



PROJETO DE GRADUAÇÃO

**SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DO
COLAPSO DE UMA CRATERA GRANULAR**

Daniel Raom Santiago Bezerra Costa da Silva

Brasília, 07 de dezembro de 2018

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

“ *"Ich kann es nun einmal nicht lassen, in diesem Drama von Mathematik und Physik die sich im Dunkeln befruchten, aber von Angesicht zu Angesicht so gerne einander verkennen und verleugnen die Rolle des (wie ich genugsam erfuhr, oft unerwünschten) Boten zu spielen."*

"Por um lado, neste drama entre matemática e física - as quais se fertilizam no escuro, mas que tanto se preocupam em desmentir e negar uma à outra cara a cara -, eu não posso resistir desempenhar a função de um mensageiro, embora este tenha sido, como muitas vezes aprendi, um papel indesejado."

Hermann Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, Leipzig, 1928

Dedicatória

*À minha família de Natal.
À minha família de Brasília.*

Daniel Raom Santiago Bezerra Costa da Silva

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço à minha família, pelo apoio nessa jornada longe de casa, principalmente à minha mãe, pela confiança nas minhas escolhas e segurança de que tudo daria certo.

À Sara e Alcides, por sempre me acolherem como um filho no Rio de Janeiro.

Aos grandes amigos de Brasília, Lilão e Marquinhos, pelo apoio constante, incentivo, momentos de descontração e, principalmente, pelos sermões que me colocavam de volta nos trilhos quando eu estava sem foco.

Às grandes amigas de Natal, Andrezza, Bárbara, Manuele e Bia, pelo riso e felicidade, essenciais durante minhas pausas no trabalho.

Aos amigos que percorreram jornada similar, Arthur, Diego, Letícia, Matheus e Pedro Augusto, por trocar experiências e frustrações sobre um projeto tão individual e decisivo, e pela amizade sólida.

Aos amigos Davi e Bruno, pelas conversas filosóficas e concretas e quintas de descontração.

A todos os amigos do grupo de pesquisa Vortex, pelo convívio diário imerso em boas conversas e dias de trabalho felizes e mais leves, Camila, Filipe, Gesse, Igor e Yurinho.

Aos amigos que fiz na matemática, Ian, Melissa, Marco, Mirelly, Henrique, Fischer, Laís, Alex, Daiane, Cid, Dióscoros e Gilberto.

Aos amigos Gilson e Luigi, por incentivarem meu esforço e tolerarem meus horários de trabalho nada convencionais.

Aos professores Adriano, Francisco Ricardo, por serem de grande influência nas minhas escolhas acadêmicas e na realização deste trabalho. Também aos outros professores do Departamento de Engenharia Mecânica, quanto do Departamento de Matemática, por fundarem em mim exemplos tão fortes de acadêmicos e pesquisadores.

Ao grande professor e orientador Yuri Dumaresq Sobral pelas conversas fluidas, pelos votos de confiança, disponibilidade total à necessidade de discutir ideias a qualquer momento, sempre pondo as perguntas em nível superior às respostas. Não somente mentor, como amigo e conselheiro. E pelo juízo!

Aos meus irmãos de orientação, os famosos "aluninhos", pelo ambiente de discussão mais do que saudável e partilha de ideias, Luís, Shumy, Jorge e Caio.

Ao Departamento de Matemática e novamente ao professor Francisco Ricardo, por disponibilizarem os locais de estudo e as ferramentas computacionais imprescindíveis à realização deste trabalho e à FAP-DF, pelo apoio financeiro.

Daniel Raom Santiago Bezerra Costa da Silva

SUMÁRIO

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1 | RESUMO | 1 |
| 1.2 | MATERIAIS GRANULARES | 2 |
| 1.2.1 | O QUE SÃO MATERIAIS GRANULARES? | 2 |
| 1.2.2 | APLICAÇÕES INDUSTRIAIS | 3 |
| 1.2.3 | BREVE PERSPECTIVA HISTÓRICA | 3 |
| 1.2.4 | DINÂMICA DE MATERIAIS GRANULARES | 4 |
| 1.2.5 | LEIS CONSTITUTIVAS PARA MATERIAIS GRANULARES? | 6 |
| 1.2.6 | REGIMES DE ESCOAMENTOS GRANULARES | 7 |
| 1.2.7 | PILHAS DE AREIA: O ÂNGULO DE REPOUSO | 8 |
| 1.3 | MODELAGEM NUMÉRICA: DINÂMICA MOLECULAR | 9 |
| 1.4 | MOTIVAÇÃO | 10 |
| 1.5 | OBJETIVOS | 11 |
| 1.6 | ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO | 11 |
| 2 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 12 |
| 2.1 | COLAPSO DE UM DEGRAU | 12 |
| 2.2 | COLAPSO DE UMA CAVIDADE | 13 |
| 3 | TEORIA DE DINÂMICA MOLECULAR | 15 |
| 3.1 | INTRODUÇÃO BÁSICA | 15 |
| 3.2 | DINÂMICA MOLECULAR DE ESFERAS MOLES | 16 |
| 3.3 | LEIS DE NEWTON E EQUAÇÕES DO MOVIMENTO | 16 |
| 3.3.1 | FORÇAS NORMAIS | 17 |
| 4 | SIMULAÇÃO/ALGORITMOS | 23 |
| 4.1 | INTRODUÇÃO BÁSICA | 23 |
| 4.1.1 | ESTABILIDADE DE UM ALGORITMO | 23 |
| 4.2 | ALGORITMO GERAL SIMPLES | 24 |
| 4.2.1 | INICIANDO A SIMULAÇÃO | 24 |
| 4.3 | O PROBLEMA DA BUSCA DE VIZINHOS | 25 |
| 4.3.1 | A LISTA DE VERLET E O ALGORITMO <i>linked cell</i> | 26 |
| 4.4 | ERROS | 29 |
| 4.5 | INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO | 29 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4.5.1 | MÉTODO DE SÉRIE DE TAYLOR PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE UMA EDO | 30 |
| 4.5.2 | MÉTODO DE EULER | 31 |
| 4.5.3 | MÉTODO DE RUNGE-KUTTA DE 4 ^A ORDEM | 31 |
| 4.5.4 | MÉTODO DE EULER SEMI-IMPLÍCITO | 32 |
| 4.5.5 | MÉTODO DE VERLET | 33 |
| 5 | VALIDAÇÕES DOS CÓDIGOS | 34 |
| 5.1 | INTRODUÇÃO BÁSICA | 34 |
| 5.1.1 | O QUE É VALIDAR UM CÓDIGO? | 34 |
| 5.1.2 | COMO VALIDAR OS <i>nossos</i> ALGORITMOS? | 35 |
| 5.2 | VALIDAÇÃO A PARTIR DA LEIS FÍSICAS | 35 |
| 5.3 | FORÇA NORMAL: CASOS SEM DISSIPACÃO DE ENERGIA | 35 |
| 5.3.1 | 1 PARTÍCULA EM QUEDA LIVRE | 35 |
| 5.3.2 | 1 PARTÍCULA EM QUEDA LIVRE COM MÚLTIPLAS COLISÕES COM O SOLO | 40 |
| 5.3.3 | 2 PARTÍCULAS MOVIMENTO HORIZONTAL COLISÃO NORMAL | 43 |
| 5.4 | FORÇA NORMAL: CASOS COM DISSIPACÃO DE ENERGIA | 45 |
| 5.4.1 | 1 PARTÍCULA EM QUEDA LIVRE | 46 |
| 5.4.2 | 2 PARTÍCULAS EM COLISÃO HORIZONTAL NORMAL | 49 |
| 5.5 | FORÇA TANGENCIAL | 51 |
| 6 | GERANDO A CONDIÇÃO INICIAL E CAVANDO O LEITO | 53 |
| 6.1 | GERANDO A CONDIÇÃO INICIAL | 55 |
| 6.1.1 | INFLUÊNCIA DO PASSO DE TEMPO | 60 |
| 6.2 | ENERGIAS E CADEIAS DE FORÇAS | 63 |
| 6.2.1 | CONDIÇÃO INICIAL COM RAZÃO DE ASPECTO $H/L = 1.4$ | 63 |
| 6.2.2 | CONDIÇÃO INICIAL COM RAZÃO DE ASPECTO $H/L = 1.0$ | 71 |
| 6.2.3 | CONDIÇÃO INICIAL PADRÃO | 75 |
| 6.3 | CAVANDO A SUPERFÍCIE LIVRE DO LEITO | 76 |
| 6.3.1 | A CAVIDADE COM DIFERENTES RAZÕES DE ASPECTO H/L | 77 |
| 7 | A CRATERA GRANULAR | 80 |
| 7.1 | VISÃO GERAL | 81 |
| 7.1.1 | INFLUÊNCIA DOS PARÂMETROS FÍSICOS | 82 |
| 7.1.2 | INFLUÊNCIA DA RAZÃO DE ASPECTO H/L | 90 |
| 7.1.3 | INFLUÊNCIA DA POSIÇÃO DA CRATERA | 100 |
| 7.2 | AJUSTANDO OS PARÂMETROS | 104 |
| 8 | CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS | 107 |

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Materiais granulares na indústria alimentícia. | 2 |
| 1.2 | Bloqueio de fluxo granular devido à formação de arco na abertura de saída - (a) e (b). Estrutura de arco com máximo grau de estabilidade (c) [22]. | 3 |
| 1.3 | Métodos para impedir bloqueio por arco na abertura de saída [22]. | 4 |
| 1.4 | Representação de uma simulação numérica do efeito Castanha-do-Pará [23]. | 5 |
| 1.5 | Os três regimes de escoamento de escoamentos granulares para o caso de esferas de alumínio [11]. | 7 |
| 1.6 | Os 6 tipos de escoamentos granulares densos [11]. | 8 |
| 1.7 | Grãos de areia sendo despejados numa superfície [25]. | 8 |
| 1.8 | Ângulo de repouso numa pilha de areia [26]. | 9 |
| 1.9 | A Cratera Barringer, no Arizona, EUA, é uma cratera de impacto originada a partir de um meteorito há 49.000 anos [27]. | 10 |
| 2.1 | Superfície digitalizada de uma cratera formada pelo colapso de uma cavidade cilíndrica, realizado experimentalmente [6]. | 13 |
| 2.2 | Evolução dos perfis da superfície livre de uma cavidade obtidos por um modelo contínuo pelas equações de Saint-Venant [6]. | 14 |
| 3.1 | Representação esquemática de duas partículas em colisão para os casos normal e oblíquo. | 18 |
| 3.2 | Esquema das velocidades relativas de duas partículas em colisão oblíqua. | 18 |
| 3.3 | Representação esquemática das forças normais atuando em uma partícula ao início e final de uma colisão. | 19 |
| 4.1 | Configuração inicial das partículas. | 25 |
| 4.2 | As células adjacentes de uma determinada célula. | 27 |
| 4.3 | O número de partículas em função do tempo de simulação se comporta de forma linear. | 28 |
| 5.1 | Representação de uma partícula em queda livre sem dissipação a partir de altura $y = 1,13$ m. $dt = 10^{-6}$ s, $k_n = 5.10^5$ kg.m/s ² | 36 |
| 5.2 | Gráfico da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 36 |
| 5.3 | Gráfico da velocidade vertical em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 37 |
| 5.4 | Gráfico da energia cinética em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 37 |

| | | |
|------|---|----|
| 5.5 | Gráfico da energia potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 38 |
| 5.6 | Gráfico das energias cinética, potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 38 |
| 5.7 | Gráfico da energia total em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 39 |
| 5.8 | Gráfico da força elástica em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação. | 39 |
| 5.9 | Gráfico da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo. | 40 |
| 5.10 | Gráfico da velocidade vertical em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo. | 41 |
| 5.11 | Gráfico das energias cinética e potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo. | 41 |
| 5.12 | Gráfico da força elástica em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo. | 43 |
| 5.13 | Gráfico da posição x em função do tempo de 2 partículas sem dissipação. | 43 |
| 5.14 | Representação de 2 partículas em colisão normal horizontal sem dissipação. | 44 |
| 5.15 | Gráfico da velocidade horizontal em função do tempo de 2 partículas sem dissipação. | 45 |
| 5.16 | Gráficos da força elástica horizontal em função do tempo de 2 partículas sem dissipação. | 45 |
| 5.17 | Representação de uma partícula em queda livre com dissipação a partir de altura. | 47 |
| 5.18 | Gráficos da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação. | 48 |
| 5.19 | Detalhes dos gráficos da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação. | 48 |
| 5.20 | Gráfico da velocidade em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação. | 48 |
| 5.21 | Gráficos das energias cinética e potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação. | 49 |
| 5.22 | Gráficos das forças elástica e viscosa em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação. | 49 |
| 5.23 | Detalhe dos gráficos das forças elástica e viscosa em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação. | 50 |
| 5.24 | Gráfico das posições x em função do tempo de 2 partículas sem dissipação. | 50 |
| 5.25 | Gráfico das velocidades horizontais em função do tempo de 2 partículas sem dissipação. | 51 |
| 5.26 | Uma partícula solta do repouso em uma colisão totalmente normal com rotação não sofre força de atrito. | 51 |
| 5.27 | Uma partícula solta do repouso em uma colisão oblíqua com rotação sofre força de atrito. | 52 |
| 5.28 | Evolução das energias cinética, potencial gravitacional e rotacional ao longo do tempo para a colisão oblíqua de uma partícula com rotação com atrito dinâmico presente. | 52 |
| 6.1 | Etapa 1. Evolução da <i>configuração inicial</i> (a) até a <i>condição inicial</i> (b). 1000 partículas. | 54 |
| 6.2 | Etapa 2: Cavando a superfície livre do leito de grãos. 1000 partículas. | 55 |
| 6.3 | Etapa 3: Colapso da <i>cavidade</i> pré-definida em uma <i>cratera</i> metaestável. 1000 partículas. | 55 |
| 6.4 | Partículas monodispersas tendem a se cristalizar. | 57 |
| 6.5 | Geração de condição inicial para 49 partículas. | 58 |

| | | |
|------|---|----|
| 6.6 | Geração de condição inicial para 89 partículas..... | 59 |
| 6.7 | Geração de condição inicial para 219 partículas. | 59 |
| 6.8 | Geração de condição inicial para 471 partículas. | 59 |
| 6.9 | Geração de condição inicial para 995 partículas. | 59 |
| 6.10 | Geração de condição inicial para 6243 partículas, com passo de tempo $dt = 10^{-4}$ s. | 61 |
| 6.11 | Geração de condição inicial para 6243 partículas, com passo de tempo $dt = 10^{-5}$ s. | 62 |
| 6.12 | Evolução das energias cinética, potencial gravitacional, rotacional e total ao longo do tempo até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$ | 63 |
| 6.13 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média ao longo do tempo até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$ | 65 |
| 6.14 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média em função do tempo adimensional t^* até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$ | 66 |
| 6.15 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$ | 67 |
| 6.16 | Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.4. 416, 645, 924 e 1253 grãos. | 69 |
| 6.17 | Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.4. 1632, 2540, 3705 e 6541 grãos. | 70 |
| 6.18 | Evolução das energias cinética, potencial gravitacional, rotacional e total ao longo do tempo até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.0$ | 71 |
| 6.19 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.0$ | 72 |
| 6.20 | Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.0. 298, 471, 657 e 905 grãos..... | 73 |
| 6.21 | Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.0. 1193, 1842, 2631 e 4706 grãos. | 74 |
| 6.22 | Condição inicial padrão a ser cavada. 7284 partículas. | 75 |
| 6.23 | Esquema da retirada de uma cratera retangular do sistema, em equilíbrio metaestável. | 76 |
| 6.24 | Cavidade com razão de aspecto $H/L = 1.0$. 7284 partículas. | 77 |
| 6.25 | Cavidade com razão de aspecto $H/L = 1.5$. 7284 partículas. | 78 |
| 6.26 | Cavidade com razão de aspecto $H/L = 2.0$. 7284 partículas. | 78 |
| 6.27 | Cavidade de largura alta, com razão de aspecto $H/L = 0.5$. 7284 partículas. | 79 |
| 6.28 | Cavidade de largura baixa, com razão de aspecto $H/L = 0.5$. 7284 partículas. | 79 |
| 6.29 | Cavidade de largura alta, com razão de aspecto $H/L = 0.75$. 7284 partículas. | 79 |
| 6.30 | Cavidade de largura baixa, com razão de aspecto $H/L = 0.75$. 7284 partículas..... | 79 |

| | | |
|------|--|-----|
| 7.1 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de k_n . | 83 |
| 7.2 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ para $k_n = 2 \times 10^5 kg/s^2$ e $k_n = 10^6 kg/s^2$. 7284 partículas. | 84 |
| 7.3 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ para $\gamma = 5 \times 10^3 kg/s$ e $\gamma = 5 \times 10^4 kg/s$. 7284 partículas. | 85 |
| 7.4 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de γ . | 86 |
| 7.5 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de μ_s . | 87 |
| 7.6 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ para $\mu_s = 0.1$ e $\mu_s = 1.0$. 7284 partículas. | 88 |
| 7.7 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de γ_s . | 89 |
| 7.8 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes razões de aspecto H/L . | 90 |
| 7.9 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$. 7284 partículas. | 92 |
| 7.10 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.5$. 7284 partículas. | 92 |
| 7.11 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 2.0$. 7284 partículas. | 93 |
| 7.12 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$. 7284 partículas. | 94 |
| 7.13 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 2.0$. 7284 partículas. | 95 |
| 7.14 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera larga com $H/L = 0.5$. 7284 partículas. | 96 |
| 7.15 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera estreita com $H/L = 0.5$. 7284 partículas. | 97 |
| 7.16 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera larga com $H/L = 0.75$. 7284 partículas. | 97 |
| 7.17 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera estreita com $H/L = 0.75$. 7284 partículas. | 97 |
| 7.18 | Evolução do colapso de uma cratera estreita com $H/L = 0.5$. 7284 partículas. | 98 |
| 7.19 | Evolução do colapso de uma cratera larga com $H/L = 0.5$. 7284 partículas. | 99 |
| 7.20 | Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes posições α da cavidade. | 100 |

| | | |
|------|---|-----|
| 7.21 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 20p$. 7284 partículas. | 101 |
| 7.22 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 30p$. 7284 partículas. | 101 |
| 7.23 | Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 40p$. 7284 partículas. | 102 |
| 7.24 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 20p$. 7284 partículas. | 102 |
| 7.25 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 30p$. 7284 partículas. | 103 |
| 7.26 | Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 40p$. 7284 partículas. | 103 |
| 7.27 | Cratera p/ $k_n = 5 \times 10^5$, $\gamma = 5 \times 10^4$, $\mu_d = 0.9$ | 104 |
| 7.28 | Altura da cratera $h_{cratera}$ em função da razão de aspecto H/L | 105 |
| 7.29 | Perfis de diferentes crateras para diferentes razões de aspecto $H/L > 1$ | 105 |
| 7.30 | Evolução do perfil de uma cratera com razão de aspecto $H/L = 2.10$ | 106 |

Capítulo 1

Introdução

“Begin at the beginning,” the King said, gravely, “and go on till you come to an end; then stop.”

“Comece pelo começo,” disse o Rei com muita gravidade, “e siga até o fim: daí pare.”

”

Lewis Carroll, *Alice in Wonderland*

1.1 Resumo

Nesse trabalho, o estudo do colapso de uma cratera é feito a partir de simulações numéricas de dinâmica molecular de esferas moles (*soft-sphere molecular dynamics*). Expomos em detalhes a teoria básica e construímos as ferramentas numéricas necessárias para estudarmos o colapso de uma cratera feita de materiais granulares. Um recipiente é preenchido com grãos esféricos confinados a deslocamentos bidimensionais, e interações entre cada par de partículas são sujeitas a uma força elástica de natureza restitutiva, uma força elástica de natureza dissipativa, e uma força de atrito, de natureza também dissipativa, todas as quais dependentes do material. A partir do momento em que o recipiente começa a ser preenchido, esse sistema evolui em direção a um estado metaestável e, a partir dele, removemos uma certa quantidade de partículas da superfície livre do sistema. Realizando esta remoção de grãos, a qual escolhemos como possuindo um formato retangular, o sistema então escoar de forma transiente até uma outra configuração final, também metaestável formando, então, ao redor do centro em que foi realizada a remoção, uma cratera.

1.2 Materiais Granulares

1.2.1 O que são materiais granulares?

Um material granular é, basicamente, um aglomerado de partículas (ou grãos, termo o qual usaremos como sinônimo ao longo deste trabalho) discretas macroscópicas. De primeira instância, podemos pensar em pilhas de areia, sal ou açúcar - estes são exemplos comuns de materiais granulares. No entanto, também podemos classificar pilhas de arroz, cascalhos e até cinturões de asteroides como materiais granulares: os grãos podem ser da escala de alguns microns até uma escala de quilômetros de diâmetro, dependendo das dimensões do sistema [22]. Quando vistos individualmente, os grãos costumam apresentar tamanhos diferentes (não-uniformidade), formatos diferentes (geometria), densidades diferentes, rugosidades superficiais diferentes. Ora, para certos sistemas, os grãos nem precisam ser feitos do mesmo material. Além disso, é natural esperarmos que uma coleção de grãos em um sistema físico real apresente uma distribuição variada das características citadas acima.

Existem inúmeras aplicações industriais para materiais granulares. Algumas das principais são a manipulação de fármacos (pílulas) e o transporte, tão como o armazenamento, de alimentos (grãos como soja, feijão e arroz). Na Figura 1.1, apresentamos grãos de arroz e grãos de milho e soja. Os exemplos acima englobam apenas sistemas de grãos secos, mas materiais granulares podem também estar imersos em fluidos, como em suspensões: a distribuição de tamanho dos grãos particulados na suspensão pode afetar a consistência de chocolates e sorvetes e também influenciar na validade de certos produtos alimentícios. Ademais, materiais granulares podem ser acrescentados a fluidos na forma de sedimentos, como nos casos do cimento e da lama.

Talvez tão importante quanto as aplicações industriais do estudo de materiais granulares é sua presença em problemas geofísicos para descrever, simular e prever fenômenos naturais considerados prejudiciais à civilização humana, como avalanches de neve, avalanches de pedras, deslizamentos de terra e o escoamento de suspensões de gás quente e rochas que usualmente acompanham erupções vulcânicas - fenômeno conhecido como fluxo piroclástico (*piro* = fogo e *clástico*, do grego *klastós* = romper).



(a) Grãos de arroz



(b) Grãos de milho e soja

Figura 1.1: Materiais granulares na indústria alimentícia.

1.2.2 Aplicações industriais

A produção mundial de grãos e agregados anualmente atinge a marca de 10 bilhões de toneladas; a produção de carvão é de aproximadamente 40% deste valor, e 10% é para outras matérias-primas de construção, como areia e cascalho e, além disso, o processamento de meios granulares e agregados consome por volta de 10% de toda energia produzida no mundo [22], perdendo apenas para o consumo de energia relacionado à água. A tecnologia usada atualmente para quebrar e particionar as matérias-primas citadas acima é basicamente a mesma desde o século XIX, e corresponde a 85% do custo total, então não muitas melhorias foram realizadas neste quesito, apesar de que o uso de silos para armazenamento, leitos fluidizados para transporte, e caminhões de cimento para mistura, são comuns.

O fluxo de um material granular ao longo de um cone, como acontece em indústrias alimentícias (grãos de soja, por exemplo) ou indústrias de construção (cascalho), é muitas vezes impedido devido à formação de arcos nas vizinhanças do buraco de saída, como mostrado na Figura (1.2). As circunstâncias em que isso acontece dependem do diâmetro da abertura, tanto quanto do tamanho e das propriedades do material granular em questão [22]. Na Figura (1.3), vemos alguns dos métodos usados na indústria para superar esse bloqueio no fluxo granular.

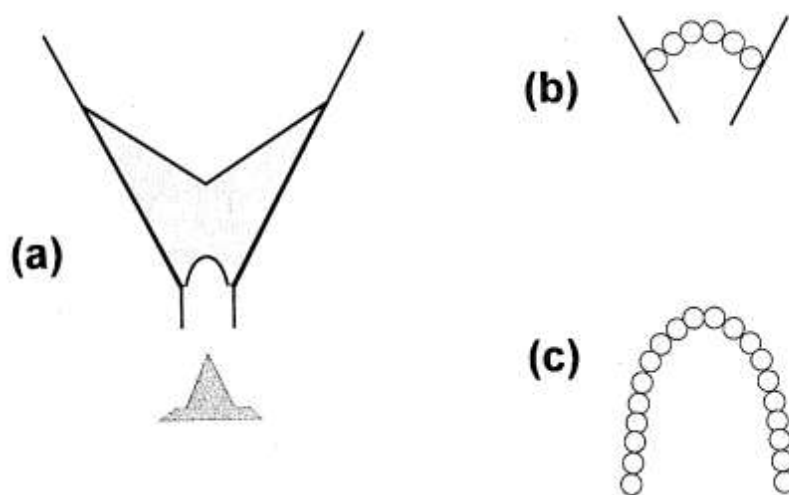


Figura 1.2: Bloqueio de fluxo granular devido à formação de arco na abertura de saída - (a) e (b). Estrutura de arco com máximo grau de estabilidade (c) [22].

1.2.3 Breve perspectiva histórica

No Século XVIII, Charles de Coulomb (1736-1806) sintetizou, com base em diversos experimentos, a leis básicas do atrito seco entre sólidos. Mais tarde, Michael Faraday (1791-1867) estudou como vibrações influenciavam na formação de pilhas de areia (hoje um fenômeno categorizado como instabilidade granular). William Rankine (1820-1872), a partir das ideias pioneiras de Coulomb, estudou as influências do atrito em materiais granulares. A distribuição de forças num meio granular foi estudada, primeiramente por I. Roberts, em 1884: "numa estrutura cujas paredes laterais são paralelas, a pressão exercida pelos grãos ali

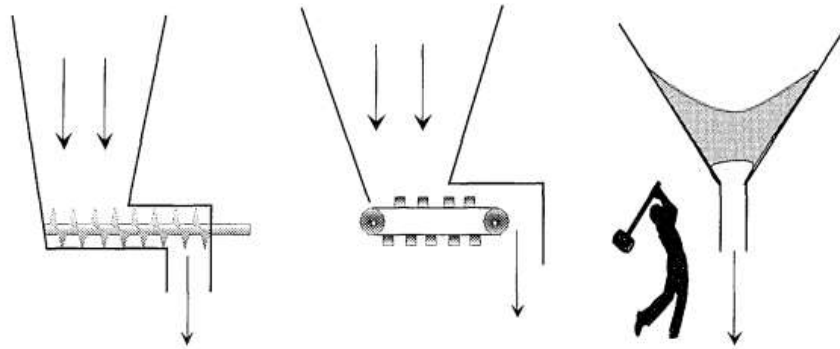


Figura 1.3: Métodos para impedir bloqueio por arco na abertura de saída [22].

contidos sobre a base deixa de crescer quando a estrutura é preenchida a uma altura duas vezes maior que o diâmetro de seu círculo inscrito- a lei da pressão hidrostática não tem relação análoga direta com materiais granulares. Ao final do Século XIX, Osborne Reynolds (1842-1912) fez, além de grandes contribuições ao estudo da hidrodinâmica, contribuições a materiais granulares, como o conceito de dilatância (ver [22], Capítulo 3). A partir do século XX, o estudo de materiais granulares cresceu consideravelmente, sendo a pesquisa neste ramo movida tanto pela indústria quanto pela própria física.

Materiais granulares podem ser não-coesos, e então as forças atuantes entre eles são apenas de repulsão, de tal forma que a forma do material é dada somente pela gravidade e por fronteiras físicas, ou podem ser secos, e então qualquer fluido presente entre dois grãos, como ar ou água, podem ser negligenciados quando se deseja determinar certas propriedades do sistema [8].

Apesar de se reduzirem a partículas discretas, o comportamento de um material granular é multifacetado: ele possui comportamentos que poderiam ser classificados como de sólidos, líquidos ou gases. Em se tratando de materiais granulares, as condições às quais eles estão sujeitos fazem toda a diferença na dinâmica que irá predominar.

Porém, há uma característica comum entre os materiais granulares: as interações entre partículas, isto é, as *colisões* que ocorrem entre pares de grãos, é de natureza dissipativa, devido à força de atrito. Assim, de primeira vista, poderíamos conjecturar que a fricção entre um par de grãos que interagem entre si pode ditar algo sobre a dinâmica do sistema quando aumentamos o número de partículas - e assim, o número de colisões entre elas.

1.2.4 Dinâmica de materiais granulares

Não devemos nos enganar quanto à aparente facilidade em descrever fenômenos de materiais granulares: embora a física esteja muito bem descrita para uma interação entre duas partículas, é na dinâmica de um conjunto de grãos que a atual ciência deixa a desejar. Em primeiro lugar, a escala de energia relevante na dinâmica da interação entre grãos é aquela da energia potencial, que torna insignificante uma escala de energia que seja termodinâmica - certamente, uma pilha de areia não se comporta como um gás denso. Daí, em um material granular, a irrelevância de tal escala de energia implica que efeitos dinâmicos predominam facilmente sobre considerações sobre a entropia - assim, ao menos que haja uma perturbação externa, cada

configuração metaestável do sistema perdura indefinidamente, sem qualquer efeito da temperatura sobre configurações de estados próximos [8]. Pelo mesmo motivo, a reprodução de um mesmo comportamento granular duas vezes, mesmo em grandes escalas, é difícil de ser alcançada [8].

1.2.4.1 Fenômeno de segregação: efeito Castanha-do-pará

Quando grãos de tamanhos idênticos estão dispostos em um sistema em que há também grãos maiores, por intermédio de vibrações os grãos maiores sobem até a superfície livre do conjunto de grãos. Intuitivamente, esperaríamos que os grãos se distribuíssem aleatoriamente pelo sistema - ocorrendo, assim, uma mistura homogênea dos grãos.

Este é um dos fenômenos mais conhecidos, denominado efeito Castanha-do-Pará (*Brazil Nut effect*). É chamado assim pois, quando balançamos um recipiente com diversos tipos de castanhas e nozes, a Castanha-do-Pará, sendo a de maior dimensão, ascende ao topo do recipiente. Na Figura 1.4 temos a evolução de um sistema em que o efeito Castanha-do-pará é simulado numericamente [23]. Um grão maior é posto em um recipiente, e grãos menores são depositados em cima dele, no mesmo recipiente; o recipiente é então vibrado periodicamente e conseguimos visualizar a elevação do grão maior.

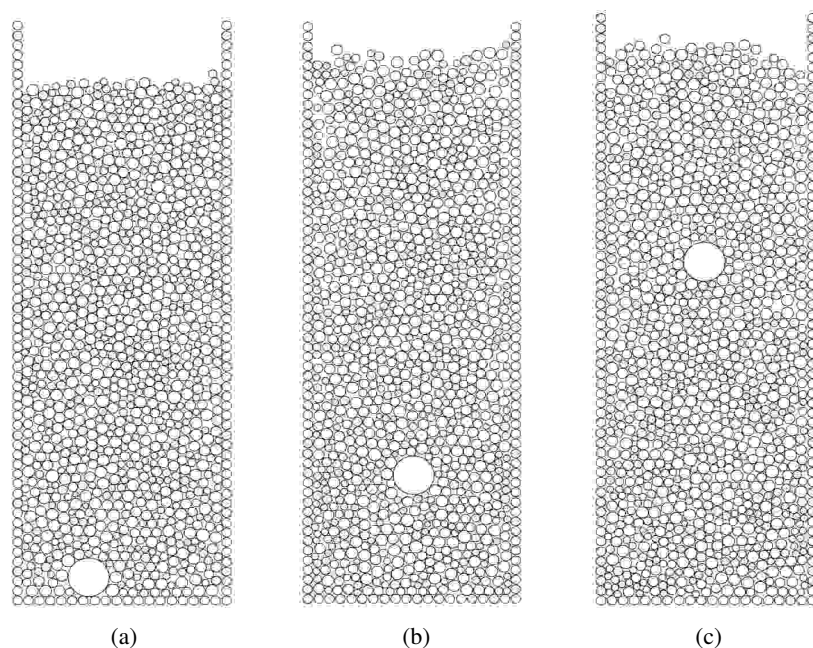


Figura 1.4: Representação de uma simulação numérica do efeito Castanha-do-Pará [23].

Tome agora um conjunto de castanhas, e solte uma delas de uma dada altura: a variação de energia cinética e a variação da energia potencial gravitacional desta castanha é praticamente a mesma. O comportamento coletivo de materiais granulares não pode ser descrito em termos de movimento Browniano, e essa inconseqüência explica porque materiais granulares tendem a resistir tentativas de mistura [22]. Assim, tentar misturar um recipiente com uma coleção de nozes resulta, tipicamente, numa segregação delas, de acordo com o tamanho: isto evidencia a falta de agitação térmica com um caminho livre médio característico da distância média entre partículas.

A origem física do fenômeno mais aceita atualmente é a citada acima, mas a raiz para o efeito Castanha-

do-Pará ainda não é consenso na literatura. Estudos recentes apresentam outras possíveis causas para o efeito, como a de que a diferença no empacotamento local nas vizinhanças de um grão maior resulta em mais graus de liberdade, e portanto leva um grão de tamanho maior a ascender, mesmo se sua densidade é maior do que a densidade das partículas menores que compõem o sistema [3]. Outra explicação comumente dada é a de que partículas de tamanhos maiores ascendem pois as partículas que rodeiam o grão maior em questão estão estacionários e previnem que ele caia, enquanto as partículas dos lados e do topo se movem [4]; se o efeito provoca uma ascensão do grão maior, as partículas menores devem escoar para baixo desta.

Outros estudos investigam experimentalmente os parâmetros que envolvem os casos em que grãos maiores não ascendem, mas descem ao fundo do recipiente em que estão embebidas as partículas, chamado de efeito castanha-do-pará reverso [13].

Tal fenômeno se mostra como um exemplo em que o comportamento coletivo de materiais granulares não se dá a partir de uma mera extensão dos comportamentos que ocorrem entre um par de grãos isolados - há um efeito contínuo que se estabelece quando vários grãos interagem entre si num mesmo sistema. Isso nos dá uma motivação quanto ao estudo de materiais granulares, pois fenômenos aparentemente simples e conhecidos possuem comportamentos anômalos, rendendo múltiplas explicações quanto à sua natureza física.

1.2.5 Leis constitutivas para materiais granulares?

É sabido que a pesquisa em materiais granulares é primariamente motivada pelas suas aplicações industriais e geofísicas. Porém, há uma outra motivação, esta mais matemática, ao estudo desses materiais: um sistema de grãos pode se comportar ora como sólido, ora como fluido. Não só isso, eles vão mais além: podem se comportar também como sistemas caóticos. Daí, materiais granulares não são objetos de estudo somente das áreas de mecânica dos fluidos e mecânica dos sólidos; são objetos de estudo de reologia, química e física estatística. Além disso, os estudos em escoamentos granulares podem ser classificados essencialmente em três tipos: estudos experimentais, estudos teóricos e modelagens numéricas.

É essa natureza abrangente dos materiais granulares que pavimenta o caminho para tantas variedades de pesquisa, sendo esta uma das principais razões que resultam na inexistência de equações constitutivas para estes materiais. Ora, fluidos newtonianos são precisa e seguramente bem descritos pelas equações de Navier-Stokes, para os mais diversos casos de escoamentos, mas não existe qualquer conjunto de leis constitutivas - pelo menos até o presente momento - que consigam capturar a pluralidade de comportamentos as quais um material granular pode apresentar.

A complexidade de uniformizar esta heterogeneidade de casos provém das características básicas de materiais granulares, como o desprezo do aumento de energia térmica do sistema e a dissipação nas interações que rapidamente levam ao (meta-)equilíbrio do sistema. São recentes os trabalhos que se arriscam a cumprir esta tarefa, e então é natural que os modelos apresentados constantemente sofram alterações.

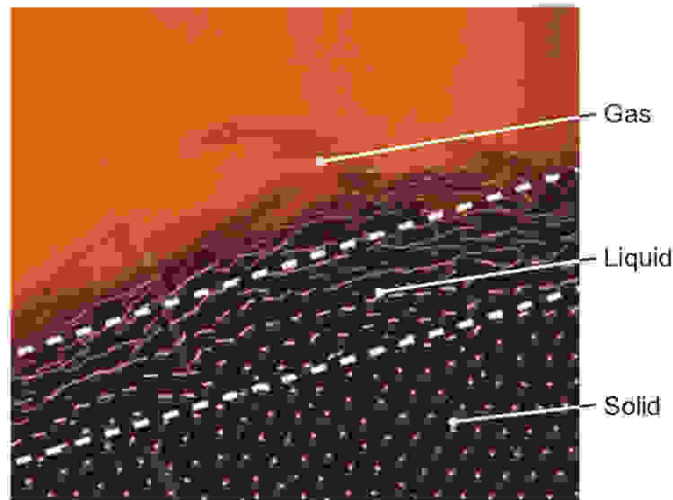


Figura 1.5: Os três regimes de escoamento de escoamentos granulares para o caso de esferas de alumínio [11].

1.2.6 Regimes de escoamentos granulares

Em um artigo de revisão, Forterre e Pouliquen [5] rememoram que escoamentos granulares são usualmente classificados em três regimes: um regime denso quasi-estático em que são lentas as deformações e os grãos interagem por contatos friccionais [9], um regime líquido intermediário em que o material é denso e escoam como um líquido, com os grãos interagindo tanto por colisões quanto por atrito [10, 11], e um regime gasoso em que o escoamento é muito rápido e diluído, em que as partículas interagem somente por colisões [12]. A Figura 1.5 [5] mostra três diferentes regiões que correspondem aos três regimes de escoamento citados acima [11].

Considerando a classificação acima, os escoamentos granulares que apresentam majoritariamente um regime líquido são os mais estudados por dinamicistas de fluidos. Tais casos são denominados escoamentos granulares densos, uma vez que temos camadas densas de materiais granulares que escoam. Basicamente, os escoamentos granulares densos são divididos em seis casos padrão, os quais permitem entender quase todos os aspectos e comportamentos básicos do escoamento de grãos, chamados de escoamentos reológicos. Tais casos são mostrados na Figura 1.6. São elas:

- a) escoamento em plano de cisalhamento: grãos esféricos são cisalhados a uma dada taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$;
- b) escoamento numa célula de Couette: grãos esféricos escoam a partir de dois cilindros coaxiais rotacionando (tem este nome devido ao conhecido escoamento de Taylor-Couette para fluidos viscosos); é uma geometria que confina o escoamento;
- c) escoamento num silo vertical: uma coluna de grãos em um recipiente fechado escoam a partir do movimento de uma espécie de pistão no fundo do silo; é também uma geometria que confina o escoamento;
- d) escoamento em plano inclinado: grãos são despejados num plano cuja inclinação é dada;

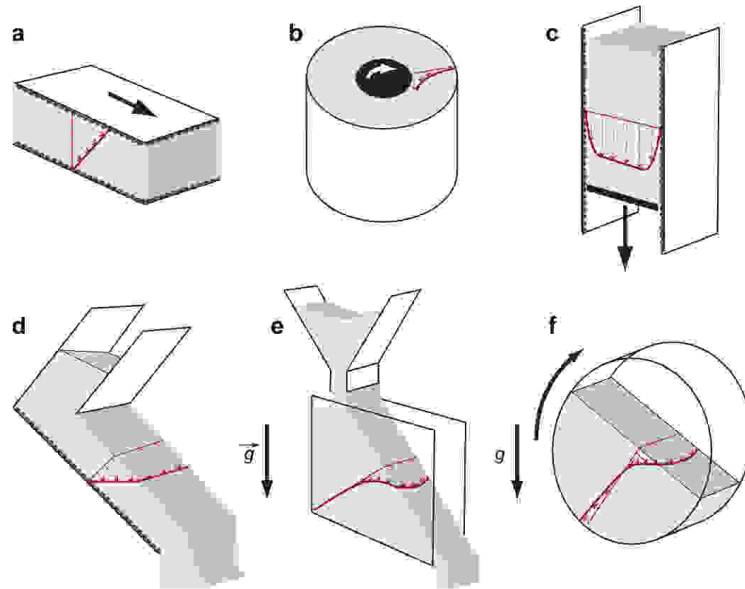


Figura 1.6: Os 6 tipos de escoamentos granulares densos [11].

e) escoamento em uma pilha: grãos são despejados em cima de um recipiente fixo. Diferentemente do plano inclinado, a inclinação da pilha depende das propriedades mecânicas das partículas;

f) escoamento em tambor rotativo: grãos são postos dentro de um tambor de tal forma que não preencham totalmente o volume deste, e o tambor é então rotacionado.

1.2.7 Pilhas de areia: o ângulo de repouso

Suponha que grãos de areia sejam despejados numa superfície lisa, a uma velocidade uniforme, nos conformes da Figura (1.7).



Figura 1.7: Grãos de areia sendo despejados numa superfície [25].

A pilha de grãos formada é estável quando ela é inclinada levemente. No entanto, se a superfície livre faz um ângulo com a horizontal que é maior do que o ângulo de máxima estabilidade, ocorre um

escoamento dos grãos, e uma pequena avalanche se inicia [24]. Tal ângulo é conhecido na literatura como o ângulo de repouso (Figura 1.8).



Figura 1.8: Ângulo de repouso numa pilha de areia [26].

1.3 Modelagem numérica: dinâmica molecular

Como mencionado anteriormente, o estudo em materiais granulares se divide primariamente em estudos experimentais, modelos teóricos e abordagens numéricas. Faremos uso desta última, tanto devido à sua versatilidade - simulações numéricas nos permitem explorar o efeito individual de diversos parâmetros os quais aparatos experimentais não oferecem -, quanto à sua facilidade de obtenção - é necessário apenas um computador para realizar as simulações, independente das configurações que se deseja simular. No entanto, simulações numéricas não devem estar desacopladas de experimentos nem de modelos teóricos: elas devem justamente estar adequadas aos experimentos realizados e comparadas com os modelos teóricos, seja a fim de confirmação ou aprimoramento.

Nas simulações de Dinâmica Molecular, *Molecular Dynamics* (MD), seguimos a dinâmica de um sistema de N partículas - introduzimos forças elásticas e dissipativas para as interações entre pares, e cada partícula é evoluída no tempo a partir das equações do movimento. Isso é diferente do método conhecido como *event-driven*, em que se pré-calculam os pontos de colisão e calculam-se as velocidades finais das partículas após o contato (como em simulações numéricas de gases rarefeitos).

Embora seja um método normalmente usado para estudar propriedades termodinâmicas de átomos e moléculas, como delata o nome, as simulações de MD podem ser de esferas moles ou de esferas duras (o termo esfera é geral, mas podem ser simuladas elipses, círculos, etc.) onde, no caso de esferas moles, é geralmente usada para simular o movimento de partículas macroscópicas. Por conseguinte, em MD, as interações entre partículas são conservativas, enquanto no caso de MD de esferas moles, são normalmente dissipativas.

Na MD de esferas duras, as partículas sofrem colisões par-a-par em que uma força ao longo de um tempo infinitesimal provoca um impulso, que é finito. Nunca ocorre de mais de duas esferas colidirem simultaneamente - as colisões são instantâneas e a dinâmica das colisões se reduz ao cálculo do choque de um par por vez.

No nosso caso, a MD de esferas moles, *soft-sphere Molecular Dynamics*, também comumente conhecida por Método de Elementos Discretos (*Discrete Element Method* (DEM)) duas partículas interagem entre si quando sua distância relativa é menor do que a soma de seus raios, e o tempo de colisão não é zero, pelo contrário, é significativo para a dinâmica da colisão. Isto será explicado mais detalhadamente no

1.4 Motivação

A desestabilização e colapso de um meio granular é um modelo simplificado de um escoamento típico de diversos problemas em engenharia e geofísica, como o armazenamento de grãos de soja em um silo e avalanches de neve. Ao longo da formação de uma cratera de impacto, tanto em escoamentos na escala humana quanto em superfícies de planetas, como na Figura (1.9), há "o colapso de uma *cratera transiente* gravitacionalmente instável que é cavada pelo impacto"[6]: antes da remoção de material granular da superfície livre, o sistema está em equilíbrio metaestável; imediatamente após a superfície livre ser cavada, inicia-se um escoamento granular, que tende a um outro estado metaestável de equilíbrio.



Figura 1.9: A Cratera Barringer, no Arizona, EUA, é uma cratera de impacto originada a partir de um meteoro há 49.000 anos [27].

Além disso, estudos recentes [28] sobre a formação de crateras de impacto formadas por um projétil caindo sobre um material granular e levantaram questões sobre o mesmo processo ocorrer no caso de impactos de baixa energia num leito granular.

Esses estudos nos motivam a investigar os parâmetros envolvidos na dependência da configuração final da cratera na geometria inicial da cavidade e como se dá o escoamento granular resultante da remoção de grãos do sistema (como o sistema do qual realizamos essa remoção está em equilíbrio estático, estaremos removendo o apoio de certos grãos, a saber, daqueles mais próximos da superfície livre) ao se formar a cavidade.

Partindo para um plano mais palpável, o estudo de crateras formadas por impactos de baixa energia podem ter aplicações diretas numa das etapas iniciais de uma construção civil, que é a fundação da obra. Usualmente, é feita uma sondagem inicial do solo que será cavado para escolher apropriadamente o tipo de fundação que será instalada com base em parâmetros que medem a rigidez do solo. É nesse contexto que o estudo do colapso de uma cratera pode ser útil, pois forneceria dados complementares para apontar uma escolha mais segura para construir a fundação.

1.5 Objetivos

Este trabalho se vale do auxílio de simulações numéricas baseadas no algoritmo de dinâmica molecular de esferas moles para analisar os diversos parâmetros que influenciam na natureza do escoamento transiente que ocorre durante o colapso de uma cavidade na superfície de um leito livre de grãos, e que influenciam no estado final de equilíbrio metaestável do meio granular.

