanece inalterada para um regime catastrófico, é análoga a uma transição ordem-desordem e podendo ser caracterizada por um parâmetro de ordem apropriado.

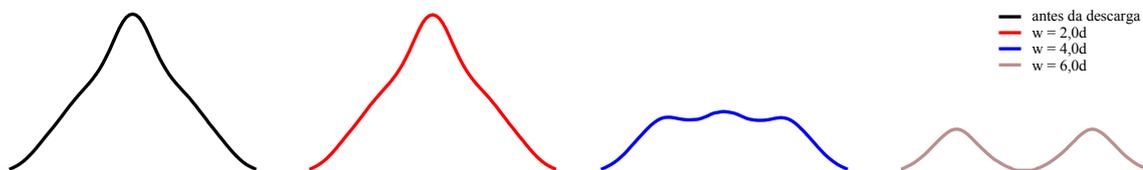


Figura 2.11: Perfil médio das pilhas construídas sobre a base de tamanho $L = 75d$ antes da descarga e perfis médios das mesmas pilhas após a descarga para alguns valores de w .

Um bom parâmetro de ordem para se investigar essa transição é a altura média da pilha medida a partir do centro da base após a descarga, $\langle h \rangle$. Se a pilha não se alterar muito após a descarga, o valor de $\langle h \rangle$ não será muito diferente da altura média da pilha original. Por outro lado, se houver uma grande descarga, que destrua a pilha, o valor de $\langle h \rangle$ será zero. Portanto, o parâmetro $\langle h \rangle$ consegue distinguir entre esses dois estados extremos da pilha após a descarga.

Assim, a altura média seria análoga à probabilidade de engarrafamento como definida nos artigos experimentais sobre transição de engarrafamento em empilhamentos fechados. Uma probabilidade de engarrafamento nula correspondente à fase de escoamento ininterrupto seria equivalente a uma altura final média nula. Já uma probabilidade não-nula estaria associada a uma altura final média também não-nula, uma vez que algumas pilhas teriam seu fluxo bloqueado por um arco resultando em uma altura finita no centro. A altura média, no entanto, fornece mais informações que a probabilidade de engarrafamento, pois distingue entre o engarrafamento já instalado — engarrafamento intrínseco — e aquele que se desenvolve após ter início o escoamento. A transição para o regime catastrófico seria então uma transição de uma fase incompatível com qualquer escoamento para uma fase de escoamento ininterrupto, enquanto a transição de engarrafamento propriamente dita é a transição de uma fase que em algum momento engarrafa para uma fase

de escoamento ininterrupto.

A fim de investigar a transição de engarrafamento, foi feita uma análise da influência do tamanho do empilhamento na transição para o regime catastrófico. O tamanho do empilhamento é controlado pelo comprimento da base L sobre a qual a pilha é construída. Cinco diferentes tamanhos foram estudados: $L = 25d$, $L = 50d$, $L = 75d$, $L = 100d$, $L = 125d$. Para cada valor de L , foi gerada uma determinada quantidade de amostras (10000 para $L = 25d$ e $L = 50d$, 5000 para $L = 75d$ e $L = 100d$ e 1000 amostras para $L = 125d$), que são submetidas ao procedimento de descarga descrito anteriormente para orifícios de diversos tamanhos. Investigou-se o intervalo do espaço de w compreendido entre $w = 1,0d$ e $w = 7,0d$ com uma resolução de $0,2d$.

Na Figura 2.12, são exibidas as configurações espaciais de uma pilha de tamanho $L = 75d$ antes e depois do processo de descarga para três valores distintos de w . A imagem (a) é a configuração da pilha original. As imagens subsequentes, (b), (c) e (d), representam os estados finais após a descarga para $w = 2,2d$, $4,2d$ e $5,2d$ respectivamente. Em (b) e (c), vê-se que a abertura do orifício não afeta muito a estrutura da pilha. O fluxo inicial de grãos é rapidamente interrompido pela formação de um arco acima do orifício, que está realçado na figura. Se o orifício é suficientemente largo, como na imagem (d), tem-se um cenário bastante diferente, em que há um fluxo intenso de partículas que perdura até que a pilha seja completamente desfeita.

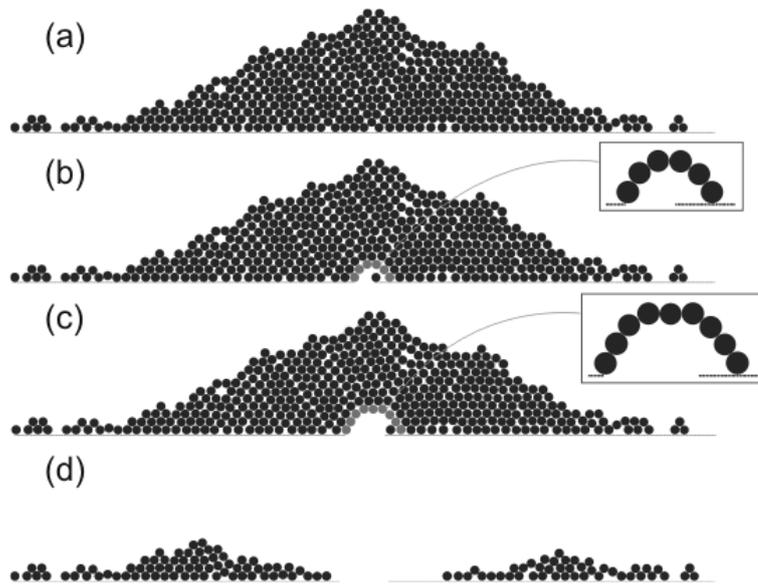


Figura 2.12: Pilha de tamanho $L = 75d$ antes (a) e depois do processo de descarga para $w = 2,2d$ (b), $w = 4,2d$ (c) e $w = 5,2d$ (d). Os arcos responsáveis por interromper o escoamento em (b) e (c) estão realçados e ampliados.

O valor de w que provoca a descarga catastrófica flutua fortemente no espaço amostral e, para uma mesma amostra, pode-se ter $h = 0$ para valores distintos de w separados por

um intervalo em que $h \neq 0$. Para cada amostra individualmente, portanto, a largura de transição não é bem definida, e o regime de escoamento é fortemente ligado à distribuição de tensões específica da amostra. No entanto, na média a altura h varia monotonicamente com w e evidencia a existência de duas fases distintas, como mostra a Figura 2.13. Os gráficos parecem convergir para a função degrau, o que, se confirmado, demonstraria a existência de uma fase de escoamento ininterrupto e de um tamanho crítico de arco.

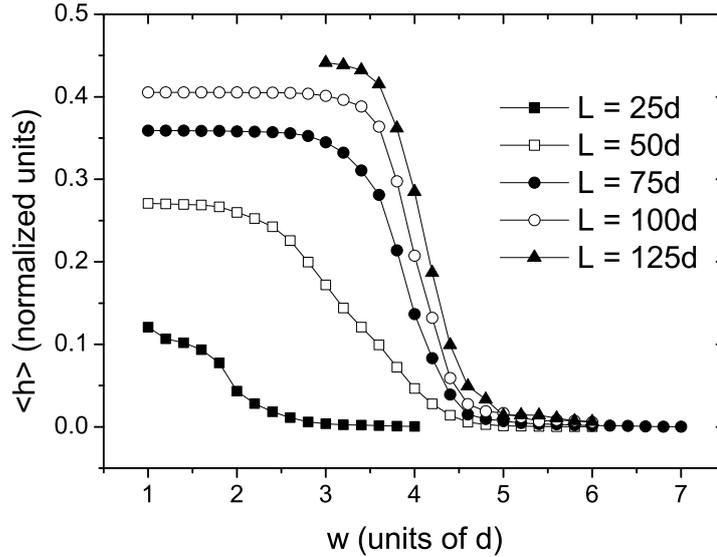


Figura 2.13: Valor esperado da altura da pilha medida a partir do centro da base $\langle h \rangle$ em função da largura do orifício w para os tamanhos do sistema estudados. A média é calculada sobre um espaço de 10.000 amostras para $L = 25d$ e $L = 50d$, 5.000 amostras para $L = 75d$ e $L = 100d$ e 1.000 amostras para $L = 125d$.

A largura do orifício de transição para o regime catastrófico, denotada por w_t , é definida como a largura em que as flutuações de h atingem o valor máximo. Na Figura 2.14, são exibidos os gráficos das flutuações de h em função de w para todos os tamanhos estudados. À medida que o tamanho do sistema aumenta, o máximo se desloca para a direita. No entanto, o gráfico de w_t contra $1/L$, apresentado na Figura 2.15, mostra que w_t tende a um valor finito quando $L \rightarrow \infty$. Além disso, nota-se que os gráficos das flutuações tornam-se mais concentrados em torno do máximo, o que é mais uma evidência de que há uma transição de fase.

O limite de w_t para $L \rightarrow \infty$, w_c , coincide com a largura do orifício na transição de engarrafamento como definida por Janda *et al.* [35]. De fato, quando $L \rightarrow \infty$, o valor de $\langle s \rangle$ para uma descarga catastrófica tenderia a infinito. O ajuste linear do gráfico de w_t em função de L^{-1} , exibido na Figura 2.15, fornece $w_c = (5, 0 \pm 0, 1)d$. Esse resultado contradiz aquele obtido por Janda *et al.* [35] ao estudar empilhamentos confinados em

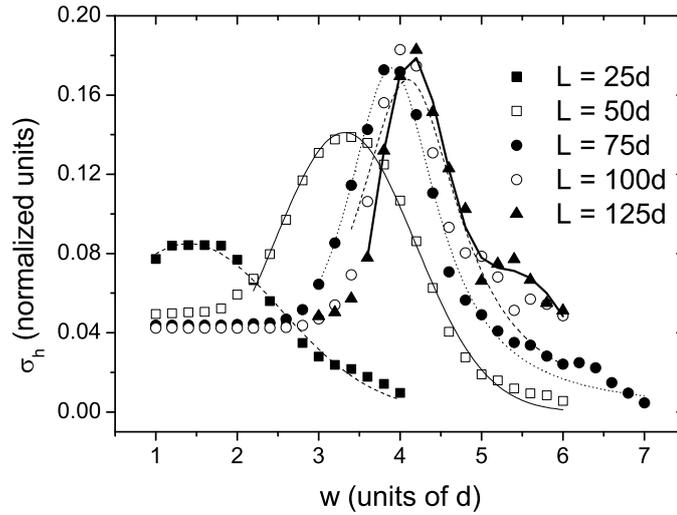


Figura 2.14: Desvio padrão da altura da pilha medida a partir do centro da base σ_h em função da largura do orifício w . Os símbolos representam os valores obtidos das simulações, e as linhas são ajustes dos dados por funções gaussianas.

silo. Naquele contexto, ficou demonstrada a inexistência da fase de escoamento ininterrupto, ou seja, que para orifício de qualquer largura sempre ocorrerá o engarrafamento dos grãos, bastando para isso esperar um tempo suficientemente longo. Essa divergência provavelmente é devido à diferença entre as geometrias dos sistemas, e deve ser melhor estudada em trabalhos futuros.

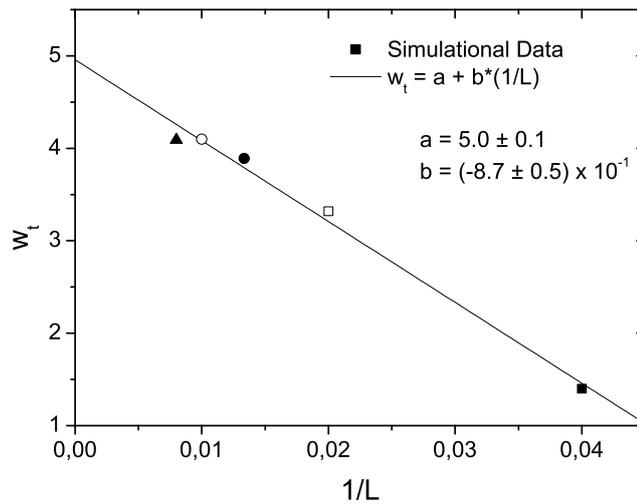


Figura 2.15: Largura de transição para o regime catastrófico w_t em função de $1/L$. Os símbolos representam os dados simulacionais e a linha é um ajuste linear. O intercepto com o eixo das ordenadas fornece o valor de w_t no infinito, que coincide com a largura da transição de engarrafamento $w_c = (5,0 \pm 0,1)d$.

Alguns autores especularam sobre a possibilidade de que descargas ou avalanches internas revelariam que empilhamentos de grãos possuiriam uma estrutura criticamente auto-organizada. Se fosse confirmado, isso concordaria com a tese da não-existência da transição de engarrafamento, uma vez que haveria avalanches de todos os tamanhos independente do tamanho do orifício. Resultados de simulações baseadas em autômatos celulares [67, 68] apontaram nessa direção. No entanto, tanto nos experimentos quanto nas simulações numéricas cujos resultados são aqui apresentados, observou-se uma distribuição exponencial do tamanho de descargas.

A Figura 2.16 exhibe os gráficos da distribuição acumulada do tamanho da descarga $F(s)$ em pilhas com $L = 75d$ para alguns valores de w . A função $F(s)$ fornece a probabilidade de ocorrência de uma descarga de tamanho s ou maior do que s . Os gráficos estão em escala semi-logarítmica de modo a enfatizar o decaimento exponencial, em acordo com os dados experimentais [35, 37], e em desacordo com as previsões dos modelos propostos por Manna e Khakhar [67] e por Manna e Herrmann [68]. Contudo, percebe-se aqui algumas diferenças em relação ao que foi observado nos experimentos em silo. Examinando os gráficos da função $F(s)$, é nítida a mudança de comportamento quando w varia entre 2,8d e 3,0d.

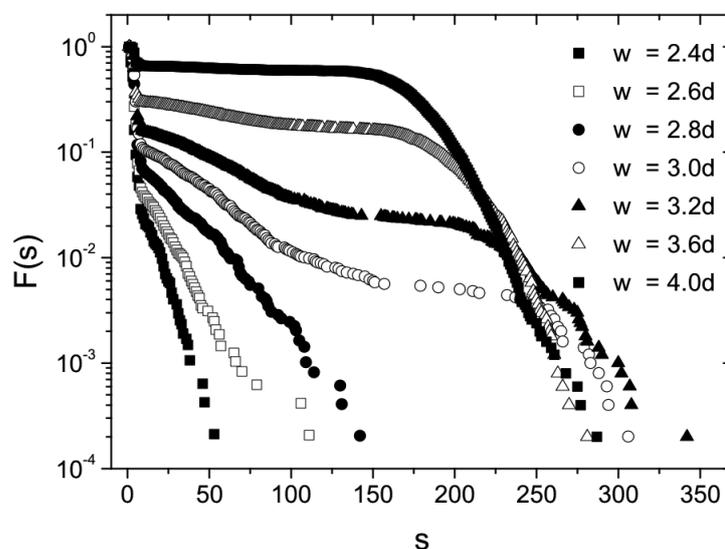


Figura 2.16: Gráficos da distribuição acumulada do tamanho da descarga $F(s)$ em pilhas com $L = 75d$ para alguns valores de w . As distribuições foram geradas a partir de um conjunto de 5.000 amostras. Nota-se uma nítida mudança de comportamento quando w varia entre 2,8d e 3,0d, evidenciando a existência de uma transição entre duas fases distintas.

Conforme pode ser visto no gráfico da Figura 2.16, é nesse intervalo que se inicia a transição para o regime catastrófico, isto é, quando $w \approx 2,9d$ o empilhamento começa a

sentir a presença do orifício e a ser significativamente perturbada por ele. Até esse valor, o escoamento é efetivamente impossibilitado, mas para $w > 2,9d$, a pilha é totalmente perturbada e eventos catastróficos começam a acontecer. Os gráficos indicam que avalanches de tamanhos intermediários se tornam menos frequentes no regime catastrófico. Em outras palavras, nesse regime ou a pilha colapsa ou o fluxo é prontamente interrompido por um arco já instalado antes do orifício ser aberto.

Com o objetivo de investigar a influência de uma maior desordem espacial na transição, foi feita a curva de $\langle h \rangle$ contra w para pilhas feitas com partículas de dois tamanhos distintos. As pilhas com grãos bidispersos são preparadas e descarregadas usando o mesmo procedimento descrito anteriormente. A diferença é que o diâmetro das partículas depositadas é escolhido aleatoriamente entre dois valores, $d_1 = 0,75d$ com probabilidade $p_1 = 0,8$ e $d_2 = 1,25d$ com probabilidade $p_2 = 1 - p_1$, onde d é o diâmetro médio. Com esses valores, a massa do conjunto de partículas pequenas é igual à massa do conjunto de partículas grandes.

