

2

Arcos em Meios Granulares Densos

2.1

Introdução: Estresses

Sistemas granulares são sistemas muito interessantes devido tanto à grande quantidade de fenômenos físicos de não-equilíbrio incomuns quanto à grande quantidade de aplicações práticas possíveis que eles apresentam (10, 6). Muito progresso foi conseguido durante as últimas duas décadas no que diz respeito ao estado da arte da pesquisa em dinâmica granular (6). No entanto, há ainda muito a se fazer.

Um dos fatores fundamentais para se compreender o funcionamento de um fluxo granular em sistemas densos é o conceito de estresse em sistemas granulares, presentes nos arcos transmissores de forças.

Para um sólido homogêneo, a variação da energia livre devido ao trabalho durante uma deformação pode ser escrita como um escalar, contração de dois tensores simétricos: uma força (ou pressão) generalizada σ_{ij} e um deslocamento (ou deformação) u_{ij} generalizado ($i,j=x,y,z$). Esta energia (livre) toma a forma (por volume) (aqui usaremos a regra da soma para índices repetidos $a_i b_i \equiv \sum_i a_i b_i$) cuja variação (trabalho δW) é dada por (51):

$$\delta W = \delta F_L = -\sigma_{ij} \delta u_{ij}. \quad (2-1)$$

O tensor de deformação u_{ij} corresponde à variação relativa

$$u_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad (2-2)$$

onde u_i é o vetor deslocamento de um ponto do corpo em relação a seu ponto de equilíbrio, sem estresses externos. O tensor de estresse é o conjugado termodinâmico de u_{ij} :

$$\sigma_{ij} = -\frac{\partial F_L}{\partial u_{ij}}.$$

O tensor de estresse σ_{ij} corresponde à força por unidade de área na direção i , ao longo da superfície perpendicular à direção j . As componentes diagonais xx , yy e zz correspondem à pressão normal sobre as superfícies perpendiculares a x , y e z respectivamente.

A aplicação de estresses sobre um objeto sólido leva o mesmo a se deformar. No caso de um cilindro, ele se deforma ao aplicarmos uma tensão constante para esticá-lo. A área transversal (e os comprimentos transversais) encolhe. Neste caso o estresse ao longo do cilindro é constante e a componente u_{zz} do tensor de deformação vale $u_{zz} = \frac{\Delta L}{L}$.

O estresse σ_{zz} é dado por

$$\sigma_{zz} = \frac{F}{\pi R^2} = \frac{4F}{\pi d^2}.$$

Duas quantidades importantes podem ser então definidas: o módulo de Young, Y , e o raio de Poisson, σ . O módulo de Young mede a rigidez elástica do material:

$$Y = \frac{\sigma_{zz}}{u_{zz}} = \frac{4F\Delta L}{\pi d^2 L}.$$

O coeficiente de Poisson mede a razão entre as deformações longitudinais e laterais:

$$\sigma = -\frac{u_{xx}}{u_{zz}} = -\frac{\frac{\Delta d}{d}}{\frac{\Delta L}{L}},$$

e devido à estabilidade termodinâmica do material devemos ter $-1 < \sigma < \frac{1}{2}$ (51).

Contudo, um sistema de grãos está longe de ser homogêneo: de fato, uma pilha de grãos é extremamente anisotrópica. Além disto, as deformações que ocorrem (fraturas, deslocamentos de conjuntos de grãos em relação a outros) absorvem energia e são plásticas (os grãos não voltam à posição original quando a perturbação externa cessa). Assim, os valores que estes coeficientes elásticos possam vir ter, para um sistema de grãos, não necessariamente obedecerão aos mesmos limites que no caso de um sólido isotrópico.

Isto fica claro no caso do coeficiente de Poisson. No caso do modelo simples de quatro grãos (ver Figura 1.3), temos $h_V^2 + h_H^2 = 16R^2$ o que dá $h_V dh_V + h_H dh_H = 0$. Então, podemos definir o coeficiente de Poisson como:

$$\sigma = -\frac{\frac{dh_V}{h_V}}{\frac{dh_H}{h_H}} = \left(\frac{h_V}{h_H}\right)^2.$$

A variação da área intersticial pode ser escrita como $dS_t = \frac{1}{2}(h_V dh_H + h_H dh_V) = \frac{1}{2} h_H dh_V(1 - \sigma)$. No ponto de máxima S_t , temos que $dS_t = 0$ e $\sigma = 1$. Este último resultado representa deformações iguais nas direções ortogonais. Para $\sigma < 1$ o regime volta a ser o usual, e não mais o de dilatância.

A própria existência de uma energia potencial ainda está em debate (5). Relações constitutivas usuais associam os termos de deformação u_{ij} linearmente com os estresses σ_{ij} (via o módulo de Young para sistemas elásticos). Isto é derivado da existência de uma energia potencial elástica de deformação do meio da forma $U_{el} \sim Yu^2$.

No caso de sistemas granulares contidos por paredes elásticas, a elasticidade das paredes pode “acumular” parte desta energia e devolvê-la (de forma mais ou menos reversível). Porém, se as paredes forem rígidas, a única fonte possível de energia potencial passa a ser gravitacional. Para entendermos isto devemos notar que a estrutura das forças em um sistema granular é bastante irregular. Além disto, como $Y \sim 10^{10} - 10^{11}$ Pa (para a maioria dos materiais rígidos), podemos considerar a energia compressiva elástica dos grãos desprezível.

Portanto, se uma força extra passa a agir na superfície de um sistema granular estático, deformando-o, e realiza trabalho sobre o mesmo, parte da variação da energia interna (potencial) do sistema tem que ser gravitacional. Como esta força externa faz então variar a energia gravitacional do sistema?

Dentro da pilha, as forças se transmitem principalmente pelas cadeias de força (os arcos) já presentes no sistema em equilíbrio. Existem evidências que apontam para uma correlação entre direcionamento de forças aplicadas externamente via arcos e energia potencial: o estresse interno da pilha, gerado pela aplicação externa de uma força, pode ser derivado da distribuição interna de arcos e paralelo aos mesmos sugerindo que estes redirecionam o grosso dessas forças (5). Talvez o sistema de arcos se mova devido à força externa extra, e a presença dos arcos tende a direcionar o efeito desta variação de estresse nas suas próprias direções.

A forma com que os estresses gerados pela aplicação da força extra se distribuem pela pilha será crucial na determinação tanto das relações constitutivas quanto na existência ou não de uma energia potencial efetiva para o sistema.

Recentemente, um novo modelo para o papel dos estresses internos elásticos e dissipativos foi proposto por Jiang e Liu (52, 53, 54). Um aspecto interessante deste modelo é o papel desempenhado pelo estresse elástico interno, que, quando em estado de equilíbrio, é o principal responsável pela estabilidade estrutural do sistema, enquanto, à temperatura granular não-nula

($T_g > 0$: não-equilíbrio), os componentes transientes plásticos (com tempo característico $1/T_g$) do estresse também estão presentes, sendo diretamente responsáveis pelos mecanismos de dissipação de energia interna dos sistemas granulares. A estabilidade das estruturas formadas pela malha de estresses elásticos, durante a fase de não-equilíbrio do movimento, e o papel dos estresses plásticos são algumas das questões que serão abordadas neste capítulo.

2.2

O Efeito do Estresse

Uma das características mais importantes apresentadas por sistemas granulares é a forma altamente incomum que os estresses se distribuem espacialmente. Os estresses se propagam principalmente através de uma malha topológica unidimensional de contatos de alto estresse, isto é, os arcos. De fato, pode-se classificar os grãos de forma grosseira como pertencendo ou à malha carregando a maior parte dos estresses (arcos) ou à massa de grãos relativamente soltos (fase “mole”) (6).

O papel desempenhado pelos arcos é crucial para a compreensão de alguns comportamentos granulares não-usuais, como o efeito Janssen em um silo (36). Neste caso específico, os grãos localizados nos terminais dos arcos pressionam (com muita força) a parede do silo, e o atrito estático nos pontos de contato (entre os grãos dos arcos) é alto o suficiente para suportar o peso dos grãos acima deles. Logo, a pressão interna na base do silo se torna razoavelmente independente da altura da pilha granular, se esta for maior que um limiar.

O efeito descrito acima só se manifesta em sistemas granulares densos, onde contatos são praticamente permanentes e muito poucos grãos movem-se livremente, em contraste com o que ocorre na fase fluidizada. Neste último caso, uma temperatura granular dinâmica pode ser atribuída aos grãos, e eles transmitem estresse da mesma forma que um fluido, por transfusão de momento durante colisões, com estresses tipicamente ordens de grandeza menores que aqueles da pilha granular em repouso. Uma vez que estamos interessados apenas nos efeitos de estresse na fase sólida, nós assumimos, conseqüentemente que o sistema seja suficientemente denso, de forma que não haja fase fluidizada presente.

Para efeito de clareza, vamos supor um arranjo experimental simples, consistindo em dois cilindros concêntricos (que, ao serem “desenrolados”, podem ser aproximados como duas placas retangulares longas), entre os quais preenchemos com um meio granular denso, tal como areia ou sal (veja Figura 2.1, abaixo). Fazendo as placas se mover em direções opostas, um momento

linear é fornecido às extremidades, a fim de vencer as forças internas de atrito a manter o sistema em movimento. Dois mecanismos possíveis para o transporte de momento surgem: via colisões e forças de atrito por contato (na fase “mole”), e via contato normal direto (propagado através dos arcos).

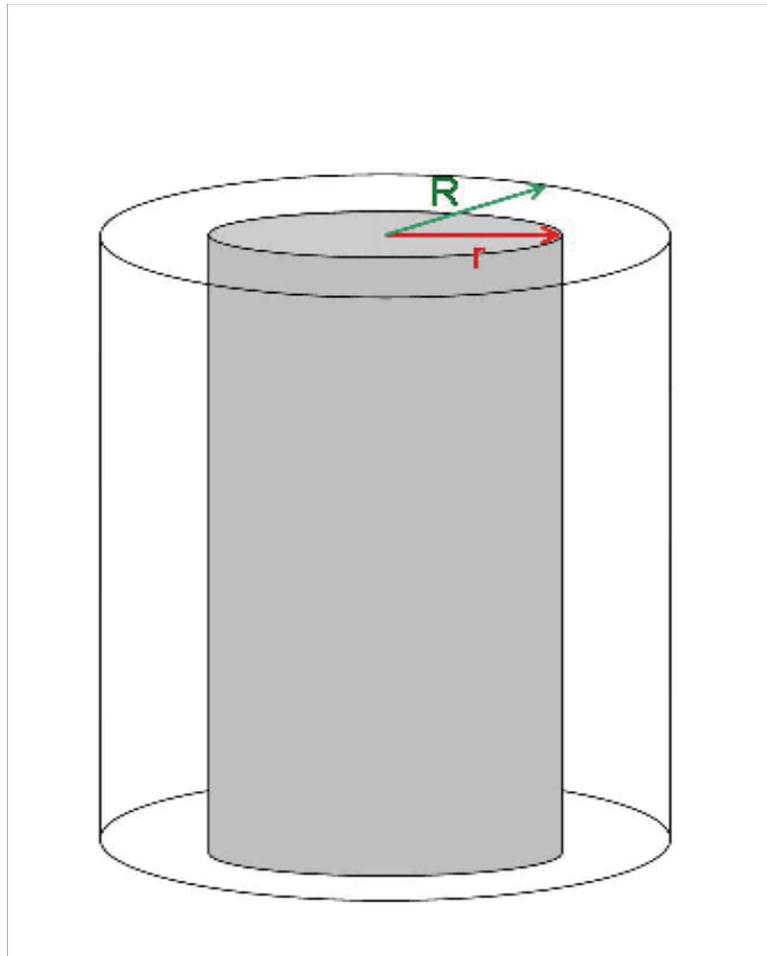


Figura 2.1: Uma ilustração do nosso arranjo experimental modelado. Dois cilindros concêntricos, de raios diferentes, entre os quais preenchemos de grãos, giram com velocidades fixas em sentidos opostos, induzindo o aparecimento de um cisalhamento no material granular em seu interior.

