

# **Simulação de materiais granulares**

Caio Franca Merelim Magalhães

Agosto de 2008

# Simulação de materiais granulares

CAIO FRANCA MERELIM MAGALHÃES

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

Agosto de 2008

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

”A guerra e a coragem realizaram grandes coisas, muito mais do que o amor ao próximo. Não a vossa compaixão, mas a vossa bravura salvou, até aqui, as vítimas de desgraças.”

Friedrich W. Nietzsche

# Agradecimentos

---

Aos meus orientadores, Allbens Atman e José Guilherme Moreira, pela paciência e pela atenção que ofereceram durante todo o período do curso.

Aos colegas da turma de bacharelado em física de 2002 com quem convivi durante grande parte do tempo de minha formação, em especial a Ana Paula, Camilla, Daniel Bretas, Douglas, Frederico Dias, Frederico Sacramento, Leonardo Gabriel, Leonardo Guillen e Lucas.

Aos colegas do grupo de física estatística Antônio, Danielle, Jonas, José Eduardo e Júlio, e demais colegas do departamento.

Finalmente, à coragem e à sorte por ter conseguido chegar até aqui, percorrendo um caminho tortuoso e cheio de espinhos.

# Sumário

---

<b>RESUMO</b>	<b>v</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>vi</b>
<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>1 Fenomenologia em meios granulares</b>	<b>3</b>
1.1 Distribuição de forças em empilhamentos . . . . .	4
1.2 Escoamento de grãos . . . . .	9
1.2.1 Fluidização e formação de padrões . . . . .	10
1.2.2 Avalanches em empilhamentos granulares . . . . .	12
1.3 Formação de aglomerados . . . . .	19
<b>2 Métodos Simulacionais</b>	<b>22</b>
2.1 Dinâmica molecular . . . . .	23
2.1.1 Algoritmo de Verlet . . . . .	25
2.2 Simulação Colisional . . . . .	28
2.3 Dinâmica de Contatos . . . . .	30
2.4 Monte Carlo . . . . .	31
<b>3 Metodologia</b>	<b>33</b>
3.1 Definição do problema . . . . .	33

3.2	Descrição do sistema . . . . .	33
3.3	Modelo de Forças . . . . .	36
3.4	Dinâmica do sistema . . . . .	41
3.5	Implementação do algoritmo . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussão</b>	<b>48</b>
4.1	Avalanches Superficiais . . . . .	52
4.2	Avalanches internas . . . . .	54
<b>5</b>	<b>Conclusão e perspectivas</b>	<b>59</b>
<b>A</b>	<b>Modelos do escoamento superficial em meios granulares</b>	<b>61</b>
A.1	Modelo baseado no movimento stick-slip . . . . .	61
A.2	Modelo BCRE . . . . .	65
<b>B</b>	<b>Método de Monte Carlo</b>	<b>67</b>
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .	70

# Resumo

Nesta dissertação, fazemos uma revisão dos fenômenos observados em materiais granulares com ênfase naqueles que aparecem em empilhamentos granulares com fronteiras abertas. Damos um retrospecto da discussão sobre a existência ou não de um estado crítico auto-organizado em pilhas de areia e acrescentamos alguns resultados a ela. Investigamos também se propriedades microscópicas da pilha e a história de formação da mesma têm alguma importância na caracterização do possível estado crítico. Para isso estudamos as avalanches superficiais e internas em empilhamentos granulares contruídos de maneiras distintas através de simulações numéricas de dinâmica molecular. Fazemos uma exposição detalhada sobre o método e citamos outras abordagens comumente utilizadas para simular materiais granulares. Após analisar os resultados, verificamos que a maneira usada para medir as avalanches superficiais é essencial para se estabelecer a existência de um estado crítico auto-organizado. Mostramos também que a distribuição de avalanches internas depende fortemente das características do substrato.

# Abstract

In this dissertation we review some phenomena observed on granular materials emphasizing those related to granular piles with open lateral boundaries. We present a retrospect of the discussion about the existence of a self-organized critical state in granular piles and add some novel results to it. We will also investigate whether the microscopic properties, as well as the history of formation of the piles, affect the possible critical state. In order to accomplish those goals, a study of the surface and internal avalanches on granular piles prepared in different ways was realized using molecular dynamics simulation technique. We give a detailed description of the method and cite some other approaches frequently used to simulate granular systems. After analysing our results, we verified that the way we measure the surface avalanches is essential to determine whether there is a self-organized critical state. We also showed that the internal avalanche distribution depends strongly on the substrate layer properties.



# Introdução

---

Uma área que tem ganhado um enorme impulso nas últimas décadas é a física dos meios granulares. O ser humano sempre teve de lidar com a matéria nesse estado que é muito freqüente na natureza, razão pela qual houve grande desenvolvimento na compreensão dos materiais granulares do ponto de vista prático no passado. No entanto, muito pouco ainda se sabe sobre os aspectos fundamentais e sobre as origens de muitas das propriedades desses materiais. O interesse por parte dos físicos nesses sistemas se deve à riqueza de fenômenos exibidos como transições de fase, formação de padrões induzidos por vibração e formação de aglomerados em gases granulares, à similaridade com outros sistemas bastante relevantes atualmente, como por exemplo, tráfego de veículos em vias urbanas, e à necessidade da indústria que clama por soluções para problemas que requerem uma análise cada vez mais elaborada e profunda.

Nessa dissertação faremos uma revisão dos fenômenos observados em materiais granulares com ênfase naqueles que aparecem em empilhamentos granulares com fronteiras abertas. Daremos um retrospecto da discussão sobre a existência ou não de um estado crítico auto-organizado em pilhas de areia, que são amontoados de grãos não-limitados por paredes laterais, e acrescentaremos alguns resultados a essa discussão. Investigaremos também se propriedades microscópicas da pilha e a história de formação da mesma têm alguma importância na caracterização do possível estado crítico.

Em 1987 Bak, Tang e Wiesenfeld [1] propõem um modelo (modelo BTW) para explicar o ruído  $1/f$  - sinal observado em diversos fenômenos cujo espectro possui todas as freqüências e varia com o recíproco da freqüência - e a abundância de padrões fractais amplamente observados na natureza. Esse modelo revelou a existência de um estado crítico auto-organizado que apresenta uma estrutura fractal no espaço e no tempo. Como ele pode ser visto como uma representação simplificada de uma pilha de areia, vários experimentos foram feitos com o intuito de verificar se existe um tal estado em pilhas de areia reais. Em 1989 Jaeger et al. [20] realizaram medidas de avalanches em um tambor girante e obtiveram resultados conflitantes com os do modelo BTW. Pouco tempo depois, em 1990, Held et al. [21] coletaram medidas de avalanches em pilhas cônicas e verificaram comportamento crítico. Liu et al. [22] argumentaram que aquele resultado era na verdade um efeito de tamanho finito. Depois disso Buchholtz e Pöschel [24] sugeriram que havia diferenças importantes entre as maneiras usadas para medir as avalanches e confirmaram tais suposições por meio de simulações numéricas. Por fim Manna e Herrmann [29]

propuseram que uma maneira mais adequada de se caracterizar o estado crítico fosse através de avalanches internas e não superficiais. Nós vamos tentar confirmar a hipótese de Buchholtz e Pöschel usando simulações mais realistas do que as que foram usadas por eles originalmente.

Neste trabalho, o estudo das avalanches é realizado por meio de simulações numéricas de dinâmica molecular. Fazemos uma exposição detalhada sobre o método e citamos outras abordagens comumente utilizadas para simular materiais granulares. As pilhas de areia são modeladas em duas dimensões como um empilhamento de discos que interagem via potencial Hertziano dissipativo e força de atrito estático coulombiano. O atrito é implementado nos moldes do que foi proposto por Cundall e Strack [26] que o trataram como uma mola virtual tangente ao plano de contato com ponto de saturação. Diferentes pilhas são utilizadas no estudo do comportamento das avalanches e avaliamos o efeito do método de preparação e da geometria do substrato em sua distribuição. Trabalhamos com dois métodos de preparação, um em que a pilha é formada por deposição localizada de grãos e outro em que a deposição é distribuída ao longo do substrato. Este, por sua vez, é formado por grãos fixos, do mesmo tipo dos grãos depositados, que podem ser dispostos em uma estrutura compacta ou em uma espaçada.

A dissertação é dividida da seguinte forma: no capítulo 1 fazemos uma revisão dos fenômenos observados em meios granulares com grande ênfase naqueles relativos ao escoamento superficial em empilhamentos; no capítulo 2 descrevemos os métodos mais usados na simulação de sistemas granulares; no capítulo 3 descrevemos o sistema, aplicamos a dinâmica molecular ao nosso caso particular e explicamos como funciona o programa que realiza a simulação; no capítulo 4 apresentamos os resultados e fazemos uma discussão de suas conseqüências; por fim, no capítulo 5, mostramos as conclusões e falamos das perspectivas de trabalhos futuros.

# Capítulo 1

---

## Fenomenologia em meios granulares

Neste capítulo abordaremos alguns aspectos peculiares de sistemas granulares, que os distiguem de outros sistemas físicos. Faremos um retrospecto do que já foi explorado nesse campo e destacaremos alguns fatos que chamam a atenção e que ainda estão em debate.

Materiais granulares possuem grande importância prática e têm despertado grande interesse teórico por parte dos físicos ultimamente. Ocorre que o homem sempre teve de lidar em suas mais variadas atividades com a matéria nessa forma. Materiais granulares estão presentes na agricultura, na indústria de construção, na indústria farmacêutica, para citar alguns exemplos. O transporte e o armazenamento de grãos foram os primeiros problemas que surgiram, e até hoje métodos arcaicos e ineficientes são adotados para realização dessas tarefas. Na agro-indústria, muitas vezes ainda se encontra um funcionário encarregado de desobstruir a passagem de grãos no bocal de silos de armazenamento por meio de marretadas na estrutura. Tais obstruções são perigosas, sendo causas de acidentes envolvendo vítimas fatais. Com o desenvolvimento da indústria, passou-se a usar esses materiais em processos cada vez mais complexos e a necessidade de sofisticação das técnicas pressionou por uma melhor compreensão de suas propriedades. Há portanto uma demanda da indústria por descrições mais precisas dos fenômenos envolvendo materiais granulares e, além disso, o estudo desses fenômenos se tornou relevante para os físicos por envolver muitos conceitos fundamentais e por lançar luz sobre outras áreas da física.

Em um olhar de relance, poderíamos imaginar um sistema granular como um gás cujas partículas estão em uma escala maior que os gases usuais, o que em determinadas circunstâncias é uma maneira adequada de visualizá-lo. No entanto, essa abordagem se mostra insatisfatória, pois conceitos essenciais não podem ser facilmente transportados para meios granulares e surgem efeitos diversos completamente incompatíveis com o modelo de um gás. Em outras circunstâncias, seu comportamento se assemelha mais ao de um líquido ou ao de um sólido, mas também com idiossincrasias que lhe são próprias.

Se observarmos um monte de areia veremos que, no lugar do que ocorreria com líquidos

ou gases, a configuração do sistema não ocupa o estado de menor energia. Ele geralmente fica preso em um estado metaestável. O estudo desses montes tem levantado questões importantes relacionadas à natureza da instabilidade no momento em que ocorre um desmoronamento. Empilhamentos granulares tem sido estudado desde o século XV por personalidades ilustres como Leonardo da Vinci (1452-1519), Charles de Coulomb (1736-1806) e Michael Faraday (1791-1867). Nas últimas décadas o debate em torno desses sistemas ganhou novo fôlego com um artigo de 1988 de Bak e colaboradores [1] que criaram um autômato celular que poderia ser pensado como um modelo para pilhas de areia. A idéia do modelo era investigar as causas do ruído  $1/f$  e da abundância de estruturas fractais em sistemas espacialmente estendidos observadas na natureza. Após a publicação desse artigo, uma enxurrada de estudos, tanto experimentais quanto teóricos, foram desenvolvidos com o fim de verificar a aplicabilidade desse modelo em sistemas granulares. Em uma seção deste capítulo falaremos mais sobre esse assunto.

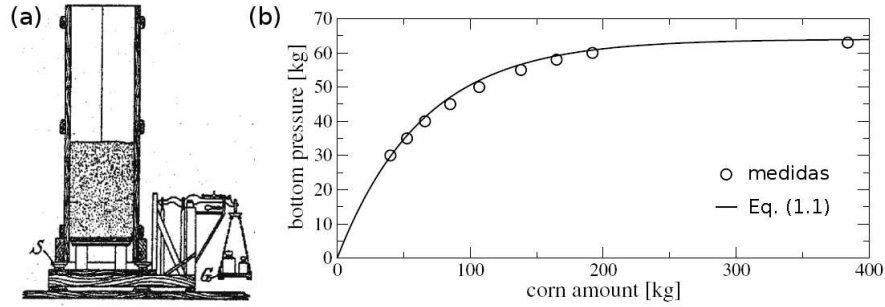
Outro exemplo que nos ajuda a enxergar melhor a distinção que existe entre os materiais granulares e outros sistemas físicos mais conhecidos é a variação da pressão em um silo preenchido com grãos. A pressão hidrostática no interior de um recipiente contendo um líquido em repouso aumenta linearmente com profundidade, o que não é verdadeiro se, em vez de líquido, for usado material granular. Nesse caso, se observa que a pressão atinge um valor limite à medida que a profundidade aumenta.

Nas próximas páginas iremos discutir com mais detalhes alguns dos problemas abordados no campo dos meios granulares.

## 1.1 Distribuição de forças em empilhamentos

O modo como as tensões são distribuídas em um meio granular é bastante diverso do que é observado em sólidos ou líquidos. Um estudo publicado pelo engenheiro alemão H. A. Janssen em 1895 mostra como a pressão varia com a profundidade em silos contendo material granular [2]. Motivado por necessidades da indústria de alimentos, que na época apresentava grande desenvolvimento devido a um crescente aumento das exportações de cereais dos países produtores para a Europa, Janssen realizou experimentos cuidadosos em caixas preenchidas com cereais. Esses experimentos visavam a uma determinação de como a pressão no interior da caixa varia com a altura da coluna de grãos e a estabelecer com maior precisão quanto do peso é suportado pelas paredes. Isso era importante por causa da intensificação do uso de silos para armazenar quantidades cada vez maiores de grãos. Janssen realizou uma série de medidas do peso transmitido apenas pelos grãos do fundo. Para isso foi utilizada uma caixa cuja base podia se mover livremente e se encaixava perfeitamente à superfície interna das paredes. Estas eram firmemente fixadas ao solo e a base pousava sobre um dos pratos de uma balança de comparação. Isso excluía da medida o peso suportado pelas paredes. O peso suportado pelas paredes é dado pela diferença entre

o peso total do material e a medida da balança. Foram realizadas várias séries de medidas em que a caixa era preenchida aos poucos enquanto o peso era registrado. Variou-se a área da seção reta da caixa e o material que a enchia. Na figura 1.1 mostramos uma ilustração do aparato idealizado e montado por Janssen e a comparação das medidas de pressão com os valores fornecidos pela solução de um modelo proposto por ele.



**Figura 1.1:** (a) Aparato usado por Janssen para medir a pressão exercida no fundo de um recipiente contendo grãos. (b) Resultado obtido por ele e a comparação com a previsão do modelo proposto. Retirado de [2].

O modelo para calcular a pressão era baseado nas seguintes hipóteses: o atrito entre a parede e o material granular é sempre igual ao atrito estático máximo e a pressão lateral é proporcional à pressão vertical,  $\mu p_l = K p_v$ . Pode-se chegar com isso à seguinte expressão para a pressão vertical  $p_v$  [2],

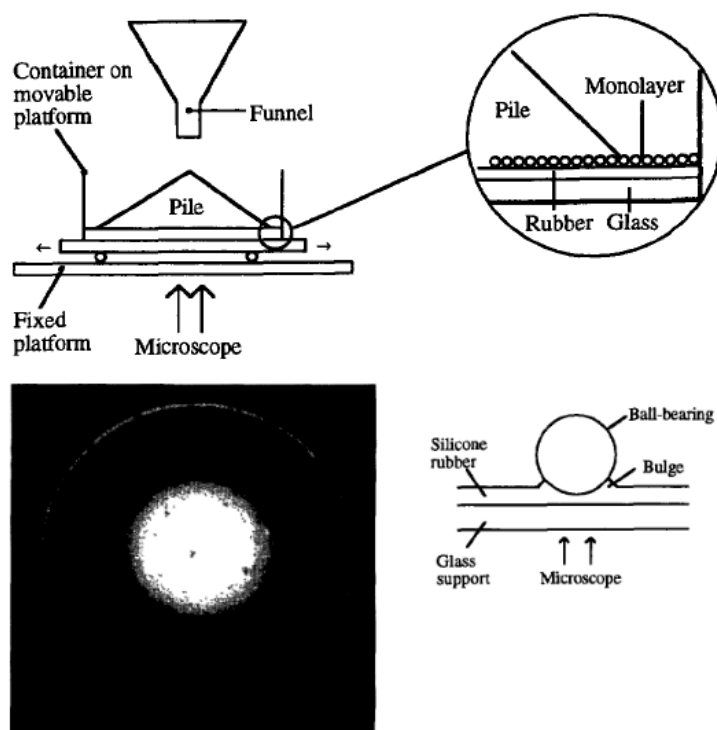
$$p_v = \frac{s\rho}{4K}(1 - e^{-4K\frac{h}{s}}) \quad (1.1)$$

Acima  $\rho$  é a densidade do cereal,  $\mu$  é o coeficiente de atrito estático entre a parede e o cereal,  $s$  é o comprimento da aresta da base quadrada e  $h$  é a altura da coluna de grãos. O coeficiente de atrito foi obtido por meio de medições e  $K$  foi determinado a partir de informações tiradas dos experimentos. Os resultados dos experimentos e a comparação com o modelo proposto são apresentados na figura 1.1.

O gráfico mostrado na figura 1.1 foi obtido usando trigo como material de preenchimento. Além do trigo, Janssen fez medidas com centeio e milho a fim de investigar se as propriedades dos grãos influenciariam o comportamento macroscópico do meio. Foram observadas diferenças apenas nos valores da pressão, mas a forma do gráfico de  $p$  X  $h$  não se altera. O milho, devido à sua superfície mais lisa, exerce maior pressão sobre o fundo.

Materiais granulares, ao serem depositados sobre uma superfície cujas fronteiras são abertas, não ocupam o estado de menor energia, ao contrário de líquidos que se espalham por toda superfície até que seu peso seja contrabalançado pela tensão superficial líquido-ar. Os grãos tendem a permanecer em um estado metaestável a menos que ocorram

perturbações muitas ordens de grandeza maiores que as flutuações térmicas de energia no meio em que estão imersos. Sistemas granulares nessas condições se organizam em uma estrutura cuja superfície livre forma um ângulo diferente de zero com a horizontal. Empilhamentos desse tipo revelaram uma propriedade bastante curiosa que chamou a atenção da comunidade. Foi relatado [3, 4] que o perfil de pressão na base de uma pilha de areia possui um mínimo abaixo de seu ápice, contrariando o senso comum que esperaria um máximo nesse ponto. A partir de então surgiram vários estudos teóricos baseados em modelos analíticos simplificados ou em simulações numéricas que fracassaram na tentativa de explicar o fato [5, 6]. Em um artigo de 1997 Brockbank et al. [7] realizaram medidas da distribuição da pressão abaixo de pilhas cônicas usando uma técnica elasto-óptica desenvolvida pelo grupo de modo a obter uma maior resolução espacial nas medidas em comparação com os trabalhos anteriores.

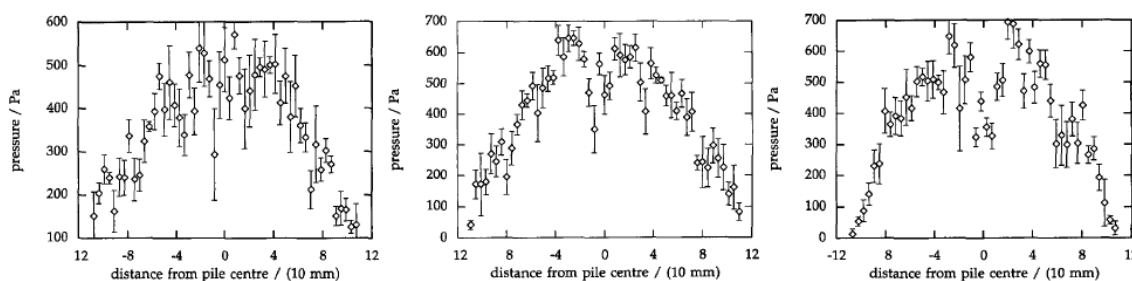


**Figura 1.2:** (a) Acima desenho esquemático da montagem utilizada por Brockbank. Abaixo à direita o efeito da compressão da camada de silicone e à esquerda a imagem gerada pelo microscópio óptico. Retirado de [7].

A técnica consiste em medir a deformação local em uma camada de silicone transparente sobre a qual a pilha é construída. Essa medição é realizada com um microscópio óptico posicionado sob a camada. O silicone é colocado sobre uma placa de vidro, e entre as partículas da pilha e a camada de silicone há uma monocamada compacta de esferas de aço. O silicone é praticamente incompressível, apesar de ser altamente deformável, de modo que o peso das esferas provoca um acúmulo de material nas bordas da área de contato formando aí uma pequena saliência. Essa região age como uma lente convergente

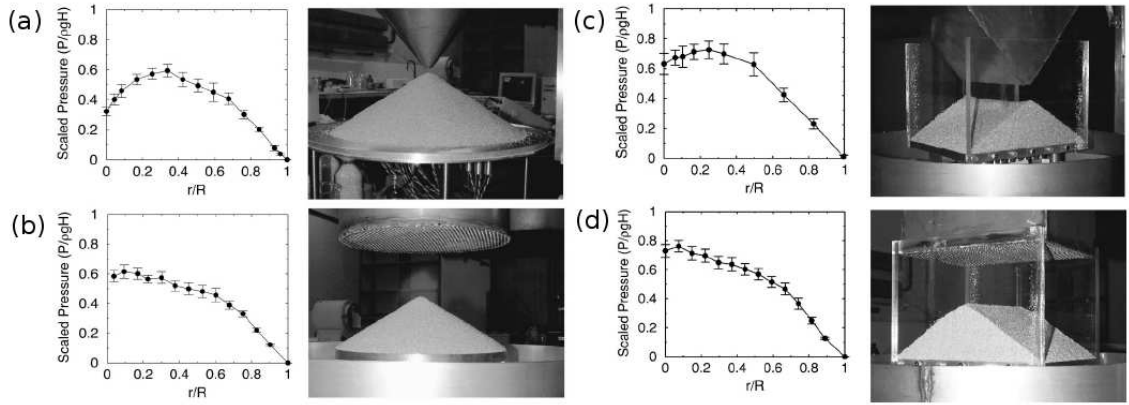
focando a luz que é refletida pela superfície da esfera gerando um contraste que permite uma medida da área de contato (cf. figura 1.2). A partir da área de contato é possível obter a pressão exercida sobre o silicone.

Foi obtido o perfil de pressão de várias pilhas variando diversas propriedades para identificação dos fatores responsáveis pela depressão no centro. Foi verificada a influência do tamanho e formato dos grãos, da variância do tamanho e da rugosidade da superfície dos mesmos. Constatou-se que o mínimo está relacionado com a razão entre o tamanho dos grãos da pilha e o tamanho das bolinhas da monocamada sobre a qual a pilha é construída (veja figura 1.2). Não foi observada variação no perfil ligado à mudança no coeficiente de atrito entre os grãos. Na figura 1.3 reproduzimos os perfis feitos por Brockbank et al. [7].



**Figura 1.3:** Perfis de pressão retirados de [7]. Da esquerda para direita: pilha de bolinhas de vidro grandes, de bolinhas de vidro pequenas e pilhas de areia.

Posteriormente, surgiu a questão de como o modo de construção das pilhas influenciaria as propriedades delas no equilíbrio. Em 1999, Vanel et al. [8] publicaram um estudo onde são obtidos os perfis de pilhas construídas de duas maneiras distintas. Além disso, procurou-se mensurar a influência do formato da pilha contrapondo resultados de pilhas cônicas ao de pilhas em formato de cunha. Uma das formas de construção consiste em uma deposição localizada por meio de um funil cuja altura varia com a altura da pilha de modo a se manter sempre próximo ao cume - *localized-source procedure*. A outra forma é uma deposição distribuída ao longo da base por meio de uma peneira cuja distância da base também é gradativamente elevada - *raining procedure*. Os experimentos mostraram uma clara dependência do perfil de pressão em relação à história da formação da pilha, onde um mínimo de pressão só aparece quando se usa o procedimento de deposição localizada. Observa-se também uma diminuição no valor do mínimo e um alargamento da depressão nas pilhas com formato cônico em relação às que possuem forma de cunha. Os autores também relataram uma acentuação do mínimo se o funil for mantido a altura fixa, o que significa que um aumento na energia inicial do sistema provoca mudanças estruturais significativas. Não foi encontrada relação entre o perfil e o tamanho da pilha, contrariando trabalhos anteriores que relataram um aumento da depressão provocado pelo aumento no tamanho [4]. O efeito relatado nesse artigo foi atribuído por Vanel ao fato das partículas das pilhas maiores serem soltas de uma altura maior.



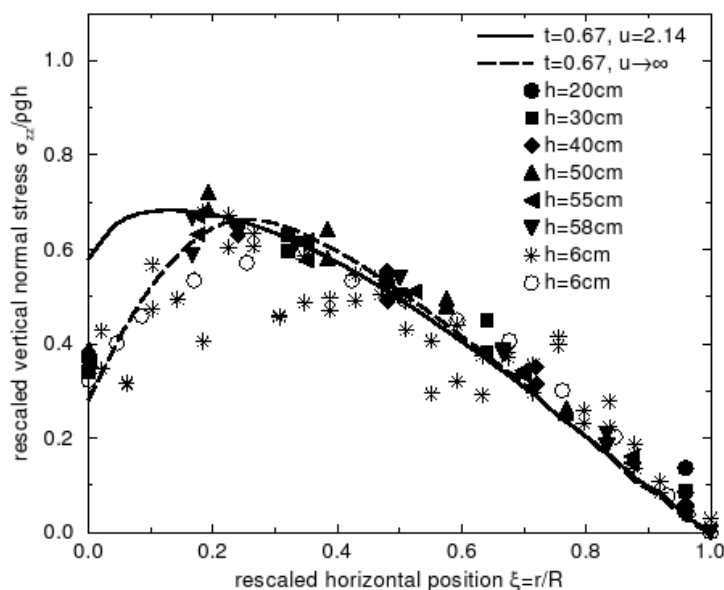
**Figura 1.4:** Perfis de pressão vs distância radial na base de pilhas (a) cônicas crescidas por deposição localizada, (b) cônicas crescidas por deposição distribuída, (c) em formato de cunha crescidas por deposição localizada e (d) em formato de cunha crescida por deposição distribuída. Ilustração retirada de [8].

