

Formação de Padrões em Sistemas Granulares Confinados Nathália Mello Mascarenhas Paixão

Novembro de 2015

Formação de Padrões em Sistemas Granulares Confinados

NATHÁLIA MELLO MASCARENHAS PAIXÃO

Orientador: Prof. Doutor ALLBENS ATMAN PICARDI FARIA

Co-orientador: Prof. Doutor GAËL COMBE¹

Dissertação apresentada ao CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre do programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

Novembro de 2015

¹Laboratoire 3S-R (Sols, Solides, Structures - Risques) UMR 5521 (UJF, INPG, CNRS), 38041 GRENOBLE Cedex 9 France, email : gael.combe@3sr-grenoble.fr

Paixão, Nathália Mello Mascarenhas

P149f Formação de padrões em sistemas granulares confinados / Nathália Mello Mascarenhas Paixão. – 2015. 57 f.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria.

Coorientador: Gaël Combe.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Materiais granulares – Teses. 2. Formação de padrões (Ciências físicas) – Teses. 3. Fluxo quasistático – Teses. 4. Dinâmica molecular – Teses. I. Faria, Allbens Atman Picardi. II. Combe, Gaël. III. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. IV. Título.

CDD 530.416

Elaboração da ficha catalográfica pela Biblioteca-Campus II / CEFET-MG

Agradeço aos meus pais, que sempre apoiaram minhas decisões na vida, dando suporte material e emocional. Sempre acreditaram que o estudo é o único caminho para o desenvolvimento de um ser humano. Gostaria de agradecer também à coordenação do *Programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática e Computacional* do CEFET-MG, bem como a todos os professores e alunos do programa que me auxiliaram nesta jornada. Ao *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico* (CNPq), por me conceder bolsa acadêmica mensal durante todo o período do mestrado, à *Secretaria de Relações Internacionais* (SRI) do CEFET-MG por me auxiliar em meu intercâmbio, e ao *Laboratoire Sols, Solides, Structures - Risques* em Grenoble, França.

Sumário

Lista de Figuras				
R	esum	10	v	
Abstract				
1	Intr	rodução	1	
2	Obj	jetivos	5	
	2.1	Objetivos Gerais	5	
	2.2	Objetivos Específicos	5	
3	Cor	nceitos Básicos	6	
	3.1	Materiais Granulares	6	
	3.2	Métodos de Elementos Discretos	9	
	3.3	Tensão em Sistemas Granulares	12	
	3.4	Revisão Bibliográfica	15	
		3.4.1 Fenômeno de formação espontânea de dedos de Saffman-Taylor	16	
		3.4.2 Formação espontânea de dedos em escoamento radial de fluidos	18	
		3.4.3 Escoamento radial de fluidos em meios granulares densos	20	
		3.4.4 Injeção radial de grãos em meios granulares confinados	22	
4	Met	todologia	27	
	4.1	Modelagem	27	
	4.2	Amostras	31	
	4.3	Análises das amostras	32	
	4.4	Perfil de Tensão	35	
5	Res	sultados e Discussões	38	
	5.1	Amostras geradas para configurações monodispersas, polidispersas e bidispersas	38	
	5.2	Análises das amostras	40	
	5.3	Resultados da evolução de tensão em amostras monodispersas e polidispersas	46	

6 Conclusões e Perspectivas

Referências Bibliográficas

52 54

Lista de Figuras

1.1	Formação de padrões na natureza.	1
1.2	Experimento do escoamento de grãos confinados em uma célula de Hele-Shaw	2
1.3	Experimento de escoamento radial em uma célula de <i>Hele-Shaw.</i>	3
3.1	Formação de arco no escoamento de materiais granulares em funil	7
3.2	Pilhas de areia com seus respectivos perfis de tensão	8
3.3	Condição de Signorini representando um potencial de contato entre duas partículas	10
3.4	Gráfico da lei de $Coulomb$ de atrito na direção tangencial	11
3.5	Distribuição de forças em empacotamentos de grãos fotoelásticos em resposta a uma força	
	localizada no topo em duas dimensões	12
3.6	Dedo se movendo em um canal	17
3.7	Bolha de ar penetrando glicerina	18
3.8	Esquema de uma célula de <i>Hele-Shaw</i> anisotrópica radial	19
3.9	Formação de padrões em escoamento de fluidos em uma célula de <i>Hele-Shaw</i> anisotrópica.	20
3.10	Visão de topo de quatro experimentos de escoamento de fluidos em uma célula de <i>Hele-Shaw</i> .	21
3.11	Injeção central de ar em uma célula de <i>Hele-Shaw</i> preenchida por material granular denso.	22
3.12	Injeção central de soluções aquosas de glicerina em uma célula de $Hele$ -Shaw preenchida	
	por material granular denso e seco	23
3.13	Padrões formados pela injeção de esferas de aço carbono em esferas de isopor	24
3.14	Formação de padrão hexagonal em invasão de esferas de poliestireno em uma base de aço	
	carbono confinada.	25
3.15	Padrões formados pela injeção de misturas bidispersas de esferas de aço carbono em esferas	
	de isopor.	26
4.1	Interpenetração entre grãos	29
4.2	Configuração de uma camada horizontal de grãos monodispersos dispostos em rede hexagonal.	32
4.3	Histograma das frequências dos contatos com os seus três respectivos picos	33
4.4	Metodologia de como se calcular a quantidade de grãos em uma faixa de ângulo	34
4.5	Esquema de como calcular as flutuações das frequências de contatos a partir de seu histo-	
	grama	34

4.6	Gráfico da distribuição gaussiana tridimensional, $\phi,$ utilizada em cálculo da tensão em	
	material granular.	37
4.7	Esquema representativo de como calcular um perfil de tensões para uma amostra de ma-	
	terial granular bidimensional em escoamento quasi-estático	37
5.1	Simulações de grãos inseridos monodispersos com diferentes coeficientes de atrito	39
5.2	Cadeias de forças em amostras de simulações de materiais granulares.	39
5.3	Configurações de simulações de sistemas com diferentes granulometrias	41
5.4	Histogramas das frequências dos ângulos de contatos para diferentes sistemas granulares	42
5.5	Histogramas das flutuações das frequências dos ângulos de contatos para vários sistemas.	44
5.6	Deposição aleatória realizada em duas dimensões	44
5.7	Ângulos da distribuição espacial dos grãos em função dos ângulos de contatos	45
5.8	Evolução do perfil de tensão ao se inserir um grão em um sistema monodisperso. \ldots .	47
5.9	Evolução do perfil de tensão ao se inserir um grão em um sistema polidis perso. \ldots . \ldots	48
5.10	Perfil e variação de tensão ao se inserir um grão em uma amostra monodispersa. \ldots .	50
5.11	Perfil e variação de tensão ao se inserir um grão em uma amostra polidispersa. \ldots .	51

Resumo

Existem muitas questões em aberto envolvendo o escoamento de materiais granulares em sistemas confinados, em particular, o escoamento em uma célula de *Hele-Shaw* em regime quasi-estático. Foi mostrado que, em alguns casos, existe uma formação espontânea de "dedos" durante a injeção de grãos em um sistema confinado. Neste trabalho, nosso objetivo foi estudar a formação de padrões nesse tipo de escoamento, utilizando simulações de Dinâmica Molecular. Alguns parâmetros foram escolhidos para determinar sua função no desenvolvimento dos dedos: o coeficiente de atrito entre as partículas, geometria e granulometria dos grãos da base de confinamento, a distribuição de tamanhos dos grãos (sistemas monodispersos, polidispersos e bidispersos). As distribuições de forças e as componentes de tensão foram analisadas. Observamos que sistemas monodispersos têm uma maior tendência para a formação de dedos, exibindo uma simetria hexagonal, enquanto sistemas com alta polidispersão e bidispersos tendem a formar padrões circulares. Em sistemas monodispersos, os contatos possuem direções preferenciais, que estão nas direções dos dedos formados, enquanto que sistemas de alta polidispersão e bidispersos possuem distribuições de ângulos de contatos aleatórias. Também evidenciamos um campo de tensão maior próximo às pontas dos dedos, em analogia ao fenômeno observado por Saffman-Taylor para fluidos de diferentes viscosidades. Portanto, concluímos que a formação de dedos em amostras monodispersas está associada à cristalização do sistema e, consequentemente, a propagação de tensão está de acordo com os modelos hiperbólicos, onde a tensão se propaga anisotropicamente. Por outro lado, os sistemas de alta polidispersão e bidispersos não apresentam cristalização, por isso exibem padrões circulares, de acordo com modelos elípticos de propagação de tensão, onde a tensão se propaga de maneira difusiva.

Palavras chaves: Materiais granulares, Formação de padrões, Escoamento quasi-estático, Dinâmica molecular

Abstract

There are many opened questions involving the displacement of granular materials in confined systems, in particular, the flow through a Hele-Shaw cell in quasistatic regime. It was shown that, in some cases, there is a spontaneous formation of fingers during the injection of grains into a confined system. In this work, our objective was to study the pattern formation in this kind of flow, using Molecular Dynamics simulations. Some parameters were chosen to determine their role in the development of fingers: the friction coefficient between the particles, the geometry and granulometry of the confinement base, the grain size distribution (monodisperse, polydisperse or bidisperse systems). The forces distributions and the stress components were analyzed. We have observed that monodisperse systems have a higher tendency for fingers formation, displaying a hexagonal symmetry, while systems with high polydispersity and bidisperses tend to form circular patterns. In monodisperse systems, the contacts have preferential directions which are in the fingers directions, while the systems with high polydispersity and bidisperses have contact angles distributed randomically. We have also evinced a higher stress field close to the fingers tips, in analogy to the Saffman-Taylor fingering phenomenon to fluids with different viscosities. Therefore, we have concluded that the finger formation in monodisperse samples is associated to the system crystallization and consequently the stress propagation is in according to the hyperbolic models, where the stress propagates anisotropically. On the other hands, systems with high polydispersity and bidisperses have problems to crystalize, because of this they exhibit circular patterns, thus the stress propagation follows elliptic models, where the stress propagates diffusively.

Keywords: Granular materials, Pattern formation, Quasistatic flow, Molecular dynamics

Capítulo 1

Introdução

Os materiais granulares possuem comportamento coletivo bastante peculiar, pois podem assumir os três estados da matéria: sólido, líquido e gás. A transição de fases em meios granulares não depende da temperatura, uma vez que esta não é capaz de promover movimentos de translação, rotação e vibração em grãos, o que faz com que os sistemas granulares se comportem de maneira bem diferente de outros sistemas, onde a temperatura e pressão desempenham o papel principal. Portanto, a transição de fases em meios granulares ocorre devido a agitações externas [1, 2]. Assim, por causa de seu comportamento tão diferente e muitas vezes ainda imprevisivel é que o estudo de materiais granulares continua sendo um grande desafio para a comunidade científica tanto da Engenharia, quanto da Física.