Conseqüências interessantes surgem, como o aparecimento de regiões estreitas (alguns diâmetros granulares de extensão) conhecidas como bandas de cisalhamento (“shear bands”), separando massas de grãos se movendo em sentidos diferentes em relação uma à outra (55, 56, 57, 58) - ver exemplo na Figura 2.2. Bandas de cisalhamento são importantes em várias áreas da física, e quando relacionadas a materiais granulares têm diversas aplicações, como erosão e mecânica dos solos, como pode ser visto na Figura 2.3.

Nós supomos que, na fase densa “mole”, os grãos estão em contato uns com os outros a maior parte do tempo, mas a magnitude típica de seus

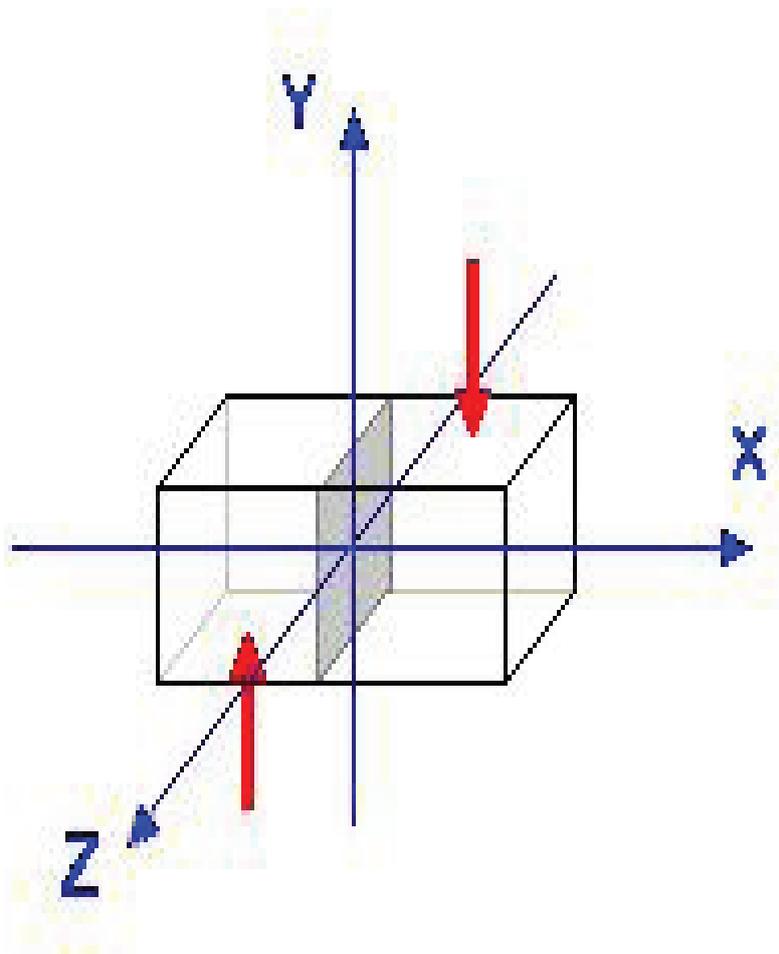


Figura 2.2: Esquema ilustrativo da banda de cisalhamento. Regiões com velocidades opostas, gerando uma região de velocidade zero no meio (hachurada na figura).

estresses é pequena, da ordem de grandeza do seu peso típico. Eles podem rolar, exercendo forças radiais e tangenciais, e colidir entre si, da mesma forma que aconteceria com as moléculas de um fluido denso (dissipativo). Em relação ao cisalhamento, as forças **individuais** de atrito tangencial produzidas pelos contatos durante a fase “mole” são fracas, devido aos valores pequenos dos estresses normais, levando a uma aderência fraca. Logo, eles não conseguem formar bandas de cisalhamento, já que a variação suave dos estresses no interior da fase “mole” faz as velocidades das camadas adjacentes de material variar de forma lenta de uma camada para a próxima. Uma fase granular puramente “mole” se comportaria praticamente como um fluido viscoso denso submetido a um estresse de cisalhamento - sem a formação das bandas. Por outro lado, uma malha formada pelos arcos se comporta de forma completamente diferente, caracterizando-se por forças de contato normais muito fortes, ordens de grandeza maiores que o peso de um grão típico, formando um sub-arranjo



Figura 2.3: Foto da estrada A6187, na Inglaterra, próximo a Castleton. Cisalhamento do solo tornou-a destruída e impossível de se trafegar.

do sistema topologicamente unidimensional, ramificado aleatoriamente. Em contraste com a fase “mole”, os arcos podem ser responsáveis por variações repentinas dos estresses em curtas escalas de distância. Eles são, portanto, candidatos a desempenhar um papel importante no desenvolvimento de bandas de cisalhamento.

Para entender o transporte de grãos em um sistema denso sob cisalhamento, foi pensado um modelo de rede quadriculada que leva em conta fenomenologicamente a estrutura não-usual dos estresses nesses sistemas. É crucial modelar a relação entre a intensidade e a direção dos estresses locais e a quantidade de matéria transportada. É importante observar que arcos com intensidade de estresse menor se ramificam de forma mais irregular que aqueles com intensidade de estresse mais alta, e que um modelo eficiente de rede para o transporte granular deve levar em consideração a direção e a intensidade dos arcos na taxa de transporte de massa.

O modelo é implementado em uma rede de células quadradas, onde cada

célula (i, j) representa uma região, com densidade escalar local dada pelo parâmetro $\psi_{i,j}$. Nós não expressamos explicitamente as forças agindo nas fases “moles” (como, por exemplo, de contato grão-grão ou o próprio peso), mas, em vez disso, o efeito delas é levado em consideração implicitamente nas equações de transporte para os $\psi_{i,j}$. As propriedades de transporte de massa tem uma dependência altamente não-linear com a intensidade do estresse de cada célula da rede. Isso ocorre devido à ramificação dos arcos mais fortes em menores que ativamente empurram os grãos da fase “mole”. Um modelo simples mostrando algum grau de auto-similaridade (sem, no entanto, implicar necessariamente em fractalidade) a uma escala mínima (maior que o tamanho de um grão típico) é desenvolvido abaixo.

No nosso modelo, os arcos são dispostos ao longo das bordas das células e suas magnitudes são uma função estocástica do tempo. O modelo leva em consideração interações friccionais estáticas e dinâmicas, bem como efeitos de volume excluído entre uma célula repleta e suas vizinhas. Aplicando estresse externo de cisalhamento (através de condições de contorno em movimento) por tempos longos, observa-se o aparecimento de um estado estacionário que reproduz bem o que ocorre em experimentos, em especial o surgimento de bandas de cisalhamento estreitas na borda de regiões granulares que se movem em sentidos opostos.

Bandas de cisalhamento se originam como a interface menos dissipativa entre regiões se movendo em sentidos opostos (57). O mecanismo “microscópico” principal para dissipação é basicamente devido tanto a colisões entre grãos na interface quanto ao atrito de deslizamento que ocorre naturalmente nela. Diversos fenômenos dissipativos, como a aglomeração granular (59) ou a formação de bandas de cisalhamento, surgem como artefatos de minimização da dissipação (60, 61), reduzindo assim a dissipação de energia total desses sistemas.

Além disso, bandas de cisalhamento são regiões estreitas que não podem ser estáveis em sistemas viscosos “moles”; eles podem, entretanto, ser associados com a descontinuidade espacial interna dos estresses em sistemas granulares, muito provavelmente devido à presença de arcos (de forças) no sistema. O próximo passo é propor um modelo efetivo para a variação temporal das forças dos arcos.

2.3

Dinâmica Estocástica para Arcos

O papel dos arcos no transporte granular é modelado para uma situação dinâmica específica: sistemas granulares densos sob cisalhamento externo. É

fato que sistemas granulares dissipativos conseguem manter o seu estado de movimento apenas enquanto uma fonte externa fornece energia ao mesmo. Para sistemas cisalhados, essa energia vem do trabalho realizado pelas forças de atrito nas extremidades. A forma com que essas forças de superfície iniciam e mantêm o movimento no interior do sistema tem conexão direta com a ação dos arcos.

No modelo apresentado, o sistema é representado por uma rede (quadrada), constituída de células e suas bordas. Cada célula corresponde a um volume de grãos e é assinalada por um parâmetro local $\psi(\mathbf{r}) = \psi_{i,j}$ (com i, j inteiros) associado com a média da distribuição local de grãos, os quais não são representados individualmente, mas apenas pela massa granular da célula, por meio do parâmetro $\psi_{i,j}$.

Nós supomos que os grãos no interior de uma célula qualquer interajam de forma fraca uns com os outros, característica de uma fase “mole” típica. As bordas das células são usadas para representar os arcos, que interajam tanto com os grãos do seu interior quanto com a vizinhança imediata da mesma. Esses arcos, representados por forças nas direções das bordas ($F_{i,j}^{x,y,\pm}$, onde os índices inferiores, i e j , representam as coordenadas da célula na rede, enquanto os índices superiores, a saber $x+$, $x-$, $y+$ e $y-$, se referem à borda da célula em questão - com $x+$ sendo a borda horizontal superior, $x-$ a borda horizontal inferior, $y+$ a borda vertical da direita e $y-$ a borda vertical da esquerda; ver Figura 2.4), evoluem no tempo por regras autômatas, e a eles são dados uma orientação associada com a direção do movimento da massa local. A orientação dos arcos vem do aparente conflito de tentar descrever uma quantidade estritamente local (o estresse) por meio de uma variável associada com um alcance finito em comprimento. De fato, a mobilidade granular irá depender dos gradientes do estresse - daí a necessidade dos arcos das bordas serem orientados.

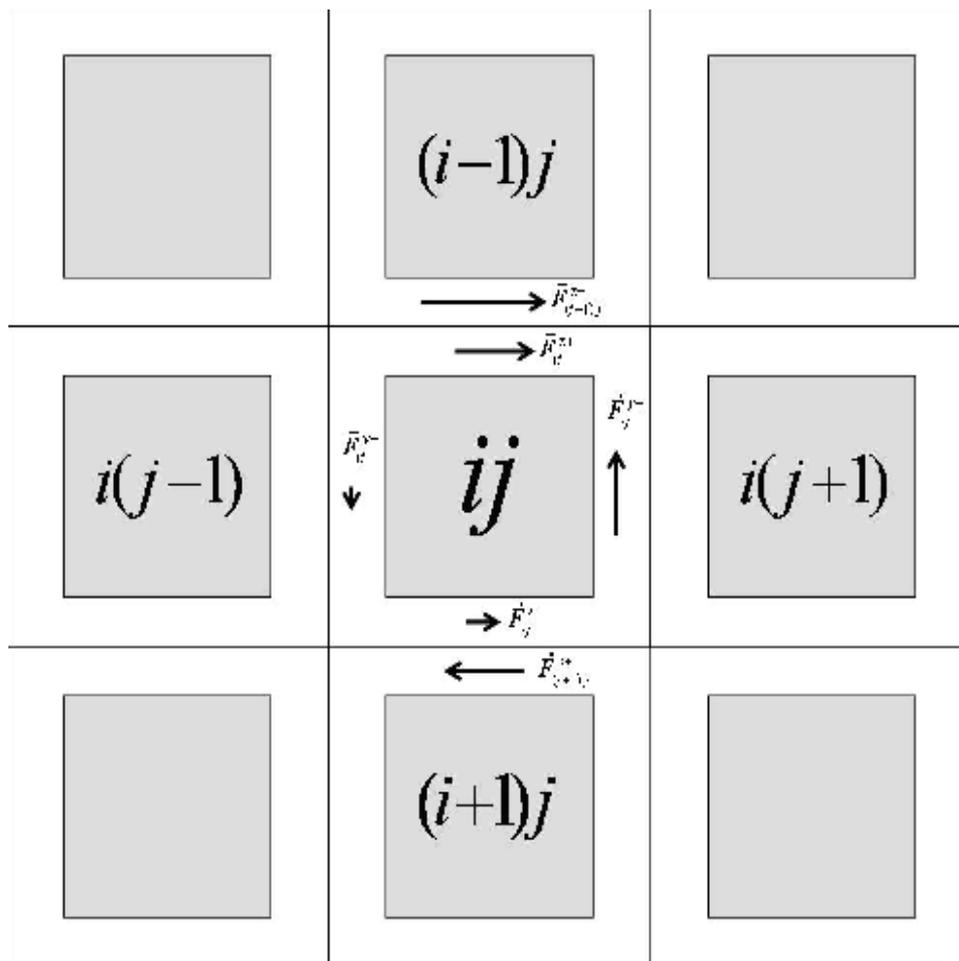


Figura 2.4: Ilustração do modelo computacional 2D. O espaço entre as células é apenas um recurso gráfico para facilitar a visualização das forças ao longo das bordas - ele não existe na simulação.