Vanel propôs uma explicação intuitiva para o mínimo dizendo que é provável que, na deposição localizada, as partículas se acomodem de forma a favorecerem o aparecimento de cadeias de força na direção da inclinação da pilha. O cruzamento das cadeias no centro produziria arcos impedindo a transmissão vertical da tensão.

Essa suspeita foi verificada por Atman et al. [9] que atacaram esse problema de uma forma bastante engenhosa. Baseado na teoria de elasticidade eles realizaram um cálculo da função resposta da tensão devido a uma força localizada na superfície superior de uma caixa preenchida com material granular previamente cisalhada. Por causa do cisalhamento, os eixos principais do tensor de *stress* sofrem uma mudança de  $45^\circ$  e a tensão máxima sofre um desvio centro abaixo do ponto onde é aplicada a força. Foram analisados dois casos, um em que o preenchimento foi homogêneo ao longo de toda a extensão da caixa e outro onde a caixa foi preenchida por meio de uma sequência de avalanches. Na preparação homogênea a horizontal e a vertical são os eixos principais determinados apenas pela direção da gravidade. Na deposição por avalanches a geometria do sistema afetaria a orientação das cadeias de força e se esperaria um eixo principal a aproximadamente  $30^\circ$  (ângulo de repouso) da horizontal e o outro naturalmente perpendicular ao primeiro. O cálculo da função resposta consiste em solucionar as equações de equilíbrio impondo as condições de contorno e certas relações constitutivas que tornam o problema de fato solucionável - a princípio as equações são indeterminadas devido ao maior número de variáveis. As equações de equilíbrio dependem de uma série de parâmetros relacionados ao material (módulos de Young, coeficientes de Poisson, etc) que não são bem estabelecidos para meios granulares. Para obter os valores desses parâmetros adequados ao caso tratado faz-se uma comparação com resultados experimentais. Eles compararam com a função resposta tirada de experimentos feitos com um material foto-elástico. Em 2D eles se basearam em um resultado de Otto et al. [10] que resolvem as equações de equilíbrio analiticamente em um meio semi-infinito e em 3D resolveram numericamente usando um programa chamado CASTEM [11]. As direções dos eixos principais são usados



como parâmetros de entrada para a obtenção das soluções. No caso da preparação por avalanches os eixos principais após o cisalhamento são obtidos por uma rotação de  $15^\circ$  em relação à vertical. Comparando as respostas de tensão calculadas dessa maneira, utilizando-se os parâmetros adequados, com os perfis de pressão dos trabalhos de Šmíd e Novosad, Brockbank et al. e Vanel et al. obtém-se boa concordância, indicando a razoabilidade da explicação proposta para o efeito da depressão da tensão no centro de pilhas preparadas por deposição localizada (veja figura 1.5).



**Figura 1.5:** Comparação dos perfis de pressão em pilhas de areia obtidos experimentalmente em trabalhos anteriores com os resultados provenientes da teoria de elasticidade. Os símbolos cheios correspondem às medidas de Šmíd e Novosad [3], as estrelas aos dados de Brockbank et al. [7] e os círculos vazios aos dados de Vanel et al. [8] referentes à deposição localizada. As curvas são as previsões teóricas calculadas a partir de dois conjuntos de parâmetros conforme indica a legenda. Os parâmetros  $t$  e  $u$  dependem dos módulos de Young, coeficientes de Poisson e módulos de cisalhamento do material. Figura retirada de [9].

## 1.2 Escoamento de grãos

Sistemas granulares em um estado de não-equilíbrio apresentam fenômenos peculiares. Como veremos, pode-se induzir, por meio de vibrações ou de injeção de fluido (*fluidised beds*), uma transição de fase sólido-líquido. As vibrações podem ainda levar ao aparecimento de ondas estacionárias que são responsáveis pelos padrões obtidos por Melo et al. [12, 13]. Tal comportamento é compartilhado pelos líquidos comuns, mas há estruturas chamadas *oscillons* que apenas em meios granulares são produzidas. Meios granulares também podem apresentar um comportamento fluido mesmo sem a introdução de fortes estímulos externos exibindo uma dinâmica mais complicada e rica. Pilhas de areia são

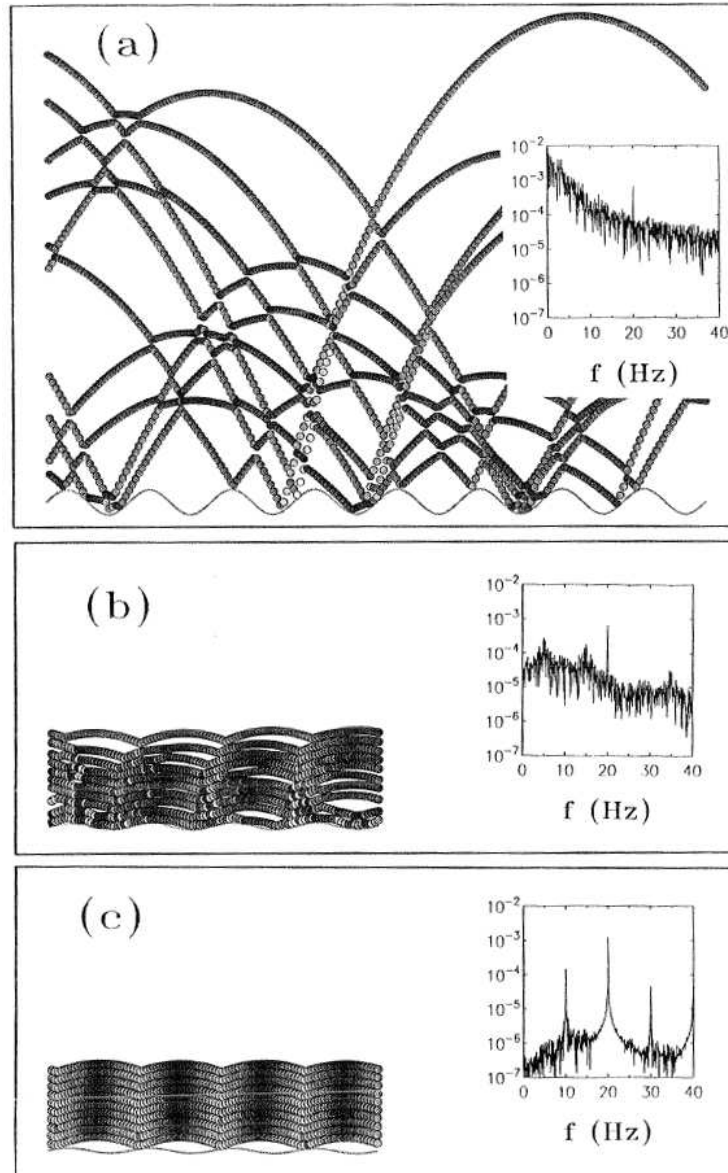
exemplos sistemas em que se observa tal comportamento. O movimento das camadas superficiais de uma pilha de areia pode se estabelecer devido a pequenas perturbações como a adição cuidadosa de um grão ou uma leve inclinação da pilha. Essas perturbações podem ocasionar avalanches, que são deslizamentos de grãos na superfície de um meio granular provocados por instabilidades. Pequenas perturbações podem ser amplificadas dando origem a grandes deslocamentos de massa. Deslizamentos de grande magnitude são observados na natureza e são responsáveis por grandes desastres em encostas de montanhas onde há ocupação humana.

### 1.2.1 Fluidização e formação de padrões

Em sua tese de doutorado Luding [14] estudou modelos de meios granulares através de simulações e verificou a transição de uma fase condensada para uma fase líquida quando o meio é estimulado por vibrações externas. Ele usou duas técnicas distintas em suas investigações: simulação dirigida por eventos, em que as partículas são perfeitamente rígidas, e dinâmica molecular, que considera as deformações durante as colisões. Uma de suas metas era fazer uma comparação entre essas duas técnicas. Faremos uma descrição de cada uma no capítulo seguinte. Primeiramente, Luding considerou um sistema composto de  $N$  partículas enfileiradas na vertical sobre uma placa sujeita à vibração e restritas a se moverem apenas nessa direção, sob ação da gravidade. As partículas, consideradas esferas duras, sofrem colisões inelásticas entre si e com a base. A dissipação é caracterizada pelos coeficientes de restituição elástica  $\epsilon$ , para colisões partícula-partícula e  $\epsilon_p$ , para colisões com a base. Dependendo dos valores dos parâmetros  $\epsilon$ ,  $\epsilon_p$  e da amplitude da vibração o sistema se comporta ora como fluido, quando as partículas apresentam um movimento errático, ora como sólido, onde há um movimento ordenado das partículas que ficam presas ao período de excitação da placa.

A aplicação de uma força vertical periódica sobre a base de um recipiente contendo material granular induz à formação de padrões espaciais semelhantes aos observados em líquidos [15, 16], porém com algumas particularidades. O estudo extensivo desse efeito foi feito por Melo e seus colaboradores [12, 13], que investigaram a variação de vários parâmetros e estabeleceram um diagrama de fases para os diversos padrões encontrados.

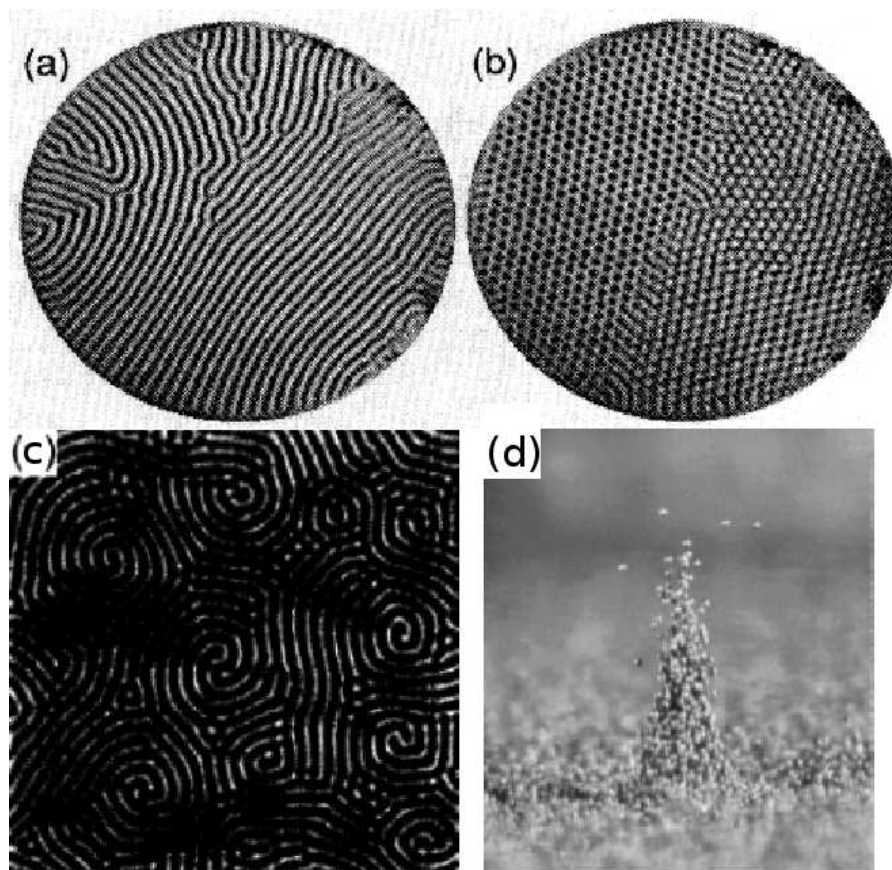
Eles realizaram experimentos em um recipiente com formato cilíndrico, parcialmente preenchido com partículas esféricas (de bronze) e submetido a vibrações senoidais por um estimulador eletromecânico. Foram feitas medições dos períodos de oscilação de cada padrão, bem como da aceleração da camada de grãos. Os resultados revelam que os padrões são devidos à presença de ondas estacionárias subharmônicas de frequências iguais à metade ou a um quarto da frequência de excitação do recipiente, e que algumas transições se devem à bifurcação do período de oscilação que passa a assumir dois valores distintos.



**Figura 1.6:** Movimento restrito à direção vertical de 10 partículas sujeitas a vibração, para diferentes valores da amplitude. Em (a) tem-se uma amplitude maior, em (c) a amplitude possui um valor menor e em (b) ela assume um valor intermediário. O gráfico interior mostra o espectro de frequências que indica o nível de ordenamento no movimento. A cor de preenchimento dos círculos representa a velocidade, sendo esta maior em tons mais claros de cinza. Retirado de [14].

O grupo também verificou a influência de outros fatores como coeficiente de restituição, densidade e tamanho das partículas e a pressão no interior do cilindro. Nenhum deles alterou significativamente os padrões observados, nem os pontos críticos. Entretanto, foi notificado uma sensibilidade em relação à espessura da camada granular e à proporção entre a altura e o diâmetro dela mostrando uma clara influência das paredes na dinâmica do sistema. Quando a largura aumenta em relação à altura, a região do diagrama de fases, onde antes se observava padrões em formato de tiras, dá lugar a formas espiraladas bem definidas, reminiscentes dos desenhos que se formam em fluidos binários. Quando a

profundidade da camada é superior a 15 vezes o diâmetro das esferas aparecem excitações localizadas chamadas *oscillons* apenas vistas em meios granulares. Na figura 1.7 mostramos fotografias de alguns desses padrões.



**Figura 1.7:** Padrões formados em uma camada de material granular por meio de vibrações externas. Nas figuras (a), (b) e (c), vemos padrões induzidos por vibração, semelhantes àqueles observados em líquidos, onde o contraste indica diferença de altura entre as regiões. A figura (d) mostra um *oscillon*, estrutura somente observada em camadas granulares com dimensões específicas e sob determinadas condições (ver texto). As figuras (a) e (b) foram retiradas de [12], a figura (c) foi retirada de [13] e a figura (d) de [17].

### 1.2.2 Avalanches em empilhamentos granulares

A dinâmica de avalanches em uma pilha de areia difere bastante da dinâmica de um meio granular fluidizado. Em pilhas de areia, geralmente os grãos em movimento se restringem a uma fina camada superficial. Os deslocamentos de grãos podem se dar por meio de um fluxo contínuo de matéria ou por um fluxo intermitente dependendo da intensidade da fonte externa de energia. Este agente externo, que pode ser tanto a adição de novos grãos ou a variação da inclinação da superfície livre, dita sozinho a dinâmica do sistema visto que perturbações térmicas são insignificantes se comparadas à energia necessária para vencer a barreira entre dois estados de equilíbrio. De fato, na ausência de alguma força

externa que injete energia no sistema, este pode permanecer preso por longos períodos de tempo em estados metaestáveis. A energia cedida ao sistema deve ser ordens de grandeza maiores que as flutuações térmicas do gás ou líquido em que o material está imerso para que sejam possíveis alterações significativas de configuração. A dinâmica dos grãos na superfície é bastante diversa daquela dos grãos interiores. Os grãos internos são bem mais estáveis pois seu movimento é impedido pelos vizinhos em todas as direções, por outro lado, quando na superfície, a partícula possui vizinhos em apenas um dos lados, estando livre para rolar pela fronteira uma vez desestabilizada. Existem alguns modelos teóricos que capturam aspectos isolados da superfície de meios granulares. Descrevemos dois deles no apêndice A.

Em 1987 Bak e colaboradores [1] propuseram um autômato celular que imitava o comportamento de uma pilha de areia. De agora em diante chamaremos esse autômato de modelo BTW. No artigo eles procuram explicar o ruído  $1/f$  observado no espectro de potência para baixas frequências em vários fenômenos. Eles relacionam esse ruído à existência de um estado crítico em sistemas dinâmicos espacialmente estendidos, onde há formação de uma estrutura auto-similar. A transição para esse estado é semelhante a uma transição de segunda ordem com a diferença de que não existe um parâmetro de controle que a caracterize. O sistema evolui naturalmente para esse estado, que foi então denominado estado crítico auto-organizado. O fato de não ser preciso o ajuste de parâmetro algum dá uma explicação mais convincente para a abundância de padrões fractais presentes na natureza.

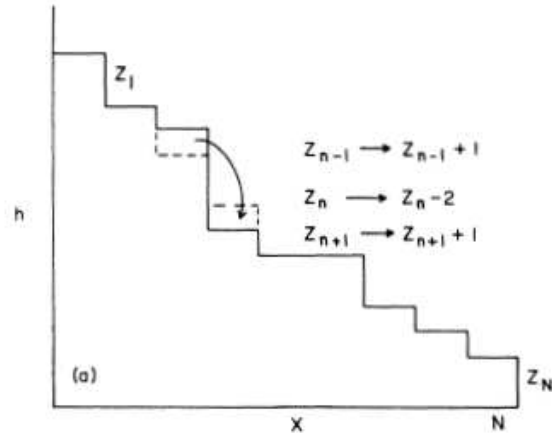
O modelo funciona da seguinte maneira em uma dimensão: define-se um vetor  $h$  de largura  $L$  igual ao tamanho do sistema, onde  $h_i$  representa a altura da pilha na posição horizontal  $i$ . A evolução da inclinação local, dada por  $z_i = h_i - h_{i+1}$ , é ditada pela seguinte regra,

$$\begin{aligned} z_i &\rightarrow z_i + 1 && \text{quando um grão é adicionado ao sítio } i \\ z_{i-1} &\rightarrow z_{i-1} - 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z_i &\rightarrow z_i - 2 && \text{quando } z_i \text{ ultrapassa o valor crítico} \\ z_{i\pm 1} &\rightarrow z_{i\pm 1} + 1 \end{aligned}$$

O estado minimamente estável é alcançado adicionando partículas ao sistema em um estado subcrítico ou deixando que o sistema relaxe a partir de um estado supercrítico em que  $z_i > z_c \forall i$ . Qualquer condição inicial culmina no estado minimamente estável, sendo esse um atrator da dinâmica. Esse modelo, em uma dimensão, pode ser pensado como uma representação grosseira de uma pilha de areia real. Sua generalização para duas ou três dimensões já não possui essa correspondência de modo tão claro.

Em duas ou mais dimensões a natureza do estado crítico é diferente do estado minimamente estável do modelo em uma dimensão. Como em  $1D$ , o estado crítico continua sendo

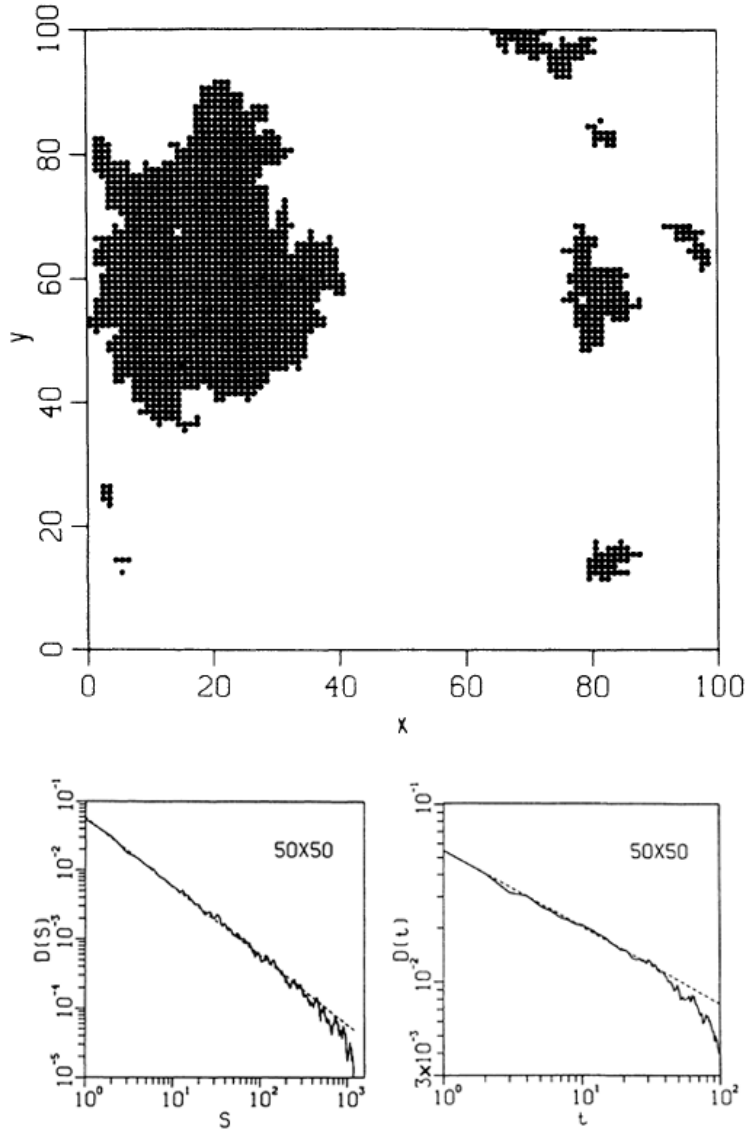


**Figura 1.8:** Funcionamento do modelo BTW em 1D. Retirado de [18].

um atrator. No entanto, pequenas perturbações não se propagam por toda extensão do sistema. As perturbações desaparecem após um intervalo de tempo cuja duração segue uma lei de potência, gerando deslocamentos de grãos de várias magnitudes, sem um tamanho característico. O espectro de potências da distribuição do tempo de vida desses deslocamentos varia com  $1/f$  para baixas frequências, o que sugere que essa propriedade, antes atribuída a um ruído, está na verdade associada a uma organização espacial do sistema, que passa a exibir uma estrutura auto-similar.

Se pensarmos em uma pilha de areia composta de grãos esféricos, que não apresentam dispersão no tamanho, é possível um estado altamente ordenado tal que a adição cuidadosa de grãos não é capaz de alterá-lo drasticamente e todo grão adicionado rola pela superfície até deixar o sistema. Esse estado equivale ao estado minimamente estável para o qual evolui o modelo BTW em uma dimensão.

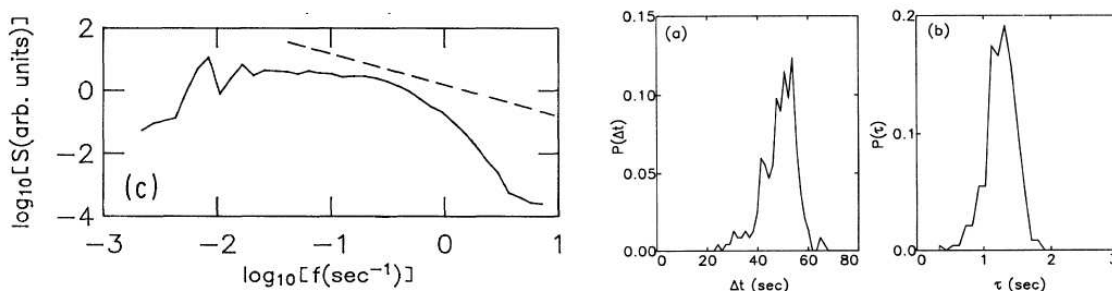
O modelo BTW foi pioneiro e relevante para a compreensão de fenômenos diversos que apresentam grandes flutuações e são invariantes por transformações de escala. Ele motivou uma série de investigações experimentais da dinâmica de avalanches em meios granulares. Evesque et al. [19] e Jaeger et al. [20] conduziram experimentos em um tambor girante parcialmente preenchido com areia, com o objetivo de verificar se o modelo de fato reproduz com fidelidade o comportamento de pilhas de areia na iminência de uma avalanche. Se a velocidade de rotação é baixa o escoamento superficial de grãos ocorre por meio de avalanches cujos tamanhos e durações são facilmente obtidos. Quando a velocidade de rotação ultrapassa um certo valor crítico o fluxo superficial de partículas torna-se contínuo e a superfície livre do meio granular passa a exibir um perfil estacionário. Ambos os grupos obtiveram as distribuições do tamanho, da duração e do intervalo entre avalanches no regime de escoamento intermitente e constataram que elas são gaussianas com médias bem definidas, o que contraria a hipótese de um estado crítico auto-organizado em materiais granulares (veja figura 1.10). Observa-se que o ângulo de inclinação da pilha oscila entre dois valores,  $\theta_r$  e  $\theta_m$ , o ângulo de repouso e o ângulo de movimento



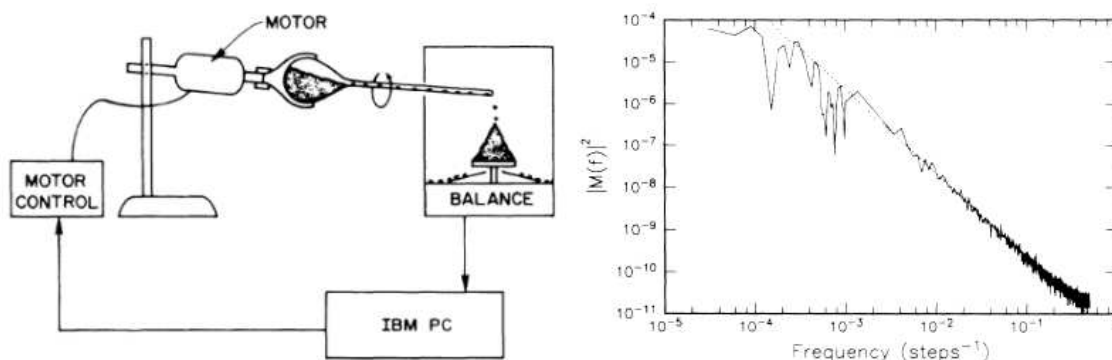
**Figura 1.9:** *Acima, tem-se a configuração no estado crítico mostrando a organização dos sítios minimamente estáveis em domínios (representados pelas manchas escuras). Os domínios são determinados perturbando um sítio, indicado na figura pelo ponto branco, por meio da adição de um grão a ele e identificando a região pela qual a perturbação se propaga. Abaixo, a distribuição de tamanho (esquerda) e do tempo de vida (direita) dos deslocamentos gerados pelas perturbações localizadas. Extraída de [18].*

respectivamente. O ângulo de repouso é o ângulo de inclinação da pilha logo após um deslizamento e o ângulo de movimento é aquele no qual o sistema está prestes a relaxar. A existência de dois ângulos vai de encontro à interpretação de que o estado estacionário seja um estado crítico. Tem-se algo mais parecido com uma transição de fase de primeira ordem onde para  $\theta < \theta_r$ , o sistema se encontra em uma fase caracterizada por ausência de escoamento e quando  $\theta > \theta_m$  o sistema se apresenta em uma fase em que há escoamento superficial. Entre esses dois ângulos o sistema pode se encontrar em uma fase ou outra dependendo de como ele chegou ao atual estado, fenômeno semelhante ao efeito de super-resfriamento, que ocorre quando um sistema é resfriado abaixo da temperatura

de transição e se mantém na fase de alta temperatura. Essa histerese se deve ao fato de que, próximo à transição, cada fase corresponde a um mínimo local na energia livre. Esses mínimos estão separados por uma barreira de energia que precisa ser vencida para que o sistema passe de uma fase à outra. Assim, um estado super-resfriado pode ser alcançado se, durante o processo de resfriamento, eliminarmos qualquer ruído responsável por flutuações que permita o sistema vencer a barreira que separa as duas fases.