Figura 1.1: Formação de padrões na natureza.

a) Concha de molusco com padrão que lembra um autômato celular. b) Formação fractal de cristal de gelo. c) Formação de dunas de areia no Brasil. d) Concha de molusco com proporção áurea.
Fonte: a) Retirado do sítio eletrônico da editora Abril [3]. b) Adaptado do trabalho de Gallo et al. [4]. c) Adaptado do acervo fotográfico do sítio eletrônico da National Geographic [5]. d) Adaptado do artigo de Godoy [6].

Com a presença de ações externas, sistemas granulares podem apresentar o surgimento de fenômenos interessantes como a segregação de partículas [7] e a formação espontânea de padrões [8], que desempenha papel importante dentre os numerosos assuntos estudados no campo de materiais granulares. Variados tipos de padrões foram observados e estudados ocorrendo em diferentes sistemas granulares como, por exemplo, em esteiras vibradas [9], em escoamento denso de granulares [10], gases granulares [11], escoamento em tambores rotativos (onde também pode ocorrer segregação) [12], dentre muitos outros.

A formação de padrões ocorre todo o tempo na natureza. Na figura 1.1, podem ser observados padrões exibidos na formação de cristal fractal de gelo [4], uma concha de caramujo que possui *design* que lembra um autômato celular de *Wolfram* [13], outra concha que se desenvolveu em uma proporção áurea e dunas de areia (que também são materiais granulares) [5]. Todos esses padrões e tantos outros que podemos encontrar na natureza ocorrem de forma espontânea. Portanto, para conhecermos o universo onde vivemos, é de suma importância o entendimento dos fenômenos de padrões que ocorrem na natureza.

Um sistema granular formado pelo escoamento quasi-estático de grãos confinados em uma célula de *Hele-Shaw* é um exemplo de formação espontânea de padrão em meio granular denso. Experimentos relativos a esse tipo de escoamento foram realizados anteriormente [14] e algumas configurações experimentais obtidas podem ser vistas na Figura 1.2. Nesse trabalho, uma base de grãos foi colocada dentro da célula de *Hele-Shaw* para cada experimento e grãos foram inseridos um a um através de um orificio central. Foram utilizadas diferentes combinações de grãos inseridos e grãos de base, sendo que, em alguns desses casos, o sistema exibia a formação de dedos, podendo levar à formação de um padrão hexagonal, e outros sistemas apresentaram formação de padrões circulares [14].



Figura 1.2: Experimento do escoamento de grãos confinados em uma célula de *Hele-Shaw*. Transição de padrões circulares e com dedos com o raio R entre o tamanho do grão inserido e o tamanho do grão que compõe a camada inicial é aumentado. (a) aço carbono injetado em uma camada de poliestireno: R = 1/5. (b) poliestireno injetado em poliestireno: R = 1/1. (c) poliestireno injetado em aço carbono: R = 1, 5/1.

Fonte: adaptado de Pinto et al. [14].

A maior inspiração para se realizar estudos do escoamento quasi-estático de grãos em uma célula de Hele-Shaw é uma possível comparação entre a formação de padrão obtida pelo escoamento de fluidos de diferentes viscosidades nessa mesma célula com padrões exibidos em sistemas granulares. Saffman e Taylor apresentaram, em 1958, experimentos e formulações matemáticas da formação de dedos quando um fluido é injetado em uma célula de *Hele-Shaw* preenchida por um outro fluido de maior viscosidade [15]. Nossa conjectura é que a formação de dedos em sistemas granulares confinados possui uma analogia direta com o bem conhecido problema de *Saffman* e *Taylor* para escoamento de fluidos. Em seu trabalho, foi evidenciada a elevação da pressão na ponta dos dedos formados pelo fluido menos viscoso [15]. Sendo assim, neste trabalho, o objetivo principal é entender os mecanismos associados à formação de padrões no escoamento quasi-estático de grãos confinados em uma célula de *Hele-Shaw*.

A célula de *Hele-Shaw* é definida por um sistema composto de duas placas paralelas planas separadas por uma distância fixa. Vários problemas em mecânica dos fluidos podem ser estudados utilizando-se uma célula de *Hele-Shaw* [16], por isso seu estudo é de suma importância. Após o trabalho de *Saffman* e *Taylor* em 1958 [15], foram realizadas várias outras pesquisas referentes à formação de dedos em escoamento radial de fluidos de diferentes viscosidades em uma célula de *Hele-Shaw* [17, 18, 19, 20], como pode ser visto em um exemplo experimental da Figura 1.3. Além de experimentos utilizando-se somente fluidos e do experimento relatado utilizando-se somente grãos [14], outros experimentos onde materiais granulares confinados foram invadidos por fluidos (ar ou glicerina) também foram realizados [21, 22].



Figura 1.3: Experimento de escoamento radial em uma célula de *Hele-Shaw*. Foram utilizados dois fluidos, no qual o fluido injetado possui viscosidade menor que o fluido deslocado. Fonte: retirado do sítio eletrônico *Nervous System* [23].

Para estudar esse sistema, simulações foram realizadas utilizando-se uma técnica muito comum para modelar materiais granulares e principalmente fluidos, a Dinâmica Molecular, que consiste em um método que integra numericamente as equações de movimento dos grãos, onde o tempo é discretizado [24]. Nesse modelo, os grãos são simulados como esferas (três dimensões) ou discos (duas dimensões) e só existe força entre duas partículas quando elas estão em contato físico, no qual a soma de seus raios é maior que a distância entre seus centros, implicando uma interpenetração δ . A interação é dividida entre forças normais e tangenciais ao contato, onde as forças normais são calculadas utilizando-se a lei de *Hooke* para materiais elásticos. O cálculo das forças tangenciais ocorre de maneira similar, no entanto, quando há introdução de atrito entre grãos, a determinação da força tangencial dependerá também da força de atrito de *Coulomb* [25].

A medida do tensor de tensões é uma ferramenta usual para analisar sistemas granulares, portanto, será de grande utilidade para estudar o sistema proposto. O tensor de tensões é uma medida macroscópica, mas computado utilizando-se quantidades microscópicas, que são, no caso de materiais granulares, a força de contato entre os grãos, as posições, velocidades, acelerações [26].

Este trabalho é dividido da maneira seguinte: após esta Introdução, serão apresentados os objetivos gerais e específicos, em seguida, faremos a descrição de Conceitos Básicos, incluindo a Revisão Bibliográfica, onde serão expostas bases teóricas e fenomenológicas para o desenvolvimento desta pesquisa, após, tem-se a Metodologia, onde será detalhadamente apresentada a modelagem matemática e computacional, bem como os parâmetros de simulação, os tipos de amostras geradas e as ferramentas utilizadas na análise dos resultados. Em seguida, mostramos os resultados obtidos, bem como suas discussões, e por último, nossas Conclusões e Perspectivas.

Capítulo 2

Objetivos

2.1 Objetivos Gerais

O objetivo deste trabalho é estudar os principais mecanismos associados à formação de padrões durante o escoamento quasi-estático de grãos em uma célula de *Hele-Shaw* por meio de simulações computacionais de Dinâmica Molecular.

2.2 Objetivos Específicos

- Determinar quais os parâmetros de simulação auxiliam na formação de dedos (constante de elasticidade, coeficiente de atrito entre partículas, geometria e granulometria dos grãos da base).
- Comparar qualitativamente e quantativamente resultados para sistemas de diferentes distribuições de tamanhos de grãos, sistemas: monodispersos, polidispersos e bidispersos.
- 3. Verificar qual é a influência do grau de polidispersão na formação de padrões.
- Verificar a orientação das cadeias de forças para diferentes configurações e comparar com a orientação macroscópica dos dedos.
- 5. No caso de amostras que apresentam dedos, verificar se os contatos estão ou não orientados nas direções dos dedos.
- Determinar para qual situação existe uma maior tendência na formação de dedos e qual é a simetria exibida.
- 7. Analisar o perfil de tensões para diferentes configurações, verificando quais as regiões onde a tensão é maior.
- 8. Associar a formação dos dedos ao gradiente de tensão.

Capítulo 3

Conceitos Básicos

3.1 Materiais Granulares

Os materiais granulares possuem comportamento coletivo bastante peculiar, uma vez que seus sistemas podem se comportar como sólidos, líquidos ou gases. Eles se empacotam como os sólidos e podem fluir como os líquidos e gases. Podem tomar a forma do recipiente que os contém ou também podem assumir formas independentes. Geralmente, quando se comportam como líquidos, o seu comportamento é extremamente não newtoniano, o que os caracteriza como sendo um fluido complexo [1]. Diferente de outros sistemas já bem conhecidos, onde a transição de fases depende da variação da temperatura, sistemas granulares não sofrem influência da temperatura para mudar de fase, somente uma ação externa é capaz de promover mudanças de fases [2].

Materiais granulares podem ser suficientemente pequenos, da ordem de algumas centenas de micrometros, como pós, ou se apresentarem em tamanhos grandes da ordem de quilômetros, como asteróides. No entanto, mesmo nas menores escalas, seu tamanho é grande o bastante para não apresentar alterações devido às flutuações térmicas. Isso ocorre, pois a energia térmica k_BT , onde k_B é a constante de *Boltzmann* e T é a temperatura, não é suficiente para fornecer energia cinética para a realização de movimentos translacionais, rotacionais e vibracionais. Essa natureza atérmica faz com que uma configuração granular não relaxe espontaneamente, significando que, para ocorrer alguma mudança estrutural, são necessárias perturbações externas.