Com isso em mente, objetivamos realizar a análise de parâmetros diversos, como os grãos que participam efetivamente do colapso, as cadeias de força, a evolução das energias ao longo da evolução do sistema, a relação da natureza do escoamento com diferentes razões de aspecto, a influência das propriedades do material (coeficiente elástico, atrito, polidispersidade) e como a geometria da cavidade inicial influencia na configuração de equilíbrio final que é atingida.

1.6 Organização do trabalho

- Capítulo 2: Fazemos uma revisão bibliográfica dos estudos previamente realizados quanto ao colapso de uma cratera granular, assim como problemas similares, não só numéricos, como experimentais e teóricos, e apresentamos o problema proposto com mais detalhes.
- Capítulo 3: Apresentamos a Teoria de Dinâmica Molecular de Esferas Moles, necessária à modelagem numérica do problema proposto: explicamos como ocorrem a colisão entre um par de grãos, valendo-se das equações do movimento, forças normais restitutivas e dissipativas e forças tangenciais dissipativas.
- Capítulo 4: Desenvolvemos um algoritmo para realizar nossas simulações, exibimos os obstáculos encontrados com relação ao algoritmo proposto, e implementamos um novo algoritmo que supera as falhas encontradas, de forma cronológica. Introduzimos as ferramentas necessárias aos códigos para correta implementação dos algoritmos, como integradores e interface gráfica para visualização dos eventos simulados.
- Capítulo 5: Validamos os códigos com diversos casos-teste em que são conhecidos os comportamentos físicos: partícula em queda livre, movimento horizontal, colisão normal, colisão oblíqua, colisão perfeitamente elástica, colisão inelástica, rotação.
- Capítulo 6: Apresentamos como são geradas as condições iniciais necessárias para obtermos a cratera que irá colapsar. Análises sobre a energia sob a variação de parâmetros do sistema são feitos.
- Capítulo 7: Fazemos análises quanto ao escoamento da cratera granular, evolução da energia, evolução da superfície livre, dependência dos parâmetros iniciais e razões de aspecto.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

“ *"In mathematics the art of proposing a question must be held of higher value than solving it."*

"Em matemática, a arte de propor uma questão deve ser posta como de maior valor do que de fato resolvê-la." ”

Georg Cantor, 1867

2.1 Colapso de um degrau

O colapso de um degrau granular é um escoamento granular que leva de um estado meta estável (instável a grandes perturbações) estático (sólido) a um outro estado metaestável estático (sólido) após uma evolução transiente entre os estados na qual o conjunto de grãos escoo como um contínuo não-newtoniano.

Quando uma pilha livre de materiais granulares atinge o equilíbrio, tal sistema não está no seu mínimo potencial, mas sim em um estado de equilíbrio que não aquele de menor energia - denominado estado metaestável.

Por via de regra, sistemas metaestáveis podem evoluir e permanecer em outro estado de energia caso seja fornecida energia suficiente. No caso de materiais granulares, uma pilha de grãos que atingiu um equilíbrio metaestável pode gerar o colapso de conjuntos de grãos da pilha sob a mínima perturbação. É esta propriedade de materiais granulares que caracteriza a ocorrência de avalanches.

A maioria das avalanches é provocada por pequenas perturbações externas gradativas, como o acúmulo de neve ou terremotos [14] (eventos naturais). A pressão aplicada ao monte de neve devido a uma carga estática aplicada por esquiadores ou, por exemplo, ondas de choque e pressão acústica geradas por aeronaves com velocidades acima da velocidade do som [15].

No que se refere à falha de um degrau granular, sua natureza depende dos vínculos aplicados e a taxa

com que o degrau falha. No caso de uma comporta retentora que confina um meio granular, diferentes velocidades de abertura da comporta resultam em diferentes evoluções dos grãos. É observado a rápida relaxação inicial do degrau com uma taxa máxima de falha ocorrendo em um ângulo maior do que o ângulo de repouso (o ângulo mais íngreme para o qual uma pilha de grãos permanece estável), então as colisões inelásticas e o atrito dinâmico devem influenciar fortemente na configuração final [7].

2.2 Colapso de uma cavidade

No caso de uma cavidade retangular, o estudo do colapso de uma cratera possui uma geometria similar à de uma abertura de uma comporta que confina o meio granular em um recipiente - a cratera é formada a partir da retirada de certa quantidade de partículas na superfície do meio granular em formato retangular, e então a semelhança se faz na simetria da abertura de duas comportas imaginárias espaçadas de uma certa distância (a largura da cavidade).

Poderíamos encaixar o estudo do colapso de uma cratera no caso de escoamento granular de uma pilha, dentre os 6 tipos de escoamento granular denso representado na Figura 1.6. No entanto, a classificação que mencionamos para o caso da pilha de grãos é normalmente tratada como um escoamento permanente; deixamos claro que o escoamento do colapso de cratera possui um caráter mais transiente.

No nosso caso, a cavidade se torna instável contra a gravidade e induz um escoamento granular quando a inclinação da superfície livre é maior que o ângulo de repouso, o que inicia o colapso da cavidade.

Siavoshi e Kudrolli [7] analisaram que a superfície da pilha formada pelo despejo lento de grãos é descrita por uma reta, com desvios logarítmicos observados somente quando partículas possuem energia cinética substancial durante a relaxação do *step* granular, e contestações a esse resultado [1] observam que desvios da linearidade sempre ocorrem durante despejo lento de grãos.

O colapso de uma cavidade axissimétrica foi estudado por de Vet e de Bruyn [6], que calcularam a dependência da cratera final na geometria inicial da cavidade e o campo de velocidades inicial.

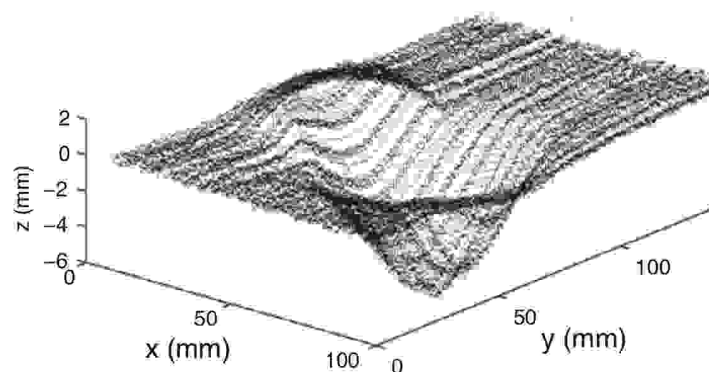
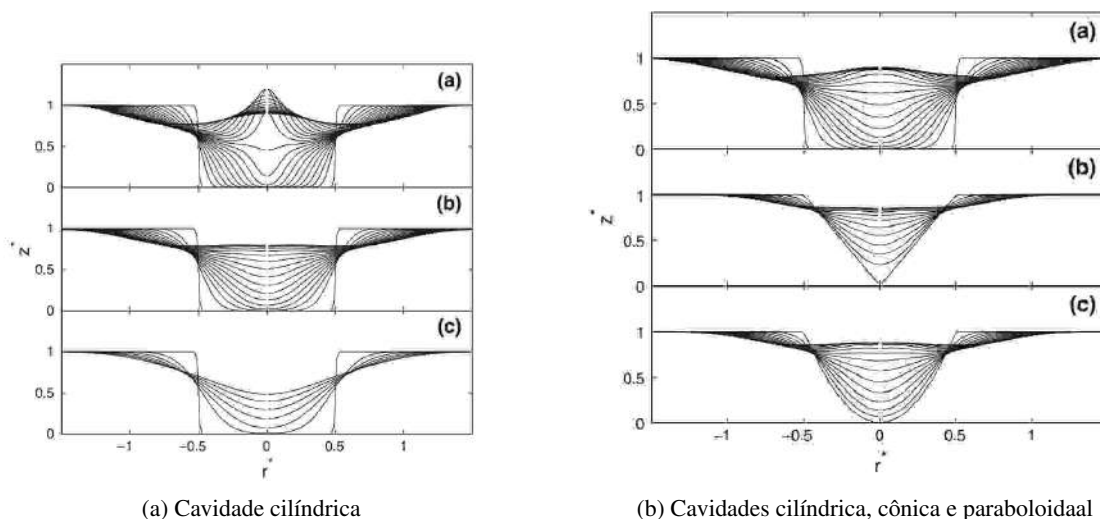


Figura 2.1: Superfície digitalizada de uma cratera formada pelo colapso de uma cavidade cilíndrica, realizado experimentalmente [6].

A Figura 2.1 mostra a superfície de uma cratera obtida experimentalmente digitalizada em computador.



(a) Cavidade cilíndrica

(b) Cavidades cilíndrica, cônica e paraboloidal

Figura 2.2: Evolução dos perfis da superfície livre de uma cavidade obtidos por um modelo contínuo pelas equações de Saint-Venant [6].

O colapso de uma cavidade cilíndrica foi modelado pelas equações de Saint-Venant para uma fina camada de escoamento, e comparando os resultados do modelo para cavidades colapsantes de geometrias cilíndrica, cônica e parabólica, mostraram que as configurações finais da cratera para cada geometria são similares em todos os casos, tanto em forma quanto em tamanho. Experimentalmente, a parte central do perfil da cratera foi bem descrita por uma hipérbole, mas o modelo contínuo diverge desta observação.

Partiremos de uma abordagem por simulações numéricas de dinâmica molecular para organizar as crateras para cada geometria e então comparar o estado final àqueles previstos pelo modelo das equações de Saint-Venant proposto por de Vet e de Bruyn e o centro da cratera com a superfície descrita por uma hipérbole.

As simulações numéricas são feitas utilizando o método de dinâmica molecular de esferas moles, e o cálculo de todas as interações par a par que ocorrem entre intervalos de tempo discretos é feito explicitamente a partir de modelos de forças mecânicas que atuam em um contato de duas esferas.

Geramos a configuração inicial preenchendo um recipiente com grãos de tamanhos distribuídos uniformemente em torno de um tamanho médio fixado e então retiramos uma certa quantidade de partículas da superfície em formato 2D cartesiano pré-definido.

Capítulo 3

Teoria de Dinâmica Molecular

“ If you wish to make an apple pie from scratch, you must first create the universe.

Se você deseja fazer uma torta de maçã do zero, você deve primeiro criar o universo. ”

Carl Sagan, 1980

Determinar em um dado instante quais partículas estão em contato entre si é essencial para calcular a dinâmica de um sistema de partículas que interagem puramente por forças de contato. Objetivamos rastrear individualmente todas as partículas do sistema e prescrever como se dão as interações par a par destas partículas, as forças mecânicas envolvidas, tão como suas posições e velocidades.

3.1 Introdução básica

Existem diversos mecanismos para dissipação de energia que ocorrem numa colisão entre duas partículas. Alguns deles são deformação plástica, a viscoelasticidade do material e também ondas elásticas excitadas pelo impacto [16]. Majoritariamente, essa dissipação de energia se transforma em calor, e sabemos que deformações plásticas são responsáveis por dissiparem a energia cinética em energia sonora, como quando duas bolas de sinuca se chocam [11].

Reconhecemos que as diferentes formas de dissipação são importantes para contabilizar a perda total da energia mecânica na pré-colisão. No entanto, devemos clarificar que nosso objetivo não é estudar a *fenomenologia* do que acontece durante uma colisão; estamos mais interessados em modelar da melhor maneira possível *perda de energia* que ocorre nesse evento. Isso porque queremos usar um modelo que consiga capturar deslocamentos e velocidades realistas de um sistema com parâmetros de entrada de materiais granulares existentes. É com essa mentalidade que tentaremos simular um sistema físico real de escoamento granular em uma pilha que seja relativamente simples de implementar numericamente (Capítulo 4) e com uma fidelidade suficiente que nos permita comparar com resultados terceiros, principalmente aqueles de caráter experimental.

3.2 Dinâmica molecular de esferas moles

3.3 Leis de Newton e equações do movimento

Primeiramente, devemos especificar explicitamente as forças agindo entre as partículas de forma a definir por completo as equações do movimento. Posteriormente, iremos apresentar os métodos para a integração numérica destas (Capítulo 4).

Antes de propor modelos para tais forças, a própria teoria da mecânica do contato define expressões para as forças que agem no contato entre dois corpos; no entanto, o contato entre dois corpos normalmente possui uma complexa matemática sob condições gerais [16, 17]. Sendo assim, é possível simplificar tal dinâmica e, então, utilizar modelos amplamente usados em simulações numéricas de algoritmos de dinâmica molecular.

Restringimos nosso movimento a uma configuração bidimensional : há dois graus de liberdade translacionais e um rotacional, que é o caso de grãos esféricos não coesivos e secos [16].

Na pesquisa em fluidos, é comum trabalhar com unidades adimensionais. No estudo de materiais granulares, adimensionalizar as quantidades não é muito comum na literatura pois o conceito de similaridade dinâmica perde sua significância. Tendo isso em mente, usaremos unidades do Sistema Internacional (SI). Ademais, essa escolha nos confere um melhor aparato comparativo para simular materiais granulares específicos, que possuem densidade e módulo de Young tabelados na literatura.

Sejam R , r e v o raio, posição e velocidade de uma dada partícula num conjunto de coordenadas. Definimos então a interpenetração virtual (*virtual overlap*) ξ relativa a um par de grãos (i, j) como:

$$\dot{\xi}_{i,j} = \max(0, R_j + R_i - |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|). \quad (3.1)$$

Naturalmente, decompomos as forças e velocidades para cada par (i, j) em uma componente normal unitária (\mathbf{n}) e uma componente tangencial unitária (\mathbf{s}):¹

$$\mathbf{n}_{i,j} = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} = (n_x, n_y), \quad (3.2)$$

$$\mathbf{s}_{i,j} = (n_y, -n_x). \quad (3.3)$$

Daí, as velocidades relativas normal e tangencial, respectivamente, são dadas pelas seguintes equações:

$$v_{i,j}^n = (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n}, \quad (3.4)$$

$$v_{i,j}^s = (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{s} + \omega_i R_i + \omega_j R_j. \quad (3.5)$$

onde ω_i e ω_j são as velocidades angulares das partículas i e j .

Por ora, o foco do trabalho atual está em contatos normais, mesmo existindo colisões que nos retornariam uma componente tangencial da velocidade relativa (colisões oblíquas) - afinal, não é sempre verdade

¹Usamos a letra s para denotar a componente tangencial, do inglês "shear"(cisalhamento). Reservamos a letra t neste trabalho para denotar o tempo.

que a rota de colisão de dois grãos estão alinhadas. Dessa forma, a rotação não é relevante e, portanto, a dinâmica não depende de esforços tangenciais. Consequentemente, serão discutidas aqui apenas as forças normais, deixando as forças tangenciais para a continuação deste trabalho.

3.3.1 Forças normais

O modelo mais simples de uma partícula que sofre deformação inelástica numa colisão com outra partícula é aquele conhecido por massa-mola-amortecedor linear. Este modelo linear combina um termo linear para a repulsão das partículas e um termo para a dissipação - estes termos são necessários para garantir que colisões inelásticas existam no nosso sistema. A força normal é da seguinte forma:

$$\mathbf{F}_{i,j}^n = -k_n \xi_{i,j} - \gamma_n \dot{\xi}_{i,j}, \quad (3.6)$$

onde k_n é a rigidez de uma mola de elongação ξ , que é a deformação da partícula, γ_n é o coeficiente de amortecimento viscoso (quanto mais elevado for este termo, mais inelástica será a colisão) e $\dot{\xi}$ é a primeira derivada de ξ com relação ao tempo.²

A maior vantagem do massa-mola-amortecedor é a de que a equação diferencial ordinária (EDO) que descreve este modelo juntamente com as condições iniciais $\xi(0) = 0$ e $\dot{\xi}(0) = v_n^0$ nos garante, pelo teorema de Picard-Lindelöf de existência e unicidade de soluções de EDOs, a existência de uma única solução para este problema de valor inicial (PVI), que tem expressão analítica bem definida.

As condições iniciais são:

$$\xi(0) = 0, \quad (3.7)$$

$$\dot{\xi}(0) = v_n^0. \quad (3.8)$$

A EDO a qual nos referimos é basicamente obtida a partir da segunda lei de Newton, do balanço de forças de uma partícula esférica durante uma colisão com outras. Apresentamos na Figura 3.1 a representação esquemática das posições e velocidades de duas partículas esféricas nos casos de colisão normal e oblíqua.

Na Figura 3.2, temos o esquema das velocidades relativas presentes numa colisão oblíqua entre duas partículas esféricas. Já na Figura 3.3, o esquema de forças no instante que precede a colisão e no instante que a sucede.

²O subscrito i, j em $F_{i,j}^n$ representa a força que a partícula j exerce na partícula i , ou seja, é a reação da partícula j na partícula i ; essencialmente, é a força normal que sofre a partícula i numa colisão.

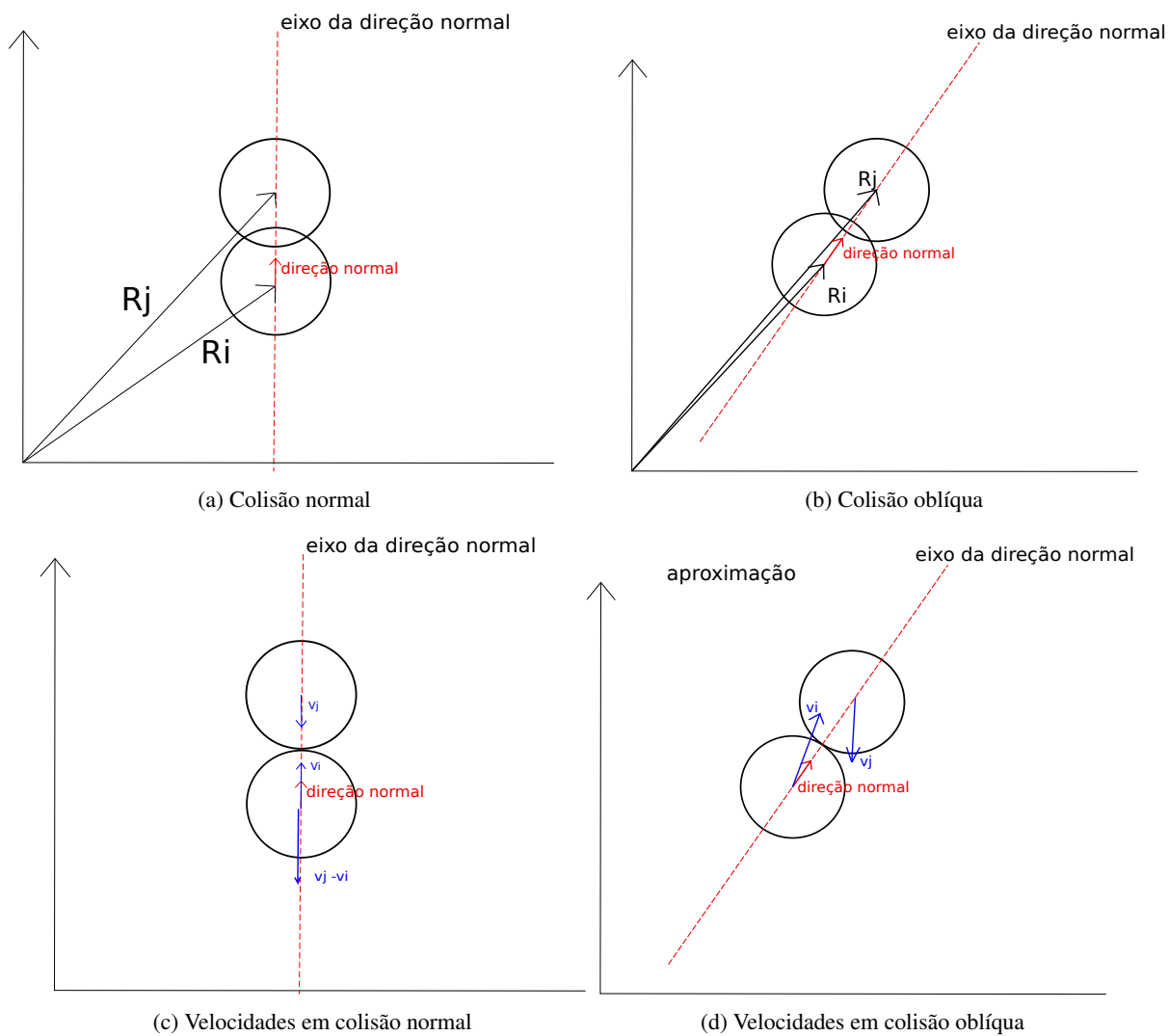


Figura 3.1: Representação esquemática de duas partículas em colisão para os casos normal e oblíquo.

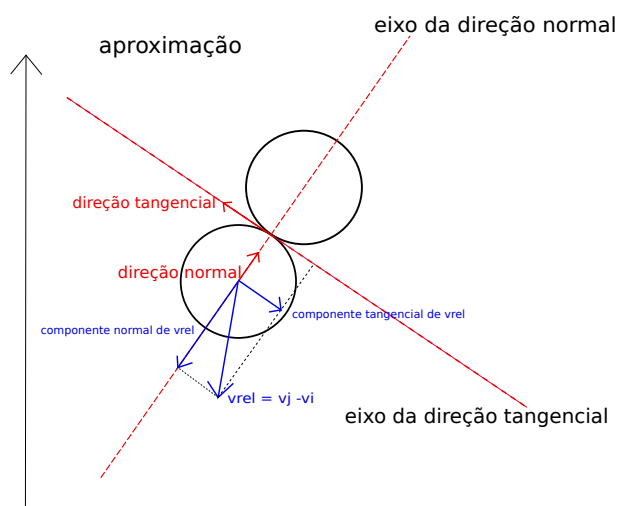


Figura 3.2: Esquema das velocidades relativas de duas partículas em colisão oblíqua.

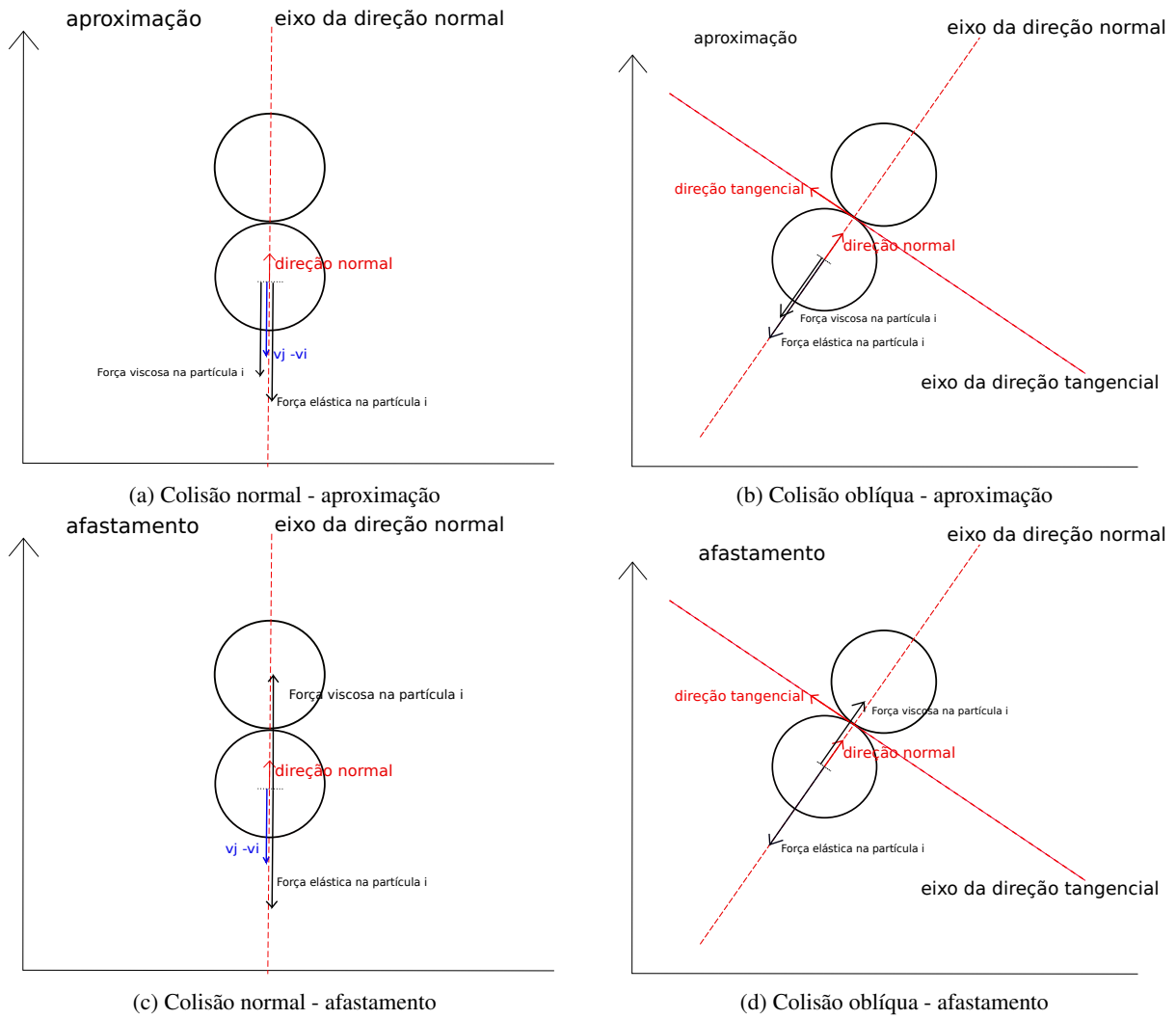


Figura 3.3: Representação esquemática das forças normais atuando em uma partícula ao início e final de uma colisão.

Explicitemos a força normal que age em um par de contato durante uma colisão:

$$\mathbf{F}^n = m_{eff}\ddot{\xi}, \quad (3.9)$$

onde m_{eff} é a massa efetiva, que é definida da seguinte forma:

$$m_{eff} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}. \quad (3.10)$$

Substituindo F^n pela expressão dada pela equação (3.6) e um simples rearranjo de termos nos dá:

$$m_{eff}\ddot{\xi} + \gamma_n\dot{\xi} + k_n\xi = 0, \quad (3.11)$$

que representa a projeção das equações do movimento de Newton na direção normal.

Simplificamos esta última equação à expressão:

$$\ddot{\xi} + 2\zeta\omega_n\dot{\xi} + \omega_n^2\xi = 0, \quad (3.12)$$

onde ω_n , a frequência do oscilador harmônico não-amortecido, e ζ são definidas conforme as equações:

$$\omega_n = \sqrt{k_n/m_{eff}}, \quad (3.13)$$

$$\zeta = \frac{\gamma_n}{2m_{eff}\omega_n}. \quad (3.14)$$

Agora, com as condições iniciais (3.7) e (3.8), as expressões (3.12), (3.7) e (3.8) definem então nosso PVI.

Passemos agora à resolução desta EDO, a fim de descobrirmos uma expressão para sua solução analítica. Note que se trata de uma EDO linear de segunda ordem com coeficientes constantes homogênea. Resolvemos supondo uma solução do tipo $\xi(t) = e^{rt}$ e encontramos o polinômio característico da EDO simplificada (3.8):

$$r^2 + 2\zeta\omega_n r + \omega_n^2 = 0.$$

Cada raiz (chamada também raiz característica) do polinômio característico nos fornece uma solução $y = e^{rt}$ da EDO. Para o caso subamortecido, a solução do PVI é da forma

$$\xi(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t},$$

onde λ_1 e λ_2 são números complexos da forma:

$$\lambda_1 = -\zeta\omega_n + \omega_d j,$$

$$\lambda_2 = -\zeta\omega_n - \omega_d j,$$

com $\omega_d = \omega_n \sqrt{1 - \zeta^2}$. Substituindo as raízes características λ_1 e λ_2 na solução $\xi(t)$ nos fornece:

$$\xi(t) = e^{-\zeta\omega_n t} (c_1 e^{\omega_d j t} + c_2 e^{-\omega_d j t}),$$

onde $j = \sqrt{-1}$. Agora, usando as relações de Euler:

$$e^{\alpha j} = \cos\alpha + j \operatorname{sen}\alpha, \quad (3.15)$$

$$e^{-\alpha j} = \cos\alpha - j \operatorname{sen}\alpha, \quad (3.16)$$

temos a seguinte expressão para a solução:

$$\xi = e^{-\zeta\omega_n t} [(c_1 + c_2) \cos\omega_d t + j(c_1 - c_2) \operatorname{sen}\omega_d t],$$

Definindo $C_1 = (a_1 - a_2)j$ e $C_2 = (a_1 + a_2)$, o que nos dá então a seguinte solução:

$$\xi(t) = e^{-\zeta\omega_n t} (C_1 \operatorname{sen}\omega_d t + C_2 \cos\omega_d t). \quad (3.17)$$

Derivando esta equação, conseguimos para $\dot{\xi}$ a seguinte expressão:

$$\dot{\xi}(t) = -\zeta\omega_n e^{-\zeta\omega_n t} (C_1 \operatorname{sen}\omega_d t + C_2 \cos\omega_d t) + \omega_d e^{-\zeta\omega_n t} (C_1 \cos\omega_d t - C_2 \operatorname{sen}\omega_d t). \quad (3.18)$$

Finalmente, aplicamos as condições iniciais (3.7) e (3.8) na solução (3.17) e na sua derivada (3.18), o que nos fornece que $C_2 = 0$ e $C_1 = \frac{v_n^0}{\omega_d}$. Daí, substituímos de volta em (3.17) e (3.18) para obter

$$\xi(t) = \frac{v_n^0}{\omega_d} e^{-\zeta\omega_n t} \sin \omega_d t, \quad (3.19)$$

$$\dot{\xi}(t) = \frac{v_n^0}{\omega_d} e^{-\zeta\omega_n t} (\omega_d \cos \omega_d t - \zeta\omega_n \sin \omega_d t). \quad (3.20)$$

Se a duração da colisão é tomada como metade do período de oscilação, definida com $\xi(t_n) = 0$, então o tempo de colisão é definido como:

$$t_n = \frac{\pi}{\omega_d} \quad (3.21)$$

Vamos agora explicitar esse parâmetro, uma vez que já temos em mãos a solução do PVI. Da relação $\omega_d = \omega_n \sqrt{1 - \zeta^2}$, segue que:

$$\begin{aligned} \omega_d &= \sqrt{\frac{k_n}{m_{eff}}} \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma_n}{2 m_{eff} \omega_n}\right)^2} \\ \Rightarrow \omega_d &= \sqrt{\frac{k_n}{m_{eff}}} \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma_n}{2 m_{eff}}\right)^2 \frac{1}{\omega_n^2}} \\ \Rightarrow \omega_d &= \sqrt{\frac{k_n}{m_{eff}} \left(1 - \left(\frac{\gamma_n}{2 m_{eff}}\right)^2 \frac{m_{eff}}{k_n}\right)} \\ \Rightarrow \omega_d &= \sqrt{\frac{k_n}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma_n}{2 m_{eff}}\right)^2} \end{aligned}$$

Assim, temos que o tempo de colisão é dado por:

$$t_n = \pi \left(\frac{k_n}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma_n}{2 m_{eff}} \right)^2 \right)^{-1/2}. \quad (3.22)$$

Agora, introduzimos coeficiente de restituição e_n , que é a razão entre as velocidades relativas de duas partículas antes e depois da colisão. O coeficiente de restituição e_n descreve a elasticidade do impacto: quanto menor o coeficiente de restituição, mais inelástica é uma colisão e, portanto, mais energia é dissipada. Ele é então definido como:

$$e_n := -\frac{\dot{\xi}(t_n)}{\dot{\xi}(0)} = -\frac{v_n^f}{v_n^0}. \quad (3.23)$$

Como anteriormente, o superscrito 0 se refere a quantidades pré-colisão e agora, o superscrito f se refere a quantidades pós-colisão.

A partir deste parâmetro, usamos a informação de que, ao final da colisão, $\dot{\xi}(t) = v_n^f$ e substituímos na equação (3.20) para obtermos:

$$e_n = \exp\left(-\frac{\gamma_n}{2 m_{eff}} t_n\right). \quad (3.24)$$

Assim, a equação (3.24) nos diz que, possuindo a rigidez k_n e as massas das duas partículas em colisão, podemos escolher o parâmetro γ_n adequadamente, dado um valor para e_n , normalmente experimental. Uma expressão explícita para a quantidade γ_n é, então:

$$\gamma_n = \frac{-2m_{eff} \ln e_n}{t_n}. \quad (3.25)$$

Simulações que reproduzem analiticamente e_n com precisão da ordem de 4 casa decimais requerem um passo de tempo constante de, no mínimo, $dt = t_n/100$. Não estamos interessados em analisar a influência de e_n nas evoluções do nosso sistema. Para as nossas simulações, fornecemos k_n , γ_n e um t_n que tem o valor de, no mínimo, 300 passos de tempo; o valor de e_n é então calculado, mas não é um parâmetro que é usado diretamente nos cálculos das forças.

3.3.1.1 Força tangencial

Para colisões em que o termo v_{ij}^s (ou v_s , para simplificarmos a notação), dado pela Equação 3.4, é não-nulo, existe uma componente de velocidade tangencial relativa não-nula. Por via de regra, a força de cisalhamento que nasce dessa colisão oblíqua é ligada à força normal pelas leis de Coulomb do atrito:

$$\begin{cases} F_{at} \leq \mu_s F_n, \text{ para atrito estático } (v_s = 0) \\ F_{at} = \mu_d F_n, \text{ para atrito dinâmico } (v_s \neq 0). \end{cases} \quad (3.26)$$

A força de atrito mais simples que podemos modelar é a lei de Coulomb no caso do atrito dinâmico, dada por:

$$F_{at} = -\mu_d |F_n| \text{sgn}(v_s), \quad (3.27)$$

onde μ_d é o coeficiente de atrito dinâmico, que é adimensional e normalmente tem valor igual a 0.5.

Note, no entanto, que este modelo não prevê a reversão da velocidade tangencial: se uma partícula tem um certo torque resultante, a rotação dela nunca será revertida devido ao atrito, mas somente desacelerada até $v_s = 0$. De fato, a equação acima apresenta uma descontinuidade na força de atrito justamente em $v_s = 0$! O efeito que isso causa nas simulações acaba por causar um efeito anômalo, pois perto de $v_s = 0$, um código que faz uso deste modelo passa a "pular" entre valores positivos e negativos de F_{at} .

Isso pode ser contornado introduzindo uma região que regulariza a descontinuidade perto de $v_s = 0$, da seguinte forma:

$$F_a = -\min\{|\gamma_s v_s|, |\mu F_n|\} \cdot \text{sgn}(v_s), \quad (3.28)$$

onde γ_s é apenas um parâmetro artificial e não tem significado físico - ele não deve ter valores altos, no entanto, pois do contrário as propriedades da colisão começam a ser influenciadas (ver Capítulo 7).

Capítulo 4

Simulação/Algoritmos

“ (...) If you really want to understand something, the best way is to try and explain it to someone else. That forces you to sort it out in your mind. And the more slow and dim-witted your pupil, the more you have to break things down into more and more simple ideas. And that's really the essence of programming. By the time you've sorted out a complicated idea into little steps that even a stupid machine can deal with, you've learned something about it yourself.

(...) Se você realmente deseja entender alguma coisa, a melhor maneira é tentar explicá-la para outra pessoa. Isso te força a resolver a questão na sua cabeça. E quanto mais lento e bobo seu pupilo, mais você terá de quebrar as coisas em ideias cada vez mais simples. E essa é a essência de programar. No momento em que você resolve uma ideia complicada em pequenos passos que mesmo uma máquina estúpida consiga entender, então você realmente entendeu algo sobre essa coisa. ”

Douglas Adams, *Dirk Gently's Holistic Detective Agency*

O presente capítulo versará sobre a modelagem numérica dos modelos matemáticos apresentados no Capítulo 3. Como discretizar as equações governantes do sistema? O quão eficientes são os nossos algoritmos? Como esses algoritmos podem ser implementados? O quão abrangente é a nossa abordagem para diferentes parâmetros de simulação?

4.1 Introdução básica

4.1.1 Estabilidade de um algoritmo

Basicamente, um algoritmo numérico é dito numericamente instável quando pequenos erros feitos em alguma etapa do algoritmo são potencializados em sua execução, prejudicando a precisão do resultado final

calculado. Similarmente, um algoritmo é dito numericamente estável quando erros de aproximação não são potencializados pelo processo iterativo.

4.2 Algoritmo geral simples

Apresentamos aqui o algoritmo geral que utilizaremos para a execução das simulações. O algoritmo segue a estrutura básica do método de dinâmica molecular de esferas moles:

Data: Inicialize as posições, velocidades e forças para cada partícula

```
while energia cinética > tolerância do  
  for todas as partículas i do  
    if partícula i em colisão com partícula j then  
      calcule forças que atuam em i  
      some o resultado à força total que sofre a partícula i  
    end  
    integre as equações do movimento para a partícula i  
    registre as novas posições e velocidades da partícula i  
  end  
  recalcule a energia cinética  
end
```

4.2.1 Iniciando a simulação

Para iniciar o algoritmo acima, é necessário conferir às partículas posições e velocidades iniciais, tão como suas massas e raios. Note que é nesta etapa que sujeitamos nosso sistema a possuir uma dada configuração inicial - é importante ressaltar que o modo como as partículas são inicialmente dispostas no sistema influencia na configuração final do sistema, apesar da dinâmica extremamente complexa. Em nossas simulações, as partículas são inicializadas de forma enfileirada, com seus centros desalinhados de dois eixos imaginários paralelos aos eixos x e y de forma aleatória - a partir de um programa de computador que gera números aleatórios. Na Figura 4.1, mostramos um esquema de como as partículas são dispostas inicialmente.

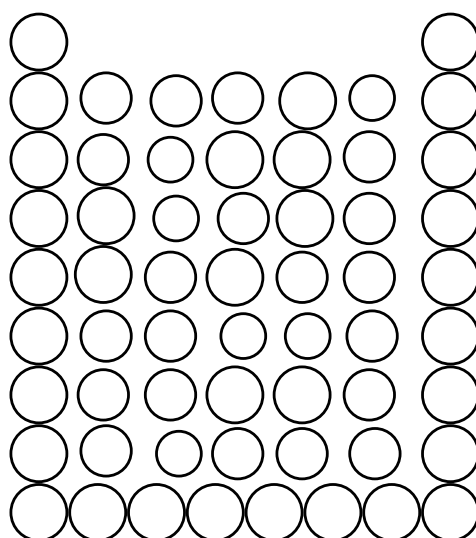


Figura 4.1: Configuração inicial das partículas.

4.3 O problema da busca de vizinhos

O termo "vizinho", em dinâmica molecular, se refere às partículas adjacentes que estão em contato com uma determinada partícula teste. Naturalmente, é preciso definir quais partículas estão em *contato* para seguirmos à etapa de calcular as forças em um dado momento t nesta determinada partícula. Como esta é a etapa mais *computacionalmente cara* de nossas simulações (precisamos calcular todas as forças que agem em uma dada partícula, e repetir este procedimento para todas as partículas), é importante encontrarmos uma forma de efetuar este trabalho com o mínimo de cálculos possível.

Certamente, a forma mais simples de se cumprir esta tarefa é checando, para cada partícula teste do sistema (exceto, obviamente, ela mesma), se ela é vizinha da partícula teste, fazendo isto da maneira discutida no Capítulo 3. Então temos que realizar um cálculo total da distância entre centros de $\frac{N(N-1)}{2}$ pares para conferir quais partículas são, de fato, vizinhas - para cada passo de tempo! Para quantidades cada vez maiores do número total de partículas N , um tempo proporcional a N^2 é gasto. Este algoritmo está demonstrado abaixo. Note que a ordem de complexidade dele é $\mathcal{O}(N^2)$, devido aos *loops* que percorrem todas as partículas do sistema, para cada partícula cuja contabilização de vizinhos deve ser feita. Já que desejamos justamente simular grandes números de partículas (1000, 5000, 10000...), é essencial dedicarmos um tempo para implementarmos um algoritmo de busca de vizinhos que contorne este problema.

Data: Inicialize as posições, velocidades e forças para cada partícula

```
while energia cinética > tolerância do
  for todas as partículas i do
    for todas as partículas j do
      if partícula i em colisão com partícula j then
        calcule forças que atuam em i
        some o resultado à força total que sofre a partícula i
      end
      integre as equações do movimento para a partícula i
      registre as novas posições e velocidades da partícula i
    end
    recalcule a energia cinética
  end
end
```

4.3.1 A Lista de Verlet e o algoritmo *linked cell*

Este é provavelmente o método mais utilizado em simulações numéricas de dinâmica molecular, e que reduz consideravelmente a quantidade de cálculos para busca de vizinhos. A engenhosidade da Lista de Verlet é fundamentada na premissa básica de que podemos delimitar um raio de busca máximo no qual podemos encontrar vizinhos, restringindo a busca a este raio e, assim, desprezar a busca por vizinhos além desta distância. Isso porque, para uma dada partícula teste, é desnecessário checar se partículas que estão espacialmente distantes dela são vizinhas - há ainda diversas partículas entre elas, logo elas certamente não estão em colisão!

De início, repartimos o domínio do nosso sistema em células quadradas virtuais de igual tamanho, de tal forma que os centros de cada partícula estejam inseridas em alguma célula. Daí, quando formos procurar os vizinhos de uma partícula teste em um dado instante, sabemos a célula à qual ela pertence, e então basta fazermos a checagem de vizinhos para as 8 células adjacentes, incluindo a própria célula à qual ela pertence, uma vez que é possível que duas partículas (ou mais) possam ocupar a mesma célula. O esquema presente na Figura 4.2 ilustra isso. O lado do quadrado que define cada célula é definido como $R_{\text{célula}}$ (raio da célula), e deve ser escolhido apropriadamente. A escolha do tamanho adequado de $R_{\text{célula}}$ é importante pois, se definirmos um $R_{\text{célula}}$ muito grande, haverá muitas partículas em uma única célula, e as partículas pertencentes às 8 células adjacentes e ela mesma somarão um número muito grande de vizinhos os quais devemos checar o contato. Agora, se $R_{\text{célula}}$ for muito pequeno, precisaremos atualizar a lista com frequência, se não sempre! Definimos então cada célula como tendo lado igual ao diâmetro de cada partícula da fronteira.

Definidas as células, a ideia da lista de Verlet é manter o controle de duas listas ao longo da simulação:

a) uma lista que nos fornece, para cada célula, qual a última partícula que foi inserida na célula - denominada *UPC* (última partícula da célula)

b) uma lista que nos fornece, para cada célula, todas as partículas que foram previamente inseridas na célula - denominada *Conexões*

Essencialmente, essas duas listas conjuntamente compõem a lista de Verlet acoplada a um algoritmo linked cell: uma lista que mantém o controle de todas as partículas contidas em cada célula do sistema.

Data: Inicialize as listas $UPC()$ e $Conexões()$

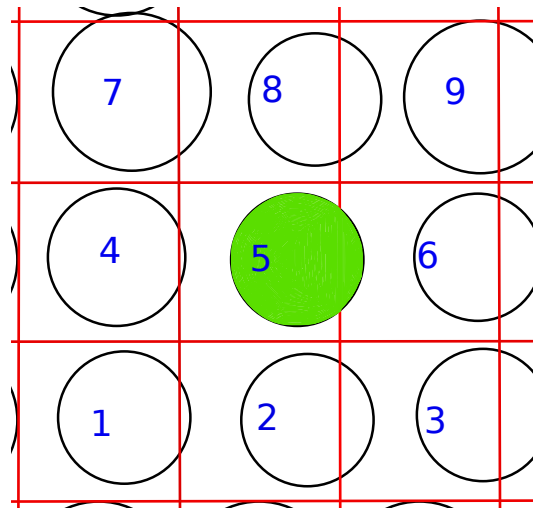
for todas as partículas i **do**

 Verifique à qual célula C_i a partícula i pertence

 assimile à lista de $Conexões()$: $Conexões(i) = UPC(C_i)$

 atualize a nova UPC : $UPC(C_i) = i$

end



(a) As células vizinhas da célula central comportam as partículas vizinhas da partícula 5.

Figura 4.2: As células adjacentes de uma determinada célula.

Para demonstrar um caso simples desse algoritmo, suponha que tenhamos 3 células em nosso sistema, que possui um total de 7 partículas, e na célula 1 estão presentes as partículas 4 e 6. Então a lista UPC é uma lista com 3 elementos (os números das células). $Conexões$ é uma lista com 7 elementos (o número total de partículas).

Inicializamos então ambas as listas da seguinte forma:

for $i = 1, 7$ **do**

$UPC(i) = 0$

$Conexões(i) = 0$

end

Este passo é necessário pois caso uma célula não possua nenhuma partícula alocada a ela, ela não será considerada na iteração de checagem de vizinhos.

- no caso $i = 1...$
- no caso $i = 2...$
- ...
- no caso $i = 4$
- $C_4 = \text{int}(x_4/R_{\text{célula}}) = 1$
- Conexões(4) = UPC(1) = 0
- UPC(1) = 4
- no caso $i = 5...$
- no caso $i = 6$
- $C_6 = \text{int}(x_6/R_{\text{célula}}) = 1$
- Conexões(6) = UPC(1) = 4
- UPC(1) = 6
- ...

Assim, a procura de vizinhos da partícula 4 é feito para a célula à qual ela pertence e as partículas pertencentes às 8 células adjacentes a esta.

Este método nos garante uma economia de tempo computacional considerável, uma vez que agora reduzimos a quantidade de cálculos para checagem de vizinhos que deve ser feita, usando agora um *array* bidimensional e uma lista com N entradas (o número de partículas). A ordem de complexidade deste método é de $\mathcal{O}(N \log N)$.

Na prática, quando implementamos este algoritmo em nossos códigos, é importante realizar alguns testes para, de fato, averiguar a complexidade computacional com a qual estamos lidando. Realizando então simulações para diferentes números de partículas, chegamos ao gráfico da Figura 4.3. Foi feita uma regressão linear nos pontos obtidos, que apresentou uma correspondência condizente com a ordem de complexidade $\mathcal{O}(N \log N)$ entre o tempo e o número de partículas.