**Figura 1.10:** O gráfico à esquerda mostra o espectro de potências do intervalo entre avalanches no experimento realizado por Jaeger et al. [20]. A linha tracejada representa um espectro de potência inversamente proporcional à frequência. Os outros dois gráficos são respectivamente a distribuição do intervalo entre avalanches e a distribuição da duração das avalanches. Extraída de [20].

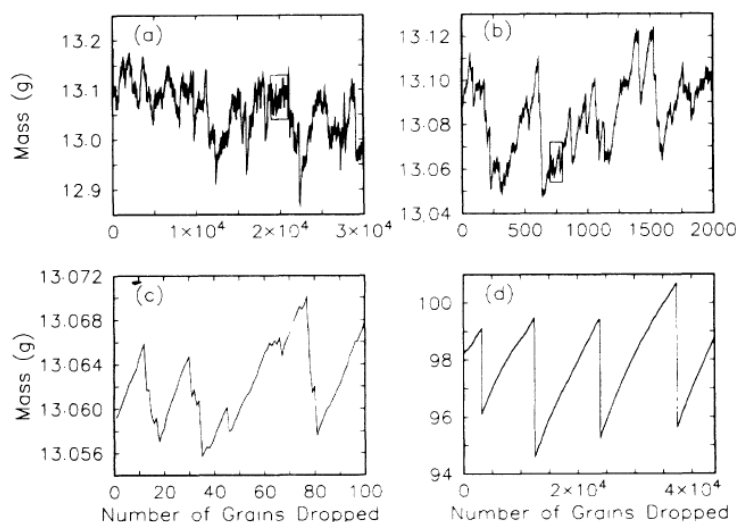


**Figura 1.11:** Do lado esquerdo é exibida a montagem usada por Held et al. [21] para estudar o comportamento de pilhas de areia. Do lado direito temos o espectro de potência do tamanho das avalanches extraído das medidas realizadas usando tal montagem.

O estudo da dinâmica de avalanches em uma geometria diferente mostrou, no entanto, resultados conflitantes. Held et al. [21] trabalharam com pilhas de areia cônicas de diferentes tamanhos e a maneira que eles usaram para medir o tamanho das avalanches possui diferenças fundamentais em relação à maneira usada nos experimentos com tambor girante. A montagem usada é constituída de uma base circular sobre a qual a pilha é formada, uma balança eletrônica localizada sob a base e um funil através do qual os grãos são depositados. A deposição é controlada por um PC que monitora as variações de massa da balança e libera a deposição de um grão apenas quando não for detectada atividade



na pilha. A balança é sensível o bastante para detectar variações da ordem da massa de um grão. Dessa forma as variações de massa constituem uma medida precisa do tamanho das avalanches. Porém apenas os deslocamentos dos grãos que escapam da pilha são contabilizados. Mostramos um diagrama esquemático da montagem utilizada e o gráfico do espectro de potência do tamanho das avalanches na figura 1.11. O comportamento crítico foi visto somente em pilhas pequenas, cuja base é constituída de no máximo 30 grãos, como pode ser constatado comparando a evolução temporal da massa de pilhas de tamanhos diversos (veja figura 1.12). Observa-se ali que o gráfico da massa em função do tempo é ruidoso, apresentando flutuações em várias escalas de tempo, para pilhas cujo diâmetro é inferior a 30 vezes o diâmetro dos grãos. Em pilhas de base maior, ao contrário, apresentam flutuações de massa apenas em uma escala de tempo característica, evidenciando ausência de comportamento crítico.



**Figura 1.12:** Gráficos da massa em função do tempo de pilhas de areia nos experimentos realizados por Held et al. [21]. Em (a) tem-se o gráfico para uma pilha cujo diâmetro é da ordem de 34 diâmetros de grão. O gráfico em (b) mostra a região indicada no gráfico da figura (a) amplificada. A região delimitada pelo retângulo em (b), por sua vez, é mostrada ampliada no gráfico da figura (c). Na figura (d), é exibido o gráfico para uma pilha de diâmetro igual a aproximadamente 68 diâmetros de grão. Figura retirada de [21].

Liu et al. [22], atribuíram a seguinte causa à discrepância entre as distribuições de avalanches nos experimentos de tambor girante e as distribuições no experimento de Held et al.: quando a razão entre o tamanho do grão e a largura do sistema é comparável à diferença  $\delta = \theta_m - \theta_r$  entre os ângulos de repouso e de movimento (medidos em radianos), a adição de um único grão eleva a inclinação além de  $\theta_m$ , se esta já tiver atingido o valor do ângulo de repouso. Há, então, uma perda de resolução angular que mascara a histerese observada em pilhas maiores, dando a impressão de que há apenas um ângulo crítico. O resultado de Held estaria, então, associado a um efeito de tamanho finito. Tal efeito se torna significativo para pilhas cuja base possui tamanho inferior a  $30d$ , onde

$d$  é o diâmetro do grão. Nos experimentos conduzidos por Held et al. [21] as pilhas tinham aproximadamente este tamanho. Eles usaram pilhas cujos diâmetros da base mediam 0,38; 0,75; 1,5 e 3,0 polegadas e cujos grãos possuíam diâmetro entre  $1/25$  e  $1/20$  polegada. Apesar desses indícios bastante fortes de que a lei de escala para a distribuição de avalanches em pilhas pequenas não passe de um efeito de tamanho finito, ainda não é possível colocar um ponto final na questão. Jaeger et al. [20] propõem então um teste para tentar sustentar a hipótese de que realmente não há uma transição de segunda ordem. Eles aplicam uma vibração com intensidade suficiente para que o valor de  $\delta$  fique próximo de zero e sob essa vibração eles coletam os dados sobre as avalanches. O resultado do teste mostra um pequeno alargamento do espectro que contudo permanece distante de uma lei de potência. Tem-se então mais um indicativo favorável à idéia de uma transição de fase de primeira ordem.

Uma questão que surge naturalmente diz respeito à origem dessa biestabilidade em meios granulares. Esse problema foi atacado pela primeira vez por Bagnold [23], que chamou a atenção para a necessidade de que haja uma dilatação das camadas superficiais na iminência de um deslizamento. Fazendo cálculos baseados em casos simples em que o material se encontra em um estado altamente ordenado, ele estimou que  $\delta\theta$  devia ser aproximadamente  $2^\circ$ , que é coerente com o valor medido para areia.

Uma outra possível explicação para os resultados obtidos por Held et al. [21] é a de que a maneira que foi usada para se medir as avalanches não é muito feliz pois esconde os deslizamentos de grãos que não escapam da pilha. Apenas avalanches que percorrem toda a extensão da pilha, que na maioria dos casos correspondem a eventos de grande magnitude, seriam detectadas. Quem primeiro atentou para este fato foram Buchholtz e Pöschel [24] que fizeram simulações de empilhamentos granulares usando dinâmica molecular. Eles compararam as estatísticas de avalanches medidas da forma como fizeram Held e colaboradores [21] com outra em que as avalanches foram medidas com base na variação da energia potencial entre o estado inicial, quando a avalanche começa, e o estado final quando o equilíbrio mecânico é restabelecido. Um ponto discutível no trabalho deles, entretanto, é o modelo de força usado para a interação entre as partículas que não leva em conta o atrito estático. Eles propõem uma alternativa para substituir o atrito que é considerar partículas não esféricas. O efeito da geometria irregular dos grãos seria equivalente ao do atrito estático, e de fato, eles relataram resultados consistentes com alguns dados experimentais [25]. A principal crítica dos autores contra os modelos comumente usados nas simulações de dinâmica molecular (inclusive nesta dissertação), que os motivou a buscar uma abordagem nova, se refere à falta de um tratamento adequado para o rolamento entre as partículas, que é muito relevante no caso de partículas esféricas e é fortemente inibido se os grãos possuem um formato irregular. Um estudo da estatística de avalanches em pilhas bi-dimensionais usando dinâmica molecular com modelo para o atrito estático nos moldes do modelo de Cundall e Strack [26], - o mesmo que nós usaremos aqui - foi realizado por Lee [27] e revelou resultados que, embora não-conclusivos devido ao pequeno número de amostras, apontam na direção daqueles provenientes dos experimentos

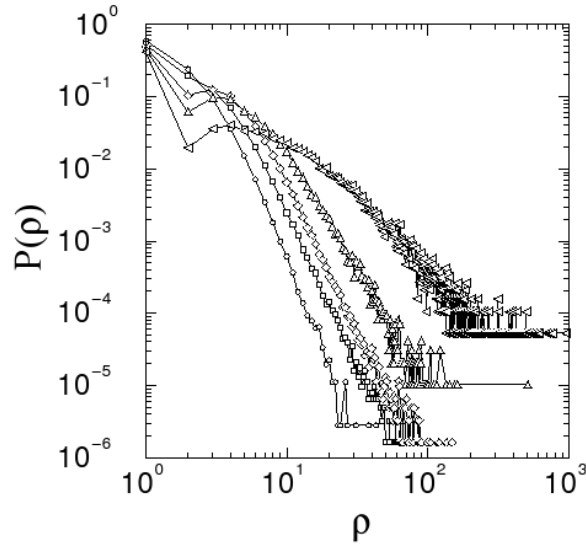
de Held. Lee mede as avalanches exatamente como feito por Held pela variação de massa do sistema.

Um trabalho experimental conduzido por Frette et al. [28] levantou outras hipóteses bastante interessantes sobre os mecanismos responsáveis pela existência de um comportamento crítico em empilhamentos granulares. Eles obtiveram a distribuição de avalanches em pilhas de arroz para diferentes espécies da planta. O objetivo era investigar a influência da forma do grão e do grau de polimento na distribuição de avalanches. Uma das espécies possui uma semente mais alongada e a outra mais arredondada. Foi verificado um comportamento crítico apenas para as pilhas formadas pelos grãos mais alongados. O resultado foi interpretado como uma evidência de que propriedades inerciais dos grãos estão diretamente ligados à natureza do estado de pilhas na iminência de uma avalanche. As características superficiais dos grãos não mostraram nenhuma relação com a distribuição de avalanches, o que significa que o atrito não é um fator relevante na caracterização do estado crítico. As avalanches foram mensuradas de modo a contemplar todos os eventos por meio da energia potencial dissipada o que livra os resultados dos problemas apontados no parágrafo anterior.

Para fechar a discussão sobre a criticalidade auto-organizada em empilhamentos granulares citaremos ainda uma abordagem seguida por Manna e Herrmann [29]. Eles imaginaram que talvez o estado crítico pudesse ser detectado de maneira mais clara em empilhamentos observando, em vez de avalanches superficiais, o movimento interno da pilha causado pela remoção de grãos da base. Essa suspeita, confirmada em seus resultados, era baseada no fato de que efeitos inerciais são fortemente suprimidos no interior do meio granular. O estudo que eles fizeram foi simulacional usando uma espécie de autômato celular determinístico. O método foi concebido de modo a imitar a dinâmica de partículas rígidas bi-dimensionais confinadas em uma caixa e sujeitas a um campo gravitacional. Na simulação o movimento dos grãos ficam restritos a dois casos: ou o grão sofre uma queda de uma determinada distância ou rola sobre a superfície de outro grão que por ventura esteja obstruindo a queda. A justificativa para tal simplificação se deve ao alto grau de empacotamento das partículas confinadas no interior da caixa. As avalanches foram medidas contando-se o número de grãos que escapavam por um orifício aberto na base do empilhamento. Elas mostraram uma distribuição que decai segundo uma lei de potência (veja figura 1.13) correspondendo a um estado crítico.

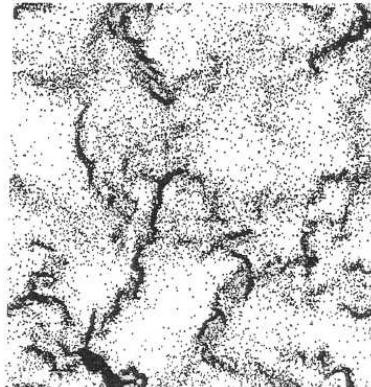
### 1.3 Formação de aglomerados

Uma característica que diferencia fundamentalmente os gases de meios granulares é o fato de nestes as colisões serem inelásticas. O caráter dissipativo dos choques altera significativamente as propriedades macroscópicas do material. Ao contrário do que ocorre com um gás, o meio granular, em determinadas condições, tende a se afastar do estado



**Figura 1.13:** Distribuição de avalanches internas na simulação feita por Manna e Herrmann [29]. O eixo horizontal representa o tamanho das avalanches que são o número de partículas que vazam pelo orifício. Tem-se distribuições para várias larguras do orifício. As curvas mais à direita correspondem a orifícios maiores.

cujas distribuições de massa e de energia sejam homogêneas. Neste caso, qualquer flutuação na densidade é amplificada gerando aglomerados que se estruturam em longas cadeias. Esses aglomerados possuem uma tendência a se manterem pois a taxa de colisões aumenta expressivamente com o aumento da densidade e, conseqüentemente, a dissipação é mais forte nas regiões mais densas.



**Figura 1.14:** Resultado obtido por Zanetti e Goldhirsch de uma simulação de um gás granular usando o método colisional [30].

Zanetti e Goldhirsch [30] estimaram em que condições essas estruturas são favorecidas. Eles calcularam, com base na hidrodinâmica clássica, que um sistema de extensão linear  $L$ , cujos grãos inicialmente ocupam uma fração  $\eta$  do volume e estão distribuídos de maneira uniforme, se torna instável para formação de aglomerados se  $\eta L$  ultrapassa um certo valor crítico que depende do grau de inelasticidade. Se  $L$  for grande o suficiente esse

resultado implica que o sistema sempre se torna instável, não importa quão pequena seja a inelasticidade.

Um tipo especial de aglomerado foi reconhecido por McNamara e Young [31] em sistemas unidimensionais, em que um número infinito de colisões ocorre em um tempo finito. Esse fenômeno foi denominado colapso inelástico e persiste em dimensões mais altas dando origem a densas cadeias de partículas. A ocorrência desse fenômeno depende do número de partículas e do coeficiente de restituição elástica. Quanto mais inelástica forem as colisões, menor o número de partículas necessário para existência de tal instabilidade. Há evidências também de que aglomerados comuns não passam de estados transientes que culminam invariavelmente em colapso inelástico ou na formação de bandas cisalhantes, que são regiões em que camadas de material essencialmente estático separam faixas em que as partículas se deslocam coletivamente com velocidade elevada.

Um aspecto do processo de formação de aglomerados digno de nota diz respeito ao formato dessas estruturas. As partículas normalmente se aglutinam formando longas fitas que lembram qualitativamente os mapas de densidade do universo visível. Daí especula-se que as colisões inelásticas tenham papel relevante na formação de galáxias, sendo a força gravitacional responsável por manter as partículas confinadas exercendo função similar à das paredes de um recipiente.

Relatamos aqui alguns fenômenos e propriedades relativos aos meios granulares. No próximo capítulo discutiremos algumas técnicas simulacionais comumente empregadas na análise de problemas envolvendo tais sistemas. Apresentaremos as duas técnicas mais usadas para estudo da dinâmica de meios granulares, simulação colisional e dinâmica molecular, daremos uma breve descrição da dinâmica de contatos, um método mais recente que é empregado no caso de sistemas quasi-estáticos, e mostraremos por fim uma adaptação do método de Monte Carlo usado no problema da segregação induzida por vibração.

# Capítulo 2

---

## Métodos Simulacionais

O objetivo de simulações computacionais é buscar um entendimento das propriedades macroscópicas de sistemas de partículas em termos das interações microscópicas. Elas servem de complemento aos experimentos reais que muitas vezes não conseguem auscultar determinadas grandezas que o caracterizam e que as simulações podem extrair com maior facilidade. De fato, nestas é possível um controle muito maior das variáveis envolvidas. Em um laboratório tal controle é muito mais custoso devido à necessidade de se isolar as variáveis de interesse em meio a uma infinidade de perturbações indesejáveis.

As simulações computacionais funcionam como uma ponte entre as escalas microscópicas de tempo e de comprimento e o mundo macroscópico do laboratório. Tenta-se um modelo para interação entre as partículas e obtém-se como resultado algumas propriedades de *bulk* do material. A comparação com resultados de medidas experimentais reflete o grau de acerto na escolha do modelo. Além disso é possível comparar os resultados da simulação com previsões baseadas em algum formalismo teórico.

Basicamente, existem duas famílias de técnicas simulacionais: dinâmica molecular e Monte Carlo. Há uma grande diferença entre esses dois tipos de abordagem. Técnicas de Monte Carlo se baseiam em probabilidades de transição entre os diversos estados do espaço de fase e exigem, portanto, um conhecimento intuitivo de como o sistema deveria se comportar. Já na dinâmica molecular o ponto de partida são as equações de movimento e os potenciais de interação. A diferença, pois, reside basicamente nas informações usadas como ponto de partida. Entre esses dois extremos existe um gradiente de técnicas híbridas que combinam o uso de procedimentos heurísticos com as leis básicas que governam a dinâmica do sistema.

Recentemente, o uso de simulações numéricas no estudo de diversos fenômenos tem se intensificado. Isso se deve ao enorme desenvolvimento da informática que multiplica a cada ano a capacidade de processamento dos computadores, ao mesmo tempo que reduz os custos de fabricação tornando-os mais acessíveis. A pesquisa em materiais granulares, em particular, tem tirado enorme proveito dessa ferramenta e grande parte

do entendimento que hoje se possui desses sistemas é devido à análise de resultados obtidos de simulações. Apesar de haver alguns estudos usando métodos de Monte Carlo, as técnicas mais utilizadas para simular materiais granulares são a dinâmica molecular e simulação colisional. Nos últimos anos surgiu um outro método, dinâmica de contatos, apropriado para sistemas estáticos ou quasi-estáticos. Falaremos de cada um desses métodos separadamente a seguir.

## 2.1 Dinâmica molecular

A simulação de dinâmica molecular consiste em solucionar numericamente, passo a passo, as equações de movimento clássicas de um sistema de  $N$  partículas que interagem via um potencial  $V$ . Na formulação newtoniana, o problema se apresenta na forma de  $3N$  equações diferenciais de segunda ordem,

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i \quad , \quad i = 1, \dots, N . \quad (2.1)$$

Acima,  $m_i$  e  $\vec{r}_i$  são respectivamente a massa e a posição da partícula  $i$  e  $\vec{F}_i$  é a força resultante que atua nesta partícula. A força que atua em cada partícula pode ser devida a um agente externo ou à interação com as outras partículas do sistema. As forças externas não oferecem muita dificuldade no cálculo das trajetórias das partículas pois geram um potencial estático ou que varia conforme uma lei bem determinada. As forças que surgem da interação entre as partículas do sistema dependem das posições e, eventualmente, das velocidades de todas elas, o que requer um série de cuidados na hora de se resolver as equações. Veremos no próximo capítulo quais são esses cuidados quando descrevermos o sistema que iremos simular.

Para resolver um sistema de equações diferenciais existe uma miríade de métodos [33] chamados métodos de diferença finita. A filosofia desses métodos consiste em discretizar o tempo e achar valores aproximados das variáveis dinâmicas no subconjunto gerado pela discretização. O cálculo das variáveis é feito passo a passo, obtendo-se os valores em  $t + \delta t$  a partir dos valores em  $t$  por meio da expansão de Taylor em torno de  $t$  até a ordem desejada,

$$\vec{r}^p(t + \delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t^2 + \frac{1}{6}\vec{b}(t)\delta t^3 \dots ,$$

$$\vec{v}^p(t + \delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{b}(t)\delta t^2 \dots ,$$

$$\vec{a}^p(t + \delta t) = \vec{a}(t) + \vec{b}(t)\delta t \dots ,$$

$$\vec{b}^p(t + \delta t) = \vec{b}(t) + \dots$$

O superescrito  $p$  se refere às quantidades preditas.

Devido ao caráter não-linear das equações diferenciais que descrevem a maioria dos sistemas de interesse, pode ocorrer que as soluções delas sejam muito sensíveis às condições iniciais. Qualquer desvio na estimativa das posições e velocidades iniciais das partículas pode aumentar rapidamente à medida que o tempo passa. Esta propriedade é extremamente desagradável do ponto de vista de quem pretende resolver tais equações numericamente, pois a cada passo de tempo o algoritmo comete um erro de avaliação das variáveis dinâmicas que, além de individualmente ser amplificado com o tempo, se soma aos erros cometidos nos passos anteriores. O desvio da trajetória real tende a aumentar devido ao acúmulo dos erros em cada passo. As estimativas das posições, velocidades e acelerações no tempo  $t + \delta t$  contêm um erro que é maior quanto menor for a quantidade de termos que se considera na expansão e quanto maior o tamanho do passo de tempo  $\delta t$ . Uma maneira de minorar esse problema é corrigir em cada etapa os valores previstos para as posições e suas derivadas temporais. A magnitude do erro cometido pode ser avaliada pela diferença entre a aceleração predita e a calculada após a atualização do campo de forças,

$$erro \sim \delta \vec{a}(t + \delta t) = \vec{a}^c(t + \delta t) - \vec{a}^p(t + \delta t),$$

onde o índice  $c$  representa a quantidade corrigida. As correções nas outras variáveis dinâmicas serão então proporcionais a  $\delta \vec{a}(t + \delta t)$ ,

$$\vec{r}^c(t + \delta t) = \vec{r}^p(t) + c_0 \delta \vec{a}(t + \delta t),$$

$$\vec{v}^c(t + \delta t) = \vec{v}^p(t) + c_1 \delta \vec{a}(t + \delta t),$$

$$\vec{a}^c(t + \delta t) = \vec{a}^p(t) + c_2 \delta \vec{a}(t + \delta t),$$

$$\vec{b}^c(t + \delta t) = \vec{b}^p(t) + c_3 \delta \vec{a}(t + \delta t),$$

e os coeficientes dos termos de correção variam de acordo com o método utilizado. O procedimento de correção pode ser iterado de forma a reduzir o erro até atingir um valor aceitável. Isso é feito colocando-se nas equações acima os valores corrigidos no lugar dos valores preditos, o que nos fornecerá uma nova correção. Entretanto, tal procedimento torna o cálculo muito mais pesado pois, para cada correção, é necessário que se atualize as forças. O cálculo de forças é a tarefa mais árdua em simulações de dinâmica molecular de modo que, geralmente, não se costuma realizar mais de duas correções nos valores



inicialmente preditos. Mesmo aplicando várias correções nenhum método numérico é capaz de fornecer eficientemente boas soluções em intervalos de tempo muito longos.

O esquema descrito acima é o esqueleto de uma variedade de métodos [34]. Ele pode ser resumido na seguinte sequência de tarefas:

1. Calcular no instante  $t + \delta t$  o valor das posições e de quantas derivadas temporais das posições forem necessárias para o grau de precisão requerido a partir dos seus valores no instante  $t$ .
2. Calcular as forças que atuam nas partículas se elas estivessem na configuração prevista.
3. Corrigir a configuração do sistema usando as acelerações obtidas das forças calculadas em (2) e das equações de movimento.
4. Calcular quaisquer variáveis de interesse como energia, temperatura, parâmetros de ordem, e retornar para o passo (1).

Existem certas propriedades que, espera-se, um bom método deve possuir. Em relação à eficiência, desejamos que ele seja rápido, consuma pouca memória e possibilite o uso de um passo de tempo largo. Ao lado dessas características, queremos também que ele produza trajetórias no espaço de fase tão fiéis quanto possível às trajetórias exatas. Portanto é importante que as leis de conservação dos momentos linear e angular e - no caso de sistemas conservativos - da energia estejam devidamente incorporadas ao algoritmo e que as soluções geradas sejam invariantes por inversão temporal. Além disso, seria bom se o algoritmo fosse simples de se implementar. Daremos a seguir uma descrição de uma família de métodos muito usados em simulações de dinâmica molecular.

### 2.1.1 Algoritmo de Verlet

Talvez o método mais usado para se integrar as equações de movimento seja o método de Verlet [35]. O método consiste em solucionar diretamente as equações 2.1, substituindo as derivadas segundas por operadores de diferença,

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} \longrightarrow \frac{\vec{r}(t + \delta t) - 2\vec{r}(t) + \vec{r}(t - \delta t)}{(\delta t)^2} .$$

Fazendo a substituição na equação de movimento obtemos uma relação de recorrência que nos permite calcular a configuração do sistema no tempo  $t + \delta t$  a partir do conhecimento da configuração em  $t$  e em  $t - \delta t$ ,

$$\vec{r}(t + \delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \delta t) + \vec{a}(t)(\delta t)^2 . \quad (2.2)$$

A equação acima pode ser deduzida formalmente somando-se as séries de Taylor de  $\vec{r}(t+\delta t)$  e  $\vec{r}(t-\delta t)$  em torno de  $t$  e truncando o resultado no termo de ordem  $(\delta t)^2$ . Notemos que as velocidades não entram em momento algum no processo. Se for preciso saber o valor das velocidades, por exemplo para o cômputo da energia cinética, ela pode ser estimada a partir do conhecimento das posições,  $\vec{v}(t) = [\vec{r}(t+\delta t) - \vec{r}(t-\delta t)]/2\delta t$ . O algoritmo de Verlet possui a virtude de gerar soluções invariantes por inversão temporal, mas peca por não lidar bem com as velocidades e por introduzir algumas imprecisões numéricas [36].