Um exemplo de quando a natureza atérmica de meios granulares auxilia na estabilidade das configurações formadas é na duração de arcos de grãos formados em sistemas engarrafados. A formação de arcos é um evento cooperativo de grãos, que ocorre quando dois ou mais grãos caem juntos devido à ação da força da gravidade, formando uma estrutura de suporte mútuo. Arcos podem se formar na construção de pilhas de areias, e elas são estáveis, pois o movimento browniano que poderia dissolvê-las não está presente em sistemas granulares. Uma vez que os grãos não modificam sua dinâmica ao receberem uma variação de temperatura, os arcos tem uma duração maior, uma vez que só podem ser desfeitos após a aplicação de um estímulo externo. Uma pequena vibração pode ser responsável por modificar a estrutura das pilhas de areia, e os arcos podem afetar as dinâmicas das pilhas, pois um dos principais mecanismos de compactação se dá pelo colapso gradual de arcos de longa vida, fazendo com que os vazios que existiam antes desaparececem [2]. Os arcos também são responsáveis pelo engarrafamento em processos granulares, como, por exemplo, no escoamento de grãos em funil [27], como pode ser visto na Figura 3.1. Nesse caso, o escoamento de grãos foi interrompido, pois houve a formação de um arco no canal onde os grãos transitavam.



Figura 3.1: Formação de arco no escoamento de materiais granulares em funil. Foram utilizados grãos de material fotoelástico onde a intensidade da luz emitida é proporcional à intensidade da tensão no local analisado. É possível ver que o escoamento foi interrompido, uma vez que houve a formação de um arco fechando o canal onde os grãos passavam, fenômeno típico que ocorre em sistemas granulares engarrafados.

Fonte: retirado da home page de Junyao Tang da Duke University [28].

Uma vez que já foi mencionado um pouco de fenômenos que ocorrem em pilhas de areia, como a formação de arcos por exemplo, vale a pena ressaltar que, entre os sistemas granulares, a pilha de areia é um dos sistemas mais estudados, devido à sua propriedade de criticalidade auto organizada. Uma pilha de areia não é somente desordenada pela sua geometria, a forma e a rugosidade dos grãos também são fontes de desordem. Elas podem se deformar e possuem um empacotamento amorfo, analogamente aos vidros. Se grãos são soltos livremente, a tendência é se construir uma estrutura cônica, formando um ângulo entre a superfície do empilhamento e o eixo horizontal. Tal ângulo é denominado ângulo de repouso, podendo variar entre o menor valor possível, θ_r , que é onde a pilha se encontra em estado estacionário, e θ_m , que é o ângulo onde se iniciam as avalanches espontâneas. O fenômeno de avalanche ocorre em uma estreita camada limite do empilhamento. Esse comportamento típico das pilhas de areia é conhecido como biestabilidade. A própria existência das pilhas de areia representa uma formação espontânea de padrão em meios granulares, uma vez que elas têm a tendência natural de se organizarem dessa forma [2].



Figura 3.2: Pilhas de areia com seus respectivos perfis de tensão.

A coluna da esquerda representa os perfis de tensão normalizados $p/\rho gH$ em função da distância adimensional r/R do eixo que passa pelo topo da pilha de areia. A coluna da direita representa duas pilhas de areias diferentes, onde a primeira foi construída pelo escoamento de grãos em um funil, e a segunda, por peneiramento de grãos.

Fonte: adaptado de Vanel at al. [29].

Um fato muito importante é que a pilha de areia formada depende da maneira como foi preparada. Por exemplo, uma pilha feita a partir do escoamento em um funil, visualmente, é idêntica a uma pilha formada por peneiramento, porém, internamente, são distintas [29]. Ambas podem apresentar mesmo ângulo de repouso e mesmo tamanho, porém os seus estados de tensões internas são completamente diferentes, assim como o tipo de empacotamento, e tudo isto influencia em seu comportamento mecânico, como pode ser visto na Figura 3.2. As pilhas são configurações metaestáveis, pois podem se desmoronar por uma pequena perturbação, a introdução de um pequeno grão pode modificar completamente sua estrutura, e as mudanças do sistema resultam em histerese. A biestabilidade é outra conseqüência de como o preparo da pilha influencia seu comportamento, a maneira na qual a pilha é formada determina se haverá avalanche para um dado ângulo de repouso. Por exemplo, pilhas formadas por funil apresentam θ_m maior do que pilhas formadas por peneiras. O estudo de atrito entre os grãos também é muito importante, sabe-se que $tan(\theta_r)$ corresponde ao valor do coeficiente de atrito estático [2].

3.2 Métodos de Elementos Discretos

Realizar simulações de materiais granulares em uma escala atômica ainda é uma tarefa impossível nos dias de hoje. No entanto, é possivel a criação de modelos na escala granular, onde, na maioria dos casos, os grãos são tidos como esferas (em três dimensões), ou discos (duas dimensões), onde a massa é igualmente distribuída. Alguns modelos também contemplam outros tipos de formas geométricas [1]. As leis de *Newton* da mecânica clássica são utilizadas para descrever os movimentos dos grãos, resultando em equações diferenciais e, para realizar as simulações, é utilizada uma ferramenta, o método do Preditor-Corretor, que discretiza essas equações diferenciais, encontrando as soluções numericamente, em vez de analiticamente [24].

Entre os diferentes métodos de elementos discretos que podem modelar sistemas granulares estão o método da Dinâmica Molecular e o método da Dinâmica de Contato. A Dinâmica Molecular é uma técnica que é utilizada para simular interações entre partículas, como por exemplo reações químicas, reações nucleares ou o escoamento de fluidos [24]. O modelo de Dinâmica Molecular foi modificado a fim de simular o comportamento coletivo de grãos. A principal diferença entre uma modelagem de granulares e a modelagem de moléculas é no cálculo das forças interpartículas. Enquanto as forças entre as moléculas são modeladas pelo potencial de ligação química de *Lennard Jones*, podendo haver interação até mesmo em distâncias grandes, grãos só interagem quando há contato físico entre eles, além disso, só existe força de repulsão, enquanto em moléculas pode haver tanto repulsão, quanto atração. Obviamente esses modelos para granulares não levam em consideração forças coesivas provenientes do efeito provocado pela introdução de líquidos interticiais, caso esses estejam presentes, adaptações são necessárias [1].

A Dinâmica Molecular ainda pode ser dividida entre dois métodos: o método das Esferas Macias, Soft Sphere Molecular Dynamics (MD), e outro método chamado Evento Dirigido, Event Driven (ED). O método ED é mais adequado na modelagem de sistemas menos densos e mais agitados, como por exemplo, quando um sistema granular comporta-se como gás. Já o MD é mais utilizado em sistemas densos em regime quasi-estático, mas pode ser utilizado para modelar qualquer sistema granular. Sua desvantagem é que, para sistemas pouco densos, o custo computacional se eleva, comparado ao ED [1].

A principal diferença entre MD e ED é na discretização do tempo. Basicamente, ambas as abordagens integram numericamente as equações de movimento, que são equações diferenciais de momento linear e momento angular, para obter posições, velocidades e acelerações dos grãos ao final da simulação. Nesse caso, a variável discreta é o tempo, sua discretização é obrigatória, uma vez que não há como solucionar o problema analiticamente. No caso de MD, o passo de tempo é fixo, que, em geral, deve ser bem menor do que o menor período de oscilação do sistema, que é dado por $2\pi\sqrt{m/k}$, onde m é a massa do menor grão do sistema e k é a sua rigidez. As interações entre os grãos são modeladas como sistemas massa-mola, onde a deformação causada quando dois grãos estão em contato é modelada por uma mola unilateral, havendo apenas repulsão, podendo haver atrito e amortecimento [1]. Já em modelos ED, o passo de tempo é calculado a cada iteração da seguinte maneira: cálculos são realizados para verificar quais serão os próximos grãos a se chocarem, dessa forma, o passo de tempo daquela iteração será o tempo necessário para este contato ocorrer, e esse processo é realizado várias vezes até o sistema atingir o critério de equilíbrio. Por causa disso, este algoritmo é apropriado para simulação de esferas rígidas, onde as colisões são instantâneas e somente colisões binárias ocorrem [30]. Portanto, fica evidente que, em sistemas densos, a Dinâmica Molecular é muito mais adequada, pois há contatos persistentes de um passo de tempo para outro, inviabilizando o cálculo do próximo contato eminente.

Já a diferença entre a Dinâmica Molecular clássica (de esferas macias) e a Dinâmica de Contato, *Contact Dynamics* (CD), é no cálculo das forças entre as partículas. No caso da CD, o cálculo das forças se dá pela resolução das equações de movimento para cada contato, em vez de trabalhar para cada partícula. Nessa abordagem, duas partículas são consideradas em contato físico se a distância entre elas, δ_n , é igual a zero, caso a distância seja maior que zero, não existe contato e não é possível a existência de distâncias menores que zero, uma vez que as partículas são tratadas estritamente como corpos rígidos, onde não existe interpenetração. Essa relação é chamada de condição de *Signorini* e pode ser representada graficamente pela Figura 3.3. Portanto, quando δ_n é positivo, a força normal entre as partículas é nula e quando $\delta_n = 0$, a força pode ser nula ou maior que zero, podendo a força normal assumir qualquer valor positivo, sendo assim, existem muitas soluções possíveis [31].



Figura 3.3: Condição de Signorini representando um potencial de contato entre duas partículas.

No modelo de Dinâmica de Contato, se a distância entre as partículas, $\delta_n = 0$, é derivada, é possivel se obter a velocidade relativa do contato. Se um contato é persistente, existe força normal apenas quando a velocidade relativa na direção normal é nula, quando ela é diferente de zero, a força normal também é igual a zero. Por outro lado, as forças tangenciais obedecem à lei de atrito de *Coulomb*, e essa relação pode ser vista pela Figura 3.4. A força tangencial é diferente de zero se existe força normal e $\mu \neq 0$. Em um contato persistente, quando a velocidade relativa de deslizamento é maior que zero, a força tangencial é dada por $-\mu \cdot F_n$, caso a velocidade seja negativa, a força tangencial é dada por $\mu \cdot F_n$, e quando a velocidade é nula, a força tangencial pode assumir qualquer valor entre $-\mu \cdot F_n$ e $\mu \cdot F_n$. Portanto, no caso da velocidade relativa de deslizamento ser zero, o problema pode apresentar várias soluções [31].



Figura 3.4: Gráfico da lei de Coulomb de atrito na direção tangencial.