A Figura 2.17 mostra os gráficos da altura média $\langle h \rangle$ em função de w para as pilhas de tamanho $L = 75d$ construídas com grãos levemente polidispersos, e pilhas de tamanho $L = 75d$ construídas com grãos bidispersos. Pode-se ver que a largura de transição para o regime catastrófico é maior no segundo caso. Aparentemente, a desordem espacial proporcionada pela mistura de grãos de diferentes tamanhos resultou em uma maior estabilidade da pilha. No entanto, é bastante provável que isso se deva exclusivamente à existência de grãos maiores do que aqueles da pilha constituída de grãos levemente polidispersos, pois, como será visto adiante, os arcos formados em pilhas construídas a partir de uma mistura de grãos de tamanhos distintos são constituídos preferencialmente pela partículas maiores. Portanto esse desvio na transição para o regime catastrófico está intimamente relacionado ao mecanismo de seleção por tamanho na formação de arcos que será visto no capítulo seguinte.

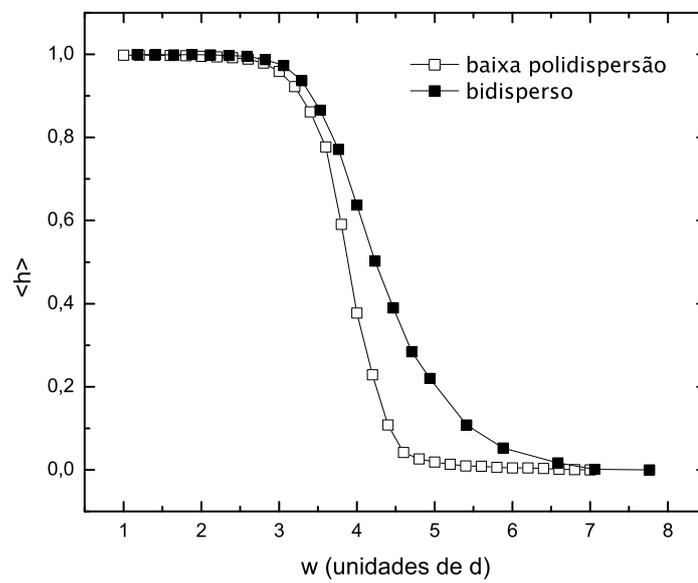


Figura 2.17: Valor esperado da altura h em função de w para pilhas de tamanho $L = 75d$ construídas com partículas de mesmo tamanho, a menos de uma pequena polidispersão, e pilhas de tamanho $L = 75d$ construídas com partículas de dois tamanhos distintos. Pode-se ver que o valor de w_t é maior quando se usa grãos bidispersos.

Capítulo 3

Segregação na formação de arcos

Uma propriedade peculiar de materiais granulares é a existência de arcos (2D) ou domos (3D), estruturas coletivas bem definidas formadas por grãos que se sustentam mutuamente. A presença dessas estruturas no interior de materiais granulares confere a eles características especiais e está associada a diversos fenômenos, por exemplo, segregação [69], engarrafamento [66] e propagação não-uniforme de forças [70]. Sobre a influência da existência de arcos nesses fenômenos e em uma variedade de outros fenômenos correlatos, há uma grande quantidade de trabalhos na literatura. Para uma visão geral, recomenda-se a leitura de Mehta [3]. As obras organizadas por Nakagawa e Luding [71] e por Appert-Rolland *et al.* [72] são boas referências para os avanços mais recentes na área. Sobre a formação de arcos em meios granulares, destaca-se ainda o trabalho teórico de Duran *et al.* [44], e os trabalhos experimentais de To e Lai [65] e de Garcimartín *et al.* [73].

O trabalho de Duran *et al.* [44] aborda a relação entre a formação de arcos e a segregação de grãos em um sistema sob vibração. Este capítulo é destinado à investigação dessa relação, mas no escoamento de grãos através de um orifício.

Segregação é um fenômeno em que componentes similares em uma mistura tendem a se agrupar após algum processo dinâmico. Materiais granulares exibem uma rica e ainda não muito bem compreendida fenomenologia nesse campo, que foi bastante estudada por meio de experimentos e simulações numéricas [9, 71]. O mecanismo principal associado ao fenômeno é o empuxo reverso [40, 38]. Verificou-se que um intruso — um grão com alguma característica diferente dos grãos do meio em que está imersa — em um meio granular sob vibração pode emergir ou afundar dependendo de determinados parâmetros como a razão entre os tamanhos ou densidades do intruso e dos grãos do meio, a frequência de vibração, etc.

Uma das primeiras tentativas de explicar a segregação em materiais granulares foi feita por Rosato *et al.* [40], que, usando o método de Monte Carlo, reproduziu o fenômeno que ficou conhecido como *Brazil Nut Effect*. Comerciantes estrangeiros que importavam do Brasil castanha-do-pará, chamada alhures de *Brazil Nut*, notaram que os contêineres carregando

as castanhas sempre traziam as maiores por cima. Após inicialmente se ter desconfiado da idoneidade dos comerciantes brasileiros, verificou-se que as castanhas maiores emergem durante o transporte da carga devido à vibração que este ocasiona, daí o efeito ter ficado conhecido por *Brazil Nut Effect*. Os autores do estudo observaram em suas simulações que um intruso maior mas de mesma densidade dos grãos do meio se move para cima quando o sistema é submetido a uma vibração vertical (Figura 3.1). Esse movimento de subida se deve à formação de um fluxo convectivo causado pelo atrito dos grãos com as paredes do recipiente.

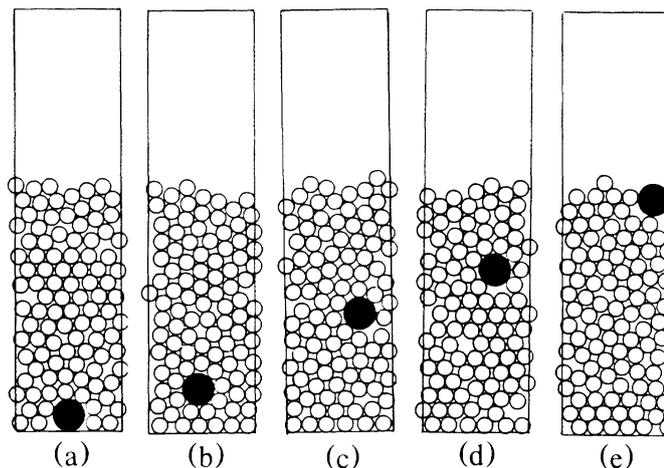


Figura 3.1: *Evolução de um empilhamento de grãos sujeito a vibração vertical obtida por uma técnica de simulação de Monte Carlo. Os quadros mostram em ordem sequencial a configuração do sistema. O empilhamento contém um grão maior que os demais grãos do meio, que se move para cima à medida que o tempo passa, demonstrando o fato experimental conhecido como Brazil Nut Effect. Retirado de Rosato et al. [40].*

No caso de intruso menos denso do que os grãos do meio, observou-se o fato notável de que ele afunda sob determinadas circunstâncias [38], contrariando a intuição expressa no princípio de Arquimedes, que diz que corpos sólidos imersos em um líquido mais denso devem boiar. Esse efeito de empuxo reverso foi também denominado *reverse Brazil nut effect* pelo fato de que o intruso, mesmo sendo maior que os grãos do meio, poderia afundar em vez de emergir. Apesar do esforço despendido em entender esses efeitos, eles ainda são tema de intenso debate [39, 74, 75].

Poucos trabalhos abordaram a questão da segregação no escoamento de misturas de materiais granulares sob ação da gravidade. É conhecido que grãos que diferem tanto em seus formatos quanto em tamanho são separados em camadas alternadas durante deposição sobre um recipiente semi-aberto, formando uma pilha estratificada [41, 42]. Um efeito de segregação também foi observado em descargas de grãos confinados em silos [43], sendo o mecanismo por trás do efeito aparentemente similar àquela relacionado à estratificação. Apesar do fenômeno de segregação em meios granulares sujeitos à vibração externa ter

tido muita atenção nos últimos anos, não houve muito avanço no entendimento dos mecanismos responsáveis pela segregação no escoamento de grãos sob ação da gravidade. Excluindo o trabalho de Duran *et al.* [44], que mostra a importância que os arcos possuem no movimento ascendente de intrusos em meios sob vibração, não há na literatura qualquer outro estudo que relacione a existência de arcos e o processo de segregação.

Com vistas a preencher essa lacuna, parte do presente trabalho se destina à investigação da composição dos arcos formados durante o processo de descarga de empilhamentos abertos constituídos de duas espécies distintas de grãos. O estudo gerou um artigo [76], que foi publicado recentemente. Essa investigação foi um desdobramento do trabalho acerca da transição de engarrafamento em empilhamentos abertos, cujos resultados estão relatados no Capítulo 2. Naquela ocasião, fez-se uma comparação entre a curva de transição para pilhas levemente polidispersas e aquela para pilhas bidispersas. Foi observado que a concentração de grãos grandes nos arcos que bloqueavam o escoamento nas pilhas bidispersas era sistematicamente maior que a concentração de grãos pequenos. Nesse sentido, buscou-se verificar se esse efeito era realmente uma característica intrínseca do processo de formação de arcos no interior de empilhamentos granulares e, se fosse esse o caso, quantificar tal efeito. Além disso, com o objetivo de saber se esse mecanismo de seleção é apenas um efeito geométrico, foi feito um estudo semelhante com empilhamentos constituídos de grãos de mesmo tamanho mas com densidades distintas.

A seguir, é descrita a metodologia usada no estudo. Na Seção 3.2, são apresentados os resultados provenientes das simulações de pilhas constituídas de grãos bidispersos em tamanho e a Seção 3.3 é dedicada à apresentação dos resultados relativos às pilhas de grãos bidispersos em densidade.

3.1 Metodologia

Simulações da construção e descarga por um orifício de empilhamentos abertos compostos de uma mistura de grãos diferindo ou em tamanho ou em densidade são realizados seguindo o mesmo procedimento usado para o estudo da transição de engarrafamento descrito no capítulo anterior.

Desta vez, contudo, o interesse se volta para a composição dos arcos que eventualmente bloqueiam o escoamento de grãos, de modo que apenas aquelas amostras em que um arco interrompe o fluxo de grãos são analisadas.

Foi desenvolvido um algoritmo que identifica o arco que se forma sobre o orifício — o código do algoritmo em C está transcrito no Apêndice A. O algoritmo funciona da seguinte maneira: primeiro, ele busca o grão localizado na posição mais baixa dentro de uma faixa vertical de $1,0d$ de largura no centro da pilha (Figura 3.2a); se a pilha tiver sido destruída, tal grão não será encontrado, uma vez que essa faixa estará vazia; caso

contrário, o grão encontrado fará parte do arco que impediu a pilha de ser completamente destruída; a partir desse primeiro grão, o algoritmo identifica separadamente o ramo à sua direita e à sua esquerda; isso é feito buscando-se o grão que esteja em contato com o primeiro e que esteja localizada à direita (esquerda) e mais abaixo na pilha (Figura 3.2b); repete-se então este procedimento considerando-se os contatos do novo grão identificado até encontrar o último grão de cada ramo, que estará necessariamente em contato com pelo menos um grão da base (Figura 3.2c).

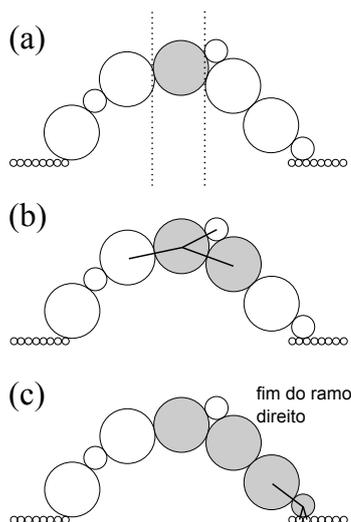


Figura 3.2: Desenho esquemático que mostra o funcionamento do algoritmo de identificação do arco que se forma sobre o orifício. Primeiro (a), localiza-se o grão mais próximo à base na faixa central da pilha. Em seguida (b), o algoritmo inicia a identificação do ramo direito do arco buscando-se o grão que esteja em contato e à direita do primeiro grão e que esteja mais abaixo na pilha. (c) Repete-se esse procedimento considerando-se os contatos da novo grão identificado até encontrar o último grão do ramo direito, que terá como contato pelo menos um grão da base.

As pilhas são construídas sobre uma base de tamanho $L = 75d$. Dois diferentes tipos de pilha foram simulados: pilhas constituídas de grãos bidispersos em tamanho e pilhas constituídas de grãos bidispersos em densidade. Na Figura 3.3, amostras representativas de cada tipo antes e após a descarga por um orifício de largura $w = 3,0d$ são exibidas. Ambas as amostras foram construídas a partir de misturas com uma proporção de um para um entre as espécies de grão presentes. Os arcos gerados logo acima do orifício durante a descarga estão ampliados e realçados na figura. Nota-se a ocorrência de regiões côncavas no arco, um fato que apesar de contra-intuitivo, já foi relatado na literatura [73].

3.2 Bidispersão no diâmetro

No caso de pilhas formadas de grãos bidispersos com relação ao tamanho, os diâmetros são escolhidos aleatoriamente entre dois valores, $d_1 = 0,75d$ e $d_2 = 1,25d$, e a densidade

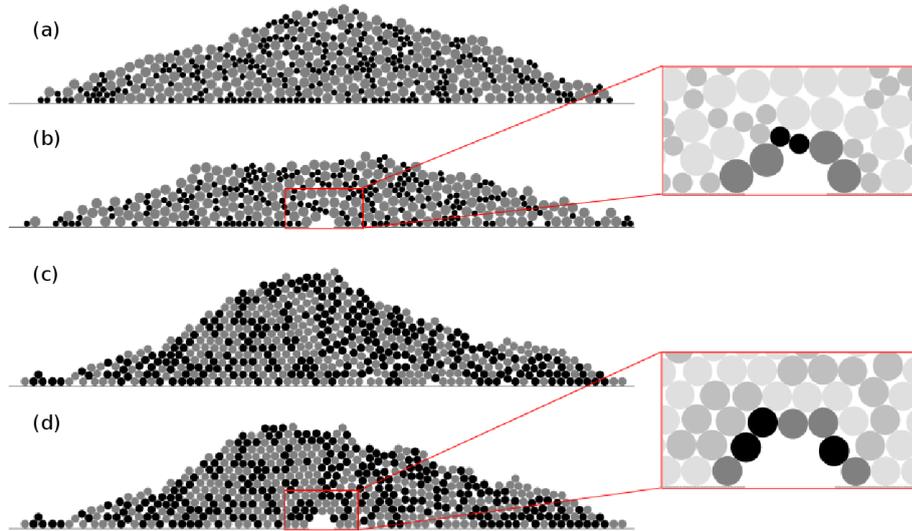


Figura 3.3: (a) Amostra representativa de uma pilha construída a partir de grãos bidispersos em tamanho. (b) Pilha resultante da descarga da amostra exibida em (a) através de um orifício de largura $w = 3,0d$ (a cor preta representa os grãos pequenos). (c) Amostra representativa de uma pilha construída a partir de grãos bidispersos em densidade. (d) Pilha resultante da descarga da amostra exibida em (c) através de um orifício de largura $w = 3,0d$ (a cor preta representa os grãos menos densos). Os arcos gerados logo acima do orifício durante a descarga estão ampliados e realçados em cada caso.

é a mesma para todos os grãos. O diâmetro menor é escolhido com uma probabilidade p_s que irá determinar a proporção entre os dois tipos de grão na pilha final. Essa proporção é quantificada pelo parâmetro q_s , que é definido simplesmente como sendo a razão entre o número de grãos pequenos e o número total de grãos em um dado conjunto de grãos.

Uma primeira observação é que o processo de deposição em si induz um certo grau de segregação. Os grãos maiores tendem a se concentrar nas camadas superficiais da pilha, conforme pode ser visto na Figura 3.4. A figura mostra um mapa representando a variação espacial do parâmetro q_s no caso de uma mistura inicial com $p_s = 0,8$. A região central é rica em grãos pequenos — $q_s \approx 0,8$ — quando comparada com as bordas, onde $q_s \approx 0,5$. Esse efeito está relacionado ao mecanismo de estratificação reportado por Makse *et al.* [41] e mencionado anteriormente. Na Figura 3.5, são exibidos cortes horizontais do mapa em três diferentes alturas evidenciando esse comportamento.