Modificações do método foram propostas para driblar essas deficiências, entre elas se destaca o algoritmo *velocity Verlet* desenvolvido em 1982 por W. C. Swope et al. [37]. Esse algoritmo minimiza os erros de arredondamento e dá um tratamento adequado às velocidades. Os valores das posições, velocidades e acelerações são estimados todos no mesmo instante de tempo e posteriormente as velocidades são corrigidas. O algoritmo é definido pelas seguintes fórmulas de recorrência,

$$\vec{r}(t + \delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)(\delta t)^2, \quad (2.3)$$

$$\vec{v}(t + \delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \delta t)]\delta t. \quad (2.4)$$

Para se chegar à equação 2.4, primeiro se calcula as posições já definitivas em  $t + \delta t$ , e as velocidades em um instante de tempo intermediário,  $t + \delta t/2$ , usando os valores das acelerações em  $t$ ,

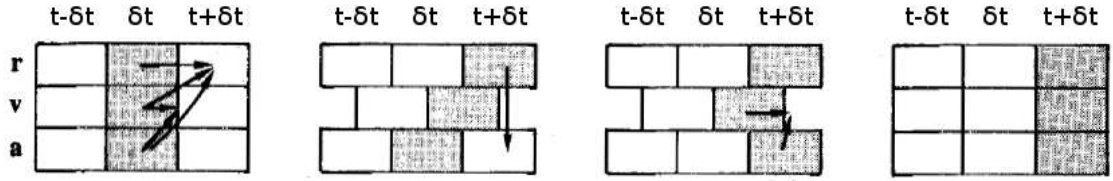
$$\vec{v}(t + \delta t/2) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\delta t.$$

Em seguida realiza-se o cálculo do campo de força da nova configuração e finalmente calcula-se as velocidades em  $t + \delta t$  usando as novas acelerações,

$$\vec{v}(t + \delta t) = \vec{v}(t + \delta t/2) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + \delta t)\delta t.$$

Eliminando o termo  $\vec{v}(t + \delta t/2)$  presente nos dois passos acima recuperamos a equação 2.4. Representamos esquematicamente as etapas envolvidas no cálculo das variáveis durante um passo de tempo no diagrama da figura 2.1.

Há uma outra maneira, mais elegante, de se derivar as fórmulas de recorrência que definem o algoritmo *velocity Verlet*, que foi apresentada por Allen [32]. A dedução, é feita no âmbito do formalismo de Hamilton. Dado um sistema descrito por um hamiltoniano  $H$ ,



**Figura 2.1:** Os diagramas mostram a ordem em que as variáveis são atualizadas durante um passo de tempo do método. Os retângulos preenchidos representam os valores armazenados no instante atual e as setas indicam as informações necessárias para o cálculo de cada variável. Figura extraída de [38].

uma determinada grandeza  $A(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i)$  associada a esse sistema evolui no tempo de acordo com a equação de Liouville,

$$\dot{A} = \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \right) \equiv i\mathbf{L}A ,$$

onde

$$\mathbf{L} \equiv \left( \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right)$$

é o operador de Liouville, gerador da dinâmica do sistema. Esta é uma equação diferencial linear de primeira ordem cuja solução, já bastante conhecida, é a função exponencial,

$$A(t) = e^{i\mathbf{L}t} A(0) = \left( e^{i\mathbf{L}\delta t} \right)^n A(0) = \left[ e^{i(\mathbf{L}_r + \mathbf{L}_p)\delta t} \right]^n A(0) , \quad t = n\delta t .$$

Na segunda igualdade acima o tempo foi repartido em pequenos intervalos tendo em vista a necessidade de fazermos aproximações na exponencial a fim de avaliarmos numericamente. Na terceira igualdade fizemos uma decomposição do operador de Liouville onde

$$i\mathbf{L}_r = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \quad e \quad i\mathbf{L}_p = \sum_i \mathbf{f}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} .$$

Fazemos agora a seguinte aproximação, que no limite  $\delta t \rightarrow 0$  se torna exata,

$$e^{i\mathbf{L}_r\delta t + i\mathbf{L}_p\delta t} \simeq e^{i\mathbf{L}_p\delta t/2} e^{i\mathbf{L}_r\delta t} e^{i\mathbf{L}_p\delta t/2} .$$

Substituindo a expressão aproximada na solução que determina a evolução das variáveis  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{p}$  e fazendo algumas manipulações chegamos facilmente nas relações que definem o algoritmo *velocity Verlet*.

## 2.2 Simulação Colisional

Este método considera as partículas do sistema como perfeitamente rígidas. Em um choque as partículas interagem durante um intervalo de tempo infinitesimal. O método consiste, então, em prever quando haverá colisões e alterar as velocidades das partículas envolvidas nos choques. Como o tempo de colisão é considerado nulo nesse algoritmo, as colisões são sempre binárias, não havendo necessidade de se preocupar com interação entre múltiplas partículas. Para levar em conta o caráter inelástico dos choques faz-se uso da seguinte relação entre as velocidades relativas entre duas partículas, 1 e 2, antes e depois da colisão,

$$\epsilon = -\frac{v_2^{(n)} - v_1^{(n)}}{u_2^{(n)} - u_1^{(n)}} \quad (2.5)$$

As velocidades anteriores à colisão são denotadas por  $u$  e as velocidades com que elas emergem da colisão por  $v$ . O  $n$  superescrito indica a componente normal ao plano de contato. Esta relação foi verificada experimentalmente por Newton para diversos corpos. De fato se as superfícies dos corpos forem suficientemente polidas constata-se que, em colisões não-frontais, a componente da velocidade relativa ao longo do plano de contato não se altera significativamente. A constante  $\epsilon$ , chamada coeficiente de restituição elástica, é um parâmetro fenomenológico relacionado com a inelasticidade do choque. Para as colisões elásticas tem-se  $\epsilon = 1$ . Para as completamente inelásticas, quando as partículas permanecem juntas após a colisão,  $\epsilon = 0$ .

Se considerarmos as partículas como esferas, impormos a conservação do momento linear e supormos que o atrito coulombiano seja sempre igual ao seu valor máximo  $|\Delta\vec{P}^{(t)}| = \mu|\Delta\vec{P}^{(n)}|$ , temos as seguintes equações que relacionam as velocidades antes e depois de uma colisão não-frontal entre duas partículas, 1 e 2,

$$\vec{v}_1 = \vec{u}_1 + \frac{\Delta\vec{P}}{m_1} \quad , \quad \vec{\omega}'_1 = \vec{\omega}_1 - \frac{d_1}{2I_1}\vec{n} \times \Delta\vec{P} \quad (2.6)$$

$$\vec{v}_2 = \vec{u}_2 - \frac{\Delta\vec{P}}{m_2} \quad , \quad \vec{\omega}'_2 = \vec{\omega}_2 - \frac{d_2}{2I_2}\vec{n} \times \Delta\vec{P} \quad (2.7)$$

onde  $\vec{\omega}'_i$ ,  $\vec{\omega}_i$ ,  $m_i$ ,  $I_i$  e  $d_i$  são respectivamente a velocidade angular anterior à colisão, após à colisão, a massa, momento de inércia e o diâmetro da partícula  $i$ ,  $\vec{n} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  é o vetor unitário normal ao plano de contato e  $\Delta\vec{P}$ , a variação do momento linear da partícula 1, é dada por,

$$\Delta\vec{P} = m_{12}(1 + \epsilon) \left[ \mu\vec{u}_c^{(t)} \cotg(\gamma) - \vec{u}_c^{(n)} \right] . \quad (2.8)$$

Acima  $m_{12} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  é a massa reduzida do sistema composto pelas partículas 1 e 2,  $\gamma$  é o ângulo entre  $\vec{n}$  e  $\vec{u}_c$  e  $\vec{u}_c$  é velocidade relativa entre as partículas no ponto de contato definida como

$$\vec{u}_c = \vec{u}_1 - \vec{u}_2 - \left( \frac{d_1}{2} \omega_1 + \frac{d_2}{2} \omega_2 \right) \times \vec{n} .$$

Ao se deter com um pouco de atenção diante da equação 2.8 nota-se que há uma grave falha no resultado ao qual acabamos de chegar. Quando  $\gamma$  se aproxima de  $\pi$ , ou seja, quando a colisão se torna cada vez mais frontal, a variação do momento linear  $\Delta \vec{P}$  diverge devido ao fator  $\cot g(\gamma)$ . A causa disso reside em uma super-simplificação quando supomos a reação tangencial sempre dada por seu valor máximo. Para colisões quase frontais geralmente o contato não é deslizante e o valor da força de atrito pode assumir qualquer valor em  $[0, \mu F^{(n)}]$ . Uma solução simples para esse problema se dá via a introdução de um segundo parâmetro fenomenológico  $\beta_0 = -v_c^{(t)} / u_c^{(t)}$ . A equação 2.8 é substituída por,

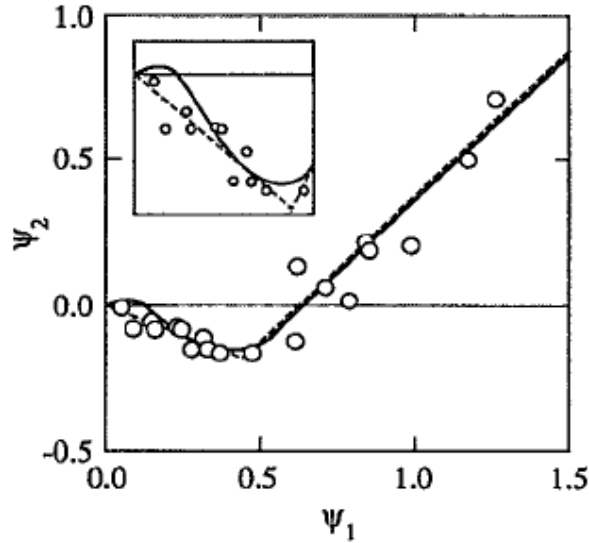
$$\Delta \vec{P} = -m_{12}(1 + \epsilon) \vec{u}_c^{(n)} - \frac{2}{7} m_{12}(1 + \beta) \vec{u}_c^{(t)} \quad (2.9)$$

onde  $\beta = \beta_0$  se  $\gamma \geq \gamma_0$ ,  $\gamma_0$  o ângulo que delimita o regime em que não ocorre deslizamento, e  $\beta = -1 - \frac{7}{2} \mu (1 + \epsilon) \cot g(\gamma)$  se  $\gamma \leq \gamma_0$ , o que recupera o resultado anterior para a variação do momento. A continuidade da função  $\beta(\gamma)$  estabelece que o ângulo  $\gamma_0$  e  $\beta_0$  devem estar relacionados por meio de

$$-tg(\gamma_0) = \frac{7}{2} \mu \frac{1 + \epsilon}{1 + \beta} . \quad (2.10)$$

Essa abordagem para se modelar colisões não frontais entre esferas foi proposta por Foerster et al. [39]. Eles fizeram experimentos de colisões entre bolinhas de vidro em que foram coletados, por meio de uma câmera de alta resolução temporal, as posições das bolinhas durante o choque. Com essas informações foi possível obter os valores das velocidades antes e depois da colisão e posteriormente a variação de momento linear. A figura 2.2 mostra a comparação das previsões do modelo com os dados experimentais.

Uma vez que sabemos como acontece a troca de momento nas colisões, o método é implementado da seguinte forma: a partir das condições iniciais nas posições e velocidades das partículas prevê-se o instante em que ocorrerá a primeira colisão, supondo que nesse intervalo as partículas se movam em vôo livre; atualiza-se o valor das variáveis para o valor previsto nesse instante e altera-se o valor das velocidades das partículas que colidiram de acordo com as equações 2.6 e 2.7; o procedimento é então repetido usando como condições iniciais o valor das variáveis calculadas no passo anterior. Percebe-se imediatamente que o tempo aqui não é discretizado de maneira uniforme, motivo pelo qual diz-se que esta



**Figura 2.2:** Gráfico de  $\Psi_2 \equiv v_c^{(t)}/u_c^{(n)}$  em função de  $\Psi_1 \equiv u_c^{(t)}/u_c^{(n)}$  para colisões binárias entre esferas de vidro. A linha tracejada corresponde ao ajuste das equações fornecidas pelo modelo. A linha cheia se refere ao modelo de Maw et al. [40], que resolve o problema da colisão entre esferas elásticas baseado na teoria de Hertz. No detalhe tem-se a ampliação da região em que ocorre a transição de colisão sem rolamento para colisão com rolamento. Após [39].

é uma simulação dirigida por eventos. As variáveis dinâmicas só são atualizadas quando há um choque.

Vemos que quanto maior for o número de colisões por unidade de tempo maior será o volume de cálculos realizados para se prever o estado futuro do sistema e tanto menos eficiente se torna o método. Simulações usando este método prevêm, como foi dito na seção 1.3 do capítulo anterior, a ocorrência de *clusters* e de regiões em que a taxa de colisões diverge. Tal efeito, que ficou conhecido como colapso inelástico, impõe um obstáculo à realização de simulações de colisões de meios dissipativos. Uma técnica para contornar o problema foi desenvolvida por S. Luding [14]. Chamada procedimento LRV, do inglês *largest relative velocity*, a técnica consiste em tratar as partículas que após colidirem não se afastam com velocidade superior a um valor limite como uma unidade coesa. Quando dois blocos colidem, os choques internos só são computados até as velocidades relativas atingirem o valor mínimo, o que gera uma economia considerável de esforço computacional. Deste modo, pode-se abarcar neste método a possibilidade de formação de contatos duradouros ainda que ele parta da hipótese de que as colisões são instantâneas.

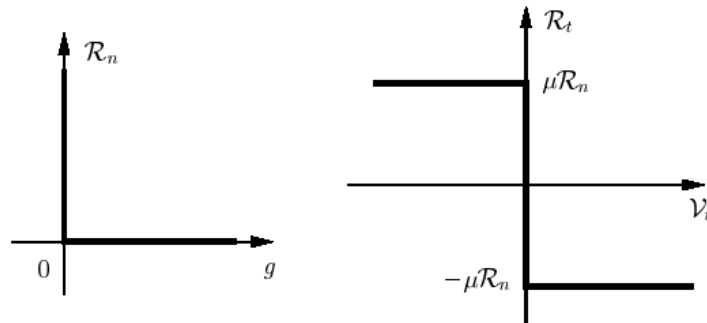
## 2.3 Dinâmica de Contatos

Este método foi desenvolvido por Moreau e Jean [41] com o objetivo de dar um tratamento mais realista às interações entre as partículas em um material granular. As simulações

colisionais não se preocupam com o que ocorre durante os choques, não sendo indicada para investigar propriedades mecânicas de materiais granulares como distribuição de tensão e propagação de ondas nesses meios. Já a dinâmica molecular considera as forças que surgem entre as partículas no momento do choque, sendo, com isso, capaz de lidar com situações que envolvam múltiplos contatos e em que estes sejam duradouros. No entanto, peca por não haver um modelo realista da força de atrito que possa ser incluída no método. Na dinâmica de contatos, as partículas são perfeitamente rígidas e as forças são inferidas por meio do efeito que essa propriedade, aliada às condições de Coulomb para o atrito, produzem no sistema. A evolução do sistema é realizada integrando-se as equações de movimento, dadas pela 2ª lei de Newton, e impondo as condições estabelecidas pelos gráficos de Signorini e de Coulomb (figura 2.3).

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \Delta t)\Delta t \quad (2.11)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{m_i}\vec{F}_i(t + \Delta t)\Delta t \quad (2.12)$$



**Figura 2.3:** À esquerda tem-se o gráfico de Signorini, onde o eixo horizontal representa a distância entre dois corpos e o vertical a reação normal entre eles. No lado direito é exibido o gráfico de Coulomb onde o eixo horizontal representa a velocidade relativa tangencial e o eixo vertical representa a reação tangencial.

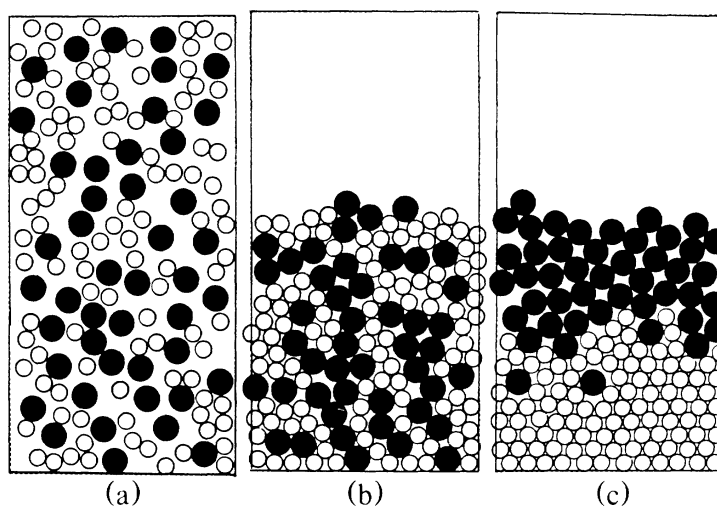
A idéia é, então, a cada passo de tempo  $\Delta t$ , modificar os valores previstos de forma que a configuração fique consistente com os vínculos geométricos satisfeitos pelo sistema. Uma revisão do método focando aspectos mais práticos pode ser encontrada em [42].

## 2.4 Monte Carlo

Embora sistemas granulares estejam inseridos na categoria dos sistemas fora do equilíbrio termodinâmico, a prescrição de Metropolis, definida para sistemas em equilíbrio como

mostramos no apêndice B, foi usada para estudar segregação em meios granulares bi-dispersos [43]. Os autores simularam, usando o método de Monte Carlo, um conjunto de esferas rígidas confinadas em uma região retangular e sujeitas a uma vibração. O sistema é composto de esferas de dois tamanhos diferentes e está em contato com um reservatório térmico. A simulação é feita supondo que a energia no equilíbrio siga a distribuição do ensemble canônico e impondo a restrição geométrica de que as esferas não se superponham. Porém, variações típicas de energia das partículas  $\Delta E \sim mgd$  são muitas ordens de grandeza maiores que as flutuações térmicas  $k_b T$ , bloqueando efetivamente qualquer mudança que aumente a energia total do sistema -  $p(i \rightarrow f) = \exp(-(E_f - E_i)/k_b T)$ . Na prática, a distribuição de equilíbrio não é alcançada pois o sistema fica preso em algum estado meta-estável devido aos vínculos geométricos que limitam o movimento das partículas.

A simulação funciona da seguinte maneira: as esferas são inicialmente dispostas de forma aleatória no retângulo com a restrição de que não ocupem o mesmo espaço. Em seguida, inicia-se uma seqüência de passos que se repete durante toda a simulação. A seqüência consiste de uma etapa em que as partículas caem até encontrar um mínimo local da energia potencial seguida de outra em que as partículas são erguidas imitando o processo de vibração. A figura 2.4 mostra a configuração do sistema em alguns momentos da simulação que indicam a ocorrência de segregação por tamanho.



**Figura 2.4:** Da esquerda para direita: configuração inicial do sistema; configuração após a primeira relaxação; estado final após 300 vibrações. As bolinhas estão diferenciadas pelo preenchimento para facilitar a visualização. As maiores são pretas. Retirado de [43].

O fenômeno de segregação conhecido como efeito castanha-do-Pará - onde os grãos maiores são deslocados para o topo do empilhamento - é amplamente observado no cotidiano e em experimentos cuidadosos. A verificação desse efeito dá credibilidade a extensões do método de Monte Carlo para tratar problemas fora do equilíbrio.



# Capítulo 3

---

## Metodologia

Este capítulo será dedicado à apresentação do sistema a ser estudado bem como à descrição do algoritmo usado nas simulações. Falaremos também sobre os problemas que queremos investigar e os métodos que usaremos para atacá-los. Começaremos contextualizando o problema a fim de dar motivação e mostrar a relevância do trabalho.

### 3.1 Definição do problema

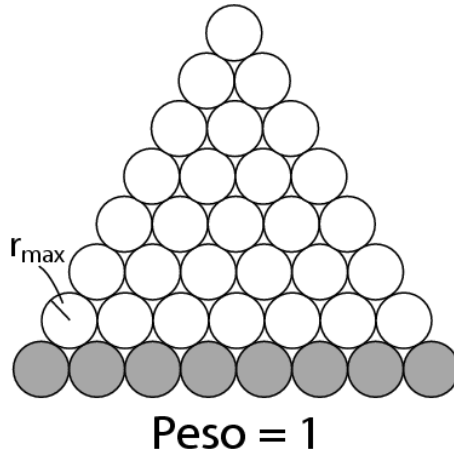
Os objetivos principais desta dissertação serão verificar a existência de um estado crítico auto-organizado em empilhamentos granulares como previsto no modelo BTW, e averiguar se a história de formação dos empilhamentos e propriedades geométricas da base influenciam a natureza do estado crítico. Visando a isso, estudaremos a estatística de avalanches em empilhamentos preparados de diferentes maneiras usando simulação de dinâmica molecular. Descreveremos a seguir como serão modelados os empilhamentos e como esses serão preparados.

### 3.2 Descrição do sistema

Os empilhamentos granulares serão simulados usando o método de dinâmica molecular descrito na seção 2.1, onde a integração das equações será feita pelo algoritmo *velocity Verlet*. O sistema será uma pilha bi-dimensional de discos, todos de mesma densidade, cujos raios terão uma distribuição uniforme em um dado intervalo  $[r_{min}, r_{max}]$ . Uma propriedade importante do sistema será a dispersão do raio dos discos em torno da média, que pode ser medida pela expressão  $\sigma_r = (r_{max} - r_{min})$ . Os discos estarão sujeitos ao campo gravitacional  $\vec{g}$ , constante na vertical, e às forças de contato entre os discos, a serem descritas na próxima seção. O substrato sobre o qual a pilha irá repousar será

constituído de discos da mesma espécie totalmente fixos. Eles serão posicionados de modo a haver um espaçamento constante  $b$  entre os centros de discos adjacentes, escolhido em uma faixa delimitada pelo diâmetro máximo e um valor tal que impeça o vazamento de grãos. O tamanho do substrato, definido pelo número de discos que o compõem, vai determinar o tamanho da pilha pois, para construí-la, depositaremos os grãos até que a pilha atinja um estado estacionário, onde o número de partículas passa a flutuar em torno de um valor constante. O substrato será composto por um número finito de partículas  $N_b$ . As partículas que caírem além das extremidades serão eliminadas do sistema, ou seja, as fronteiras são abertas. A massa de cada disco será determinada pelo valor de sua área e normalizada pela partícula mais massiva,  $m = r^2/r_{max}^2$ . O valor da aceleração da gravidade será definido de modo que o peso da pilha seja normalizado pelo valor de uma pilha perfeitamente ordenada conforme ilustra a figura 3.1. Dessa maneira o valor de  $g$  estará relacionado ao tamanho da pilha por  $g = 2/[m_{max}N_b(N_b + 1)]$ . A razão para se adotar esse critério para a escolha da constante  $g$  é evitar que a deformação dos discos atinjam um valor inaceitável. Como assumiremos em nossas simulações uma interação visco-elástica entre os grãos, as deformações destes não serão limitadas podendo alcançar valores não-físicos se o peso que eles suportarem for muito elevado.

Para construirmos as pilhas utilizaremos dois tipos de preparação que representariam dois casos extremos do ponto de vista da estrutura da pilha resultante. Faremos uma descrição de cada um separadamente. Ambos os métodos de preparação estão representados na figura 3.2.



**Figura 3.1:** Empilhamento usado para normalização do peso e, conseqüentemente, para o valor da constante  $g$ , visto que a massa é calculada de forma independente.

## Deposição grão a grão

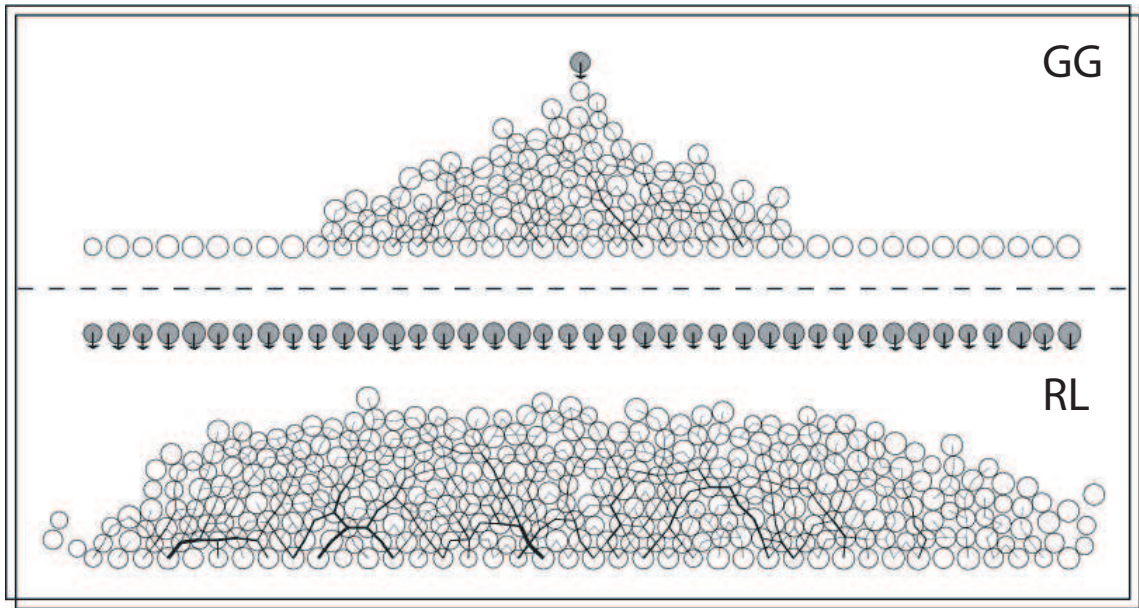
Neste modo de preparo os grãos são depositados com velocidade nula, um a um, no centro da pilha e sempre próximo ao cume - da ordem de um raio de distância. A frequência de deposição dos grãos é um parâmetro importante. O período com que os grãos serão depositados será igual ao tempo gasto por uma partícula de massa média percorrer a distância de um diâmetro médio. A frequência é dada, então, por  $f = \sqrt{2\langle d \rangle / g}$ . Identificaremos daqui em diante esse modo por deposição GG. Pilhas feitas por este método, como relatado no capítulo 1, possuem um mínimo de pressão no centro. Esperamos observar esse efeito na distribuição de avalanches internas. Ao implementar este procedimento surge um inconveniente. A partícula depositada é solta próximo ao topo da pilha, mas pode ser que haja uma outra partícula na região, que esteja livre e que, portanto, não é considerada como parte da pilha. Nesse caso a deposição será feita acima desta que já ocupava a região. Tal inconveniente poderia ser evitado se diminuíssemos a frequência de deposição, porém a simulação se tornaria demasiadamente demorada.