Na prática, a diferença resultante entre MD e CD é no tratamento das pequenas escalas e nas escalas de tempo presentes. Nas amostras de Dinâmica Molecular, as forças de contatos são calculadas utilizando uma deformação local (interpenetração), que obedece um comportamento viscoelástico. Para resolver explicitamente as equações da dinâmica, é necessária a utilização de escalas pequenas de comprimento e tempo, envolvidas na interação entre grãos, promovendo, assim, uma resolução fina. Por outro lado, algoritmos de CD negligenciam essas pequenas escalas, pois seus efeitos são absorvidos utilizando-se leis de contato e uma formulação não lisa (no caso de sistemas onde o atrito está presente), e possibilita a utilização de escalas maiores, em vez de se usar um pequeno tempo de resposta elástica e deslocamentos. O coeficiente de restituição é utilizado para calcular a velocidade relativa prevista daquele contato e esta, por sua vez, é utilizada para calcular as forças [31]. Em sistemas isostáticos (onde não há atrito), o número de equações é igual ao número de incógnitas, assim, existe somente uma solução possível, logo, um sistema simulado tanto por MD, quanto por CD, resultará em mesmos resultados finais de cálculos de forças [32]. No entanto, para sistemas onde há atrito, há muitas possibilidades, podendo haver infinitas soluções, esta é a desvantagem da utilização de CD [31]. Acredita-se que as restrições geométricas e o modo como o carregamento é aplicado podem diminuir a quantidade de soluções possíveis.

3.3 Tensão em Sistemas Granulares

A tensão é uma quantidade macroscópica dada pelo produto da força pela posição sobre um volume do espaço, portanto possui mesma unidade de pressão, mas diferentemente desta, que é escalar, a tensão é um tensor de segunda ordem [33]. A tensão em meios granulares é calculada a partir de quantidades microscópicas conhecidas que estão presentes nos sistemas, como, por exemplo, as forças entre grãos que estão em contato e os deslocamentos das partículas. Para o estudo de tensão em meios granulares, a utilização de uma escala adequada é de suma importância para que a suposição de uma teoria macroscópica seja válida, caso contrário, correções são necessárias. O sistema é discretizado em várias regiões para se calcular os campos macroscópicos de tensão ou deformação, e a discretização não pode nem levar a volumes muito pequenos, e nem em volumes muito extensos [1].

Outra questão de relevância no estudo de tensão em meios granulares é que sistemas estáticos são estados metaestáveis devido às restrições geométricas e ao atrito estático, sendo assim, qualquer tipo de média de amostras deve ser questionada [1]. Para auxiliar, várias caractéristicas experimentais obtidas pela média podem ser utilizadas, caso o número de amostras seja suficientemente grande e a escala de discretização espacial seja adequada [34].



Figura 3.5: Distribuição de forças em empacotamentos de grãos fotoelásticos em resposta a uma força localizada no topo em duas dimensões.

Cada imagem representa uma média da resposta de tensão de 50 amostras. Na primeira imagem (esquerda), foi preparada uma rede regular de grãos circulares monodispersos, e é possível visualizar que a tensão se propaga em duas direções preferenciais. Na imagem do meio, grãos em formato pentagonais foram dispostos de forma desordenada, e neste caso a tensão já se propaga de forma difusa. Na última imagem (direita) uma camada granular foi submetida a cisalhamento antes de receber a força localizada no topo, e a tensão se propaga na direção do cisalhamento. A altura típica das amostras utilizadas possui de 15 a 20 diâmetros de grãos.

Fonte: retirado do trabalho de Atman et al. [35].

Quando consideramos um modelo de elasticidade para descrever o campo de tensões de um sistema granular, a isotropia, que é a capacidade de um material possuir propriedades físicas constantes independente da direção considerada, não deve ser tida como verdade. Isso ocorre, porque mesmo sistemas que possuem comportamento isotrópico em grandes escalas podem possuir anisotropia em escalas menores, devido ao elevado gradiente de deformação e/ou desordem. Um exemplo de sistema granular anisotrópico é uma pilha de areia formada pelo escoamento de grãos em funil, a tensão medida na base desta pilha não pode ser descrita por modelos isotrópicos, no entanto, pode ser perfeitamente descrita por modelos de elasticidade anisotrópica [29]. Portanto, essas pilhas de areia possuem perfil de tensão descrito por modelo elástico, porém não isotrópico, uma vez que suas propriedades físicas dependem da direção analisada. Outro exemplo de perfil de tensão em sistema granular que pode ser descrito por um modelo elástico anisotrópico é a função resposta a uma força localizada em uma camada de grãos. Imagine que grãos monodispersos são dispostos em uma rede regular formando uma camada granular, e então uma força vertical é aplicada no topo. Mesmo em sistemas muito grandes, a tensão se propaga em duas direções preferenciais, como pode ser visto na Figura 3.5, portanto, esses sistemas também podem ser modelados pela elasticidade anisotrópica [35]. Uma camada granular que é cisalhada, ao receber uma força vertical localizada também possui uma resposta de tensão anisotrópica, uma vez que as forças se orientam preferencialmente na direção do cisalhamento. Já uma camada de grãos dispostos aleatoriamente possui uma resposta de tensão difusa, fazendo com que estes sistemas, diferentemente dos outros sistemas já citados, possam ser modelados pela elasticidade isotrópica [35].

Muitos sistemas podem ser modelados como um conjunto de partículas sem atrito, portanto, é comum o negligenciamento da força de atrito para se construir o campo de tensões. No entanto, muitas vezes, não contabilizar a força de atrito pode gerar resultados imcompactíveis com a realidade. A presença do atrito aumenta a faixa de elasticidade, deixando a resposta mais isotrópica (difusa), mesmo fora desta faixa. Isso ocorre, pois o atrito estático é reversível na ausência de deslizamento [36].

Tradicionalmente, engenheiros têm utilizado a teoria elástica para descrever propriedades de materiais granulares em recipientes submetidos a baixo carregamento e modelos elasto-plásticos para descrever a deformação em escoamentos quasi-estáticos [36]. Porém, a elasticidade contínua é uma teoria macroscópica válida apenas a alguns exemplos. Cada partícula de um meio granular interage com um número finito de outras partículas, onde cada contato possui uma direção. Portanto, o ambiente local de uma partícula não é isotrópico. A existência de direções preferenciais abre a possibilidade do surgimento de cadeias de forças (que são as forças com intensidade maior do que a força média dos contatos). Esse fenômeno não é suficiente para impedir a elasticidade, as forças podem ser derivadas de um potencial, resultando em um conjunto de equações diferenciais elípticas. A teoria contínua não pode ser esperada para descrever essas forças microscópicas interpartículas. Embora o campo de tensão possa ser definido em pequenas escalas, a elasticidade contínua somente ocorre em escalas suficientemente grandes [33].

A existência das cadeias de forças, por si só, não é o suficiente para inserir anisotropia ao sistema. Pode ser visto qualitativamente que uma certa cadeia de força possui destaque, mas ao obter o campo de tensão, pode ser concluído que, mesmo aparentemente o sistema ser anisotrópico, na verdade sua resposta é difusa e o sistema pode ser modelado com equações diferenciais parciais elípticas [33].

Acreditava-se que, em sistemas muito grandes, aqueles considerados pelos engenheiros, não era possível se obter uma resposta anisotrópica, no entanto, experimentos têm mostrado que isso não é verdade. Um exemplo que podia dar margem a esta interpretação é o caso já citado da função resposta de uma força pontual vertical aplicada no topo de uma camada de grãos dispostos aleatoriamente. Ao aplicar a força, é possível ver a presença de cadeias de forças logo abaixo do ponto de aplicação, no entanto, caso a profundidade seja muito grande, ao medir a tensão no fundo do recipiente, não é possível distinguir uma região onde a tensão fosse significativamente mais elevada [37]. Em sistemas organizados em redes regulares, principalmente aqueles onde os grãos possuem todos os mesmos tamanhos, ao realizar um experimento de função resposta, é possível ver dois picos de tensão no fundo do recipiente em experimentos em duas dimensões, em três dimensões, a força se propaga na forma de um cone, logo, as maiores tensões no fundo do recipiente correspondem a um anel, cujo diâmetro é aumentado à medida em que a profundidade aumenta [36]. Em particular, a desordem pode ter grande efeito na anisotropia em pequenas escalas, no entanto, deixa a distribuição de forças mais homogênea em grandes escalas, resultando em uma resposta mais difusa e provavelmente isotrópica [33]. Já a organização parece deixar o sistema mais anisotrópico (portanto, podendo ser modelado por equações diferenciais hiperbólicas). Sendo assim, como já foi mostrado experimentalmente, o modo de preparo de uma amostra influencia fortemente o desenvolvimento do campo de tensão [35]. Como já foi mencionado, um contra-exemplo que pode provar a existência de um sistema granular anisotrópico, é a pilha de areia cônica. Pilhas são sistemas suficientemente grandes do ponto de vista da Engenharia, e a distribuição de tensões embaixo das pilhas é um dos assuntos mais polêmicos na estática de materiais granulares. De fato, experimentos têm mostrado que, quando uma pilha é construída por uma fonte de um ponto (funil, por exemplo), o perfil de pressão embaixo da pilha possui um mínimo local logo abaixo de seu pico. Pelo senso comum, era de se esperar que o pico de pressão fosse logo abaixo da maior altura devido à força da gravidade atuante sobre os grãos. Chegou-se à conclusão de que a presença ou a falta desse mínimo local está relacionada com a história de preparação da pilha, uma vez que, ao existir apenas um ponto para depositar os grãos, a ocorrência de avalanches sucessivas é inevitável, sendo este fenômeno o responsável por diminuir a tensão no centro da pilha, e as avalanches podem ser entendidas como um efeito induzido pelo cisalhamento ao longo das direções das avalanches. Esse acontecimento em pilhas de areia tem inspirado o desenvolvimento de novos modelos para descrever como as forças são transmitidas em meios granulares densos [38, 39]. No caso de sistemas granulares submetidos ao cisalhamento em escoamento quasi-estático, foi mostrado experimentalmente que, após o cisalhamento, as cadeias de forças apresentam direções preferenciais que são suficientes para introduzir anisotropia a um sistema [35].

A elasticidade permanece em um sistema quando ele apresenta linearidade, quando o princípio da superposição é mantido e quando há reversibilidade. A linearidade ocorre quando a aplicação de carregamentos em um mesmo ponto, com mesma direção e sentido, porém com intensidades diferentes, resulta em efeitos proporcionais. O princípio da superposição é quando carregamentos diferentes não mudam seus efeitos caso sejam aplicados isoladamente ou em conjunto. Por fim, a reversibilidade é a capacidade do sistema em voltar ao mesmo estado de tensão anterior à aplicação do carregamento. É impossível um sistema ter essas três características em perfeitas condições, no entanto há limites experimentais toleráveis para garantir a elasticidade [26].