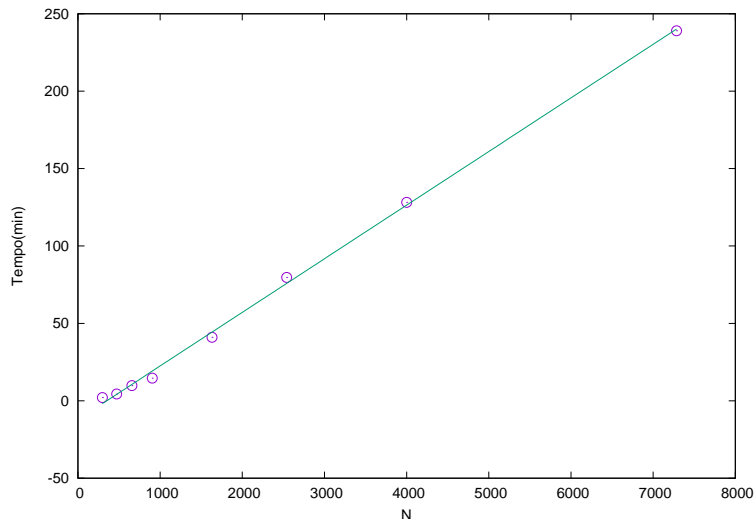


Figura 4.3: O número de partículas em função do tempo de simulação se comporta de forma linear.

No entanto, deixamos claro aqui que foi fixado o tamanho do recipiente a ser preenchido, de forma a analisarmos somente a influência do número de partículas. Pretendemos aumentar o número de partículas

mas preservando o raio médio de cada uma delas, de forma a não ser necessário realizar alterações nos parâmetros físicos (assim driblando a necessidade de calibrar o sistema novamente).

Nesse sentido, para a obtenção da *condição inicial* (a ser discutida no Capítulo 6), nossas simulações levam mais tempo; no entanto, este tempo não é significativo: para o sistema padrão que iremos tomar, com 7284 partículas, levamos menos de um dia para que a simulação termine (num computador com processador *Intel i7* de sexta geração). No caso da evolução da própria cratera, esse tempo é de pouco mais de 3 horas.

4.4 Erros

Existem diversos erros associados a métodos numéricos e à máquina utilizada para realizar as simulações.

O erro de arredondamento local é o erro obtido pela limitação da precisão da máquina usada para realizar nossos cálculo em uma etapa do algoritmo.

O erro de arredondamento global é o acúmulo de todos os erros de arredondamento locais em todas as etapas precedentes do algoritmo.

O *erro de truncamento local* é o erro que é inevitavelmente cometido em uma etapa quando substituímos um processo infinito (no caso, nossa soma infinita da série de Taylor), por um processo finito (considerar apenas os n primeiros termos na nossa soma).

O erro de truncamento global é o erro obtido pelo acúmulo de todos os erros de truncamento local realizados em cada etapa. É um erro que, diferentemente do erro de arredondamento, está associado ao próprio método. Ele não se trata simplesmente da soma de todos os erros de truncamento local anteriores. Isso porque cada passo da solução numérica deve usar um valor inicial que foi aproximado no passo anterior; como este valor está enviesado, o algoritmo está procurando a curva de solução errada. Uma análise mais rigorosa de o quão díspares são as soluções de um PVI com diferentes condições iniciais nos leva à conclusão de que:

Se os erros de truncamento locais de uma solução numérica de uma equação diferencial são de ordem $\mathcal{O}(h^{n+1})$, então o erro de truncamento global é de ordem $\mathcal{O}(h^n)$.

Uma prova formal da afirmação acima pode ser encontrada em [18].

Finalmente, o erro total é a soma dos erros de arredondamento e truncamento globais.

4.5 Integração das equações de movimento

A força total que uma partícula j exerce numa partícula i é dada por:

$$F_{i,j} = \mathbf{F}_{i,j}^n \cdot \hat{n}_{i,j} + \mathbf{F}_{i,j} \cdot \hat{t}_{i,j}. \quad (4.1)$$

Nosso objetivo é resolver as equações do movimento:

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{\text{colisões } i,j} \mathbf{F}_{i,j} + m_i \mathbf{g}, \quad (4.2)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{\text{colisões } i,j} \mathbf{M}_{i,j}, \quad (4.3)$$

onde

$$\mathbf{M}_{i,j} = R_i \mathbf{F}_{i,j} \times \hat{n}_{i,j} \quad (4.4)$$

é o momento realizado pela força $\mathbf{F}_{i,j}$ no centro da partícula i em questão.

Por ora, estaremos interessados em resolver apenas a primeira das equações do movimento mencionadas acima, que diz respeito à conservação do momento linear.

Resolver tais equações numericamente é o mesmo que calcular as posições e velocidades num instante $t + dt$, a partir destas quantidades no instante t , que são conhecidas; uma vez que é possível calcular as forças que sofrem cada partícula i no instante t , é possível alcançarmos tal objetivo.

4.5.1 Método de Série de Taylor para solução numérica de uma EDO

A estratégia para integrarmos as equações do movimento é de usar as expansões em série de Taylor das quantidades que desejamos calcular no tempo t , a saber, a posição e a velocidade - para cada partícula do sistema -, para aproximarmos estas quantidades no instante seguinte, $t + dt$. Existem diversos métodos que se baseiam nessa estratégia.

Considere o PVI unidimensional¹

$$x' = f(t, x), \quad (4.5)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad (4.6)$$

onde f é uma função dada, de duas variáveis, e (t_0, x_0) é um dado ponto pelo qual a curva que define a solução dessa EDO deve passar. A solução desse PVI é uma função $x(t)$ que satisfaz $\frac{dx(t)}{dt} = f(t, x(t))$ para todo t em alguma vizinhança de t_0 , e com $x(t_0) = x_0$.

Se a existência de todas as derivadas parciais de ordem superior é garantida para x no ponto $t = t_0$, então por expansão em série de Taylor, o valor x em qualquer ponto $t + h$ nas vizinhanças de t_0 , pode ser escrito como:

$$x(t + h) = x(t) + hx'(t) + \frac{h^2}{2!}x''(t) + \frac{h^3}{3!}x^{(3)}(t) + \frac{h^4}{4!}x^{(4)}(t) + \dots \quad (4.7)$$

Já que (t_0, x_0) é um ponto conhecido, a derivada x' no ponto x_0 também pode ser encontrada computando $f(t_0, x_0)$. O mesmo procedimento pode ser repetido para as derivadas de ordens superiores. Logo, o valor x em qualquer ponto $t + h$ nas vizinhanças do ponto t_0 pode ser obtido calculando a série infinita acima.

Evidentemente, em algoritmos numéricos, somamos apenas os n primeiros termos da série. Se o último termo da série usado foi o da n -ésima derivada, então a fórmula aproximada é chamada série de Taylor

¹usaremos esta representação de um PVI sucessivas vezes ao longo deste capítulo - é importante termos em mente desde já que x será, no nosso caso, um vetor, a saber, o vetor posição no caso de integrarmos a posição no tempo; e o vetor velocidade no caso de integrarmos a velocidade no tempo.

aproximada de x de ordem n - e o erro é então de ordem $n + 1$. Os termos que não incluímos constituem o *erro de truncamento*, que é inevitável em nosso procedimento numérico. Note que, a princípio, precisamos de expressões para as derivadas de x até a n -ésima ordem que usaremos para nosso cálculo; no entanto, isso não é necessário devido à natureza recursiva das fórmulas que usamos.

O método de série de Taylor para obter numericamente a solução de uma EDO tem a vantagem de ser um procedimento relativamente simples e de alta precisão; se pudermos usar o máximo de derivadas possível, conseguimos uma ótima aproximação. Em contrapartida, as derivadas devem ser explicitadas separadamente no algoritmo, o que se torna moroso para muitas derivadas. É possível então usar poucas derivadas e diminuir o passo h com que resolvemos nossos cálculos - assim, estamos "diminuindo" a vizinhança de t_0 onde calcularemos o valor da solução num ponto próximo $t + h$, aumentando a precisão do resultado obtido.

A seguir, apresentaremos diversos métodos numéricos para solução de um PVI do tipo dado pelas equações (4.5) e (4.6). A ideia aqui é propor diversos métodos que possam resolver nossas equações do movimento para cada par que colide em nossa simulação - as quais podem ser resolvidas pelo método em questão -, e então escolher o que melhor relaciona precisão e simplicidade em nosso algoritmo.

4.5.2 Método de Euler

O método de Euler é o método de série de Taylor no caso $n = 1$. Obtemos a partir da fórmula (4.3):

$$\mathbf{x}(t + h) = \mathbf{x}(t) + h f(t, \mathbf{x}). \quad (4.8)$$

Note que o método de Euler não requer a derivada da função f . No entanto, para ganharmos valores de precisão aceitáveis, devemos tomar valores pequenos para o passo h .

O presente método é um método de primeira ordem: o erro local é proporcional h^2 (ordem $\mathcal{O}(h^2)$) e o erro global é proporcional a h (ordem $\mathcal{O}(h)$).

4.5.3 Método de Runge-Kutta de 4ª ordem

Usar um método de série de Taylor de quarta ordem no PVI exige que tenhamos que diferenciar sucessivamente a equação (4.1). Os métodos de Runge-Kutta contornam esta dificuldade, embora mimique o método da série de Taylor combinando valores de $f(t, x)$. A obtenção deste método é relativamente longa e será omitida. A fórmula para o método de Runge-Kutta de quarta ordem é a seguinte:

$$\mathbf{x}(t + h) = \mathbf{x}(t) + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \quad (4.9)$$

onde

$$K_1 = hf(t, \mathbf{x}), \quad (4.10)$$

$$K_2 = hf\left(t + \frac{1}{2}h, \mathbf{x} + \frac{1}{2}K_1\right), \quad (4.11)$$

$$K_3 = hf\left(t + \frac{1}{2}h, \mathbf{x} + \frac{1}{2}K_2\right), \quad (4.12)$$

$$K_4 = hf(t + h, \mathbf{x} + K_3). \quad (4.13)$$

Este método utiliza quatro aproximações para a inclinação da curva:

K_1 : é a inclinação no início do passo de tempo t_0 (é a mesma inclinação do método de Euler)

K_2 : é uma estimativa da inclinação no ponto médio do passo $t = t_0 + h/2$, e é mais precisa que a inclinação K_1 .

K_3 : é uma outra estimativa da inclinação no ponto médio do passo, $t = t_0 + h/2$.

K_4 : é uma estimativa da inclinação no ponto final do passo, $t = t_0 + h$.

A inclinação final usada para estimar $x(t + h)$ é uma média ponderada das inclinações K_1, K_2, K_3 e K_4 .

Essa inclinação é dada por

$$K = \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4).$$

Note que as inclinações K_2 e K_3 do ponto intermediário são contabilizadas com um peso maior.

Este método é de quarta ordem pois reproduz os termos a série de Taylor até o termo com h^4 , incluindo este. O erro de truncamento local então é $\mathcal{O}(h^5)$, e o erro global, de ordem $\mathcal{O}(h^4)$.

4.5.4 Método de Euler semi-implícito

Até então, apresentamos dois métodos que resolvem um PVI do tipo (4.1) - isto é, apenas uma EDO de primeira ordem. Recordamos que nosso objetivo é resolver a equação (3.6) numericamente em duas dimensões. Para tanto, devemos integrar as equações do movimento para a posição e a velocidade - e cada uma destas para cada coordenada (x e y). Assim, se pretendemos usar algum dos métodos supracitados em nossas simulações, devemos resolvê-lo quatro vezes para cada passo de tempo.

O método de Euler semi-implícito, também conhecido como método de Newton-Störmer-Verlet, é um método para resolver um par de equações diferenciais. Diferentemente dos métodos apresentados anteriormente (Euler e Runge-Kutta de quarta ordem), este método nos permite já resolver a integração da posição e da velocidade "simultaneamente". Elaboremos melhor esta ideia:

O método produz uma solução discreta para um par de EDO's da forma:

$$\mathbf{x}'(t) = f(t, \mathbf{x}), \quad (4.14)$$

$$\mathbf{v}'(t) = g(t, \mathbf{v}), \quad (4.15)$$

com f e g funções dadas. As condições iniciais são:

$$\mathbf{x}(t_0) = x_0 \text{ e } \mathbf{v}(t_0) = v_0.$$

Uma solução numérica aproximada é obtida pelo método a partir das expressões:

$$\mathbf{v}(t + h) = \mathbf{v}(t) + g(t, \mathbf{x})h, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{x}(t + h) = \mathbf{x}(t) + g(t, \mathbf{x} + h)h. \quad (4.17)$$

À primeira vista, há uma grande semelhança com o método de Euler. A diferença é que enquanto o método de Euler usaria $v(t)$ para o cálculo de $x(t+h)$, o de Euler semi-implícito usa $v(t+1)$ para o cálculo de $x(t+h)$.

Este método é, assim como o de Euler, um integrador de primeira ordem - o erro de truncamento global é proporcional a h (ordem $\mathcal{O}(h)$).

Por outro lado, um diferencial importante deste método é o fato de que este é um *integrador simplético*.

Formalmente [19], um método numérico $y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$ é denominado *simplético* se, quando aplicado a um sistema Hamiltoniano, o mapeamento discreto $y \rightarrow \Phi_h(y)$ é uma transformação simplética para todos os passos suficientemente pequenos. Em termos mais simples, quando aplicado a um sistema hamiltoniano, que é o nosso caso, nossas equações do movimento em mecânica hamiltoniana são da forma (4.8)-(4.9). Ademais, o hamiltoniano, $\mathcal{H} = T(t, v) + V(t, x)$, que representa a soma das energias cinética e potencial dos sistema, é conservado: a energia total do sistema é conservada.²

4.5.5 Método de Verlet

O método de Verlet, também conhecido como Störmer-Verlet, é de fácil implementação e altamente preciso. Ele se vale de usar as posições - trataremos da velocidade posteriormente - nos instantes $t - dt$ e t e a força que uma partícula i sofre nesses instantes.

Fixemos uma partícula i e façamos então o desenvolvimento em série de Taylor da sua posição x :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t - dt) &= \mathbf{x}(t) - \mathbf{v}(t)dt + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{dt^2}{2} - \ddot{\mathbf{x}}(t) \frac{dt^3}{3!} + \mathcal{O}(dt^4) \\ \mathbf{x}(t + dt) &= \mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(t)dt + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{dt^2}{2} + \ddot{\mathbf{x}}(t) \frac{dt^3}{3!} + \mathcal{O}(dt^4) \end{aligned}$$

Somar as duas equações acima nos dá:

$$\mathbf{x}(t + dt) = 2\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(t - dt) + \frac{\mathbf{F}}{m} dt^2 + \mathcal{O}(dt^4). \quad (4.18)$$

Assim, a equação (4.12) nos permite calcular $\mathbf{x}(t + dt)$ a partir das posições anteriores $\mathbf{x}(t - dt)$ e $\mathbf{x}(t)$.

Agora, para o cálculo da velocidade no tempo t , podemos estimá-la utilizando as posições $\mathbf{x}(t - dt)$ e $\mathbf{x}(t + dt)$ calculadas:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{x}(t + dt) - \mathbf{x}(t - dt)}{2dt} + \mathcal{O}(dt^2). \quad (4.19)$$

A energia total ao longo de uma solução numérica do método de Störmer-Verlet é conservada até uma ordem de $\mathcal{O}(h^2)$ ao longo de intervalos de tempo longos [20]. Uma vez que desejamos manter com precisão o controle das posições e velocidades, usamos a integração de Störmer-Verlet para tal. No caso das velocidades angulares, usamos uma integração de Euler pois apenas desejamos que haja alguma forma de dissipação da parcela oblíqua da colisão. Como calculamos as posições por um método de quarta ordem, isso é satisfatório e a dinâmica do sistema não será comprometida.

²A diferença entre um integrador simplético e um não-simplético é mais evidente quando a integração é feita durante longos tempos de simulação. É claro que integradores simpléticos não preservam a energia total do sistema devido a presença de outros erros, mas as flutuações entre o hamiltoniano \mathcal{H} e o seu valor verdadeiro são certamente menores.

Capítulo 5

Validações dos Códigos

“ *I'm a scientist and I know what constitutes proof. [...] a scientist must also be absolutely like a child. If he sees a thing, he must say that he sees it, whether it was what he thought he was going to see or not. See first, think later, then test. But always see first. Otherwise you will only see what you were expecting. Most scientists forget that.*

Eu sou um cientista e sei o que constitui uma prova. [...] um cientista deve também ser absolutamente como uma criança. Se ele observa algo, ele deve dizer que ele a vê, seja ela aquilo que ele imaginou que observaria ou não. Observe primeiro, pense depois, então teste. Mas sempre observe primeiro. Do contrário você verá apenas aquilo que esperava. A maioria dos cientistas esquece disso. ”

Douglas Adams, *So Long, and Thanks for All the Fish*

5.1 Introdução básica

5.1.1 O que é validar um código?

Quando procuramos simular numericamente um evento, seja ele físico ou não, propomos um modelo que captura todas as características essenciais deste evento. Em seguida, elevamos o nível de maturidade, diga-se de passagem, deste modelo e criamos um código programado em computador. A etapa seguinte, e tão importante quanto as anteriores, é *garantir* que as simulações numéricas geradas a partir do algoritmo criado estejam de acordo com nossas expectativas.

Raramente levamos em conta todas as variáveis que circundam o problema ao modelarmos um dado sistema físico - frequentemente fazemos hipóteses que simplificam o nosso problema, mas que ainda assim herdam a generalidade do problema original. Validar um código é a etapa do processo de uma simulação numérica que afere até que grau de confiabilidade o código proposto é fiel ao problema definido.

5.1.2 Como validar os *nossos* algoritmos?

A validação dos códigos dos algoritmos apresentados no Capítulo 4 pode ser dividida em duas partes: das leis físicas que regem o sistema e da lista de Verlet com algoritmo *linked-cell*. A estratégia aqui é simples: em primeiro lugar, conferir se as quantidades que integramos ao longo do tempo (posições e velocidades) se comportam de acordo com diversos casos-base da física de partículas e se o cálculo das forças está "bem resolvido"; em segundo lugar, checar se o algoritmo bruto de checagem de vizinhos, de complexidade $\mathcal{O}(N^2)$ nos retorna os mesmos resultados que o algoritmo de checagem de vizinhos pela lista de Verlet discutido anteriormente, de complexidade $\mathcal{O}(n \log n)$.

5.2 Validação a partir da leis físicas

Antes de simularmos o escoamento de uma pilha em uma caixa que em seguida será "cavada" em sua superfície, iremos comparar a dinâmica de partículas para os casos mais simples. Os casos a)-d) são validações para a força normal (sem força tangencial), os casos e)-h) são validações para a força tangencial (sem dissipação normal) e os casos i) e j) são validações para uma configuração em que ambas as forças normal e tangencial estão presentes.

- a) Queda livre de uma partícula solta do repouso com colisão normal perfeitamente elástica
- b) Queda livre de uma partícula solta do repouso com colisão normal inelástica (com dissipação)
- c) Colisão horizontal normal perfeitamente elástica de duas partículas com velocidades iniciais dadas inseridas num ambiente sem gravidade
- d) Colisão horizontal normal inelástica (com dissipação) com velocidades iniciais dadas inseridas num ambiente sem gravidade.
- e) Queda livre de uma partícula solta do repouso com colisão normal com rotação
- f) Queda livre de uma partícula solta do repouso com colisão oblíqua com rotação

5.3 Força normal: casos sem dissipação de energia

5.3.1 1 partícula em queda livre

Usamos as equações de movimento uniformemente variado para uma partícula em queda livre, dadas por

$$\mathbf{x}(t) = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} \mathbf{a} t^2 \quad (5.1)$$

$$\mathbf{v}(t) = v_0 + \mathbf{a} t \quad (5.2)$$

para descrever como a posição e velocidade dessa partícula variam no tempo em nosso sistema.

A Figura 5.1 nos dá uma representação gráfica da situação em questão. Note que o solo não corresponde à altura $h = 0m$, mas é modelado como uma partícula fixada numa altura $h > 0m$.

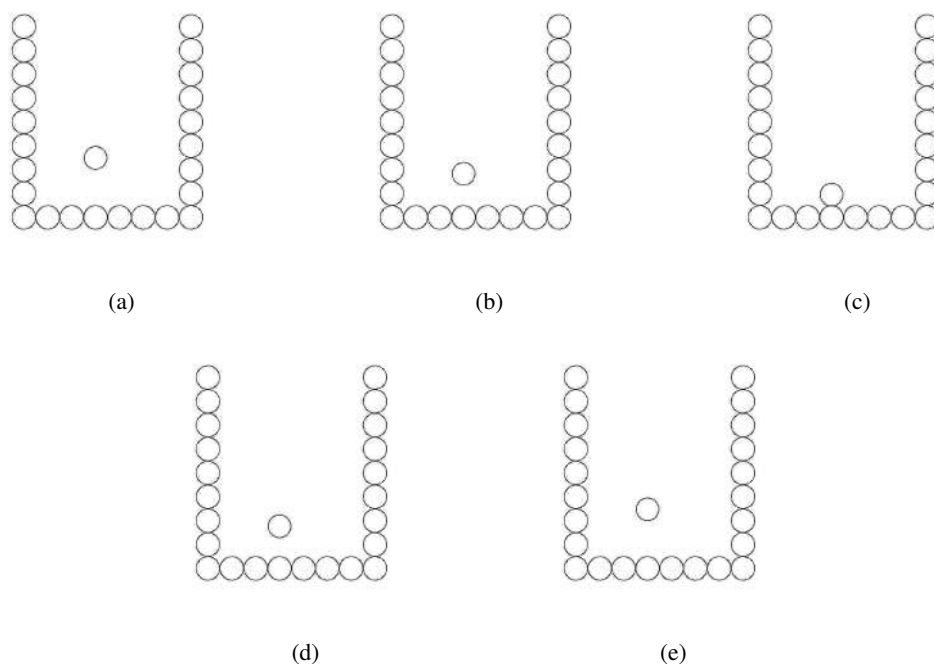


Figura 5.1: Representação de uma partícula em queda livre sem dissipação a partir de altura $y = 1,13m$. $dt = 10^{-6} s$, $k_n = 5.10^5 kg.m/s^2$.

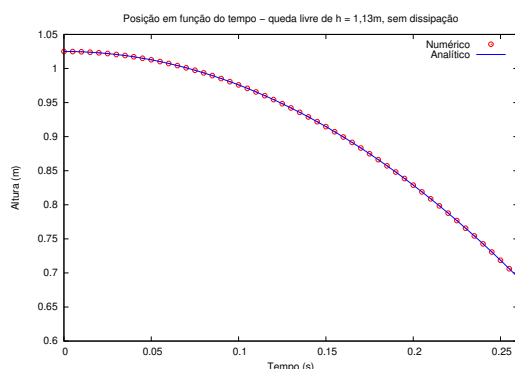


Figura 5.2: Gráfico da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

Com as equações do movimento acima em mãos, traçamos a posição e a velocidades calculadas analiticamente para uma partícula partindo do repouso de uma altura de $h = 1,025m$, nos gráficos encontrados nas Figuras 5.2 e 5.3, respectivamente. Também nestes mesmos gráficos, traçamos a solução numérica obtida pelo nosso algoritmo para estas mesmas quantidades. Note que a velocidade inicial da partícula é nula, e a posição deve variar com o quadrado do tempo, o que é indiciado pelo formato parabólico das curvas no gráfico da Figura 5.2. Um raciocínio similar nos diz que a velocidade deve variar linearmente com o tempo, o que também é visto no gráfico da Figura 5.3.

É evidente que nosso algoritmo retorna resultados perfeitamente condizentes com o previsto para uma partícula em queda livre partindo do repouso. Lembremos que estamos usando um método de quarta ordem

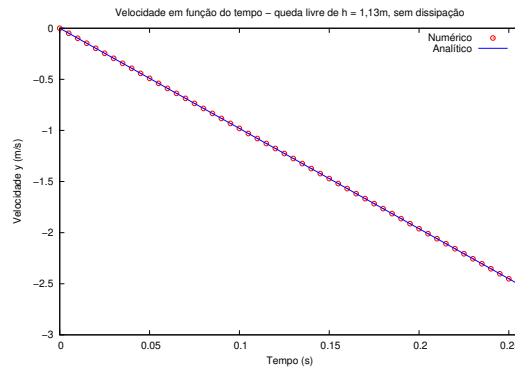


Figura 5.3: Gráfico da velocidade vertical em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

para integrar a posição, o que certamente reflete na precisão encontrada nestes gráficos. Embora usemos um método de segunda ordem para integrar a velocidade, o método utilizado é também satisfatório.

Investiguemos então se as energias cinética e potencial gravitacional do sistema estão também se comportando conforme a teoria. Pois bem, as energias cinética e potencial gravitacional de uma partícula são dadas pelas seguintes expressões:

$$E_c = m \frac{v^2}{2} \quad (5.3)$$

$$E_{pg} = mgh \quad (5.4)$$

onde v é o módulo da velocidade da partícula em um dado instante e h é a altura da partícula em um dado instante.

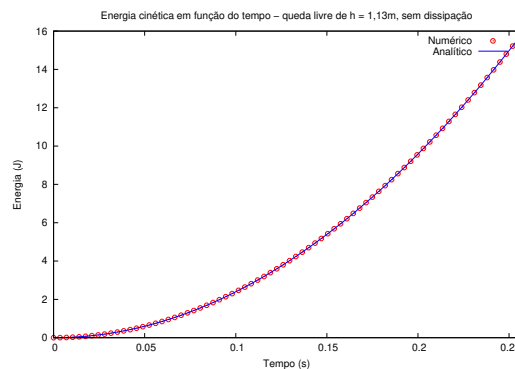


Figura 5.4: Gráfico da energia cinética em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

Os gráficos das figuras 5.4 e 5.5 apresentam, respectivamente, as energias cinética e potencial gravitacional da partícula do instante que ela é solta de $h = 1,025m$ até o ponto em que ela atinge o solo.

No gráfico da Figura 5.4, plotamos a curva obtida analiticamente segundo a equação (5.3) e a curva obtida numericamente. Vê-se que as curvas se comportam parabolicamente, já que a energia cinética é proporcional ao quadrado da velocidade e esta, por sua vez, já vimos que varia linearmente com o tempo. Além disso, percebemos que, no gráfico da Figura 5.3, o módulo da velocidade cresce ao longo do tempo -

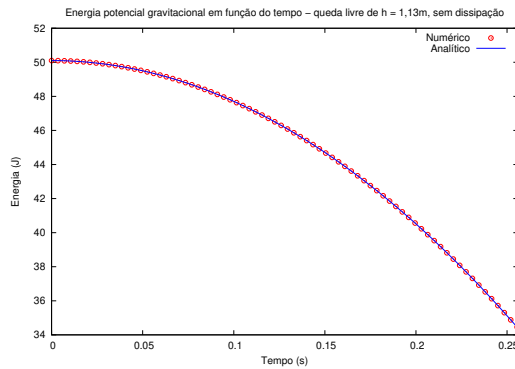


Figura 5.5: Gráfico da energia potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

de fato, a partícula está sendo acelerada pela gravidade. Isso reflete no crescimento da energia cinética ao longo do tempo a partir do instante em que a partícula é solta do repouso.

Quanto ao gráfico da Figura 5.5, a energia potencial gravitacional é também plotada com duas curvas - uma analítica, descrita pela equação (5.4), e uma obtida numericamente. As curvas também variam ao longo do tempo, assim como as curvas da energia cinética, de forma parabólica. Isso porque a energia potencial gravitacional varia linearmente com a altura, a qual varia com o quadrado do tempo; um simples rearranjo na equação (5.1) nos comprova essa última afirmação:

$$\mathbf{x} - x_0 = v_0 t + \frac{1}{2} \mathbf{a} t^2 \Rightarrow h = \frac{1}{2} g t^2 \quad (5.5)$$

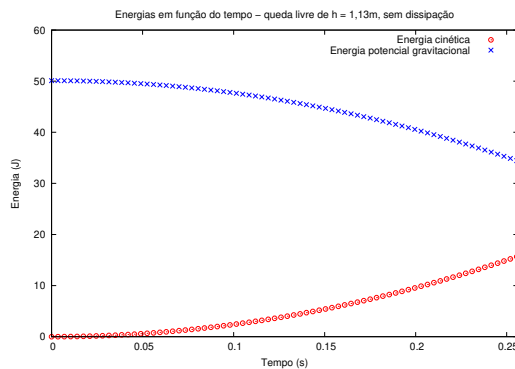


Figura 5.6: Gráfico das energias cinética, potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

Feita esta verificação, o gráfico que se encontra na Figura 5.6 nos mostra como variam as energias cinética e potencial gravitacional ao longo do tempo: qualquer aumento na energia cinética é acompanhada de uma diminuição na energia potencial gravitacional - de fato, a energia total do sistema deve ser conservada.

O gráfico da Figura 5.7 reflete essa conservação. No entanto, conforme mencionado previamente no Capítulo 3, o uso de um integrador simplético, que é o caso do método de Verlet que usamos para integrar as posições, não nos garante que a energia será conservada em nossas simulações - afinal, há erros de arredondamento inerentes à programação de algoritmos em computadores. Embora imperceptível no gráfico,

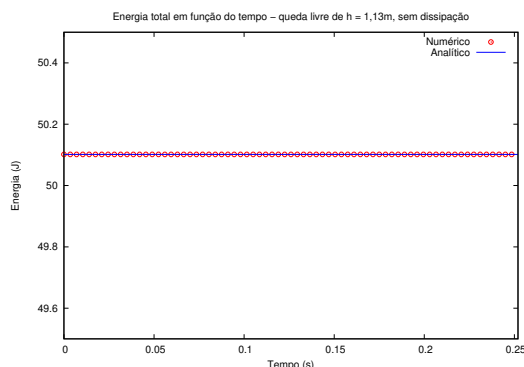


Figura 5.7: Gráfico da energia total em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

a variação da energia ocorre na ordem de 10^{-5} . A longo prazo (para simulações que representam tempos físicos mais longos), a conservação de energia em simulações que fazem uso de integradores simpléticos, quando comparada à conservação de energia em simulações que não o fazem, é mais evidente. Este é um importante esclarecimento. Todavia, objetivamos simular meios granulares em que há dissipação de energia, portanto não faremos uma análise mais profunda deste resultado neste trabalho.

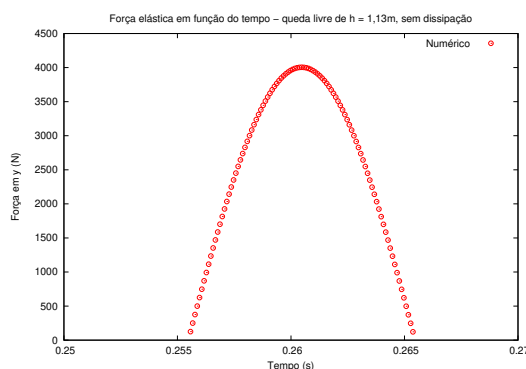


Figura 5.8: Gráfico da força elástica em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação.

O gráfico da Figura 5.8 apresenta a variação da força elástica com o tempo. Ela é não-nula somente nos intervalos de tempo em que há contato entre duas partículas - quando de fato uma colisão está ocorrendo. Como se trata de uma colisão normal de uma partícula em queda livre, é seguro afirmarmos que há força elástica somente no eixo vertical (eixo y) e plotamos então apenas a força elástica em função do tempo nesta direção. Recapitulamos que o cálculo da força elástica é feito a partir da fórmula (3.6), onde neste caso γ_n tem valor nulo pois, uma vez que o coeficiente de restituição é 1 (o momento é totalmente conservado), o cálculo de γ_n na equação (3.25) nos dá esse resultado. A força elástica é então calculada por:

$$F_e = F_n = -k_n \xi \quad (5.6)$$

Quando não há contato entre as partículas, a interpenetração é certamente nula e não há colisão; o instante em que a interpenetração passa a ser não-nula marca o início da colisão entre as partículas: elas estão em contato. Como há uma velocidade relativa de aproximação entre as partículas no início do contato (de outra forma não haveria colisão), a interpenetração cresce gradualmente, e portanto a força elástica

também cresce gradualmente.

Devemos ter em mente que a curva mostrada no gráfico é, na verdade, a *reação* que a partícula sofre pelo seu par de contato. Essa reação cresce até o ponto em que ela é o suficiente para parar o movimento desta (movimento este causado pela aceleração da partícula devido à gravidade) - a velocidade relativa se torna nula e a interpenetração é, portanto, máxima nesse instante. A partir daí, a reação da força elástica passa a agir no sentido contrário ao movimento de aproximação; a velocidade relativa muda de sentido e a interpenetração passa a diminuir e, conseqüentemente, a reação da força elástica também. A reação diminui gradualmente até o último instante em que a interpenetração é não-nula - no instante seguinte, não há mais contato e a colisão cessa.

Ademais, não podemos deixar de perceber que a curva apresentada na Figura 5.8 parece apresentar um formato parabólico. Afirmamos que isso não é verdade. A força elástica varia linearmente com a interpenetração ξ , a qual varia com o tempo segundo um movimento uniformemente variado. No intervalo de tempo entre dois instantes t e $t + dt$, a aceleração da partícula permanece constante pois a força permanece constante - de fato, usamos a força do instante t para aproximarmos as posições e velocidades em $t + dt$. Assim, entre dois instantes de tempo "adjacentes", isto é, separados por um único passo de tempo dt , a força elástica se comporta quadraticamente. É este comportamento quadrático que rende o formato parabólico visto no gráfico; como estamos calculando a força elástica em tempos discretos, não podemos dizer que a curva como um todo se comporta quadraticamente.

5.3.2 1 partícula em queda livre com múltiplas colisões com o solo

Agora que validamos o que acontece com uma partícula em queda livre do momento em que ela é solta do repouso até o ponto em que a colisão com o solo termina, vamos estender então o mesmo movimento para diversas colisões com o solo, sob as mesmas condições anteriores.

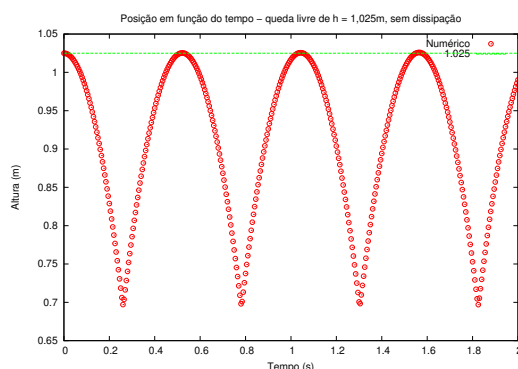


Figura 5.9: Gráfico da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo.

O gráfico presente na Figura 5.9 mostra a posição da partícula em função do tempo. Até o ponto da primeira colisão, em aproximadamente $t = 0,26s$, o gráfico é idêntico àquele apresentado na figura 5.2. Conforme esperado, após a primeira colisão, a partícula retorna para a mesma posição a qual ela foi soltada do repouso, $h = 1,025m$, segundo a equação (5.1). A diferença é que, no primeiro instante pós-colisão, a partícula possui uma velocidade não-nula de sentido contrário à aceleração gravitacional: o termo v_0t

compete com o termo $a\frac{t^2}{2}$, que cresce mais rapidamente, logo eventualmente $v_0t = a\frac{t^2}{2}$, o que nos deixa com $x = x_0 = 1,025m$.

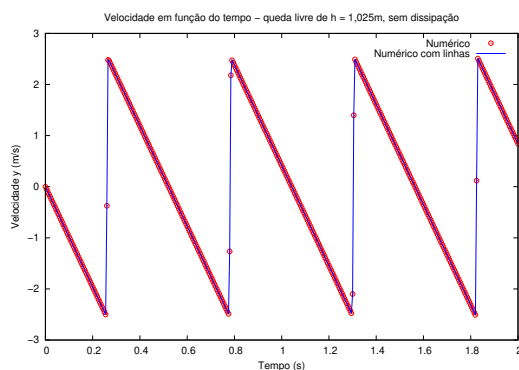
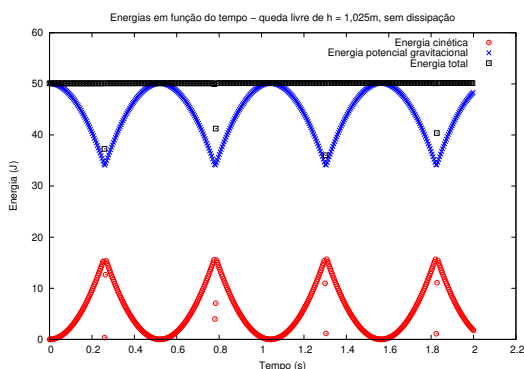
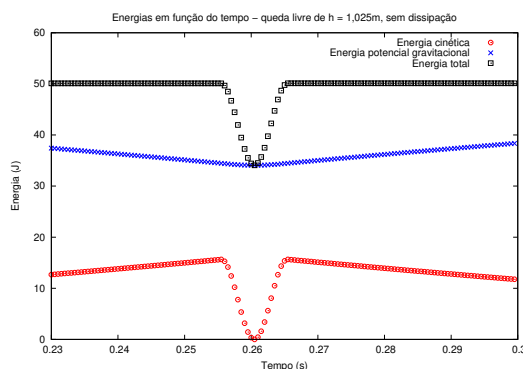


Figura 5.10: Gráfico da velocidade vertical em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo.

Quanto à velocidade, o gráfico da Figura 5.3 é também idêntico, do momento em que a partícula é solta do repouso até o final da primeira colisão com o solo, ao gráfico da Figura 5.10. Vemos no gráfico da Figura 5.10 que a velocidade da partícula tem sentido para baixo até o momento em que a velocidade relativa entre o par de contato se torna nula; a partir de então, a velocidade cresce, mas no sentido contrário, durante a segunda parte da colisão (da velocidade relativa nula até o final do contato), de tal forma que, ao final desta, ela possui sentido para cima e mesmo módulo da velocidade que o último instante de pré-colisão. A velocidade então decai linearmente conforme a equação horária (5.2), até o instante em que ela se torna nula. Nesse mesmo instante, a partícula atinge sua altura inicial $x_0 = 1,025m$ novamente. O mesmo processo se repete periodicamente, da posição inicial da partícula (onde sua velocidade é nula) até o ponto em que ela retorna para essa mesma posição depois de sofrer uma colisão com o solo.



(a) Energias cinética, potencial gravitacional e total



(b) Detalhe das energias

Figura 5.11: Gráfico das energias cinética e potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo.

O gráfico (a) da Figura 5.11 apresenta a variação das energias cinética, potencial gravitacional e total ao longo do tempo. Entre duas colisões, podemos perceber que a energia cinética começa decrescendo pois a partir do instante em que a colisão da partícula com seu par de contato cessa, ela possui uma velocidade no sentido contario da aceleração gravitacional - a partícula vai então perdendo velocidade e, portanto,

energia cinética. Essa perda é quadrática pois a energia cinética é proporcional ao quadrado da velocidade, e esta última varia linearmente com o tempo. O ganho de energia cinética que ocorre na queda da partícula a partir de quando a partícula atinge novamente a altura inicial se comporta da mesma forma explicada previamente.

No primeiro instante pós-colisão com o solo, vemos que a partícula ganha energia potencial gravitacional ao longo do tempo, até atingir um valor máximo (quando a partícula atinge sua altura inicial novamente). Após a partícula colidir com o solo, sua altura aumenta até atingir a altura inicial, conforme já explicado, o que reflete em um aumento da energia potencial gravitacional. A altura varia com o quadrado do tempo, portanto a variação desta energia também se dá de forma quadrática.

Podemos também no gráfico (a) da Figura 5.6 que a energia total permanece constante ao longo do tempo. O gráfico (b), por sua vez, mostra o que acontece com a energia cinética durante uma colisão. Durante uma colisão, a atuação da força elástica implica na existência de uma energia potencial elástica em cada instante da colisão. Esta energia potencial elástica varia segundo a seguinte expressão:

$$E_{pe} = k_n \frac{\xi^2}{2} \quad (5.7)$$

A energia potencial elástica é a energia mecânica potencial que é armazenada na configuração da partícula de acordo com o trabalho gerado para deformar a partícula - trabalho este que ocorre devido à reação da força elástica provocada pelo seu par de contato.

O pico que é visto no gráfico (b) da Figura 5.6 é então devido à energia potencial elástica, que cresce do início da colisão até o momento em que a velocidade relativa é zerada, e então decresce até o final da colisão, já que a interpenetração ξ varia desta mesma forma. A variação desta energia é quadrática pois varia com o quadrado de ξ , segundo a equação (5.7). Ademais, como o par de contato da partícula em questão está fixo, quando a velocidade relativa se torna nula no instante de máxima interpenetração, necessariamente a velocidade da partícula é zero - e portanto a energia cinética dela cai a zero, como vemos no gráfico. A energia potencial gravitacional permanece inalterada pois varia somente com a altura h - afinal, a massa e a aceleração da gravidade são constantes. Por outro ponto de vista, a energia total da partícula quando em uma colisão é contabilizada pela seguinte forma, quando levadas em conta somente colisões normais:

$$E_{total} = E_{pg} + E_{pe} + E_c \quad (5.8)$$

Assim, se a energia potencial gravitacional não apresenta picos, qualquer aumento na energia potencial elástica deve ser acompanhado de uma diminuição correspondente na energia cinética, e vice-versa.

O gráfico da Figura 5.12 apresenta a variação da força elástica com o tempo. Evidentemente, a força elástica é nula para todos os instantes, excetuando-se aqueles em que a partícula está em colisão com o solo. A força elástica varia da mesma forma para todas as colisões pois, como há conservação de energia, a partícula sempre iniciará a colisão com a mesma velocidade inicial, e portanto a velocidade relativa será a mesma (pois a partícula do solo está fixada). Também, a interpenetração máxima será igual para todas as colisões, logo o mesmo será verdade para a força elástica máxima.

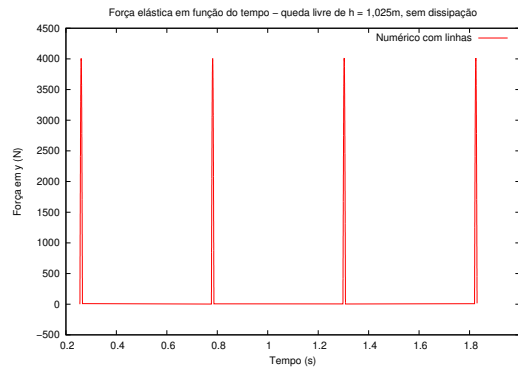


Figura 5.12: Gráfico da força elástica em função do tempo de uma partícula em queda livre sem dissipação com múltiplas colisões com o solo.

5.3.3 2 partículas movimento horizontal colisão normal

No caso teste de 2 partículas em movimento horizontal com colisões normais sem gravidade, o movimento de cada partícula não é uniformemente variado, mas sim uniforme. As partículas são impostas com uma velocidade inicial dada, iguais em módulo. As equações horárias que descrevem o movimento uniforme são as seguintes:

$$x = x_0 + vt \tag{5.9}$$

$$v = v_0 + at \tag{5.10}$$

As partículas iniciam seu movimento de posições pré-definidas: a partícula 1 possui posição inicial 0,815m e a partícula 2, posição inicial de 1,655m. Uma representação esquemática dessa situação é mostrada na Figura 5.14.

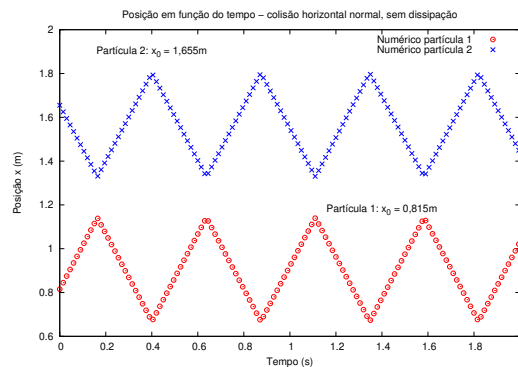


Figura 5.13: Gráfico da posição x em função do tempo de 2 partículas sem dissipação.

O gráfico da Figura 5.13 nos mostra a variação da posição de ambas as partículas com o tempo. Vemos que a posição da partícula 1 começa crescendo; isso porque impomos a ela uma velocidade positiva, isto é, no sentido positivo do eixo horizontal x , e a posição da partícula 2 começa decrescendo já que impomos a ela uma velocidade negativa, de tal forma que as duas entrem em contato na média das posições iniciais

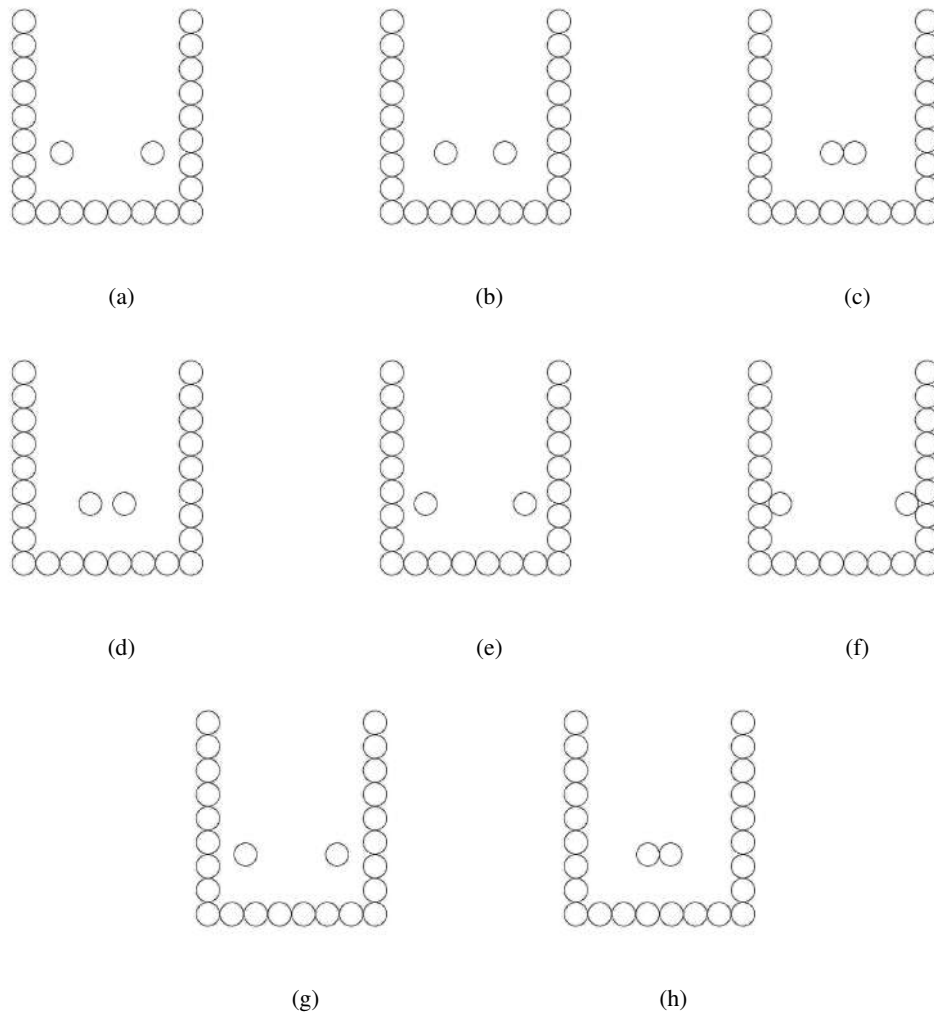


Figura 5.14: Representação de 2 partículas em colisão normal horizontal sem dissipação.

das partículas, i.e. $\frac{0,815+1,655}{2} = 1,235m$. Este valor é a posição em que está o ponto de contato quando as partículas começam a colidir.