Foi feita uma comparação entre o valor de q_s para a pilha toda e o valor de q_s para o arco que se forma sobre o orifício. Naturalmente, o valor de q_s para a pilha é uma média apenas sobre as amostras que tiveram o escoamento interrompido por um arco. A Figura 3.6 mostra o gráfico de q_s em função da largura do orifício w para a pilha toda e para os arcos isoladamente. A figura também indica o valor de p_s usado para obter a mistura usada na deposição. Nota-se que o valor de q_s é ligeiramente superior ao valor de p_s . Essa diferença se explica pelo fato dos grãos maiores rolarem com mais facilidade sobre a superfície do que os grãos pequenos durante o processo de deposição, sendo por isso eliminados em maior número pelas extremidades. De fato, há uma diferença entre a mistura inicial e a pilha formada após a etapa de deposição, que naturalmente se mantém

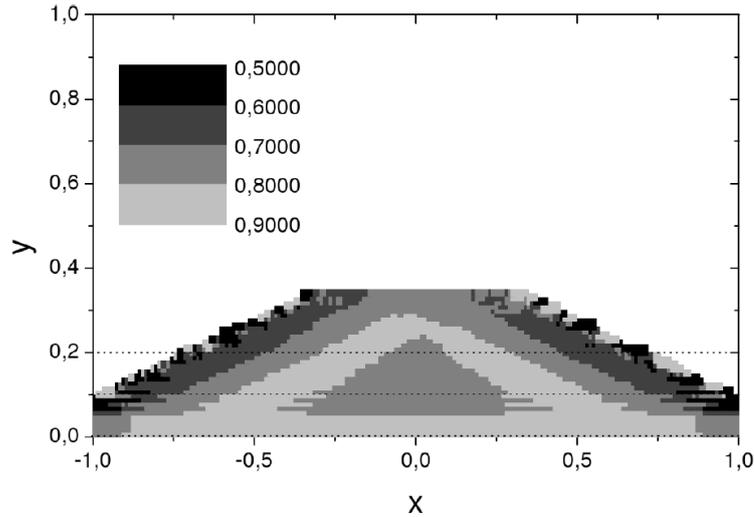


Figura 3.4: Mapa em tons de cinza da pilha de grãos bidispersos em tamanho representando a variação espacial do valor médio do parâmetro q_s . A mistura inicial dos grãos a partir da qual as pilhas são construídas é feita com $p_s = 0,8$. O parâmetro q_s é calculado sobre um quadrado de lado igual a $5d$. As regiões mais escuras possuem valores mais baixos de q_s , isto é, são mais pobres em grãos pequenos.

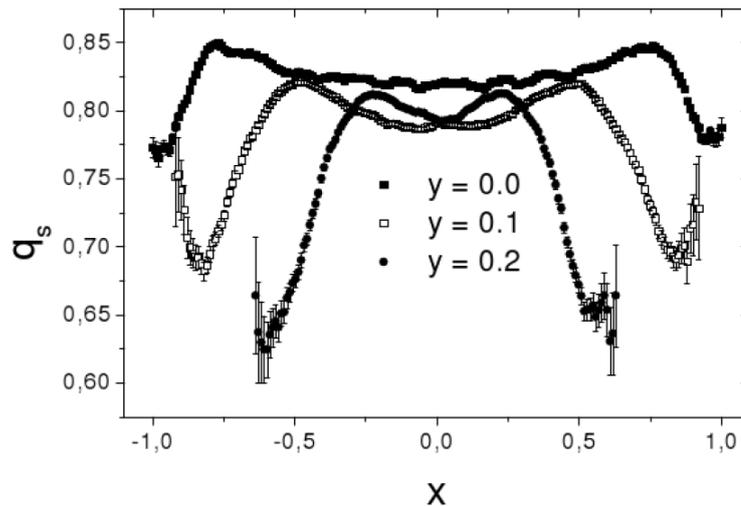


Figura 3.5: Cortes horizontais do mapa exibido na Figura 3.4 em três diferentes alturas $y = 0$, $y = 0,1$ e $y = 0,2$, indicadas no mapa pelas linhas tracejadas. O eixo vertical representa a variável q_s e o eixo horizontal a posição horizontal na pilha. Cada gráfico representa a grandeza q_s em função da posição horizontal em uma altura da pilha, que está indicada na legenda.

ou até mesmo se amplia após a descarga.

A principal característica observada na Figura 3.6 é o fato de que o arco possui um valor mais baixo de q_s quando comparado com a pilha toda. O valor de q_s para o arco diminui com a largura do orifício w , enquanto o q_s da pilha permanece aproximadamente constante. Esse resultado sugere que o mecanismo de formação de arco seleciona preferencialmente os grãos maiores para constituí-lo, sendo tão eficaz quanto maior for o valor de w . A heterogeneidade inicial da pilha devido ao processo de deposição não explica esse efeito,

uma vez que o parâmetro q_s não flutua significativamente na região central da pilha logo acima do orifício. Os grãos que constituirão o arco se localizam nessa região, pois, especialmente no caso de orifícios largos, a maioria dos arcos se desenvolve no início da descarga (Figura 3.7). Esse efeito está presente em descargas de pilhas construídas com diferentes valores de p_s . Para $p_s = 0,5$, a discrepância entre os valores de q_s da pilha e do arco é mais pronunciada. Da observação de que a região central da pilha é mais rica em grãos pequenos, pode-se realmente afirmar que o mecanismo subjacente à formação de arcos é de fato o responsável pelo efeito de seleção.

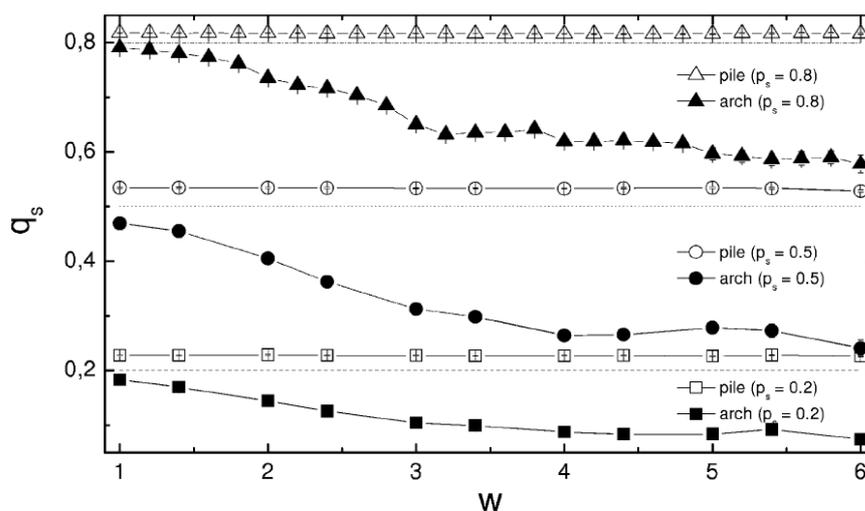


Figura 3.6: Valor esperado de q_s para a pilha após a descarga (símbolos vazios) e para o arco (símbolos cheios). São apresentados gráficos obtidos de pilhas com três diferentes valores da probabilidade de sorteio, $p_s = 0, 2$, $p_s = 0, 5$ e $p_s = 0, 8$. Esses valores estão indicados pelas linhas tracejadas.

Esse resultado é de certa forma intuitivo. A probabilidade de um arco constituído de n grãos se formar decresce rapidamente à medida que n aumenta [77, 78]. Então, é mais provável que um arco formado por poucos grãos grandes bloqueie o escoamento no orifício do que um arco formado por muitos grãos pequenos. À medida que w aumenta, o tamanho do arco necessário para cobrir o orifício e interromper o escoamento deverá necessariamente aumentar, aumentando por conseguinte a probabilidade de que haja maior preponderância de grãos grandes em sua composição. Era esperado então esse comportamento qualquer que fosse a composição inicial da mistura usada na construção das pilhas.

Cabe aqui uma diferenciação entre o regime caracterizado por valores pequenos de w e aquele caracterizado por valores elevados de w . À medida que w aumenta, a quantidade de amostras que apresentam uma descarga significativa reduz drasticamente dentro do universo de amostras que desenvolvem um arco sobre o orifício. Não apenas a quantidade, mas a própria distribuição do tamanho das descargas sofre uma mudança qualitativa

com a variação de w , como pode ser visto na Figura 3.7. Para todos os valores de w cuja distribuição das descargas é exibida, aproximadamente 70% dos eventos de engarrafamento ocorrem antes que 15 grãos atravessem o orifício. Engarrafamentos tardios se tornam ainda mais escassos com o aumento de w e, para $w = 6d$, todas as descargas são interrompidas antes que 25 grãos deixem o sistema.

De fato, como relatado no capítulo anterior, para w maior do que um determinado valor w_t , as pilhas não sobrevivem à descarga, excetuando-se algumas poucas amostras em que há somente um pequeno ou mesmo nenhum escoamento após a abertura do orifício. Nesse último caso, o arco já é formado no processo de construção da pilha e as condições para o engarrafamento estão presentes antes da abertura do orifício. Esse pequeno escoamento é tão somente a queda de grãos que estão abaixo do arco e que perdem a sustentação imediata dos grãos da base removidas. Se, no entanto, a abertura do orifício provoca uma instabilidade que perpassa toda a pilha, um eventual arco que se forme não será capaz de interromper o fluxo de grãos através do orifício, e o escoamento prossegue até o colapso da pilha.

Então, para valores grandes de w , a segregação na formação de arcos é entendida como uma seleção estatística entre realizações aleatórias de arcos ocorridas no processo de construção das pilhas. Por outro lado, para valores pequenos de w , a dinâmica do processo de descarga desempenha papel relevante na segregação pois, como as distribuições na Figura 3.7 indicam, em muitas amostras o arco se desenvolve durante a descarga. O efeito de segregação observado possui, dessa forma, uma componente de natureza dinâmica e uma componente de natureza estatística, que serão abordadas individualmente em trabalhos futuros.

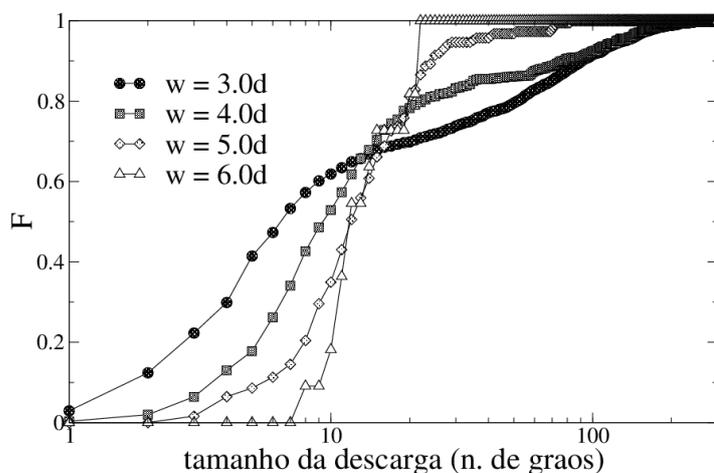


Figura 3.7: Distribuição acumulada F do tamanho das descargas para as pilhas construídas com $p_s = 0,8$. Apenas as amostras que apresentaram engarrafamento foram consideradas.

3.3 Bidispersão na densidade

No caso de bidispersão em relação à densidade, o diâmetro dos grãos é distribuído uniformemente em torno do valor médio, com um desvio padrão relativo de 5% para evitar efeitos de cristalização. A densidade é escolhida aleatoriamente entre dois valores: $\rho = 1$ e $\rho = 10$, no sistema de unidades apresentado no Capítulo 1. Cada um dos valores possui 50% de chance de ser escolhido, produzindo na média uma mistura de um para um entre os dois tipos de grão. Analogamente ao caso de bidispersão no tamanho, é introduzido um parâmetro q_d para quantificar a proporção entre os dois tipos em um dado conjunto de grãos, que é definido como a razão entre o número de grãos leves e o número total de grãos do conjunto.

Na Figura 3.8, são exibidos os gráficos de q_d em função de w para as pilhas engarrafadas e para os arcos isoladamente. Nota-se que há uma pequena discrepância de q_d em relação ao valor da mistura inicial de 0,5, que, curiosamente, é da mesma ordem daquela observada no caso de bidispersão no tamanho. Esse valor é aproximadamente igual ao valor de q_d que resulta da etapa de construção. Isso significa que a perda de grãos leves é maior que a de grãos pesados durante a deposição, um fato que pode ser atribuído à maior mobilidade das grãos leves, que são facilmente aceleradas e, por isso, tem mais chance de escapar do sistema.

Para orifícios pequenos, os grãos pesados têm uma leve preferência na constituição do arco. Como mostra a Figura 3.9, nesse regime o tamanho da descarga das amostras engarrafadas possui uma distribuição mais espalhada, indicando uma maior relevância da dinâmica de escoamento na formação do arco. Os grãos leves conseguem escapar com mais facilidade de configurações quase-estáveis, aumentando a probabilidade dos grãos pesados no arco. É um efeito similar ao empuxo reverso observado em sistemas granulares sob vibração, em que a vibração externa é substituída pelo escoamento intermitente de grãos através do orifício. Esse escoamento intermitente é causado justamente por configurações de arco quase-estáveis candidatas a bloquear o fluxo de grãos. Quando um desses arcos instáveis se desfaz, é gerada uma onda de descompressão ascendente, que provoca uma zona de baixa fração sólida e drena para orifício os grãos com elevada mobilidade. Os grãos pesados são mais lentos, o que aumenta sua chance de formar um arco estável subsequente.

No caso de orifícios grandes, comportamento contrário é observado, isto é, é mais provável a presença de grãos leves no arco. Nesse regime, a segregação está ligada a uma seleção estatística entre os arcos pre-existentes provenientes do processo de construção, uma vez que a distribuição do tamanho das descargas é concentrado em torno de valor pequeno (Figura 3.9). A maior mobilidade dos grãos leves não contribui de forma alguma para a segregação, pois, na maioria das amostras, o arco já está formado antes da descarga se iniciar.

Para entender esse comportamento, é importante lembrar que a constante de mola e o coeficiente de atrito da interação entre os grãos são os mesmos para ambos os tipos de grão. Então, um arco constituído de grãos leves pode suportar mais facilmente uma carga externa porque apenas uma pequena fração da força de atrito e da força elástica disponíveis é usada para sustentar seu próprio peso. Em outras palavras, um arco constituído principalmente de grãos menos densos, por ser mais leve, pode sustentar uma carga externa maior. É esperado que esse efeito tenda a se acentuar com o aumento de w porque a diferença entre o peso de arcos compostos somente por grãos leves e o peso de arcos compostos somente por grãos pesados é proporcional ao número de grãos no arco.

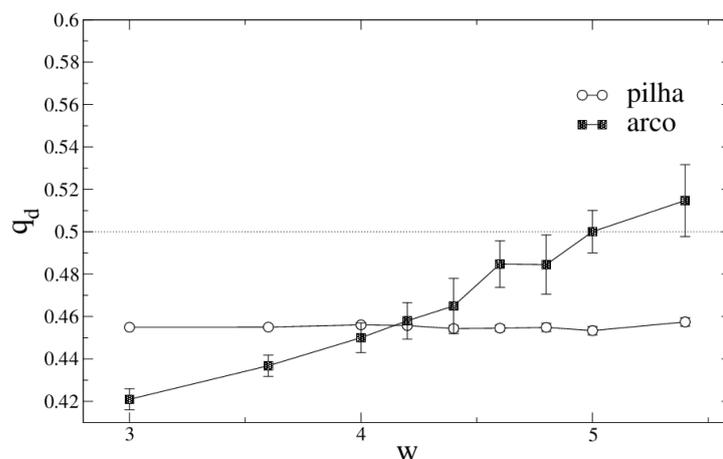


Figura 3.8: Valor do parâmetro q_d em função de w . Os símbolos vazios representam q_d calculado sobre toda a pilha na configuração de equilíbrio após a descarga, os símbolos cheios representam o valor de q_d do arco e a linha indica o valor de q_d da mistura inicial usada na deposição.

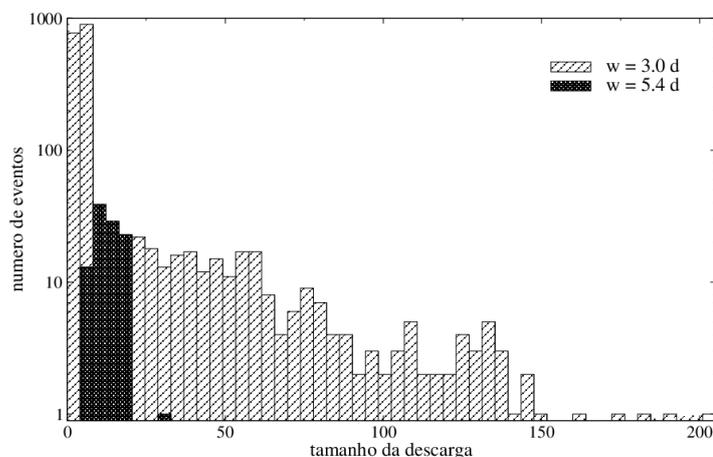


Figura 3.9: Histograma do tamanho das descargas s para $w = 3.0d$ and $w = 5.4d$.