Muitas dessas questões discutidas não são específicas apenas a sistemas granulares, elas também podem ser bastante relevantes para estudos de muitos outros sistemas fora de equilíbrio, como vidros, espumas, suspensões, sistemas em micro ou nano escala, ou em nanofluidos. Na verdade, pode até ser observado o aparecimento de forças individuais interpartículas em sistemas atômicos, podendo formar cadeias de forças. A diferença é que materiais granulares possuem a vantagem das suas escalas microscópicas serem relativamente mais fáceis de acessar experimentalmente, bem como a determinação das diferenças entre materiais granulares e materiais regulares (como sólidos clássicos) [1]. Além disto, a teoria da elasticidade clássica para sistemas com escalas muito pequenas deve ser revista [40].

3.4 Revisão Bibliográfica

Ao longo dos anos, alguns experimentos demonstravam que existia uma instabilidade na interface entre dois fluidos acelerados de densidades diferentes. Uma instabilidade análoga também foi observada no escoamento de fluidos por gravidade em meios porosos de duas dimensões. A fim de se aprofundar no estudo desses fenômenos, que foram observados inicialmente em fluidos, *Saffman* e *Taylor* fizeram um trabalho onde apresentaram formalismos matemáticos para a formação de dedos, uma vez que eles se formavam devido à instabilidade gerada entre os dois fluidos diferentes, e realizaram experimentos em que puderam comparar com os resultados analíticos obtidos [15].

No trabalho de *Saffman* e *Taylor*, o escoamento do fluido injetado ocorria axialmente, portanto, após a publicação de seu trabalho, muitas pesquisas referentes ao escoamento de um fluido menos viscoso sendo injetado radialmente em uma célula de *Hele-Shaw* preenchida por outro fluido mais viscoso começaram a surgir [17, 18, 19, 20, 41]. Nos trabalhos experimentais, foram observadas formações espontâneas de dedos de maneira radial.

Além dos trabalhos referentes a apenas o escoamento de dois fluidos, foram também realizadas pesquisas onde um fluido (ar ou glicerina) invadia uma célula de *Hele-Shaw* preenchida por um meio granular denso [22, 21]. Nesses sistemas, também foi observada a formação de dedos quando o fluido foi empurrado dentro da célula. Finalmente, um trabalho foi publicado em 2007 por Pinto et al., onde não foi mais utilizado qualquer fluido, em vez disto, material granular era empurrado dentro de uma célula de *Hele-Shaw* inicialmente preenchida por grãos diferentes dos grãos injetados [14]. Grãos foram utilizados no lugar de fluidos, pois o objetivo era comparar o comportamento coletivo de materiais granulares neste tipo de sistema com o fenômeno de formação de dedos em fluidos reportado por *Saffman* e *Taylor*.

Sendo assim, as subseções que se seguem têm por objetivo explorar um pouco dos trabalhos referentes à formação espontânea de dedos em sistemas confinados. Primeiramente, há a apresentação do fenômeno de formação espontânea de dedos de *Saffman-Taylor*, com alguns resultados experimentais e as soluções matemáticas propostas. Após, são mostrados alguns resultados obtidos no escoamento radial de fluidos com a consequente formação de dedos. Em seguida, resultados referentes à formação de dedos em sistemas onde fluidos invadem meios granulares densos são mostrados. E por último, e mais relevante, um pouco dos resultados referentes ao escoamento de apenas grãos são relatados.

3.4.1 Fenômeno de formação espontânea de dedos de Saffman-Taylor

No ano de 1958, os autores Saffman e Taylor publicaram um trabalho referente à penetração de fluidos em meios porosos ou em uma célula de Hele-Shaw contendo um fluido mais viscoso. A motivação para esse trabalho se deu ao fato de que quando um líquido viscoso que preenche os espaços vazios de um meio poroso é movido pela pressão de um outro fluido, a interface entre eles passa a ser instável se o líquido empurrado for menos viscoso que o líquido deslocado. Esse fenômeno ocorre em sistemas com óleos. Uma formulação simplista de que os dois fluidos permanecem completamente separados ao longo de uma interface definida leva a expressões análogas bem conhecidas por cientistas que trabalham em indústrias de óleos e também possuem analogias que representam a instabilidade da interface acelerada entre fluidos de diferentes densidades. No último caso, a instabilidade da interface leva à formação de dedos arredondados quando o fluido menos denso penetra o fluido mais denso. Experimentos onde um fluido viscoso confinado entre duas placas paralelas de vidro espaçadas por uma distância muito pequena (no formalismo matemático, esta distância é considerada infinitesimal), a célula de Hele-Shaw, é dirigido por um fluido menos viscoso revelam um estado similar. Sendo assim, o movimento dentro de uma célula de Hele-Shaw é, matematicamente, análogo ao escoamento bidimensional em um meio poroso [15].

Considerando o escoamento de dois fluidos de diferentes viscosidades em uma célula de *Hele-Shaw*, devido à instabilidade formada entre os dois fluidos, há a formação de bolhas compridas, que também são chamadas de dedos. O movimento dessas bolhas está conectado com os mecanismos de formação e propagação de dedos, e, por virtude da analogia, carrega também a questão de quanto tempo levaria para um tubo vertical ou um canal saturado de material poroso drenar-se quando se fecha seu topo e abre sua parte inferior. A partir do problema análogo para líquidos imiscíveis da movimentação das bolhas através de líquidos em tubos e canais, é possível se obter soluções exatas das equações de movimento na forma fechada e comparar com experimentos [15].

Imagine que uma bolha de viscosidade μ_2 e densidade ρ_2 se move firmemente através de um canal vertical de uma celula de *Hele-Shaw* preenchida com fluido de viscosidade μ_1 e ρ_1 , como pode ser esquematicamente visualizado pela figura 3.6, onde *BC* e *FE* são as paredes do canal, *AOG* é a superfície da bolha na interface dos dois fluidos, o eixo x corresponde à coordenada vertical e cresce à medida em que se afasta do solo, a coordenada horizontal y é perpendicular às paredes, e a origem do sistema é na ponta da bolha, que supostamente é simétrica em relação ao centro do canal. A velocidade da bolha é denotada por *U*, e a velocidade do outro fluido no infinito após a ponta da bolha é *V*. As paredes do canal tem como coordenadas y = -1 e y = 1, e a espessura da bolha no infinito (portanto, longe de sua ponta) é 2λ , onde λ pode ser qualquer valor entre 0 e 1. Os sufíxos 1 e 2 referem-se a parâmetros dos fluidos fora e



Figura 3.6: Dedo se movendo em um canal. Escoamento de fluidos em uma célula de *Hele-Shaw* onde um fluido menos viscoso é empurrado em um fluido mais viscoso, formando um bolha comprida, que também é chamada de dedo. Fonte: retirado de *Saffman & Taylor* [15].

dentro da bolha, respectivamente [15].

No trabalho de Saffman e Taylor, foram demonstradas as equações para as componentes de velocidade de um dedo escoando em um meio poroso, e estes resultados podem ser generalizados para sistemas contendo dois fluidos de viscosidades diferentes. Sendo assim, as velocidades médias dos dois fluidos ao longo do canal são dadas pelas equações 3.1 e 3.2 e a equação da continuidade toma a forma da equação 3.3, onde u e v são componentes das velocidades médias paralelas aos eixos x e y.

$$u_1 = -(b^2/12\mu_1)\nabla(p + \rho_1 gx) = \nabla\phi_1$$
(3.1)

$$u_2 = -(b^2/12\mu_2)\nabla(p + \rho_2 gx) = \nabla\phi_2$$
(3.2)

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{3.3}$$

Após a utilização das equações das componentes de velocidade do fluido da bolha e condições de contorno adequadas, Saffman e Taylor fizeram várias manipulações algébricas e encontraram as soluções para a equação do formato da bolha, equação 3.4, e também uma equação para λ , que é definido como sendo a divisão entre a espessura do dedo pela espessura do canal onde o fluido menos viscoso passa. O valor de λ da bolha é dado em termos de U (a velocidade da bolha), V (velocidade do outro fluido no infinito), e das propriedades físicas do fluido, de acordo com a equação 3.5 [15].

$$x = \frac{1-\lambda}{\pi} \ln \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{\pi y}{\lambda} \right) \tag{3.4}$$

$$\lambda = \frac{V + U^*}{U + U^*} \tag{3.5}$$

A velocidade máxima de propagação do dedo corresponde ao valor onde $\lambda = 0$, logo, é dada pela equação 3.6.

$$U_{max} = \frac{\mu_1}{\mu_2} V + \frac{b^2 g}{12\mu_2} (\rho_1 - \rho_2)$$
(3.6)

Nesta análise matemática não existe nenhum argumento capaz de determinar a espessura da bolha e os valores de λ . Portanto, se somente uma velocidade no infinito da bolha é especificada (isto é equivalente à especificar a pressão com que o fluido menos viscoso é empurrado na direção do fluido mais viscoso), então o problema de fronteira livre não tem uma solução única e existem infinitos números possíveis de formas estáveis, com diferentes velocidades de propagação. Os experimentos reportados no trabalho de Saffman e Taylor indicaram que, se a velocidade do escoamento para um dado fluido cresce, λ decresce rapidamente para $\lambda = \frac{1}{2}$ e permanece próximo a este valor em altas taxas de velocidade, até que, em uma velocidade muito elevada, o escoamento da língua do dedo do fluido invasor se rompe, dividindo-se em outros dedos menores [15]. Fotografia de um dos experimentos reportados pode ser verificada na Figura 3.7, onde há a formação de dedo quando uma bolha de ar invade um fluido mais viscoso, que, neste caso, foi a glicerina.



Figura 3.7: Bolha de ar penetrando glicerina. Fonte: retirado de Saffman & Taylor [15].

3.4.2 Formação espontânea de dedos em escoamento radial de fluidos

Após o trabalho de *Saffman* e *Taylor* em 1958 [15], muitas pesquisas relacionadas ao escoamento de fluidos radialmente em uma célula de *Hele-Shaw* surgiram. Alguns destes trabalhos mostravam resultados experimentais das configurações obtidas, com a consequente formação de dedos [19], e outros evidenciavam resultados obtidos por simulações computacionais [18, 20].



Figura 3.8: Esquema de uma célula de *Hele-Shaw* anisotrópica radial. Fonte: retirado do trabalho de *Banpurkar* et al. [17].