Após a colisão, o sentido das velocidades é revertido e as partículas se movem no sentido contrário àquele anterior à colisão. O momento em que elas sofrem outra colisão, aproximadamente no instante $t = 0,4s$, é o instante em que elas colidem com a parede. A variação da posição é linear pois o movimento é uniforme - a velocidade é constante, e portanto a posição é proporcional ao tempo de forma linear, como esperado da equação (5.10).

No gráfico da Figura 5.15, estão plotadas as variações das velocidades de cada partícula com o tempo. Podemos notar que a velocidade da partícula 1 é positiva (está no sentido positivo do eixo horizontal) e a da partícula 2 é negativa (sentido negativo), mas são iguais em módulo. Vemos também que, ao final da colisão, a velocidade de cada partícula muda de sentido. Como a colisão representa apenas um brusco evento quando comparado com toda a evolução da dinâmica do sistema, essa mudança está representada por poucos pontos - no entanto, garantimos que essa mudança da velocidade que ocorre durante as colisões é gradativa e bem resolvida.

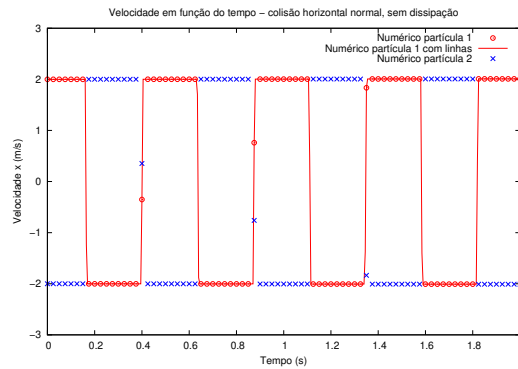


Figura 5.15: Gráfico da velocidade horizontal em função do tempo de 2 partículas sem dissipação.

Os gráficos (a) e (b) da Figura 5.16 mostram a variação das forças elásticas das duas partículas. No gráfico (a), vemos com mais clareza que as colisões de fato são muito rápidas quando comparadas com a evolução inteira do sistema. O gráfico (b) tenta capturar com maior detalhe como variam as forças elásticas com o tempo. Elas variam da mesma forma que na análise feita para o caso de queda livre de 1 partícula anteriormente; a natureza das colisões é a mesma pois a força normal se comporta igualmente.

Damos atenção ao fato de que as colisões não apresentam sempre as mesmas forças elásticas máximas. Isso porque, para cada partícula, a primeira colisão mostrada no gráfico (b) corresponde à colisão com a outra partícula móvel, e a segunda, à colisão com a parede, que é modelada como uma partícula fixa. Isso implica que a velocidade relativa ao início da primeira colisão plotada na figura (b) é o dobro da velocidade relativa ao início da colisão com a parede. Daí, a interpenetração da primeira será duas vezes maior que a interpenetração da segunda e, conseqüentemente, a força elástica se comportará também na mesma proporção.

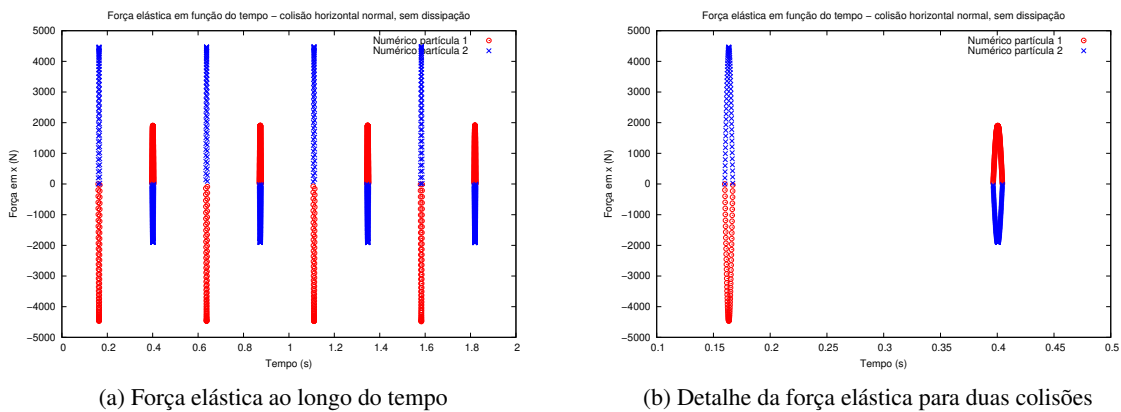


Figura 5.16: Gráficos da força elástica horizontal em função do tempo de 2 partículas sem dissipação.

5.4 Força normal: casos com dissipação de energia

Até agora validamos casos-teste em que não há qualquer força dissipativa. Agora, iremos validar para os mesmos casos anteriores na situação em que ocorre dissipação de energia. Os parâmetros como posições

e velocidades iniciais foram mantidos e fixamos $k_n = 5.10^5 \text{ kg.m/s}^2$. Mantemos também o passo de tempo como $dt = 10^{-6} \text{ s}$.

5.4.1 1 partícula em queda livre

Na Figura 5.17, temos um esquema do caso de queda livre com dissipação. É possível ver que a partícula não retorna novamente para a mesma altura inicial, e eventualmente permanece em contato com o solo. Apresentaremos nossos gráficos sempre comparando as situações com coeficiente de restituição $e_n = 0,87$ e com $e_n = 0,3$.

Os gráficos da Figura 5.18 mostram a variação da posição da partícula com o tempo. Além de a partícula retornar para uma altura sempre menor do que antes de cada colisão com o solo, note que a partícula também *descende* até uma altura menor a cada colisão, até se estabilizar na altura de aproximadamente $h = 0,705 \text{ m}$. Isso porque, para a primeira colisão, a velocidade com que a partícula em queda livre entra no evento da colisão é a maior possível ao longo da evolução do sistema - com isso, a interpenetração máxima é maior, e portanto o centro da partícula consegue atingir alturas menores do que $h = 0,705 \text{ m}$.

Quando a partícula começa a atingir o equilíbrio, a interpenetração não é tão grande quanto aquelas das primeiras colisões, mas é ainda existente, mas que acaba se tornando imperceptível no gráfico. Este fenômeno é mais bem visualizado no gráfico (a). No gráfico (b), há uma maior dissipação, e vemos então que a posição decai mais rapidamente, e o equilíbrio é atingido aproximadamente 5 vezes mais rápido. É importante lembrarmos que o coeficiente de restituição não corresponde à porcentagem com que a energia é dissipada, mas à rapidez com que ocorre essa dissipação - é isto que nos diz a equação (3.17).

Na Figura 5.19 apresentamos os mesmos gráficos da posição com mais detalhes: conseguimos ver como se dá o equilíbrio da partícula - quando praticamente toda a energia é dissipada. Notamos também que a partícula atinge um *plateau* por volta da altura de $h = 0,705 \text{ m}$, o que pode ser visto com mais facilidade no gráfico (b). No gráfico (a), o efeito de que a interpenetração máxima de cada colisão diminuir ao longo do tempo fica mais evidente.

Já na Figura 5.20, temos a variação da velocidade da partícula com o tempo. Devido à existência de dissipação, o envelope de oscilações que vai definir o decaimento da velocidade é justamente o coeficiente de restituição e_n (ver definição na equação (3.17)). Não outras mudanças significativas em relação ao caso sem dissipação à parte do decaimento da velocidade: o comportamento é ainda linear.

A variação das energias cinética e potencial gravitacional da partícula apresentadas no gráfico 5.21 possuem um aspecto similar ao que explicamos anteriormente no caso sem dissipação. Novamente, a diferença está na rapidez com que a energia é dissipada no caso de um coeficiente de restituição menor, como no gráfico (b), em comparação a um coeficiente de restituição maior, como no gráfico (a).

Agora, plotamos nos gráficos da Figura 5.22 a variação das forças elástica e viscosa no decorrer do tempo. Antes de tudo, informamos que as variações da força viscosa que ocorrem entre duas colisões são, na verdade, inexistentes. Eles são provenientes da escolha de usar linhas para representar o resultado numérico com a finalidade de melhor visualizar os resultados. Um gráfico mais detalhado para cada coeficiente de restituição que abordamos aqui pode ser encontrado na Figura 5.23. De primeira instância, vemos que a força elástica máxima é cada vez menor a cada colisão - de fato, a interpenetração máxima decai, o que

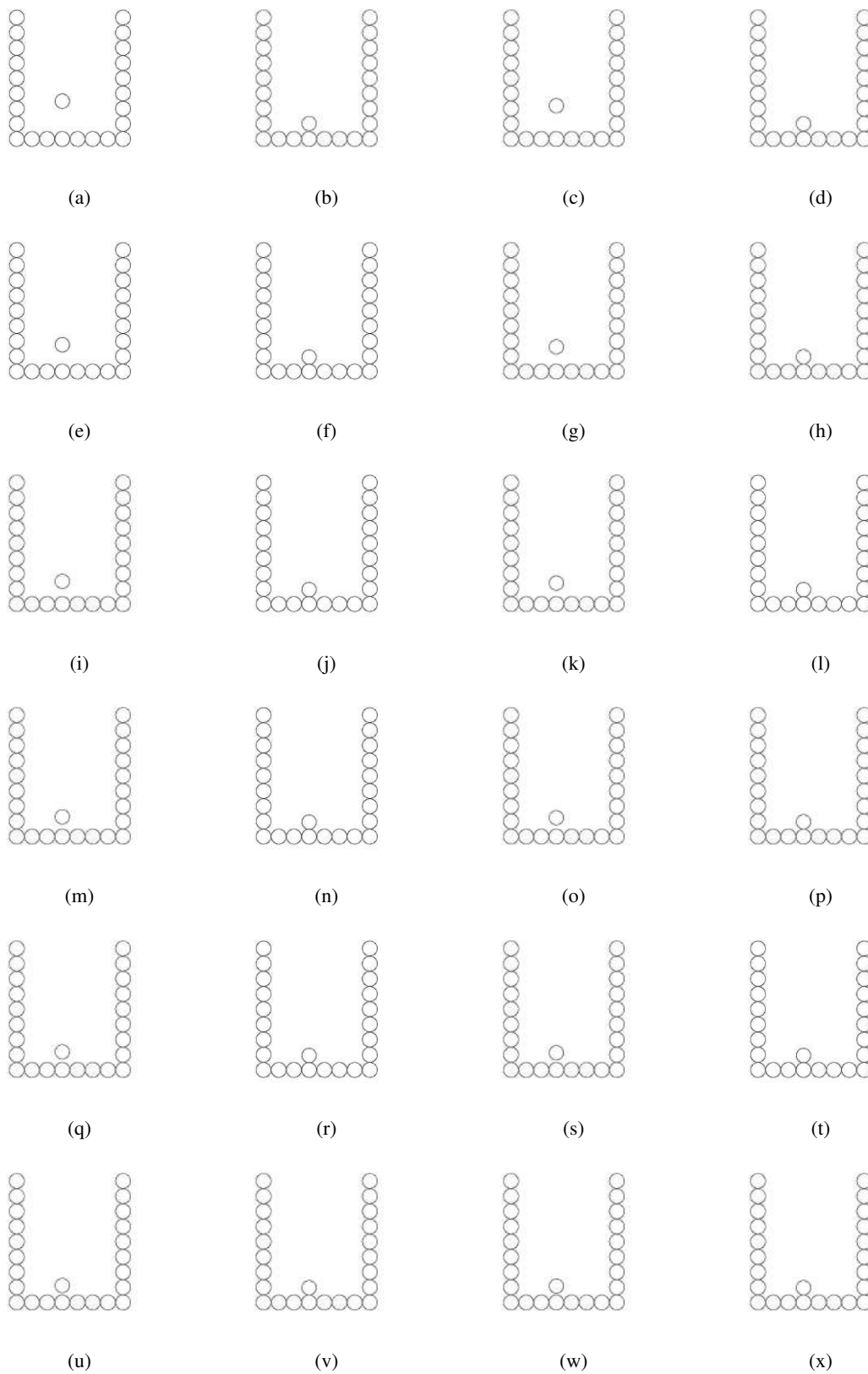
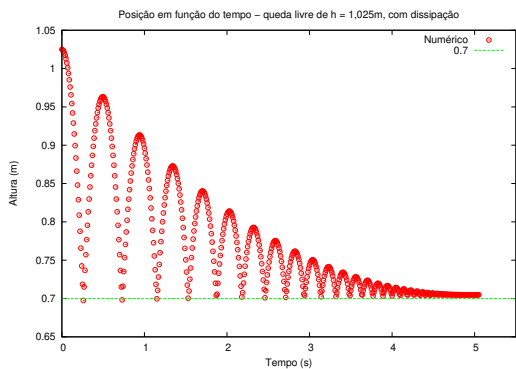
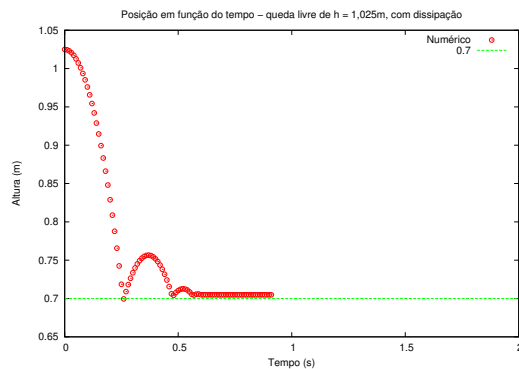


Figura 5.17: Representação de uma partícula em queda livre com dissipação a partir de altura.

influencia diretamente no decaimento da força elatica máxima.

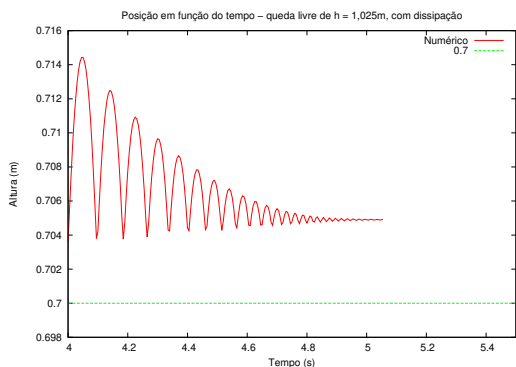


(a) $e_n = 0,87$.

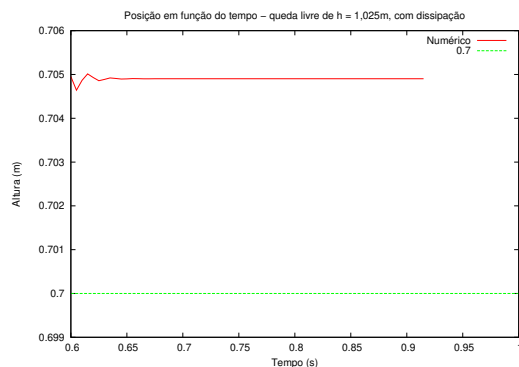


(b) $e_n = 0,30$

Figura 5.18: Gráficos da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação.

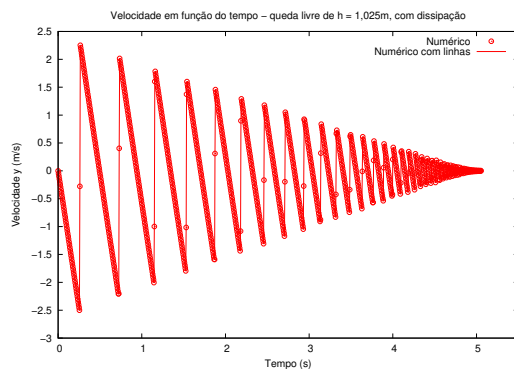


(a) $e_n = 0,87$.



(b) $e_n = 0,30$

Figura 5.19: Detalhes dos gráficos da altura em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação.



(a) $e_n = 0,87$.

Figura 5.20: Gráfico da velocidade em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação.

Pelo que podemos ver em ambos os gráficos (a) e (b), mas que certamente é mais nítido no gráfico (a), é que o envelope de oscilações da força elástica parece apresentar um carácter linear. Ademais, podemos garantir que o envelope de oscilações da força viscosa apresenta também um carácter linear, devido ao envelope no caso das velocidades apresenta carácter linear - a equação (3.6) nos mostra que a força viscosa varia linearmente com a velocidade relativa do par de contato.

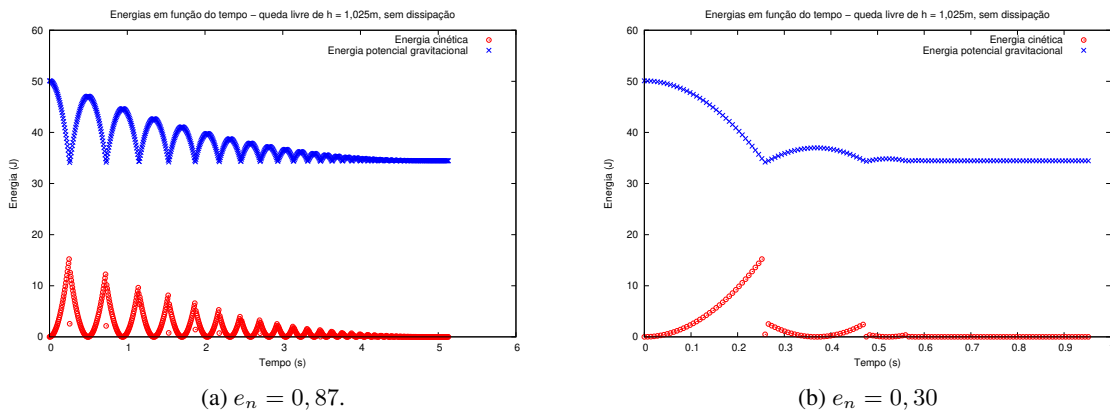


Figura 5.21: Gráficos das energias cinética e potencial gravitacional em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação.

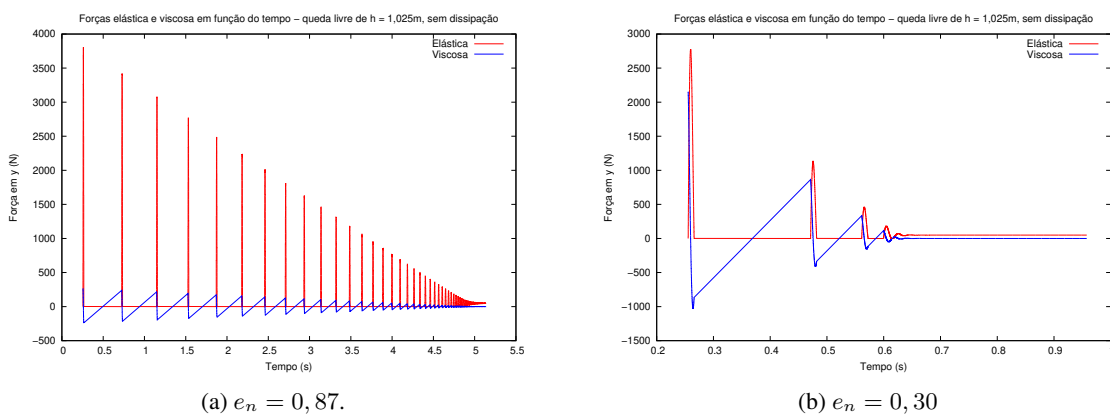


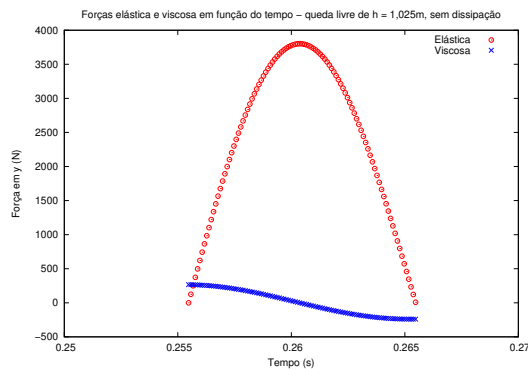
Figura 5.22: Gráficos das forças elástica e viscosa em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação.

Um outro aspecto, evidenciado melhor no gráfico (b), é o fato de, a partir do instante de velocidade relativa nula até o final de cada colisão, a contribuição da força elástica na força normal resultante é parcialmente contrabalanceada pela força viscosa - o que resulta na perda de energia; a inexistência de uma força viscosa implicaria na conservação da energia ao final de cada colisão, como vimos anteriormente.

Com mais detalhe, os gráficos da Figura 5.23 nos mostram como variam as forças elástica e viscosa durante uma colisão. Repetimos a mesma análise feita no caso de queda livre sem dissipação: a força elástica cresce do início da colisão até o momento em que a velocidade relativa é nula e a interpenetração é máxima, e então decresce até o final da colisão. Quanto à força viscosa, no início da colisão, a velocidade relativa é máxima, e portanto a força viscosa é máxima e atua no mesmo sentido da força elástica. Do início da colisão até o instante em que a velocidade relativa é nula, a força viscosa decresce até zero, e então passa a decrescer até um valor negativo (em módulo, há um crescimento da força viscosa).

5.4.2 2 partículas em colisão horizontal normal

Assim como no caso sem dissipação, as partículas iniciam seu movimento das seguintes posições: a partícula 1 da posição inicial $0,815m$ e a partícula 2 da posição inicial de $1,655m$. O mesmo esquema



(a) $e_n = 0,87$.

Figura 5.23: Detalhe dos gráficos das forças elástica e viscosa em função do tempo de uma partícula em queda livre com dissipação.

do caso não dissipativo pode ser usado (Figura 5.14). Aqui, optamos por mostrar somente o caso em que $e_n = 0,3$.

Na Figura 5.24, podemos ver como variam as posições de cada uma das partículas com o tempo, e logo percebemos que, diferentemente do comportamento periódico visto no gráfico da Figura 5.13, as partículas demoram mais tempo para retornar às posições iniciais a cada colisão que sofrem; de fato, o coeficiente de restituição provoca uma diminuição da velocidade de pré-colisão - a partícula sai da colisão mais lenta.

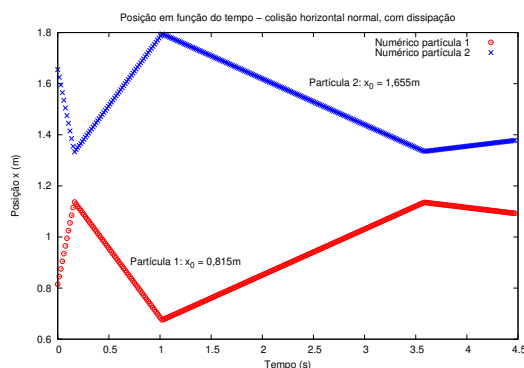


Figura 5.24: Gráfico das posições x em função do tempo de 2 partículas sem dissipação.

Na Figura 5.25, o gráfico das velocidades das 2 partículas nos revela justamente o que explicamos anteriormente, mas ressaltamos: a dissipação de energia provoca uma diminuição entre as velocidades nos instantes de pré-colisão e pós-colisão, e a partícula diminui sua velocidade a cada colisão. A alternância de sinal das velocidades de cada partícula é proveniente das colisões com a outra partícula móvel e com a parede.

Não plotamos os gráficos das forças elástica e energias aqui pois eles são idênticos aos gráficos das Figuras 5.22 e 5.21.

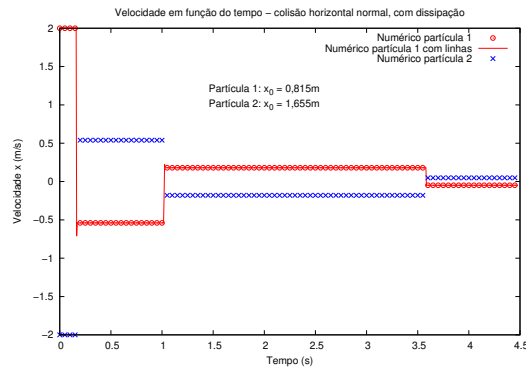


Figura 5.25: Gráfico das velocidades horizontais em função do tempo de 2 partículas sem dissipação.

5.5 Força tangencial

Embora uma validação mais rigorosa deva envolver casos do movimento de uma partícula em planos horizontais e inclinados, com e sem rotação para garantir que o atrito está agindo corretamente, iremos nos limitar ao caso de uma partícula solta do repouso com choque oblíquo. Isso porque este caso é essencialmente o que acontece em cada colisão entre um par de grãos.

Na Figura 5.26, temos a queda de uma partícula que irá sofrer uma colisão normal. Note que, diferentemente dos casos anteriores, a partícula móvel, que é solta do repouso, possui um traço que parte do seu centro e tem o tamanho do seu raio; usamos deste artifício gráfico para mantermos controle da rotação da partícula. Para este caso, como a colisão é totalmente normal, não há velocidade tangencial relativa e, portanto, não há torque. Não havendo torque, não haverá força de atrito dinâmico que atua nela.

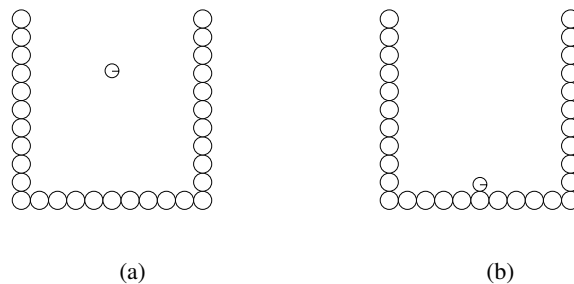


Figura 5.26: Uma partícula solta do repouso em uma colisão totalmente normal com rotação não sofre força de atrito.

Assim, imprimamos ao choque desta partícula com o fundo do recipiente uma parcela oblíqua, como na Figura 5.27. Como esperado, a partícula pende para a direita, e desliza sobre a partícula do fundo para então depositar-se entre duas partículas da fronteira. Se não houvesse rotação presente, o choque normal iria lançar a partícula na mesma componente da direção do choque normal, e não ocorreria o deslizamento. Ademais, há força de atrito pois a partícula, quando está parada, não sofre rotação. Caso contrário, após deslizar, ela conservaria sua energia rotacional, pois não há outra forma dessa energia ser dissipada a não ser pelo atrito dinâmico.

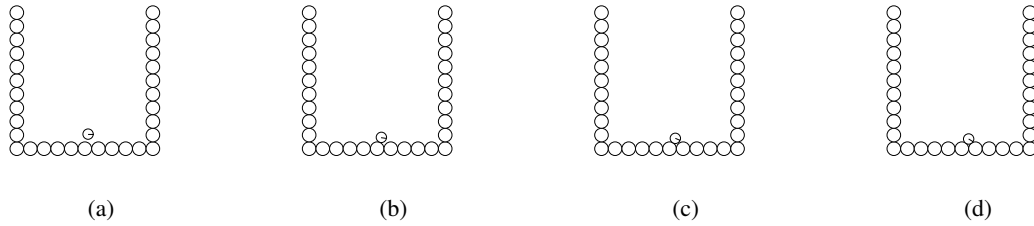


Figura 5.27: Uma partícula solta do repouso em uma colisão oblíqua com rotação sofre força de atrito.

Vemos isso nos gráficos da Figura 5.28; na Figura 5.28a, a energia cinética sobe até o ponto da colisão com o fundo do recipiente, e após a partícula começar a deslizar, ela volta a adquirir energia cinética, parando novamente quando se equilibra entre duas partículas da fronteira.

No gráfico da Figura 5.28b, vemos que no mesmo instante em que a partícula colide com a partícula da fronteira, a energia potencial gravitacional para brevemente, e passa a descer novamente quando a partícula começa a deslizar; a energia potencial gravitacional chega então num *plateau* quando se equilibra entre as partículas do fundo.

Quanto ao gráfico da Figura 5.28c, nota-se que a energia rotacional é nula até o momento da colisão, quando cresce rapidamente (quando a partícula passa a sofrer um torque resultante não-nulo). Daí, quando começa a deslizar, ela adquire energia rotacional devido ao torque gerado, mas que é logo parada quando ela se equilibra entre as partículas do lado. Ademais, sua rotação é parada pela força de atrito que atua no sentido contrário ao torque que é provocado pela colisão.

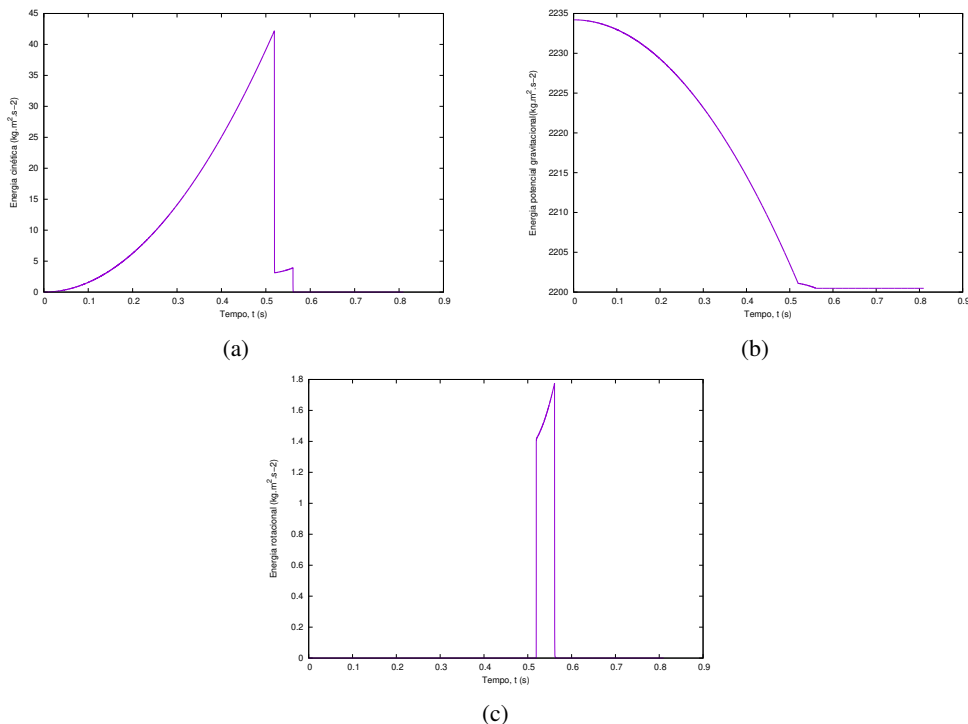


Figura 5.28: Evolução das energias cinética, potencial gravitacional e rotacional ao longo do tempo para a colisão oblíqua de uma partícula com rotação com atrito dinâmico presente.

Capítulo 6

Gerando a Condição Inicial e Cavando o Leito

“ And I asked myself about the present: how wide it was, how deep it was, how much was mine to keep.

E eu me perguntei sobre o presente: o quão largo ele era, o quão profundo ele era; o quanto dele era meu para guardar. ”

Kurt Vonnegut Jr., *Slaughterhouse-Five*

No Capítulo 5, realizamos simulações de casos teste como queda livre, colisões horizontais e rotação de partículas com o intuito de validar nosso código. Com isso, fomos capazes de definir a configuração básica para simulações de maior escala, isto é, com uma quantidade maior de partículas, que possuem uma dinâmica complexa. Como visto anteriormente, a modelagem que fizemos foca em calcular interações entre pares de contato - assim, já que obtivemos sucesso em reproduzir os casos base para colisões essencialmente binárias, o aumento do número de partículas em recipientes maiores se tornam uma mera extensão das combinações dos casos que validamos.

Como discutido ao propormos o problema a ser estudado neste trabalho, procuramos realizar simulações numéricas usando algoritmos da teoria de dinâmica molecular de esferas moles para simular o despejo de um leito de grãos em um recipiente a partir de uma dada configuração inicial. Daí, desejamos cavar deste leito uma cavidade retangular, cuja evolução resulta então no colapso da cratera granular. Em resumo, os cálculos das forças da interação foram feitos explicitamente para cada par, e o problema da busca de vizinhos de complexidade $\mathcal{O}(N^2)$ foi contornado utilizando um algoritmo conhecido como lista de Verlet com *linked cells*, de complexidade $\mathcal{O}(N \log N)$, o que diminui consideravelmente o custo computacional para as simulações. Feito isto, partimos para as simulações do problema proposto no Capítulo 2, que se dividem em três etapas:

- Etapa 1: Evolução da *configuração inicial* (Figura 4.1) até o que chamamos de *condição inicial*, onde o sistema está pronto para ser cavado. Representado na Figura 6.1.
- Etapa 2: Obtenção da *cavidade*, com formato retangular pré-definido, a partir da condição inicial. Representado na Figura 6.2.
- Etapa 3: Evolução da cavidade até o colapso em uma cratera. Representado na Figura 6.3.

O presente Capítulo foca na realização da primeira e segunda etapas, pavimentando o caminho para o Capítulo seguinte, onde finalmente estudamos os aspectos do colapso de uma cratera granular.

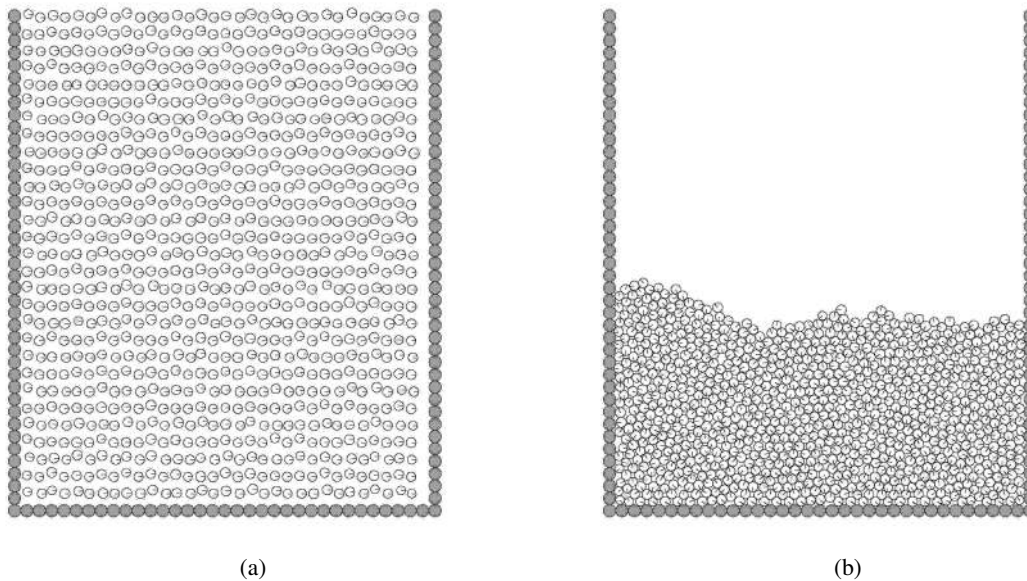


Figura 6.1: Etapa 1. Evolução da *configuração inicial* (a) até a *condição inicial* (b). 1000 partículas.

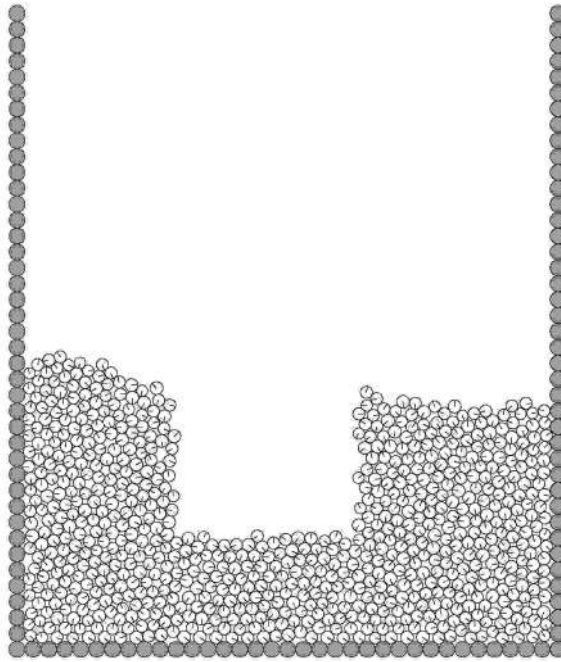


Figura 6.2: Etapa 2: Cavando a superfície livre do leito de grãos. 1000 partículas.

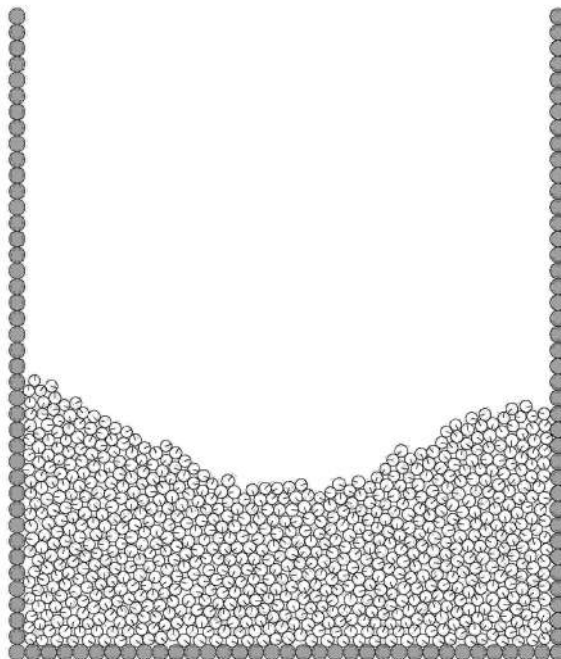


Figura 6.3: Etapa 3: Colapso da *cavidade* pré-definida em uma *cratera* metaestável. 1000 partículas.

6.1 Gerando a condição inicial

Para que geremos a condição inicial a qual estará pronta para ser cavada, partimos de uma configuração inicial, conforme a Figura 6.1a, que é diferente a cada vez que repetimos a simulação.

Para que a condição inicial (mostrada na Figura 6.1b possua, no leito granular, uma superfície livre aproximadamente paralela à fronteira inferior (o fundo do recipiente), devemos gerar configurações iniciais de tal forma que as partículas caiam umas sobre as outras por camadas. No entanto, simplesmente *definir* a condição inicial remove parte da natureza de materiais granulares de se reproduzir um mesmo evento duas vezes, além de ser trabalhosa. Para tanto, iremos nos aproveitar da evolução do sistema e além disso, em vez de despejarmos os grãos de forma centralizada, tal qual a partir de uma abertura, de como quem despejaria areia para fora de uma garrafa, o faremos com uma *configuração inicial* conhecida como *rain-like* (como chuva). Isso nos garante que a obtenção da *condição inicial* será alcançada em um tempo computacional menor e que a superfície livre será aproximadamente paralela, e não em forma de pilha.

A configuração *rain-like* faz com que o recipiente gradualmente preencha, a uma taxa aproximadamente uniforme, a área do fundo. Conforme a Figura 6.1a, vemos que as partículas possuem inicialmente uma disposição enfileirada, o que poderia gerar certa predicabilidade à *condição inicial* e, possivelmente, ao formato final da cratera obtida. No entanto, asseguramos que as condições iniciais, embora tenham em comum que a superfície livre do leito de cada uma delas seja aproximadamente paralela ao fundo do recipiente, são geradas de forma diferente: embora as posições das partículas sejam enfileiradas em linhas e colunas, cada linha e coluna é levemente desviada do eixo. Tais desvios variam de um desvio nulo até um certo desvio máximo, e o desvio que uma dada partícula sofre do enfileiramento usual cai dentro desse intervalo, cuja escolha é feita a partir de um gerador de números aleatórios (por uma função intrínseca à linguagem de programação FORTRAN 90). Além disso, essa deviação é feita separadamente para as linhas e colunas de partículas.

À parte da aleatoriedade conferida a cada *configuração inicial*, os tamanhos das partículas também influenciam na *condição inicial*. Por isso, as partículas sempre apresentarão um grau de polidispersidade (isto é, o quanto seus raios variam em torno de um raio médio). Em todas as nossas simulações, escolhemos um grau de polidispersidade de 8%, sendo o raio de uma dada partícula gerado do mesmo modo que sua posição: dado um raio médio R^* , a partícula pode ter um raio máximo de $R^* + 8\%$ e um raio mínimo de $R^* - 8\%$, sendo ele definido dentro deste intervalo a partir de um gerador de números aleatórios. A distribuição dos raios das partículas em torno do raio médio é uniforme.

O grau de polidispersidade é escolhido tão somente para evitar o efeito de cristalização do sistema, como na Figura 6.4: quando partículas de mesmo tamanho são imersas num mesmo recipiente, naturalmente conjuntos de partículas se agregam em um empilhamento ordenado, com graus de empacotamento locais próximos ao grau ótimo.

Com isso, de início pudemos gerar diferentes condições iniciais para diversos números de partículas. As Figuras 6.5, 6.6, 6.7, 6.8 e 6.9 mostram a evolução de 5 sistemas diferentes, com 49, 89, 219, 471 e 995 partículas, respectivamente. Para estas, assim como para as simulações que irão seguir ao longo deste trabalho, a menos que explicitamente indique-se o contrário, os parâmetros foram fixados como (todos os parâmetros físicos em unidades do SI):

- Massa específica dos grãos: $\rho = 1190 \times 10^3$ (acrílico [?])
- Coeficiente elástico: $k = 7 \times 10^5$
- Coeficiente de dissipação normal viscosa: $\gamma = 1.5 \times 10^3$

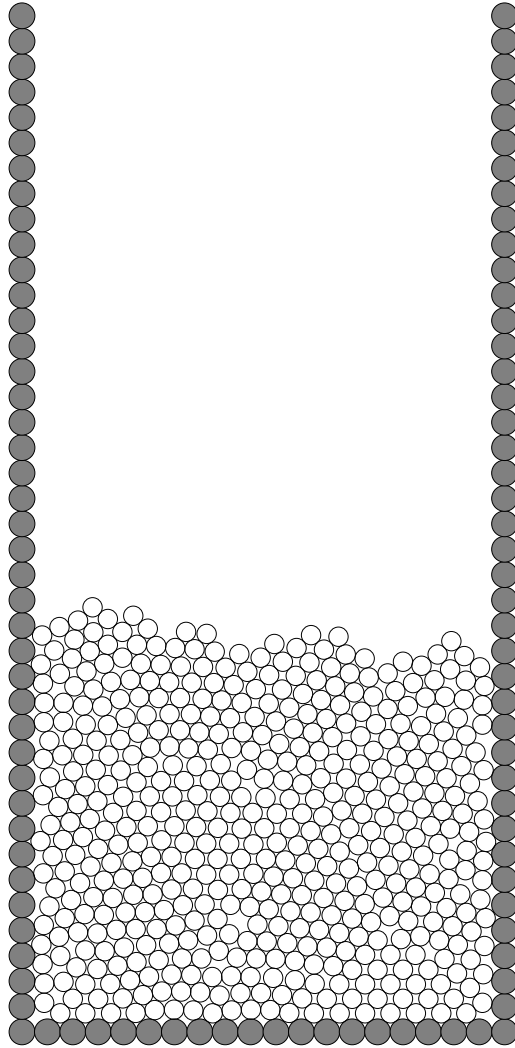


Figura 6.4: Partículas monodispersas tendem a se cristalizar.

- Coeficiente de atrito dinâmico: $\mu_s = 0.5$
- Coeficiente de regularização do atrito dinâmico: $\gamma_s = 5.0$
- Aceleração gravitacional: $g = 9.806$
- Passo de tempo: $dt = 10^{-5}$
- Raio das partículas da fronteira (raio máximo): $r_{max} = 0.105$
- Raio médio das partículas: $r_{med} = 0.08$
- Grau de polidispersidade: 8%
- Tolerância para energias cinética e rotacional total do sistema em que se julga equilíbrio: $tol = 0.1$
- Folga média entre duas colunas de partículas na configuração inicial: $0.005 \times r_{max}$
- Folga média entre duas linhas de partículas na configuração inicial: $0.75 \times r_{max}$
- Grau de desvio entre partículas em colunas adjacentes na configuração inicial: 5%
- Grau de desvio entre partículas em linhas adjacentes na configuração inicial: 8%

Além disso, todas as partículas partem do repouso.

Asseguramo-nos então de que as simulações estão funcionando bem e os sistemas simulados também apresentaram bons comportamentos, condizentes com a física prevista. Vemos que, a olho nu, o sistema de fato dissipa sua energia e, além disso, os grãos de fato sofrem rotação. A partir deste ponto, estamos prontos para adicionar artifícios que, no Capítulo 7, nos ajudarão a realizar as análises da dinâmica do colapso que almejamos.