2.4

Arcos Ramificados

É necessário um modelo simples para explicar qualitativamente como os arcos das bordas contribuem para o transporte granular. Em duas dimensões, a massa transportada por causa de um arco de intensidade típica T (em unidades de força) depende do número de vezes que ele se ramifica. Vamos supor que um comprimento de ramificação típico L , onde o arco então se bifurca em dois novos arcos de força aproximadamente $T/2$ (ver Figura 2.5). A ramificação prossegue até a força do arco alcançar o valor típico da fase “mole” para a força intergranular, f_0 .

Supõe-se que o número de grãos transportados seja proporcional à área A coberta pelas ramificações. Definido N como o número de ramificações

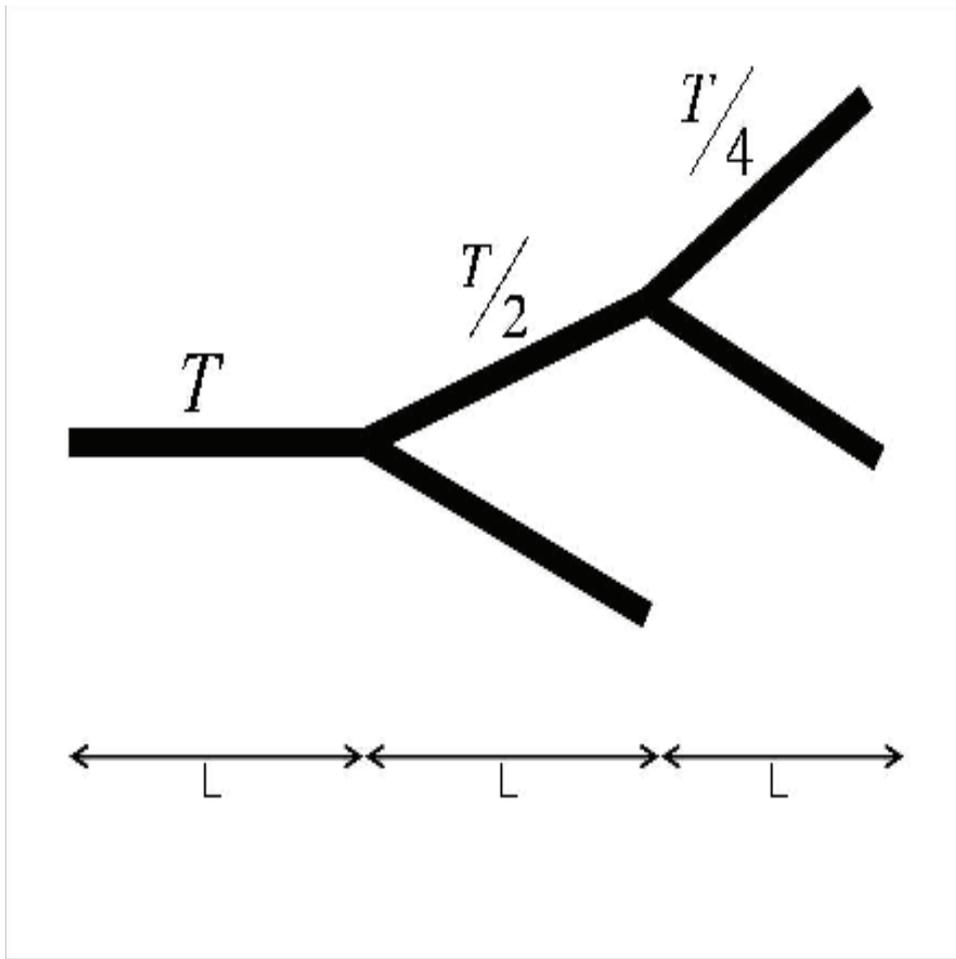


Figura 2.5: Um diagrama simples da ramificação dos arcos e suas forças (T) a intervalos regulares (L).

necessárias para levar o estresse de T a f_0 :

$$f_0 = \frac{T}{2^N} \Rightarrow N = \frac{\ln \frac{T}{f_0}}{\ln 2}.$$

Logo, a área A acima é proporcional a $N^2 L^2$, e pode-se escrever

$$\frac{\Delta\psi}{\Delta t} \propto \pm \ln \frac{|T|}{f_0} \approx \pm \ln \left(1 + \frac{|T|}{f_0} \right), \quad (2-3)$$

uma vez que, em geral, $|T| \gg f_0$. A última modificação na Equação (2-3) é feita apenas para melhorar a convergência numérica.

A Equação (2-3), acima, não deve ser vista como um modelo exato para o transporte no interior de um sistema granular denso, mas apenas como um indicador fenomenológico aproximativo para a equação de transporte correta. Por exemplo, a saturação não-linear da transferência de massa com a intensidade de força é um ingrediente muito importante para o surgimento de bandas de cisalhamento e provavelmente estará presente em modelos mais

sofisticados no futuro.

2.5

Modelo Computacional Bidimensional

2.5.1

Descrição do Arranjo Experimental 2D

Para simular o arranjo descrito anteriormente (um cilindro externo longo com um cilindro interno concêntrico de raio menor e igualmente longo, repleto de material granular entre os dois), foi feito um modelo bidimensional consistindo de duas paredes paralelas horizontais, em lugar das paredes do cilindro, com a rede de células quadradas entre ambas, onde se encontram os grãos. O experimento é bem descrito por esse modelo bidimensional, devido a suas simetrias - impondo condições periódicas nas laterais verticais, simulamos, de forma aproximada, anéis “esticados” (62).

Em experimentos realizados com sistemas análogos (55), ao se ligar o movimento nas paredes, estresses são induzidos no meio granular por meio de forças de cisalhamento, e uma clara separação entre as massas se movendo em sentidos opostos pode ser observada, demonstrando o surgimento de uma banda de cisalhamento entre elas. Essa banda é comparativamente fina: sua espessura é da ordem de alguns diâmetros granulares.

É importante compreender as causas físicas dos fenômenos descritos acima, tais como a formação de bandas de cisalhamento e outras transições. Muita informação pode ser obtida sobre um sistema ao se modelá-lo utilizando os ingredientes físicos mais importantes contidos no mesmo. Essa é a idéia por trás do modelo proposto. Essas idéias foram aplicadas para simular um sistema granular denso sob a ação de um cisalhamento externo, descrito acima.

O modelo é composto de dois cilindros concêntricos, cada um girando em uma direção diferente, com material granular entre eles. Isto é simulado por um meio dividido como uma rede de células quadradas, que podem conter até N grãos cada. Esta rede tem condições de contorno periódicas em seus limites horizontais, representando uma seção do sistema (ou dois “anéis abertos”), e condições de velocidade constante em seus limites inferior e superior, representando as duas paredes dos cilindros. Em cada borda, de cada célula, uma força aparece devido à formação e transporte de arcos. Essas forças são as responsáveis pelo movimento correlacionado dos grãos entre as células e, conseqüentemente, no interior das mesmas.

No início da simulação, apenas as células nos extremos inferior ou superior da rede possuem qualquer tipo de velocidade ou forças aplicadas.

A rede, como um todo, tem em $t = 0$ uma distribuição isotrópica de grãos. As células das linhas das extremidades superior e inferior têm velocidades fixas: zero na direção y , e v (constante) na direção x (mas com sinais diferentes para as linhas superiores e inferiores). Isso simula uma camada colada de grãos nas paredes, onde os grãos e a parede movem-se com mesma velocidade (artifício utilizado corriqueiramente em experimentos para evitar fenômenos decorrentes de contatos - e atritos - com a parede do sistema (48)). Esse movimento de grãos, assim como o seu padrão difusivo aleatório, forma arcos, que promovem o surgimento de forças e o transporte de material granular.

Essa interação entre os grãos é simulada pela aplicação de uma força na borda entre as duas células - mais especificamente, na borda de cada célula individual, em ambas as direções, como pode ser visto na Figura 2.4, acima - a qual sofre a influência tanto das forças em sua vizinhança quando da densidade de grãos nas células vizinhas. A cada passo de tempo τ , as forças são recalculadas de acordo com as equações desenvolvidas e descritas abaixo. Isso simula arcos surgindo ao longo das linhas da rede, entre as células, que são os responsáveis pelo transporte de grãos e, conseqüentemente, pelo aparecimento das bandas de cisalhamento.

2.5.2

Modelo Simplificado

Como um primeiro passo, nós testamos nossa hipótese de redes de células quadradas e ramificação de arcos por meio de um modelo bastante simplificado. Para tanto, foi levado em consideração apenas a ação das forças vizinhas, de forma direta. Por isso, nas equações ((2-4)-(2-8)), abaixo, tudo o que foi feito foi fazer uma média aritmética simples sobre todas as forças, na mesma direção, que tenham conexão direta com a força a ser calculada, supondo que reproduza, de forma grosseira, o comportamento de arcos reais no material (62).

Por exemplo, para $F_{i,j}^{x+}$, as contribuições relevantes vêm: das forças imediatamente antes e depois do sítio (i, j) , ao longo da mesma linha reta, respectivamente $F_{i,j-1}^{x+}$ e $F_{i,j+1}^{x+}$, associadas com a transmissão direta da força ao longo do arco; da força paralela aplicada na mesma célula, mas na parede oposta ($F_{i,j}^{x-}$), uma vez que ela pode facilitar (se ambas estiverem agindo no mesmo sentido) ou impedir (se ambas estiverem agindo em sentidos opostos) o transporte de grãos pela transmissão do seu efeito através da fase “mole” da célula em questão; da força paralela da célula adjacente ($F_{i-1,j}^{x-}$), cujo arco correspondente interage com o arco a ser calculado por atrito cinético; e da própria força calculada ($F_{i,j}^{x+}$).

Assim, nosso “modelo de teste” pode ser descrito por esse simples

conjunto de equações (62):

$$F_{i,j}^{x+}(t + \tau) = \frac{F_{i,j+1}^{x+}(t) + F_{i,j-1}^{x+}(t) + F_{i,j}^{x-}(t) + F_{i-1,j}^{x-}(t) + F_{i,j}^{x+}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{x+}(t), \quad (2-4)$$

$$F_{i,j}^{x-}(t + \tau) = \frac{F_{i,j+1}^{x-}(t) + F_{i,j-1}^{x-}(t) + F_{i,j}^{x+}(t) + F_{i+1,j}^{x+}(t) + F_{i,j}^{x-}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{x-}(t), \quad (2-5)$$

$$F_{i,j}^{y+}(t + \tau) = \frac{F_{i+1,j}^{y+}(t) + F_{i-1,j}^{y+}(t) + F_{i,j}^{y-}(t) + F_{i,j+1}^{y-}(t) + F_{i,j}^{y+}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{y+}(t), \quad (2-6)$$

$$F_{i,j}^{y-}(t + \tau) = \frac{F_{i+1,j}^{y-}(t) + F_{i-1,j}^{y-}(t) + F_{i,j}^{y+}(t) + F_{i,j-1}^{y+}(t) + F_{i,j}^{y-}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{y-}(t), \quad (2-7)$$

$$\Delta\psi_{ij} = K \ln(k_f |F_{R_{i,j}}| + 1) + \eta_{i,j}^{\psi}(t), \quad (2-8)$$

onde K define a escala de tempo ($K = 0.1$), k_f é a escala de força ($k_f = 20$), os η 's são números gerados aleatoriamente (por meio de uma distribuição normal, com média $\mu = 0$ e variância σ^2), ψ é a função densidade de grãos das células e $F_{R_{i,j}}$ é a resultante das forças dos arcos aplicadas nas bordas da célula (i, j) e calculadas separadamente para cada direção. A variação de $\psi_{i,j}$ é dada pelo modelo da seção 2.4, e descrita pela Equação (2-8), a qual por sua vez está de acordo com o disposto pela Equação (2-3).