## Deposição tipo chuva

Nesta preparação as partículas são depositadas em camadas ao longo de todo o substrato de uma altura  $h$  fixa partindo do repouso. A frequência de deposição é a mesma que a utilizada no tipo GG. As posições das partículas em cada camada a ser depositada é escolhida ao acaso apenas com a restrição de que não haja superposição entre elas. É preciso ter uma certa cautela na escolha de  $h$  pois a dinâmica molecular exhibe resultados incoerentes dependendo das condições iniciais do sistema. Os resultados relatados por Luding em sua tese de doutorado [14] revelam um desvio das trajetórias de um sistema de partículas obtidas por cálculo de dinâmica molecular em relação às previsões de simulações colisionais. Dependendo das condições iniciais observa-se uma anomalia na dissipação de energia nas trajetória previstas pela dinâmica molecular, como detalharemos à frente. A partir de agora vamos sempre nos referir a esse modo de preparo como deposição RL, de *rain-like*.

## Condições de equilíbrio

Após a deposição de um material granular real sobre uma base o sistema relaxa até atingir um estado de equilíbrio mecânico devido ao caráter dissipativo da interação entre os grãos. Esse aspecto da interação será apropriadamente modelado em nossas simulações conforme será visto em breve. A configuração de equilíbrio deste sistema é o que chamamos de empilhamento granular. A definição de equilíbrio mecânico é fundamental do ponto de vista simulacional. Após o sistema atingir o estado estacionário, quando a deposição é interrompida, o que irá determinar o momento de parada serão os seguintes critérios,



**Figura 3.2:** Ilustração dos métodos de preparação das pilhas. As figuras são instantâneos do processo de deposição após um determinado tempo após o início desta. A espessura das linhas ligando os centros dos discos representa a intensidade da força de contato entre eles. Quanto mais espessa maior a intensidade da força.

1. Nenhuma partícula estar deslizando sobre a superfície de outra,
2. Todas as partículas estarem em contato com pelo menos duas outras - critério de estabilidade mecânica,
3. A energia cinética total do sistema estar abaixo de um patamar pre-determinado,
4. A força exercida sobre o substrato na direção vertical ser igual ao peso do empilhamento dentro de uma tolerância pré-estabelecida.

As tolerâncias na energia cinética e na força sobre a base devem ser escolhidas de maneira cuidadosa para evitar que a simulação seja interrompida antes das partículas ocuparem suas posições definitivas. Elas não devem, contudo, ser demasiadamente rígidas a ponto de tornar processo de deposição desnecessariamente moroso.

Resumimos as características geométricas do sistema que acabamos de descrever listando na tabela 3.1 os parâmetros relevantes associados a ele. Vamos falar, na seção subsequente, sobre a interação entre os entes que compõem os empilhamentos e como ela será modelada.

### 3.3 Modelo de Forças

Como foi dito anteriormente, as partículas que compõem um material granular são objetos sólidos macroscópicos cujo diâmetro é maior do que  $0.1\mu m$ . Nessa escala, o movimento dos

**Tabela 3.1:** Listagem dos parâmetros importantes relativos às propriedades geométricas do sistema.

$N_b$	Número de partículas da base
$b$	Distância entre os centros dos discos da base
$\sigma_r$	Dispersão do raio dos discos
$f$	Frequência de deposição
$h$	Altura de onde os grãos são soltos na deposição RL

grãos é bem descrito pela mecânica clássica. A segunda lei de Newton e o conhecimento das forças que atuam sobre as partículas fornecem as equações de movimento, que é tudo que precisamos para prevermos as configurações posteriores do sistema dadas as condições iniciais. A grande dificuldade para um tratamento numérico adequado reside, porém, justamente na determinação dessas forças. Os grãos estão sujeitos, basicamente, ao campo gravitacional e a forças de contato de curto alcance. Não estaremos interessados na influência do meio intersticial. Desprezaremos também interações eletromagnéticas de longo alcance que podem surgir devido ao acúmulo de cargas na superfície dos grãos por causa do atrito entre eles. Na prática, sólidos granulares imersos em um gás e na ausência de umidade são bons representantes de um sistema com essas características.

Além de desconsiderarmos efeitos eletrostáticos e de umidade, limitando-nos à classe dos materiais granulares secos, faremos mais algumas simplificações na interação entre os grãos que tornarão a tarefa de simulá-los mais amena. As forças de contato entre sólidos podem se mostrar bastante complexas e complicadas para se modelar. Em muitos casos elas não são nem ao menos conhecidas. Geralmente elas dependem de diversos fatores que vão da forma dos corpos à distribuição de massa nos mesmos e, em última instância, do material de que são feitos. A relação tensão-deformação para um determinado objeto sólido não possui uma expressão simples. O gráfico dessa função normalmente apresenta uma região linear, onde a deformação é reversível. À medida que a deformação aumenta o material se desvia do regime linear e a tensão aumenta até atingir um valor limite em que o material se rompe. Na região não-linear diz-se que o material está no regime plástico pois observa-se efeitos de histerese que alteram o formato do objeto permanentemente. Evitaremos, contudo, um tratamento desses efeitos e faremos a hipótese de que o material se deforma sempre elasticamente, o que facilitará a modelagem da interação. Entretanto, é bom alertar para o fato de que deformações plásticas são bastante prováveis em meios granulares. Mesmo em colisões a velocidades relativamente baixas, a deformação é da ordem do tamanho das micro-imperfeições nas superfícies dos grãos. Pode-se, contudo, minimizar esse efeito aumentando o grau de polimento das partículas.

Partindo do pressuposto de que as deformações estarão sempre no regime elástico, utilizaremos um resultado bem conhecido da teoria de elasticidade que estabelece que a força necessária para se deformar uma bola homogênea é proporcional à profundidade da

deformação elevada ao expoente  $3/2$ . Esse resultado, que foi deduzido primeiramente por Hertz, é demonstrado por Landau e Lifshitz [45]. Um raciocínio heurístico nos convence de que em duas dimensões o análogo da lei de Hertz é uma relação linear entre a força e a deformação. Em três dimensões podemos chegar ao resultado obtido rigorosamente por Hertz pensando da seguinte forma: sendo  $h$  a profundidade da penetração entre duas esferas de raio  $R$ , observa-se que o raio do círculo determinado pela interseção das superfícies das duas esferas  $a$  é aproximadamente  $\sqrt{Rh}$ . Isso pode ser mostrado usando argumentos de geometria euclidiana e supondo que  $h \ll R$ , o que é razoável se permanecermos dentro do limite elástico:

$$\begin{aligned} R^2 &= a^2 + (R - h/2)^2 \\ R^2 &= a^2 + R^2 + h^2/4 - Rh \\ a^2 &= Rh - h^2/4 = h(R - h/4) \simeq Rh \\ a &\simeq \sqrt{Rh} \end{aligned}$$

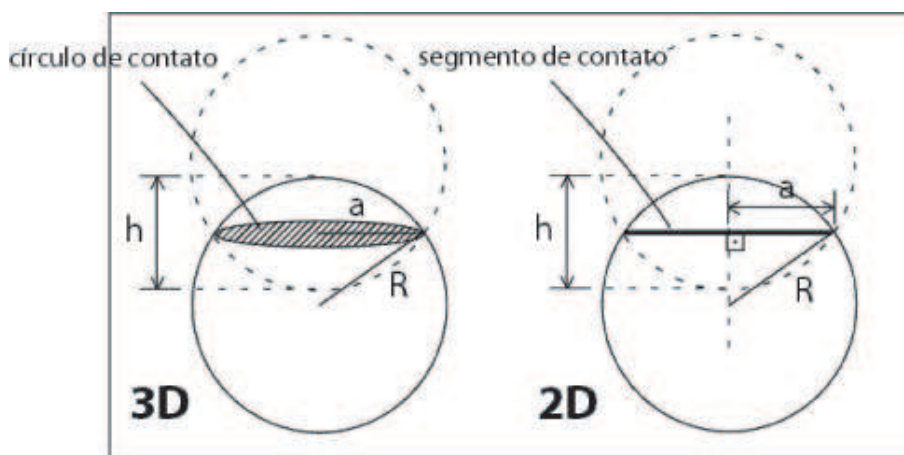
Agora partindo da definição do módulo de Young,  $E = P/h_{rel}$ , em que  $P$  é a pressão e  $h_{rel}$  é a deformação relativa, e supondo que a deformação esteja circunscrita por uma esfera de raio  $a$  conforme indica a figura 3.3, a lei de Hertz emerge das seguintes relações

$$F \sim Pa^2 \sim \frac{Eha^2}{a} = Eha \sim Eh\sqrt{Rh} = E\sqrt{Rh^3}$$

Por meio do mesmo raciocínio é possível deduzir o equivalente da lei de Hertz em duas dimensões.

$$F \sim Pa \sim \frac{Eha}{a} = Eh$$

As quantidades que aparecem nas equações estão devidamente representadas na figura 3.3. Notemos que neste caso  $P$  é o análogo da pressão em duas dimensões, e tem unidade de força por unidade de comprimento.

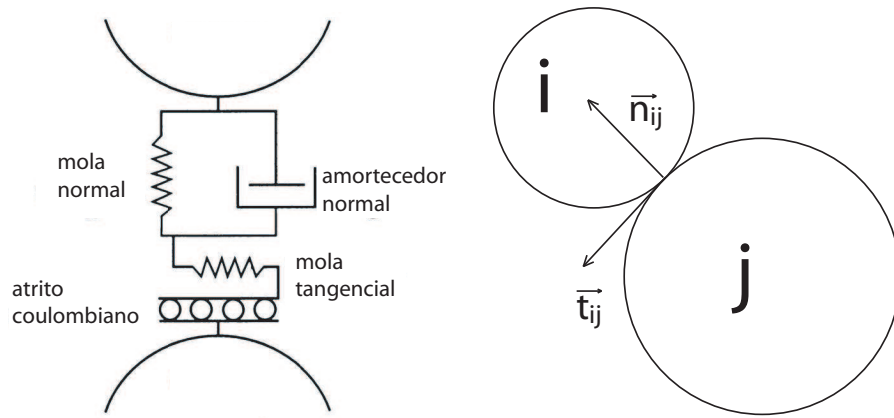


**Figura 3.3:** Representação das quantidades envolvidas na dedução da lei de Hertz para a relação tensão-deformação entre esferas elásticas.

No nosso caso, o efeito da deformação é produzido pela superposição dos discos. A profundidade da deformação devida ao contato entre dois discos é dada pela diferença entre a soma dos raios dos discos e a distância entre os seus centros de massa, e é usada no cálculo das reações elásticas.

$$\vec{f}_{el} = -k_n \left( r_{ij} - \frac{d_i + d_j}{2} \right) \vec{n}_{ij} \quad (3.1)$$

Acima,  $\vec{f}_{el}$  é a força elástica de contato,  $k_n$  é uma constante que caracteriza a resistência do material,  $\vec{n}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ ,  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$  é o vetor que aponta do centro de massa da partícula  $i$  para o da partícula  $j$  e  $d_i$  é o diâmetro da partícula  $i$ .



**Figura 3.4:** Diagrama esquemático do modelo das forças de interação entre as partículas e da base em que elas são calculadas. Retirado de [46].

Um aspecto muito importante da interação é seu caráter dissipativo. Em um meio granular a energia mecânica dos grãos é dissipada por meio de vários mecanismos. Além da possibilidade de haver deformações permanentes, que requerem uma quantidade de energia para serem criadas, pode haver excitações dos modos normais de vibração internos dos grãos, o que reflete em um aumento de temperatura do sistema. Essas excitações são mediadas pelas ondas mecânicas produzidas nos choques. As ondas são atenuadas provocando o aumento da energia associada aos graus de liberdade internos de cada grão. Uma revisão da influência dos efeitos citados acima em meios granulares pode ser encontrada em [46]. A dissipação será introduzida no modelo que nós iremos utilizar nas simulações por meio de duas contribuições na expressão que define a força de interação entre dois discos: um termo de amortecimento de contato - atua somente durante as colisões - na direção normal ao plano que tangencia o ponto em que os discos se tocam e um termo de atrito coulombiano paralelo a esse plano. A força de amortecimento será dada por

$$\vec{f}_{av} = -\gamma (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}) \vec{n}_{ij} . \quad (3.2)$$

Na equação acima,  $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$  é a velocidade relativa entre as partículas  $i$  e  $j$  e  $\gamma$  é a constante de amortecimento que depende das características do material de que são feitos os grãos. Em nossas simulações o valor da constante  $\gamma$  será escolhido de modo a termos um amortecimento crítico.

A força de atrito surge quando dois sólidos em contato são estrangidos a deslizarem um sobre o outro. Os primeiros estudos realizados sobre a natureza da força de atrito foram conduzidos por Leonardo da Vinci no século XVI, quando ele mostrou que a força necessária para que dois sólidos em contato começassem a deslizar um sobre o outro era proporcional à força de compressão entre eles e não à área de contato como se imaginava. Posteriormente, Leonhard Euler introduziu os conceitos de atrito estático e atrito dinâmico. Mas o crédito do conjunto das leis fundamentais que descrevem o comportamento do atrito entre sólidos macroscópicos é concedido consensualmente a Coulomb devido a um artigo de sua autoria que organiza os resultados obtidos até então [47]. O tratamento do atrito constitui uma das grandes dificuldades na simulação de materiais granulares, devido principalmente a uma lacuna que existe no conhecimento das forças que surgem no momento de uma colisão. A questão que se coloca é saber em que circunstâncias as partículas irão rolar e quando, ao contrário, haverá deslizamento. No caso das partículas partirem do repouso, sabemos como age a força de atrito, apesar de não haver um entendimento completo sobre os mecanismos que originam essa força. Já em uma colisão, a questão se torna mais complexa, pois há um leque maior de situações que devem ser consideradas para se decidir que movimento irá ocorrer. Além disso, há uma dificuldade de lidar com o movimento de rolamento dentro do ambiente da dinâmica molecular. Uma maneira de se implementar as leis de atrito de Coulomb, que será a utilizada em nossas simulações, foi proposta por Cundall e Strack [26] que verificaram qualitativamente, *a posteriori*, que essa abordagem é satisfatória. Eles compararam o resultado obtido a partir de uma análise fotoelástica das tensões em um conjunto de discos submetidos a uma compressão com o resultado de uma simulação da mesma configuração de discos. A idéia proposta por eles é tratar o atrito como uma força restauradora linear na direção tangencial limitada pelo valor da força de atrito estático máxima,

$$\vec{f}_{ac} = \begin{cases} \vec{f}_r, & \text{se } |\vec{f}_r| \leq f_{max} \\ \text{signal}(\vec{f}_r \cdot \vec{t}_{ij}) f_{max} \vec{t}_{ij}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\vec{f}_r = -k_t \delta t \left( \vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}_{ij} - \frac{d_i \omega_i + d_j \omega_j}{2} \right) \vec{t}_{ij} \quad (3.4)$$

$$f_{max} = \mu |\vec{f}_n| \quad (3.5)$$

Nas equações acima,  $\vec{t}_{ij}$  é o vetor unitário na direção da reta tangente ao ponto de contato entre os discos  $i$  e  $j$ , que é obtido fazendo uma rotação em sentido anti-horário do vetor



$\vec{n}_{ij}$ ,  $\omega_i$  é a velocidade angular do disco  $i$  em torno de seu centro de massa,  $k_t$  é uma constante relacionada à rugosidade da superfície dos grãos,  $\Delta t$  é o intervalo de tempo de discretização, que discutiremos na próxima seção, e  $\mu$  é o coeficiente de atrito cinético que não distinguiremos do coeficiente de atrito estático.

Quando a força restauradora atinge o valor limite, os discos passam a deslizar um sobre o outro e entra em ação a força de atrito cinético. A força tangencial possui então dois regimes: até a força atingir o valor de saturação é como se os discos estivessem colados um ao outro por uma mola tangencial limitada apenas a uma pequena vibração, caracterizando dessa maneira o atrito estático; quando ela atinge o seu valor máximo passa a haver deslizamento, permanecendo a força de atrito constante. Nesse momento há uma perda de energia mecânica associada ao atrito que, aliada à perda devida ao amortecimento de contato na direção normal, são responsáveis pela dissipação da energia do sistema, possibilitando que este atinja um estado de equilíbrio mecânico.

### 3.4 Dinâmica do sistema

A evolução temporal do sistema será realizada numericamente pelo método da dinâmica molecular, a integração das equações de movimento sendo feita pelo algoritmo *velocity Verlet*, que foi discutido no capítulo anterior quando falamos dos métodos usados para simular sistemas granulares. O sistema que iremos simular é constituído de  $N$  discos em um espaço bidimensional sujeitos a deformações elásticas conforme descrito no início do capítulo. Cada disco possui 2 graus de liberdade associados ao movimento de translação do centro de massa e 1 grau de liberdade devido à rotação em torno do centro de massa, totalizando  $3N$  graus de liberdade para o sistema. A aplicação da segunda lei de Newton ao movimento das partículas do sistema resulta nas seguintes equações,

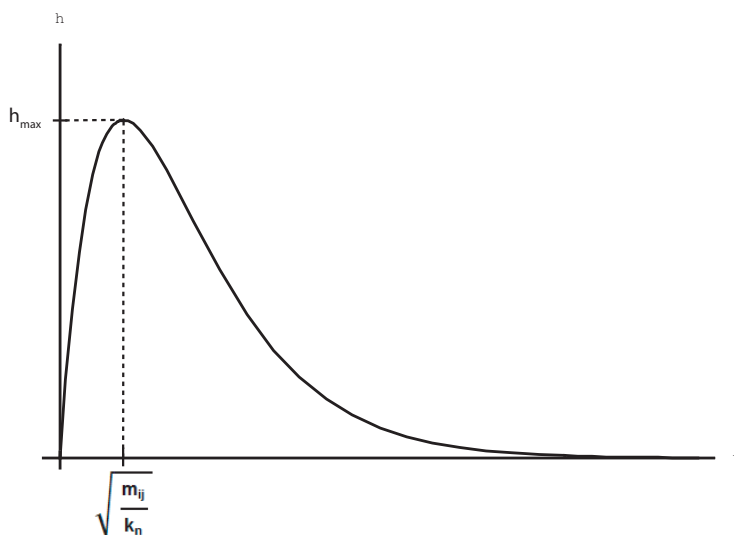
$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = m_i \vec{g} + \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij} \quad (3.6)$$

$$I_i \frac{d^2 \theta_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^N \tau_{ij} \quad (3.7)$$

Acima  $m_i$  e  $I_i$  são, respectivamente, a massa e o momento de inércia do disco  $i$ ,  $\vec{r}_i$  é a posição do centro de massa do disco  $i$  e  $\theta_i$  representa sua rotação em torno do centro de massa,  $\vec{F}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j; \vec{v}_i, \vec{v}_j; \dot{\theta}_i, \dot{\theta}_j)$  e  $\tau_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j; \vec{v}_i, \vec{v}_j; \dot{\theta}_i, \dot{\theta}_j)$  são a força e o torque em relação ao centro de massa exercidos pelo disco  $j$  sobre o disco  $i$ . Além das forças de contato representadas acima por  $\vec{F}_{ij}$ , as partículas também estão sujeitas a um campo gravitacional  $\vec{g}$  constante.

Antes de falarmos sobre a implementação do algoritmo, vamos ressaltar alguns detalhes que requerem atenção e cuidado para evitarmos incorrer em erros grosseiros do ponto de vista físico. É necessário um certo critério na escolha do passo de tempo de discretização e das condições iniciais. O intervalo de tempo entre duas previsões consecutivas das variáveis dinâmicas não pode exceder um valor tal que permita uma superposição excessiva dos discos, o que ocasionaria situações irreais. A razão da existência de tal possibilidade é o fato dos campos de força mudarem ao longo do tempo. Assim, se o próximo instante de tempo em que as posições das partículas forem avaliadas estiver muito distante do instante atual, podem acontecer situações inaceitáveis como uma partícula atravessar outra sem sentir sua presença, pois as posições previstas de ambas coincidiriam mas os campos gerados por elas não estariam atualizados. Para evitar tais transtornos, tomaremos o tempo de discretização pelo menos uma ordem de grandeza inferior à duração do contato entre dois discos. A duração do contato é facilmente obtida da equação diferencial que determina a variação temporal da profundidade da deformação  $h = (d_i + d_j)/2 - r_{ij}$ . Essa equação corresponde a um oscilador harmônico criticamente amortecido cuja massa é a massa reduzida dos discos,

$$m_{ij} \frac{d^2 h}{dt^2} + \gamma \frac{dh}{dt} + k_n h = 0, \quad \text{com} \quad \gamma = 2\sqrt{m_{ij} k_n} \quad (3.8)$$



**Figura 3.5:** Gráfico da solução da equação 3.8 com as condições iniciais,  $h(0) = 0$  e  $v(0) = v_0$ .

A solução da equação, dado que  $h(0) = 0$  e  $v(0) = v_0$ , é

$$h(t) = v_0 t e^{-\sqrt{\frac{k_n}{m_{ij}}} t}.$$

A duração do contato é da ordem do tempo que leva para discos atingirem a deformação máxima,  $t_c \geq \sqrt{m_{ij}/k_n}$ . Usaremos, então,

$$\delta t = 50^{-1} \sqrt{\frac{m_{min}}{k_n}} ,$$

onde  $m_{min}$  é a massa do disco mais leve do conjunto.

É preciso tomar certo cuidado com as posições e velocidades iniciais das partículas. Se o sistema estiver muito agitado, poderá ser necessário diminuir o tempo de discretização ainda mais, para evitar o *overlapping* excessivo que discutimos acima. Acontece que, ao diminuir o valor desse parâmetro, o custo computacional aumenta. Devemos portanto limitar a energia do sistema para tornar viável a simulação. Isso significa limitar as velocidades iniciais e a altura de onde as partículas cairão. A influência desses parâmetros foi estudada sistematicamente por Luding em sua tese de doutorado [14]. Ele fez simulações de uma coluna de discos restritos a se moverem apenas na vertical sob ação da gravidade. O sistema parte de uma configuração em que os discos vizinhos estão separados por uma distância  $s_0$  e caem com velocidade inicial  $v_0$ . Mediu-se então o coeficiente de restituição efetivo, que é dado por  $\epsilon_{eff} = \sqrt{E_f/E_0}$ , para diversas combinações dos parâmetros  $s_0$ ,  $v_0$  e  $t_c$ , chegando a uma lei de escala entre  $\epsilon_{eff}$  e  $\sigma = s_0/(v_0 t_c)$ . Comparando com o resultado obtido por meio de uma outra técnica - simulação colisional dirigida por eventos - observa-se uma discrepância para valores de  $\sigma$  menores que um valor crítico aproximadamente igual a 1 (veja figura 3.6).