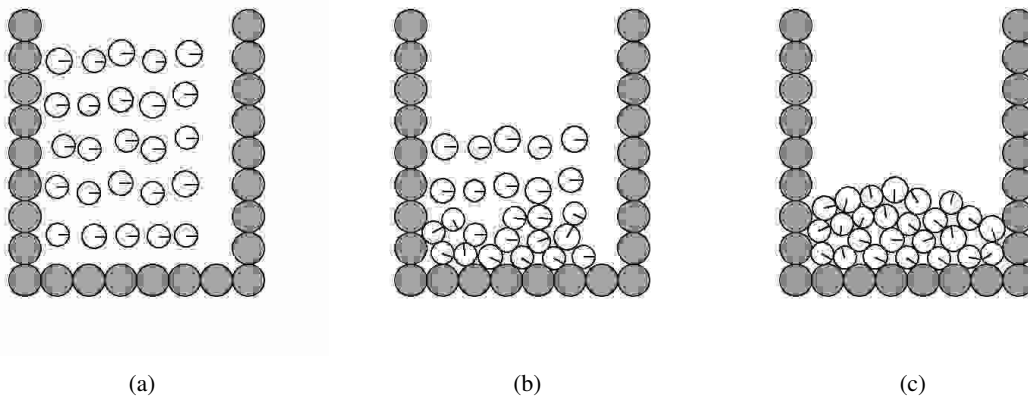


Figura 6.5: Geração de condição inicial para 49 partículas.

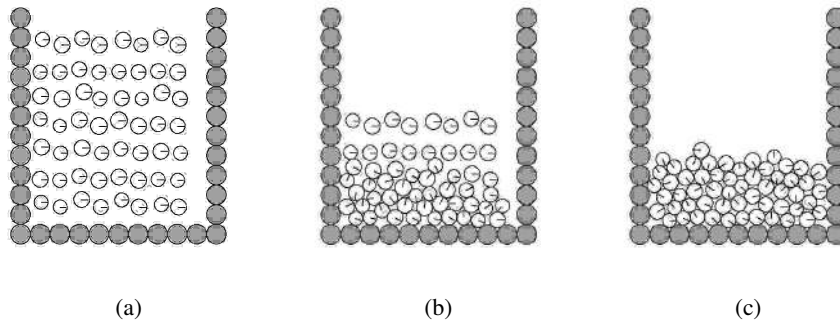


Figura 6.6: Geração de condição inicial para 89 partículas.

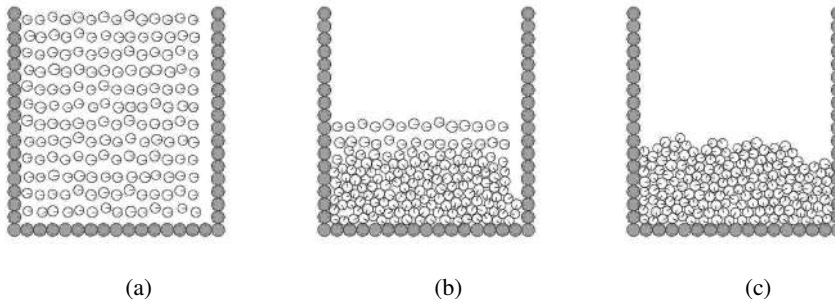


Figura 6.7: Geração de condição inicial para 219 partículas.

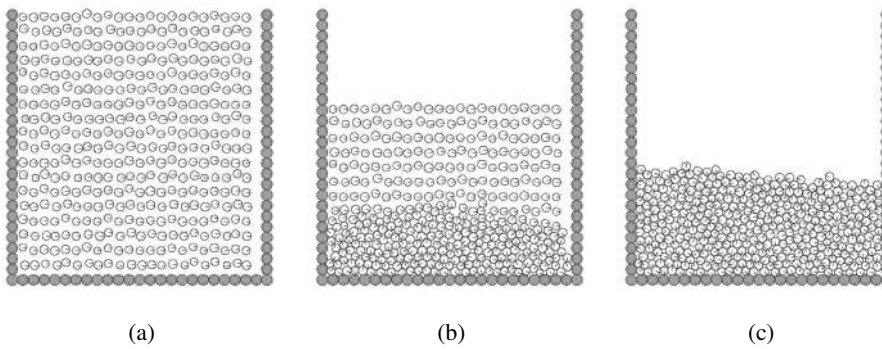


Figura 6.8: Geração de condição inicial para 471 partículas.

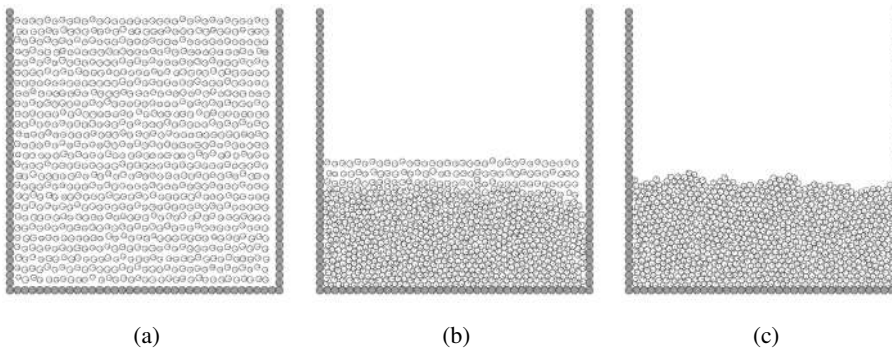


Figura 6.9: Geração de condição inicial para 995 partículas.

6.1.1 Influência do passo de tempo

Como discutido no Capítulo 4, usamos o algoritmo da lista de Verlet com um algoritmo de linked-cell para reduzirmos o custo computacional da busca de vizinhos. No entanto, podemos reduzir também o custo computacional considerando o passo de tempo que utilizamos em nossas simulações, afinal, passos de tempo menores nos levam a realizar mais cálculos e, portanto, mais tempo para obtermos nossos resultados. Tendo isso em mente, procuramos o menor passo de tempo para o qual nossa simulação responda de forma fiel aos erros numéricos inevitavelmente cometidos, e que apresente uma dinâmica (no que se refere à física) realista a qual esperamos que se comportem nossas simulações.

Comparando as Figuras 6.10, 6.11, vemos que um passo de tempo de $dt = 10^{-4}$ é grosseiro demais para que a física do sistema evolua corretamente. Fixados os parâmetros do sistema, para passos de tempo cada vez mais grosseiros, a tendência é de haver uma superestimação das forças calculadas nas colisões par-a-par devido ao tempo de uma colisão estar muito discreto (a diferença entre dois passos de tempo numa colisão é muito grande) e, conseqüentemente, isso leva a uma extrapolação da energia do sistema. Basta que a energia de uma única partícula seja superestimada para que a física de todo o sistema esteja comprometida.

Repetimos as simulações, a partir da mesma configuração inicial, considerando passos de tempo de $dt = 5 \times 10^{-5}s$, $dt = 10^{-5}s$, $dt = 10^{-6}s$. Para $dt = 5 \times 10^{-5}s$, houve uma extrapolação da energia nos mesmos moldes da Figura 6.10. Nos outros dois casos, o sistema comportou-se positivamente e de forma muito similar e, portanto, escolhemos o passo de tempo padrão para as nossas simulações como sendo de $dt = 10^{-5}$. Pelo mesmo motivo, não repetimos aqui a evolução para o caso de $dt = 10^{-6}$.

Uma observação importante a se fazer é que, se desejássemos, poderíamos *sim* realizar nossas simulações com passo de tempo $dt = 10^{-4}s$, por exemplo. No entanto, teríamos de alterar os parâmetros, como o coeficiente elástico k_n e o coeficiente de atrito dinâmico μ_s . Mesmo assim, optamos por não fazê-lo pois, ao deixarmos o passo de tempo mais grosseiro, as partículas passam a ficar mais "moles" no sentido de que a interpenetração passa a ser maior. Tentando corrigir isto, adequaríamos k_n para garantir uma colisão bem resolvida (que é de aproximadamente 100 passos de tempo), o que torna as partículas naturalmente mais "moles" (diminuição do k_n). Mais ainda, caso se tenha êxito nesta adequação, seria recomendável aumentar os raios dos grãos, o que naturalmente aumentaria o tempo computacional pois os grãos precisam se deslocar maiores distâncias, e uma mudança na escala da interface gráfica (arquivos *encapsulated postscript*) teria de ser obtida, de forma que acabamos por julgar inviável simular com passos de tempo mais grossos que $dt = 10^{-5}s$.

6.1.1.1 $dt = 10^{-4}s$

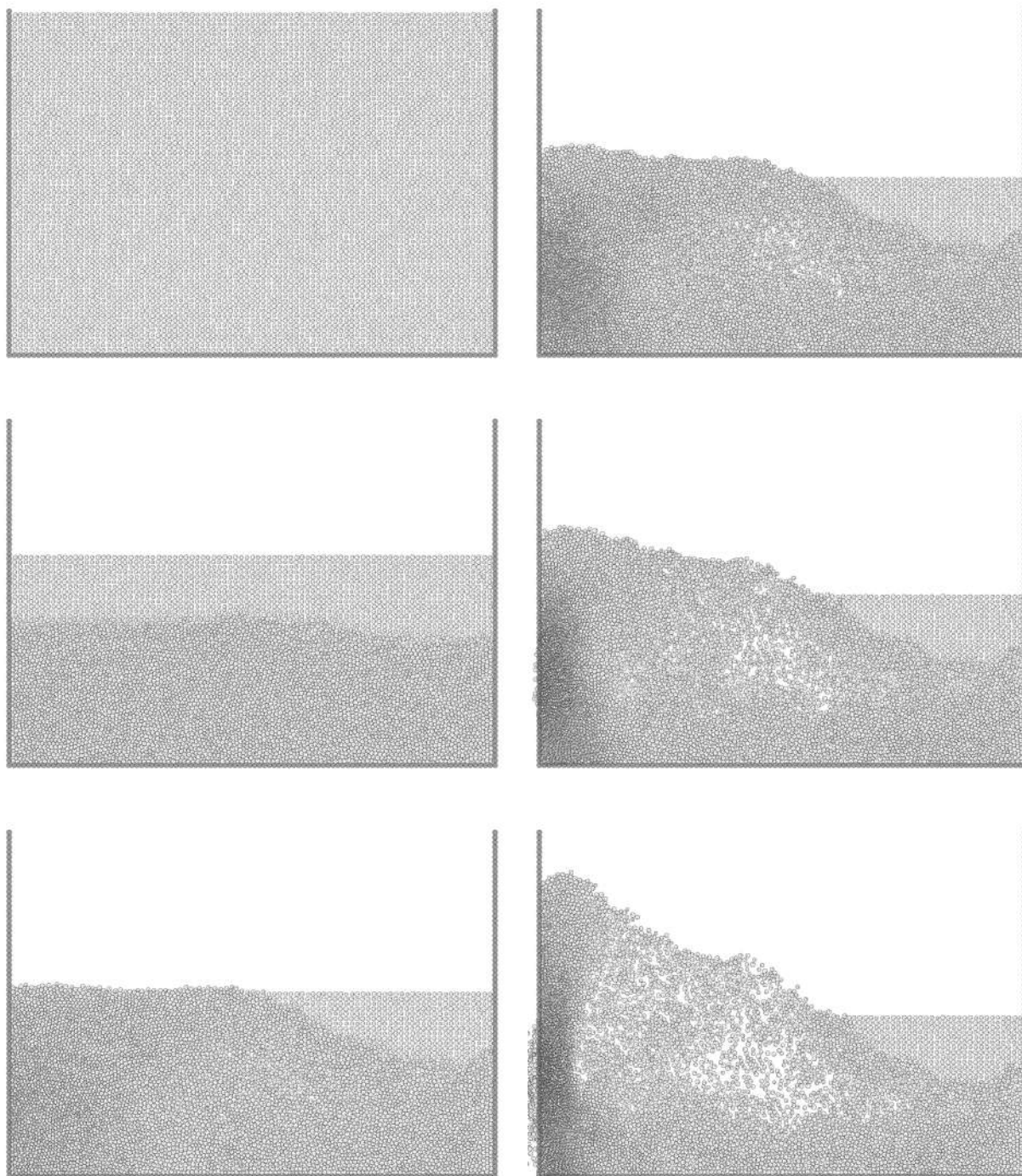


Figura 6.10: Geração de condição inicial para 6243 partículas, com passo de tempo $dt = 10^{-4}s$.

6.1.1.2 $dt = 10^{-5}s$

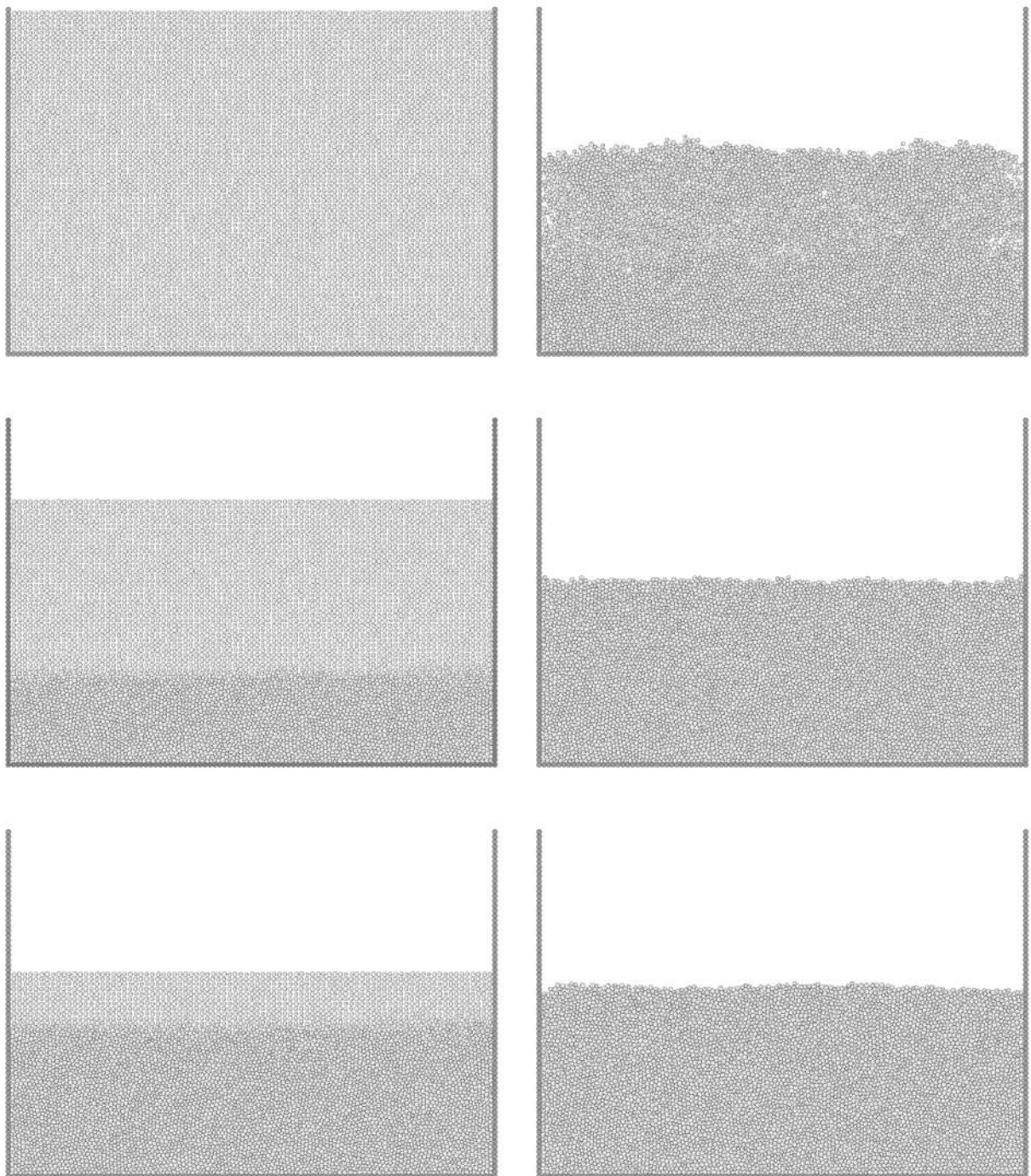


Figura 6.11: Geração de condição inicial para 6243 partículas, com passo de tempo $dt = 10^{-5}s$.

6.2 Energias e cadeias de forças

Muito da evolução temporal do nosso problema pode ser explicada a partir da evolução das energias cinética, potencial gravitacional, rotacional e total do sistema. A seguir, mostramos a evolução dessas energias para duas razões de aspecto iniciais (isto é, a razão de aspecto do próprio recipiente), a saber, $H_i/L_i = 1.4$ e $H_i/L_i = 1.0$.

Além disso, as cadeias de forças presentes num material granular muito indicam sobre o comportamento do sistema num dado instante. Estudos numéricos e experimentais mostram que, em todos os casos, uma distribuição de densidade de probabilidade da intensidade das forças que cada grão do sistema sofre mostra um decaimento exponencial para forças elevadas e apresenta um *plateau* [31]. Daí, a transmissão de forças num meio granular envolve uma rede de contatos entre grãos que transferem uma força maior que a força média por partícula do sistema naquele dado instante, e uma rede de contatos transferindo uma força menor que a média [29].

6.2.1 Condição inicial com razão de aspecto $H/L = 1.4$

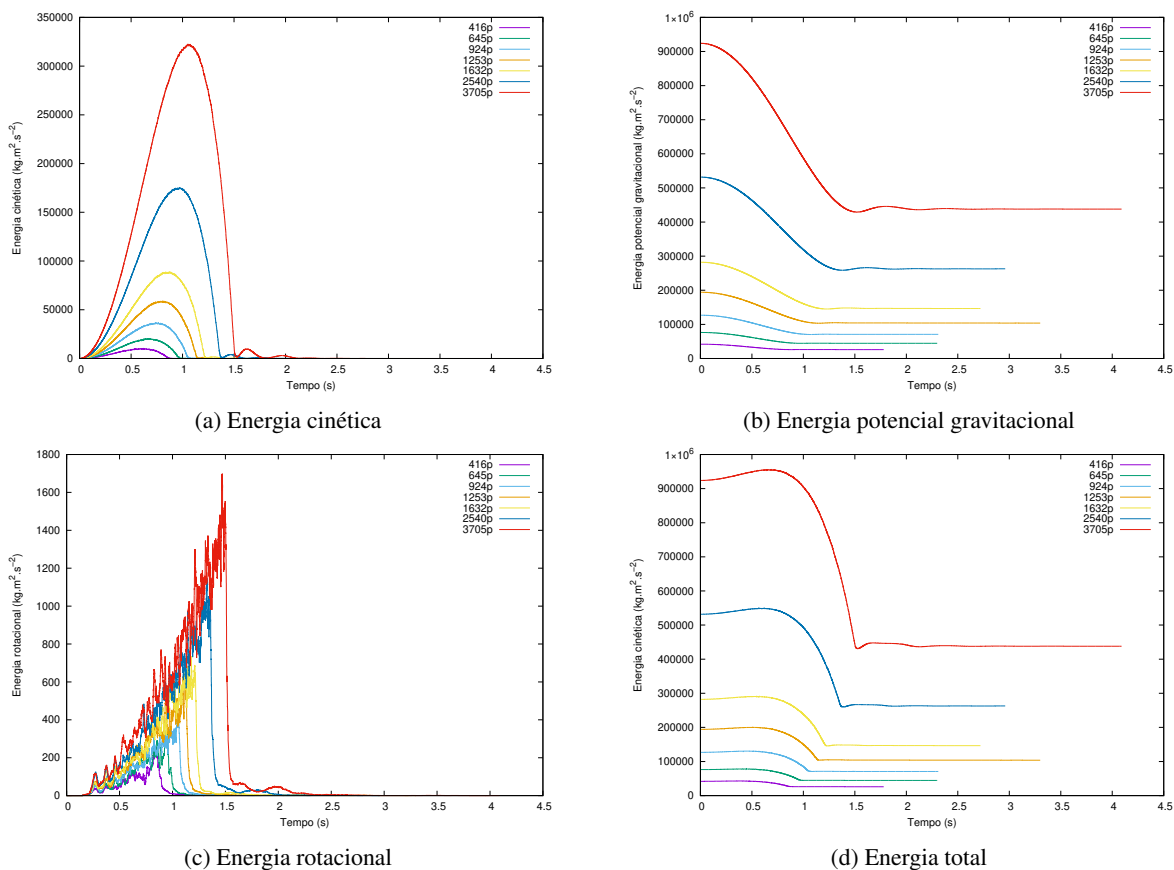


Figura 6.12: Evolução das energias cinética, potencial gravitacional, rotacional e total ao longo do tempo até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$.

No gráfico da Figura 6.12, vemos a evolução das energias ao longo do tempo, para a mesma razão de aspecto do recipiente de $H_i/L_i = 1.4$, para diferentes quantidades de grãos no sistema, cujas condições

iniciais obtidas podem ser encontradas nas Figuras 6.16 e 6.17.

No gráfico da Figura 6.12a vemos o gráfico da evolução da energia cinética. De primeira instância, vemos que rapidamente o sistema com 416 partículas dissipa sua energia cinética, enquanto o sistema com 3705 partículas demora além do dobro desse tempo para dissipá-la quase que completamente.

Como esperado, o pico de energia aumenta à medida que aumentamos o número de partículas. Não só isso, mas a distância de um pico a outro não aumenta de forma linear: se dobrarmos o número de partículas, a energia cinética máxima atingida não é dobrada. Isso porque, como $E_c = m \frac{v^2}{2}$, como as partículas da camada mais superior da *configuração inicial* cairão de uma altura mais alta, elas colidem com a superfície livre do leito de grãos com uma velocidade maior. Pelo mesmo motivo, o pico se desloca cada vez mais à direita - que é o tempo em que todas as partículas atingem o leito livre.

Também percebe-se que a energia cinética evolui, até o pico, de forma monótona crescente: em nenhum instante vemos que há uma brusca queda de energia. Assim, podemos separar esta evolução em dois regimes: o primeiro, em que a energia cinética domina a parcela dela que é dissipada, e uma (pós-pico) em que esse efeito se inverte.

Uma observação mais precisa nos traz atenção para pequenos picos de energia cinética que se formam após o pico principal. Isso é perceptível somente a partir de 1632 partículas. Esses picos são formados devido ao "destaque" de uma onda elástica que se forma quando a última camada de partículas atinge o leito. No instante anterior à última camada se chocar com o leito de grãos, temos o pico de energia cinética. Daí, a energia começa a ser dissipada rapidamente, mas essa energia vinda da última camada de grãos se transfere ao resto do sistema como uma onda elástica: o sistema começa a ficar mais denso, e depois passa a ficar menos denso e a "relaxar" na direção contrária ao movimento que a forneceu energia. Então a grande coluna de partículas sobe, adquirindo velocidade e, conseqüentemente, energia cinética. Esse efeito é mais bem visualizado numa coluna enfileirada de partículas; depois de ser comprimida, a coluna passa a relaxar, provocando o "destaque" da partícula mais elevada. No nosso caso, esse "destaque" ocorre nas últimas camadas da superfície livre.

Já no gráfico da Figura 6.12b, vemos o gráfico da variação da energia potencial gravitacional do sistema com o tempo. Evidentemente, ela é máxima na configuração inicial do sistema, e decai logo em seguida. Isso acontece até o tempo correspondente aos picos menores de energia cinética que vemos na Figura 6.12a, tempo em que acontece o "destaque" das camadas mais superiores do leito de grãos. Quando isso ocorre, elas se elevam, aumentando então a energia potencial gravitacional do sistema.

Apresentado no gráfico da Figura 6.12c, nota-se instantaneamente que a evolução da energia rotacional depende fortemente das interações par-a-par: não conseguimos retirar uma conclusão global deste gráfico, à parte de que o pico da energia rotacional se dá sempre um pouco após o pico de energia cinética máxima. Deste ponto, a energia rotacional cai a uma taxa muito alta, quando o atrito predomina e dissipa esta energia, parando a rotação das partículas. Novamente, vemos que no tempo do "destaque" das camadas mais superiores devido à onda elástica formada, as partículas se elevam, ganhando energia rotacional: estes são os picos secundários formados após o pico de energia rotacional máxima para cada caso.

Na Figura 6.12d, temos o gráfico da evolução da energia total do sistema. Do início da simulação até o primeiro pico, vemos que há uma competição entre a energia potencial gravitacional e a energia

cinética. Após isso, a energia passa a somente decair, se elevando novamente somente no ponto em que há o "destaque" das camadas superiores da superfície livre do leito, como discutido anteriormente.

Uma importante observação a se fazer é que o tempo que o sistema leva para atingir o equilíbrio depende da tolerância a qual julgamos que a energia do sistema atingiu um *plateau* e não irá mais sofrer grandes flutuações. Vejamos, no caso de 1632 partículas, trocamos a tolerância padrão de $0.1 \text{ kg.m}^2.\text{s}^{-2}$ por $0.01 \text{ kg.m}^2.\text{s}^{-2}$. Naturalmente, o sistema leva então um tempo maior para atingir o equilíbrio. De fato, o tempo de equilíbrio para este caso "quebra" o padrão daquele apresentado pelos outros casos.

Nos gráficos da Figura 6.13, temos a evolução da energia média por partícula (p representa partícula) do sistema em função do tempo. Notamos que, para todos os gráficos, as curvas se aproximam. No entanto, para um número maior de partículas, ainda temos que a energia média é maior, pois as partículas mais elevadas da *configuração inicial* possuem uma energia potencial gravitacional maior e atingem velocidades mais elevadas quando atingem o leito.

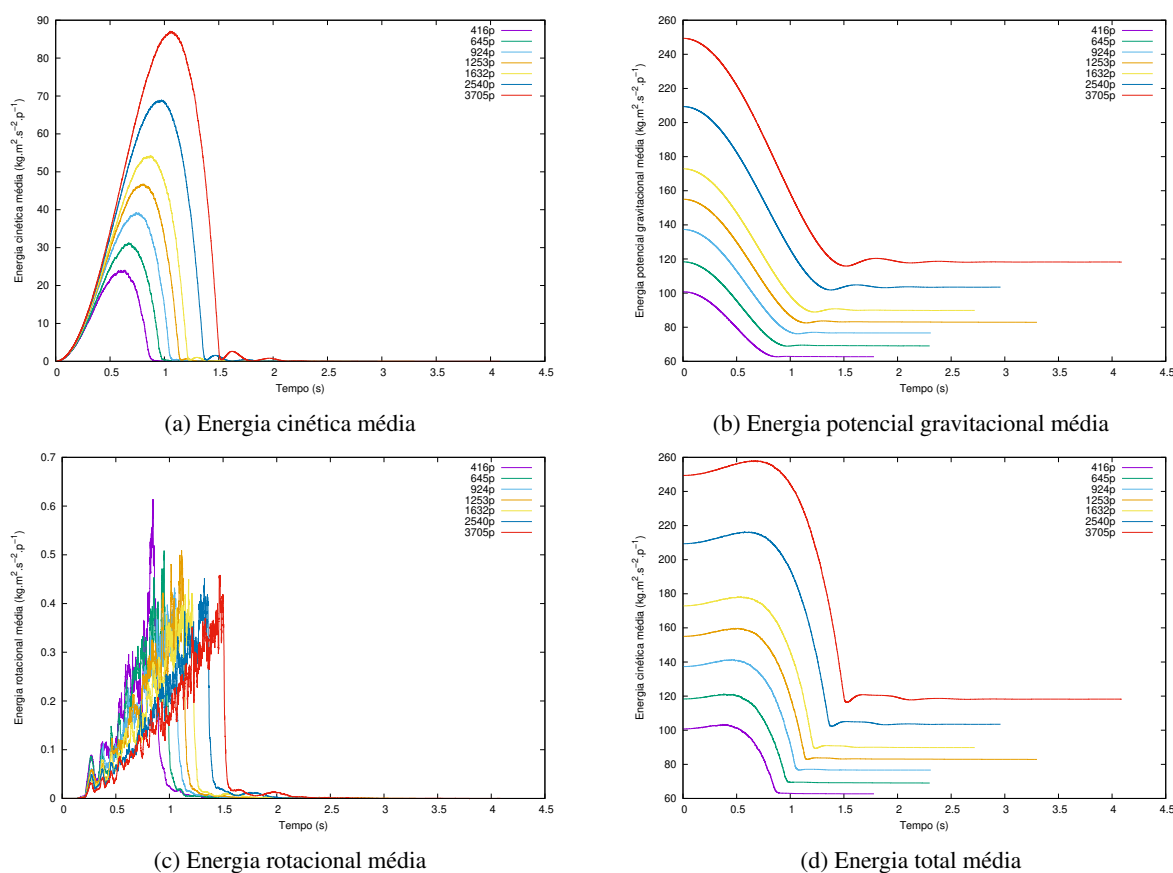


Figura 6.13: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média ao longo do tempo até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$.

Já na Figura 6.14, os gráficos mostram a evolução da energia cinética média ao longo do tempo adimensional, dado por:

$$t^* = \frac{t}{\sqrt{\frac{D}{g}}}, \quad (6.1)$$

onde t é o tempo físico da simulação, D é a altura do recipiente, e g é a aceleração gravitacional.

Vemos que, agora, o equilíbrio das energias se dá no mesmo instante, assim como os picos de energia. No entanto, a altura desses picos é ainda influenciada pelo número de partículas, por motivos já explicados acima.

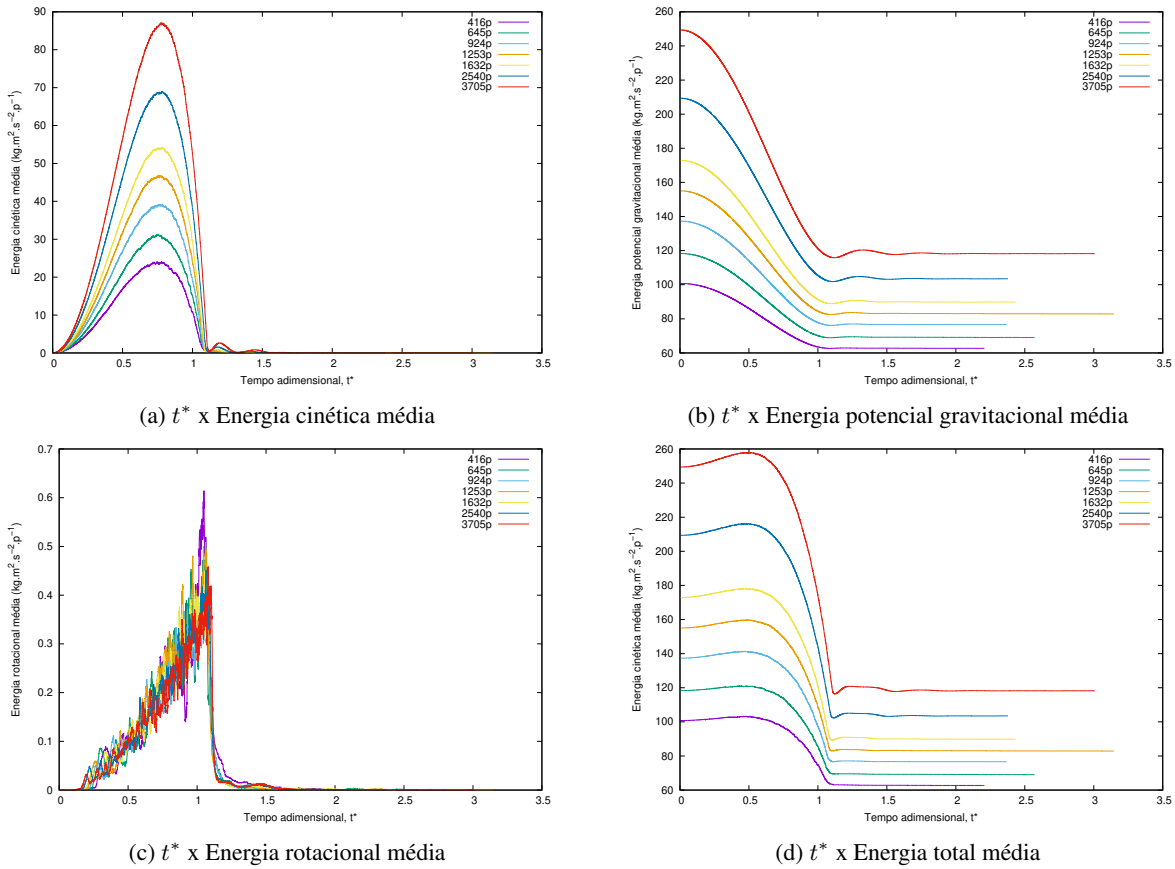


Figura 6.14: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média em função do tempo adimensional t^* até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$.

Finalmente, nos gráficos da Figura 6.15, temos a evolução das energias médias adimensionais, E_{med}^* em função do tempo adimensional, t^* . As energias médias adimensionais são calculadas da seguinte forma:

$$Ec_{med}^* = \frac{Ec_{med}}{E_o} \quad (6.2)$$

$$Epg_{med}^* = \frac{Epg_{med}}{E_o} \quad (6.3)$$

$$Erot_{med}^* = \frac{Erot_{med}}{E_o} \quad (6.4)$$

$$Et_{med}^* = \frac{Et_{med}}{E_o}, \quad (6.5)$$

em que Ec_{med} , Epg_{med} , $Erot_{med}$, Et_{med} são as energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média, respectivamente, e E_o é a escala de energia adimensional, dada por:

$$E_o = \bar{m}gD, \quad (6.6)$$

onde \bar{m} é a massa média de uma partícula do sistema, calculada pela média simples das massas das partículas do mesmo sistema.

Vemos que, mesmo usando a energia e tempo adimensionais, as curvas não colapsam perfeitamente em nenhum dos gráficos. Isso é provavelmente devido ao fato de que tomamos $\bar{m} = \rho \frac{4}{3} r_{med}^3$ em todos os casos. Para um número pequeno de partículas, essa aproximação não é tão boa pois sabemos que as partículas das fronteiras são maiores e, sendo todos os grãos modelados como sendo o mesmo material (tem a mesma massa específica) e, portanto, o pico máximo adimensionalizado desloca-se para cima do ponto real.

No entanto, vemos que à medida que o número de grãos aumenta, as curvas de energia adimensionais ficam mais próximas. Partindo da mesma vertente da explicação anterior, passamos a ter mais partículas com raio igual ao raio médio do que partículas com raio máximo, e então a quantidade de partículas da fronteira passa a ser "diluída" pela quantidade de partículas total, e \bar{m} se aproxima mais e mais de $\frac{4}{3} r_{med}^3$. Além disso, como temos uma altura maior do recipiente para um número maior de partículas, isso influencia em deslocar as curvas de energia para cima.

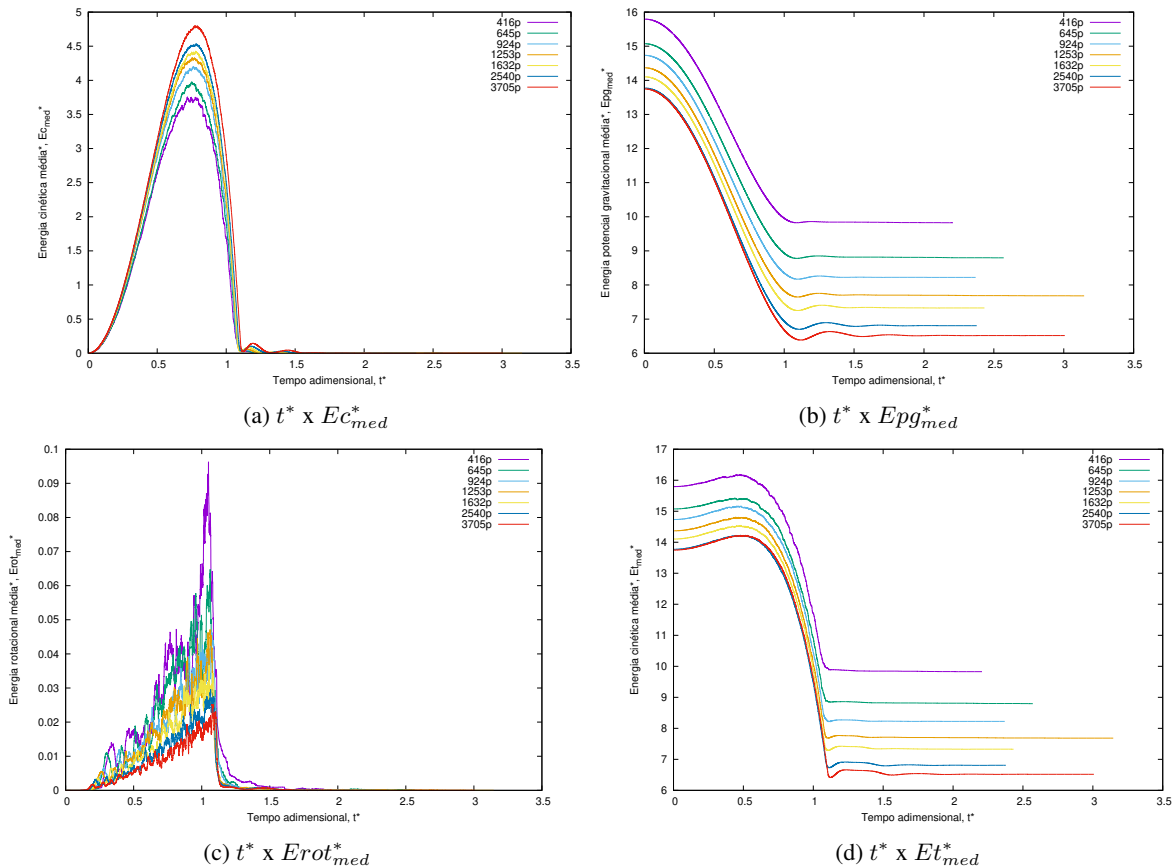
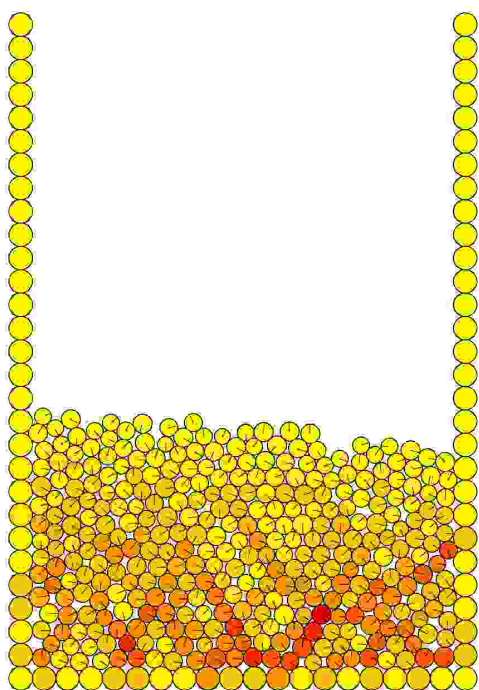


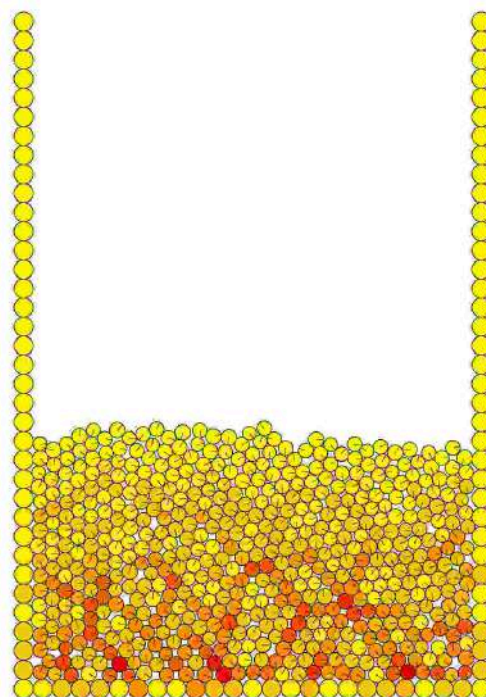
Figura 6.15: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.4$.

Um resultado mais interessante seria, talvez, manter as alturas e as razões de aspecto e aumentar o número de partículas, mas diminuindo o raio médio. Este é o nosso primeiro resultado de autosimilaridade. Mantendo a razão de aspecto da configuração inicial, e aumentando o número de partículas, a evolução das energias se comportam quase que da mesma maneira.

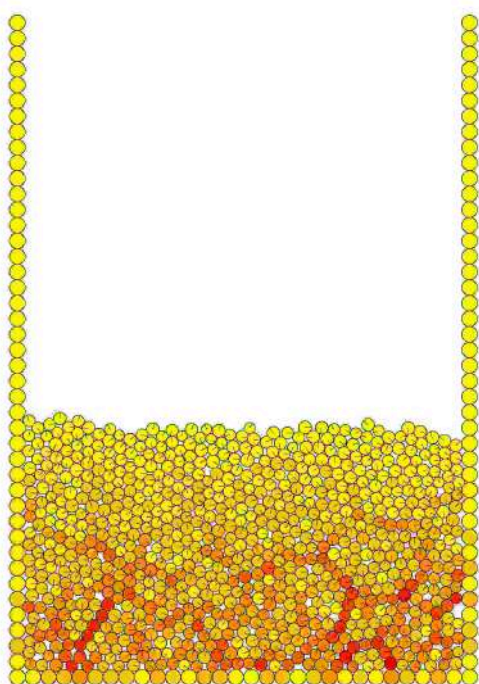
Quanto às cadeias de forças, vemos na Figura 6.16a que as cadeias de forças se distribuem de maneira a formarem cones, algo que foi estudado no caso tridimensional quando a superfície livre sofre uma força de impacto [29]. À parte de conseguirmos visualizar este efeito na *condição inicial*, isso também ocorre à medida que a configuração inicial evolui em um leito de grãos. As camadas que já colidiram com o fundo do recipiente sofrem o impacto das camadas superiores, formando uma área cônica com lados formados pelas cadeias de forças e vértice no ponto de impacto. Ademais, à medida que o número de partículas aumenta, vemos que cadeias de forças com formatos similares à cones também existem, mas há uma distribuição mais uniforme ao longo do sistema.



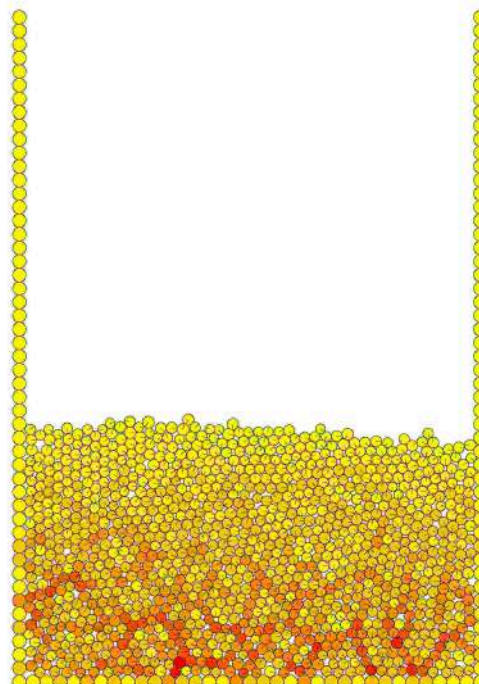
(a) 416 grãos - 20x28



(b) 645 grãos - 25x35

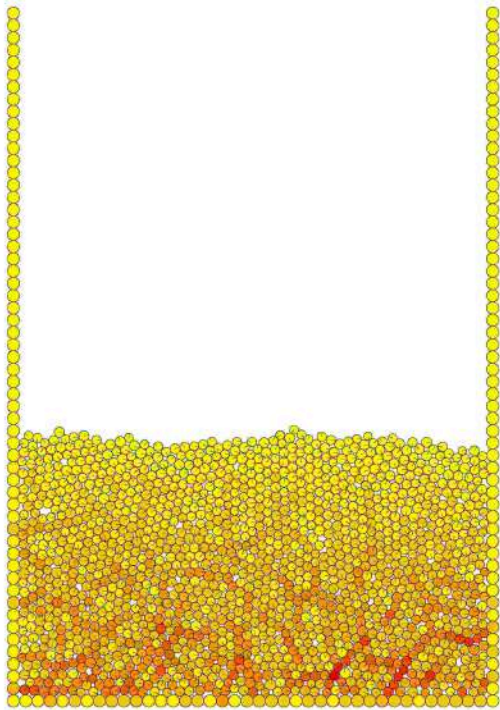


(c) 924 grãos - 30x42

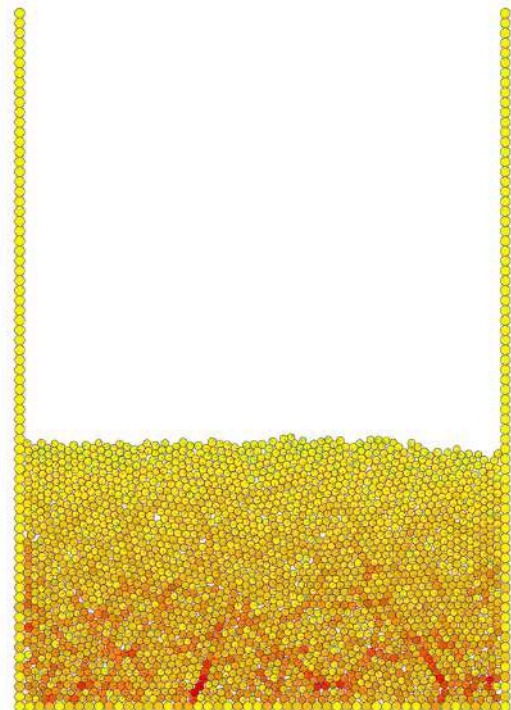


(d) 1253 grãos - 35x49

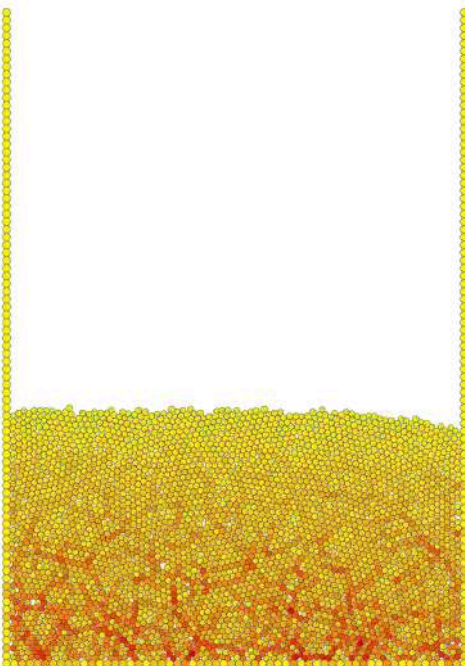
Figura 6.16: Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.4. 416, 645, 924 e 1253 grãos.