As equações acima representam também a ramificação dos arcos como um processo difusivo, uma vez que o Laplaciano discretizado pode ser escrito como $F_{i+1,j} + F_{i-1,j} + F_{i,j+1} + F_{i,j-1} - 4F_{i,j}$. Com uma manipulação algébrica trivial de uma das equações do modelo (como exemplo, usaremos a Equação

(2-4) podemos chegar a

$$\begin{aligned}
 & 5F_{i,j}^{x+}(t + \tau) - 5F_{i,j}^{x+} = \\
 & F_{i,j+1}^{x+}(t) + F_{i,j-1}^{x+}(t) + F_{i,j}^{x-}(t) + F_{i-1,j}^{x-}(t) - 4F_{i,j}^{x+}(t) + \eta_{i,j}^{x+}(t),
 \end{aligned}
 \tag{2-9}$$

que é, a menos de uma constante $\propto \frac{1}{\tau}$, uma equação de difusão discreta para a propagação dos arcos.

2.5.3

Modelo Completo

Para levar em consideração os efeitos do atrito estático nas bordas, a influência da força da massa de grãos na fase “mole”, o possível atrito cinético entre os arcos de células adjacente, etc., um modelo mais detalhado foi elaborado. Esse modelo incorpora também o mecanismo de realimentação entre a massa e a intensidade do arco.

As condições iniciais são as mesmas do modelo simplificado.

As equações para as forças aplicadas nos grãos de cada célula são (62):

$$\begin{aligned}
 & F_{i,j}^{x+}(t + \tau) = \\
 & \frac{\alpha \left[\frac{F_{i,j+1}^{x+}(t) + F_{i,j-1}^{x+}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{x-}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i-1,j}^{x-}(t) - F_{i,j}^{x+}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
 & + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
 & + \eta_{i,j}^{x+}(t),
 \end{aligned}
 \tag{2-10}$$

$$\begin{aligned}
 & F_{i,j}^{x-}(t + \tau) = \\
 & \frac{\alpha \left[\frac{F_{i,j+1}^{x-}(t) + F_{i,j-1}^{x-}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{x+}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i+1,j}^{x+}(t) - F_{i,j}^{x-}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
 & + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
 & + \eta_{i,j}^{x-}(t),
 \end{aligned}
 \tag{2-11}$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j}^{y+}(t + \tau) = & \\
& \frac{\alpha \left[\frac{F_{i-1,j}^{y+}(t) + F_{i+1,j}^{y+}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{y-}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i,j+1}^{y-}(t) - F_{i,j}^{y+}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
& + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
& + \eta_{i,j}^{y+}(t),
\end{aligned} \tag{2-12}$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j}^{y-}(t + \tau) = & \\
& \frac{\alpha \left[\frac{F_{i-1,j}^{y-}(t) + F_{i+1,j}^{y-}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{y+}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i,j-1}^{y+}(t) - F_{i,j}^{y-}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
& + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
& + \eta_{i,j}^{y-}(t),
\end{aligned} \tag{2-13}$$

$$\Delta\psi_{ij} = K \ln(k_f |F_{R_{i,j}}| + 1) + \eta_{i,j}^{\psi}(t), \tag{2-14}$$

onde os valores das constantes da Equação (2-14) acima são os mesmos da Equação (2-8).

Vários parâmetros novos são introduzidos aqui: os parâmetros α e β dão conta das anisotropias internas (em um caso genérico, é definido $\alpha = \beta = 1$) para o termo de média aritmética das equações abaixo, relacionado ou com a estrutura de transmissão de estresses ao longo do arco em si ou com o quando a massa granular no interior da célula transmite a influência do arco paralelo na borda oposta da célula; c_1 é um pequeno termo de acoplamento que leva em conta o atrito cinético entre células vizinhas - a função de Heaviside indica o sentido da contribuição da força de atrito cinético, devido ao deslizamento relativo entre os arcos de bordas de células adjacentes; c_2 controla a interação compressiva entre as fases “moles” de células vizinhas e a sua influência no reforçamento-enfraquecimento da intensidade de estresse do arco. Isso é feito de fato pelo termo de “penalidade” na energia (controlado pelo c_2) que é associado com as funções exponenciais (uma constante arbitrária no argumento da exponencial não é mostrado) da diferença de densidades de massa entre células vizinhas. É dispendioso tentar excessivamente encher (ou esvaziar) células, a

custo das suas células vizinhas. O pequeno ϵ previne divergências numéricas espúrias. Abaixo, será descrito com maiores detalhes o comportamento dos termos mencionados neste parágrafo.

Como no caso real, os segmentos de arcos imediatamente antes e depois de um segmento qualquer interagem com a força a ser calculada por meio de contato direto (os primeiros dois termos das Equações (2-4)-(2-7)). Aqui, pelo menos, é mantido o mesmo método do modelo simplificado: uma simples média sobre ambos. O outro termo das equações anteriores, correspondente à força na parede oposta da mesma célula, também dá uma contribuição direta, mas de uma natureza diferente. Isso acontece porque os outros dois termos representam segmentos de arcos conectados por contato direto, enquanto este reflete a influência de forças na parede oposta da mesma célula no transporte do material granular de seu interior. Para levar essa diferença em consideração, esses tipos diferentes de contribuição são ponderados pelas constantes α e β - onde α depende apenas das propriedades físicas dos grãos, enquanto β depende não apenas dessas propriedades, mas também da densidade do meio: se o meio for mais denso, a influência desta força será maior, e vice-versa. Para simplificar o modelo computacional, no entanto, aqui o parâmetro β depende apenas das condições iniciais do sistema, em vez de depender de um cálculo passo-a-passo baseado na densidade de cada célula individual a cada passo de tempo. É, naturalmente, uma grande simplificação, mas necessária para manter o tempo de simulação computacional dentro de um limite razoável.

O atrito entre células (isto é, arcos) vizinhas é levado em conta agora por meio de uma função degrau de Heaviside. O atrito aqui é considerado uma função do coeficiente de atrito cinético efetivo (representado pelo parâmetro c_1), e a função degrau de Heaviside define se o atrito está trabalhando a favor ou contra o movimento granular da célula. O sinal é dado pelo valor da função Heaviside da diferença entre as forças e subtraindo $1/2$ (por exemplo, $[\theta (F_{i-1,j}^{x-}(t) - F_{i,j}^{x+}(t)) - \frac{1}{2}]$ resultará em $-1/2$ se as forças têm sinais opostos e $+1/2$ em caso contrário). Assim, tem-se meios de levar em consideração a contribuição direta causada pelo atrito, com o atrito cinético entre as bordas aumentando ou reduzindo as forças propagadas pelos arcos.

Outro problema abordado neste modelo é a descrição das propriedades físicas do meio sem olhar para o que está ocorrendo na fase “mole” do interior da célula. Para melhorar o modelo, foi incluído neste ponto um termo dependente das densidades das células, que acarreta duas coisas: primeiro, fornece uma contribuição, à força, relativa às quantidades de grãos dentro da célula, e, segundo, leva em consideração que cada célula tem um limite físico de um certo número N de grãos em seu interior. Se a célula tiver atingido

a sua capacidade máxima, então ela não pode receber mais grãos. Se houver mais grãos em células adjacentes que deveriam se mover para a célula em questão, então eles ficarão presos em seu lugar original - criando aglomerados completamente empacotados. Uma vez que não é tentado aqui descrever o comportamento da fase “mole”, é difícil saber de antemão quão relevante será este termo para as simulações - desta forma, o parâmetro constante c_2 deverá ser ajustado, aumentando ou diminuindo a relevância das densidades para o comportamento geral dos arcos.

No caso especial onde uma das forças de cisalhamento das paredes era inicialmente nula, o atrito estático dos grãos “colados” nela deve ser levado em consideração, pelo menos nos passos iniciais da simulação. Para tanto, é necessário olhar apenas para os termos de atrito das equações acima para as bordas das células em contato com a parede. Então basta forçá-los para ser exatamente igual à força da borda oposta até que esta força atinja um limiar F_0 (tomando como exemplo a célula (i, j) em contato com a parede inferior parada, então $F_{i,j}^{x-} = F_{i,j}^{x+}$ para $F_{i,j}^{x+} < F_0$). Após isso, as equações normais para as forças podem ser seguidas. Isto força uma condição de transporte lateral nulo de grãos entre as células, simulando o efeito do atrito estático.

2.5.4 Resultados 2D

Os resultados obtidos pelas nossas simulações computacionais concordam com os resultados experimentais encontrados na literatura. Em ambos os modelos (tanto no simplificado quanto no mais completo), a modelagem foi feita através de uma seqüência de grãos entre as duas paredes, simulando esta condição por meio de um sistema retangular com condições periódicas nas paredes laterais. O perfil de densidades no início é isotrópico, com cada célula preenchida com metade de sua capacidade máxima. As paredes superior e inferior são submetidas a forças em sentidos opostos, criando, conseqüentemente, um cisalhamento. As células entre as paredes começam sem quaisquer forças ou taxas de transporte. À medida em que o tempo vai passando, o sistema evolui naturalmente - os grãos começam a ser transportados gradativamente entre as células da rede, devido tanto ao movimento aleatório quanto às forças aplicadas ao longo das bordas das células, criando os arcos e a propagação do estresse - e, em conseqüência, a transmissão de força que eles causam. Após o equilíbrio ser atingido, os campos de velocidade e densidade são inspecionados e o comportamento do meio é analisado. Imagens da simulação computacional podem ser vistas na Figura 2.6.

Mesmo o nosso modelo simplificado, para os testes iniciais, com uma

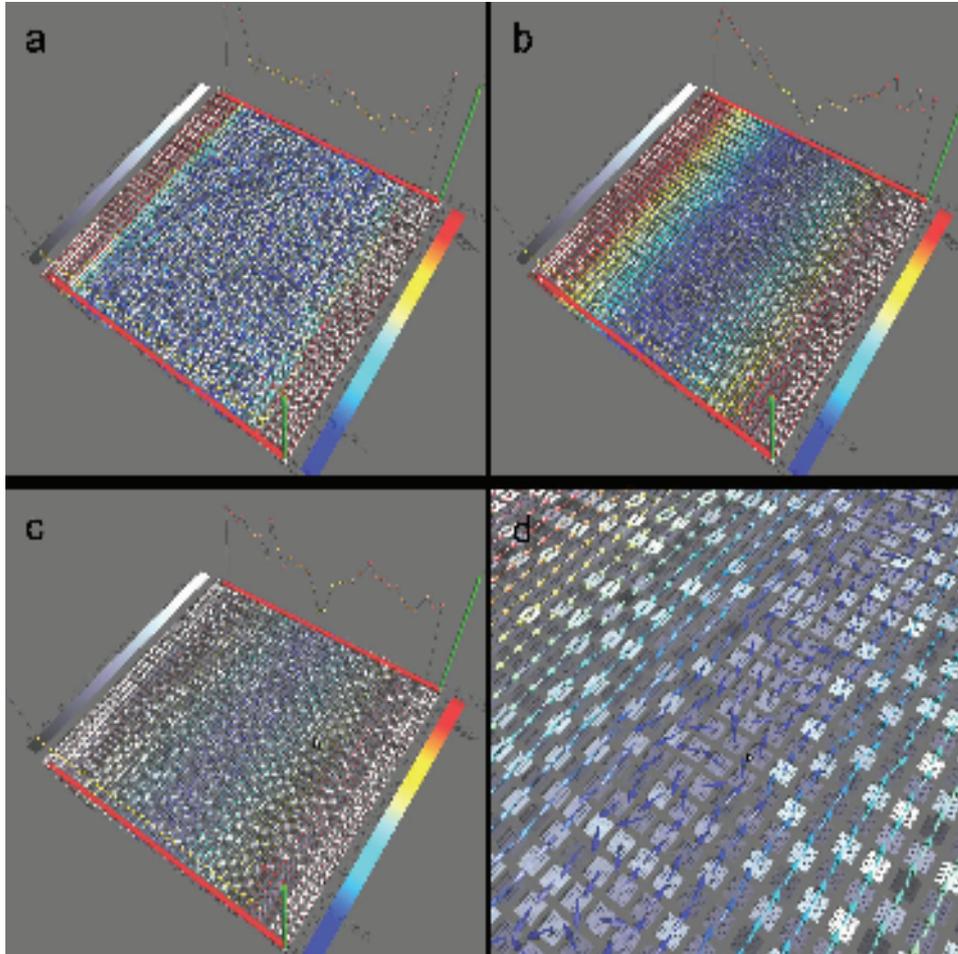


Figura 2.6: Imagens da simulação computacional. **a**, **b** e **c** mostram três estágios diferentes da simulação, respectivamente: nos estágios iniciais, onde as velocidades (representadas por flechas) estão todas distribuídas aleatoriamente ao longo do meio, à exceção das paredes (flechas vermelhas); em um estágio intermediário, onde podem ser vistas várias fileiras de células com velocidades orientadas da mesma forma; e no estado de equilíbrio, com quase metade dos grãos se movendo para um lado, e metade para o outro, com a banda de cisalhamento formada no centro. **d** mostra um zoom desta área central, onde a velocidade é distribuída aleatoriamente e o seu módulo é praticamente zero, resultando em uma banda de cisalhamento (62).