Como no caso de bidispersão no tamanho, as pilhas já apresentam um certo grau de heterogeneidade após o processo de construção. Como mostra a Figura 3.10, as regiões mais altas próximo à superfície possuem uma concentração maior de grãos leves, provavelmente por causa de sua baixa inércia. Durante a deposição, um grão leve que atinja a pilha em um ângulo crítico é mais facilmente aprisionado em uma posição localmente estável. Antes da pilha atingir o ângulo crítico, a superfície é mais achatada e todos os grãos indiscriminadamente são presos na posição em que eles caem pelos que vão sendo depositados em sequência. Isso explica a maior homogeneidade no interior da pilha.

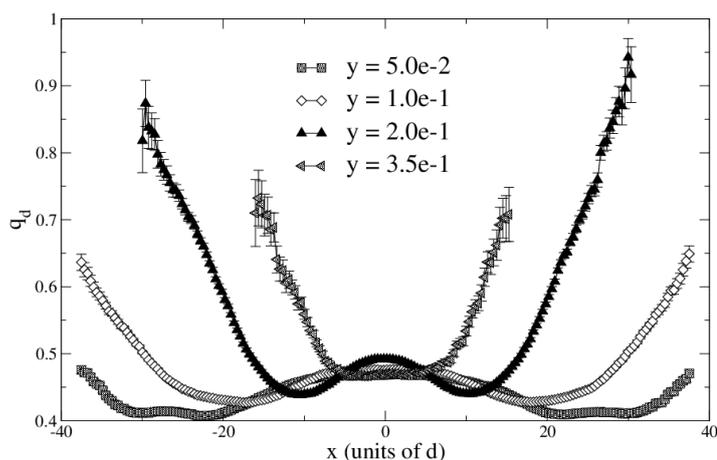


Figura 3.10: Parâmetro q_d em função da posição horizontal x para alguns valores de y .

A Figura 3.11 mostra uma ampliação da região próxima ao orifício dos gráficos apresentados na Figura 3.10. Nota-se que o parâmetro q_d se mantém próximo à 0,47 e que a flutuação espacial não excede o valor de 0,02. A flutuação amostral, representada pela barra de erro, é ainda mais baixa, da ordem de 10^{-3} . Como as flutuações nas proximidades do orifício são menores do que a diferença entre os valores de q_d para o arco e para a pilha, $|q_d^{(arch)} - q_d^{(pile)}| \sim 10^{-1}$, pode-se afirmar que a segregação está associada apenas a mecanismos envolvidos com a formação de arcos. Mesmo se for considerada uma região mais ampla da pilha, a diminuição de q_d para o arco vai no sentido inverso da variação espacial de q_d , que aumenta com a distância ao orifício.

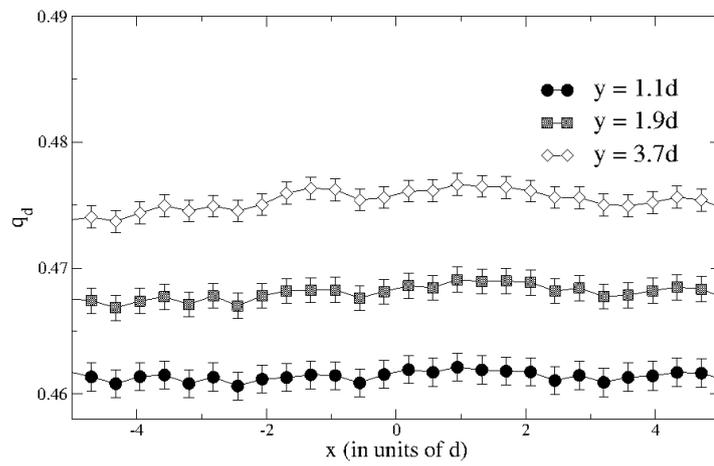


Figura 3.11: *Visão ampliada da vizinhança do orifício nos gráficos da Figura 3.10.*

Capítulo 4

Resistência ao Rolamento

Neste capítulo, serão apresentados resultados referentes à transição de engarrafamento levando-se em consideração um ingrediente adicional no modelo de interação entre os grãos. Além da força elástica, do amortecimento e do atrito estático, acrescenta-se ao modelo um termo de resistência ao rolamento. A inclusão desse termo se mostrou importante na reprodução de algumas propriedades de sistemas granulares, como o ângulo de repouso em empilhamentos abertos [51], a ocorrência de bandas de cisalhamento em testes de deformação [15] e os diversos tipos de falhas observadas em materiais granulares [52]. Uma vez que o principal efeito da resistência ao rolamento é tornar mais estáveis as estruturas granulares, imaginou-se que sua consideração pudesse resultar em uma mudança drástica na transição de engarrafamento, podendo até mesmo extingui-la. Conforme será visto, essa expectativa não se confirmou, embora tenha havido uma alteração no valor de w_c em relação às simulações que não levaram em conta a resistência ao rolamento.

4.1 Motivação

A resistência ao rolamento surge devido a diversos fatores, entre os quais o principal é a deformação dos grãos na região em contato. Além da deformação, microdeslizamentos, deformações plásticas, adesão superficial e a geometria do grão são outras causas dessa interação [79]. No caso em estudo, será considerada apenas a influência da deformação na implementação da resistência ao rolamento, por serem os outros fatores irrelevantes para o tipo de grão que compõe o sistema — grãos circulares, macroscópicos, homogêneos, elásticos, com constante elástica e coeficiente de atrito uniformes.

Para se entender por que a deformação provoca essa resistência, pode-se imaginar as situações ilustradas na Figura 4.1. Ao se aplicar uma força lateral sobre um corpo, induzindo-o a rolar, a existência de uma área de contato finita entre o corpo e a superfície sob ele faz que a tensão na região do contato se distribua de forma heterogênea, dando

origem a um torque contrário ao torque inicial (lado direito da Figura 4.1). Uma roda perfeitamente indeformável tocaria a superfície em apenas um ponto. A força de compressão entre as superfícies estaria concentrada em um único ponto e direcionada ao longo da linha que passa pelo centro da roda, não produzindo torque algum (lado esquerdo da Figura 4.1).

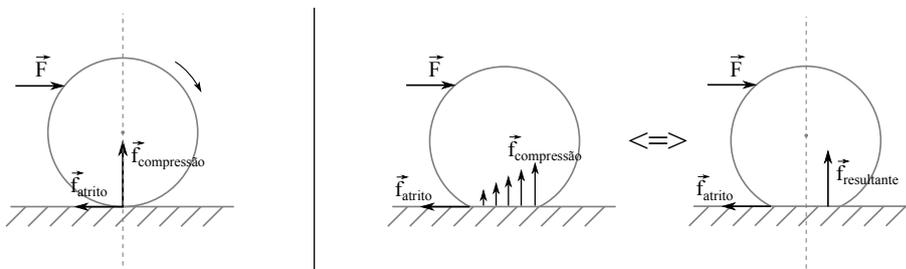


Figura 4.1: Diagramas de forças de um corpo esférico sob ação da gravidade e de uma força lateral \vec{F} . Se o corpo é perfeitamente indeformável (diagrama à esquerda) a força de compressão normal está concentrada em único ponto localizado exatamente abaixo do centro da esfera. Como a força de compressão é vertical, ela não produz torque algum em relação ao centro, e o corpo rola para qualquer valor não-nulo de F . Se, por outro lado, o corpo é deformável (diagramas à direita), a força de compressão normal se distribui ao longo de toda a área deformada. O modo como a força se distribui depende do vetor \vec{F} bem como do ponto em que a força é aplicada. Em geral, a distribuição da força de compressão é heterogênea, o que gera uma força resultante deslocada em relação à reta vertical que passa pelo centro do corpo, dando origem a um torque contrário àquele causado por \vec{F} e pela força de atrito.

Além de acrescentar um detalhe importante na interação entre sólidos macroscópicos e assim tornar o modelo mais realista, a adição do termo de resistência ao rolamento permite ter uma idéia do comportamento de sistemas de partículas cujo formato se afasta do formato circular, conforme mostra o estudo conduzido por Estrada *et al.* [80]. Nesse estudo, os autores traçaram um paralelo entre dois sistemas distintos: um sistema de partículas circulares cuja interação contém o termo de resistência ao rolamento e um sistema de partículas poligonais regulares em que não há resistência ao rolamento na interação entre elas. Foi demonstrado que há uma relação entre um dos parâmetros que caracterizam a resistência ao rolamento no primeiro sistema — a constante de rolamento, k_r , que aparece na implementação numérica do modelo e será definida adiante — e o número de lados do polígono regular que descreve o formato das partículas no segundo sistema. Essa analogia permite a obtenção de previsões sobre o comportamento de um sistema de partículas poligonais por meio da simulação de partículas circulares com resistência ao rolamento, que são computacionalmente muito mais simples de tratar.

4.2 Modelo

A resistência ao rolamento é incluída no modelo como um torque, τ_{rr} , que se opõe ao torque ocasionado pelas demais forças de contato. Esse torque depende do comprimento de contato l_c (Figura 1.2) e do deslocamento angular entre as partículas devido ao rolamento δ_{\odot} . Assim como o atrito estático, a resistência ao rolamento apresenta uma região plástica, que se apresenta como uma saturação do torque quando δ_{\odot} ultrapassa um certo valor crítico. A expressão para τ_{rr} é dada por

$$\tau_{rr} = \begin{cases} -k_r \delta_{\odot}, & k_r |\delta_{\odot}| \leq \mu_r f_{el} \\ -\frac{\delta_{\odot}}{|\delta_{\odot}|} \mu_r f_{el}, & k_r |\delta_{\odot}| > \mu_r f_{el} \end{cases}, \quad (4.1)$$

onde $k_r = k_n l_c^2$ e $\mu_r = \mu l_c$. Essas relações foram obtidas por Jiang *et al.* [53] da análise de um modelo micro-mecânico para o contato entre grãos (Figura 4.2). O modelo considera a superfície de contato composta por um conjunto de molas e amortecedores. A rotação de um dos grãos em torno de seu centro produz uma deformação das molas linear ao longo da superfície. À medida que o ângulo de rotação aumenta, a superfície em contato diminui provocando a quebra de algumas molas. Isso se traduz na saída do regime elástico da resistência ao rolamento e subsequente saturação do torque de rolamento. O modelo prevê uma transição suave entre o regime elástico e o regime plástico, em que o torque de rolamento obedece $\tau_{rr} = -\mu_r f_{el} [3 - 2(\delta_{\odot}/\delta_{\odot,0})^{-0,5}]$, para $k_r |\delta_{\odot}| > \mu_r f_{el}$, sendo $\delta_{\odot,0}$ uma constante. Essa expressão pode ser aproximada pela equação 4.1 para fins computacionais, conforme os autores do estudo propõem.

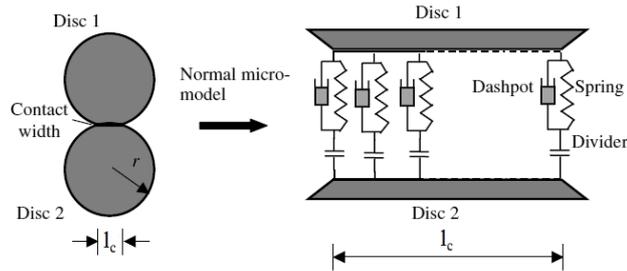


Figura 4.2: Ilustração do modelo micro-mecânico proposto por Jiang *et al.* [53] para descrever a resistência ao rolamento no contato. O contato entre os grãos é composto por um conjunto de elementos mecânicos básicos — mola, amortecedor e separador. Se os grãos se aproximam ou se afastam sem girar, a deformação é a mesma em todas as molas e não há torque. Se, por outro lado, os grãos giram em torno seus centros com velocidades angulares distintas, as molas de um lado do contato se deformam mais que as molas do outro e surge um torque que se opõe ao movimento. Retirado de [53].

Assim como o atrito estático, a resistência ao rolamento depende da posição dos grãos no momento em que o contato se forma. Ela é calculada então, usando a Equação 4.1, da

mesma forma que o atrito estático. O valor de τ_{rr} é a soma das quantidades $-k_r[\delta_{\odot}]_{t \rightarrow t+\Delta t}$ em cada passo de tempo desde a formação do contato, com a restrição de que $|\tau_{rr}|$ está limitado por $\mu_r f_{el}$:

$$\tau_{rr}(t + \Delta t) = \tau_{rr}(t) - k_r[\delta_{\odot}]_{t \rightarrow t+\Delta t}, \quad |\tau_{rr}| \leq \mu_r f_{el}. \quad (4.2)$$

Na Equação 4.2, $[\delta_{\odot}]_{t \rightarrow t+\Delta t} = (\omega_j - \omega_i)\Delta t$ é a deformação devido ao rolamento que ocorre durante o intervalo entre t e $t + \Delta t$. Ao contrário da deformação tangencial, δ_{\odot} é obtida da diferença dos deslocamentos angulares e independe do movimento de translação dos grãos. Grãos, cujos centros estejam fixos, que giram com a mesma velocidade angular apresentam movimento de deslizamento puro, e se eles giram com a mesma velocidade angular mas com sentidos contrários, há apenas rolamento (Figura 4.3).

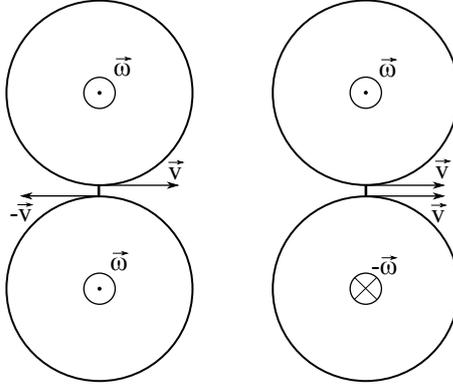


Figura 4.3: Ilustração que mostra os dois casos extremos em que há ou deslizamento puro (esquerda) ou rolamento puro (direita) nas superfícies em contato. O vetor \vec{v} representa a velocidade do ponto de contato em ambas as superfícies.

4.3 Resultados

Foram realizados os mesmos experimentos numéricos descritos no Capítulo 2, mas agora considerando a resistência ao rolamento no modelo para a interação. Dois casos foram estudados: o caso mais realista, em que o valor da constante de rolamento varia de acordo com o modelo proposto por Jiang *et al.* [53], $k_r = k_n l_c^2$, e o caso em que a constante de rolamento assume um valor fixo $k_r = k_n 0,0025d^2$. No segundo caso, o objetivo é usar o parâmetro k_r para simular grãos não-circulares, com base no estudo feito por Estrada *et al.* [80]. Esse valor de k_r corresponde a um conjunto de grãos irregulares cujo número de lados está entre 3 e 4. Esse valor também foi usado no trabalho de Charalampidou *et al.* [50] para simular adequadamente uma mistura grãos bidimensionais — cilindros circulares e retangulares — sob compressão.

Em ambos os casos, os procedimentos adotados para a preparação das amostras — estrutura da base, condições iniciais, critério de parada da deposição, critérios de equilíbrio e procedimentos de descarga — foram os mesmos adotados no caso $k_r = 0$, discutido no Capítulo 2. A mesma análise foi feita para obter a largura crítica w_c em que o sistema sofre a transição para a fase de escoamento contínuo.

A Figura 4.4 exibe a dependência da largura de transição w_t com o tamanho do sistema para os dois casos e para o caso $k_r = 0$. Há um deslocamento vertical positivo dos gráficos para $k_r \neq 0$ em relação ao gráfico em que $k_r = 0$. Como era esperado, a largura de transição sofre uma elevação quando se adiciona o termo de resistência ao rolamento, indicando que a pilha se torna mais estável. No entanto, o comportamento de w_t com o tamanho do sistema continua indicando a existência da transição de engarrafamento. No limite $L \rightarrow \infty$, curvas de ajuste aos dados simulacionais fornecem $w_c = 5,3 \pm 0,1$, para $k_r \propto l_c^2$, e $w_c = 7,6 \pm 0,2$, para k_r fixo.

Esse é ainda um resultado preliminar, que parece indicar que a transição de engarrafamento persiste com adição de um termo de atrito de rolamento ao modelo do grãos. No momento em que esta tese é escrita, simulações estão sendo realizadas com o objetivo de obter mais pontos no gráfico de w_t em função de L .