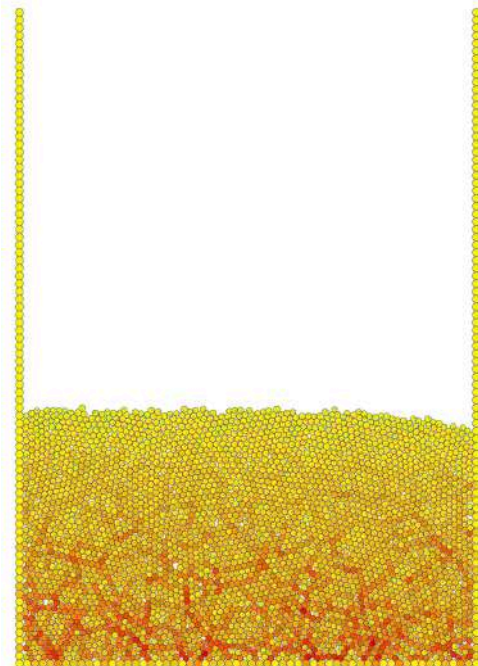
(a) 1632 grãos - 40x56



(b) 2540 grãos - 50x70



(c) 3705 grãos - 60x84



(d) 3705 grãos - 60x84

Figura 6.17: Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.4. 1632, 2540, 3705 e 6541 grãos.

6.2.2 Condição inicial com razão de aspecto $H/L = 1.0$

Realizando agora as simulações para o caso de uma razão de aspecto do recipiente de $H/L = 1.0$, notamos resultados muito similares aos obtidos para a razão de aspecto $H/L = 1.0$. Em face disso, mostramos aqui somente os gráficos da variação das energias com o tempo (Figura 6.18), e da evolução das energias médias adimensionais em função do tempo adimensional (Figura 6.19).

A fim de compararmos a diferença da razão de aspecto na obtenção da *condição inicial*, tomemos o caso de 2540 partículas ($H/L = 1.4$) e de 2631 partículas ($H/L = 1.0$). Comparemos então os gráficos das Figuras 6.12a e (6.18a): nota-se que o pico para $H/L = 1.4$ é maior. O mesmo pode ser dito sobre a energia potencial gravitacional máxima, comparando-se os gráficos das Figuras 6.12a e 6.18a: ela é maior para para $H/L = 1.4$.

Todavia, não devemos nos equivocar em dizer que isso se deve pela razão de aspecto diferente. Passemos a uma comparação das Figuras 6.17c e 6.21c e vejamos que as alturas do recipiente são diferentes. De fato, no caso de $H/L = 1.4$, ele possui uma altura de 84 partículas empilhadas, cada uma com raio igual a r_{max} ; no caso de $H/L = 1.0$, essa altura é de 60 partículas!

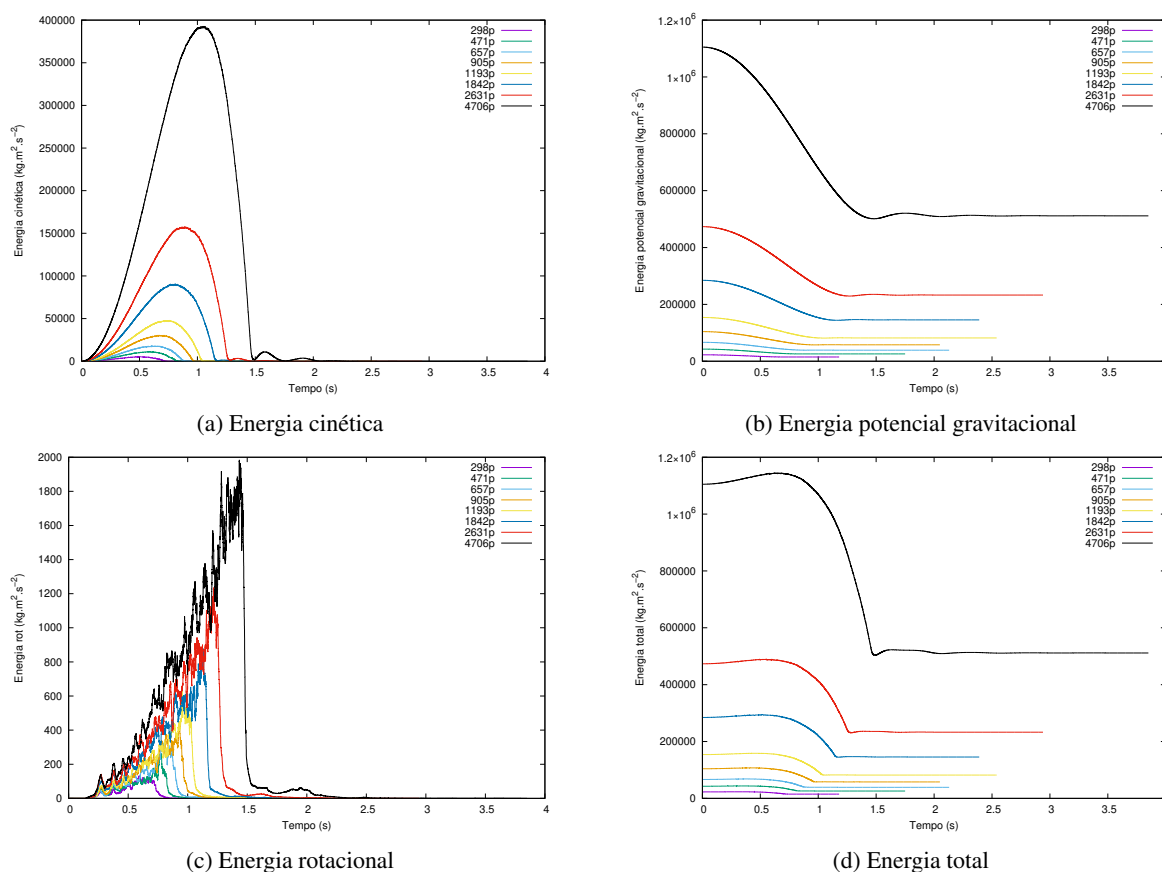


Figura 6.18: Evolução das energias cinética, potencial gravitacional, rotacional e total ao longo do tempo até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.0$.

Podemos então concordar que é uma análise do formato das curvas de energia adimensionalizadas que nos darão um possível confronto entre as duas diferentes razões de aspecto da *configuração inicial*. Vemos, porém, que este não é o caso pois, evidentemente, as curvas possuem formatos muito similares.

Assim, pelo menos na obtenção da *condição inicial*, a evolução da energia é essencialmente igual para as duas diferentes razões de aspecto simuladas, e nos arriscamos a estender essa conclusão para outras razões de aspecto.

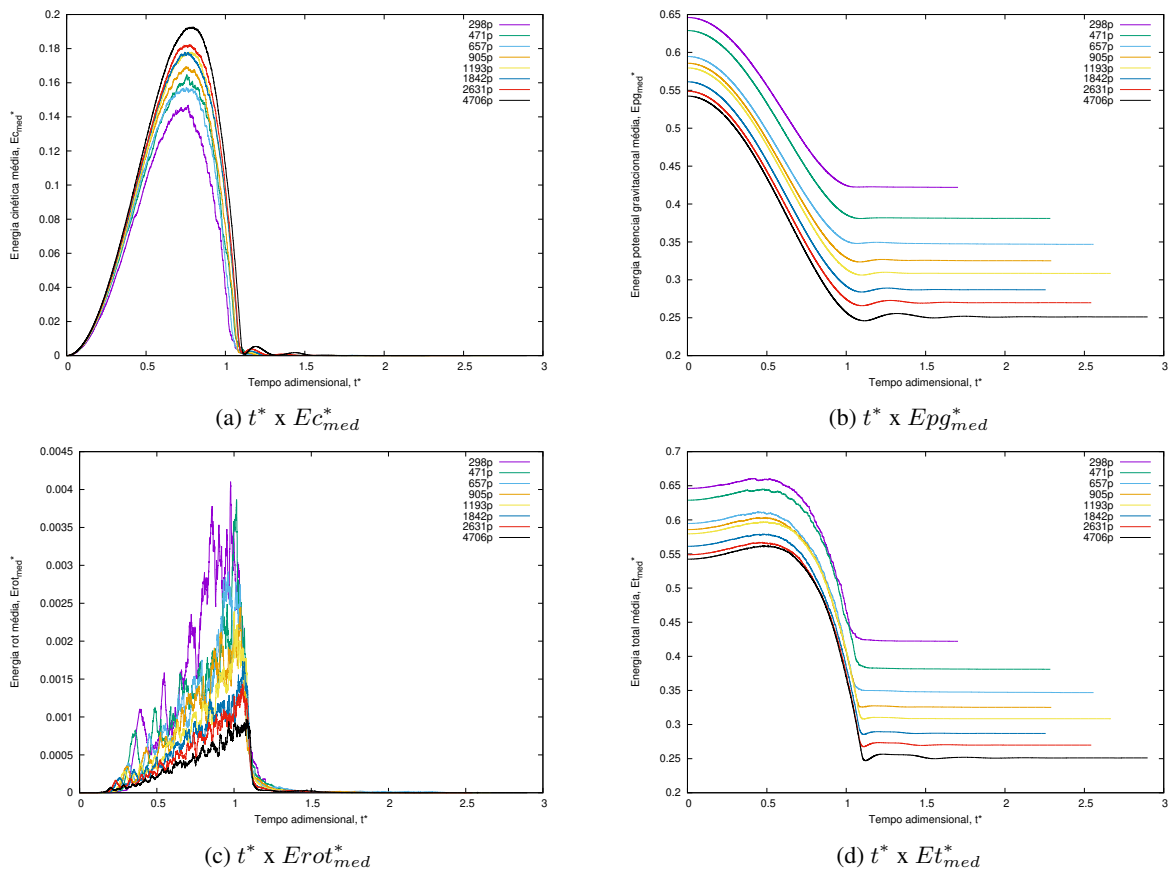
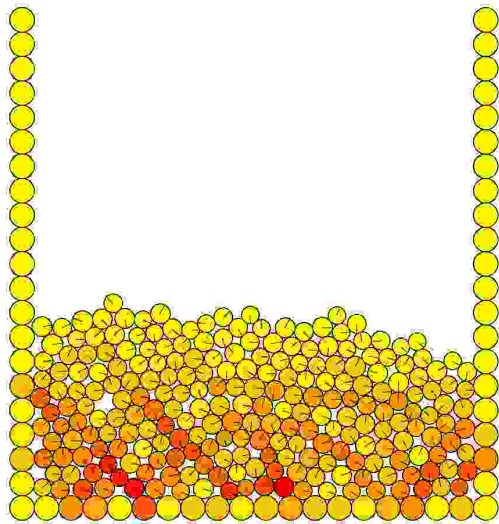
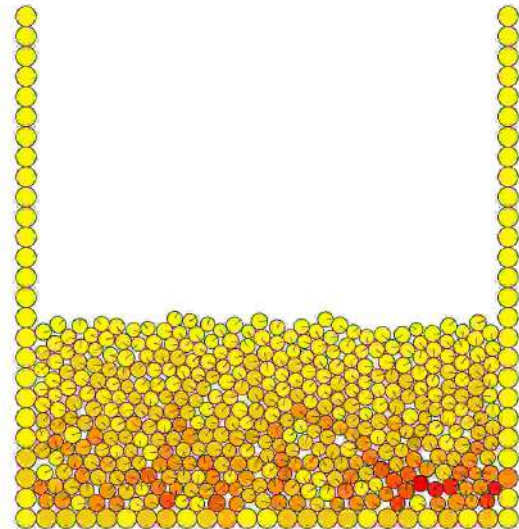


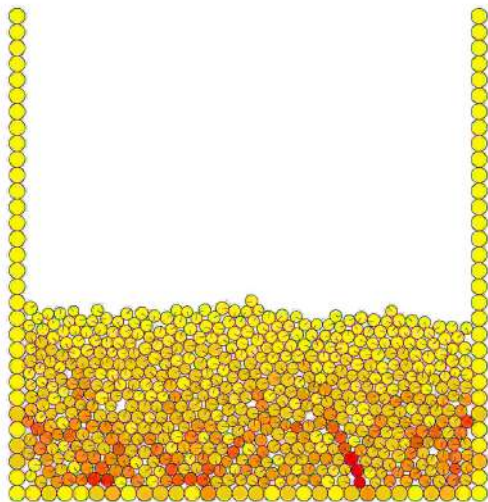
Figura 6.19: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* até a obtenção da condição inicial para razão de aspecto inicial de $H/L = 1.0$.



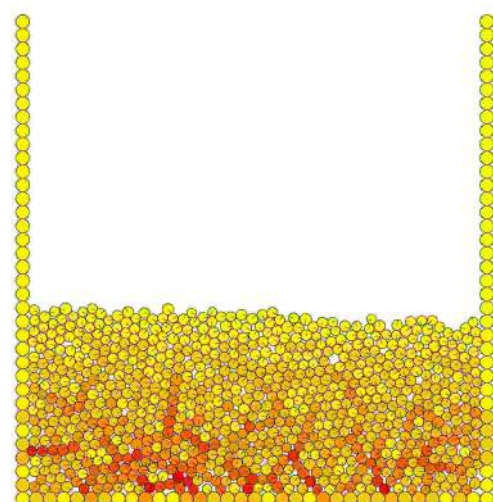
(a) 298 grãos - 20x20



(b) 471 grãos - 25x25

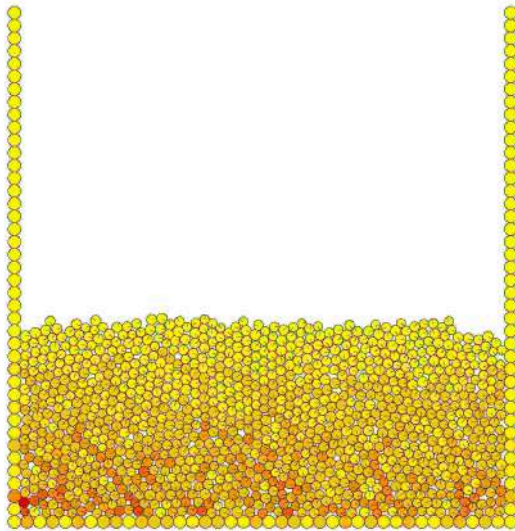


(c) 657 grãos - 30x30

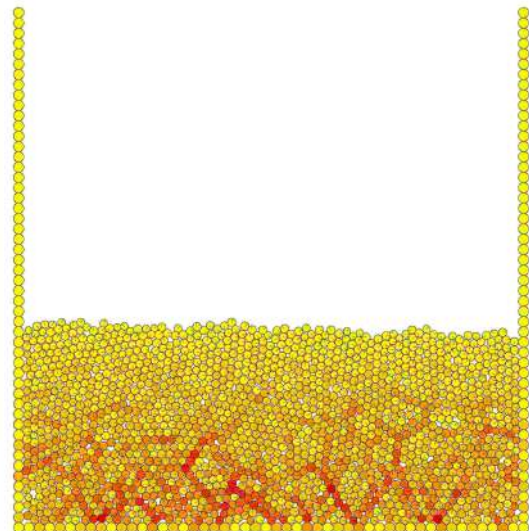


(d) 905 grãos - 35x35

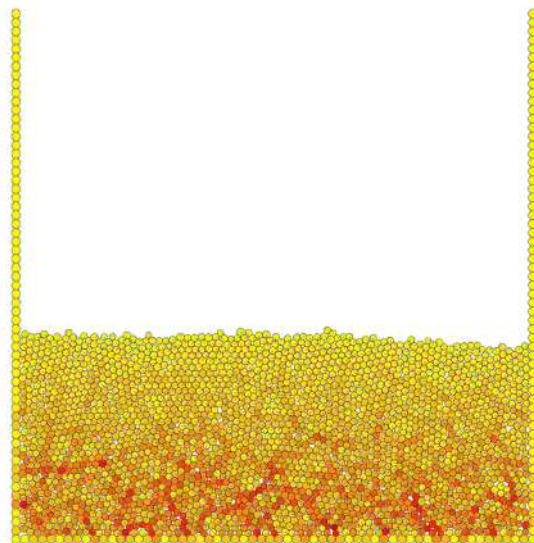
Figura 6.20: Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.0. 298, 471, 657 e 905 grãos.



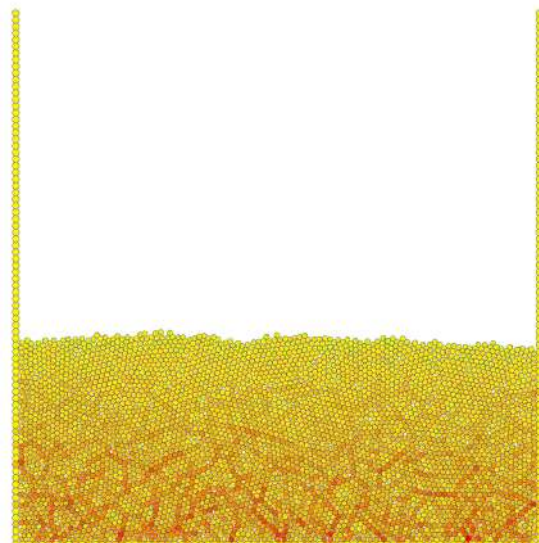
(a) 1193 grãos - 40x40



(b) 1842 grãos - 50x50



(c) 2631 grãos - 60x60



(d) 4706 grãos - 80x80

Figura 6.21: Cadeias de forças na condição inicial para recipientes com mesma razão de aspecto na configuração inicial de 1.0. 1193, 1842, 2631 e 4706 grãos.

6.2.3 Condição inicial padrão

A condição inicial padrão a ser cavada com diferentes razões de aspecto será tomada como sendo a da Figura 6.22, com 7284 partículas, e razão de aspecto da *configuração inicial* de $H/L = 1.0$, com altura e larguras iguais ao tamanho de 100 partículas de raio igual a r_{max} . Na obtenção da condição inicial, a superfície livre tem uma altura de 40 partículas.

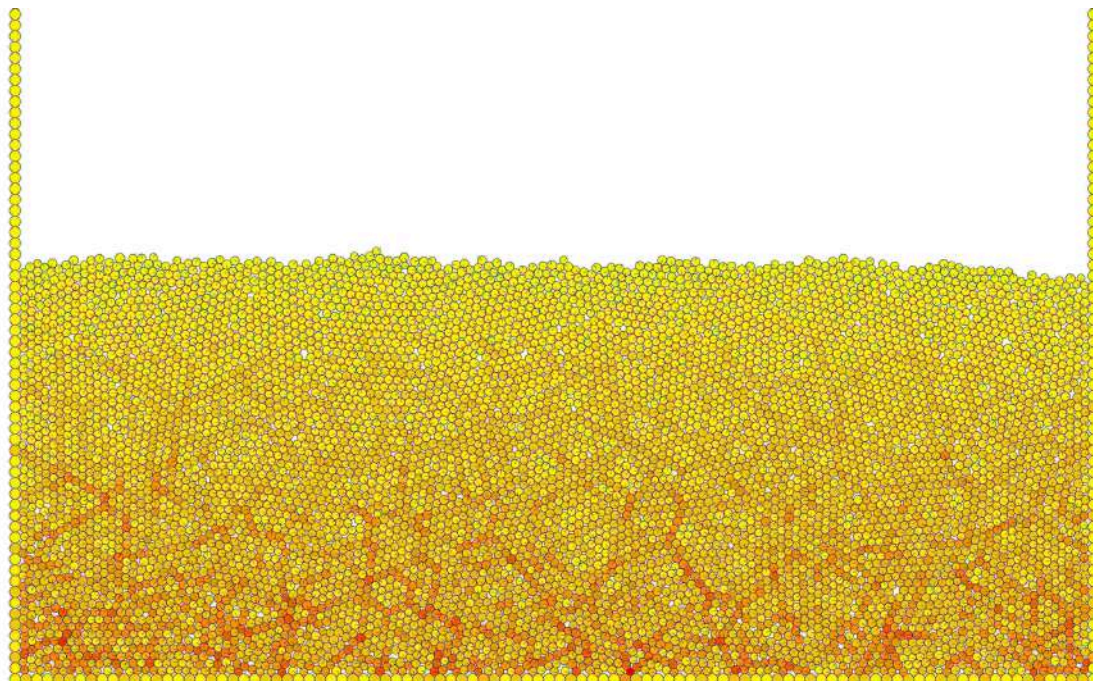


Figura 6.22: Condição inicial padrão a ser cavada. 7284 partículas.

6.3 Cavando a superfície livre do leito

Com a geração de diversas condições iniciais, desejamos agora criar um algoritmo que seja capaz de retirar uma certa quantidade de grãos da configuração final do centro do leito, conforme a Figura 6.23.

Isso pode ser facilmente alcançado usando a própria lista de Verlet: ao longo da nossa simulação, sabemos em quais células virtuais estão localizadas as partículas do nosso sistema. Daí, como definimos anteriormente que cada célula possui aproximadamente o diâmetro de um grão da parede, basta escolhermos qual a largura e a altura da nossa cavidade retangular a ser cavada a partir da localização das células de Verlet. Tendo isto definido, basta excluir os grãos presentes nessas células: ignorando-as para o cálculo das forças, para a evolução das partículas do sistema, e para a criação da interface gráfica em arquivo *encapsulated postscript*.

Tal cavidade retangular pode possuir diversos tamanhos. Para a obtenção de uma cratera granular, iremos obter uma cavidade retangular com uma dada razão de aspecto, que é a razão $Ar = \frac{H}{L}$, onde H é a altura da cavidade, e L sua largura, como mostrado na Figura 6.23. Fora isso, como queremos analisar não só a evolução desta cavidade - que, ao final do colapso, há de se transformar numa cratera -, mas também como o formato final da cratera formada é influenciada pela geometria da região que é cavada, é interessante que repitamos este procedimento para diferentes razões de aspecto.

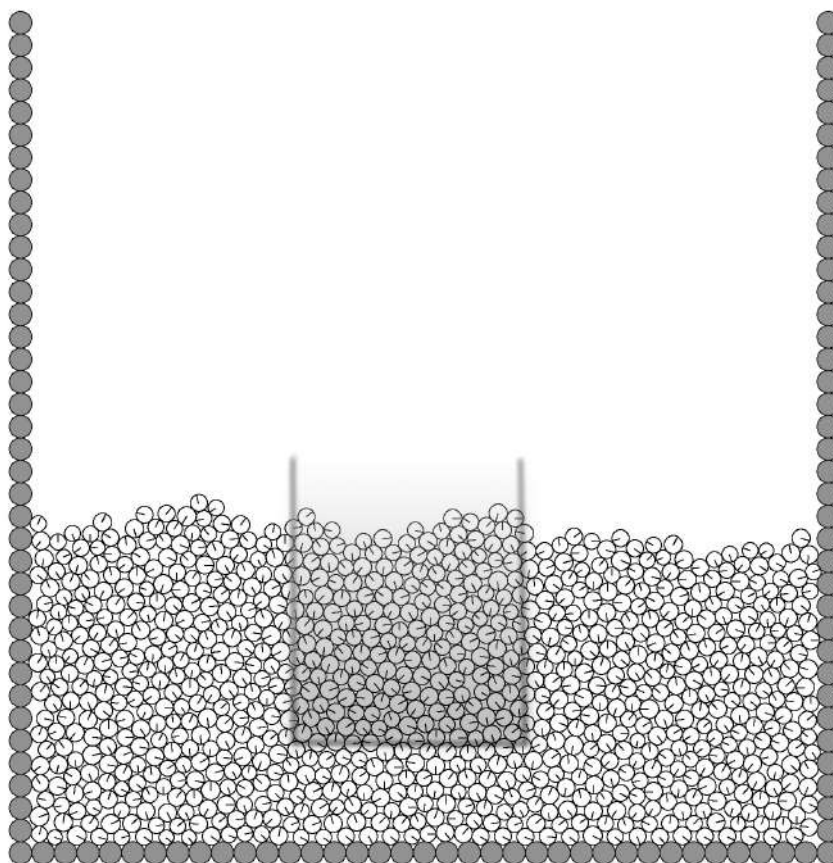


Figura 6.23: Esquema da retirada de uma cratera retangular do sistema, em equilíbrio metaestável.

6.3.1 A cavidade com diferentes razões de aspecto H/L

Finalmente, a partir deste ponto encontramos-nos prontos para observar a evolução do colapso da cratera e, em seguida, fazer a análise de parâmetros diversos, como os grãos que participam efetivamente do colapso, as cadeias de forças que são quebradas, a relação da natureza do escoamento com diferentes razões de aspecto: como a geometria da cavidade inicial influencia na configuração de equilíbrio final que é atingida. Ademais, o foco principal está em gerar um algoritmo que possa nos dar o perfil da superfície do estado metaestável final. Estes são os pontos principais a serem abordados no Capítulo seguinte.

Para as cavidades, escolhemos 5 razões de aspecto diferentes: 0.5, 0.75, 1.0, 1.5 e 2.0. Destas, também optamos pela obtenção de duas cavidades com largura e alturas diferentes, mas com mesma razão de aspecto - nos casos de $H/L = 0.5$ e $H/L = 0.75$. A ideia aqui é analisar até que ponto o colapso se comporta similarmente, e também entender como as paredes do nosso recipiente influenciam para restringir este colapso.

Note que obtemos as cavidades de tal forma que ainda é possível ver as cadeias de forças no instante de tempo imediatamente antes de cavarmos. Deixamos claro aqui que isso foi feito com a intenção de visualizarmos as cadeias de forças que foram "quebradas" da Figura 6.22 após a cava. No Capítulo 7, quando apresentarmos a evolução do colapso, veremos as cadeias de forças no instante que sucede a cava.

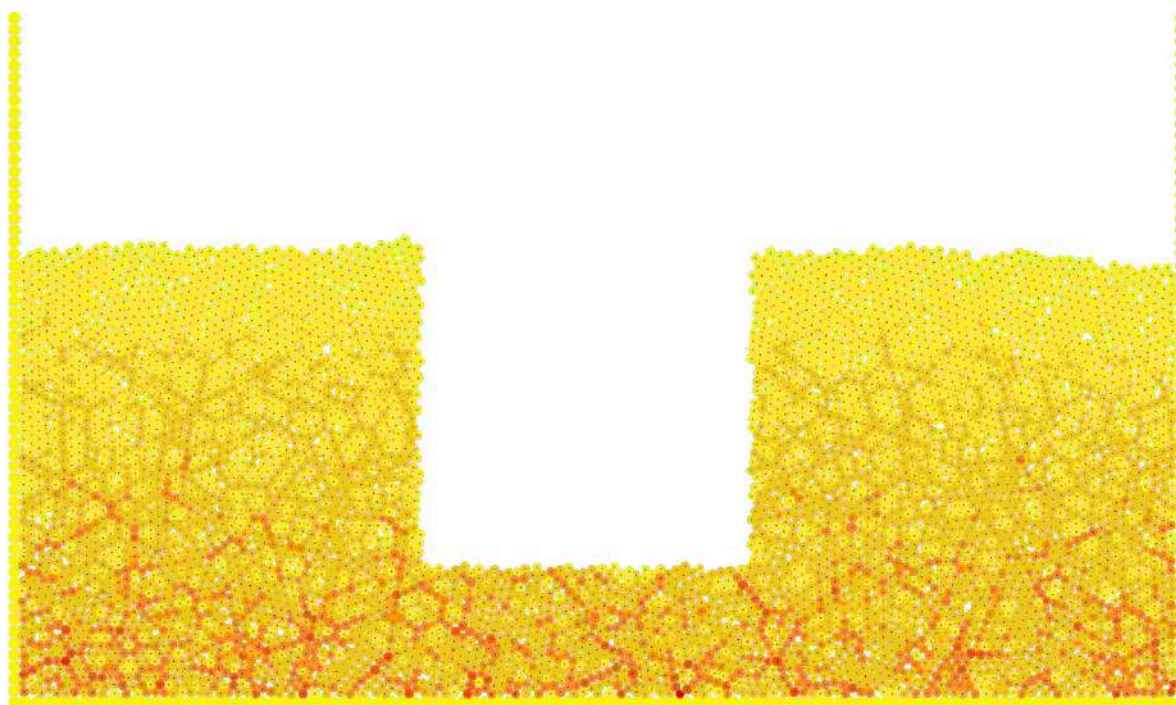


Figura 6.24: Cavidade com razão de aspecto $H/L = 1.0$. 7284 partículas.

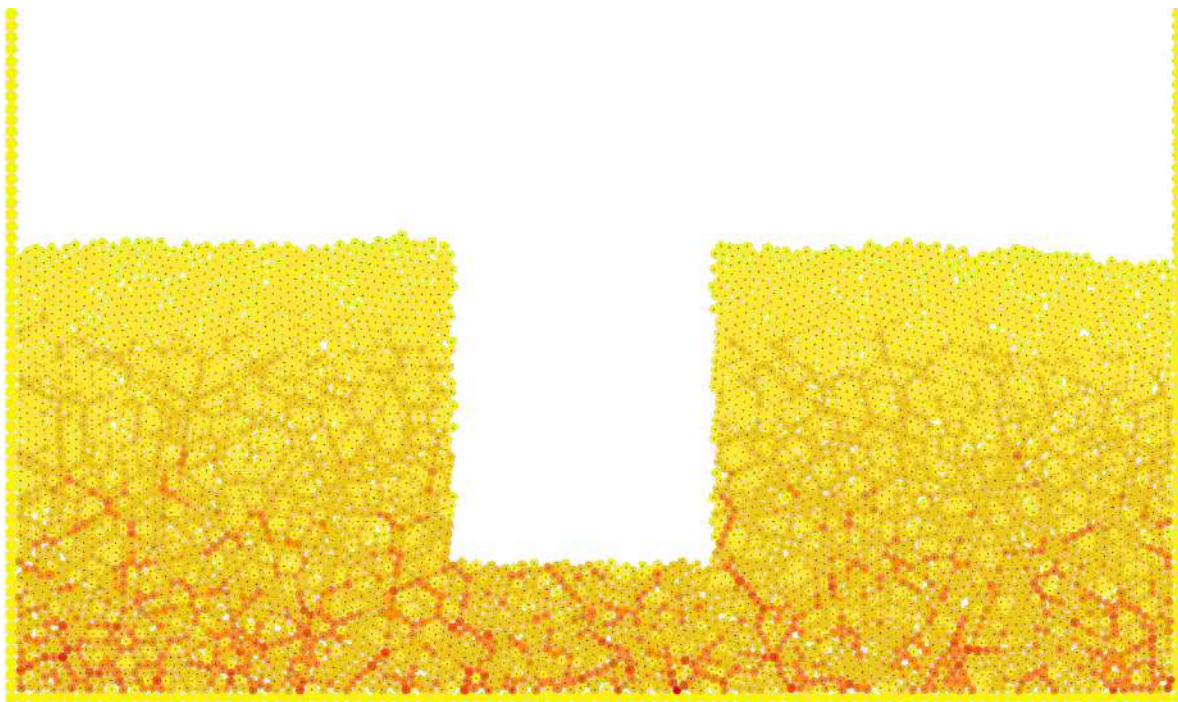


Figura 6.25: Cavidade com razão de aspecto $H/L = 1.5$. 7284 partículas.

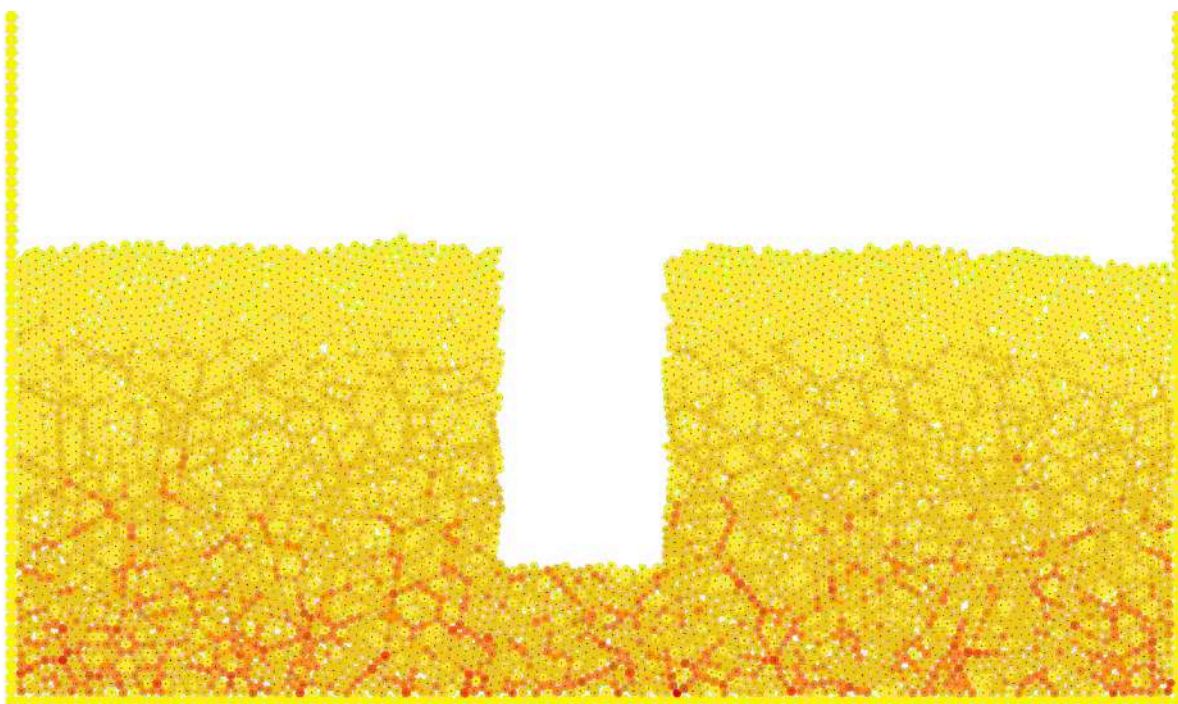


Figura 6.26: Cavidade com razão de aspecto $H/L = 2.0$. 7284 partículas.

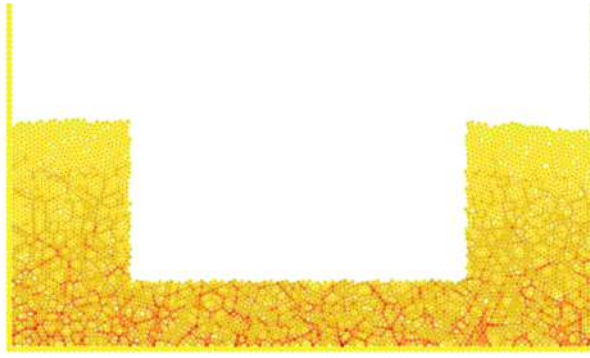


Figura 6.27: Cavidade de largura alta, com razão de aspecto $H/L = 0.5$. 7284 partículas.

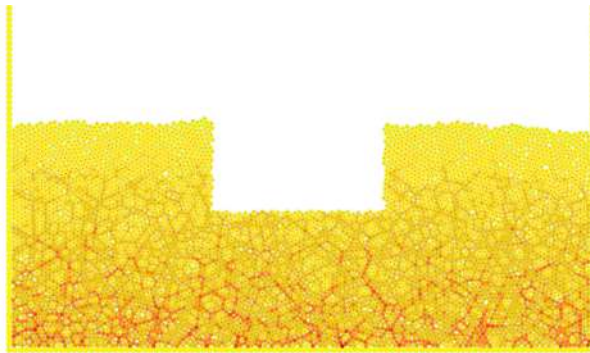


Figura 6.28: Cavidade de largura baixa, com razão de aspecto $H/L = 0.5$. 7284 partículas.

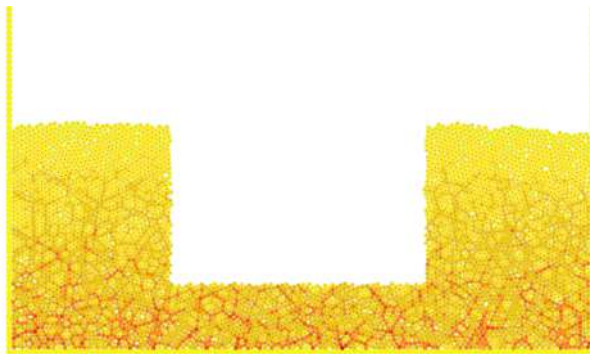


Figura 6.29: Cavidade de largura alta, com razão de aspecto $H/L = 0.75$. 7284 partículas.

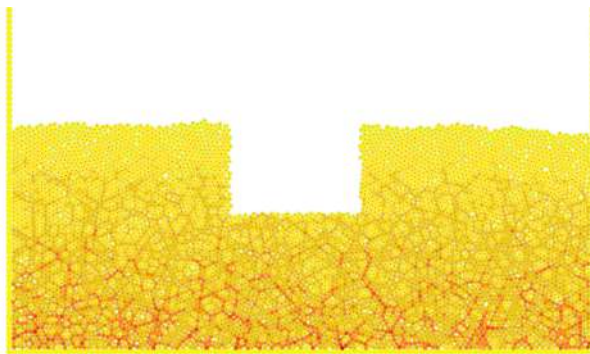


Figura 6.30: Cavidade de largura baixa, com razão de aspecto $H/L = 0.75$. 7284 partículas.

Capítulo 7

A cratera granular

“ A process cannot be understood by stopping it. Understanding must move with the flow of the process, must join it and flow with it.

Um processo não pode ser entendido parando-o. Entendê-lo deve mover-se juntamente com o fluxo do processo, deve unir-se e fluir junto com ele. ”

Frank Herbert, *autor de Duna*

O objetivo principal deste capítulo é de analisar a evolução do colapso de uma cratera quando uma cavidade (também comumente chamado de poço) é cavada na superfície livre do leito granular. Como discutido no Capítulo 6, isto é feito para diferentes razões de aspecto, isto é, realizamos simulações numéricas desta evolução para cavidades retangulares com diferentes razões entre altura e largura.

Analisamos também a influência dos parâmetros físicos (coeficiente elástico k_n , coeficiente de dissipação normal γ_n , coeficiente de atrito dinâmico γ_n e o coeficiente de regularização do atrito dinâmico γ_s); a influência do passo de tempo dt nas simulações já foi discutido no Capítulo 6 e não será abordado aqui.

A influência da posição da cratera com relação às paredes do recipiente foi também estudada: o colapso de uma cratera centralizada no recipiente é o mesmo quando esta cratera passa a ter seu centro cada vez mais perto da parede?

Para estas análises, mostramos aqui os *frames* mais importantes durante o colapso, também mostrando as cadeias de forças durante a evolução e as velocidades instantâneas de cada partícula; os campos de velocidades médias locais em cada caso; a evolução das energias cinética, potencial gravitacional, rotacional e total médias adimensionais ao longo do tempo adimensional.

7.1 Visão geral

Todas as crateras são geradas, neste capítulo, a partir da mesma condição inicial. Dessa forma, resultados diferentes para a configuração final do sistema, além do próprio formato da cratera objetivado dependem somente dos parâmetros alterados (coeficiente elástico, coeficiente de dissipação normal, coeficiente de atrito dinâmico, coeficiente de regularização de atrito, polidispersidade). Adotar essa estratégia nos garante um maior controle sobre a diferença entre as configurações finais.

De outra forma, seria mais interessante adotar uma estratégia diferente, a qual demanda mais tempo: obter diferentes crateras a partir de diferentes condições iniciais, analisá-las pela variação de um único parâmetro dentre os supracitados, (fixando-se os restantes) e então repetindo a simulação para todos os parâmetros envolvidos na dinâmica do sistema.

O poço padrão que é cavado do leito livre de grãos possui altura fixa igual ao comprimento de 39 partículas de fronteira enfileiradas. A largura total do leito é também fixa e igual ao comprimento de 100 partículas de fronteira enfileiradas. Exceto quando abordarmos o caso da influência da posição α do poço inicial cavado, todas as crateras são centralizadas na posição de 50 partículas de fronteira. Ademais, fixamos uma cavidade padrão de razão de aspecto $H/L = 1.0$, a não ser que explicitemos o contrário.

Brevemente observando as Figuras da evolução do colapso, notamos que, em todos os instantes iniciais, vemos que as cadeias de forças se concentram nas pontas do recipiente, e vão gradualmente diminuindo de intensidade à medida que nos aproximamos da cavidade. De fato, as partículas logo abaixo da cavidade não estão sendo comprimidas por partículas acima, logo não sofrem menos forças. No entanto, devemos atentar que é incorreto afirmar que os grãos mais fundos que estão abaixo da cavidade sofrem apenas as forças daquelas verticalmente vizinhas. Na verdade, vemos que existem cadeias de forças que se transferem das laterais até os grãos mais profundos que estão abaixo da cavidade, o que podemos notar pela cor mais intensa destes grãos.

Essa configuração à qual submetemos o nosso sistema é instável. De imediato, o sistema "sente" que houve uma remoção de grãos. No entanto, certamente não é qualquer remoção de partículas que gera uma instabilidade na configuração do sistema: é a remoção de partículas que contribuíam significativamente para o apoio das partículas adjacentes. É a *quebra* das cadeias de forças que está por trás dessa instabilidade: com efeito, retirar uma partícula que está sofrendo uma força pouco intensa (no gradiente de cores, em amarelo) é muito diferente de retirar uma partícula que sofre uma força muito intensa (no gradiente de cores, em vermelho).

Isso é claro, e não é necessário realizar testes sobre a diferença entre cavarmos algumas partículas horizontalmente, das camadas mais superiores do leito, e cavarmos algumas partículas verticalmente, *quebrando* cadeias de forças.

7.1.1 Influência dos parâmetros físicos

7.1.1.1 Coeficiente elástico k_n

De acordo com o modelo de força normal restitutiva utilizada nas nossas simulações (ver Capítulo 3), o coeficiente elástico k_n influencia de forma diretamente proporcional na força que uma partícula irá sofrer: coeficientes elásticos maiores provocam forças maiores, e a partícula deforma mais (já que usamos dinâmica molecular de esferas moles em nossas simulações). Não só isso, devido à natureza linear do modelo utilizado para a força restitutiva, temos que o k_n não influencia tanto nisto quanto seria no caso de um modelo não-linear hertziano, por exemplo. Isso porque, como a interpenetração virtual sempre tem um valor menor que uma unidade, para potências ξ^p , $p > 1$, o valor de k_n acaba por pesar mais no cálculo da força.

A variação de k_n é mostrada na evolução do colapso de uma cratera com a razão de aspecto padrão de $H/L = 1.0$, na Figura 7.2. O lado esquerdo mostra a evolução para $k_n = 2 \times 10^5 \text{kg/s}^2$ e o lado direito, para $k_n = 10^6 \text{kg/s}^2$.

Comparando-se as Figuras 7.2a e 7.2b, vemos que o gradiente de cores se apresenta de forma diferente. Ora, para um k_n maior, temos grãos mais rígidos que, portanto, sofrem uma menor intensidade da força elástica. Daí, nota-se a evidente diferença na distribuição das cadeias de forças. Com uma observação mais apurada também conseguimos identificar que a altura do leito livre é levemente maior no caso de $k_n = 10^6 \text{kg/s}^2$ do que naquele - claro, pois sendo as partículas mais rígidas, sofrem menores deformações para uma mesma intensidade da força elástica.

A diferença na rigidez das colisões acaba por influenciar, também, na dissipação da energia. Pelo modelo da equação 3.6, F_n terá uma intensidade maior pela maior contribuição positiva no termo $k_n \xi$. Assim, os grãos tendem a acelerar mais e então adquirem mais velocidade. Adquirindo mais velocidade, os grãos passam a dissipar mais energia pelo termo $-\gamma \dot{\xi}$. Isso causa um efeito negativamente retroativo, mas cuja competição entre o maior k_n e a dissipação pela maior velocidade é vencida pelo termo restitutivo: isso se evidencia quando comparamos as Figuras 7.2c e 7.2c, pois vemos que quando os degraus esquerdo e direito se colapsam, vemos um momento maior nos grãos com k_n maior.

Em contrapartida, esse efeito acaba por uniformizar a superfície da cratera, como visto na Figura 7.2f, pois o escoamento transfere um número significativo de partículas para o centro do leito após o colapso dos degraus esquerdo e direito, o que não acontece no outro caso, da Figura 7.2e.

As evoluções das energias adimensionais em função do tempo adimensional são mostradas na Figura 7.1. Na Figura 7.1a é fácil ver que, para k_n maiores, temos energias cinética, potencial gravitacional e rotacional médias adimensionais maiores. Isso sela a suspeita que tínhamos de a competição entre o termo restitutivo e o termo dissipativo da força normal ser vencido pelo termo restitutivo. Isso acaba por influenciar no aumento da energia rotacional, como se vê na Figura 7.1c. Embora próximos, não sabemos explicar o fato de a curva para $k_n = 9 \times 10^5 \text{kg/s}^2$ estar num patamar superior àquela correspondente a $k_n = 10^6 \text{kg/s}^2$.