equação sem refinamentos para as forças, mostra que a modelagem do meio como um grupo de células quadradas, com arcos se formando nas bordas entre elas, já é boa o suficiente para reproduzir um sistema real, como pode ser visto na Figura 2.7. Estão apresentados lá os resultados para três configurações diferentes de cisalhamento externo: $F_1 = F_2$, $F_1 > F_2$ e $F_2 = 0$, onde F_1 e F_2 são os módulos das forças aplicadas respectivamente em cada parede (não-periódica) do sistema - note que F_1 e F_2 (quando diferentes de zero) possuem sempre sinais opostos entre si. É interessante notar que a banda de cisalhamento observado no perfil de velocidades é muito sensível às forças aplicadas nas paredes, exatamente como deveria ser. No caso extremo no qual uma das paredes é estática, a banda de cisalhamento é formada diretamente na parede, o que não condiz com a realidade. Mas, ao menos, o perfil de densidade do meio mostra que o mesmo permanece basicamente isotrópico. À medida que o sistema evolui durante a simulação, pode ser observado que às vezes pequenas regiões de alta densidade (regiões onde a densidade das células granulares atingem níveis acima de sessenta por cento de sua capacidade) são formados, mas são rapidamente dissolvidos - mesmo na vizinhança da banda de cisalhamento. Portanto, pode ser concluído que seu papel para o sistema como um todo nada mais é que mera flutuação.

Deve ser observado também que o modelo simplificado (desprovido de atrito e contribuições dos efeitos de massa interna das células para os arcos) não é tão bom para reproduzir o que acontece de fato em experimentos reais como o modelo completo, uma vez que já na Figura 2.7 pode ser visto que no caso de velocidade zero na parede externa ($F_2 = 0$) a banda de cisalhamento está localizada na parede. O modelo completo, pelo contrário, é muito mais consistente - nota-se, na Figura 2.8, uma grande massa de grãos em repouso próximo à parede estacionária, como esperado.

Quando os refinamentos propostos no modelo completo são incluídos, a formação da banda de cisalhamento se torna muito mais pronunciada e realista. Como pode ser visto nas Figuras 2.8 e 2.9, os gráficos mostram uma clara formação de banda de cisalhamento, que varia de acordo com as forças assinaladas para as paredes externas, reproduzindo o que pode ser observado experimentalmente. Não apenas isso, mas com a adição dos termos de atrito cinético e de contribuição das densidades, as simulações correm de forma muito mais suave e gradual do que no modelo simplificado, evitando qualquer tipo de aglomerações (o estado de equilíbrio foi atingido mais rapidamente com a seguinte configuração de parâmetros: $\alpha = \beta = 1$, $c_1 = 0.03$ e $c_2 = 0.1$).

Convém frisar também que a formação observada, em todos os casos, é muito mais condizente com bandas de cisalhamento reais do que no modelo

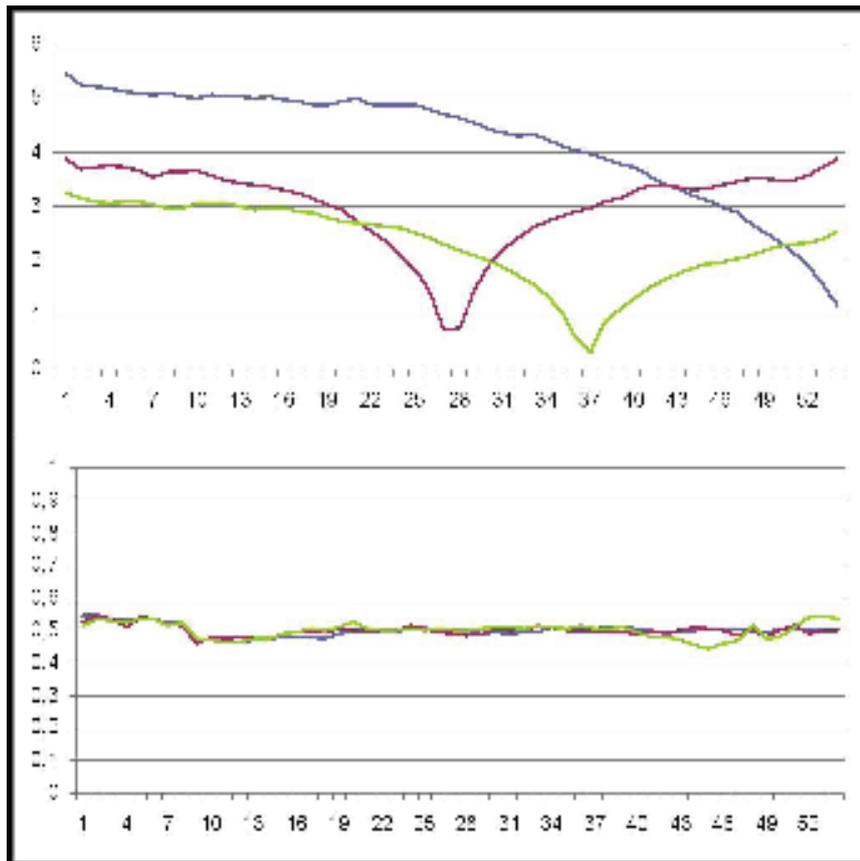


Figura 2.7: Gráficos dos perfis de velocidade (em módulo) e densidade para três configurações diferentes do modelo computacional simplificado: $F_1 = F_2$ (vermelho), $F_1 > F_2$ (verde) e $F_2 = 0$ (azul). É fácil ver a formação análoga a uma banda de cisalhamento no primeiro gráfico (de velocidade), enquanto o segundo mostra que a densidade dos grãos no interior das células se mantém razoavelmente constante em todo o sistema (62).

simplificado, sendo mais suave e englobando distâncias de algumas poucas células de separação, em vez de praticamente apenas uma, como no caso anterior. Isto é particularmente verdade para o caso $F_2 = 0$, onde a banda de cisalhamento se forma próximo à parede, mas não colado à mesma, como o modelo anterior parecia implicar. Essa formação, por sua vez, ocorre devido à transmissão de atrito, primeiramente da parede com os grãos, e subsequente dos arcos formados inicialmente para os demais. Como esse atrito é gerado a partir da intensidade da força de contato, arcos de força mais intensos surgem mais próximos a parede com maior intensidade de força, direcionando o movimento granular no interior das células no sentido das forças transmitidas, como pode ser observado pelos diagramas ilustrativos da Figura 2.10. Como essa transmissão mais intensa das forças através dos atritos gerados pelos arcos influencia diretamente o movimento granular, ela irá ser responsável pelo deslocamento observado da banda de cisalhamento.

E também é importante notar que, apesar de variações nos parâmetros do modelo influenciar as características de evolução do sistema e do seu estado de equilíbrio (incluindo a banda de cisalhamento), o comportamento do sistema, suas propriedades cinemáticas e a física por trás da simulação (em particular a própria formação da banda de cisalhamento), se mantêm incólumes - mostrando que os parâmetros são relevantes mas não interferem com a descrição física proposta para o sistema.

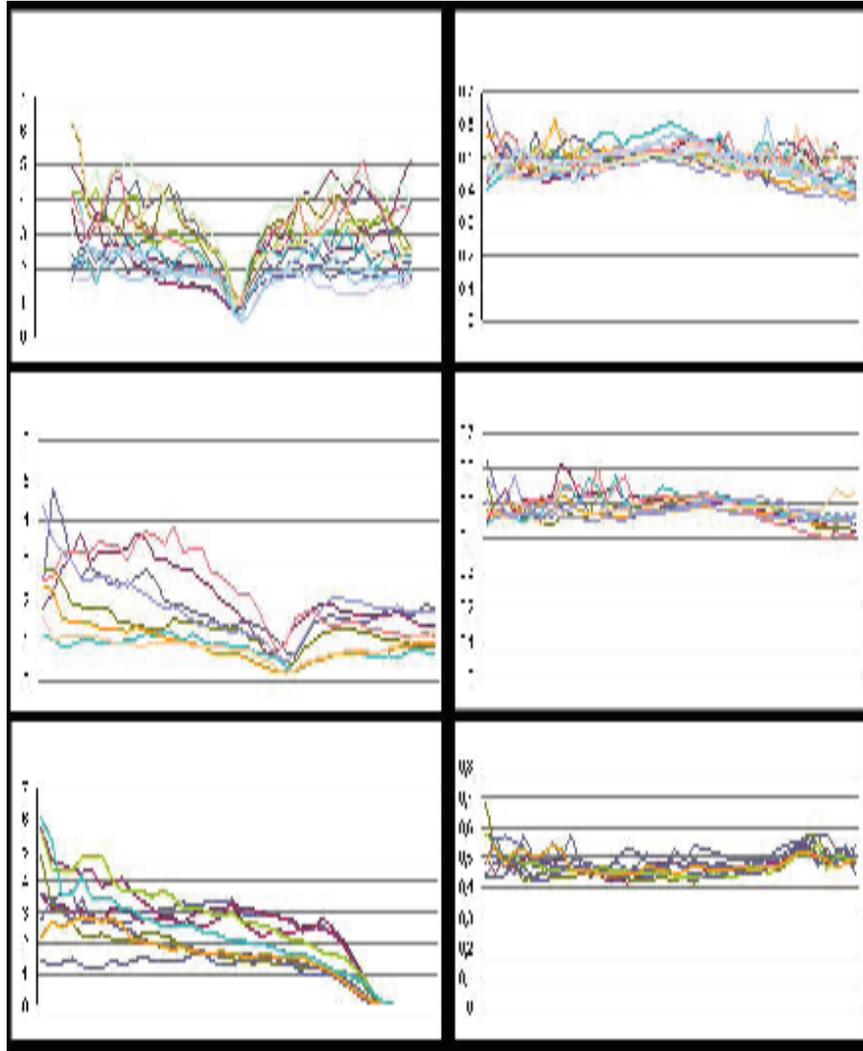


Figura 2.8: Gráficos dos perfis de magnitude da velocidade (primeira coluna) e densidade (segunda coluna) para três diferentes configurações do modelo computacional completo, de cima para baixo, respectivamente: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. As linhas coloridas diferentes representam configurações diferentes dos parâmetros das equações do modelo (62).