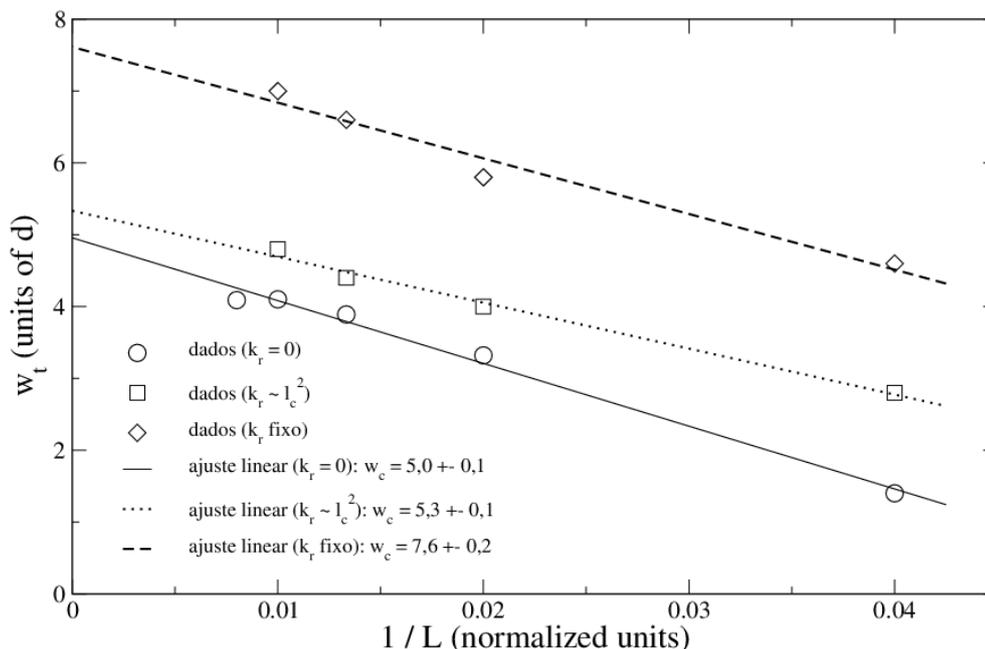


Figura 4.4: Gráficos da largura de transição w_t em função do recíproco do tamanho do sistema $1/L$ para modelos com resistência ao rolamento e sem resistência ao rolamento. Conforme as legendas indicam, os símbolos representam os dados obtidos das simulações numéricas e as linhas são as curvas de ajuste, que fornecem os valores de w_c .

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Por meio de simulações de dinâmica molecular, foram estudados a transição de engarrafamento em empilhamentos abertos de materiais granulares e a segregação de grãos na formação de arcos. Investigou-se também o efeito da resistência ao rolamento na transição de engarrafamento. O material granular simulado consiste de grãos circulares de espessura desprezível. O modelo usado para a interação entre os grãos leva em conta uma força de origem elástica, uma força de amortecimento e uma força de atrito estático. Posteriormente, acrescentou-se um termo de resistência ao rolamento com o fim de medir seu efeito no engarrafamento.

As simulações feitas com o objetivo de investigar a transição de engarrafamento e a segregação na formação de arcos consistem em descarregar, por meio de um orifício aberto na base, pilhas de grãos construídas seguindo um determinado procedimento de deposição.

Analisando o comportamento da altura média dos empilhamentos descarregados, pôde-se demonstrar a existência da transição de engarrafamento, tanto para o modelo mais simples, que não contém o termo de resistência ao rolamento, quanto para o modelo que incorpora esse detalhe. Essa inferência, que contraria conclusões recentes baseadas em estudos experimentais [35], se baseia no comportamento da largura de transição para o regime catastrófico w_t , que apresenta uma saturação no limite $L \rightarrow \infty$, aliado ao fato, também observado nos experimentos em silo, de que as descargas apresentam tamanho característico. É importante ressaltar porém que, no trabalho experimental mencionado, os empilhamentos eram confinados enquanto os resultados apresentados aqui se referem a empilhamentos abertos. Essa pode ser a causa da divergência, mas a comprovação dessa hipótese carece de estudos mais detalhados.

Em empilhamentos constituídos de uma mistura de grãos, foi observado um mecanismo de segregação na formação do arco que bloqueia o escoamento de grãos. Esse mecanismo se fez atuante tanto em misturas de grãos diferindo em tamanho quanto em misturas de grãos diferindo em densidade. No primeiro caso, os arcos são preferencialmente formados pelos grãos maiores devido ao fato de que é maior a probabilidade da ocorrência de arcos

com menos grãos. No segundo caso, a preferência é por grãos mais pesados se o orifício é pequeno e por grãos mais leves se o orifício é grande. A diferença de comportamento nos dois limites se deve à existência de dois regimes de escoamento distintos. Se o orifício é pequeno, muitas amostras apresentam escoamento intenso anterior à formação do arco, o que é mais raro para orifícios grandes, onde o arco se forma logo após a abertura do orifício ou não se forma mais.

Alguns projetos para o futuro são: investigar melhor a influência que a geometria do empilhamento exerce sobre a natureza da transição de engarrafamento, tentando reproduzir numericamente os resultados experimentais provenientes dos estudos em silos e estudando a transição em sistemas fechados por fronteiras periódicas; analisar a dinâmica da transição, ou seja, estudar como o escoamento evolui ao longo do tempo e como ele é interrompido, verificar se há efeitos de histerese, se o processo de engarrafamento é local ou se é resultado de um comportamento coletivo envolvendo toda a pilha; investigar a composição das cadeias de força em misturas de grãos após o escoamento sofrer um estrangulamento, para saber se o efeito de segregação observado na formação de arcos se estende às estruturas filamentosas responsáveis pela transmissão das tensões ao longo do material.

Referências Bibliográficas

- [1] R. M. Nedderman, *Statics and Kinematics of Granular Materials*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [2] H. Hinrichsen e D. E. Wolf, *The Physics of Granular Media*, (Wiley-VCH, Weinheim, 2004).
- [3] A. Mehta, *Granular Physics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [4] S. J. Antony, W. Hoyle e Y. Ding, *Granular Materials: Fundamentals and Applications*, (The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2004).
- [5] T. Halsey e A. Mehta, *Challenges in Granular Physics*, (World Scientific, New Jersey, 2002).
- [6] J. Duran, *Sands, Powders and Grains*, (Springer, Berlin, 1997).
- [7] F. Melo, P. B. Umbanhowar e H. L. Swinney, *Periodic, aperiodic, and transient patterns in vibrated granular layers*, *Physica A* **249**, 1-9 (1998).
- [8] I. Goldhirsch e G. Zanetti, *Clustering instabilities in dissipative gases*, *Physical Review Letters* **70**, 1619 (1993).
- [9] A. Kudrolli, *Size separation in vibrated granular matter*, *Reports on Progress in Physics* **67**, 209-247 (2004).
- [10] P. Tegzes, *Stability, Avalanches and Flow in Dry and Wet Granular Materials*, Tese de Doutorado, Universidade de Eötvös, 2002.
- [11] V. Frette, K. Christensen, A. Malthe-Sørensen, J. Feder, T. Jossang e P. Meakin, *Avalanche dynamics in a pile of rice*, *Nature* **379**, 49-52 (1996).
- [12] O. Ramos, E. Altshuler e K. J. Måløy, *Avalanche prediction in a self-organized pile of beads*, *Physical Review Letters* **102**, 078701 (2009).
- [13] R. A. Bagnold, *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes*, (Methuen, London, 1941).
- [14] O. Reynolds, *On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact*, *Philosophical Magazine Series 5* **20**, 469-481 (1885).

- [15] K. Iwashita e M. Oda, *Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM*, Journal of Engineering Mechanics **124**, 285292 (1998).
- [16] Bertrand Duplantier, Thomas C. Halsey e Vincent Rivasseau, *Glasses and Grains: Poincaré Seminar 2009*, (Springer, Basel, 2011).
- [17] G. Katgert e M. van Hecke, *Jamming and geometry of two-dimensional foams*, EPL **92**, 34002 (2010).
- [18] N. D. Denkov, S. Tcholakova, K. Golemanov e A. Lips, *Jamming in sheared foams and emulsions, explained by critical instability of the films between neighboring bubbles and drops*, Physical Review Letters **103**, 118302 (2009).
- [19] A. Kumar e J. Wu, *Structural and dynamic properties of colloids near jamming transition*, Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects **247**, 145151 (2004).
- [20] A. Fluerasu, A. Moussaid, A. Madsen e A. Schofield, *Slow dynamics and aging in colloidal gels studied by x-ray photon correlation spectroscopy*, Physical Review E **76**, 010401 (2007).
- [21] C. Teng e G. Xue, *Unjamming transition and cold flow of polymer chains*, Acta Polymerica Sinica **9**, 1001-1006 (2011).
- [22] C. Appert-Rolland, F. Chevoir, P. Gondret, S. Lassarre, J.-P. Lebacque e M. Schreckenberg, *Traffic and Granular Flow '07*, (Springer-Verlag, Berlin, 2009).
- [23] K. Bhattacharya e S. S. Manna, *Self-organized critical models of earthquakes*, Physica A **384**, 1520 (2007).
- [24] M. Bartolozzia, D. B. Leinweber e A. W. Thomas, *Scale-free avalanche dynamics in the stock market*, Physica A **370**, 132139 (2006).
- [25] K. Friston, M. Breakspear e G. Deco, *Perception and self-organized instability*, Frontiers in Computational Neuroscience **6**, 44 (2012).
- [26] W. L. Shew e D. Plenz, *The functional benefits of criticality in the cortex*, Neuroscientist **19**, 88-100 (2013).
- [27] A. L. Rodrigues e M. J. de Oliveira, *Continuous time stochastic models for vehicular traffic on highways*, Brazilian Journal of Physics **34**, 2A (2004).
- [28] H. M. Jaeger e S. R. Nagel, *Granular solids, liquids and gases*, Reviews of Modern Physics **68**, 1259-1273 (1996).
- [29] M. Schröter, S. Nägle, C. Radin e H. L. Swinney, *Phase transition in a static granular system*, EPL **78**, 44004 (2007).

- [30] M. G. Clerc, P. Cordero, J. Dunstan, K. Huff, N. Mujica, D. Risso e G. Varas, *Liquid-solid-like transition in quasi-one-dimensional driven granular media*, Nature Physics **4**, 249254 (2008).
- [31] A. Coniglio, A. Fierro, A. de Candia, M. Nicodemi, M. Tarzia e M. Pica Ciamarra, *Jamming in Dense Granular Media*, Lecture Notes in Physics: Jamming, Yielding, and Irreversible Deformation in Condensed Matter **688**, 53-68 (2006).
- [32] S. F. Edwards e R. B. S. Oakeshott, *Theory of powders*, Physica A **157**, 1080-1090 (1989).
- [33] M. E. Cates, J. P. Wittmer, J.-P. Bouchaud e P. Claudin, *Jamming, Force Chains, and Fragile Matter*, Physical Review Letters **81**, 1841-1844 (1998).
- [34] Kiwing To, Pik-Yin Lai e H. K. Pak, *Jamming of Granular Flow in a Two-Dimensional Hopper*, Physical Review Letters **86**, 71-74 (2001).
- [35] A. Janda, I. Zuriguel, A. Garcimartn, L. A. Pagnaloni e D. Maza, *Jamming and critical outlet size in the discharge of a two-dimensional silo*, EPL **84**, 44002 (2008).
- [36] I. Zuriguel, L. A. Pagnaloni, A. Garcimartín e D. Maza, *Jamming during the discharge of grains from a silo described as a percolating transition*, Physical Review E **68**, 030301 (2003).
- [37] I. Zuriguel, A. Garcimartn, D. Maza, L. A. Pagnaloni e J. M. Pastor, *Jamming during the discharge of granular matter from a silo*, Physical Review E **71**, 051303 (2005).
- [38] T. Shinbrot e F. J. Muzzio, *Reverse buoyancy in shaken granular beds*, Physical Review Letters **81**, 4365-4368 (1998).
- [39] D. A. Huerta e J.C. Ruiz-Suárez, *Vibration-induced granular segregation: a phenomenon driven by three mechanisms*, Physical Review Letters **92**, 114301 (2004).
- [40] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz e R. H. Swendsen, *Why the Brazil nuts are on top: size segregation of particulate matter by shaking*, Physical Review Letters **58**, 1038 (1987).
- [41] H. A. Makse, S. Havlin, P. R. King e H. E. Stanley, *Spontaneous stratification in granular mixtures*, Nature **386**, 379-382 (1997).
- [42] F. Klein, J. Benito, I. Ippolito e A. M. Vidales, *Segregation effects in rectangular piles built up by a moving injection device*, in Powders and Grains 2009, ed. by M. Nakagawa and S. Luding, AIP Conference Proceedings **1145**, 691-694 (2009).
- [43] A. Samadani, A. Pradhan e A. Kudrolli, *Size segregation of granular matter in silo discharges*, Physical Review E **60**, 7203-7209 (1999).

- [44] J. Duran, E. Kolb e L. Vanel, *Static friction and arch formation in granular materials*, Physical Review E **58**, 805 (1998).
- [45] N. Metropolis, *The beginning of the Monte Carlo method*, Los Alamos Science **15**, 125-130 (1987).
- [46] M. Jean, *The non-smooth contact dynamics method*, Computer Methods in Applied Mechanics Engineering **177**, 235-257 (1999).
- [47] S. Luding, *Models and Simulations of Granular Materials*, Tese de Doutorado, Universidade de Freiburg, 1994.
- [48] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [49] S. F. Pinto, M. S. Couto, A. P. F. Atman, S. G. Alves, A. T. Bernardes, H. F. V. de Resende e E. C. Souza, *Granular fingers on jammed systems: new fluidlike patterns arising in grain-grain invasion experiments*, Physical Review Letters **99**, 068001 (2007).
- [50] E.-M. Charalampidou, G. Combe, G. Viggiani e J. Lanier, *Mechanical behavior of mixtures of circular and rectangular 2D particles*, Powders and Grains 2009: Proceedings of the 6th International Conference on Micromechanics of Granular Media, AIP Conf. Proc., Vol. **1145** (2009).
- [51] Y. C. Zhou, B. D. Wright, R. Y. Yang, B. H. Xu e A. B. Yu, *Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation*, Physica A **269**, 536-553 (1999).
- [52] X. Li, X. Chu e Y. T. Feng, *A discrete particle model and numerical modeling of the failure modes of granular materials*, Engineering Computations: International Journal for Computer-Aided Engineering and Software **22**, 894-920 (2005).
- [53] M. J. Jiang, H.-S. Yu e D. Harris, *A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance*, Computers and Geotechnics **32**, 340357 (2005).
- [54] S. McNamara e W. R. Young, *Inelastic collapse and clumping in a one-Dimensional granular medium*, Physics of Fluids A **4**, 496 (1992).
- [55] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens e K. R. Wilson, *Computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: application to small water clusters*, The Journal of Chemical Physics **76**, 637-649 (1982).
- [56] M. P. Allen e D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, (Clarendon Press, Oxford, 1987).
- [57] H. Hertz, *On the contact of elastic solids*, Journal für die reine und angewandte mathematik **92**, 156-171 (1881).

- [58] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, (Pergamon Press, London, 1959).
- [59] P. A. Cundall e O. D. L. Strack, *A discrete numerical model for granular assemblies*, *Géotechnique* **29**, 47-65 (1979).
- [60] S. T. Thornton e J. B. Marion, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, (Brooks Cole, Belmont, 2004).
- [61] L. Verlet, *Computer 'experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules*, *Physical Review* **159**, 98-103 (1967).
- [62] A. P. F. Atman, P. Brunet, J. Geng, G. Reydellet, G. Combe, P. Claudin, R. P. Behringer e E. Clément, *Sensitivity of the stress response function to packing preparation*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **17**, S2391-S2403 (2005).
- [63] S. Zapperi, M. C. Miguel, P. Moretti e M. Zaiser, *Jamming and yielding of dislocations: from crystal plasticity to superconducting vortex flow*, *Lecture Notes in Physics: Jamming, Yielding, and Irreversible Deformation in Condensed Matter* **688**, 189-205 (2006).
- [64] A. J. Liu e S. R. Nagel, *Jamming is not just cool any more*, *Nature* **396**, 21-22 (1998).
- [65] K. To e P.-Y. Lai, *Jamming pattern in a two-dimensional hopper*, *Physical Review E* **66**, 011308 (2002).
- [66] C. F. M. Magalhães, J. G. Moreira e A. P. F. Atman, *Catastrophic regime in the discharge of a granular pile*, *Physical Review E* **82**, 051303 (2010).
- [67] S. S. Manna e D. V. Khakhar, *Internal avalanches in a granular medium*, *Physical Review E* **58**, R6935-R6938 (1998).
- [68] S. S. Manna e H. J. Herrmann, *Intermittent granular flow and clogging with internal avalanches*, *The European Physical Journal E* **1**, 341344 (2000).
- [69] J. Duran, J. Rajchenbach e E. Clément, *Arching effect model for particle size segregation*, *Physical Review Letters* **70**, 2431-2434 (1993).
- [70] Junfei Geng, D. Howell, E. Longhi, R. P. Behringer, G. Reydellet, L. Vanel, E. Clément e S. Luding, *Footprints in sand: the response of a granular material to local perturbations*, *Physical Review Letters* **87**, 035506 (2001).
- [71] M. Nakagawa e S. Luding, *Powders and Grains 2009: Proceedings of the 6th International Conference on Micromechanics of Granular Media: 1145 (AIP Conference Proceedings)*, (AIP Press, New York, 2009).
- [72] C. Appert-Rolland, F. Chevoir, P. Gondret, S. Lassarre, J.-P. Lebacque e M. Schreckenberg, *Traffic and Granular Flow '07*, (Springer, Berlin, 2009).