Houve também um estudo interessante realizado por *Banpurkar* et al. no ano de 2000 em que, em vez de utilizarem uma célula de *Hele-Shaw* lisa, foi utizada uma célula anisotrópica quadriculada [17], como pode ser vista esquematicamente na Figura 3.8. A presença dos quadriculados influenciou fortemente na dinâmica de formação de dedos e também nos padrões encontrados. Nesse sistema, a capilaridade é dada por $N_{ca} = U\mu/T$, onde U é a velocidade de injeção do fluido menos viscoso na célula, μ é a viscosidade relativa entre os dois fluidos utilizados, e T é a tensão superficial na divisa entre os dois fluidos. Nesse trabalho, foi utilizada uma razão de μ/T 10 vezes maior do que em sistemas tradicionais compostos de ar e glicerina. Foi observado que quanto maior é a capilaridade N_{ca} (portanto, quanto maior é a velocidade U), maior é a tendência do sistema em formar dendritas, e em velocidades suficientemente elevadas (onde N_{ca} tende a 1), há a formação de uma nova fase onde o fluido empurrado escoa ao longo dos canais e também ao longo de direções que fazem um ângulo de 45 ° com os canais [17], como pode ser visto na Figura 3.9. Essa nova fase também já foi observada em sistemas de líquidos miscíveis com baixas taxas de escoamento [17].

Já no trabalho de *Martyushev* et al. de 2008 [19], foi determinada a produção da entropia neste tipo de escoamento. A morfologia da superfície entre os fluidos injetado e deslocado foi estudada utilizandose uma análise linear para a estabilidade e o princípio da produção máxima de entropia. Por meio de modelos criados nesse trabalho, regiões com diferentes formas de interfaces são previstas, e estas regiões dependem do tamanho da célula, da velocidade de injeção e da viscosidade relativa entre os dois fluidos. Na verdade, as teorias propostas não foram validadas nesse trabalho, no entanto os experimentos não eram capazes de falseá-las, o que já é um resultado próspero.

No trabalho de *Nase* et al. de 2011 [41], foi estudada a variação do número de dedos formados e suas profundidades no escoamento radial de ar em uma célula preenchida por óleo. Os parâmetros de controle eram a tensão superficial entre os dois fluidos, que aumenta com o passar do tempo, e a distância entre as duas placas da célula. No problema clássico de *Saffman-Taylor*, a tensão superficial governa a instabilidade entre os dois fluidos, que é, por sua vez, a responsável pelo crescimento de dedos. Também foram distinguidos dedos crescentes de dedos estagnados. Ao variar as propriedades do óleo e a geometria da célula, foi observado que o número de dedos crescentes em um dado momento depende apenas da tensão superficial adimensional. Por outro lado, a amplitude do dedo e o número total de dedos depende



Figura 3.9: Formação de padrões em escoamento de fluidos em uma célula de *Hele-Shaw* anisotrópica. A primeira imagem representa uma amostra realizada com um baixo valor de capilaridade. A capilaridade vai aumentando ao longo das imagens e é possível observar que quanto maior é a capilaridade, maior é a tendência da formação de dendritas.

Fonte: adaptado do trabalho de Banpurkar et al. [17].

também da célula de confinamento, como pode ser visto na Figura 3.10. Algumas simulações foram realizadas após esse trabalho, que se mostraram de acordo com estes e outros resultados experimentais presentes na literatura [18].

3.4.3 Escoamento radial de fluidos em meios granulares densos

A apresentação anterior de alguns trabalhos referentes ao escoamento radial de fluidos em uma célula de *Hele-Shaw* foi bastante significativa para o entendimento dos mecanismos que levam à formação de dedos nestes sistemas, mas agora alguns resultados experimentais serão mostrados referentes ao escoamento de fluidos em uma célula preenchida por material granular denso confinado. Um trabalho publicado no ano de 2006 por *Johnsen* et al. explora resultados experimentais e simulações de injeção de ar em material granular denso [21]. Já o trabalho de *Huang* et al. publicado no ano de 2012, resultados experimentais são apresentados referentes à injeção radial de soluções aquosas de glicerina em um sistema granular seco e denso [22].

No trabalho de *Johnsen*, o objetivo era investigar a dinâmica do material granular confinado em uma célula de *Hele-Shaw*, durante a injeção central de ar [21]. Foram realizados experimentos e simulações para estudar esse sistema, que é dirigido pelo seu próprio fluido intersticial (ar). O modelo numérico levou em consideração as interações entre o material granular e seu fluido intersticial, as interações físicas entre os grãos e as interações entre grãos e as placas responsáveis pelo confinamento. O atrito entre os grãos e entre grãos e as placas da célula de confinamento agem como um mecanismo estabilizador,



Figura 3.10: Visão de topo de quatro experimentos de escoamento de fluidos em uma célula de *Hele-Shaw*. Os experimentos foram realizados com diferentes espaçamentos *b* entre as placas de vidro da célula de *Hele-Shaw*, e três diferentes tempos *t'* foram mostrados para cada um dos quatro experimentos. Em todas as amostras, ar foi injetado em uma célula contendo óleo. Fonte: retirado do trabalho de *Nase* et al. [17].

dificultando o deslocamento de partículas. Nesse trabalho, quatro regimes de pressão de injeção de ar foram utilizados, promovendo a formação de padrões diferentes. No primeiro regime de pressão (menor valor), não foi registrado deslocamento de grãos, assim, o ar injetado apenas escoou através dos poros do material granular. No segundo regime de pressão, as partículas começaram a se movimentar, e um padrão circular foi observado. No terceiro regime de pressão, uma instabilidade entre a divisão dos grãos e do fluido aparece, fazendo com que o deslocamento de grãos perca seu padrão circular, levando à formação de dedos, como pode ser visto na Figura 3.11. O comprimento dos dedos cresce à medida que a pressão de injeção cresce. Assim como a instabilidade de *Saffman-Taylor*, o gradiente de pressão é maior nas pontas dos dedos mais desenvolvidos [21].

O estudo de *Huang* et al. mostra resultados experimentais da formação espontânea de padrões em um meio granular denso e seco invadido radialmente por soluções aquosas de diferentes concentrações em massa de glicerina em uma célula de *Hele-Shaw*. A mudança da viscosidade do fluido injetado se deu alterando-se a concentração de glicerina nas soluções (quanto maior a massa de glicerina, mais viscoso o



Figura 3.11: Injeção central de ar em uma célula de *Hele-Shaw* preenchida por material granular denso. A imagem representa um padrão de deslocamento a uma pressão de injeção de 2,34 kPa, no terceiro regime de pressão. A região compactada é indicada pelas linhas brancas. As linhas escuras no centro da imagem mostram as direções dos movimentos das partículas durante a injeção de ar na célula. Fonte: adaptado do trabalho de *Johnsen* et al [21].

fluido é), ajustando-se a velocidade de injeção e a distância entre as duas placas da célula. Ao realizar os experimentos, foram observados quatro tipos de regimes de deslocamento: um regime simples radial (o sistema de grãos se comporta como um meio sólido poroso), um regime onde a infiltração é dominante, um regime onde o deslocamento de grãos domina e um regime viscoso de formação de dedos (onde o sistema granular se comporta como um fluido) [22], como por ser visto na Figura 3.12. Esses regimes de deslocamentos podem ser associados aos mecanismos de dissipação de energia, que dependem de vários fatores, como a velocidade de injeção, o acoplamento hidromecânico e a plasticidade viscoelástica [22].

3.4.4 Injeção radial de grãos em meios granulares confinados

Já foi apresentado detalhes sobre escoamento radial de fluidos em uma célula de *Hele-Shaw*, escoamento de fluidos em sistemas granulares confinados e agora mostramos resultados de um trabalho publicado em 2007 por Pinto at al. da injeção quasi-estática de partículas em meios granulares confinados na célula de *Hele-Shaw* [14]. Até então, não existiam trabalhos teóricos disponíveis descrevendo esse fenômeno particular do escoamento de grãos confinados radialmente em duas dimensões, uma vez que não existe tensão superficial em materiais granulares, e no escoamento de fluidos, esta é a responsável pela formação de dedos em experimentos. Portanto, o estudo de Pinto at al., através de experimentos e simulações, teve por objetivo explorar tais fenômenos em materiais granulares, uma vez que ainda era pouco conhecido.

Nos experimentos e simulações, os grãos foram inseridos um por um quasi-estaticamente, no centro de uma célula contendo uma monocamada inicial de grãos. Foram realizadas várias combinações de grãos e



Figura 3.12: Injeção central de soluções aquosas de glicerina em uma célula de *Hele-Shaw* preenchida por material granular denso e seco.

A viscosidade do fluido injetado cresce dos experimentos A1 ao C4, e assim, é possivel observar uma transição de um comportamento do escoamento onde a infiltração domina, para um comportamento em que existe um limite de infiltração. A resposta do material granular também muda de um meio poroso no experimento A1, para um sistema granular que se comporta como um fluido no experimento C4, onde a morfologia das ramificações dos dedos assemelha-se ao escoamento entre dois fluidos. As regiões mais claras correspondem à presença única de material granular, as regiões mais escuras representam áreas onde há somente fluido, e as regiões cinzas correspondem à mistura de grãos e fluido. Fonte: adaptado do trabalho de *Huang* et al. [22].

diferentes tamanhos de partículas. Nos experimentos, a configuração da monocamada foi testada (grãos dispostos de forma organizada ou aleatoriamente), para ver a influência de sua preparação na formação de padrões, e foi também variada a distância entre as placas da célula. Vários padrões, variando de formato circular, até padrões com dedos, podem ser visualizados na Figura 3.13. Basicamente, as imagens da primeira linha evidenciam o desenvolvimento do padrão formado pela injeção de aço carbono em uma monocamada inicial de isopor. Na segunda linha, a distância entre as placas foi gradualmente aumentada. Os experimentos evidenciaram que só existe a formação de dedos quando os grãos inseridos são maiores que os grãos da monocamada, sendo que, quanto menor for o grão injetado, maior é a tendência da formação de padrão circular. Em simulações, também foi observada a formação de dedos quando os grãos injetados eram menores que os grãos da base. Nos experimentos, ao se aumentar a distância entre as placas, existe uma transição gradual de padrões onde os dedos são bem pronunciados, para padrões circulares, sendo que a menor distância possível é levemente maior do que um diâmetro do grão injetado [14].



Figura 3.13: Padrões formados pela injeção de esferas de aço carbono em esferas de isopor. A monocamada inicial de isopor era polidispersa. (a)-(d) Desenvolvimento do padrão para uma distância entre placas de 4,93 mm. O número de grãos injetados corresponde, aproximadamente, a 790 (a), 2760 (b), 4730 (c), e 6700 (d). (e)-(f) transição de um padrão com dedos para um padrão circular, para diferentes espaços entre as placas da célula: 4,93 (e), 5,17 (f), 5,44 (g), and 5,73 mm (h). Os padrões foram formados injetando-se 6700 esferas de aço carbono.