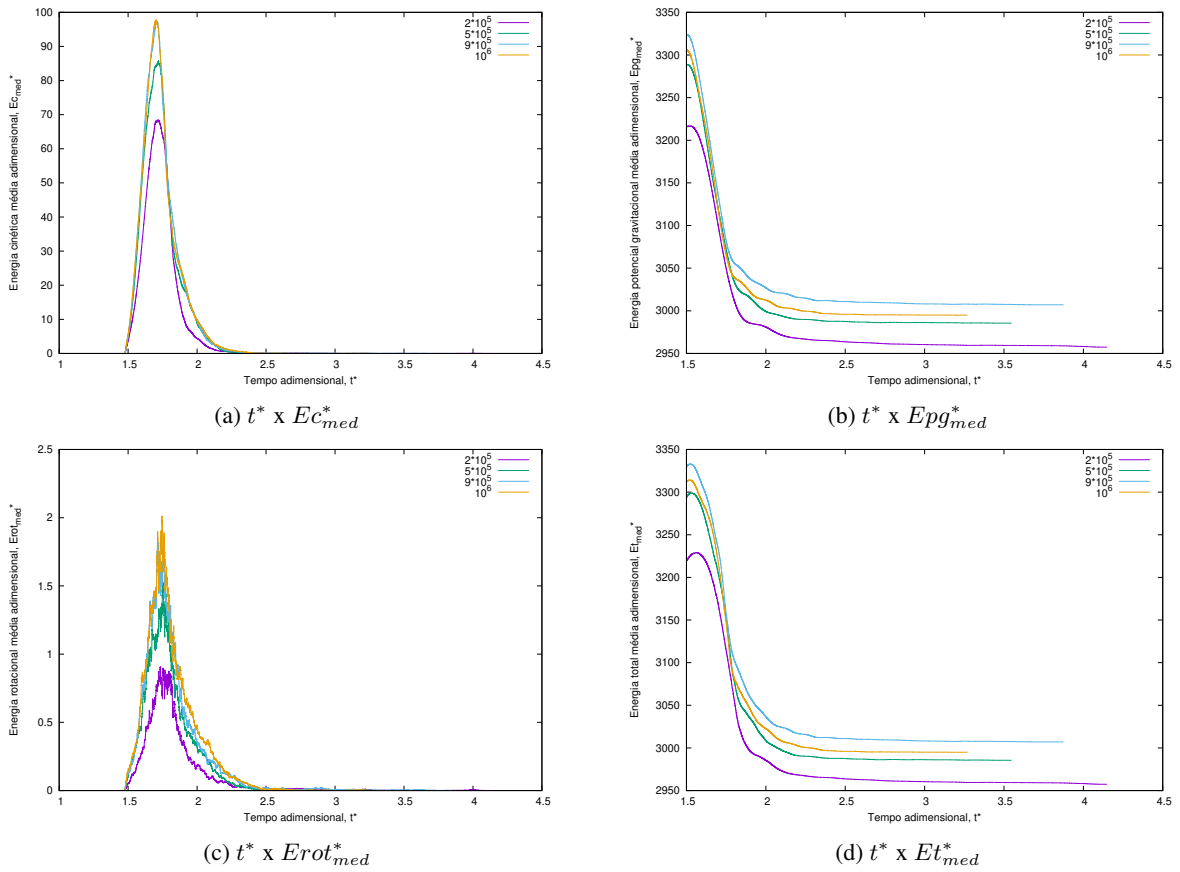


Figura 7.1: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de k_n .

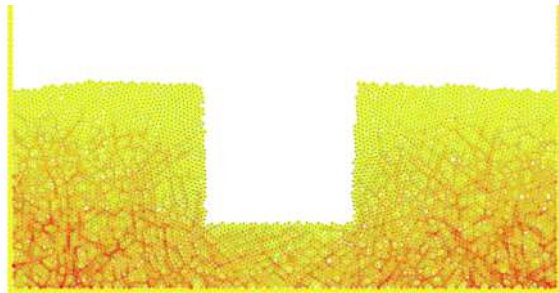
7.1.1.2 Coeficiente de dissipação normal γ

Assim como o coeficiente elástico k_n , o coeficiente de dissipação viscosa, γ , também influencia significativamente em como se dá o escoamento dos grãos do sistema à medida que a cratera colapsa.

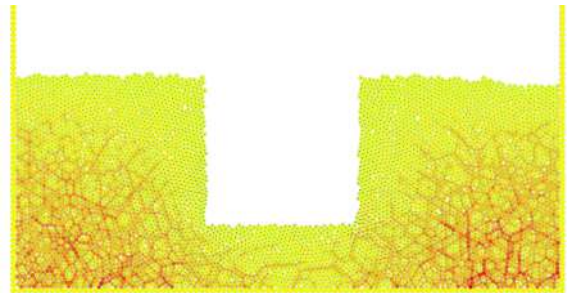
Na Figura 7.3 comparamos a evolução para $\gamma = 5 \times 10^3 kg/s$ e $\gamma = 5 \times 10^4 kg/s$. Nas Figuras 7.3c e (7.3d), vemos que um γ menor, ao dissipar menos energia, acaba por manter parte do momento adquirido pelas partículas do topo dos degraus esquerdo e direito quando atingem a superfície livre do leito. Daí, quando se encontram as partículas dos degraus no centro da cratera, elas tendem a subir (ver Figura 7.3c).

Vejam que, aparentemente, o escoamento do degrau esquerdo, que colapsa para direita, e o do degrau direito, que colapsa para a esquerda, provoca uma compressão temporária do centro do sistema; após a elevação das partículas, a superfície livre da cratera é uniformizada. Com um γ maior, ocorre uma dissipação maior da energia, que acaba por parar o escoamento mais rapidamente - na Figura 7.3d, vemos que esse efeito quase não ocorre - a cratera possui então um formato mais bem definido, não-uniforme.

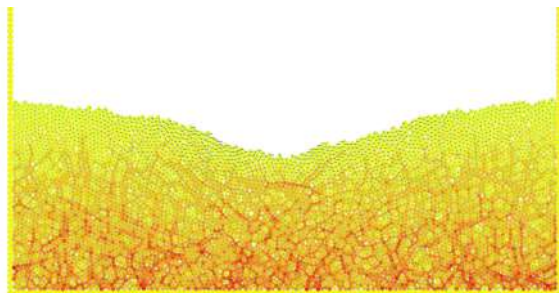
Quanto às evoluções das energias, mostradas na Figura 7.3, observamos que, como esperado, valores de γ maiores terão maior dissipação de energia.



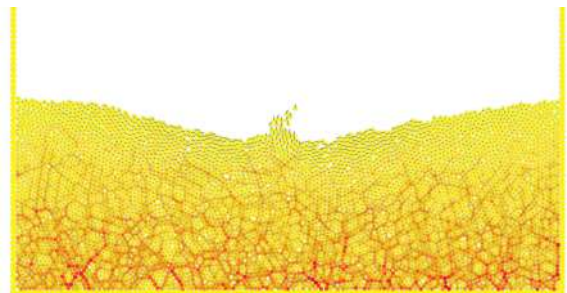
(a) $t = 6.02s, k_n = 2 \times 10^5 kg/s^2$



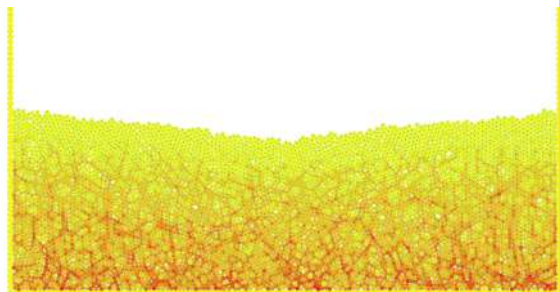
(b) $t = 5.15s, k_n = 10^6 kg/s^2$



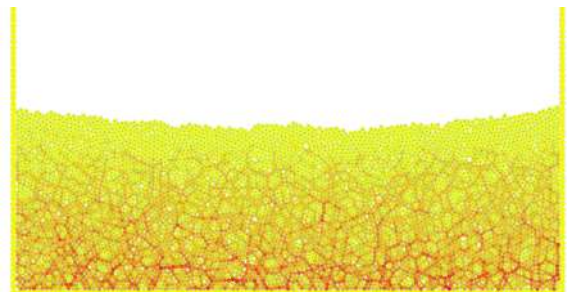
(c) $t = 7.15s, k_n = 2 \times 10^5 kg/s^2$



(d) $t = 6.40s, k_n = 10^6 kg/s^2$



(e) $t = 13.88s, k_n = 2 \times 10^5 kg/s^2$



(f) $t = 10.44s, k_n = 10^6 kg/s^2$

Figura 7.2: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ para $k_n = 2 \times 10^5 kg/s^2$ e $k_n = 10^6 kg/s^2$. 7284 partículas.

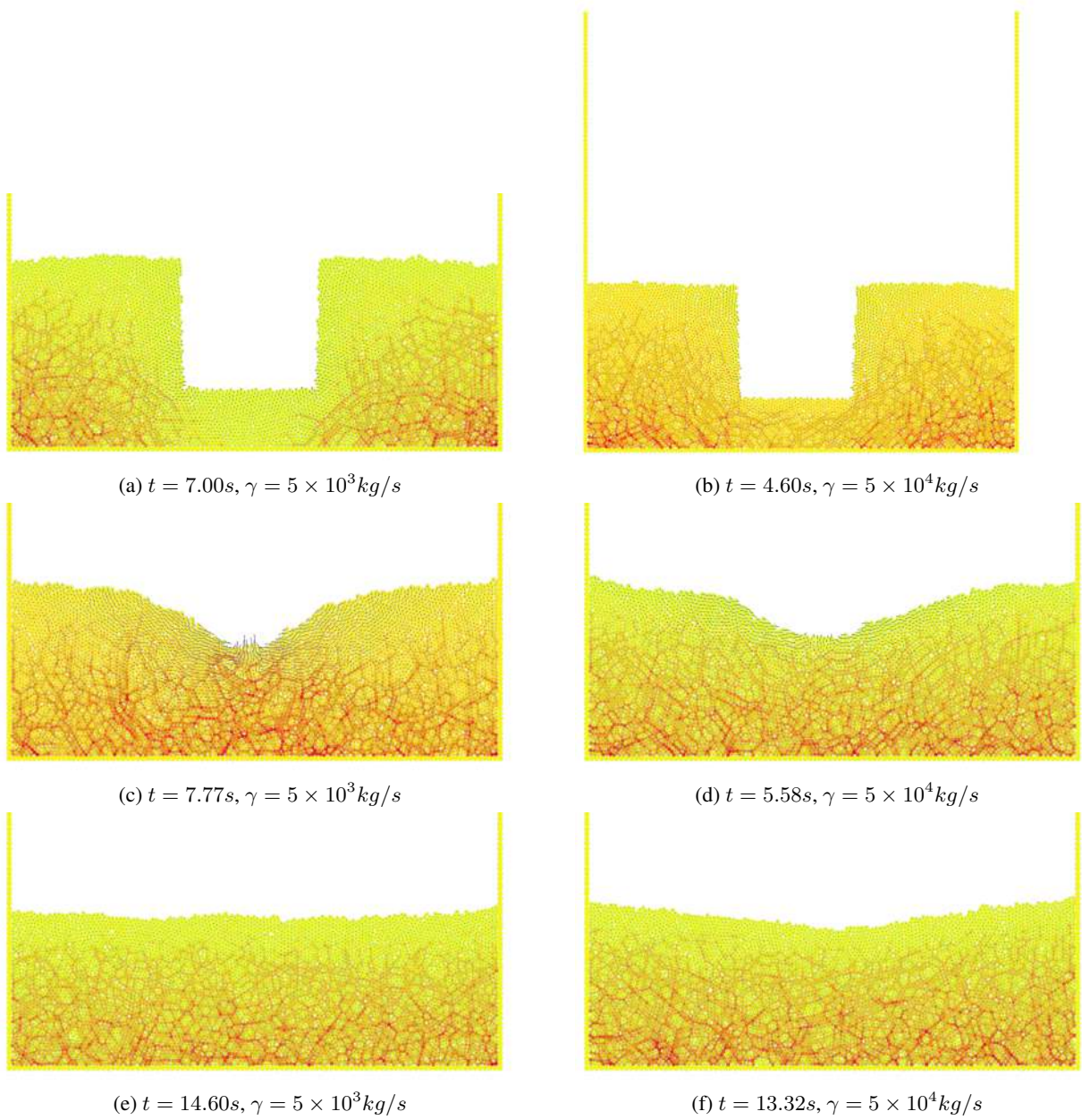
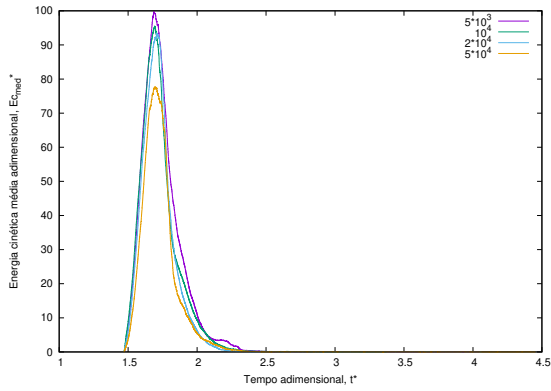
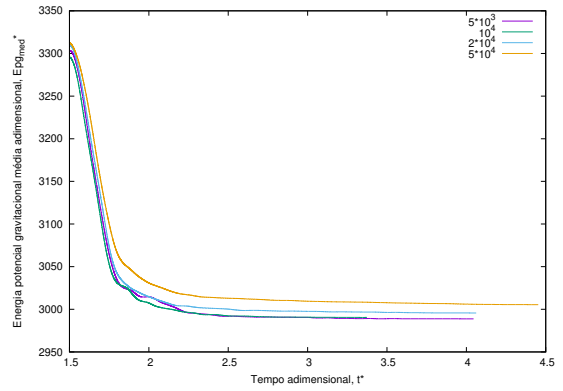


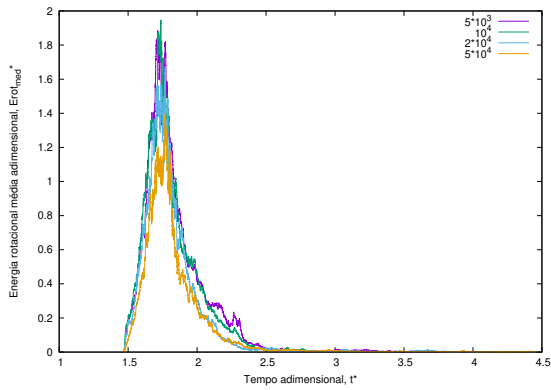
Figura 7.3: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ para $\gamma = 5 \times 10^3 kg/s$ e $\gamma = 5 \times 10^4 kg/s$. 7284 partículas.



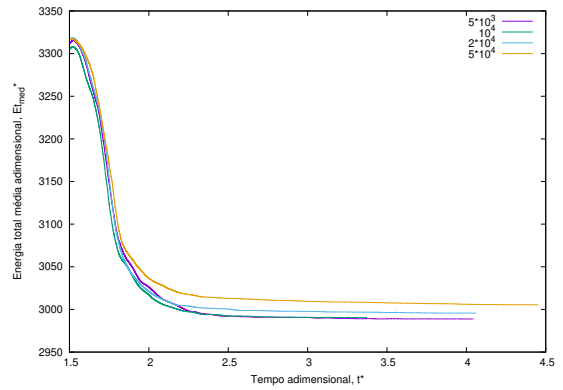
(a) $t^* \times E_{c_{med}}^*$



(b) $t^* \times E_{pg_{med}}^*$



(c) $t^* \times E_{rot_{med}}^*$



(d) $t^* \times E_{t_{med}}^*$

Figura 7.4: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de γ .

7.1.1.3 Coeficiente de atrito dinâmico μ_s

No caso da variação do coeficiente de atrito dinâmico, temos na Figura 7.6, a evolução do colapso para $\mu = 0.1$ e $\mu = 1.0$. Na Figura 7.5, vemos que a variação do coeficiente de atrito dinâmico pouco muda a evolução das energias. Certamente, a energia rotacional varia significativamente com este parâmetro, mas é insignificante nos outros casos.

Comparando-se as Figuras 7.6c e 7.6d, vemos que um baixo coeficiente de atrito dinâmico provoca uma maior preservação do momento no escoamento quando os degraus esquerdo e direito se chocam, uma vez que as partículas deslizam mais umas sobre as outras. Vemos então que as partículas adquirem uma maior velocidade nesse instante, como pode ser visto pela altura maior do pico de grãos formado no centro.

Além disso, note que no caso da Figura 7.6d, percebemos que o maior atrito tende a provocar uma cratera mais evidente. No entanto, devido à elevação das partículas no centro da cratera após o choque dos degraus, a cratera acaba por ser uniformizada. Veja que as crateras finais são praticamente idênticas; assim, conjecturamos que o atrito dinâmico possui grande influência sobre a cratera final, mas esse efeito é diluído quando aliado a valores relativamente baixos de γ (menor dissipação) e maiores valores de k_n (grãos mais rígidos). É necessária uma investigação mais profunda.

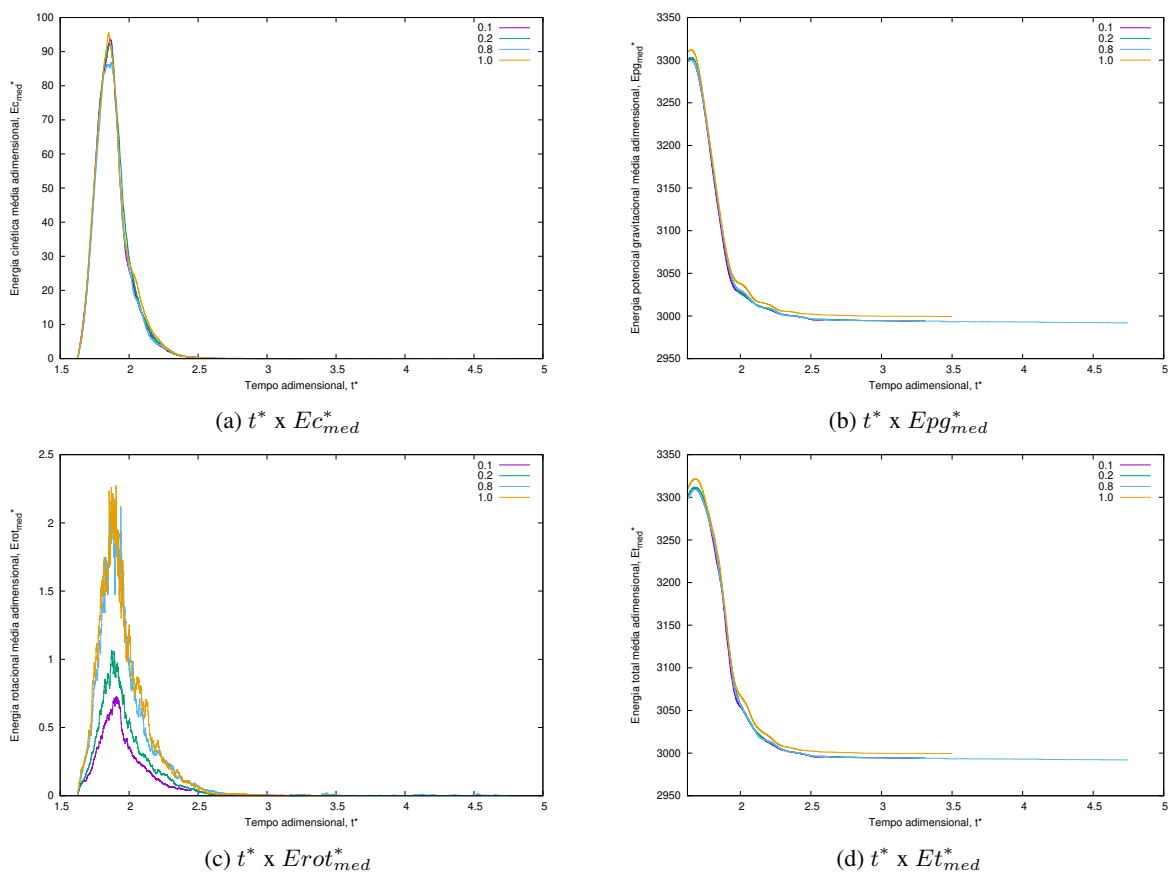


Figura 7.5: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de μ_s .

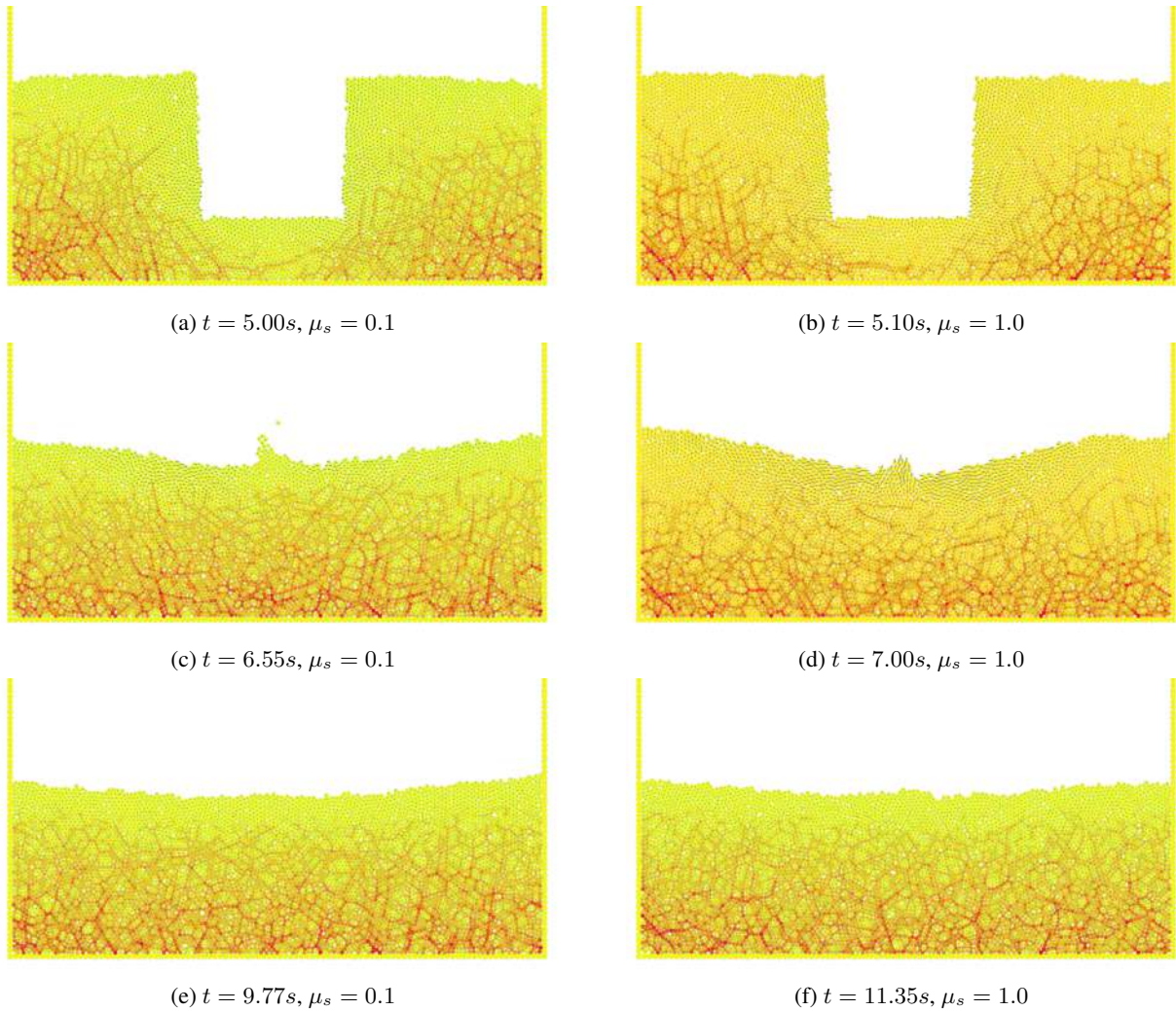
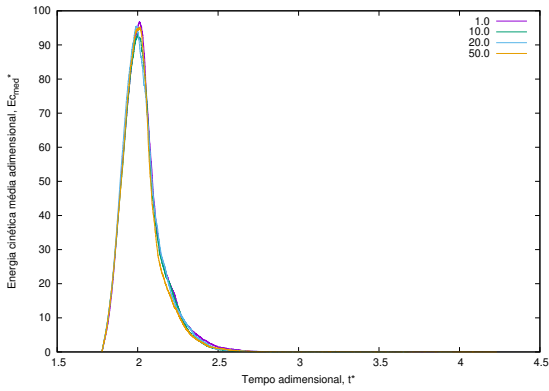


Figura 7.6: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ para $\mu_s = 0.1$ e $\mu_s = 1.0$. 7284 partículas.

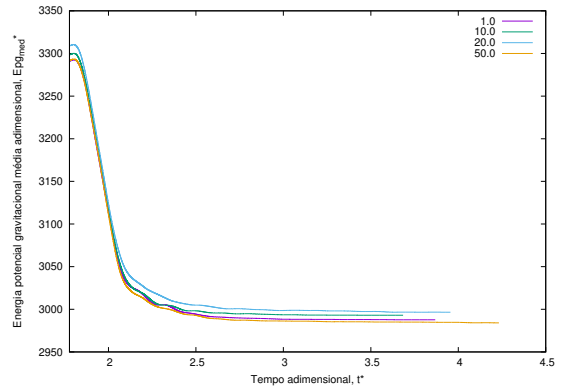
7.1.1.4 Coeficiente de regularização de atrito γ_s

Uma vez que o coeficiente de regularização de atrito γ_s atua somente quando a velocidade tangencial relativa entre duas partículas é próxima de zero, é esperado que ele pouco influencie na cratera final, já que passa a atuar somente quando as partículas estão próximas de atingir o repouso no equilíbrio metaestável.

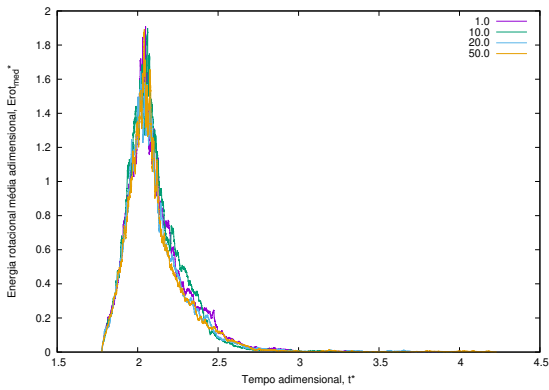
Todavia, de forma a manter nosso trabalho autocontido, documentamos aqui a evolução das energias durante o colapso.



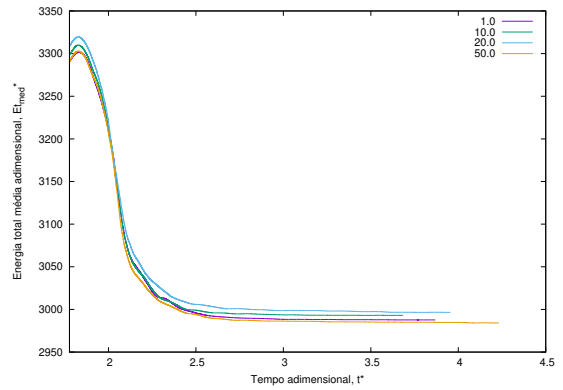
(a) $t^* \times E_{c_{med}}^*$



(b) $t^* \times E_{pg_{med}}^*$



(c) $t^* \times E_{rot_{med}}^*$



(d) $t^* \times E_{t_{med}}^*$

Figura 7.7: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes valores de γ_s .

7.1.2 Influência da razão de aspecto H/L

Analisaremos agora a influência da razão de aspecto H/L no colapso da cratera granular. Plotamos a evolução das energias e os campos de velocidades médias locais nos instantes mais importantes do colapso para os casos de $H/L = 1.0, 1.5, 2.0, 0.75$ e 0.5 . No caso de $H/L = 0.5$ e $H/L = 0.75$, fizemos duas simulações para cada: uma cratera larga e uma cratera estreita, para tentarmos entender a influência do tamanho do poço cavado, mantendo-se a razão de aspecto.

Na Figura 7.8, temos os gráficos da evolução das energias médias adimensionais em função do tempo adimensional. No gráfico da Figura 7.8a, fixando a razão de aspecto $H/L = 1.0$ como a padrão, vemos que ao cavarmos poços com razões de aspecto maiores, temos picos de energia menores à medida que essa razão aumenta.

Similarmente, as curvas das energias potenciais gravitacionais médias adimensionais possuem patamares maiores para razões de aspecto maiores.

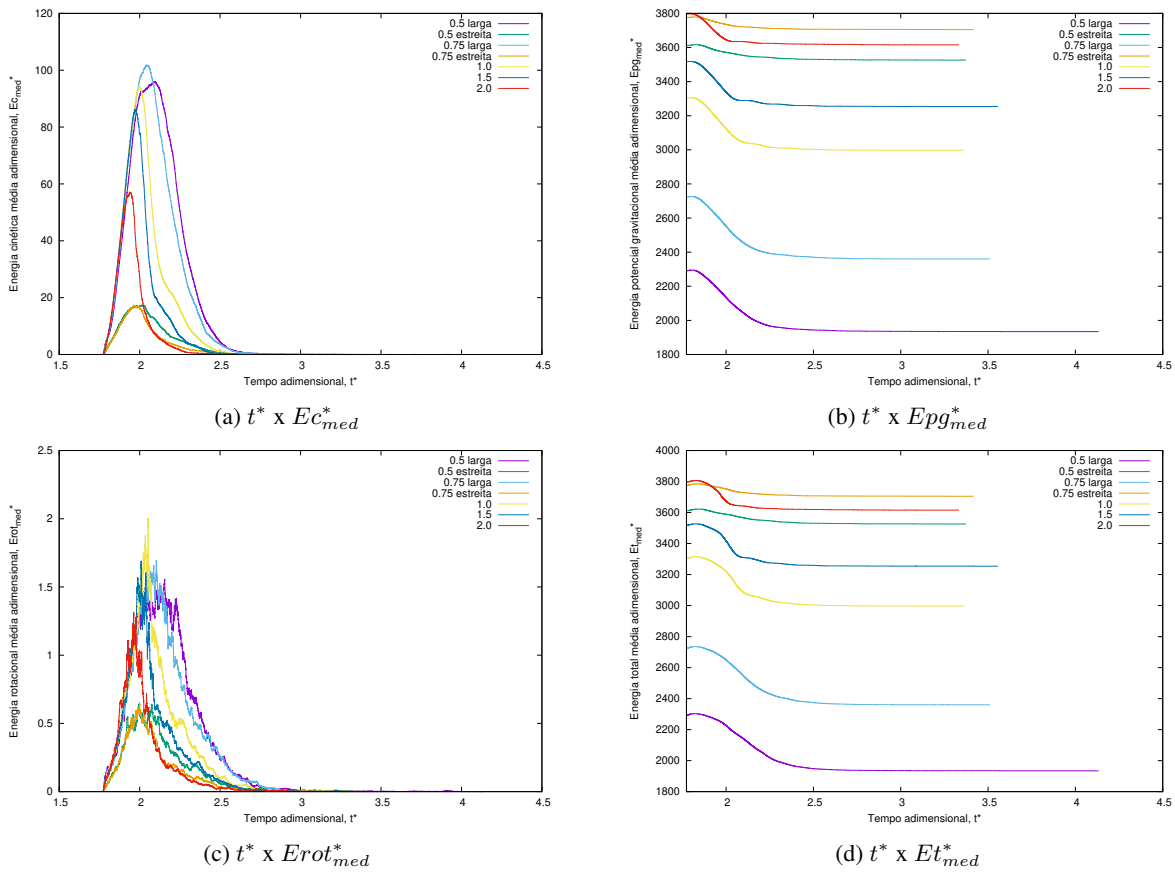


Figura 7.8: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes razões de aspecto H/L .

7.1.2.1 $H/L = 1.0, 1.5$ e 2.0

Nas Figuras 7.9, 7.10 e 7.11 vemos os campos de velocidades médias locais para os referidos tempos nos casos de $H/L = 1.0$, $H/L = 1.5$ e $H/L = 2.0$, respectivamente.

Comparando-se a evolução para estes três casos, vemos que nos instantes que seguem a cava do poço, vemos que as partículas do degrau esquerdo possuem velocidades maiores que aquelas do degrau direito. Como todas as cavidades são geradas a partir da mesma *condição inicial*, o fenômeno se repete. No lado esquerdo, as partículas tendem a cair primeiro, e então preencher a cratera; no lado direito, predomina um efeito cisalhante. Isso pode ser explicado pela quebra das cadeias de forças: enquanto no lado direito as cadeias de forças são mais bem distribuídas, no lado esquerdo o apoio era predominantemente sobre as partículas que estavam presentes no poço cavado.

Com isso, para $H/L = 1.0$, o degrau direito colapsa primeiro, e assim nota-se uma assimetria no escoamento. Com efeito, em tempos subsequentes, notamos que o escoamento formado pelo colapso do degrau esquerdo "carrega" as partículas do lado esquerdo, que ainda irão atingir o fundo, para a direita. Ademais, o efeito de o colapso dos degraus se encontrar no centro acaba por formar um escoamento no sentido vertical, que uniformiza a cratera (Figuras 7.9d e 7.12j).

Nos casos de $H/L = 1.5$ e $H/L = 2.0$, temos o mesmo fenômeno de que o degrau esquerdo colapsa antes do degrau direito. No entanto, não ocorre de o escoamento das partículas do degrau esquerdo "carregar" aquelas do lado direito, pois a cavidade é funda com relação à sua largura: as partículas então vão sendo depositadas no fundo da cavidade, preenchendo-a. Ademais, vemos que nossas cavidades para estes casos envolveram a remoção de poucas partículas, e portanto o fenômeno que predomina é o de preenchimento do poço, e as crateras são quase que imperceptíveis (ver Figura 7.13). Omitimos aqui a evolução do colapso para o caso de $H/L = 1.5$ - ele é muito similar àquele de $H/L = 2.0$, tanto no escoamento quanto no formato da cratera.

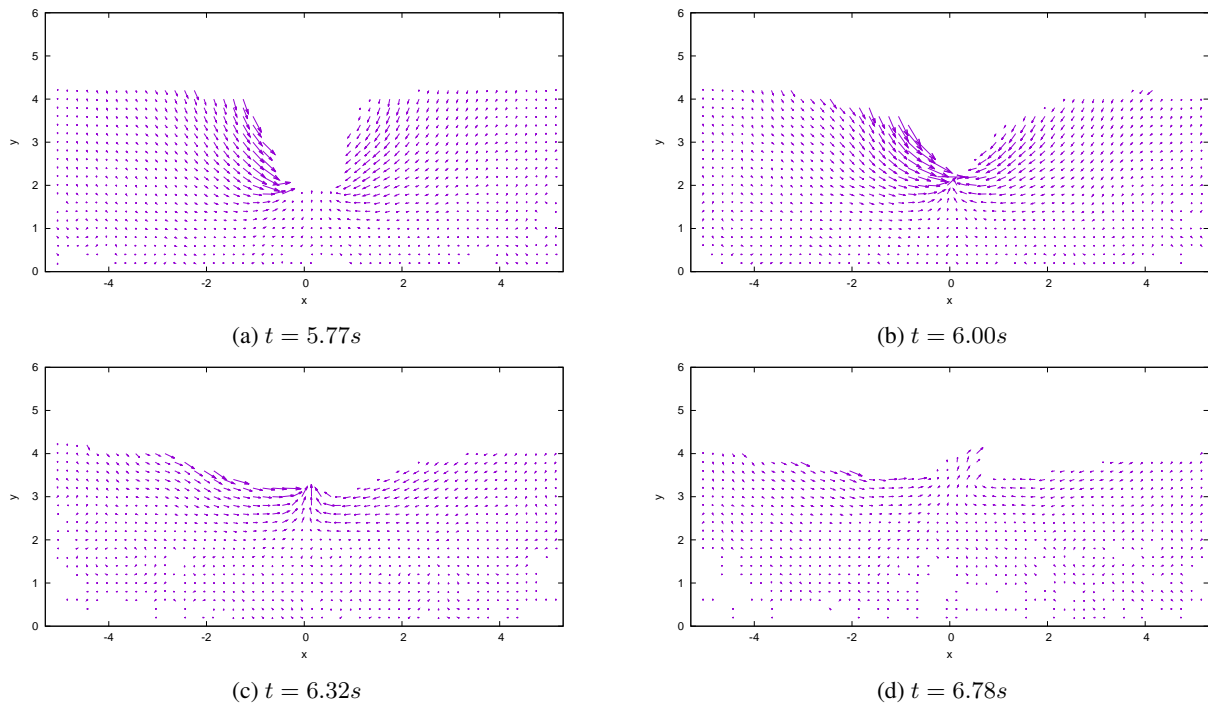


Figura 7.9: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$. 7284 partículas.

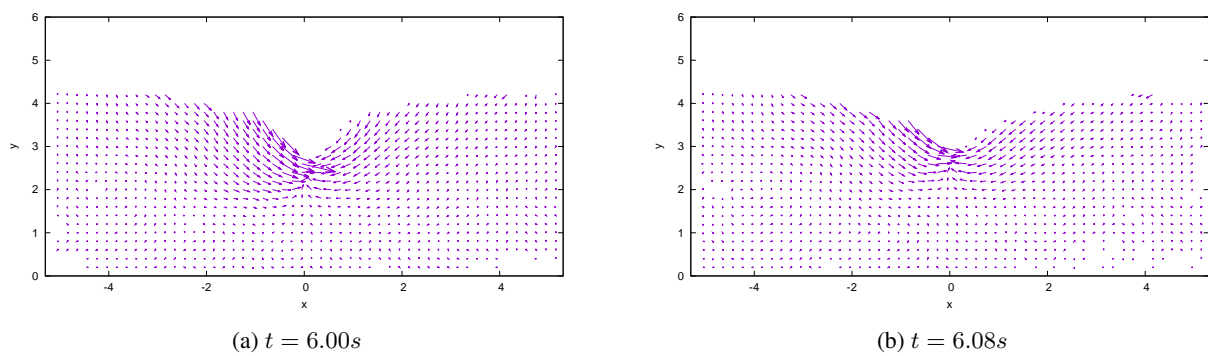


Figura 7.10: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.5$. 7284 partículas.

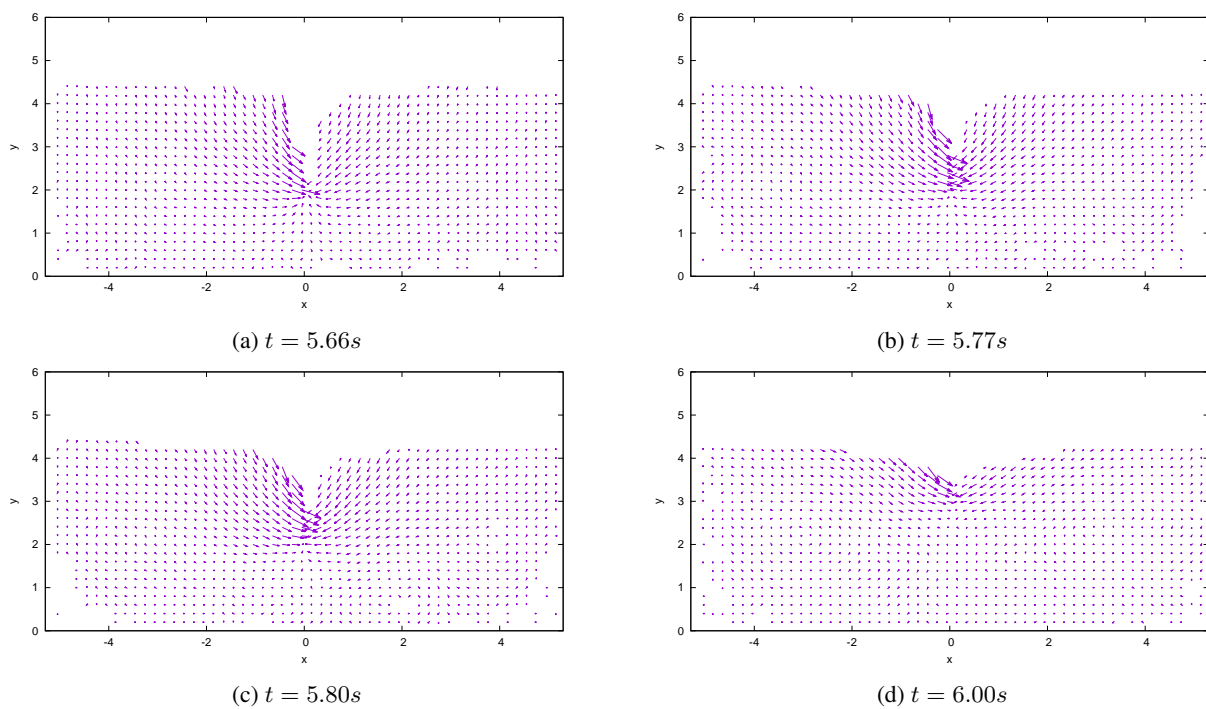


Figura 7.11: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 2.0$. 7284 partículas.

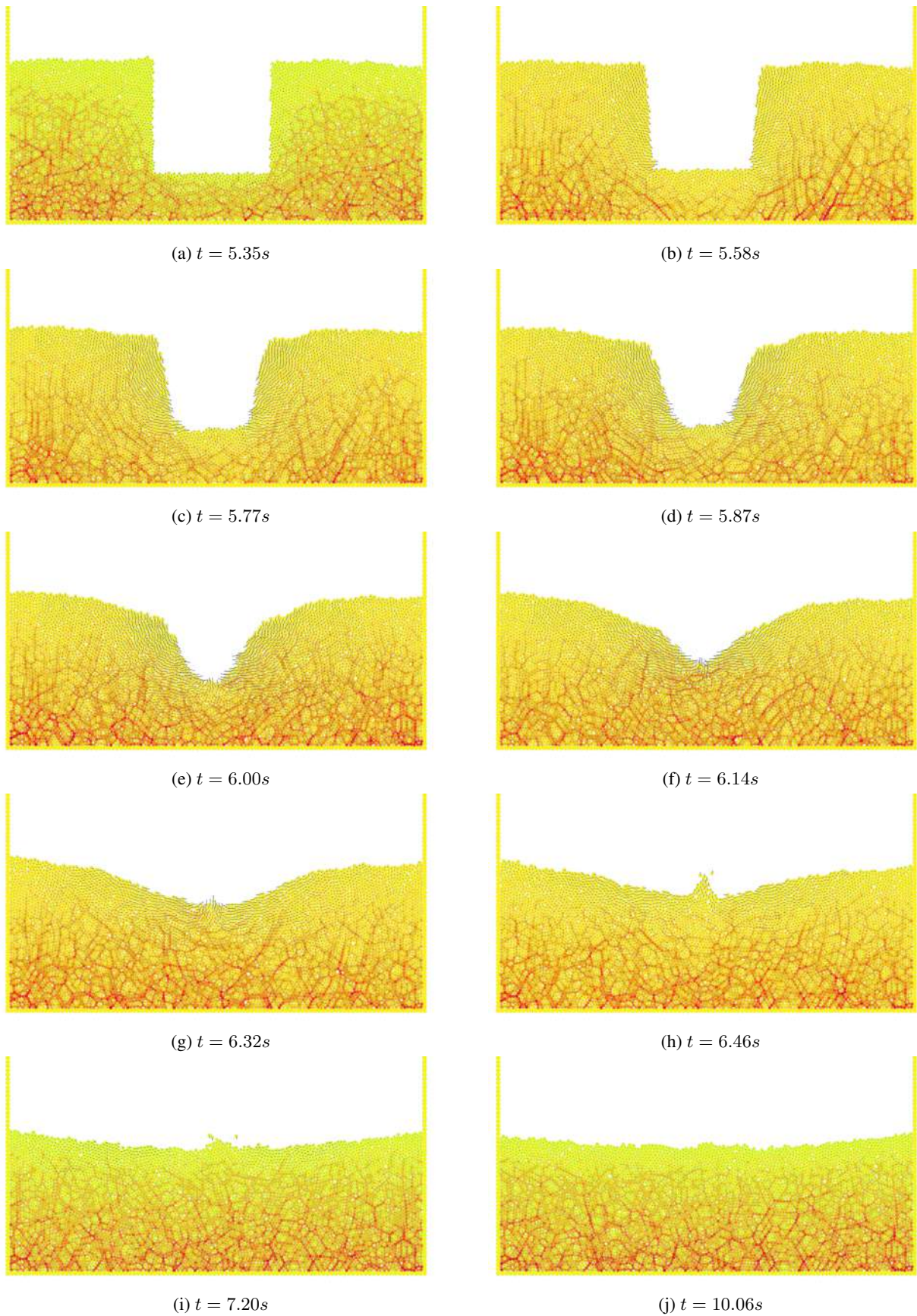


Figura 7.12: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$. 7284 partículas.



Figura 7.13: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 2.0$. 7284 partículas.

7.1.2.2 $H/L = 0.5$ e $H/L = 0.75$

Nas Figuras 7.14, 7.15, 7.16 e 7.17 temos os campos de velocidades médias locais para instantes de tempo relevantes do colapso nos casos de $H/L = 0.5$ com cratera larga, $H/L = 0.5$ com cratera estreita, $H/L = 0.75$ com cratera larga e $H/L = 0.75$ com cratera estreita, respectivamente.

Comparando a evolução para a razão de aspecto de $H/L = 0.75$, nas Figuras 7.16b e 7.17a, vemos que o colapso se dá de forma muito similar. No entanto, a profundidade e largura totais em relação à parede influenciam no formato da cratera final. Expliquemos: enquanto no caso de uma cratera larga possuímos uma cratera larga e alta (ver Figura 7.19, para o caso de $H/L = 0.5$, em que o mesmo fenômeno se repete), as partículas dos degraus esquerdo e direito estão muito próximas da parede e quase que escoam totalmente para preencher a cratera.

Aliado a isso, temos que os grãos do topo do degrau escoam por uma distância significativa até se chocarem com os grãos do degrau oposto, e uma cratera alta só contribui para maiores velocidades até esse entre os dois escoamentos em sentidos contrários. Assim, o escoamento que se eleva no centro da cratera acaba por formar duas pequenas crateras, separadas no centro do recipiente.

No caso de crateras mais estreitas, as partículas dos degraus que efetivamente irão colapsar estão longes do centro! Isso nos garante que a cratera irá ser muito mais visível, visto que veremos uma deposição de partículas que começa com partículas mais elevadas perto da parede, e que vai gradualmente decrescendo em altura à medida que nos aproximamos do centro do recipiente, que coincide com a posição x do centro da cratera. De fato, comparando as Figuras 7.16b e 7.17b, assim como as Figuras 7.14b e 7.15b, vemos que para as crateras estreitas, as partículas próximas à parede tem velocidade quase nula, o que não é verdade para o caso das crateras largas.