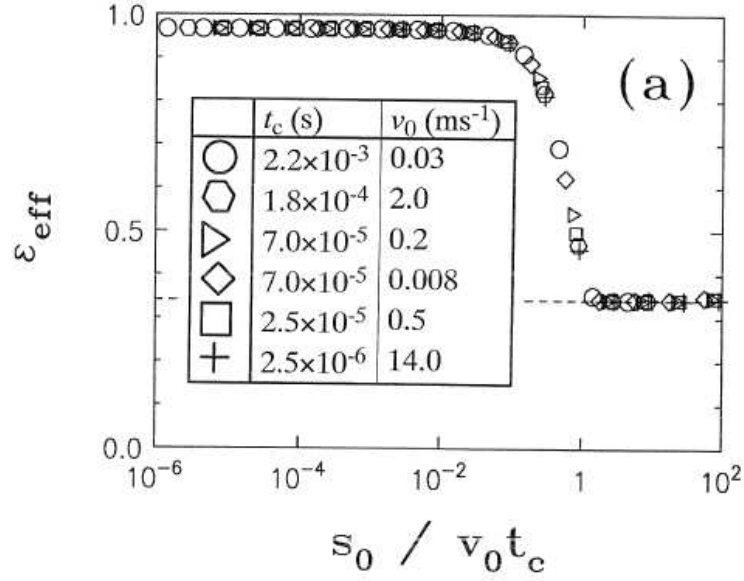
### 3.5 Implementação do algoritmo

No capítulo 2 nós explicamos como funciona a simulação de dinâmica molecular no caso geral. Aqui vamos aplicar o método ao caso particular do sistema descrito nas seções anteriores. O sistema é completamente descrito pelas equações de movimento 3.6 e 3.7. Integrando-as usando a prescrição dada pelo algoritmo *velocity Verlet*, obtemos as seguintes relações de recorrência,

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\delta t + \frac{1}{2} \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} (\delta t)^2 , \quad (3.9)$$

$$\theta_i(t + \delta t) = \theta_i(t) + \omega_i(t)\delta t + \frac{1}{2} \frac{\tau_i(t)}{I_i} (\delta t)^2 , \quad (3.10)$$

$$\vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{m_i} \left[ \frac{\vec{F}_i(t) + \vec{F}_i(t + \delta t)}{2} \right] \delta t , \quad (3.11)$$



**Figura 3.6:** Gráfico do coeficiente de restituição efetivo como função do parâmetro  $\sigma = s_0/(v_0 t_c)$  retirado de [14], onde Luding estudou modelos para materiais granulares usando dinâmica molecular e simulação colisional dirigida por eventos. A linha pontilhada representa a previsão da simulação colisional enquanto os pontos demarcados pelos símbolos são o resultado da dinâmica molecular.

$$\omega_i(t + \delta t) = \omega_i(t) + \frac{1}{I_i} \left[ \frac{\tau_i(t) + \tau_i(t + \delta t)}{2} \right] \delta t . \quad (3.12)$$

As quantidades  $\vec{F}_i(t + \delta t)$  e  $\tau_i(t + \delta t)$  são calculadas a partir das posições e velocidades preditas em  $t + \delta t$ , que são dadas pelas equações acima e por,

$$\vec{v}_i^p(t + \delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i} \delta t .$$

O algoritmo será implementado em linguagem C e abaixo fazemos um esboço do código do programa usado nas simulações.

```

WHILE (EQUIL==0) {
  IT++;
  IF ((IT%FVIZ)==0) PROCURAVIZINHOS();
  PREDITOR();
  CALCULAFORCAS();
  CORRETOR();
  IF ((IT%FEQ)==0) VERIFICAEEQUILIBRIO();
}

```

Essa é a rotina principal do programa que é dividido em várias sub-rotinas, cada uma responsável por uma função específica. Vamos detalhar agora cada uma das sub-rotinas. As funções PREDITOR() e CORRETOR(), como os nomes indicam, possuem o papel de

atualizar os valores das variáveis posição, velocidade, e aceleração de cada partícula. O preditor realiza a primeira estimativa dessas variáveis e o corretor melhora a estimativa baseado na distribuição atualizada de forças. Para armazenar as posições, velocidades e acelerações de cada disco será necessária a declaração de 18 vetores de ponto flutuante cujo tamanho é igual ao número máximo de discos presentes no sistema. Abaixo mostramos o código das duas funções,

```

VOID PREDITOR() {
  INT I;
  FOR (I=0 ; I<NP ; I++) {
    XPR[0][i] = X[0][i] + DT*V[0][i] + DT2S2*A[0][i];
    XPR[1][i] = X[1][i] + DT*V[1][i] + DT2S2*A[1][i];
    VPR[0][i] = V[0][i] + DT*A[0][i];
    VPR[1][i] = V[1][i] + DT*A[1][i];
    APR[0][i] = A[0][i];
    APR[1][i] = A[1][i];
    TETAPR[i] = TETA[i] + DT*VANG[i] + DT2S2*AANG[i];
    VANGPR[i] = VANG[i] + DT*AANG[i];
    AANGPR[i] = AANG[i];
  }
}

VOID CORRETOR() {
  INT I;
  FOR (I=0 ; I<NP ; I++) {
    A[0][i] = FPL[0][i]*IVMASS[i];
    A[1][i] = FPL[1][i]*IVMASS[i];
    V[0][i] = VPR[0][i] + DTS2*(A[0][i] - APR[0][i]);
    V[1][i] = VPR[1][i] + DTS2*(A[1][i] - APR[1][i]);
    X[0][i] = XPR[0][i];
    X[1][i] = XPR[1][i];
    AANG[i] = TORQUE[i]*IVMOMINERCIA[i];
    VANG[i] = VANGPR[i] + DTS2*(AANG[i] - AANGPR[i]);
    TETA[i] = TETAPR[i];
  }
}

```

A variável DT2S2 armazena a quantidade  $(\delta t)^2/2$  e DTS2 armazena  $\delta t/2$  para economizar uso de CPU. Entre o preditor e o corretor são chamadas as sub-rotinas relacionadas com o cálculo das forças. Essa é a etapa mais dispendiosa do programa, pois cada par de partículas sofre um teste para se saber há contato. O teste verifica se a distância entre os centros é menor que a soma dos raios. Se isso acontecer as partículas estarão em contato e haverá uma força visco-elástica e uma força de atrito atuando sobre cada uma, de acordo com o modelo que discutimos na seção passada. A rotina que cuida dessa tarefa é apresentada logo abaixo em linhas gerais,

```

FOR (K=0 ; K<NVIZ ; K++) {
  I = LISTAVIZ[0][K];
  J = LISTAVIZ[1][K];
  XIJ = XPR[0][J] - XPR[0][I];
  YIJ = XPR[1][J] - XPR[1][I];
  DIJ = XIJ*xXIJ + YIJ*YIJ;
  RIJ = (R[I] + R[J])*(R[I] + R[J]);
  IF (LISTAVIZCONT[K]) ICONTO = ICONTO + 1;
  IF (DIJ<RIJ) {
    DIJ = SQRT(DIJ);
    HIJ[NCONT] = DIJ - R[I] - R[J];
  }
}

```

```

VECUNITIJ[0][NCONT] = XIJ/DIJ;
VECUNITIJ[1][NCONT] = YIJ/DIJ;
IF (LISTAVIZCONT[K]) REACT[NCONT] = REACT0[ICONT0];
ELSE REACT[NCONT] = 0;
LISTAVIZCONT[K] = 1;

/*forças normais*/
XN = VECUNITIJ[0][NCONT];
YN = VECUNITIJ[1][NCONT];
VIJN = XN*(VPR[0][J] - VPR[0][I]) + YN*(VPR[1][J] - VPR[1][I]);
REACN[NCONT] = -HIJ[NCONT]*KN - VIJN*GN;

/*forças tangenciais*/
XT = -VECUNITIJ[1][NCONT];
YT = VECUNITIJ[0][NCONT];
VIJT = XT*(VPR[0][J] - VPR[0][I]) + YT*(VPR[1][J] - VPR[1][I]) - VANGPR[I]*R[I] - VANGPR[J]*R[J];
REACT[NCONT] = REACT[NCONT] - KT*VIJT*DT;
FTEST = -MIEST*HIJ[NCONT]*KN;
IF (ABS(React[NCONT])>FTEST) {
  IF (React[NCONT]>0) REACT[NCONT] = FTEST;
  ELSE REACT[NCONT] = -FTEST;
}

/*forças resultantes*/
F[0][I] = F[0][I] - (REACN[NCONT]*XN + REACT[NCONT]*XT);
F[1][I] = F[1][I] - (REACN[NCONT]*YN + REACT[NCONT]*YT);
F[0][J] = F[0][J] + (REACN[NCONT]*XN + REACT[NCONT]*XT);
F[1][J] = F[1][J] + (REACN[NCONT]*YN + REACT[NCONT]*YT);
TORQUE[I] = TORQUE[I] - REACT[NCONT]*R[I];
TORQUE[J] = TORQUE[J] - REACT[NCONT]*R[J];
}
FOR (I=0 ; I<NCONT ; I++) REACT0[I] = REACT[I];
}

```

Um detalhe importante nessa etapa a ser ressaltado diz respeito às reações tangenciais. A reação tangencial, devida ao atrito coulombiano, é modelada por uma força restauradora limitada por um valor máximo. Esse procedimento é uma regularização do gráfico de Coulomb cujo objetivo é eliminar as indeterminações na relação entre velocidade e a força de atrito. O ponto de equilíbrio da força restauradora é definido no momento que as partículas se tocam. A força de atrito estático começa a ser calculada nesse momento somando-se os deslocamentos relativos tangenciais até o contato se desfazer. Para isso o programa mantém armazenadas em uma lista as reações tangenciais antigas para que possa recuperá-las durante a próxima atualização das forças caso o contato ainda esteja ativo. As instruções envolvidas nesse processo estão realçadas no bloco de código acima.

Nota-se na rotina principal que de tempos em tempos é chamada uma função denominada PROCURAVIZINHOS. Essa função, como seu nome indica, é responsável por manter uma lista das partículas vizinhas a cada partícula do sistema. A idéia de criar uma lista de vizinhos foi sugerida por Verlet [35] para tornar as simulações mais eficientes. Incluímos no programa essa técnica que descreveremos a seguir.

## Listas de vizinhos

A interação entre as partículas que estamos simulando é de curto alcance sendo desnecessário o cômputo das forças entre pares suficientemente afastados. A proposta de Verlet consiste em manter uma lista que armazene, para cada elemento do sistema, as partículas que estejam localizadas nas proximidades dele. O cálculo das forças só é realizado para as partículas da lista, que é atualizada com periodicidade menor do que o passo de tempo com que se faz a evolução do sistema, mas não tão esparsa a ponto de omitir um contato existente. A definição da região de vizinhança é uma escolha importante que vai determinar quanto esforço será economizado no cálculo de forças. O alcance do potencial gerado pelas partículas do sistema é de um diâmetro pois elas interagem por forças de contato. Consideraremos vizinhas partículas que estiverem a distância de  $1.1d_{max}$ , o que mostrou ser eficaz nas circunstâncias estudadas. De fato, o limite que define a vizinhança deve depender das características do sistema a ser simulado. Se a região de vizinhança for grande a lista de vizinhos e o tempo gasto para se montá-la também o será. Se, caso contrário, for escolhido um raio pequeno para delimitar a vizinhança de uma dada partícula, a lista será menor mas a frequência de atualização deverá aumentar pois tão logo duas partículas se tornam vizinhas elas já estão prestes a colidirem. Na hora de dimensionar o tamanho da vizinhança é preciso então balancear essas duas tendências a fim de chegar a um ponto ótimo. Abaixo esboçamos o código da rotina que monta a lista de vizinhos.

```
VOID PROCURAVIZINHOS() {
  RL2 = 2.2*2.2*RMAX*RMAX;
  FOR (I=0 ; I<NP ; I++) {
    FOR (J=I+1 ; J<NP ; J++) {
      XIJ = X[0][J] - X[0][I];
      YIJ = X[1][J] - X[1][I];
      DIJ = XIJ*XIJ + YIJ*YIJ;
      IF (DIJ<RL2) {
        LISTAVIZ[0][NPOINT] = I;
        LISTAVIZ[1][NPOINT] = J;
        IF ((LISTACONTP1[ICON]==i) && (LISTACONTP2[ICON]==J)) {
          LISTAVIZCONT[NPOINT] = 1;
          ICON = ICON + 1;
        }
        ELSE LISTAVIZCONT[NPOINT] = 0;
        NPOINT = NPOINT + 1;
      }
    }
  }
  NVIZ=NPOINT;
}
```

# Capítulo 4

---

## Resultados e Discussão

Neste capítulo descreveremos os experimentos numéricos realizados visando ao estudo das avalanches em pilhas de areia e mostraremos os resultados obtidos e suas implicações. Esse estudo será feito no sistema apresentado no capítulo anterior, que são empilhamentos de discos em duas dimensões com fronteiras laterais abertas. Investigaremos as propriedades tanto das avalanches superficiais quanto de avalanches internas, das quais falaremos separadamente nas duas primeiras seções. Na seção seguinte mostraremos os resultados e discutiremos suas interpretações.

As simulações feitas para estudar as avalanches superficiais e internas partem de pilhas no estado estacionário, definido no capítulo anterior. Trabalhamos com um conjunto de 4 tipos de pilhas que diferem quanto ao tipo de deposição - GG ou RL - e ao espaçamento entre os grãos da base - espaçada E ou compacta C. A tabela 4.1 nos fornece a lista dos empilhamentos com suas respectivas características. As avalanches superficiais serão estudadas apenas em pilhas formadas por deposição GG por motivos que explicitaremos na próxima seção.

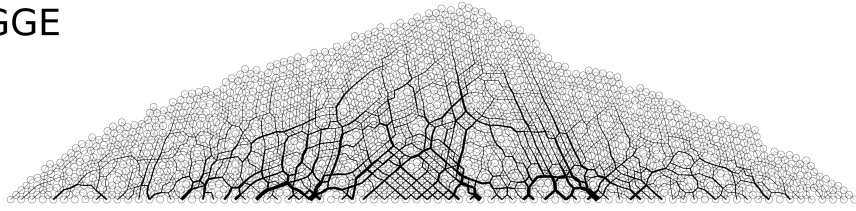
**Tabela 4.1:** Relação dos empilhamentos estudados com os valores dos parâmetros que os caracterizam.

Nome	Tipo de Deposição	$N_b$	N. médio de grãos livres	$\sigma_r$	$b$	$f$	$h$
GGE	GG	80	$(1,83 \pm 0.07) \times 10^3$	$0,05\langle r \rangle$	$1,47\langle d \rangle$	$1/\tau$	variável
RLE	RL	80	$(1,83 \pm 0.07) \times 10^3$	$0,05\langle r \rangle$	$1,47\langle d \rangle$	$1/\tau$	$160\langle d \rangle$
GGC	GG	80	$(1,8 \pm 0.1) \times 10^3$	$0,05\langle r \rangle$	$\langle d \rangle$	$1/\tau$	variável
RLC	RL	80	$(1,68 \pm 0.06) \times 10^3$	$0,05\langle r \rangle$	$\langle d \rangle$	$1/\tau$	$160\langle d \rangle$

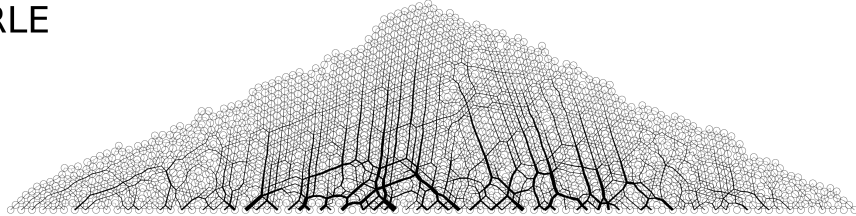
Na figura 4.1 mostramos exemplares de cada um dos tipos. Podemos perceber visualmente diferenças na orientação das forças de contato entre GGE e RLE. A deposição GG privilegia a transmissão do *stress* na direção definida pela superfície livre da pilha, diferentemente da deposição RL que favorece a transmissão do *stress* em uma direção mais



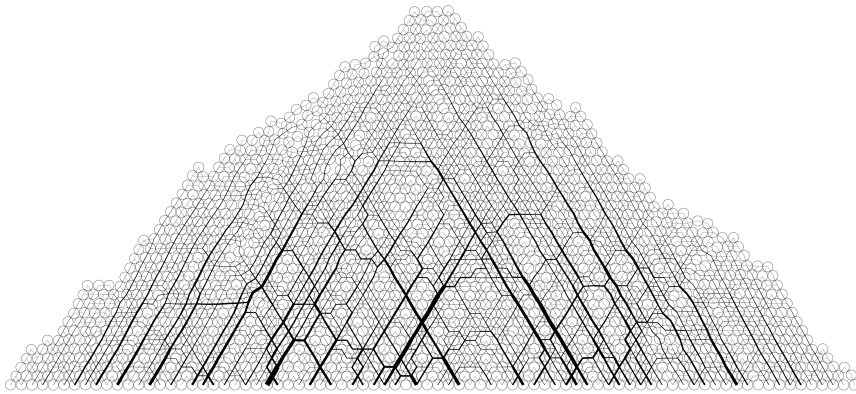
GGE



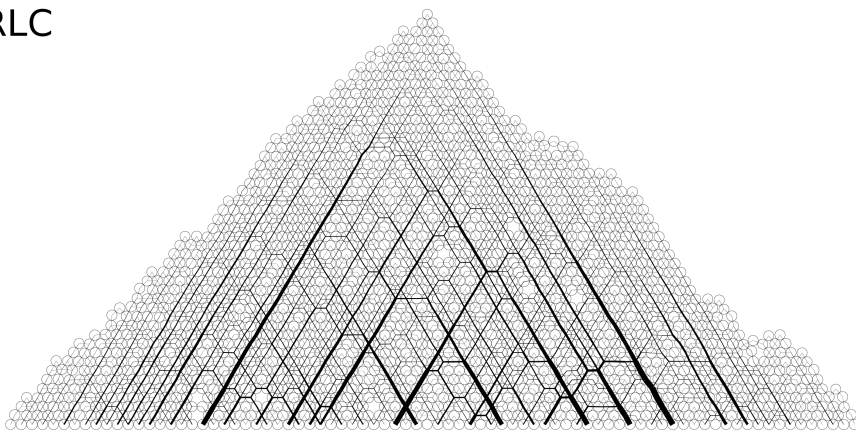
RLE



GGC



RLC



**Figura 4.1:** *Imagens das pilhas listadas na tabela 4.1. A espessura dos segmentos de reta ligando os centros das partículas em contato indica a intensidade da força.*

inclinada. Essa diferença é visível apenas quando há espaçamento entre os grãos fixos da base. No caso em que os grãos da base estão todos justapostos os dois modos de preparação geram pilhas muito semelhantes, como vemos nas figuras 4.1(c) e 4.1(d). Mas se repararmos atentamente vamos notar que as cadeias de força nas pilhas RLC são um pouco mais compridas do que nas pilhas GGC.

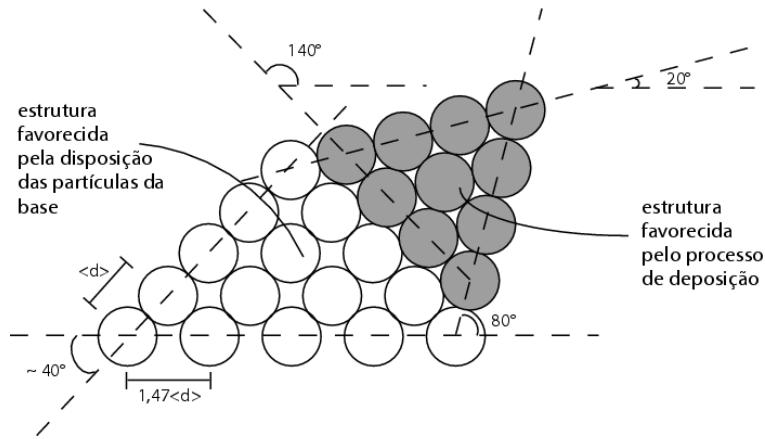
Algo que também podemos notar em uma rápida inspeção nas imagens das pilhas é a tendência em ambos os modos de deposição das pilhas se organizarem em uma estrutura compacta, chamada na literatura de *closed packed*, onde o volume excluído é mínimo. Quando a base é espaçada o crescimento da pilha começa ordenado seguindo o padrão imposto pela geometria da camada de grãos fixos, mas logo esse ordenamento é quebrado dando origem a uma estrutura marcada por domínios onde as partículas estão compactadas em orientações diversas. A orientação preferencial é aquela definida pela inclinação da estrutura regular definida pela posição dos grãos fixos. Quando a base é compacta (GGC e RLC) o tipo de empacotamento favorecido pelo processo de deposição já é o empacotamento natural determinado pela disposição dos grãos fixos. Por isso as pilhas crescidas a partir de uma base compacta apresentam um grau maior de ordenamento. A figura 4.2 ilustra essa quebra de ordenamento provocada pela disputa entre a geometria do substrato e o processo de deposição. No início do processo de preparação a pilha tende a acompanhar o padrão definido pelos grãos da base, mas assim que começa a ocorrer grandes avalanches os grãos se reorganizam em uma estrutura distinta, acompanhando a conformação dos grãos superficiais.

Alguns dos fatos observados diretamente na imagem das pilhas podem ser inferidos da distribuição do ângulo do vetor que liga duas partículas em contato. Os gráficos das distribuições são exibidos na figura 4.3. Vemos a presença de quatro picos bastante pronunciados em  $0^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $120^\circ$  e  $180^\circ$  nas distribuições das pilhas GGC e RLC. Longe desses valores a distribuição é aproximadamente nula. Não há diferenças entre os dois tipos de deposição. No caso em que os grãos da base são espaçados (GGE e RLE) a distribuição é mais espalhada e os máximos ocorrem em posições diferentes, em  $18^\circ$ ,  $42^\circ$ ,  $79^\circ$ ,  $103^\circ$ ,  $138^\circ$  e  $160^\circ$ . Os máximos em  $0^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $120^\circ$  e  $180^\circ$  são mantidos no caso de deposição RL, devido possivelmente à existência de estruturas compactas orientadas à  $90^\circ$  da horizontal favorecidas pelo processo de deposição uniforme ao longo da base. A explicação para os novos máximos é que as regiões que se organizam formando uma estrutura *close packed* se alinham ao longo da direção da inclinação da estrutura cristalizada, como mostrado na figura 4.2.

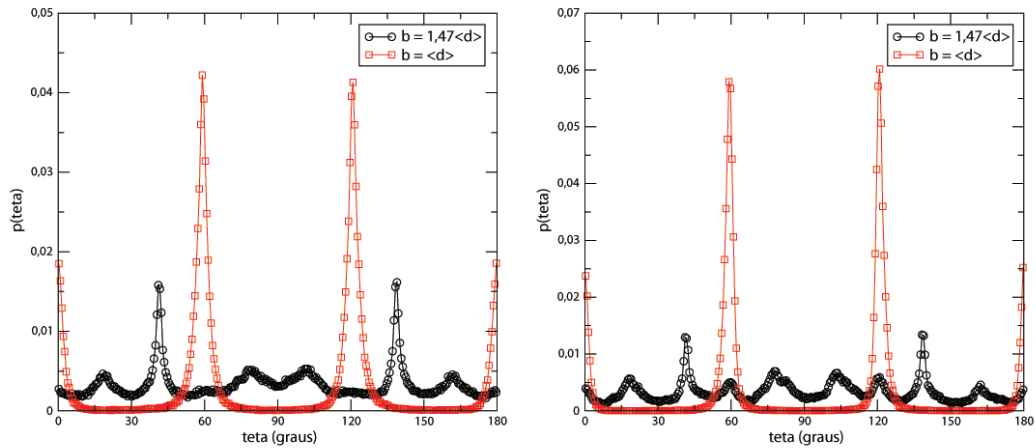
Antes de passarmos às discussões sobre as simulações destinadas ao estudo das avalanches vamos apresentar mais um resultado relacionado à estrutura das pilhas. Nós obtivemos o perfil de pressão na base de cada pilha seguindo o procedimento usado por Atman et al. para estudar a função resposta da pressão em empilhamentos com condições periódicas de contorno [48]. Goldenberg et al. [49] apresentam uma justificativa para a definição do tensor de *stress* em meios granulares. O tensor de *stress* na base da pilha é calculado pela expressão

$$\sigma_{zz}(x) = -\frac{1}{L} \sum_i f_{iz} H\left(\frac{L}{2} - |x - x_i|\right), \quad (4.1)$$

onde  $L$  é a escala em que o tensor é definido,  $f_{iz}$  é a componente  $z$  da força exercida sobre



**Figura 4.2:** Desenho esquemático explicando a origem da desordem exibida por pilhas construídas sobre uma monocamada de grãos espaçados. O desenho mostra as direções de propagação do stress permitidas pela estrutura exibida. Essas direções coincidem com os picos mais expressivos das distribuições do ângulo de contato para as pilhas de base espaçada (figura 4.3).



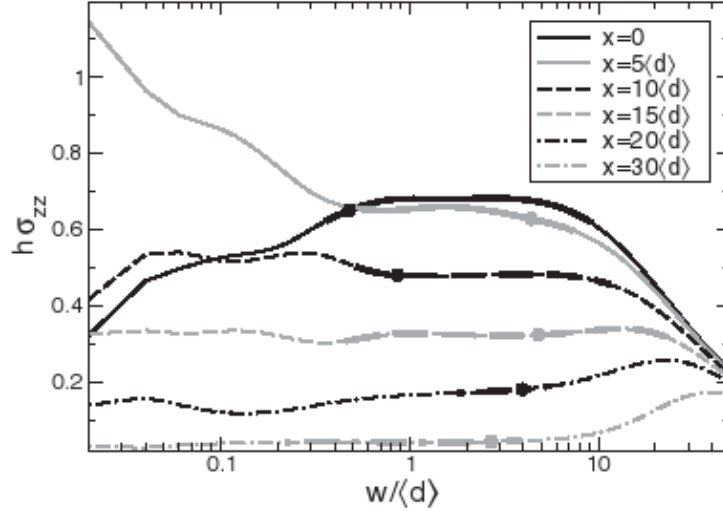
**Figura 4.3:** Distribuições do ângulo do vetor que liga duas partículas em contato. A figura (a) compara GGE com GGC e a figura (b) RLE com RLC.

a partícula  $i$  e  $H$  é a função de Heaviside definida por

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}.$$

A soma é feita sobre todas as partículas da base, porém a função de Heaviside cancela a contribuição das que estão fora do intervalo de tamanho  $L$  centrado em  $x$ . A faixa de valores permitidos para  $L$  foi estabelecida por Goldenberg et al. [49]. Medindo a resposta do stress devido à aplicação de uma força localizada no topo de uma camada de discos em duas dimensões usando a mesma técnica simulacional empregada aqui, eles observaram a existência de um platô onde o *stress* não varia com o parâmetro  $L$ , ou seja, é independente da resolução com que é medido. Na figura 4.4 exibimos esse resultado. A existência desse

platô é uma comprovação de que é possível uma definição objetiva do tensor de *stress* em meios granulares. Como vemos no gráfico da figura 4.4, o tensor de *stress* é bem definido se  $0,6\langle d \rangle < L < 6\langle d \rangle$ .

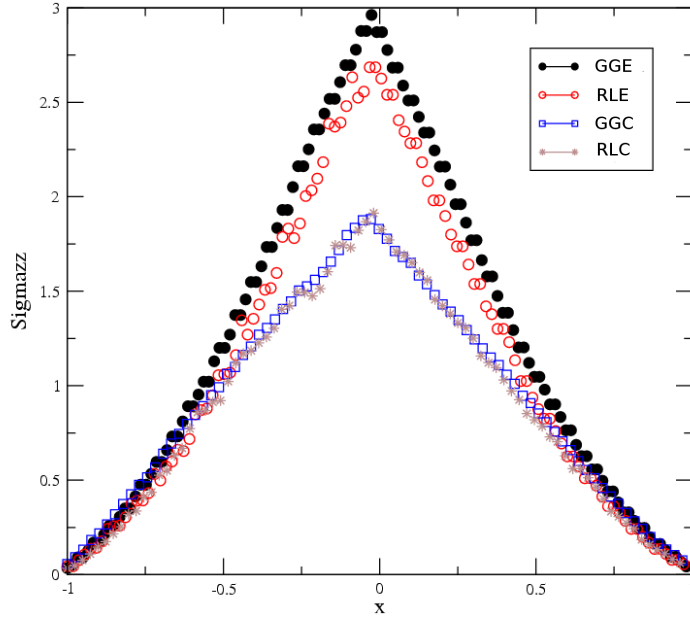


**Figura 4.4:** Respostas da pressão a uma força localizada no topo de uma camada granular bidimensional em função da escala em que a pressão é calculada para vários pontos da base. As partes em que as curvas estão mais espessas indicam os platôs onde é possível a definição do tensor de *stress*. Retirado de [49].

O resultado da média sobre 50 amostras da pressão calculada usando a equação 4.1 está exposto na figura 4.5. Não é verificada a existência da depressão nos empilhamentos construídos pela deposição GG, contrariando uma vasta gama de resultados mencionados no capítulo 1. Acreditamos que a frequência de deposição do método GG difere da frequência usada nos experimentos. Nós usamos uma frequência grande devido a limitações computacionais, o que provavelmente tenha agitado o sistema o suficiente para produzir estruturas metaestáveis similares às produzidas ao longo da deposição RL.