Fonte: adaptado do trabalho de Pinto et al. [14].

Já na Figura 3.14, esferas de poliestireno foram injetadas em uma monocamada de aço carbono. É possível observar que as esferas injetadas cristalizam espontaneamente, organizando-se em uma rede triangular. Analisando o padrão, observa-se que os dedos estão orientados ao longo das direções da rede. O padrão hexagonal de dedos é formado, pois, em uma estrutura granular cristalizada, a força pode se propagar em uma reta, ou então pode ser dividida em duas direções preferenciais que possuem ângulo de 60° entre si e, consequentemente, o movimento dos grãos ocorre na direção dos dedos. Esse tipo de padrão ocorre em algumas exceções especiais.





Os dedos vistos em (a) estão orientados ao longo da direção mostrada em (b), enquanto que as regiões adjacentes aos dedos está orientada ao longo da direção mostrada em (c). Fonte: adaptado do trabalho de Pinto et al. [14].

Também foram realizados experimentos injetando-se esferas de aço carbono de dois tamanhos diferentes, para avaliar a real influência da cristalização na formação de dedos. Imagina-se que a existência de grãos de dois tamanhos diferentes pode impedir ou, pelo menos, dificultar a cristalização do sistema em uma rede regular triangular. Se não existe cristalização, então a formação de dedos deveria diminuir ou até mesmo desaparecer. Na Figura 3.15, experimentos utilizando-se amostras bidispersas foram realizados, onde a porcentagem de esferas de cada tamanho foi variada. É possível notar que, em amostras bidispersas, o sistema passa a ter um padrão circular, enquanto que, em amostras monodispersas, existe a formação de dedos [14].

Por fim, o trabalho de Pinto at al. sugere uma conexão com os estudos de tensão em sistemas granula-

res. Em amostras que possuem dedos, a transmissão de força está de acordo com os modelos anisotrópicos de propagação de tensão (modelos hiperbólicos), uma vez que a formação de dedos deve estar associada à propagação de tensão ao longo dessas direções preferenciais. Já em padrões circulares, a propagação de tensão está de acordo com os modelos elípticos, onde a resposta é mais difusa [14].



Figura 3.15: Padrões formados pela injeção de misturas bidispersas de esferas de aço carbono em esferas de isopor.

A porcentagem da esfera de aço carbono maior em cada experimento é: (a) 100%, (b) 50%, (c) 25%, (d) 0%. A mistura de esferas com dois tamanhos diferentes dificulta a formação de dedos. Nesses experimentos, a segregação de grãos por tamanho não foi observada.

Fonte: adaptado do trabalho de Pinto et al. [14].

Capítulo 4

Metodologia

Nesta seção, será apresentada a modelagem matemática e computacional utilizada para simular os sistemas granulares, que é uma adaptação do modelo de Dinâmica Molecular descrito no livro de Allen e Tildesley, Computer Simulation of Liquids [24]. Em seguida, serão apresentados os parâmetros utilizados na produção das amostras e, por fim, serão descritas as ferramentas utilizadas na análise das amostras geradas.

4.1 Modelagem

Duas equações diferenciais de segunda ordem são basicamente utilizadas para modelar matematicamente sistemas granulares, são elas as equações 4.1 e 4.2. Onde m é a massa do grão, \mathbf{r} é sua posição no espaço, \mathbf{f} é a força resultante sobre o grão, \mathbf{g} é a aceleração da gravidade, I é seu momento de inércia, ϕ é sua posição angular e τ é o torque. A letra *i* representa a indexação para um grão qualquer do sistema.

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i = \mathbf{f}_i + m_i \mathbf{g} \tag{4.1}$$

$$I_i \frac{d^2}{dt^2} \phi_i = \tau_i \tag{4.2}$$

Todas as simulações foram realizadas em duas dimensões, onde os dois eixos utilizados eram ambos na horizontal, portanto, como os grãos não têm liberdade para se movimentarem no eixo vertical, portanto, nesse caso, não há contribuição da aceleração da gravidade, logo g = 0. Os grãos foram modelados como sendo discos circulares com espessura infinitesimal.

Dentre as diversas abordagens para a modelagem computacional de sistemas granulares, a utilizada neste trabalho foi a Dinâmica Molecular, para todas as simulações. Os sistemas são modelados pelas equações diferenciais já descritas, que são integradas numericamente pelo método Preditor-Corretor *Gear* de terceira ordem. Nesse algoritmo, o tempo é uma variável discreta com tamanho suficientemente pequeno, que é menor do que o tempo de oscilação da menor partícula do sistema, sendo assim, dt é dado

pela equação 4.3, onde k é a constante de mola do grão, e m é a sua massa.

$$dt = \frac{\sqrt{m/k}}{100} \tag{4.3}$$

O programa se divide em processos iterativos, onde, para cada passo de tempo, as equações diferenciais são numericamente integradas utilizando o passo de tempo, dt, calculado. Para cada iteração, temos subrotinas essenciais que devem ser executadas na seguinte ordem:

- Preditor;
- Detectar Contatos;
- Calcular Forças;
- Arquivar Reações Tangenciais;
- Corretor;

Dentro da subrotina **Preditor**, calculamos as posições, velocidades e acelerações previstas de todos os grãos inseridos até o momento no sistema, utilizando um passo de tempo fixo já calculado, dt. Sendo assim, é necessária a utilização das equações dos sistemas 4.4 e 4.5, onde \mathbf{r}_i^p , \mathbf{v}_i^p e \mathbf{a}_i^p são, respectivamente, a posição, velocidade e aceleração previstas para cada grão i, e \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i e \mathbf{a}_i são, respectivamente, posição, velocidade e aceleração de cada grão calculadas no processo iterativo anterior, enfatizando que os mesmos cálculos são realizados tanto para a coordenada x do sistema, como para a coordenada y. Além disso, consideramos um sistema onde o atrito entre as partículas não é nulo, portanto é necessário calcular a posição angular, θ_i^p , a velocidade angular, ω_i^p , e a aceleração angular, α_i^p , previstas, calculadas a partir dos valores de θ_i , ω_i , e α_i do passo de tempo anterior.

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{i}^{p}(t+dt) = \mathbf{r}_{i}(t) + \mathbf{v}_{i}(t) \cdot dt + \mathbf{a}_{i}(t) \cdot dt^{2}/2 \\ \mathbf{v}_{i}^{p}(t+dt) = \mathbf{v}_{i}(t) + \mathbf{a}_{i}(t) \cdot dt \\ \mathbf{a}_{i}^{p}(t+dt) = \mathbf{a}_{i}(t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \theta_{i}^{p}(t+dt) = \theta_{i}(t) + \omega(t) \cdot dt + \alpha_{i}(t) \cdot dt^{2}/2 \\ \omega_{i}^{p}(t+dt) = \omega_{i}(t) + \alpha_{i}(t) \cdot dt \\ \alpha_{i}^{p}(t+dt) = \alpha_{i}(t) \end{cases}$$

$$(4.4)$$

Em seguida, tem-se a subrotina **Detectar Contatos**, cuja finalidade é criar uma lista com todos os grãos que estão em contato. O critério para se determinar os contatos é de que a diferença entre a distância entre os centros de massa dos dois grãos analisados pela soma dos raios de ambos os grãos deve ser negativa, e esta diferença é denominada interpenetração, δ , que é representada esquematicamente na Figura 4.1. Os cálculos são realizados utilizando-se a equação 4.6, onde xr é o raio e as letras i e



Figura 4.1: Esquema de dois grãos em contato fisico usado em modelo de Dinâmica Molecular, evidenciando a interpenetração δ .

j representam parâmetros para dois diferentes grãos. Cada grão do sistema é comparado com todos os grãos. Dessa forma, nenhum contato deixará de ser colocado na lista.

$$\delta = \left| \mathbf{r}_i^p - \mathbf{r}_j^p \right| - (xr_i + xr_j) \tag{4.6}$$

A fim de se diminuir o custo computacional das simulações, uma subrotina a mais foi adicionada ao programa. Ela não foi explicitada anteriormente, pois ela não é executada em todos os processos iterativos, e sim a cada 100 passos de tempo. Ela tem por objetivo criar uma lista de grãos vizinhos, onde são vizinhos aqueles grãos que estão a uma distância de até 2,5 vezes o raio máximo. Dessa forma, na subrotina **Detectar Contatos**, em vez de compararmos cada grão com todos os outros, os cálculos são realizados apenas com os seus respectivos vizinhos.

Na subrotina **Calcular Forças**, as forças entre cada par de grãos que estão em contato são calculadas. Cada grão é modelado pela lei de *Hooke* da elasticidade linear de meios contínuos. Para cada contato, a força entre os grãos é dividida entre uma componente normal à direção do contato e uma componente tangencial. A força na direção normal é dividida entre a força restauradora, f_{nel} , e a força de arraste, f_{vis} , que são calculadas, respectivamente, pelas equações 4.7 e 4.8, onde k_n é a constante de mola na direção normal (quando há contatos entre grãos de rigidez diferentes, k_n será a média aritmética entre os dois valores). A força total na direção normal daquele contato é $f_n = f_{nel} + f_{vis}$. A propriedade k_n depende do tipo de material em que o grão é feito e está relacionada ao módulo de elasticidade E.

$$f_{nel} = -\delta_{ij} \cdot k_n \tag{4.7}$$

$$f_{vis} = -vn_{ij} \cdot g_n \tag{4.8}$$

As variáveis $vn_{ij} \in g_n$ representam, respectivamente, a velocidade relativa entre os dois grãos na direção normal e o coeficiente de amortecimento, onde g_n é ligeiramente menor que $2\sqrt{k_n \cdot m}$ (representando uma oscilação levemente subcrítica para o menor grão), no qual m é a massa do menor grão do sistema, e $vn_{ij} = (\mathbf{v}_j^p - \mathbf{v}_i^p) \cdot \mathbf{n}$, onde \mathbf{n} é o vetor unitário da direção normal do contato (conecta os centros de massa dos dois grãos).