- [73] A. Garcimartín, I. Zuriguel, L. A. Pugnaloni e A. Janda, *Shape of jamming arches in two-dimensional deposits of granular materials*, Physical Review E **82**, 031306 (2010).
- [74] T. Shinbrot, *The brazil nut effect in reverse*, Nature **429**, 352-353 (2004).
- [75] Meheboob Alam, L. Trujillo e H. J. Herrmann, *Hydrodynamic theory for reverse brazil nut segregation and the non-monotonic ascension dynamics*, Journal of Statistical Physics **124**, 587-623 (2006).
- [76] C. F. M. Magalhães, J. G. Moreira e A. P. F. Atman, *Segregation in arch formation*, The European Physical Journal E **35**, 38 (2012).
- [77] L. A. Pugnaloni e G. C. Barker, *Structure and distribution of arches in shaken hardsphere deposits*, Physica A **337**, 428-442 (2004).
- [78] R. Arévalo, D. Maza e L. A. Pugnaloni, *Identification of arches in two-dimensional granular packings*, Physical Review E **74**, 021303 (2006).
- [79] J. Ai, J.-F. Chen, J. M. Rotter e J. Y. Ooi, *Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations*, Powder Technology **206**, 269282 (2011).
- [80] N. Estrada, E. Azéma, F. Radjai e A. Taboada, *Identification of rolling resistance as a shape parameter in sheared granular media*, Physical Review E **84**, 011306 (2011).

Apêndice A

Códigos das rotinas

A1. Rotina de deposição

A2. Rotina de descarga

A3. Rotina de identificação de arcos

A.1 Rotina de deposição

```
/* Implementacao do algoritmo Velocity-Verlet para simulacao de deposicao de graos
 *
 * Forca normal visco-elastica (Hertz em 2D e amortecimento critico)
 * Atrito estatico (mola tangencial a la Cundall-Strack)
 * Atrito de rolamento
 *
 */

#include <stdio.h>
#include <math.h>

#define NPAM 10000
#define NVIZM 60000

#define A 843314861
#define B 453816693
#define M 1073741824
#define Mi 1.0 / (double)M

#define doispi 2*3.14159265
```

```

#define max(A,B) ((A>B)?A:B)
#define min(A,B) ((A<B)?A:B)
#define abs(A) ((A<0)?(-A):A)

static int semente ;
static int id[NPAM] ;
static int listaviz[2] [NVIZM] ,listavizcont [NVIZM] ;
static int listacontp1[NVIZM] ,listacontp2[NVIZM] ,listancont [NPAM] ;
static int amostra,npal,npali,npaf,npat1,npat2,npc;
static int nvizpl,nviztot,ncontpl,nconttot,equil;
static int freqcalcviz,freqas,freqaff,freqdep;
static int it,npacont,npacont0,npacont01,npadesl,contpdep=0;

static double x[2] [NPAM] ,v[2] [NPAM] ,a[2] [NPAM] ;
static double teta[NPAM] ,vang[NPAM] ,aang[NPAM] ;
static double fpl[2] [NPAM] ,fpp[2] [NPAM] ,torque[NPAM] ;
static double xpr[2] [NPAM] ,vpr[2] [NPAM] ,apr[2] [NPAM] ;
static double tetapr[NPAM] ,vangpr[NPAM] ,aangpr[NPAM] ;
static double r[NPAM] ,ivmass[NPAM] ,ivmominercia[NPAM] ;
static double reacn[NVIZM] ,react [NVIZM] ,react0 [NVIZM] ;
static double vecunitij[2] [NVIZM] ,sobreposij [NVIZM] ;
static double kn,kt,gn[NPAM] [NPAM] ,Zeta,miest,dt,dt2s2,c1;
static double viol,errototal,ffm,nmpp,Tolff,TolKl,pesotot;
static double rmin,rmax,deltar,ymax,ymax2c,decale,h,grav;
static double lv2 ;

//variaveis do atrito de rolamento
static double contlength , kr , mur , frol[NVIZM] , frol0[NVIZM] ;

double vaud( double l ) {
    semente = semente*A + B ;
    if ( semente < 0 ) semente = ( semente + M ) + M ;
    return ( semente * Mi - 1 ) * l ;
}

void Init() {
    int i ;

    kn = 1000 ;
    kt = 750 ;
    miest = 0.9 ;
    freqcalcviz = 100 ;
    freqas = 1000 ;
    freqaff = 500 ;

    //npali tem de ser multiplo inteiro de npc

    npaf = 1000 ;
    npali = 7600 ;
    npc = 50 ;

```

```

h = 100 ;

npat1 = npali + npaf ;
npat2 = npaf ;

ncontpl = 0 ;
nconttot = 0 ;

for ( i = 0 ; i < NPAM ; i++ ) {
    a[0][i] = 0 ;
    a[1][i] = 0 ;
    teta[i] = 0 ;
    vang[i] = 0 ;
    aang[i] = 0 ;
    fpl[0][i] = 0 ;
    fpl[1][i] = 0 ;
    fpp[0][i] = 0 ;
    fpp[1][i] = 0 ;
}

for ( i = 0 ; i < NVIZM ; i++ ) {
    listacontp1[i] = -1 ;
    listacontp2[i] = -1 ;
    reacn[i] = 0 ;
    react[i] = 0 ;
    react0[i] = 0 ;
    frol[i] = 0 ;
    frol0[i] = 0 ;
}

it = 0 ;
ffm = 0 ;
contpdep = 0 ;
equil = 0 ;
semente = amostra ;

for ( i = 0 ; i < NPAM ; i++ ) {
    id[i] = i ;
}

}

void Preparacao() {
    int i , j ;
    double ivmassmin , ivmassmax ;

    decalc = (npaf - 1) / 10.0 ;

    for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) {
        x[0][i] = 0.2 * i ;
    }
}

```

```

    x[0][i] = ( x[0][i] - decalc ) / decalc ;
    x[1][i] = 0.0 ;
    r[i] = 0.1 ;
    r[i] = r[i] / decalc ;
}

// graos levemente polidispersos em tamanho
deltar = 0.05 ;
for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {
    r[i] = 1.0 + vaud( deltar / 2 ) ;
    r[i] = r[i] / decalc ;
}

// graos com tamanho bidisperso
/*for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {
    if ( vaud( 0.5 ) < 0.3 ) r[i] = 1.25 ;
    else r[i] = 0.75 ;
    r[i] = r[i] / decalc ;
}*/

rmin = 1000 ;
rmax = 0 ;
for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {
    rmin = min( rmin , r[i] ) ;
    rmax = max( rmax , r[i] ) ;
}

ivmassmin = 0 ;
ivmassmax = 1000 ;
for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {

    // graos com mesma densidade
    ivmass[i] = rmax * rmax / ( r[i] * r[i] ) ;

    // graos com densidade bidispersa
    //if ( vaud( 0.5 ) > 0 ) ivmass[i] = 10 * ivmass[i] ;

    ivmominercia[i] = 2.0 * ivmass[i] / ( r[i] * r[i] ) ;
    ivmassmin = max( ivmassmin , ivmass[i] ) ;
    ivmassmax = min( ivmassmax , ivmass[i] ) ;
}
for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) {
    ivmass[i] = 0.0 ;
}

// kr = 0
// contlength = 0 ;

// kr fixo
contlength = ( rmin + rmax ) / 20.0 ;

```

```

kr = kn * contlength * contlength ;
mur = contlength * miest ;

if ( npc == 1 ) {
    for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {
        x[0][i] = vaud( ( npaf - 1 ) / 10.0 ) + ( npaf - 1 ) / 10.0 ;
        x[0][i] = ( x[0][i] - decale ) / decale ;
        x[1][i] = h * ( rmin + rmax ) ;
    }
}
else {
    for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {

        x[0][i] = ( ( i % npc ) / (double)( npc - 1 ) ) *
        2.0 * ( npaf - 1 ) / 10.0 ;

        x[0][i] = x[0][i] + ( ( ( npaf - 1 ) / 10.0 ) /
        (double)( npc - 1 ) - 1.0 ) * vaud( 0.95 ) ;

        x[0][i] = ( x[0][i] - decale ) / decale ;
        x[1][i] = h * ( rmin + rmax ) ;
    }
}

for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {
    v[0][i] = 0 ;
    v[1][i] = 0 ;
}

grav = ( npaf / 10.0 ) * ( npaf / 10.0 + 1.0 ) / 2.0 ;
grav = 1.0 / grav ;
pesotot = 0.0 ;

Zeta = 0.95 ;
for ( i = 0 ; i < npat1 ; i++ ) {
    for ( j = 0 ; j < npat1 ; j++ ) {
        gn[i][j] = Zeta*2.0*sqrt( kn/( ivmass[i] + ivmass[j] ) ) ;
    }
}

dt = 1.0 / ( sqrt( kn * ivmassmin ) * 50.0 ) ;

dt2s2 = dt * dt / 2.0 ;
c1 = dt2s2 / dt ;
freqdep = (int)( ( 2.0 * sqrt( rmax / grav ) / dt ) + 1 ) ;

TolK1 = 1e-6 * grav * rmin / ivmassmax ;
Tolff = 1e-6 * grav / ivmassmax ;

```

```

}

void ProcuraVizinhos() {
    int i,j,icon,npoint;
    double xij,yij,dij;

    listacontp1[nconttot]=-1;
    icon=0;
    npoint=0;

    for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
        for ( j = i + 1 ; j < npat2 ; j++ ) {
            xij = x[0][id[j]] - x[0][id[i]] ;
            yij = x[1][id[j]] - x[1][id[i]] ;
            dij = xij*xij + yij*yij ;
            if ( dij < lv2 ) {
                listaviz[0][npoint] = id[i] ;
                listaviz[1][npoint] = id[j] ;
                if ( (listacontp1[icon] == id[i]) && (listacontp2[icon] == id[j]) ) {
                    listavizcont[npoint] = 1 ;
                    icon = icon + 1 ;
                }
                else listavizcont[npoint] = 0 ;
                npoint = npoint + 1 ;
            }
        }
    }
    nvizpl = npoint ;

    for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
        for ( j = 0 ; j < npaf ; j++ ) {
            xij = x[0][id[j]] - x[0][id[i]] ;
            yij = x[1][id[j]] - x[1][id[i]] ;
            dij = xij*xij + yij*yij ;
            if ( dij < lv2 ) {
                listaviz[0][npoint] = id[i] ;
                listaviz[1][npoint] = id[j] ;
                if ( (listacontp1[icon] == id[i]) && (listacontp2[icon] == id[j]) ) {
                    listavizcont[npoint] = 1 ;
                    icon = icon + 1 ;
                }
                else listavizcont[npoint] = 0 ;
                npoint = npoint + 1 ;
            }
        }
    }
    nviztot = npoint ;
}

```

```

void DetectaContatoseCalculaForcas() {
    int il,i,j,icont0;
    double xij,yij,dij,ripj2,rimj2,xn,yn,xt,yt,Vijn,Vijt,ftest;
    double drot , rolm , rtest ;

    for ( il = npaf ; il < npat2 ; il++ ) {
        fpl[0][id[il]] = 0.0;
        fpl[1][id[il]] = -grav/ivmass[id[il]] ;
        torque[id[il]] = 0.0 ;
        listancont[id[il]] = 0 ;
    }
    for ( il = 0 ; il < npaf ; il++ ) {
        fpp[0][id[il]] = 0.0 ;
        fpp[1][id[il]] = 0.0 ;
    }
    npadesl = 0 ;
    ncontpl = 0 ;
    icont0 = -1 ;

    for ( il = 0 ; il < nvizpl ; il++ ) {
        i = listaviz[0][il] ;
        j = listaviz[1][il] ;
        xij = xpr[0][j] - xpr[0][i] ;
        yij = xpr[1][j] - xpr[1][i] ;
        dij = xij*xij + yij*yij ;
        ripj2 = (r[i] + r[j])*(r[i] + r[j]) ;
        rimj2 = (r[i] - r[j])*(r[i] - r[j]) ;
        if (listavizcont[il]) icont0 = icont0 + 1 ;
        if ( dij < ripj2 ) {
            listancont[i] = listancont[i] + 1 ;
            listancont[j] = listancont[j] + 1 ;
            listacontp1[ncontpl] = i ;
            listacontp2[ncontpl] = j ;

            // kr variavel ~ lc^2
            contlength = sqrt( ( dij - rimj2 ) * ( ripj2 - dij ) / dij ) ;

            dij = sqrt(dij) ;
            sobreposij[ncontpl] = dij - r[i] - r[j] ;
            vecunitij[0][ncontpl] = xij/dij ;
            vecunitij[1][ncontpl] = yij/dij ;
            if (listavizcont[il]) {
                react[ncontpl] = react0[icont0] ;
                frol[ncontpl] = frol0[icont0] ;
            }
            else {
                react[ncontpl] = 0.0 ;
                frol[ncontpl] = 0.0 ;
            }
        }
        listavizcont[il] = 1 ;
    }
}

```

```

xn = vecunitij[0][ncontpl] ;
yn = vecunitij[1][ncontpl] ;
Vijn = xn*(vpr[0][j] - vpr[0][i]) + yn*(vpr[1][j] - vpr[1][i]) ;
reacn[ncontpl] = -sobreposij[ncontpl]*kn - Vijn*gn[i][j] ;

xt = -vecunitij[1][ncontpl] ;
yt = vecunitij[0][ncontpl] ;

Vijt = xt*(vpr[0][j] - vpr[0][i]) + yt*(vpr[1][j] - vpr[1][i]) -
vangpr[i]*r[i] - vangpr[j]*r[j] ;

react[ncontpl] = react[ncontpl] - kt*Vijt*dt ;
ftest = miest*(-sobreposij[ncontpl]*kn) ;
if ( abs(react[ncontpl]) > ftest ) {
    if ( (listancont[i] != 1) && (listancont[j] != 1) ) {
        npadesl = npadesl + 1 ;
    }
    if ( react[ncontpl] > 0.0 ) react[ncontpl] = ftest ;
    else react[ncontpl] = -ftest ;
}

// Rolling resistance
kr = kn * contlength * contlength ;
mur = contlength * miest ;
drot = vang[j] - vang[i] ;
rolm = frol[ncontpl] ;
rolm = rolm - kr*drot*dt ;
rtest = mur * (-sobreposij[ncontpl]*kn) ;
if ( abs(rolm) > rtest ) {
    if ( rolm > 0 ) {
        rolm = rtest ;
    }
    else {
        rolm = -rtest ;
    }
}
frol[ncontpl] = rolm ;
// -----

fpl[0][i] = fpl[0][i] - (reacn[ncontpl]*xn + react[ncontpl]*xt) ;
fpl[1][i] = fpl[1][i] - (reacn[ncontpl]*yn + react[ncontpl]*yt) ;
fpl[0][j] = fpl[0][j] + (reacn[ncontpl]*xn + react[ncontpl]*xt) ;
fpl[1][j] = fpl[1][j] + (reacn[ncontpl]*yn + react[ncontpl]*yt) ;

// rolm ---> rolling resistance
torque[i] = torque[i] - react[ncontpl]*r[i] - rolm ;
torque[j] = torque[j] - react[ncontpl]*r[j] + rolm ;

ncontpl = ncontpl + 1;

```

```

    }
    else listavizcont[il] = 0;
}
nconttot = ncontpl ;

for (il=nvizpl;il<nviztot;il++) {
    i = listaviz[0][il];
    j = listaviz[1][il];
    xij = x[0][j] - xpr[0][i];
    yij = x[1][j] - xpr[1][i];
    dij = xij*xij + yij*yij;
    ripj2 = (r[i] + r[j])*(r[i] + r[j]) ;
    rimj2 = (r[i] - r[j])*(r[i] - r[j]) ;
    if (listavizcont[il]) icont0 = icont0 + 1;
    if ( dij < ripj2 ) {
        listancont[i] = listancont[i] + 1;
        listacontp1[nconttot] = i;
        listacontp2[nconttot] = j;

        // kr variabel ~ lc^2
        contlength = sqrt( ( dij - rimj2 ) * ( ripj2 - dij ) / dij ) ;

        dij = sqrt(dij);
        sobreposij[nconttot] = dij - r[i] - r[j];
        vecunitij[0][nconttot] = xij/dij;
        vecunitij[1][nconttot] = yij/dij;
        if (listavizcont[il]) {
            react[nconttot] = react0[icont0] ;
            frol[nconttot] = frol0[icont0] ;
        }
        else {
            react[nconttot] = 0.0 ;
            frol[nconttot] = 0.0 ;
        }
        listavizcont[il]=1;

        xn=vecunitij[0][nconttot];
        yn=vecunitij[1][nconttot];
        Vijn=xn*(-vpr[0][i])+yn*(-vpr[1][i]);
        reacn[nconttot]=-sobreposij[nconttot]*kn-Vijn*gn[i][j];

        xt=-vecunitij[1][nconttot];
        yt=vecunitij[0][nconttot];
        Vijt=xt*(-vpr[0][i])+yt*(-vpr[1][i])-vangpr[i]*r[i];
        react[nconttot]=react[nconttot]-kt*Vijtdt;
        ftest=miest*(-sobreposij[nconttot]*kn);
        if (abs(react[nconttot])>ftest) {
            if ((listancont[i]!=1)&&(listancont[j]!=1)) npadesl=npadesl+1;
            if (react[nconttot]>0.0) react[nconttot]=ftest;
            else react[nconttot]=-ftest;
        }
    }
}