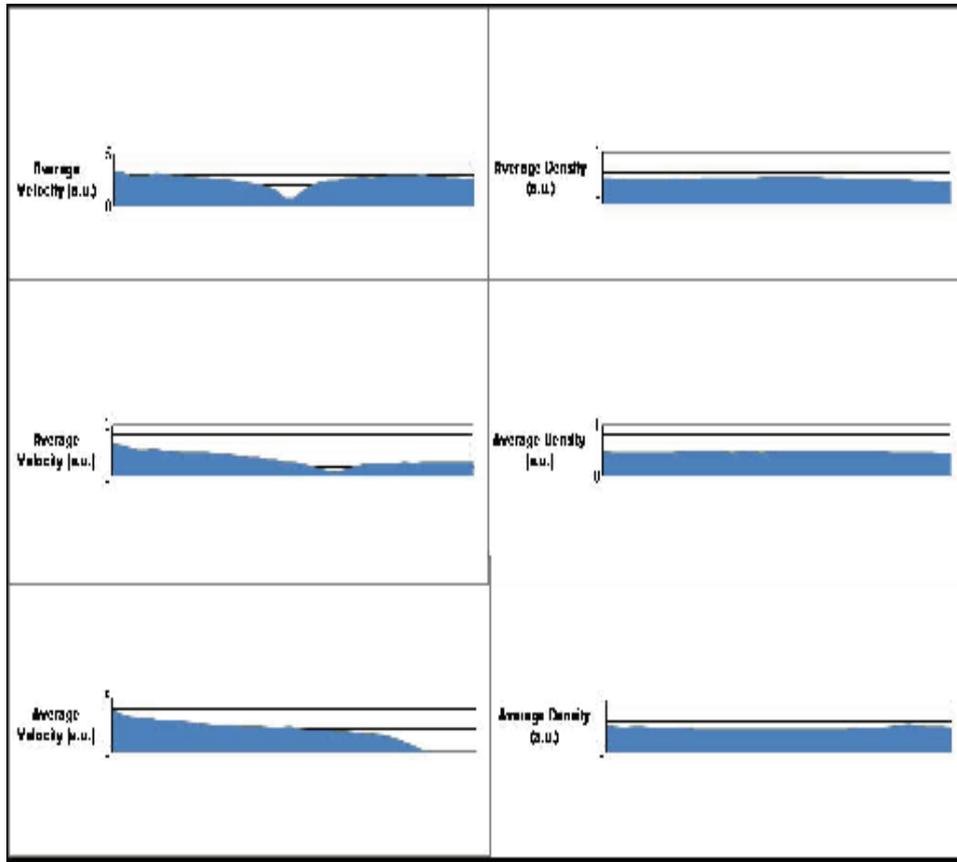


Figura 2.9: Gráficos dos perfis de velocidade (em módulo) média e densidade média (primeira e segunda colunas, respectivamente) para três diferentes configurações do nosso modelo computacional completo, respectivamente de cima para baixo: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. Os perfis acima representam médias feitas sobre todas as configurações de parâmetros testadas. É fácil perceber a formação da banda de cisalhamento - em todos os três casos - na primeira coluna, enquanto a segunda mostra que não há formação de aglomerado e que a densidade das células se mantém constante através do meio (62).

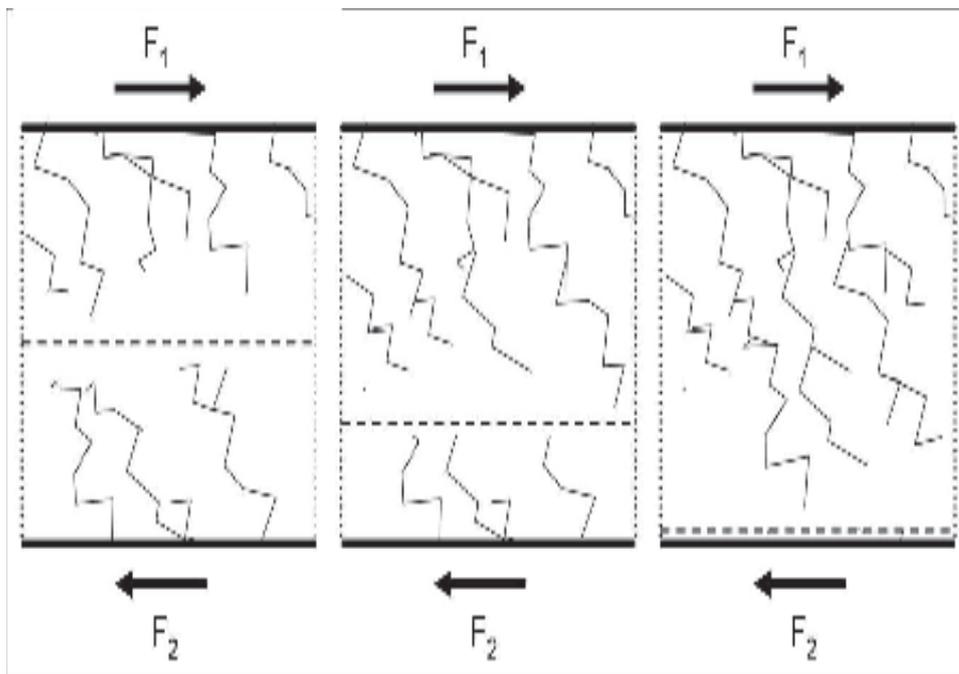


Figura 2.10: Representação da formação da banda de cisalhamento e dos arcos de forças responsáveis pela mesma, respectivamente da esquerda para a direita: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. A intensidade dos atritos gerados primeiramente pela parede e depois pelos arcos de força na formação de novos arcos fazem com que as forças que promovem o movimento empurrem mais grãos nos casos com $F_1 > F_2$, deslocando a banda de cisalhamento.

2.6

Modelo Computacional Tridimensional

2.6.1

Descrição do Arranjo Experimental 3D

Para melhor testar as aplicações e realismo do modelo, o próximo passo foi passar para uma generalização tridimensional, tentando simular as condições propostas e desenvolvidas por Fenistein *et al.* (55, 56) em experiências realizadas em laboratório.

Uma forma padrão de estudar os efeitos do cisalhamento em um sistema granular é usar um arranjo Couette modificado (55, 56, 57), composto de um cilindro externo fixo (de raio R), cuja base possui um anel externo fixo, preso às paredes, e um disco interno girante (de raio r , com $0 < r < R$) - ver Figura 2.11. A superfície superior é livre, sem qualquer estresse aplicado a ela.

O sistema montado por Fenistein *et al.* consistia em um cilindro transparente de altura h repleto de grãos, o qual também está ilustrado na Figura 2.11, abaixo. Variando a altura do cilindro, eles observaram, ao fazer com que o disco interno da base girasse e deixando o sistema atingir o equilíbrio, padrões de banda de cisalhamento circulares no topo do cilindro dependentes com a altura. Na verdade, a região interna era menor quanto maior fosse a altura h . Após uma certa altura h_c crítica, nenhuma banda de cisalhamento pode ser observado no topo do cilindro. Török e colaboradores desenvolveram um modelo teórico para tentar explicar o que ocorre no interior do cilindro e como os bandas de cisalhamento se desenvolvem ao longo do mesmo (57, 58), cujos resultados podem ser vistos na Figura 2.12. Detalhes sobre o experimento e a modelagem teórica, aos quais serão feitas constante referências ao longo deste capítulo, podem ser encontrados no Apêndice.

No nosso caso, foi utilizado um cilindro de altura $h > h_c$, mas com altura da pilha granular H variável. Uma transição interessante dependente dessa altura H ocorre (na verdade, dependente de H/R). Para um preenchimento raso ($H < R$), o banda de cisalhamento chega à superfície da pilha e a rotação interna pode ser observada externamente como um disco girante no topo do sistema. O raio do disco superior observado é menor que o disco inferior (ou seja, menor que r) e segue com bastante precisão algumas predições teóricas baseadas no princípio de mínima dissipação (57, 58, 60, 61). Entretanto, para alturas de preenchimento maiores ($H > R$), a banda de cisalhamento colapsa sobre si mesmo, resultando em um formato de domo - fenômeno também previsto pelo modelos teóricos citados. Mais especificamente, o método apresentado por Török *et al.* (57) supõe que a pressão interna varie

linearmente com a profundidade, o que só é verdade para preenchimentos rasos e longe das paredes laterais, isto é, $R \gg r$. Na verdade, a altura do domo é predita tender a zero quando $H \rightarrow \infty$ por esse modelo. Para sistemas com cilindros dimensionados realisticamente, a pressão média tende a alcançar um plateau (devido ao efeito Janssen (36), descrito anteriormente), e assim deveria acontecer com a altura do domo.

Este modelo tem a intenção de dar bons resultados a alturas maiores (com $H > R$), uma vez que aqui a pressão vertical será tratada apenas de forma indireta, de forma análoga ao caso onde o valor da pressão já tenha atingido um plateau.

2.6.2

O Modelo 3D

O modelo de rede de arcos será agora transposto para uma ambientação tridimensional. Assim, nosso meio de rede de células quadradas passa a ser agora uma rede de células cúbicas, com arcos (e, conseqüentemente, estresses e forças) se propagando ao longo das bordas dos cubos. Para identificar cada segmento de arco, foi designado a cada borda de cada cubo um código, que pode ser visto na Figura 2.13. Em nossas equações, cada força é identificada por três índices superiores (correspondentes à direção da força - x , y ou z - e a um código de duas letras referente à borda específica) e três índices inferiores (o endereço da célula em nossa rede).

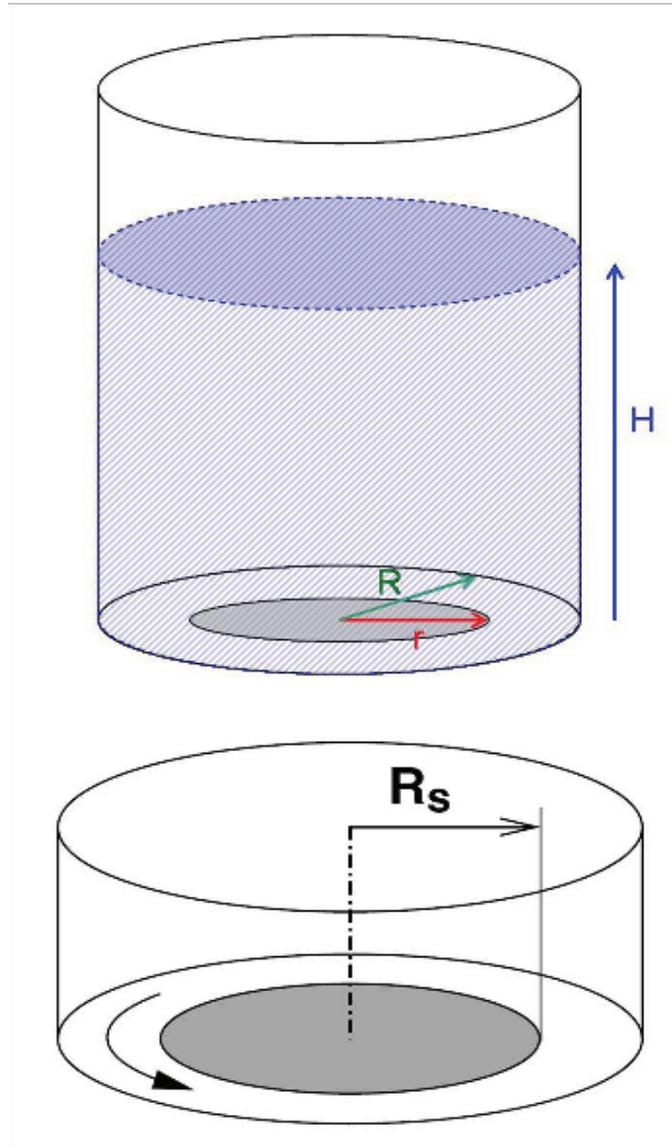


Figura 2.11: Acima, representação do experimento a ser simulado, em 3 dimensões. Abaixo, ilustração do experimento conduzido por Fenistein *et al.* (55, 56). É bastante similar ao experimento modelado, como pode ser visto acima, mas com alturas menores do cilindro e com grãos o preenchendo completamente. R_s representa aqui o raio do disco girante da base.