## 4.1 Avalanches Superficiais

Os experimentos numéricos para se investigar as avalanches na superfície de meios granulares são análogos àqueles feitos por Held et al. [21] onde grãos são adicionados um a um ao topo da pilha entre dois estados consecutivos de equilíbrio. O experimento começa com uma pilha no estado estacionário preparada grão à grão. A partir de então começamos a registrar as avalanches. Para isso, continuamos depositando partículas próximo ao topo da pilha, mas esperando que se restabeleça o estado de equilíbrio entre as deposições. O processo termina quando for atingido um número suficiente de eventos, que no nosso caso significa um conjunto que contenha pelo menos 500 eventos em que haja perda de massa. No capítulo anterior nós definimos as condições de equilíbrio a serem usadas como



**Figura 4.5:** *Perfis de pressão na base dos empilhamentos listados na tabela 4.1.*

critério de parada durante a formação da pilha. Aqui nós relaxaremos aqueles critérios para diminuir o tempo da simulação e obtermos uma amostragem maior. Dentre aqueles quatro critérios manteremos apenas o de estabilidade mecânica, ou seja, o próximo grão é solto quando todas as partículas tiverem pelo menos dois contatos. Consideramos pouco provável que, uma vez que todas as partículas tenham alcançado posições estáveis, elas sofram um rearranjo muito grande.

As avalanches foram medidas em trabalhos anteriores de muitas maneiras distintas. Bak et al. [1] avaliaram o tamanho das avalanches em seu modelo pelo número de sítios desestabilizados. Evesque e Rajchenbach [19], e Jaeger et al. [20] estudaram as avalanches em tambores girantes e o tamanho da avalanche era estimado pelas flutuações na inclinação da superfície do material granular contido no tambor. Held et al. [21] mediram as avalanches ocorridas em pilhas cônicas por meio das flutuações de massa da mesma.

Nós escolhemos medir o tamanho das avalanches pela variação da energia potencial gravitacional da pilha, que é uma grandeza facilmente acessível em simulações numéricas. Vamos comparar dois tipos de medida. Uma delas considera a variação da energia devida apenas às partículas que escapam pelas laterais após a perturbação causada pela adição de um grão ao topo da pilha. Designaremos essa medida por  $s_A$ , que é calculada pela expressão abaixo,

$$s_A = \frac{\sum_{k:pe} [m_k h_k^{(i)} - m_k h_k^{(f)}]}{\sum_k m_k h_k^{(f)}}. \quad (4.2)$$

As variáveis  $m_k$  e  $h_k$  representam a massa e altura em relação à base da partícula  $k$  e o índice  $pe$  indica que o somatório é feito somente sobre as partículas que escaparam da pilha. Como o nosso objetivo é corroborar a idéia de que os resultados de Held et al. [21] são fortemente influenciados pela maneira que ele mede as avalanches, seria esperado que fôssemos fiel à medida deles. Mas não os seguimos estritamente para termos uma uniformidade com a nossa segunda medida e facilitar a comparação entre as duas. A segunda medida, que designaremos por  $s_B$ , leva em conta todas as partículas da pilha no cálculo da variação da energia e por isso considera as avalanches em que não há perda de matéria. A medida é calculada pela expressão

$$s_B = \frac{\sum_k [m_k h_k^{(i)} - m_k h_k^{(f)}]}{\sum_k m_k h_k^{(f)}}, \quad (4.3)$$

onde, agora, a soma em  $k$  não possui restrições.

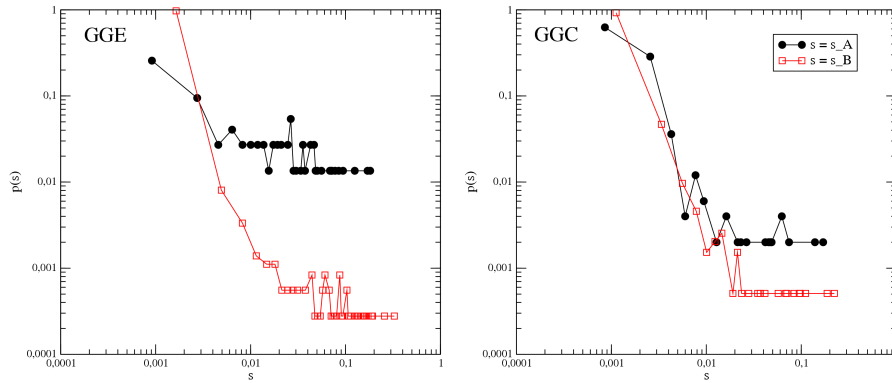
Como vemos nas expressões 4.2 e 4.3  $s_A$  e  $s_B$  são normalizadas pela energia potencial gravitacional da pilha com a finalidade de possibilitar comparações entre pilhas de tamanhos diferentes.

As medidas feitas por Held et al. [21] geram dificuldades na comparação dos resultados de pilhas pequenas com o de pilhas maiores. Em nossos resultados fica evidente a origem de tal dificuldade. As avalanches pequenas, que se extinguem antes de alcançar as extremidades, não são detectadas pela medida  $s_A$  causando uma diminuição da densidade de probabilidade  $p(s_A)$  em relação à densidade da medida  $s_B$  para avalanches pequenas. Na figura 4.6 mostramos as densidades de probabilidade das duas medidas do tamanho de avalanches para os experimentos numéricos GGC e GGE da tabela 4.1. A diferença entre as distribuições é mais acentuada na pilha GGE onde o alto grau de desordem propicia um maior acúmulo de grãos em regiões fracamente estáveis na superfície. Nas pilhas com maior grau de ordenamento os grãos superficiais freqüentemente possuem maior estabilidade, o que torna mais difícil que eles sejam desalojados durante um deslizamento e favorece a recaptura de grãos em movimento. Isso é refletido na baixa freqüência de eventos de grande magnitude na distribuição de  $s_A$ .

As distribuições obtidas levando-se em conta todos os eventos são muito semelhantes, enquanto a contraposição das distribuições construídas a partir somente dos eventos em que a massa da pilha varia mostra claramente que o ordenamento inibe a ocorrência de avalanches que escapam do sistema.

## 4.2 Avalanches internas

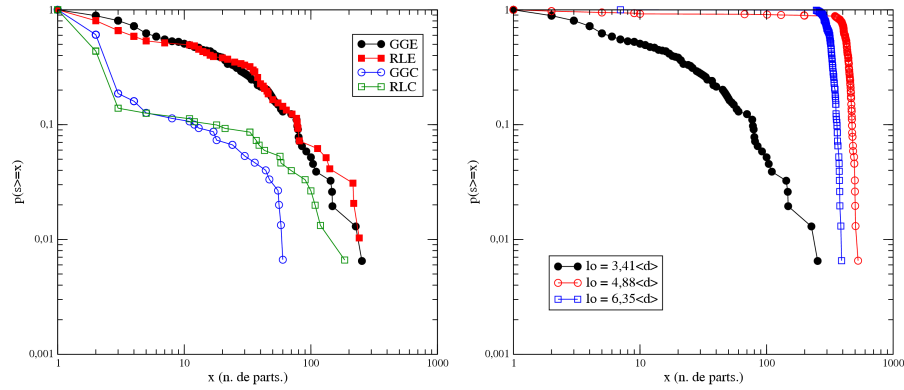
O movimento de partículas em uma pilha de areia geralmente se restringe a uma camada superficial de apenas alguns diâmetros médios de espessura. No entanto, se a pilha for



**Figura 4.6:** Distribuições de  $s_A$  e  $s_B$  nas pilhas GGE (à esquerda) e GGC (à direita). O eixo horizontal representa o tamanho da avalanche medido diferentemente em cada gráfico conforme indica a legenda. O eixo vertical representa a densidade de probabilidade  $p(s)$  de ocorrência de uma avalanche de tamanho  $s$ .

suficientemente perturbada podem ocorrer mudanças em sua configuração interna. Essas mudanças são ocasionadas por deslocamentos de grãos no interior do empilhamento, que foram adequadamente denominados avalanches internas. Seguindo a idéia de Herrmann e Manna [29], que estudaram a distribuição do tamanho das avalanches internas no âmbito de um modelo simplificado, e uma sugestão que Herrmann propôs em um encontro de física computacional, nós iremos verificar se é possível identificar o suposto estado crítico examinando a distribuição de avalanches internas. A simulação do empilhamento usando dinâmica molecular como estamos realizando é bem mais realista do que a simulação feita por eles. Além da diferença no método de simulação, há uma diferença na geometria do sistema estudado. O estudo que eles conduziram foi em empilhamentos sujeitos a condições periódicas de contorno na horizontal. Nós estamos estudando empilhamentos com fronteiras abertas.

Para provocar as avalanches internas nós abriremos um pequeno orifício de largura  $l_o$  na base da pilha. Como a base é constituída de partículas não será permitido um valor qualquer para o tamanho do orifício. Este será feito eliminando-se alguns grãos da base, de forma que  $l_o$  só poderá assumir os valores  $nb - \langle d \rangle$ , onde  $n$  é um número inteiro maior do que zero. As pilhas estarão inicialmente no estado estacionário definido no capítulo anterior. Após a abertura do orifício os grãos que eram sustentados pelas partículas retiradas perdem o apoio e ficam instáveis. Os grãos que se apoiavam nesses imediatamente desestabilizados se tornam instáveis também e, dessa forma, a perturbação se propaga até encontrar uma estrutura que bloqueie a transmissão da tensão para regiões situadas além dela. As avalanches serão mensuradas através do número de partículas que vazam pelo orifício. O fluxo de partículas é interrompido tão logo se forme um arco próximo à abertura ou quando a pilha se desfizer completamente. Um amplo espectro do tamanho das avalanches é observado. A figura 4.7 mostra a função de distribuição acumulada do tamanho das avalanches internas nos empilhamentos listados na tabela 4.1.



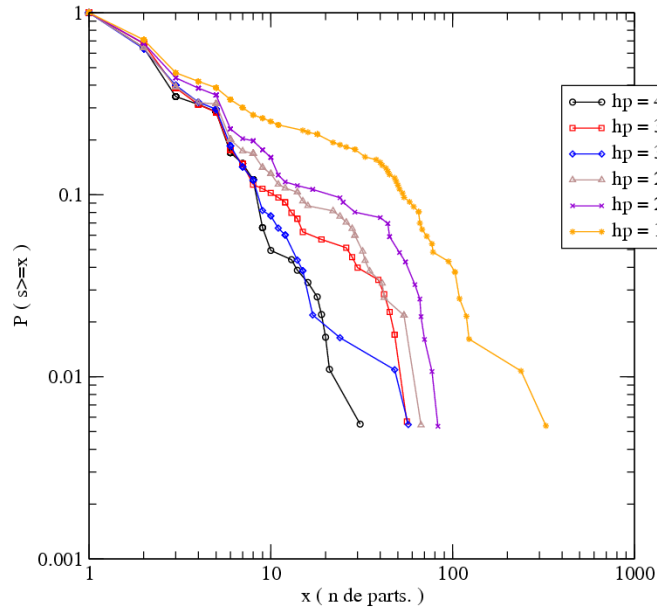
**Figura 4.7:** Funções de distribuição acumulada do tamanho das avalanches internas. À esquerda mostramos as distribuições das avalanches nas pilhas listadas na 4.1 para orifício de largura  $l_o \sim 3.3\langle d \rangle$ . Do lado direito plotamos as distribuições na pilha GGE para vários valores de  $l_o$ .

As distribuições foram geradas a partir dos dados de 50 amostras para cada tipo de pilha. Em cada amostra são realizados vários experimentos de descarga variando a posição em que é feito o orifício. A escolha das posições usadas para compôr a amostragem se baseia nos resultados de Løvoll et al. [50] e Silbert et al. [51] que mostram que não há correlação entre as tensões localizadas em regiões separadas por uma distância maior do que  $5\langle d \rangle$  em empilhamentos granulares estáticos. O orifício é feito sempre na porção central da pilha que é definida como sendo a região delimitada pelos grãos 31 e 50 da base composta de 80 grãos, ou seja, 25% da base. Estabelecemos esses limites observando como as funções de distribuição variam com a posição em que o orifício é feito, como mostra o gráfico da figura 4.8. Vemos que, quando o orifício é aberto na região compreendida pelos grãos 30 e o 40, as distribuições possuem um aspecto muito semelhante. Quando o orifício se distancia dessa região em direção às extremidades da pilha a distribuição se altera qualitativamente.

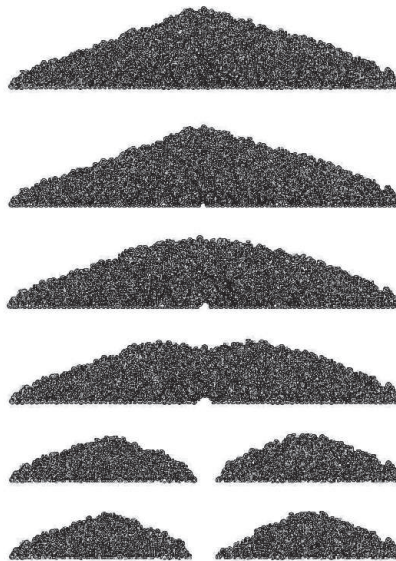
Observamos no gráfico no lado direito da figura 4.7 que existem dois regimes caracterizados pela largura do orifício. Quando esse parâmetro assume valores pequenos a função de distribuição segue aproximadamente uma lei de potência. À medida que a largura é aumentada a função de distribuição passa a exibir uma região em que é aproximadamente constante seguida de uma queda brusca quando o tamanho da avalanche é da ordem de 500 partículas. Essa forma indica que a maioria das avalanches possui um tamanho típico. Se olharmos para a configuração do estado final da pilha (figura 4.9), após o fluxo de partículas pelo orifício ter se interrompido, veremos que na maioria dos casos a pilha é completamente destruída originando duas menores separadas pelo orifício. Por isso chamamos catastrófico a esse regime.

Uma pergunta que se faz é qual largura  $l_o$  onde há a transição de um regime para o outro. Como não podemos variar continuamente a largura do orifício tentamos um outro caminho. Realizamos simulações em que são feitos não um mas dois orifícios. A figura 4.10 mostra o resultado obtido. Ali estão expostas as funções de distribuição acumulada





**Figura 4.8:** *Varição da função de distribuição acumulada com a posição em que é feito o orifício.*



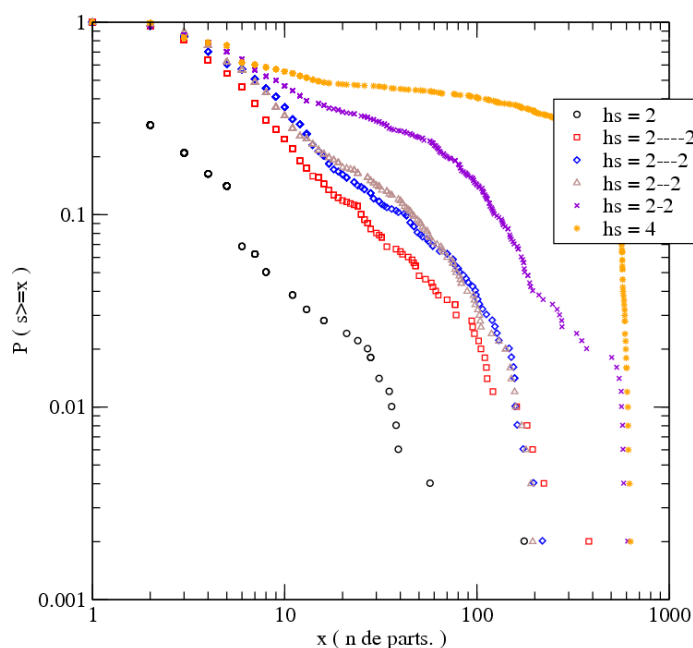
**Figura 4.9:** *Estados de uma pilha GGE após ter sido aberto um orifício na base e ter sido esperado a recuperação do equilíbrio, para vários tamanhos do orifício. De cima para baixo tem-se a pilha original e as pilhas resultantes da retirada de 1 até 5 grãos da base.*

do número de partículas que vazam pelos orifícios. A distância que separa os buracos é diferente em cada uma das curvas. Nota-se que à medida que os orifícios vão se distanciando a distribuição se torna mais parecida com aquela proveniente das simulações de descargas em apenas um orifício. Quando eles estão próximos o efeito local devido à abertura deles se torna mais acentuado pois a região desestabilizada sente o efeito dos dois orifícios. Por outro lado, se eles estiverem muito afastados as áreas desestabilizadas sentirão a presença apenas do buraco mais próximo o que torna o fluxo de partículas resultante equivalente à soma do fluxo através de dois orifícios localizados em pilhas

distintas. Conseguimos então um efeito entre aquele ocasionado por um buraco de duas partículas e o que é causado por um de três partículas.

Analisando o painel esquerdo da figura 4.7 nós podemos notar que, curiosamente, há uma diferença maior entre as distribuições de GGC e RLC do que entre as distribuições de GGE e RLE. Esse fato carece de ser entendido pois estávamos esperando que as avalanches internas revelassem diferenças mais marcantes entre as pilhas GGE e RLE. Foram estas que exibiram diferenças estruturais mais significativas. Outro efeito que pode ser observado no diagrama é a frequência bem mais elevada de ocorrência de avalanches de 1 ou 2 grãos nas pilhas de base compacta. Isso pode ser explicado pelo alto grau de empacotamento da pilhas GGC e RLC o que dificulta o fluxo de grãos no interior da pilha.

Uma motivação para o estudo das avalanches internas era tentar identificar algum regime em que fosse observado uma lei de potência para a distribuição de avalanches. As simulações de descargas por dois orifícios mostraram a existência de uma lei de potência. As descargas por um orifício apenas não apresentaram esse comportamento. Isso significa que a perturbação usada para desencadear as avalanches precisa ser considerada na interpretação dos resultados.



**Figura 4.10:** Diagrama mostrando a transição do regime catastrófico, em que a abertura dos orifícios provoca uma avalanche cujo tamanho é da ordem do tamanho da pilha, para um regime em que o escoamento é interrompido tão logo escapem alguns grãos.

# Capítulo 5

---

## Conclusão e perspectivas

Nós realizamos simulações de empilhamentos granulares em duas dimensões por dinâmica molecular para estudar o comportamento de avalanches superficiais e internas. Verificamos que a maneira de se avaliar o tamanho de avalanches superficiais é fundamental, podendo influenciar de forma significativa a interpretação dos dados estatísticos. Vimos também que a perturbação aplicada ao sistema para desencadear as avalanches internas - abertura de um ou dois orifícios na base - produz um efeito que pode ser notado na análise da estatística dessas avalanches.

A distribuição do tamanho de avalanches superficiais possui uma tendência para uma lei de potência se todos os eventos forem considerados, que desaparece quando coletamos apenas os eventos que ocasionam perda de massa. Essa distinção é menos evidente em pilhas de base compacta. Apesar do resultado apontar na direção de uma lei de potência para a distribuição da medida  $s_B$ , são necessárias simulações em sistemas maiores para termos certeza sobre essa afirmação.

No caso das avalanches internas, obtivemos uma lei de potência para distribuição do tamanho quando o sistema é perturbado pela abertura de dois orifícios separados por 3 ou 4 grãos. As simulações de descargas por dois orifícios foram realizadas apenas em pilhas de base espaçada. Não esperamos observar o mesmo em pilhas de base compactas devido à menor mobilidade dos grãos no interior da pilha.

Comparamos dois modos de deposição, localizada e distribuída ao longo da base, e observamos variações na estrutura das pilhas resultantes. As diferenças foram mais proeminentes nos empilhamentos contruídos sobre uma base constituída de grãos espaçados. O tipo de deposição não interferiu na distribuição de avalanches internas para pilhas com base espaçada, mas produziu uma ligeira discrepância nas distribuições para pilhas de base compacta. A diferença, contudo, é muito pequena, podendo ser devida apenas a flutuações estatísticas ocasionadas pela falta de um número suficiente de amostras para gerar a distribuição. É preciso um *ensemble* maior para afirmarmos com convicção se o efeito é uma característica da deposição.

Possíveis projetos para o futuro são:

1. investigar com mais detalhes a estrutura das pilhas formadas pelos dois modos de preparação, por meio da função resposta e das função de correlação de força,
2. aumentar a eficiência do método para viabilizar o estudo em pilhas maiores e preparadas por um processo mais lento de deposição,
3. estudar a influência da polidispersão na distribuição de avalanches,
4. fazer um estudo mais abrangente dos aspectos geométricos dos empilhamentos,
5. desenvolver um algoritmo para simular esferas em três dimensões com o mesmo modelo para o atrito estático.

# Apêndice A

---

## Modelos do escoamento superficial em meios granulares

Existem alguns modelos que buscam descrever o comportamento da superfície livre de pilhas de areia. Vários aspectos são capturados nesses modelos embora não exista um que seja capaz de uma descrição completa. Falaremos um pouco sobre dois modelos bem distintos em sua essência e que conseguem reproduzir características importantes desses sistemas. Um deles é baseado no movimento *stick-slip* e é capaz de explicar o fluxo intermitente, a transição para um fluxo contínuo e a existência de dois ângulos críticos. A vantagem dessa abordagem é que existe uma analogia perfeita entre o fluxo de matéria na superfície livre de um meio granular em um tambor girante e a dinâmica do modelo mínimo que apresenta o movimento *stick-slip* - sistema massa-mola sobre uma superfície que se move a velocidade constante. Em ambos os casos as equações de movimento que emergem da aplicação das leis de Newton são estruturalmente idênticas, o que nos permite ter uma imagem mais nítida e um entendimento maior acerca da superfície granular. O outro descreve o comportamento de empilhamentos granulares tratando-os como um meio contínuo dividido em duas fases distintas, uma fase fluida e uma sólida. A partir dessa hipótese ele fornece equações que buscam reproduzir o comportamento esperado para o escoamento superficial de grãos.

### A.1 Modelo baseado no movimento *stick-slip*

Daremos uma breve descrição do movimento *stick-slip* para melhor compreendermos a analogia que existe entre ele e a superfície granular. O modelo mais simples que apresenta tal comportamento, como já dissemos, é um sistema constituído por um bloco de massa  $m$  sobre uma superfície plana entre os quais atuam forças de atrito, sendo o bloco puxado por uma mola de constante elástica  $k$ . A extremidade livre da mola por sua vez se move a uma velocidade fixa  $V$  em relação ao plano. Tal sistema é o paradigma do movimento *stick-slip* e já foi bastante estudado no passado [52]. A apresentação que faremos agora é

baseada na tese de doutorado de Pál Tegzes [17].

O bloco está sujeito à força de atrito, que primeiramente será modelada pelas leis de Coulomb, e à força restauradora exercida pela mola. A força de atrito  $F_a$  é definida da seguinte forma,

$$\begin{aligned} F_a &\leq \mu_e F_n \equiv F_{max}, \quad v = 0 \\ F_a &= \mu_d F_n \equiv F_d, \quad v \neq 0 \end{aligned}$$

onde  $\mu_e$  e  $\mu_d$  são, respectivamente, os coeficientes de atrito estático e dinâmico, e  $F_n$  é a força de compressão normal entre as superfícies. Denotemos por  $x$  a posição do bloco que obedece à seguinte equação de movimento,

$$m\ddot{x} = \begin{cases} 0, & \text{se } \dot{x} = 0 \text{ e } k(Vt - x) < F_{max} \\ k(Vt - x) - F_d, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

que possui, além de uma solução estacionária trivial  $x_{se}(t) = -F_d/k + Vt$ , uma solução *stick-slip* se  $\mu_e$  for estritamente maior do que  $\mu_d$ . Para ver isso imaginemos que o bloco parta do repouso estando a mola distendida e que seja puxado lentamente. O bloco permanecerá em repouso até a força exercida pela mola atingir o valor  $F_{max}$  quando então a força de atrito sofre uma queda súbita e o bloco passa a deslizar. O bloco realiza então meio período de movimento harmônico e volta a parar recomeçando o ciclo. A equação de movimento pode ser facilmente resolvida se for feita a mudança de variável

$$y(t) = x(t) - x_{se}(t) = F_d/k + x(t) - Vt. \quad (\text{A.2})$$

Com essa mudança ela se reescreve da seguinte forma,

$$m\ddot{y} = \begin{cases} 0, & \text{se } \dot{y} = -V \text{ e } -y < y_{desl} \\ -ky, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

onde  $y_{desl} = (F_{max} - F_d)/k$ . Na fase em que o bloco está deslizando

$$y = -A \cos(\omega t - \phi), \quad (\text{A.4})$$

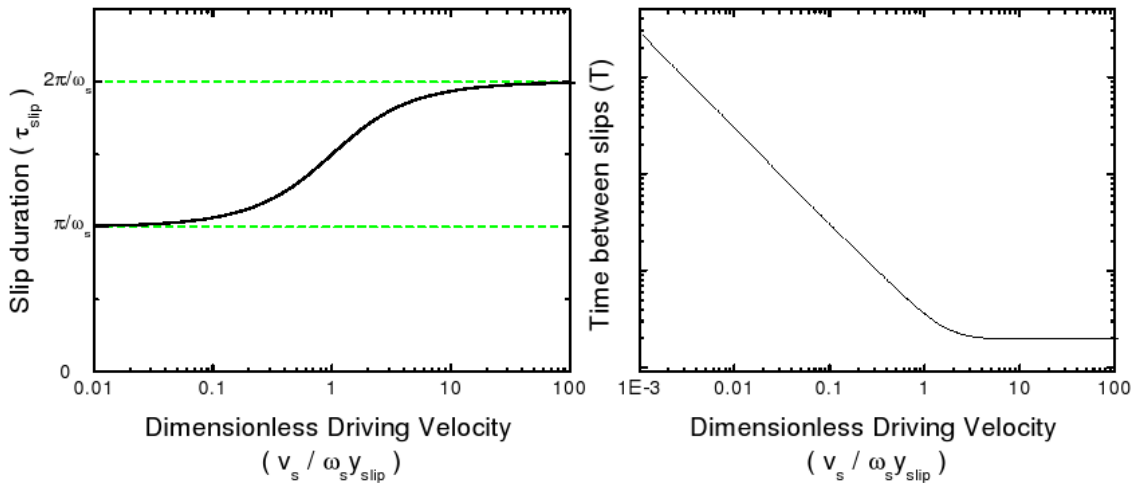
onde as constantes de integração são obtidas das condições iniciais  $y(0) = y_{desl}$  e  $\dot{y}(0) = -V$ . Assim

$$\phi = \text{tg}^{-1}\left(\frac{V}{\omega y_{desl}}\right) \quad e \quad A = \frac{y_{desl}}{\cos(\phi)}. \quad (\text{A.5})$$

Podemos calcular a partir de  $y(t)$  a duração do deslizamento

$$\tau = (2\phi + \pi)/\omega, \quad (\text{A.6})$$

que possui uma dependência com  $V$  por meio de  $\phi$ . Esse modelo é bem sucedido em reproduzir o movimento *stick-slip* tão presente em vários fatos cotidianos como o ranger de uma porta antiga, o deslocamento de mobília pesada sem suspensão da mesma ou a eletrização constante de duas esferas metálicas próximas uma da outra, em que descargas espaçadas no tempo ocorrem por meio de faíscas. No entanto, ele não é capaz de explicar a transição para um movimento contínuo visto que tanto o estado estacionário quanto o estado de movimento intermitente são estáveis para todos os valores de  $V$ . Além disso, o estado estacionário só se dá em uma situação muito especial sendo extremamente instável a perturbações na configuração do sistema. Isso pode ser visto no segundo gráfico da figura A.1. Percebe-se que, qualquer que seja o valor de  $V$ , o intervalo entre dois deslizamentos sucessivos é sempre finito.