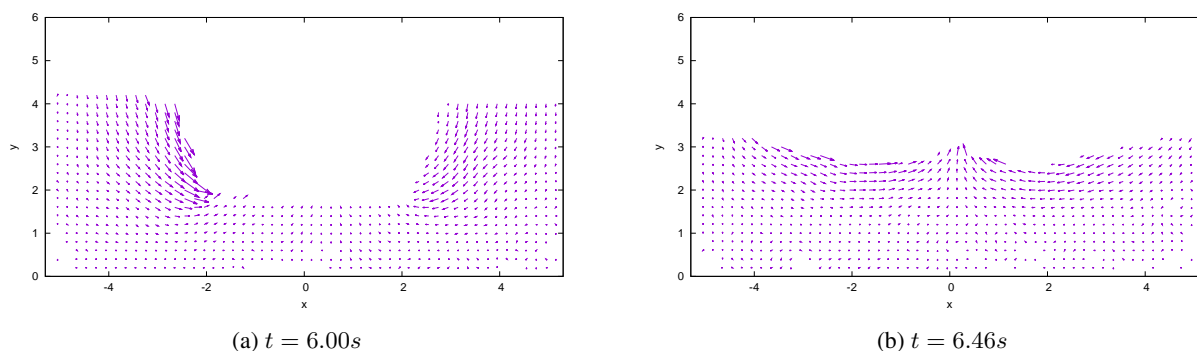
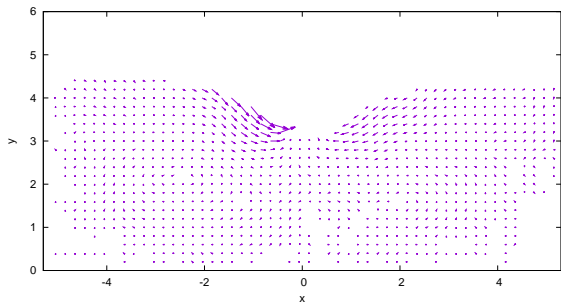
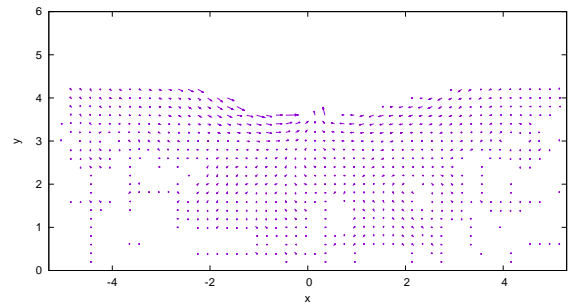


Figura 7.14: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera larga com $H/L = 0.5$. 7284 partículas.

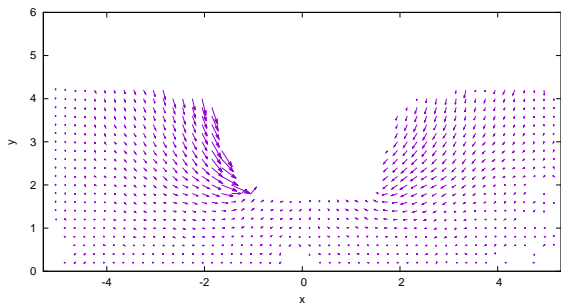


(a) $t = 6.00s$

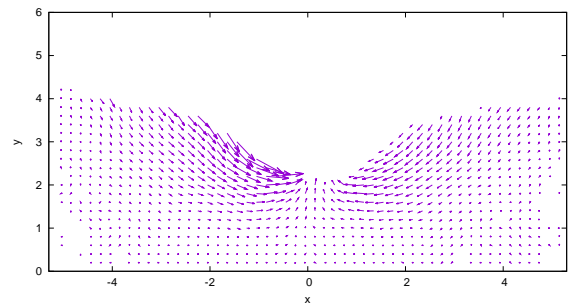


(b) $t = 6.46s$

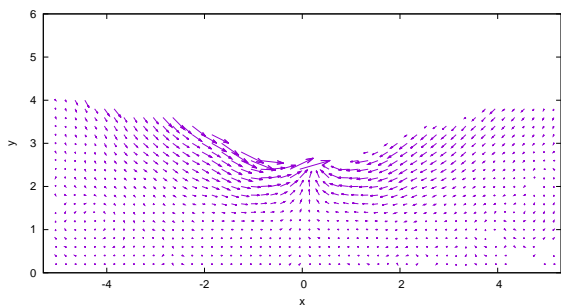
Figura 7.15: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera estreita com $H/L = 0.5$. 7284 partículas.



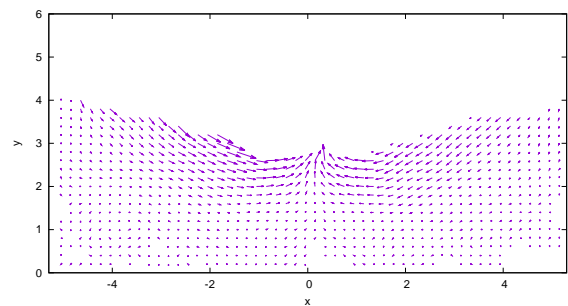
(a) $t = 5.77s$



(b) $t = 6.14s$

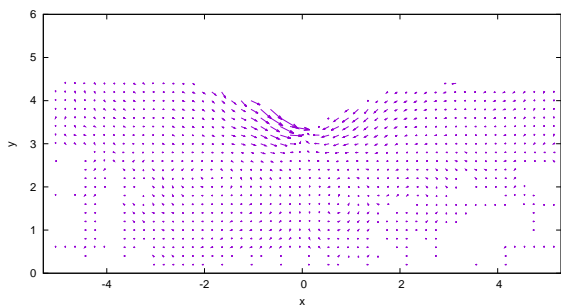


(c) $t = 6.32s$

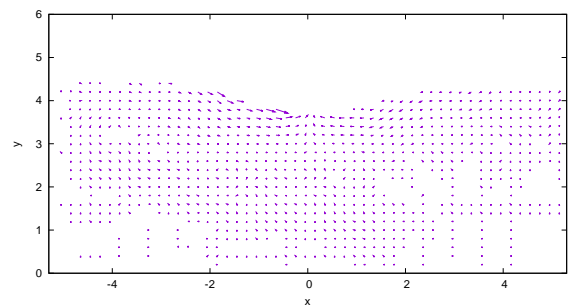


(d) $t = 6.46s$

Figura 7.16: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera larga com $H/L = 0.75$. 7284 partículas.



(a) $t = 6.00s$



(b) $t = 6.32s$

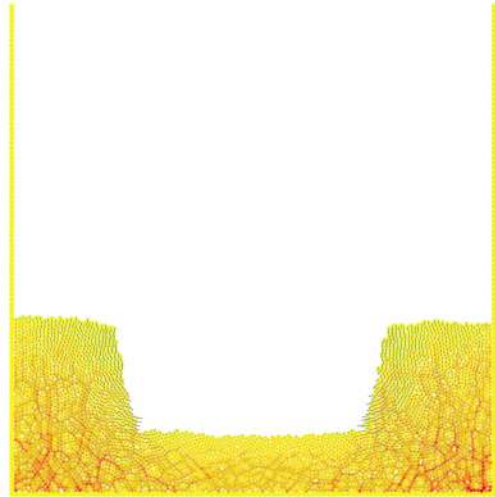
Figura 7.17: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera estreita com $H/L = 0.75$. 7284 partículas.



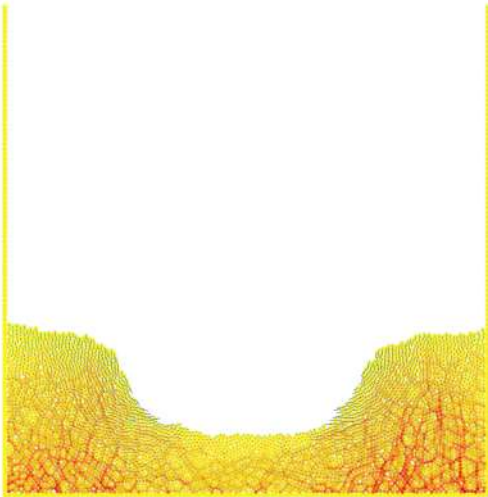
Figura 7.18: Evolução do colapso de uma cratera estreita com $H/L = 0.5$. 7284 partículas.



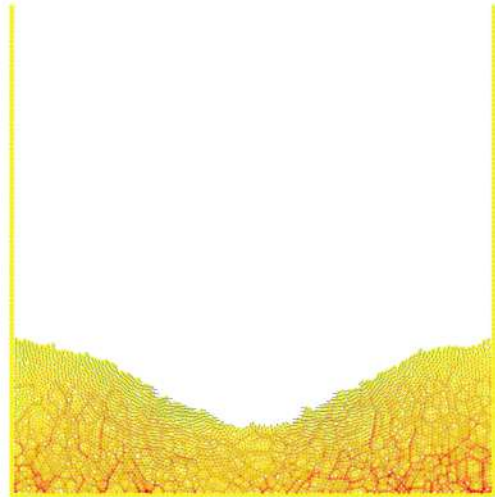
(a) $t = 5.35s$



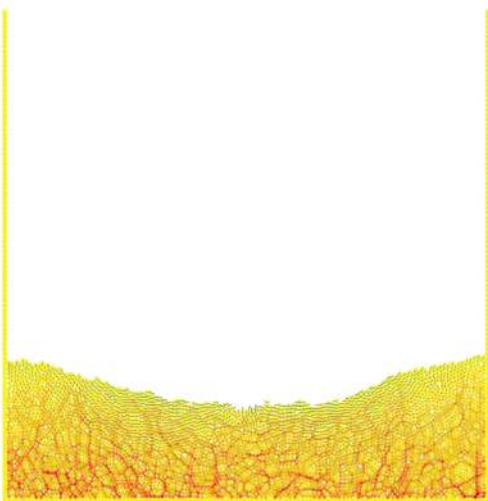
(b) $t = 5.77s$



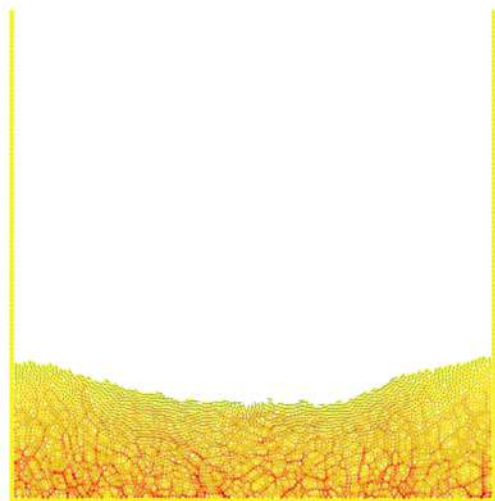
(c) $t = 6.00s$



(d) $t = 6.32s$



(e) $t = 6.64s$



(f) $t = 6.88s$

7.1.3 Influência da posição da cratera

Finalmente, investiguemos a influência da posição em que cavamos o poço com relação a parede. Foram feitas três simulações diferentes, para cavidades com mesma razão de aspecto $H/L = 1.0$, com centros da cavidade relativos à parede esquerda de 20, 30 e 40 partículas da fronteira enfileiradas.

Na Figura 7.20, temos os gráficos das evoluções das energias adimensionais em função do tempo adimensional. Notamos, juntamente com a evolução do colapso, mostradas nas Figuras 7.24, 7.25 e 7.26, que quanto mais longe da parede é cavado o poço, mais partículas irão colapsar (mais partículas presentes em cada degrau). Como, nos três casos, o degrau esquerdo poucas partículas que colapsam, à medida que aumentamos a distância da cavidade com relação à parede, esse número aumenta. Aumenta-se portanto a energia cinética média adimensional envolvidas na evolução do sistema. Quanto à energia potencial gravitacional, esse fator é quase que insignificante.

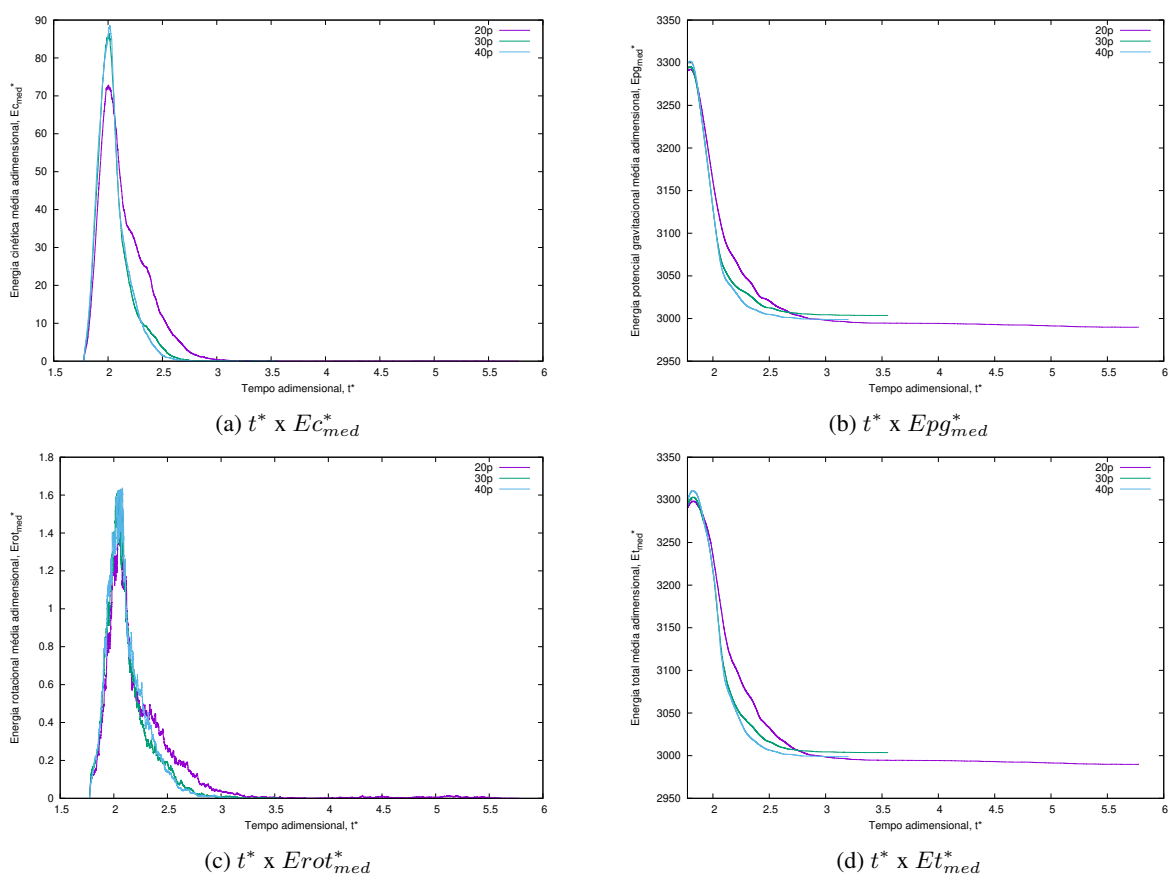


Figura 7.20: Evolução das energias cinética média, potencial gravitacional média, rotacional média e total média adimensionais em função do tempo adimensional t^* durante o colapso para diferentes posições α da cavidade.

Para $\alpha = 20p$, a posição da cratera é muito próxima da parede esquerda. Com isso, quase que a totalidade das cadeias de forças que serviam de apoio no instante anterior à cava é retirada, e então o degrau esquerdo colapsa "cai" rapidamente antes de escoar. Quanto ao degrau direito, o escoamento é mais sutil - há muitas partículas para escoarem na direção do poço cavado. Isso é evidente ao compararmos o campo de velocidades médias locais das Figuras 7.21a e 7.21b.

No campo da Figura 7.21a, as partículas que estão longe da cavidade só passam a "sentir" o escoamento quando suas cadeias de forças são parcialmente "quebradas" por este escoamento: só então elas começam a se mover em direção à cratera (Figura 7.21b). Isso se repete nos casos de $\alpha = 20p$ e $\alpha = 30p$, mas em menor intensidade, pois à medida que a distância α da cratera com relação à parede aumenta, isso acontece mais rapidamente.

Quanto ao formato da cratera final, vemos que para $\alpha = 20p$, a altura da superfície livre do leito final é menor próxima à parede esquerda, e vai aumentando à medida que avançamos à parede direita. Para $\alpha = 30p$, a menor altura da superfície livre vai se encontrar cada vez mais à direita da parede, por causa da posição do centro da cratera.

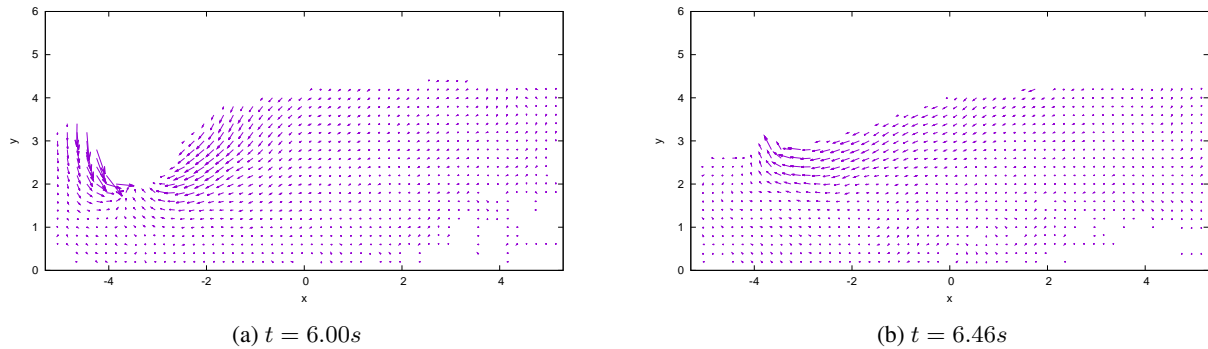


Figura 7.21: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 20p$. 7284 partículas.

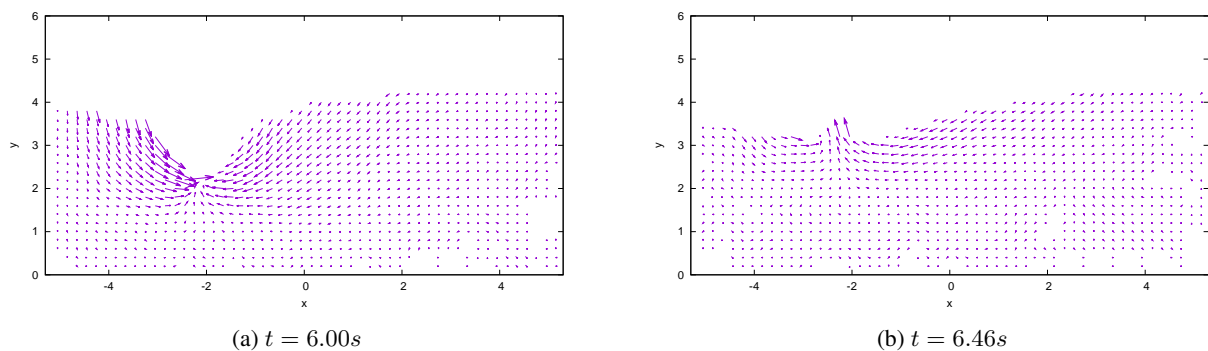


Figura 7.22: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 30p$. 7284 partículas.

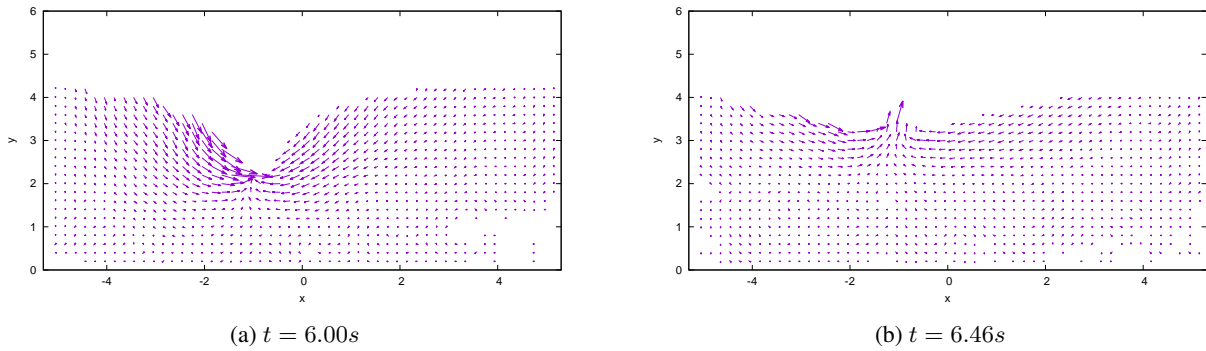


Figura 7.23: Campo de velocidades médias locais da evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 40p$. 7284 partículas.

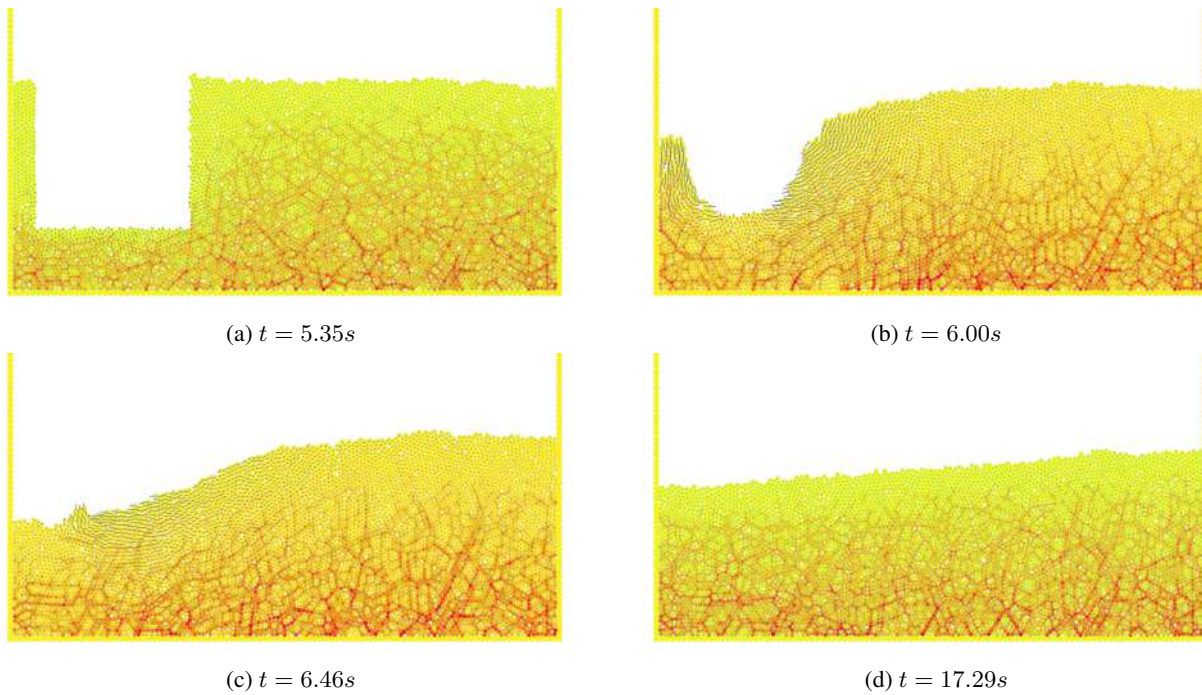


Figura 7.24: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 20p$. 7284 partículas.

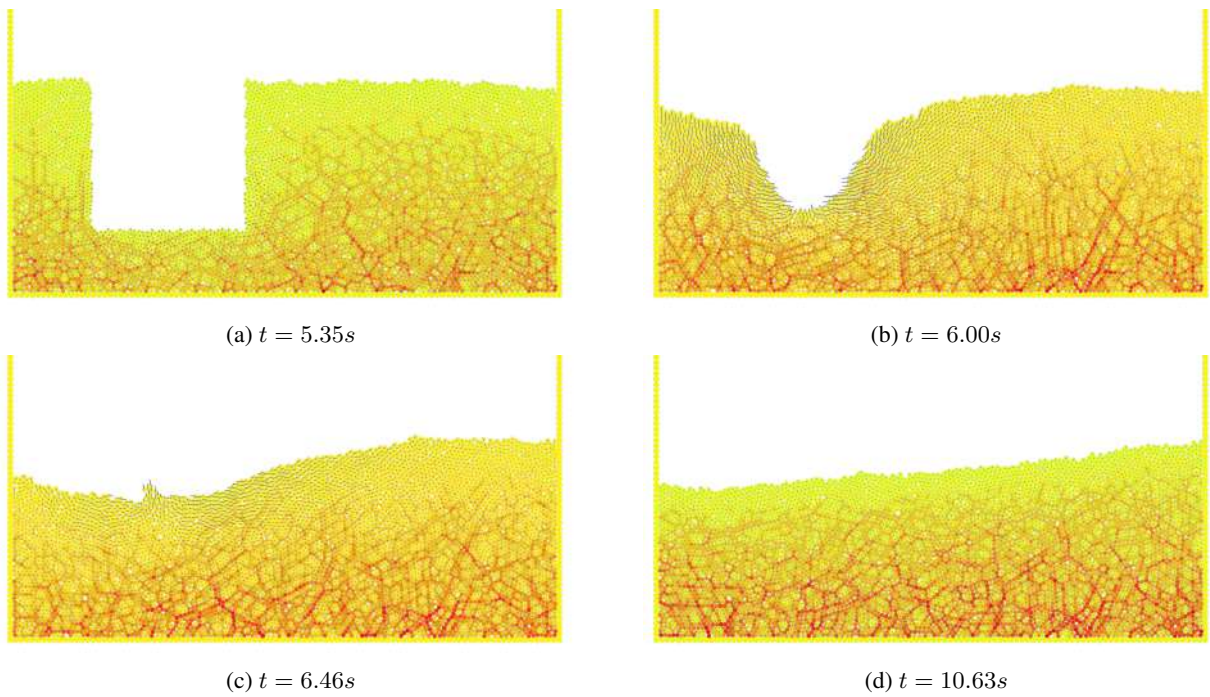


Figura 7.25: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 30p$. 7284 partículas.

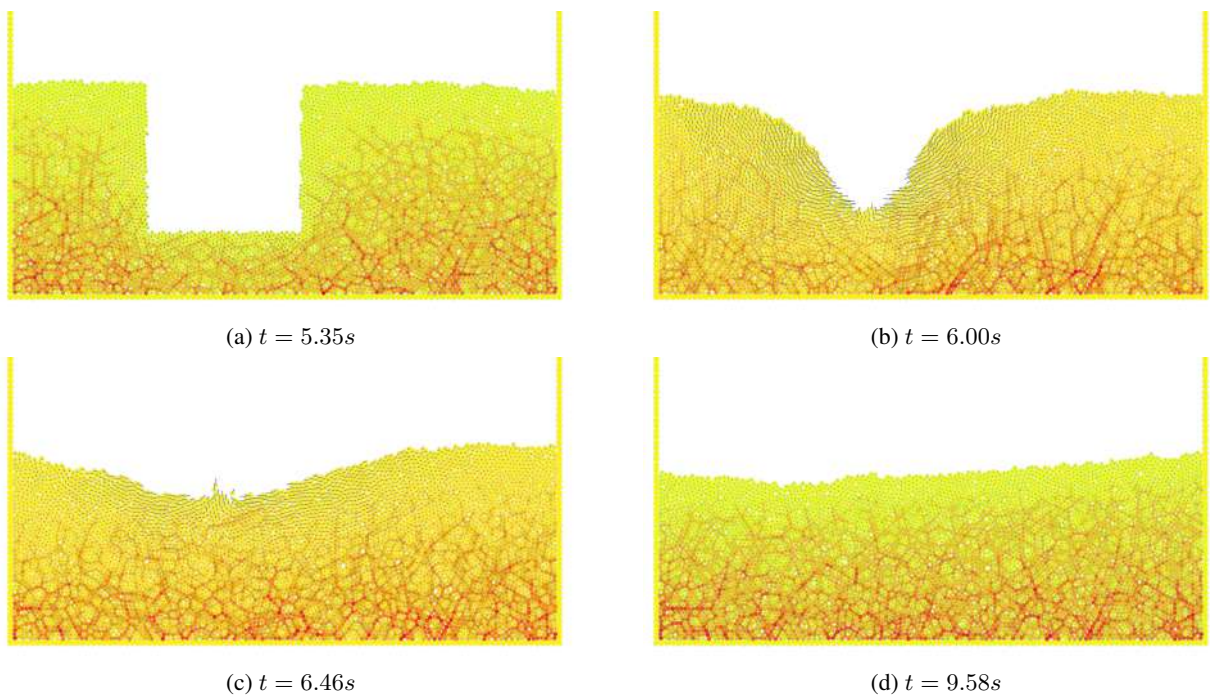


Figura 7.26: Evolução do colapso de uma cratera com $H/L = 1.0$ e $\alpha = 40p$. 7284 partículas.

7.2 Ajustando os parâmetros

Nas seções anteriores, obtivemos crateras não tão evidentes, e outras mais facilmente identificáveis. Como mencionado anteriormente, os parâmetros físicos do sistema muito influenciam no ângulo de repouso que a cratera final irá apresentar. Nesse sentido, refizemos as simulações para um k_n menor (partículas menos rígidas), um γ maior e um coeficiente de atrito dinâmico μ_s também maior. Dessa forma, "paramos" o escoamento dos degraus mais rapidamente antes que eles se choquem no centro da cavidade e venham por uniformizar a altura da cratera, elevando-a.

Na Figura 7.27, temos o formato da cratera final após a estabilização da energia do sistema. Vemos que ela é mais visível do que as mostradas nas seções anteriores.

Nas Figuras 7.28 e 7.29, temos a relação entre a altura da cratera (a altura mínima da superfície livre) e a razão de aspecto H/L , para valores de $H/L > 1$. Vemos que a altura decresce à medida que aumentamos a razão de aspecto, mas a partir de $H/L = 2.82$, talvez antes, temos que a altura se estabiliza num certo valor. Isso faz sentido pois, à medida que a cratera fica mais estreita e funda, os degraus esquerdo e direito caem rapidamente e predomina o efeito de preenchimento da cratera.

Na Figura 7.30, temos a evolução do perfil da cratera ao longo do tempo para um poço granular com $H/L = 2.10$.

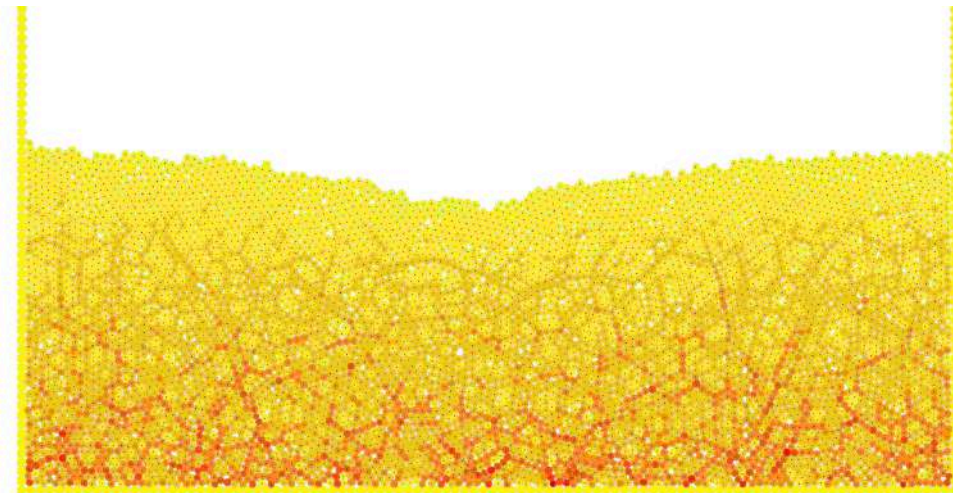


Figura 7.27: Cratera p/ $k_n = 5 \times 10^5$, $\gamma = 5 \times 10^4$, $\mu_d = 0.9$

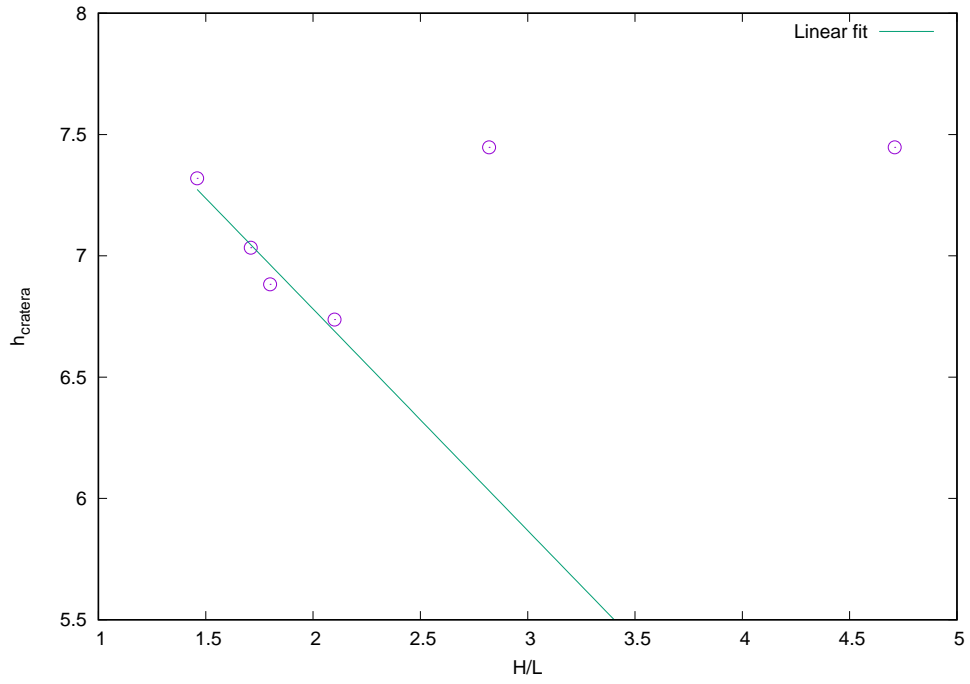


Figura 7.28: Altura da cratera $h_{cratera}$ em função da razão de aspecto H/L .

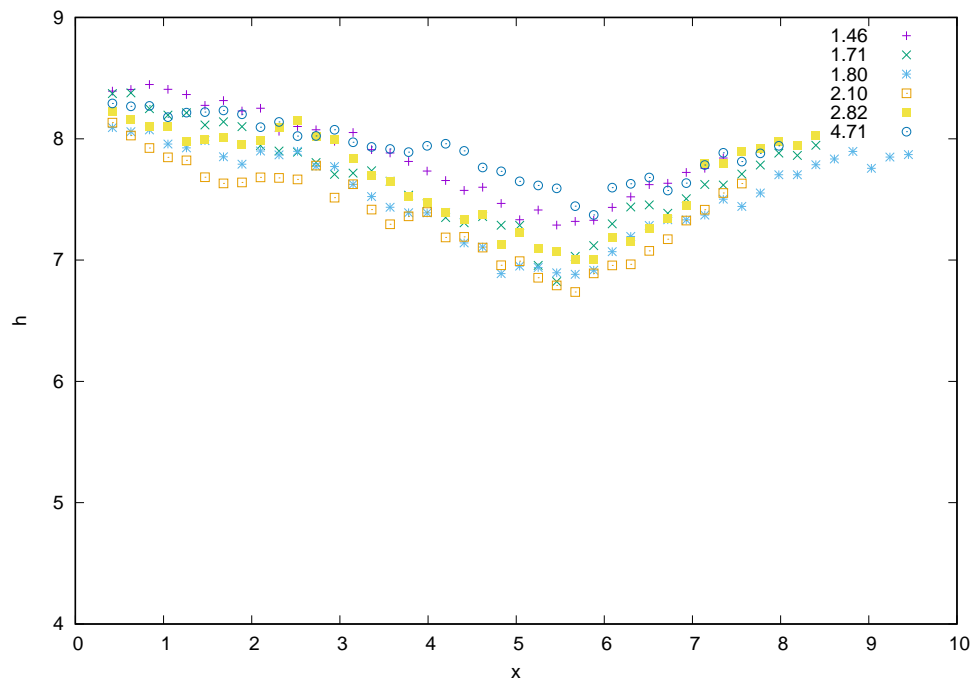


Figura 7.29: Perfis de diferentes crateras para diferentes razões de aspecto $H/L > 1$.

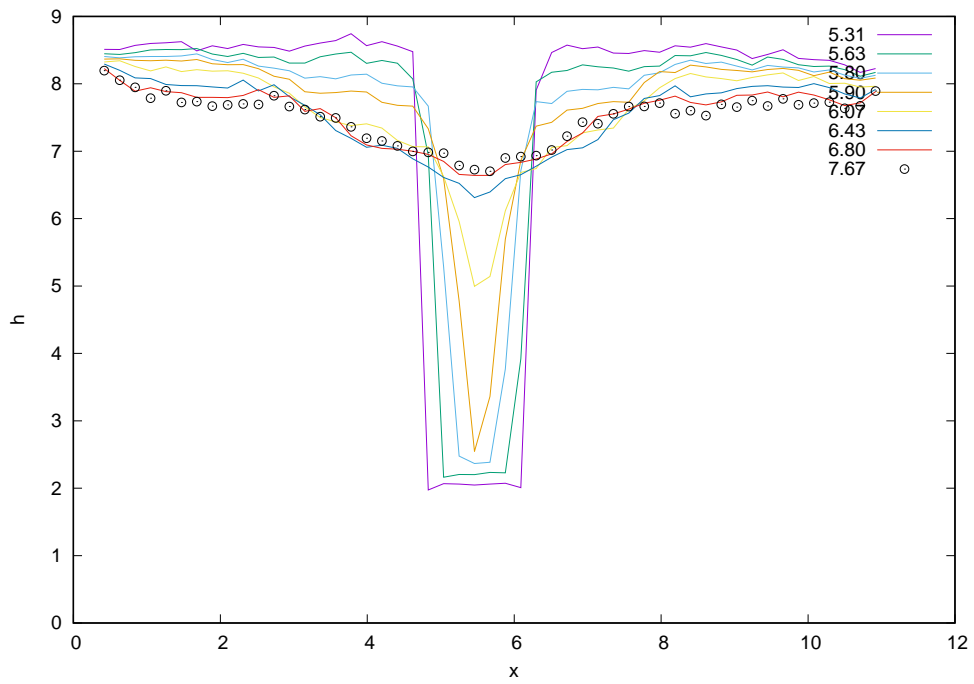


Figura 7.30: Evolução do perfil de uma cratera com razão de aspecto $H/L = 2.10$

]

Capítulo 8

Conclusões e Perspectivas Futuras

Em vista dos resultados obtidos nos Capítulos 6 e 7, fomos capazes de realizar algumas análises quanto ao escoamento granular do colapso de uma cratera. A partir de uma *condição inicial* com partículas com uma dada polidispersidade uniformemente distribuída, obtivemos *condições iniciais* com as quais pudemos cavar poços retangulares na superfície livre do leito de grãos.

Foram variados os parâmetros físicos envolvidos na dinâmica do sistema, as razões de aspecto H/L desses poços retangulares e a posição da cratera com relação às paredes do recipiente.

Vimos que a visualização das cadeias de forças é essencial para dar uma predição de como se dará a dinâmica inicial do colapso - se as cadeias de forças apoiam de forma diferente os dois degraus que irão colapsar, sabemos prever qual deles irá colapsar primeiro. Vimos também que as cadeias de forças se transmitem tanto verticalmente quanto horizontalmente, sendo este um dos principais motivos pelo qual o colapso ocorre.

Além disso, conseguimos avaliar que partículas mais rígidas, com coeficientes elásticos k_n mais elevados apresentam uma distribuição de cadeias de forças diferente de partículas com coeficientes elásticos menores. O valor de k_n também influencia na menor dissipação de energia pelos grãos: os degraus, quando colapsam, garantem ao escoamento uma maior velocidade. Quando os dois escoamentos dos degraus esquerdo e direito se chocam, há um escoamento vertical que acaba uniformizando o formato da cratera. O efeito contrário se dá com o coeficiente de dissipação normal viscosa γ : valores maiores deste coeficiente "param" o escoamento mais rapidamente pois há uma maior dissipação de energia na componente normal das colisões.

Quanto às razões de aspecto, vimos que nas razões de aspecto há a competição entre um fenômeno de preenchimento da cavidade e o escoamento das partículas dos dois degraus colapsantes. Além disso, a largura e profundidade totais do poço cavado em relação à posição da parede influencia no formato final da cratera pois, quando as extremidades do poço estão muito próximas da parede, predomina o efeito de preenchimento da cratera, pois há poucas partículas a colapsarem. Em contrapartida, cavidades menos largas apresentam crateras bem definidas.

Esse efeito é potencializado quando analisamos a influência da posição α do centro da cratera em relação à parede. Quando o degrau colapsante tem uma quantidade considerável de partículas a preencher

a cavidade, a cratera é mais visível.

Além destes resultados, há ainda muito o que se estudar. Por exemplo, o estudo de como as cadeias de forças influenciam diretamente no campo de velocidades médias locais do escoamento é importante para entender o colapso. Ademais, a influência da profundidade total da cratera é um parâmetro importante a se considerar, assim como um estudo mais detalhado da influência do atrito que, infelizmente, não foi possível de ser abordada neste trabalho. Finalmente, gostaríamos de analisar a influência de diferentes geometrias para os poços que são cavados, como triangular e parabólica.

Bibliografia

- [1] JIN, B. XU, F., MAKSE, H. *Surface shape of two-dimensional granular piles*. Journal of Statistical Mechanics 03 (2004)
- [2] KUDROLLI, Arshad. *Size separation in vibrated granular matter*. Reports on Progress in Physics, **67** (2004) 209-247
- [3] BROWN, R. L. 1939 *The fundamental principles of segregation*. J. Inst. Fuel, **13** 15-19
- [4] WILLIAMS, J. C. *The segregation of particulate materials: a review*. Powder Technol., (1976) **15** 245-51
- [5] FORTERRE, Yoël and POULIQUEN, Olivier. *Flows of Dense Granular Media*. Annual Review of Fluid Mechanics, 2008 , 40:1-24
- [6] de VET, Simon J. and de BRUYN, John R. *The collapse of a cylindrical cavity in a granular medium*. Granular Matter. ,(2012) 14:661-670
- [7] SIAVOSHI, S. and KUDROLLI, A. *Failure of a granular step*. Physical Review, E 71 (2005) 051302-1
- [8] JAEGER, H.M., NAGEL, S.R., BEHRINGER, R.P. *Granular solids, liquids, and gases*. C. R. Phys. Mod. Phys. 68:1259-73
- [9] ROUX, J-N, COMBES, G. *Quasistatic rheology and the origin of strain*. C. R. Phys. (2002) 3:131-40
- [10] GDR, MiDi. *On dense granular flows*. Eur. Phys J. (2004) 14:341-65
- [11] POULIQUEN, O. and CHEVOIR, F. *Dense flows of dry granular material*. C. R. Phys. (2002) 3:163-75
- [12] GOLDBIRSCHE, I. *Rapid granular flows*. (2003). Annu. Rev. Fluid Mech. 35:267-93
- [13] BREU, A.P.J, ENSNER, H-M, KRUELLE, C.A. and REHBERG, I. *Reversing the Brazil-nut effect: competition between percolation and condensation*. Phys. Rev. Lett. (2003) 90 014302 (p 4)
- [14] LACHAPPELLE, E.R. *The character of snow avalanching induced by the Alaska earthquake, The Great Alaska Earthquake of 1964* Hydrology (Volume 1, part A)(1968) pp. 355-361

- [15] REUTER, Benjamin. SCHWEIZER, Jürg. *Avalanche triggering by sound: myth and truth*. International Snow Science Workshop, Davos 2009, Proceedings
- [16] SCHÄFER, J., DIPPEL, S. and D.E. Wolf. *Force Schemes in Simulations of Granular Materials*. Journal de Physique 1 (1996) 5-20
- [17] JOHNSON, K.L. *Contact Mechanics*. University Press Cambridge, 1989
- [18] KINCAID, D. and CHENEY, Ward. *Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing*. (1991) Brooks/Publishing Company
- [19] HAIRER, Ernst. *Geometric Numerical Integration*. TU München. January-Februaru 2010. Lecture notes.
- [20] HAIRER, Ernst. LUBICH, Christian and WANNER, Gerhard. *Geometric numerical integration illustrated by the Störmer/Verlet method*. Acta Numerica (2003), p.p 1-51.
- [21] TABERLET, Nicolas. *Écoulements gravitaires de matériaux granulaires*. Thèse de doctorat, Université de Rennes 1. 2005
- [22] DURAN, Jacques. *Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials*. Springer (2000).
- [23] SOBRAL, Yuri D. *Acervo pessoal*.
- [24] BARABÁSI, Albert L. ALBERT, Réka. SCHIFFER, Peter E. *Physics of sand castles: maximum angle of stability in wet and dry granular media*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications (1999) 266:366-371
- [25] <http://matemateca.ime.usp.br/>. Acesso em: 28 de novembro de 2018.
- [26] https://pt.m.wikipedia.org/wiki/Ângulo_de_repouso. Acesso em: 28 de novembro de 2018.
- [27] www.starchild.gsfc.nasa.gov. Acesso em: 28 de novembro de 2018.
- [28] WALSH, A. de BRUYN, J.R. *Penetration of spheres in loose granular media*. Can. J. Phys. (2004) **82**, 439
- [29] ZHANG, L. et. al. *The role of force chains in granular materials: from statics to dynamics*. European Journal of Environmental and Civil Engineering (2017) **21** 874-895.
- [30] www.engineeringtoolbox.com. Acesso em: 29 de novembro de 2018.
- [31] BLAIR, Daniel et. al. *Force distributions in three-dimensional granular assemblies: Effects of packing order and interparticle friction*. Phys Rev. E (2001) **63**, 041304