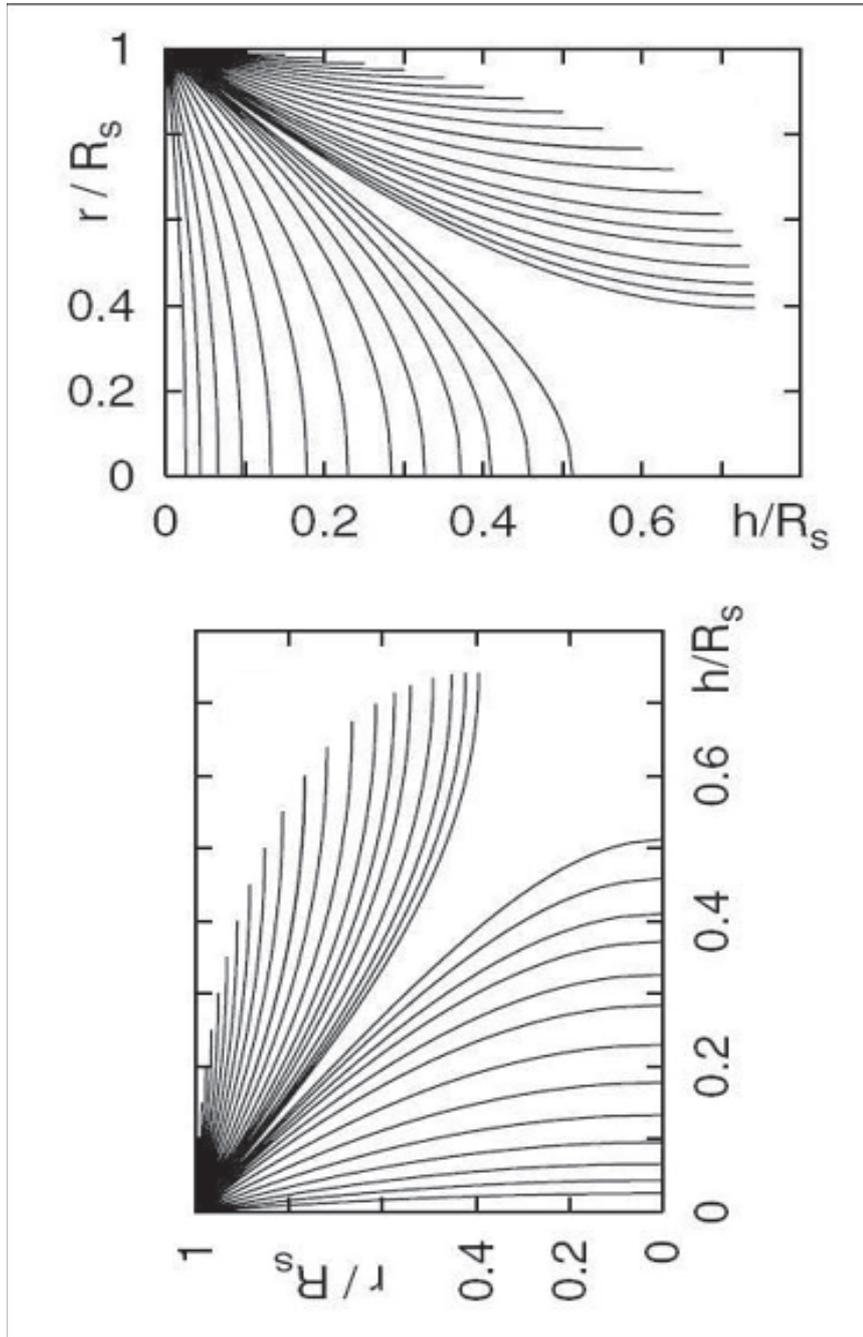


Figura 2.12: Gráficos obtidos por Török *et al.* (57, 58) para modelar os experimentos realizados por Fenistein *et al.* (55, 56). Nele está disposta a variação do raio da banda de cisalhamento com a sua altura. Abaixo, olhando o gráfico original de lado (tomando r/R_s como base), pode-se ver o formato do perfil da banda de cisalhamento sendo delineado pelas linhas do mesmo.

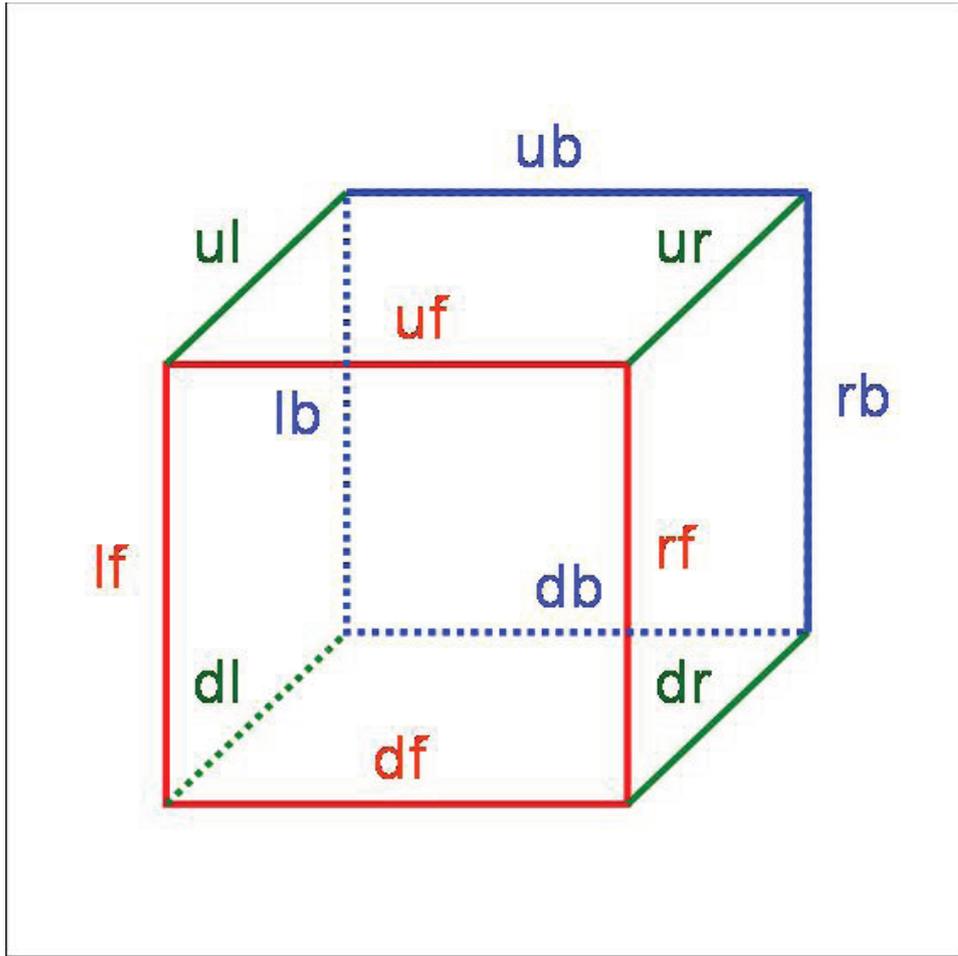


Figura 2.13: Célula 3D cúbica. Cada borda é identificada por um código de duas letras.

A equação de força, agora, passa a ser:

$$\begin{aligned}
 F_{i,j,k}^{x(uf)}(t + \tau) &= \\
 &= \frac{1}{\alpha + \beta + \gamma + \lambda} \left[\alpha \left(\frac{F_{i,j-1,k}^{x(uf)}(t) + F_{i,j+1,k}^{x(uf)}(t)}{2} \right) + \right. \\
 &+ \beta \left(\frac{F_{i,j-2,k}^{x(uf)}(t) + F_{i,j+2,k}^{x(uf)}(t)}{2} \right) + \gamma \left(\frac{F_{i,j,k}^{x(df)}(t) + F_{i,j,k}^{x(ub)}(t)}{2} \right) + \lambda F_{i,j,k}^{x(db)}(t) \left. \right] + \\
 &+ c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k})}{|\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}|)} + \right. \\
 &+ \left. \left[\frac{(\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k})}{|\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}|)} \right\} + \\
 &+ \eta_{i,j,k}^{x(uf)}(t).
 \end{aligned} \tag{2-15}$$

Vamos analisar cada termo da equação (2-15) separadamente.

As primeiras duas linhas são compostas de quatro termos, cada um com sua própria constante. O termo com o parâmetro α é relacionado com as forças das células imediatamente antes e depois da célula em questão (para simplificar, doravante a força a ser calcular será referida como força “primária” e sua célula, célula “primária”), na mesma direção (no caso da força observada na equação (2-15), x). O termo β funciona exatamente como o termo α , mas diz respeito aos segundos vizinhos, ou seja, as células imediatamente antes e depois das referentes ao termo anterior. O termo γ dá conta da influência das forças vizinhas na célula primária (como sempre, na mesma direção da força primária), as duas forças ao longo das bordas opostas das faces na qual a força primária se encontra. Por último, o termo λ refere-se à força diagonalmente oposta à força primária. Uma vez que a influência tanto do termo β quanto do λ são bem menores que a dos outros dois, as relações $\beta \ll \alpha$ e $\lambda \ll \gamma$ são impostas.

As terceira e quarta linhas da equação (2-15) são as contribuições das funções densidades, e ela funciona exatamente da mesma forma que suas correspondentes nas equações (2-10)-(2-13).

O último termo é apenas o termo aleatório estocástico, o qual inclui a difusão granular no modelo.

Convém frisar que, no modelo tridimensional, não há contribuição do atrito entre os arcos. A explicação não é complicada: em nosso modelo 2D, um arco (um objeto unidimensional) tem uma codimensão de 1. Portanto, como o meio possui duas dimensões e a soma de seus vínculos (dois arcos) é 2,

interseções de arcos podem ser encontradas em espaços de dimensão zero (um ponto). Já no modelo 3D, arcos possuem codimensão de 2. Logo, a soma de seus vínculos é igual a 4 - e com isso a interseção possui uma dimensão -1 , o que significa que ela tem probabilidade zero de acontecer.

2.6.3 Resultados 3D

Os resultados encontrados para o sistema modelado tridimensionalmente para tentar reproduzir os resultados experimentais de Fenistein *et al.* e comparar com os modelos teóricos de Török *et al.* foram de um sucesso quase absoluto.

Em primeiro lugar, convém ressaltar que o sistema permanece isotrópico ao longo da simulação, com a densidade média das células mantendo-se constante durante a mesma.

Os resultados do modelo podem ser visto nas Figuras 2.14 e 2.15. Observa-se de imediato que as previsões do modelo teórico de Török *et al.* (57) são reproduzidas fielmente, a saber: a formação do domo (quando a banda de cisalhamento colapsa) para $H > R$, e a banda de cisalhamento circular no topo para $H < R$ (observado por Fenistein *et al.* (55, 56) em laboratório). Convém voltar à Figura 2.12 para melhor observação da correspondência entre as formas obtidas para a banda de cisalhamento e o modelo. O mais interessante é que, no decorrer da simulação, é possível perceber claramente a evolução da formação da banda de cisalhamento, como um círculo de raio cada vez menor (à medida que a altura do topo da banda de cisalhamento aumenta), até que: se $H < R$, a banda de cisalhamento atinge a última camada de grãos e se estabiliza; ou se $H > R$, a banda de cisalhamento não se sustenta e colapsa, chegando ao equilíbrio quando o domo é formado.

No entanto, podem ser observados (ver Figura 2.14) vórtices no plano horizontal de forças ao longo da banda de cisalhamento. A explicação mais provável para este fenômeno aparentemente irreal que surge nas simulações é o formato cúbico das células. Está em desenvolvimento no momento uma nova rede que, em vez de cubos, consistirá de células cujas laterais sejam arcos de círculo, para utilizarmos coordenadas cilíndricas (o que nos parece mais natural para o sistema descrito de qualquer forma), e desta forma evitaremos vórtices espúrios.