**Figura A.1:** Tempos característicos do modelo mínimo como função de  $V$ . Em (a) a duração dos deslizamentos e em (b) o intervalo entre dois deslizamentos sucessivos. Figura retirada de [17].

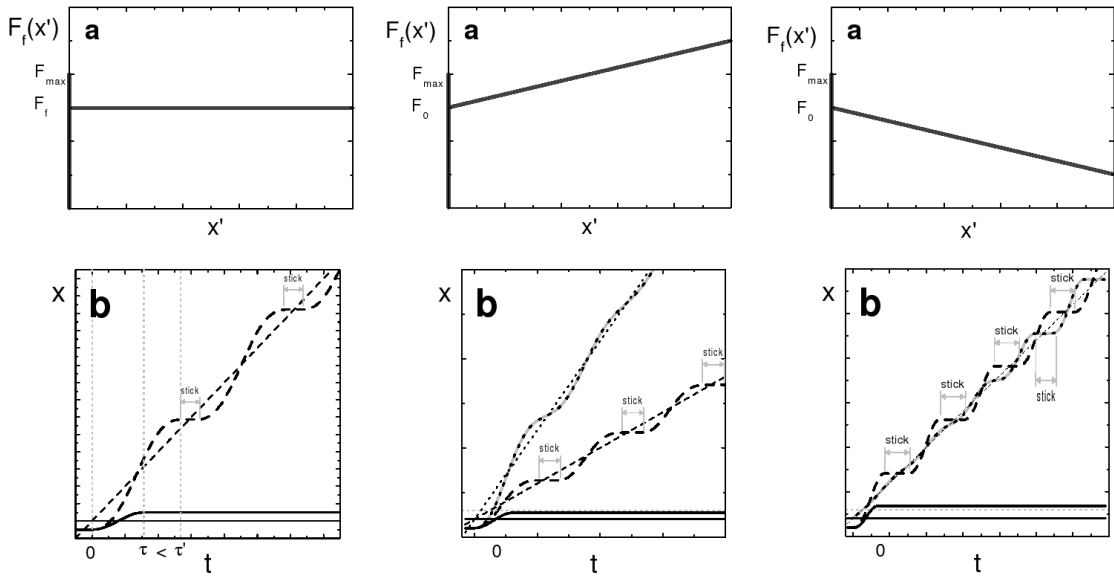
Pode-se, entretanto, introduzir algumas modificações de modo a permitir uma transição entre os dois modos de movimento por meio do ajuste do parâmetro  $V$ . Isso é feito alterando-se a forma funcional da força de atrito. O atrito coulombiano só varia com a velocidade por causa de uma descontinuidade em  $\dot{x} = 0$ . Se atribuímos ao atrito dinâmico uma dependência linear crescente, o movimento *stick-slip* é estável apenas no intervalo  $0 \leq V < V_c$  onde  $V_c$  é uma velocidade crítica. Para  $V > V_c$ , o amortecimento impede que o bloco, ao começar a deslizar, atinja o repouso novamente e o sistema é atraído inexoravelmente para o estado estacionário. Este é estável nessa região do eixo  $V$ .

Quando a força de atrito dinâmico  $F_d$  é uma função linear decrescente de  $\dot{x}$ , a fase de movimento contínuo desaparece. A velocidade do bloco, ao começar a deslizar, é

amplificada, o que faz que a oscilação em torno da solução estacionária  $x_{se}$  sempre se complete. O movimento *stick-slip* é estável em todo o eixo  $V$ .

A transição na prática, não é reversível. O valor de  $V_c$  não é o mesmo para os dois sentidos da transição. Novamente o modelo precisa ser aprimorado para incluir esse efeito de histerese. Adota-se a mesma estratégia de modificar a lei de atrito. A generalização é permitir uma dependência explícita do tempo,

$$m\ddot{x} = k(Vt - x) - F_d(\dot{x}, t), \quad \dot{x} \neq 0 \quad (\text{A.7})$$



**Figura A.2:** *Diferentes tipos de força de atrito e os respectivos resultados para o movimento do bloco. Os gráficos de cima mostram os modelos usados para a força de atrito e abaixo tem-se o gráfico correspondente da posição do bloco em função do tempo para diferentes valores de  $V$  - velocidade com que a mola é puxada. Podemos visualizar a presença de duas fases distintas no caso do atrito ser proporcional à velocidade e aumentar com esta. Retirado de [17].*

Voltemos agora ao caso do escoamento em meios granulares. Podemos visualizar melhor a correspondência entre movimento *stick-slip* e a dinâmica de avalanches fazendo uma análise do fluxo de grãos em um tambor girante. O ângulo de inclinação da superfície livre satisfaz à seguinte equação, que é deduzida com base na conservação de massa,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \omega - \frac{2J}{R^2} \quad (\text{A.8})$$

onde  $\omega$  é a velocidade de rotação,  $J$  é a taxa de escoamento e  $R$  é o raio do tambor. A evolução de  $J$  é determinada pela gravidade e pelo atrito entre os grãos de acordo com,

$$\frac{\partial J}{\partial t} = g h \sin(\theta) - F(\theta, J) \quad (\text{A.9})$$



O termo  $F(\theta, J)$  representa o atrito, que pode ser modelado de várias formas. A escolha da relação entre  $F$ ,  $\theta$  e  $J$  é responsável, em grande parte, pelo comportamento do sistema, de maneira semelhante ao que ocorre no modelo *stick-slip*. Usando atrito tipo coulomb,  $F(\theta, J) = gh\mu_d(J)\cos(\theta)$ , e assumindo que  $\theta$  não se afasta muito de  $\Theta_d \equiv tg^{-1}(\mu_d)$ , obtém-se facilmente,

$$\ddot{\theta} = -\Gamma p\theta + \Gamma p\Theta_d(\dot{\theta}) \quad (\text{A.10})$$

onde  $\Gamma = 2/R^2$  e  $p = gh/\cos(\Theta_d)$ . Essa equação é a mesma que descreve o movimento *stick-slip* e, portanto, podemos estabelecer uma relação direta entre as avalanches e os deslizamentos do bloco, a compressão da mola correspondendo ao aumento da inclinação e a velocidade do bloco à taxa de escoamento.

## A.2 Modelo BCRE

O modelo BCRE [53], abreviação de Bouchaud, Cates, Ravi e Edwards, os nomes de seus proponentes, se baseia na hipótese de que é possível separar um empilhamento granular em duas fases distintas: uma fase estática e uma fase fluida em que os grãos se movem. Cada fase é descrita por uma variável que representa a sua espessura local. As variáveis dependem do tempo e da posição horizontal na pilha e sua evolução é determinada basicamente pelas seguintes equações,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\epsilon(x, t) , \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = v_d \frac{\partial R}{\partial x} + \epsilon(x, t) . \quad (\text{A.12})$$

Na realidade são introduzidos nas equações que governam a evolução dessas variáveis outros termos que levam em conta processos difusivos e efeitos relacionados com a curvatura da pilha, mas nos atemos aqui aos aspectos essenciais do modelo. A característica fundamental, que é inserida por meio do termo de acoplamento  $\epsilon(x, t)$ , é a possibilidade de troca de partículas entre as duas fases. O modelo prevê a possibilidade de que grãos que estejam rolando sobre a superfície possam eventualmente parar e que grãos, que estejam inicialmente em repouso, possam ser desalojados passando à fase fluida. O primeiro termo do lado direito da equação que descreve a evolução de  $R$  está relacionado ao mecanismo de convecção responsável pelo escoamento dos grãos à uma velocidade típica  $v_d$ .

O termo de acoplamento  $\epsilon(x, t)$  é o cerne do modelo. Nele devem estar contidos os ingredientes necessários para a correta descrição dos processos que desencadeiam deslizamentos dos grãos superficiais. A proposta daqueles que idealizaram o modelo foi a seguinte,

$$\epsilon(x, t) = \gamma R(\theta - \theta_n) , \quad (\text{A.13})$$

ou seja, um termo de troca que depende linearmente da quantidade de grãos em movimento e da diferença entre a inclinação local e um ângulo crítico - ângulo de repouso. Essa escolha provê os mecanismos intuitivamente esperados de desestabilização dos grãos fixos: desestabilização devida às colisões com os grãos em movimento e devida à ausência de apoio quando a inclinação atinge um limiar. As equações A.11 e A.12 se reescrevem então ( $\theta \simeq \frac{\partial h}{\partial x}$ ) como,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\gamma R\left(\frac{\partial h}{\partial x} - \theta_n\right) , \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = v_d \frac{\partial R}{\partial x} + \gamma R\left(\frac{\partial h}{\partial x} - \theta_n\right) . \quad (\text{A.15})$$

Essa é uma abordagem puramente heurística. No entanto, as equações a que se chega são consistentes com uma dedução rigorosa baseada apenas na conservação local de massa e de momento. Essa dedução e a relação com o modelo BCRE pode ser vista em [54].

# Apêndice B

---

## Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo foi desenvolvido por von Neumann, Ulam e Metropolis no final da segunda guerra mundial com o objetivo de estudar a difusão de neutrons em materiais radioativos. A escolha do nome Monte Carlo se deve ao fato do método fazer grande uso de números aleatórios, e foi feita por Metropolis que em 1947 usou a expressão no título de um artigo [55] que descrevia o método. A técnica se baseia na possibilidade de transpor certos problemas matemáticos para análogos probabilísticos que podem ser resolvidos por meio de experimentos estocásticos [56]. De fato, a modelagem de determinados problemas por experimentos estocásticos já era feita muito antes do trabalho de Metropolis, que teve o mérito de colocar a prática em bases mais formais e estender a sua aplicabilidade.

O cálculo de integrais definidas é um exemplo dos problemas matemáticos que podem ser atacados usando ferramentas da teoria da probabilidade. Como muitos dos problemas em ciências naturais culminam com a integração de alguma grandeza, é possível vislumbrar a utilidade dos métodos de Monte Carlo. De fato, ele é largamente usado em diversas áreas, principalmente na mecânica estatística. Vamos descrever como funciona o método aplicando-o ao caso da avaliação de uma integral definida. Em termos matemáticos queremos calcular o valor da seguinte expressão,

$$F = \int_{x_1}^{x_2} dx f(x) . \tag{B.1}$$

Podemos reescrevê-la da seguinte forma,

$$F = \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{f(x)}{\rho(x)} \rho(x) , \tag{B.2}$$

onde  $\rho(x)$  é uma densidade de probabilidade normalizada no intervalo de integração. O cálculo da integral é, então, equivalente ao cálculo da média da função  $f(x)/\rho(x)$  cuja

variável independente é agora vista como uma variável aleatória cuja distribuição é dada por  $\rho$ . Para obter essa média, a idéia é construir uma amostragem de valores de  $x$  pertencentes a  $[x_1, x_2]$  e fazermos a média aritmética de  $f(x)/\rho(x)$  nesse conjunto. O valor encontrado seria uma aproximação de  $F$ , tão boa quanto maior for o tamanho da amostragem. Matematicamente,

$$F = \left\langle \frac{f(x)}{\rho(x)} \right\rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)} . \quad (\text{B.3})$$

Para integrais de funções de apenas uma variável os métodos diretos de integração numérica são mais rápidos. No entanto à medida que a dimensão do espaço em que a integral é definida aumenta, as técnicas comuns, como o método do trapézio, se tornam muito ineficientes. Para nos convenceremos disso, vamos imaginar o caso de uma integral em um espaço de 300 dimensões, que costuma ocorrer na resolução de problemas de mecânica estatística. Suponhamos que a região de integração seja um hipercubo e que realizemos o cálculo em uma malha construída seccionando a região correspondente a cada variável em 10 sub-intervalos, o que forneceria uma estimativa grosseira do valor da integral. Seriam necessárias então algo em torno de  $10^{300}$  operações aritméticas, que significa uma quantidade monstruosa de cálculos. O método de Monte Carlo possibilita uma razoável economia de processamento se tivermos alguma informação sobre o sistema, como é o caso, por exemplo, de um líquido em equilíbrio termodinâmico a uma dada temperatura. Aí é conhecida a distribuição de energia, que é dada pela função de Maxwell-Boltzmann. O método possibilita uma escolha arbitrária da distribuição das variáveis de integração, o que permite que optemos por uma que seja mais concentrada onde os valores do integrando forem mais significativos. Fazendo-se uma escolha acertada se consegue uma solução que convirja bem mais rapidamente para o valor exato.

Até aqui nós apenas mostramos como o método funciona no papel. Agora é preciso dizer como se gera a amostragem da variável aleatória de integração que é a parte mais importante do ponto de vista operacional. Se utilizarmos uma distribuição uniforme para a variável, não há muito segredo. Porém, em muitos casos, a distribuição não é uniforme. Deseja-se, portanto, construir a partir de uma distribuição qualquer uma seqüência de elementos do espaço de integração de forma tal que a variável aleatória por fim possua aquela distribuição. Uma maneira de se fazer isso é construir uma cadeia de Markov dos possíveis valores que a variável possa assumir. Uma cadeia de Markov possui a propriedade de que todo elemento da seqüência é influenciado apenas pelo elemento que o antecede, ou seja, só elementos adjacentes estão correlacionados. Uma seqüência desse tipo é gerada por uma matriz  $\Pi$  chamada matriz de transição cujas entradas são as probabilidades de transição entre os diversos elementos do conjunto,

$$\rho^{n+1} = \Pi \rho^n . \quad (\text{B.4})$$

O objeto  $\rho$  é um vetor de probabilidades que define a distribuição da variável aleatória, em que estamos integrando, em um determinado instante  $n$  - a variável é discreta ou foi restrita a um subconjunto discreto. Partindo de uma distribuição inicial  $\rho^1$  a distribuição  $\rho$  em um instante posterior é obtida iterando a equação B.4,

$$\rho^{n+1} = \Pi^n \rho^1 . \quad (\text{B.5})$$

Se, ao tomarmos o limite quando  $n \rightarrow \infty$ , a distribuição convergir, digamos, para  $\rho$ , então a seguinte equação deve ser satisfeita,

$$\rho = \Pi \rho . \quad (\text{B.6})$$

Tal equação nos diz que a matriz de transição possui o autovalor 1 cujo autovetor associado é a distribuição limite da cadeia de Markov gerada por ela. Há um teorema devido à Perron e Frobenius [57] que atesta a recíproca sob a condição de que  $\Pi$  seja a matriz de uma cadeia de Markov irredutível ou ergódica, isto é, que cada estado possa ser alcançado a partir de qualquer outro em um número finito de passos. Nesse caso, a distribuição limite independe da condição inicial, propriedade bastante útil. O objetivo é encontrar uma matriz  $\Pi$  que gere uma sequência cujo limite seja a distribuição escolhida para resolver o problema original que era o cálculo numérico de uma dada integral. Já sabemos algumas características que ela deve possuir, contudo ainda não é suficiente para determiná-la. A obtenção da matriz se torna possível se impormos a condição de balanço detalhado,  $\rho_m \Pi_{mn} = \rho_n \Pi_{nm}$ , que é mais forte que a propriedade  $\sum_n \Pi_{mn} = 1$ , que  $\Pi$  possui pelo modo como é definida - uma matriz que possui esta propriedade é chamada matriz estocástica. A primeira solução para o problema, conhecida por solução assimétrica, foi proposta por Metropolis et al. [58],

$$\Pi_{mn} = \begin{cases} \alpha_{mn} & \rho_n \geq \rho_m \text{ e } m \neq n \\ \alpha_{mn}(\rho_n/\rho_m) & \rho_n < \rho_m \text{ e } m \neq n \\ 1 - \sum_{i \neq m} \Pi_{mi} & m = n . \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

A matriz  $(\alpha_{mn})$  é uma matriz estocástica simétrica arbitrária. Essa solução nos dá uma prescrição para obtermos a amostragem da variável de integração com a distribuição desejada e realizarmos o cálculo da integral de maneira mais eficaz. Entretanto, muitas vezes não está disponível muita informação sobre a função que queremos integrar, como ocorre na maioria dos sistemas longe do equilíbrio. Podemos, porém, aproveitar um pouco a idéia do método para tratar esses casos. Em vez de nos preocuparmos em criar uma seqüência de estados com uma distribuição determinada pulamos diretamente para a tarefa de construir a matriz de transição baseados na intuição física de como sistema se comporta e em argumentos heurísticos. A escolha das probabilidades de transição deve ser criteriosa para ser fiel às interações entre os entes do sistema porque alguns estados são proibidos devido à falta de ergodicidade inerente a sistemas longe do equilíbrio termodinâmico.

# Referências Bibliográficas

---

- [1] P. Bak, C. Tang e K. Wiesenfeld, *Self-organized criticality: an explanation of  $1/f$  noise*, PHYS REV LETT **59**, 381 (1987).
- [2] M. Sperl, *Experiments on corn pressure in silo cells - translation and comment of Janssen's paper from 1895*, GRANULAR MATTER **8**, 59-65 (2006).
- [3] J. Šmíd e J. Novosad, *Pressure distribution under heaped bulk solids*, PROCEEDINGS OF THE POWTECH CONFERENCE 1981, I CHEM ENG SYMPOSIUM SERIES **63**, (1981).
- [4] T. Jotaki e R. Moriyama, *On the bottom pressure distribution of the bulk materials piled with the angle of repose*, J SOC POWDER TECHNOL JPN **16**, 184 (1979).
- [5] J. Grindlay e A. H. Opie, *Contact force distribution in a pile of rigid disks*, PHYS REV E **51**, 718-723 (1995).
- [6] A. H. Opie e J. Grindlay, *Deformation of an elastic triangle in equilibrium under gravity*, PHYS REV E **51**, 724-731 (1995).
- [7] R. Brockbank, J. M. Huntley e R. C. Ball, *Contact force distribution beneath a three-dimensional granular pile*, JOURNAL DE PHYSIQUE II **7**, 1521-1532 (1997).
- [8] L. Vanel, D. Howel, D. Clark, R. P. Behringer e E. Clément, *Memories in sand: experimental tests of construction history on stress distributions under sandpiles*, PHYS REV E **60**, R5040-R5043 (1999).
- [9] A. P. F. Atman, P. Brunet, J. Geng, G. Reydellet, P. Claudin, R. P. Behringer e E. Clément, *From the stress response function (back) to the sand pile dip*, EUR PHYS J E **17**, 93-100 (2005).
- [10] M. Otto, J.-P. Bouchaud, P. Claudin e J. E. S. Socolar, *Anisotropy in granular media: Classical elasticity and directed-force chain network*, PHYS REV E **67**, 031302 (2003).
- [11] CAST3M, veja <http://www.castem.org:8001>, PHYS REV E **67**, 031302 (2003).
- [12] F. Melo, P. B. Umbanhowar e H. L. Swinney, *Hexagons, kinks, and disorder in oscillated granular layers*, PHYS REV LETT **75**, 3838 (1995).

- [13] F. Melo, P. B. Umbanhowar e H. L. Swinney, *Periodic, aperiodic, and transient patterns in vibrated granular layers*, PHYSICA A **249**, 1-9 (1998).
- [14] S. Luding, *Models and Simulations of Granular Materials*, Tese de Doutorado, Universidade de Freiburg, 1994.
- [15] K. Lerman, E. Bodenschatz, D. S. Cannell e G. Ahlers, *Transient localized states in 2D binary-liquid convection*, PHYS REV LETT **70**, 3572 (1993).
- [16] S. W. Morris, E. Bodenschatz, D. S. Cannell e G. Ahlers, *Spiral defect chaos in large aspect ratio rayleigh-benard convection*, PHYS REV LETT **71**, 2026 (1993).
- [17] P. Tegzes, *Stability, Avalanches and Flow in Dry and Wet Granular Materials*, Tese de Doutorado, Universidade de Eötvös, 2002.
- [18] P. Bak, C. Tang e K. Wiesenfeld, *Self-organized criticality*, PHYS REV A **38**, 364 (1988).
- [19] P. Evesque e J. Rajchenbach, *Powders and Grains*, (Balkema, Rotterdam, 1989).
- [20] H. M. Jaeger, C. H. Liu e S. R. Nagel, *Relaxation at the angle of repose*, PHYS REV LETT **62**, 40 (1989).
- [21] G. A. Held, D. H. Solina, D. T. Keane, W. J. Haag, P. M. Horn e G. Grinstein, *Experimental study of critical-mass fluctuations in an evolving sandpile*, PHYS REV LETT **65**, 1120 (1990).
- [22] C. H. Liu, H. M. Jaeger e S. R. Nagel, *Finite-size effects in a sandpile*, PHYS REV A **43**, 7091-7092 (1991).
- [23] R. A. Bagnold, *The shearing and dilatation of dry sand and the 'singing' mechanism*, PROC ROY SOC (LONDON) SER A **295**, 219 (1966).
- [24] V. Buchholtz e T. Pöschel, *Avalanche statistics of sand heaps*, J STAT PHYS **84**, 1373 (1996).
- [25] T. Pöschel e V. Buchholtz, *Static friction phenomena in granular materials: Coulomb law vs. particle geometry*, PHYS REV LETT **71**, 3963-3966 (1993).
- [26] P. A. Cundall e O. D. L. Strack, *A discrete numerical model for granular assemblies*, GÉOTECHNIQUE **29**, 47-65 (1979).
- [27] J. Lee, *Avalanches in (1+1)-dimensional piles: a molecular dynamics study*, J PHYS I FRANCE **3**, 2017-2027 (1993).
- [28] V. Frette, K. Christensen, A. Malthé-Sorensen, J. Feder, T. Jossang e P. Meakin, *Avalanche dynamics in a pile of rice*, NATURE **379**, 49-52 (1996).

- [29] S. S. Manna e H. J. Herrmann, *Intermittent granular flow and clogging with internal avalanches*, EUR PHYS J E **1**, 341-344 (2000).
- [30] I. Goldhirsch e G. Zanetti, *Clustering instabilities in dissipative gases*, PHYS REV LETT **70**, 1619 (1993).
- [31] S. McNamara e W. R. Young, *Inelastic collapse and clumping in a one-Dimensional granular medium*, PHYS FLUIDS A **4**, 496 (1992).
- [32] M. P. Allen, *Introduction to Molecular Dynamics Simulation*, NIC SERIES **23**, 1-28 (2004).
- [33] J. D. Lambert, *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*, (John Wiley & Sons, Nova York, 1973).
- [34] C. W. Gear, *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971).
- [35] L. Verlet, *Computer 'experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules*, PHYS REV **159**, 98-103 (1967).
- [36] G. Dahlquist e A. Björk, *Numerical Methods*, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1974).
- [37] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens e K. R. Wilson, *A computer-simulation method for the calculation of equilibrium-constants for the formation of physical clusters of molecules: application to small water clusters*, J CHEM PHYS **76**, 637-649 (1982).
- [38] M. P. Allen e D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, (Clarendon Press, Oxford, 1987).
- [39] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang e K. Allia, *Measurement of the collision properties of small spheres*, PHYS FLUIDS **6**, 1108 (1994).
- [40] N. Maw, J. R. Barber e J. N. Fawcett, *The oblique impact of elastic spheres*, WEAR **38**, 101-114 (1976).
- [41] M. Jean, *The non-smooth contact dynamics method*, COMPUT METHODS APPL MECH ENG **177**, 235-257 (1999).
- [42] T. Unger e J. Kertész, *The contact dynamics method for granular media*, cond-mat/0211696v1 (2002)
- [43] 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*, PHYS REV LETT **58**, 1038 (1987).



- [44] F. P. Bowden e D. Tabor, *The Friction and Lubrication of Solids*, (Clarendon Press, Oxford, 1950).
- [45] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, (Pergamon Press, London, 1959).
- [46] J. Duran, *Sands, Powders and Grains*, (Springer, Berlin, 1997).
- [47] C. A. Coulomb, , ACAD ROY SCI MEM PHYS DIVERS SAVANTS **7**, 343 (1773).
- [48] 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*, J PHYS: CONDENS MATTER **17**, S2391-S2403 (2005).
- [49] C. Goldenberg, A. P. F. Atman, P. Claudin, G. Combe e I. Goldhirsch, *Scale separation in granular packings: stress plateaus and fluctuations*, PHYS REV LETT **96**, 168001 (2006).
- [50] G. Løvoll, K. J. Måløy e E. G. Flekkøy, *Force measurements on static granular materials*, PHYS REV E **60**, 58725878 (1999).
- [51] L. E. Silbert, G. S. Grest e J. W. Landry, *Statistics of the contact network in frictional and frictionless granular packings*, PHYS REV E **66**, 061303 (2002).
- [52] F. Heslot, T. Baumberger, B. Perrin, B. Caroli, and C. Caroli, *Creep, stick-slip, and dry-friction dynamics: experiments and a heuristic model*, PHYS REV E **49**, 49734988 (1994).
- [53] J.-P. Bouchaud, M. E. Cates, J. R. Prakash e S. F. Edwards, *A model for the dynamics of sandpile surfaces*, J PHYS I FRANCE **4**, 1383-1410 (1994).
- [54] A. Aradian, E. Raphael e P.-G. de Gennes, *Surface flows of granular materials: a short introduction to some recent models*, C R PHYSIQUE **3**, 187-196 (2002).
- [55] N. Metropolis e S. Ulam, *The Monte Carlo method*, J AM STAT ASS **44**, 335-41 (1949).
- [56] J. Von Neumann e S. Ulam, *Random ergodic theorems*, BULL AM MATH SOC **51**, 660 (1945).
- [57] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, (Wiley, New York, 1957).
- [58] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller, *Equation o state calculations by fast computing machines*, J CHEM PHYS **21**, 1087-92 (1953).