```

```

    }

    // Rolling resistance -----
    kr = kn * contlength * contlength ;
    mur = contlength * miest ;
    drot = - vang[i] ;
    rolm = frol[nconttot] ;
    rolm = rolm - kr*drot*dt ;
    rtest = mur * (-sobreposij[nconttot]*kn) ;
    if ( abs(rolm) > rtest ) {
        if ( rolm > 0 ) {
            rolm = rtest ;
        }
        else {
            rolm = -rtest ;
        }
    }
    frol[nconttot] = rolm ;
    // -----

    fpl[0][i]=fpl[0][i]-(reacn[nconttot]*xn+react[nconttot]*xt);
    fpl[1][i]=fpl[1][i]-(reacn[nconttot]*yn+react[nconttot]*yt);
    fpp[0][j]=fpp[0][j]+(reacn[nconttot]*xn+react[nconttot]*xt);
    fpp[1][j]=fpp[1][j]+(reacn[nconttot]*yn+react[nconttot]*yt);

    // rolm ---> rolling resistance
    torque[i] = torque[i] - react[nconttot]*r[i] - rolm ;

    nconttot=nconttot+1;
}
else listavizcont[il]=0;
}

}

void ArmazenaReacaotg() {
    int i;

    for ( i = 0 ; i < nconttot ; i++ ) {
        react0[i] = react[i] ;
        frol0[i] = frol[i] ;
    }

}

void Preditor() {
    int i;

    for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
        xpr[0][id[i]] = x[0][id[i]] + dt*v[0][id[i]] + dt2s2*a[0][id[i]] ;
    }
}

```

```

    xpr[1][id[i]] = x[1][id[i]] + dt*v[1][id[i]] + dt2s2*a[1][id[i]] ;
    vpr[0][id[i]] = v[0][id[i]] + dt*a[0][id[i]] ;
    vpr[1][id[i]] = v[1][id[i]] + dt*a[1][id[i]] ;
    apr[0][id[i]] = a[0][id[i]] ;
    apr[1][id[i]] = a[1][id[i]] ;
    tetapr[id[i]] = teta[id[i]] + dt*vang[id[i]] + dt2s2*aang[id[i]] ;
    vangpr[id[i]] = vang[id[i]] + dt*aang[id[i]] ;
    aangpr[id[i]] = aang[id[i]] ;
}

}

void Corretor() {
    int i;

    for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
        a[0][id[i]] = fpl[0][id[i]]*ivmass[id[i]] ;
        a[1][id[i]] = fpl[1][id[i]]*ivmass[id[i]] ;
        v[0][id[i]] = vpr[0][id[i]] + c1*( a[0][id[i]] - apr[0][id[i]] ) ;
        v[1][id[i]] = vpr[1][id[i]] + c1*( a[1][id[i]] - apr[1][id[i]] ) ;
        x[0][id[i]] = xpr[0][id[i]] ;
        x[1][id[i]] = xpr[1][id[i]] ;
        aang[id[i]] = torque[id[i]]*ivmominercia[id[i]] ;
        vang[id[i]] = vangpr[id[i]] + c1*( aang[id[i]] - aangpr[id[i]] ) ;
        teta[id[i]] = tetapr[id[i]] ;
    }

}

void Verificaequilibrio() {
    int il,i,j;
    double Rmax[NPAM],fve[2][NVIZM],res1,resrel,fx,fy,fnel,ff;

    errototal = 0.0 ;

    for ( il = npaf ; il < npat2 ; il++ ) {
        Rmax[id[il]] = 0.0 ;
        fve[0][id[il]] = 0.0 ;
        fve[1][id[il]] = -grav/ivmass[id[il]] ;
    }

    for ( il = 0 ; il < ncontp1 ; il++ ) {
        i = listacontp1[il] ;
        j = listacontp2[il] ;
        fnel = -sobreposij[il]*kn ;
        Rmax[i] = max( Rmax[i] , fnel ) ;
        Rmax[j] = max( Rmax[j] , fnel ) ;
        fx = fnel*vecunitij[0][il] - react[il]*vecunitij[1][il] ;
        fy = fnel*vecunitij[1][il] + react[il]*vecunitij[0][il] ;
        fve[0][i] = fve[0][i] - fx ;

```

```

        fve[1][i] = fve[1][i] - fy ;
        fve[0][j] = fve[0][j] + fx ;
        fve[1][j] = fve[1][j] + fy ;
    }

    for ( il = ncontpl ; il < nconttot ; il++ ) {
        i = listacontp1[il] ;
        fnel = -sobreposij[il]*kn ;
        Rmax[i] = max( Rmax[i] , fnel ) ;
        fx = fnel*vecunitij[0][il] - react[il]*vecunitij[1][il] ;
        fy = fnel*vecunitij[1][il] + react[il]*vecunitij[0][il] ;
        fve[0][i] = fve[0][i] - fx ;
        fve[1][i] = fve[1][i] - fy ;
    }

    res1 = 0 ;
    resrel = 0 ;
    for ( il = npaf ; il < npat2 ; il++ ) {
        if ( listancont[id[il]] > 1 ) {

            ff = sqrt( fve[0][id[il]]*fve[0][id[il]] +
                fve[1][id[il]]*fve[1][id[il]] ) ;

            res1 = max( abs( torque[id[il]] ) , max( ff , res1 ) ) ;
            if ( Rmax[id[il]] > 0.0 ) resrel = max( resrel , ff/Rmax[id[il]] ) ;
        }
    }
    errottotal = max( errottotal , max( res1 , resrel ) ) ;
}

void profon() {
    int i ;

    viol = 0.0 ;
    for ( i = 0 ; i < nconttot ; i++ ) viol = min( viol , sobreposij[i] ) ;
    viol = -viol / (2.0 * rmax) ;
}

void Affichage() {
    FILE *f;
    char nome[50] ;
    int i;
    double Vqrt , ecinet , ff ;

    double ecinetl ;

    profon();
}

```

```

npacont=0;
npacont01=0;
ecinet=0.0;
ymax=0.0;
for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
    ymax = max( ymax , x[1][id[i]] ) ;
    Vqrt = v[0][id[i]]*v[0][id[i]] + v[1][id[i]]*v[1][id[i]] ;
    ecinet = ecinet + Vqrt ;
    if ( listancont[id[i]] > 0 ) npacont = npacont + 1 ;
    if ( listancont[id[i]] <= 1 ) npacont01 = npacont01 + 1 ;
}
ff = 0.0 ;
for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) ff = ff - fpp[1][i] ;

ecinetl = ecinet ;
for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
    if ( listancont[id[i]] == 1 ) {
        ecinetl = ecinetl - v[0][id[i]]*v[0][id[i]] + v[1][id[i]]*v[1][id[i]] ;
    }
}

equil = 0 ;
if ( npat2 == npat1 ) {
    if ( npadesl < 1 ) {
        if ( npacont01 == 0 ) {
            if ( ecinet < TolKl ) {
                if ( abs( (ff - pesotot) ) <= Tolff ) {
                    equil = 1 ;
                }
            }
        }
    }
}

}

void AtualizaSistema() {
    int i , n ;

    n = npaf ;
    for ( i = npaf ; i < npat1 ; i++ ) {
        if ( x[1][id[i]] >= 0 ) {
            id[n] = id[i] ;
            n++ ;
        }
        else {
            pesotot = pesotot - ( grav / ivmass[id[i]] ) ;
        }
    }
    npat2 = npat2 - ( npat1 - n ) ;
}

```

```

    npat1 = n ;

}

void Deposicao() {
int i ;

    for ( i = npat2 ; i < npat2 + npc ; i++ ) {
        pesotot = pesotot + grav / ivmass[id[i]] ;
    }
    contpdep = contpdep + npc ;
    npat2 = npat2 + npc ;

}

void SalvarConf() {
    FILE *fs ;
    char nome[50] ;
    int i , j , k , il ;

    sprintf( nome , "a%05d" , amostra ) ;

    fs = fopen( nome , "w" ) ;

    fprintf( fs , "%d %d\n" , npat2 - npaf , npat2 ) ;

    for ( i = npaf ; i < npat2 ; i++ ) {
        fprintf( fs , "%23.15e" , x[0][id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , x[1][id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , r[id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , ivmass[id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , ivmominercia[id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , v[0][id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , v[1][id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e\n" , vang[id[i]] ) ;
    }

    for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) {
        fprintf( fs , "%23.15e" , x[0][id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , x[1][id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , r[id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e" , ivmass[id[i]] ) ;
        fprintf( fs , "%23.15e\n" , ivmominercia[id[i]] ) ;
    }

    fprintf( fs , "%23.15e" , kn ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , kt ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , miest ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , kr ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , mur ) ;
}

```

```

fprintf( fs , "%23.15e" , Zeta ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , grav ) ;
fprintf( fs , "%23.15e\n" , dt ) ;

fprintf( fs , "%d %d\n" , ncontpl , nconttot ) ;

for ( il = 0 ; il < ncontpl ; il++ ) {
    i = listacontp1[il] ;
    j = listacontp2[il] ;

    for ( k = 0 ; k < npat2 ; k++ ) {
        if ( id[k] == i ) i = k ;
        if ( id[k] == j ) j = k ;
    }

    fprintf( fs , "%6d" , il ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , i + 1 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , j + 1 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , reacn[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , react[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , frol[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , vecunitij[0][il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e\n" , vecunitij[1][il] ) ;
}

for ( il = ncontpl ; il < nconttot ; il++ ) {
    i = listacontp1[il] ;
    j = listacontp2[il] ;

    for ( k = 0 ; k < npat2 ; k++ ) {
        if ( id[k] == i ) i = k ;
        if ( id[k] == j ) j = k ;
    }

    fprintf( fs , "%6d" , il ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , i + 1 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , j + 1 + npat2 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , reacn[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , react[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , frol[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , vecunitij[0][il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e\n" , vecunitij[1][il] ) ;
}

fclose(fs) ;

}

int main( int argc , char** argv ) {
    FILE *fout ;

```

```

char nome[20] ;
int i , j ;

amostra = atoi( argv[1] ) ;

Init() ;
Preparacao() ;

lv2 = 2.2*2.2*rmax*rmax ;

ProcuraVizinhos() ;

while ( equil == 0 ) {
    it++ ;
    if ( (it%freqdep) == 0 && npat2 < npat1 ) Deposicao() ;
    if ( (it%freqcalcviz) == 0 ) {
        if ( (it%freqas) == 0 ) AtualizaSistema() ;
        ProcuraVizinhos() ;
    }
    Preditor();
    DetectaContatoseCalculaForcas();
    ArmazenaReacaotg();
    Corretor();
    if ((it%freqaff)==0) {
        Verificaequilibrio();
        Affichage();
    }
}

printf( "EQUILIBRIO!\n" ) ;

SalvarConf() ;

return 0 ;

}

```

A.2 Rotina de descarga

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

#define NPAM 10000
#define NVIZM 40000

#define max(A,B) ((A>B)?A:B)
#define min(A,B) ((A<B)?A:B)
#define abs(A) ((A<0)?(-A):A)

static int hp , hs , amostra , npo , npai ;
static int id[NPAM] ;
static int listaviz[2][NVIZM],listavizcont[NVIZM];
static int listacontp1[NVIZM],listacontp2[NVIZM],listancont[NPAM];
static int amostra,npal,npali,npaf,npat;
static int nvizpl,nviztot,ncontpl,nconttot,equil;
static int freqcalcviz,freqas,freqaff;
static int it,npacont,npacont0,npacont01,npadesl,contpdep=0;

static double x[2][NPAM],v[2][NPAM],a[2][NPAM];
static double teta[NPAM],vang[NPAM],aang[NPAM];
static double fpl[2][NPAM],fpp[2][NPAM],torque[NPAM];
static double xpr[2][NPAM],vpr[2][NPAM],apr[2][NPAM];
static double tetapr[NPAM],vangpr[NPAM],aangpr[NPAM];
static double r[NPAM],ivmass[NPAM],ivmominercia[NPAM];
static double reacn[NVIZM],react[NVIZM],react0[NVIZM];
static double vecunitij[2][NVIZM],sobreposij[NVIZM];
static double kn,kt,gn[NPAM][NPAM],Zeta,miest,dt,dt2s2,c1;
static double viol,errototal,ffm,nmpp,Tolff,TolKl,pesotot;
static double rmin,rmax,pesom,ymax,grav;
static double lv2 ;

//variaveis do atrito de rolamento
static double contlength , kr , mur , fro1[NVIZM] , fro10[NVIZM] ;

void Init() {
    int i ;

    freqcalcviz = 100 ;
    freqas = 1000;
    freqaff = 500 ;
    freqsalvar = 100 ;

    for ( i = 0 ; i < NPAM ; i++ ) {
        x[0][i] = 0 ;
        x[1][i] = 0 ;
    }
}
```

```

        v[0][i] = 0 ;
        v[1][i] = 0 ;
        a[0][i] = 0 ;
        a[1][i] = 0 ;
        teta[i] = 0 ;
        vang[i] = 0 ;
        aang[i] = 0 ;
        fpl[0][i] = 0 ;
        fpl[1][i] = 0 ;
        fpp[0][i] = 0 ;
        fpp[1][i] = 0 ;
    }

    for ( i = 0 ; i < NVIZM ; i++ ) {
        listacontp1[i] = -1 ;
        listacontp2[i] = -1 ;
        reacn[i] = 0 ;
        react[i] = 0 ;
        react0[i] = 0 ;
        frol[i] = 0 ;
        frol0[i] = 0 ;
    }

    it = 0 ;

    equil = 0 ;

    npo = 0 ;

    for ( i = 0 ; i < NPAM ; i++ ) {
        id[i] = i ;
    }

}

/* sub-rotinas identicas aquelas tambem presentes no codigo da
* rotina de deposicao *****/

void ProcuraVizinhos() {...}

void DetectaContatoseCalculaForcas() {...}

void ArmazenaReacaotg() {...}

void Preditor() {...}

void Corretor() {...}

void Verificaequilibrio() {...}

```

```

void profon() {...}

/*****/

void Affichage() {
    int i ;
    double Vqrt , ecinet , ff ;

    profon() ;

    npacont = 0 ;
    npacont01 = 0 ;
    ecinet = 0.0 ;
    ymax = 0.0 ;
    for ( i = npaf ; i < npat ; i++ ) {
        ymax = max( ymax , x[1][id[i]] ) ;
        Vqrt = v[0][id[i]]*v[0][id[i]] + v[1][id[i]]*v[1][id[i]] ;
        ecinet = ecinet + Vqrt ;
        if ( listancont[id[i]] > 0 ) npacont = npacont + 1 ;
        if ( listancont[id[i]] <= 1 ) npacont01 = npacont01 + 1 ;
    }
    ff = 0.0 ;
    for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) ff = ff - fpp[1][id[i]] ;

    equil = 0 ;

    if ( npadesl < 1 ) {
        if ( npacont01 == 0 ) {
            if ( ecinet < TolKl ) {
                if ( abs( (ff - pesotot) ) <= Tolff ) {
                    equil = 1 ;
                }
            }
        }
    }
}

void AtualizaSistema() {
    int i , n ;

    n = npaf ;
    for ( i = npaf ; i < npat ; i++ ) {
        if ( x[1][id[i]] >= 0 ) {
            id[n] = id[i] ;
            n++ ;
        }
        else {
            pesotot = pesotot - ( grav / ivmass[id[i]] ) ;
            if ( ( x[0][id[i]] > -8*rmax ) && ( x[0][id[i]] < 8*rmax ) ) {

```