Outro resultado interessante obtido foi para quando a simulação foi realizada com a condição $r > R/2$, não estudada anteriormente, e está disposto na Figura 2.16, abaixo. Com valores mais altos de r , um comportamento estranho aparece. A formação próxima à base do cilindro é consistente com a

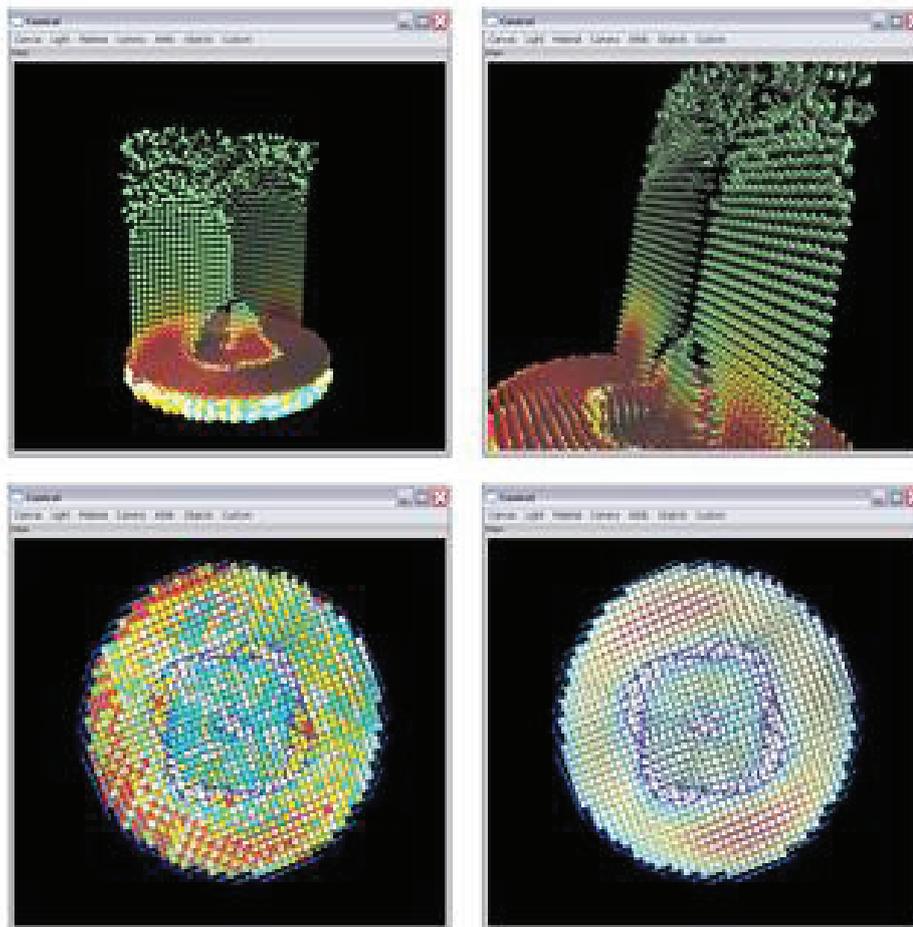


Figura 2.14: Imagens da simulação com o sistema em equilíbrio. Nota-se claramente o domo colapsado nas imagens de cima (onde as setas representam a velocidade dos grãos), conforme modelo de Török (57). As imagens inferiores mostram o diagrama de forças horizontais com dois cortes em alturas diferentes, onde percebe-se a formação de vórtices.

literatura, mas na parte próxima ao topo da banda de cisalhamento a simulação diverge fortemente, devido ao fato que estamos simulando um cilindro sem atrito nas paredes laterais. O resultado, no entanto, é compatível e coerente com o princípio da dissipação mínima (57, 58, 60, 61, 63, 64), uma vez que, com as paredes sem atrito, a menor dissipação de energia se dá com a banda de cisalhamento curvando-se dessa forma aparentemente espúria para as paredes, em vez de colapsar na cúa observada nos casos anteriores e prevista teoricamente. Isto implica na necessidade de se incluir o atrito estático com as paredes, como foi feito no modelo 2D. De qualquer forma, é curioso notar que uma vez que o raio do disco interno é, neste caso, maior que a metade do raio do cilindro, a formação no centro torna-se uma influência mais forte no sistema que a parte externa. Logo, pode-se esperar que, ao invés da banda de cisalhamento

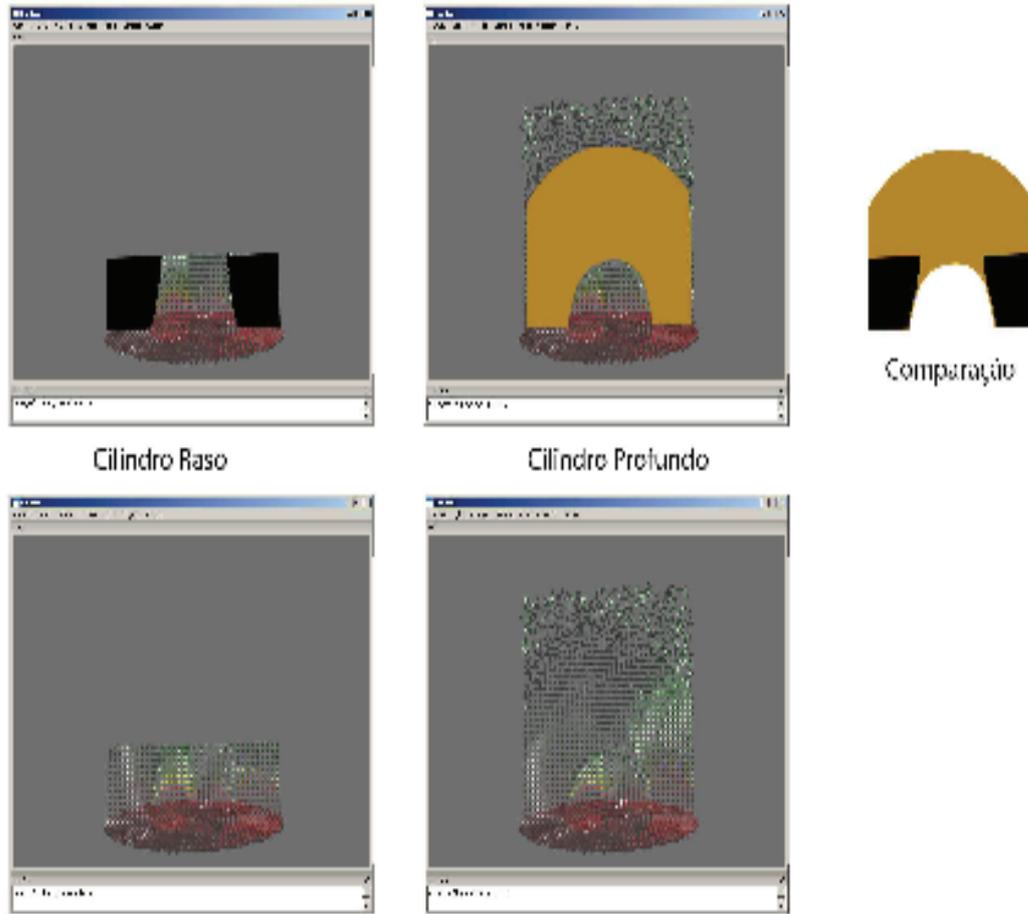


Figura 2.15: Resultados observados para preenchimentos H rasos (com $H < R$) e profundos (com $H > R$). Os resultados obtidos por Fenistein (55) são reproduzidos para o cilindro raso, bem com as previsões teóricas de Török (57) para os dois casos. Nota-se claramente na comparação entre as áreas coloridas a diferença do formato da banda de cisalhamento de um caso para outro.

colapsar para o centro do cilindro, formando o domo, ele colapse para fora, em direção às paredes laterais, seguindo o princípio de dissipação mínima citado acima. Convém frisar que o modelo desenvolvido por Török *et al.* não leva este caso em consideração, pois é baseado em um modelo hidrodinâmico, onde $r \ll R$ e o efeito Janssen é considerado desprezível.

2.7 Sumário

Em suma, o modelo proposto baseado na propagação das forças e transporte de massa em decorrência à presença de arcos ao longo do sistema parece dar resultados bastante satisfatórios ao tentar descrever o comportamento coletivo de sistemas de materiais granulares densos. Nosso modelo de rede de

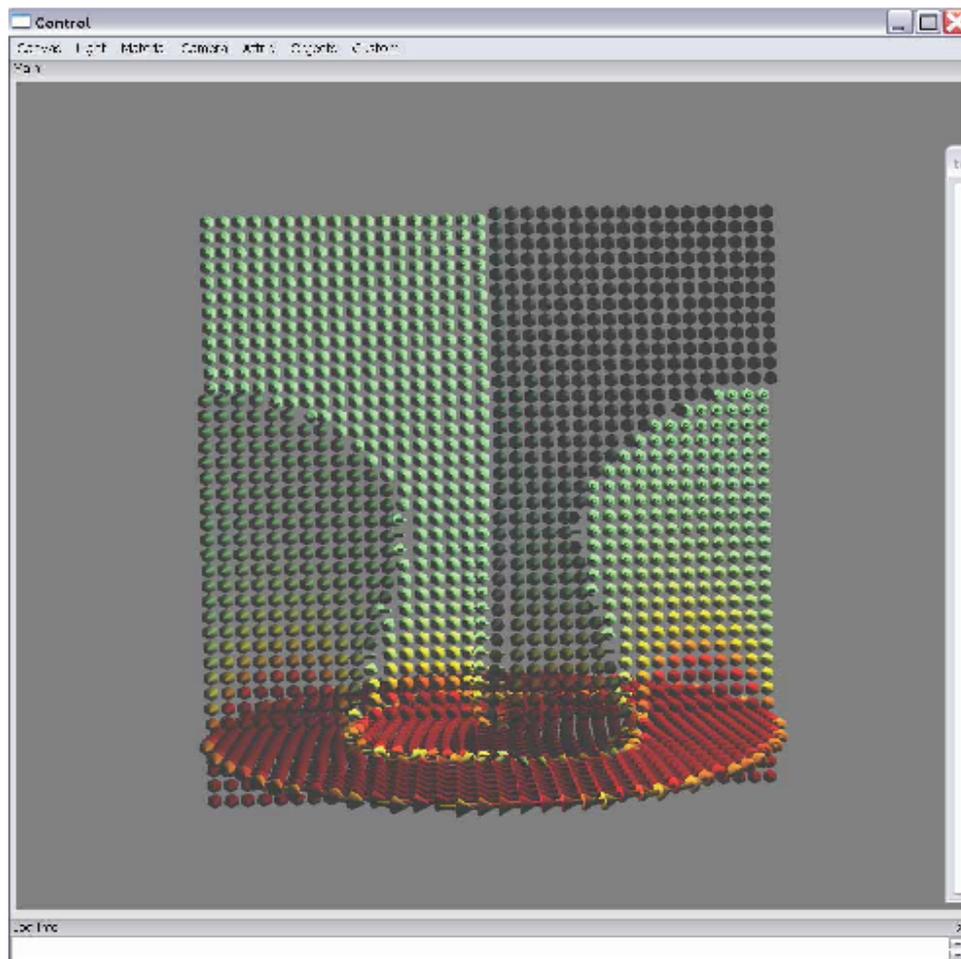


Figura 2.16: Imagem do sistema em equilíbrio para o caso $r > R/2$, onde em vez de colapsar para o centro do cilindro, o colapso da banda de cisalhamento ocorre em direção às paredes, onde os coeficientes de atrito cinético e estático são nulos, o que é coerente com a mínima dissipação (57, 58).

células quadradas bidimensional, apesar de uma grande aproximação de sistemas reais, com arcos sendo formados de forma não-ordenada, fornece resultados bastante razoáveis, descrevendo com precisão surpreendente o comportamento qualitativo de sistemas granulares densos sob a ação de forças de cisalhamento - em particular, a formação de bandas de cisalhamento (62).

Da mesma forma, o modelo tridimensional, ainda que uma simplificação, consegue reproduzir não apenas os resultados experimentais encontrados na literatura, mas também é corroborado por modelos teóricos encontrados para descrever os experimentos.

O comportamento quantitativo não é possível de ser simulado com um modelo tão genérico, uma vez que isso é altamente dependente de propriedades granulares específicas (e.g. tamanho, coeficiente de atrito, etc.). Mas, no modelo bidimensional “completo” e no nosso modelo tridimensional, através de

uma simples variação dos parâmetros das equações, essas condições granulares podem ser facilmente reproduzidas de forma coletiva. O que é importante ter em mente, portanto, é que este simples modelo mostra que arcos têm um papel muito mais importante no comportamento de sistemas granulares densos não-estacionários do que acreditava-se anteriormente, já que os fenômenos físicos foram tão bem reproduzidos aqui.