```

        npo++ ;
    }
}
npat = n ;
}

void CarregarConf() {
    FILE *fc ;
    char nome[50] ;
    int i , j , il ;
    double xn , yn , xt , yt , ivmassmax , lixo ;

    sprintf( nome , "a%05d" , amostra ) ;

    fc = fopen( nome , "r" ) ;
    fscanf( fc , "%d %d" , &npal , &npat ) ;
    npaf = npat - npal ;
    for ( i = 0 ; i < npal ; i++ ) {
        fscanf( fc , "%lf" , &x[0][npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &x[1][npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &r[npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &ivmass[npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &ivmominercia[npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &v[0][npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &v[1][npaf+i] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &vang[npaf+i] ) ;
    }
    for ( i = npal ; i < npat ; i++ ) {
        fscanf( fc , "%lf" , &x[0][i-npal] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &x[1][i-npal] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &r[i-npal] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &ivmass[i-npal] ) ;
        fscanf( fc , "%lf" , &ivmominercia[i-npal] ) ;
    }

    fscanf( fc , "%lf" , &kn ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &kt ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &miest ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &kr ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &mur ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &Zeta ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &grav ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &dt ) ;

    for ( i = 0 ; i < npat ; i++ ) {
        for ( j = 0 ; j < npat ; j++ ) {
            gn[i][j] = Zeta*2.0*sqrt( kn/( ivmass[i] + ivmass[j] ) ) ;
        }
    }
}

```

```

}

fscanf( fc , "%d %d" , &ncontpl , &nconttot ) ;
for ( i = 0 ; i < ncontpl ; i++ ) {
    fscanf( fc , "%lf" , &lixo ) ;
    fscanf( fc , "%d" , &listacontp1[i] ) ;
    fscanf( fc , "%d" , &listacontp2[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &reacn[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &react[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &frol[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &vecunitij[0][i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &vecunitij[1][i] ) ;
    listacontp1[i] = listacontp1[i] - 1 + npaf ;
    listacontp2[i] = listacontp2[i] - 1 + npaf ;

    react0[i] = react[i] ;
    frol0[i] = frol[i] ;

}

for ( i = ncontpl ; i < nconttot ; i++ ) {
    fscanf( fc , "%lf" , &lixo ) ;
    fscanf( fc , "%d" , &listacontp1[i] ) ;
    fscanf( fc , "%d" , &listacontp2[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &reacn[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &react[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &frol[i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &vecunitij[0][i] ) ;
    fscanf( fc , "%lf" , &vecunitij[1][i] ) ;
    listacontp1[i] = listacontp1[i] - 1 + npaf ;
    listacontp2[i] = listacontp2[i] - 1 - npal ;

    react0[i] = react[i] ;
    frol0[i] = frol[i] ;

}

fclose(fc);

for ( i = npaf ; i < npat ; i++ ) {
    fpl[0][i] = 0.0 ;
    fpl[1][i] = - grav / ivmass[i] ;
    torque[i] = 0.0 ;
}

for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) {
    fpp[0][i] = 0.0 ;
    fpp[1][i] = 0.0 ;
}

for ( il = 0 ; il < ncontpl ; il++ ) {

    i = listacontp1[il] ;

```

```

    j = listacontp2[il] ;
    xn = vecunitij[0][il] ;
    yn = vecunitij[1][il] ;
    xt = -vecunitij[1][il] ;
    yt = vecunitij[0][il] ;
    fpl[0][i] = fpl[0][i] - ( reacn[il]*xn + react[il]*xt ) ;
    fpl[1][i] = fpl[1][i] - ( reacn[il]*yn + react[il]*yt ) ;
    fpl[0][j] = fpl[0][j] + ( reacn[il]*xn + react[il]*xt ) ;
    fpl[1][j] = fpl[1][j] + ( reacn[il]*yn + react[il]*yt ) ;
    torque[i] = torque[i] - react[il]*r[i] - frol[il] ;
    torque[j] = torque[j] - react[il]*r[j] + frol[il] ;

}

for ( il = ncontpl ; il < nconttot ; il++ ) {

    i = listacontp1[il] ;
    j = listacontp2[il] ;
    xn = vecunitij[0][il] ;
    yn = vecunitij[1][il] ;
    xt = -vecunitij[1][il] ;
    yt = vecunitij[0][il] ;
    fpl[0][i] = fpl[0][i] - ( reacn[il]*xn + react[il]*xt ) ;
    fpl[1][i] = fpl[1][i] - ( reacn[il]*yn + react[il]*yt ) ;
    fpp[0][j] = fpp[0][j] + ( reacn[il]*xn + react[il]*xt ) ;
    fpp[1][j] = fpp[1][j] + ( reacn[il]*yn + react[il]*yt ) ;
    torque[i] = torque[i] - react[il]*r[i] - frol[il] ;

}

for ( i = 0 ; i < npal ; i++ ) {
    a[0][i] = fpl[0][i]*ivmass[i] ;
    a[1][i] = fpl[1][i]*ivmass[i] ;
    aang[i] = torque[i]*ivmominercia[i] ;
}

ivmassmax = 1000 ;
pesotot = 0 ;
for ( i = npaf ; i < npat ; i++ ) {
    pesotot = pesotot + ( 1.0 / ivmass[i] ) ;
    ivmassmax = min( ivmassmax , ivmass[i] ) ;
}
rmin = 1000 ;
rmax = 0 ;
for ( i = npaf ; i < npat ; i++ ) {
    rmin = min( rmin , r[i] ) ;
    rmax = max( rmax , r[i] ) ;
}

pesotot = grav * pesotot ;

```

```

dt2s2 = dt * dt / 2.0 ;
c1 = dt2s2 / dt ;

TolK1 = 1e-6 * grav * rmin / ivmassmax ;
Tolff = 1e-6 * grav / ivmassmax ;

}

void SalvarConf() {
FILE *fs ;
char nome[50] ;
int i , j , k , il ;

sprintf( nome , "w%03da%05d" , hs , amostra ) ;

fs = fopen( nome , "w" ) ;

fprintf( fs , "%d %d\n" , npat - npaf , npat ) ;

for ( i = npaf ; i < npat ; i++ ) {
fprintf( fs , "%23.15e" , x[0][id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , x[1][id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , r[id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , ivmass[id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , ivmominercia[id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , v[0][id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , v[1][id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e\n" , vang[id[i]] ) ;
}

for ( i = 0 ; i < npaf ; i++ ) {
fprintf( fs , "%23.15e" , x[0][id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , x[1][id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , r[id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , ivmass[id[i]] ) ;
fprintf( fs , "%23.15e\n" , ivmominercia[id[i]] ) ;
}

fprintf( fs , "%23.15e" , kn ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , kt ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , miest ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , kr ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , mur ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , Zeta ) ;
fprintf( fs , "%23.15e" , grav ) ;
fprintf( fs , "%23.15e\n" , dt ) ;

fprintf( fs , "\n%d %d\n" , ncontpl , nconttot ) ;

for ( il = 0 ; il < ncontpl ; il++ ) {

```

```

    i = listacontp1[il] ;
    j = listacontp2[il] ;

    for ( k = 0 ; k < npat ; k++ ) {
        if ( id[k] == i ) i = k ;
        if ( id[k] == j ) j = k ;
    }

    fprintf( fs , "%6d" , il ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , i + 1 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , j + 1 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , reacn[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , react[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , frol[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , vecunitij[0][il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e\n" , vecunitij[1][il] ) ;
}

for ( il = ncontp1 ; il < nconttot ; il++ ) {
    i = listacontp1[il] ;
    j = listacontp2[il] ;

    for ( k = 0 ; k < npat ; k++ ) {
        if ( id[k] == i ) i = k ;
        if ( id[k] == j ) j = k ;
    }

    fprintf( fs , "%6d" , il ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , i + 1 - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%5d" , j + 1 + npat - npaf ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , reacn[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , react[il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e" , frol[il] ) ; //rolling resistance
    fprintf( fs , "%23.15e" , vecunitij[0][il] ) ;
    fprintf( fs , "%23.15e\n" , vecunitij[1][il] ) ;
}

fclose(fs) ;

}

int main( int argc , char** argv ) {
    FILE *f ;
    char nome[20] ;
    int i , n ;

    hp = atoi( argv[1] ) ;
    hs = atoi( argv[2] ) ;
    amostra = atoi( argv[3] ) ;

```

```

Init() ;

CarregarConf() ;

npai = npat - npaf ;

lv2 = 2.2 * 2.2 * rmax * rmax ;

for ( i = 1 ; i <= hs/2 ; i++ ) {
    x[1][ - 1 + hp - i + 1 ] = 100.0 ;
    x[1][ - 1 + hp + i ] = 100.0 ;
}

ProcuraVizinhos();

while ( equil == 0 ) {

    it++ ;
    if ( (it%freqcalcviz) == 0 ) {
        if ( (it%freqaff) == 0 ) {
            Verificaequilibrio() ;
            Affichage() ;
            if ( (it%freqas) == 0 ) AtualizaSistema() ;
        }
        ProcuraVizinhos() ;
    }
    Preditor() ;
    DetectaContatoseCalculaForcas() ;
    ArmazenaReacaotg() ;
    Corretor() ;

}

printf("EQUILIBRIO!\n");

SalvarConf() ;

sprintf( nome , "s_w%03d" , hs ) ;
f = fopen( nome , "a" ) ;
fprintf( f , "%6d %6d %6d\n" , amostra , npo , npai-(npat-npaf) ) ;
fclose( f ) ;

return 0 ;

}

```

A.3 Rotina de identificação de arcos

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

#define N1 5000
#define N2 15000

#define max(A,B) ((A>B)?A:B)
#define min(A,B) ((A<B)?A:B)
#define abs(A) ((A<0)?(-A):A)

int main( int argc , char** argv ) {
    FILE *f1,*f2;
    char nome1[50],nome2[50];
    int i,j,k,l,m,n,np,p,q,n1,n2,n3,n4,flag1,flag2,w;
    int cp1[N2],cp2[N2];
    double rmin,rmax,rmedio,dmin,dmax,dmedio,ymax,rhs,lixo;
    double x[N1],y[N1],r[N1],xa[100],ya[100],ra[100];

    w = atoi( argv[1] ) ;

    sprintf( nome1 , "w%03da00000" , w ) ;
    sprintf( nome2 , "arcosw%03d" , w ) ;

    for ( l = 1 ; l <= 5000 ; l++ ) {

        /*--- Leitura da configuracao da amostra l -----*/

        sprintf( nome1 , "w%03da%05d" , w , l ) ;

        rmin = 1000 ;
        rmax = 0 ;
        ymax = 0 ;
        f1 = fopen( nome1 , "r" ) ;
        fscanf( f1 , "%d %d" , &n1 , &n2 ) ;
        for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
            fscanf( f1 , "%lf" , &x[j] ) ;
            fscanf( f1 , "%lf" , &y[j] ) ;
            fscanf( f1 , "%lf" , &r[j] ) ;
            fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        }
    }
}
```

```

        rmin = min( rmin , r[j] ) ;
        rmax = max( rmax , r[j] ) ;
        ymax = max( ymax , y[j] ) ;
    }
    for ( j = n1 ; j < n2 ; j++ ) {
        fscanf( f1 , "%lf" , &x[j] ) ;
        fscanf( f1 , "%lf" , &y[j] ) ;
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
    }

    fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
    fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;

    fscanf( f1 , "%d %d" , &n3 , &n4 ) ;
    for ( j = 0 ; j < n3 ; j++ ) {
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        fscanf( f1 , "%d" , &cp1[j] ) ;
        fscanf( f1 , "%d" , &cp2[j] ) ;
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        cp1[ j ] = cp1[ j ] - 1 ;
        cp2[ j ] = cp2[ j ] - 1 ;
    }
    for ( j = n3 ; j < n4 ; j++ ) {
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        fscanf( f1 , "%d" , &cp1[j] ) ;
        fscanf( f1 , "%d" , &cp2[j] ) ;
        fscanf( f1 , "%lf" , &lixo ) ;
        cp1[j] = cp1[j] - 1 ;
        cp2[j] = cp2[j] - 1 ;
    }
    fclose(f1) ;
    dmin = 2 * rmin ;
    dmax = 2 * rmax ;
    rmedio = 0.5 * ( rmin + rmax ) ;
    dmedio = 2 * rmedio ;

```

```

/*=====*/

/*--- Busca pelo grao central do possivel arco -----*/

p0 = 0 ;
for ( i = 0 ; i < n1 ; i++ ) {
    if ( y[i] > y[p0] ) {
        p0 = i ;
    }
}

flag1 = 0 ;
for ( i = 0 ; i < n1 ; i++ ) {
    if ( x[i] > -rmedio && x[i] < rmedio ) {
        if ( y[i] < y[p0] ) {
            p0 = i ;
            xa[0] = x[p0] ;
            ya[0] = y[p0] ;
            ra[0] = r[p0] ;
        }
        flag1 = 1 ;
    }
}

/*=====*/

np = 0 ;

flag2 = 0 ;
if ( flag1 == 1 ) {
    p = p0 ;
    n = 1 ;
    if ( ra[0] == rmin ) np++ ;
    flag2 = 0 ;
    i = 0 ;
    while ( flag2 != 1 ) {
        flag1 = 0 ;
        q = 0 ;
        for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
            if ( y[j] > y[q] ) {
                q = j ;
            }
        }

        if ( ra[i] == rmin ) {
            for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
                if ( x[j] < xa[i] &&
                    x[j] > xa[i] - dmedio &&
                    y[j] > ya[i] - dmedio ) {
                    if ( y[j] < y[q] ) q = j ;
                }
            }
        }
    }
}

```

```

        }
    }
else {
    for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
        if ( x[j] < xa[i] &&
            x[j] > xa[i] - dmax &&
            y[j] > ya[i] - dmax ) {
            if ( y[j] < y[q] ) q = j ;
        }
    }
}

for ( k = 0 ; k < n3 ; k++ ) {
    if ( ( cp1[k] == q && cp2[k] == p ) ||
        ( cp1[k] == p && cp2[k] == q ) ) {
        if ( x[p] > x[q] ) {
            xa[i+1] = x[q] ;
            ya[i+1] = y[q] ;
            ra[i+1] = r[q] ;
            p = q ;
            i++ ;
            n++ ;
            if ( ra[i] == rmin ) np++ ;
            flag1 = 1 ;
            for ( m = n3 ; m < n4 ; m++ ) {
                if ( cp1[m] == p ) {
                    flag2++ ;
                    break ;
                }
            }
            break ;
        }
    }
}

if ( flag1 != 1 ) break ;

}

xa[99] = xa[0] ;
ya[99] = ya[0] ;
ra[99] = ra[0] ;
xa[0] = xa[i] ;
ya[0] = ya[i] ;
ra[0] = ra[i] ;
xa[i] = xa[99] ;
ya[i] = ya[99] ;
ra[i] = ra[99] ;

p = p0 ;

```

```

while ( flag2 != 2 ) {
    flag1 = 0 ;
    q = 0 ;
    for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
        if ( y[j] > y[q] ) {
            q = j ;
        }
    }

    if ( ra[i] == rmin ) {
        for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
            if ( x[j] > xa[i] &&
                x[j] < xa[i] + dmedio &&
                y[j] > ya[i] - dmedio ) {
                if ( y[j] < y[q] ) q = j ;
            }
        }
    }
    else {
        for ( j = 0 ; j < n1 ; j++ ) {
            if ( x[j] > xa[i] &&
                x[j] < xa[i] + dmax &&
                y[j] > ya[i] - dmax ) {
                if ( y[j] < y[q] ) q = j ;
            }
        }
    }
}

for ( k = 0 ; k < n3 ; k++ ) {
    if ( ( cp1[k] == q && cp2[k] == p ) ||
        ( cp1[k] == p && cp2[k] == q ) ) {
        if ( x[p] < x[q] ) {
            xa[i+1] = x[q] ;
            ya[i+1] = y[q] ;
            ra[i+1] = r[q] ;
            p = q ;
            i++ ;
            n++ ;
            if ( ra[i] == rmin ) np++ ;
            flag1 = 1 ;
            for ( m = n3 ; m < n4 ; m++ ) {
                if ( cp1[m] == p ) {
                    flag2++ ;
                    break ;
                }
            }
            break ;
        }
    }
}
}

```

```
        if ( flag1 != 1 ) break ;
    }
}

if ( flag2 == 2 && n > 2 ) {

    f2 = fopen( nome2 , "a" ) ;
    fprintf( f2 , "%6d %6d %6d %6d %6d %15.5e\n" ,1,n,np,n - np,n1,ymax ) ;
    fclose(f2) ;

}

}

return 0 ;
}
```

Apêndice B

Artigos publicados

C. F. M. Magalhães, J. G. Moreira e A. P. F. Atman, *Catastrophic regime in the discharge of a granular pile*, Physical Review E **82**, 051303 (2010).

C. F. M. Magalhães, J. G. Moreira e A. P. F. Atman, *Segregation in arch formation*, The European Physical Journal E **35**, 38 (2012).