Já para se calcular a força tangencial, é necessário calcular a força de atrito entre os dois grãos, $f_{at} = \mu \cdot f_{nel}$, e a força elástica na direção tangencial, f_{test} , onde μ é o coeficiente de atrito entre os grãos. Caso $|f_{test}| > |f_{at}|$, então a força tangencial é $f_t = f_{at}$, caso contrário, $f_t = f_{test}$. A força elástica na direção tangencial, f_{test} , é calculada segundo a equação 4.9, onde vt_{ij} é a velocidade relativa entre os dois grãos na direção tangencial, que é dada pela equação 4.10, sendo k_s a constante de mola na direção tangencial e f_t^* a força tangencial entre os dois grãos calculada no passo de tempo anterior, isto, se o contato já estivesse presente na última iteração, caso contrário, $f_t^* = 0$. O vetor t é o vetor unitário da direção tangencial do contato. A propriedade da constante de mola na direção tangencial, k_s , depende do tipo de material no qual o grão é feito e está relacionada ao coeficiente de *Poisson* na elasticidade linear de meios contínuos.

$$f_{test} = f_t^* - k_s \cdot v t_{ij} \cdot dt \tag{4.9}$$

$$vt_{ij} = (\mathbf{v}_j^p - \mathbf{v}_i^p) \cdot \mathbf{t} - \omega_i \cdot xr_i - \omega_j \cdot xr_j$$
(4.10)

Calculando-se as forças entre grãos de todos os contatos, a força resultante sobre cada grão nada mais é do que a soma vetorial de todas as forças que os grãos em contato excercem sobre ele. Também calculamos o torque resultante para cada grão i que é $\tau_i(t+dt) = \tau_i(t) - f_r \cdot xr_i$, onde f_r é a força tangencial resultante no grão i, que é a soma vetorial das forças tangenciais de todos os contatos daquele grão.

Pode ser visto que a subrotina **Calcular Forças** é uma das mais complexas do programa, no entanto, uma das mais importantes, qualquer erro pode comprometer drasticamente a mecânica dos cálculos. Próxima subrotina é a **Arquivar Reações Tangenciais**. Essa subrotina é mais simples, ela é somente responsável por armazenar todas as forças tangenciais de cada contato recém calculadas, uma vez que, como foi visto, para a próxima iteração, caso determinado contato seja persistente, a força tangencial precisa ser computada utilizando a força do passo de tempo antecedente.

Finalmente, última subrotina é o **Corretor**. Sua finalidade é, a partir das forças resultantes em cada grão, atualizar os valores de aceleração, velocidade e posição. Para isso, utilizamos as equações dos sistemas 4.11 e 4.12, onde f_i^p é a força resultante em cada grão, m_i é sua massa, I_i é o momento de inércia, que, para o caso de discos circulares, é $I_i = (m_i \cdot xr_i^2)/2$, e $c1 = dt^2/2$. A fim de simular a perda de energia devido à interação entre os grãos e as placas da célula de *Hele-Shaw*, o parâmetro η (variando entre 0 e 1) foi introduzido no algoritmo, com analogia ao "atrito viscoso".

$$\begin{cases} \mathbf{a}_{i} = \mathbf{f}_{i}^{p}/m_{i} \\ \mathbf{v}_{i} = (1 - \eta) \cdot (\mathbf{v}_{i}^{p} + c1 \cdot (\mathbf{a}_{i} - \mathbf{a}_{i}^{p})) \\ \mathbf{r}_{i} = \mathbf{r}_{i}^{p} \end{cases}$$
(4.11)

$$\begin{cases} \alpha_i = \tau_i / I_i \\ \omega_i = \omega_i^p + c1 \cdot (\alpha_i - \alpha_i^p) \\ \theta_i = \theta_i^p \end{cases}$$

$$(4.12)$$

Para inserir um novo grão ao sistema, uma subrotina **Coloque Bola** é executada a cada 10000 iterações. Essa subrotina determina uma posição para o grão novo, na qual é uma posição vazia aproximadamente no centro do sistema, e determina seu raio. A princípio, o raio atribuído ao grão é dividido por 5000, sendo que, a cada passo de tempo, o seu tamanho é acrescido deste incremento na subrotina **Preditor**, até que o grão tenha seu raio original. Portanto, são necessários 5000 passos de tempo para que um grão seja totalmente inserido e os outros 5000 passos de tempo restantes são responsáveis pelo relaxamento do sistema, equilibrando-o. Grãos são inseridos um por um. O grão inserido é modelado dessa forma, pois representa um corte da seção transversal da célula de *Hele-Shaw*, portanto, à medida que o grão vai se movimentando verticalmente, entrando no sistema pelo orifício, o corte de sua seção transversal vai aumentando até que o grão seja todo inserido, portanto, apresentando o seu raio completo ao final da inserção.

4.2 Amostras

Para todas as amostras, consideramos um substrato inicial com 3781 grãos dispostos em uma rede hexagonal, como pode ser visto pela configuação da Figura 4.2. Os grãos inseridos eram 1,5 vezes maiores que o maior grão da base. Esse substrato é o responsável pelo confinamento do sistema. O módulo de elasticidade na direção tangencial foi de 0,75 vezes o módulo na direção normal. Dados foram armazenados a cada grão inserido. Grãos inseridos possuíam módulo de elasticidade 10 vezes maior do que os grãos da base.

Alguns parâmetros foram variados a fim de se observar o comportamento coletivo e determinar quais são os responsáveis por aumentar a tendência à formação de padrões com dedos. Em todos os casos considerados aqui, utilizamos grãos inseridos maiores que os grãos do substrato. Foram geradas 10 amostras para cada parâmetro avaliado. O coeficiente de atrito foi fixado em $\mu = 0.5$, exceto quando está explicitamente indicado, e o coeficiente de atrito entre as partículas e as placas foi fixado em $\eta = 0.15$. Testamos as seguintes combinações de grãos de base/inseridos:



Figura 4.2: Configuração de uma camada horizontal de grãos monodispersos dispostos em rede hexagonal.

- Monodisperso/monodisperso: diferentes coeficientes de atrito entre partículas foram testados ($\mu = 0,10; 0,50; e 0,90$);
- Polidisperso/polidisperso: com polidispersão de 5%, 10%, 20% e 30%;
- Monodisperso/bidisperso: grãos inseridos são bidispersos com razão de raios R/r = 2,0/1,4. Os grãos da base apresentam todos os mesmos tamanhos;
- *Polidisperso/monodisperso*: raio dos grãos inseridos 1,5 vezes maior que o tamanho do maior grão do substrato.

Neste caso, definimos a polidispersão como sendo o raio do maior grão, xr_{maior} , subtraído do raio do menor grão, xr_{menor} , tudo isso dividido pelo raio do maior grão, portanto, a polidispersão é igual a $100\% \cdot (xr_{maior} - xr_{menor})/xr_{maior}$. Um algoritmo para a geração de números aleatórios foi utilizado a fim de garantir que a probabilidade do grão ter um determinado raio seja igual para qualquer valor do intervalo compreendido entre o maior e menor valor de raio determinado pela polidispersão.

4.3 Análises das amostras

Para verificar se os ângulos de contatos possuem direções preferenciais, algumas técnicas foram utilizadas. O ângulo de contato é o ângulo que o vetor de contato (vetor que une os centros de massa de dois grãos que estão em contato efetivo) faz com o eixo x. Para realizar as análises, primeiramente, um histograma foi realizado das frequências dos ângulos de contatos. Cada ângulo de cada contato é calculado utilizando-se $\theta = arctg(sen\theta/cos\theta)$, uma vez que, a cada iteração, são armazenados o cosseno e seno daquele contato, que correspondem, respectivamente, às coordenadas x e y do vetor unitário de um determinado contato. A função arcotangente fornece valores de ângulos entre -90° e 90° , portanto, o histograma dos ângulos de contatos também terá estes valores mínimo e máximo. Neste caso, a espessura de cada barra do histograma foi de 5°, portanto, o histograma possui 36 barras. Após a realização do histograma, as três maiores frequências (picos) são determinadas para se utilizar mais adiante, como será explicitado. Um esquema de um histograma com os seus três respectivos picos é evidenciado na Figura 4.3.



Figura 4.3: Histograma das frequências dos contatos com os seus três respectivos picos.

Após a realização do histograma dos ângulos de contatos, o histograma da distribuição espacial dos grãos também é realizado. Ao fixar um eixo de coordenadas x e y no centro do sistema, que é por onde os grãos são inseridos, as frequências da distribuição dos grãos também são determinadas. Os setores circulares iniciam-se de -90° e variam de 5° em 5°, até completar 90°. Para cada setor circular, são determinados quantos grãos injetados estão dentro do setor (o centro de massa do grão deve estar dentro da área do setor), e esta é a frequência de grãos para aquele ângulo, e é assim que o histograma é construído, similarmente ao histograma dos ângulos de contatos. Após a construção do histograma, seus três maiores picos também são determinados. A Figura 4.4 é um esquema de como é realizada a contagem de grãos para um setor genérico entre -90° e 90° .

Após determinar os valores dos três picos, tanto para a distribuição dos grãos, quanto para os ângulos de contatos, um gráfico foi realizado da distribuição de grãos em função do ângulo de contato. Isso significa



Figura 4.4: Metodologia de como se calcular a quantidade de grãos em uma faixa de ângulo.

que o pico 1 do histograma dos grãos com o pico 1 do histograma dos ângulos de contatos representam um ponto e assim ocorre sucessivamente. Portanto, para cada amostra, três pontos são determinados, ao se plotar todos os pontos de todas as amostras em um mesmo gráfico, ao utilizar 10 amostras, teremos um gráfico com 30 pontos.



Figura 4.5: Esquema de como calcular as flutuações das frequências de contatos a partir de seu histograma.

Perfis demonstrando somente as cadeias de forças também foram gerados, a fim de se observar qualitativamente se elas possuem direções preferenciais. Para isso, a força média foi calculada radialmente, sendo que, quanto maior a distância do ponto analisado até o centro do sistema, menor é a força média. Sendo assim, o sistema foi dividido em vários aneis de espessura igual a 5 diâmetros do maior grão, e a força média daquele anel foi calculada como sendo a soma das intensidades de todas as forças de contatos que estão geometricamente dentro do anel dividida pelo número de contatos presentes nesta região. Após esses cálculos, alguns valores de força média em função da distância até o centro foram obtidos. Considerando que a força média diminui linearmente, foi realizado um ajuste linear desses valores de força média obtidos, para chegar até uma expressão da força média em função da distância até o centro do sistema. Sendo assim, para cada contato presente, sua distância até o centro do sistema foi calculada e foi utilizada na função linear obtida para determinar a força média. Caso a intensidade da força daquele contato analisado seja maior que a força média calculada para aquele ponto, então este contato é armazenado para depois ser representado nos perfis das configurações com as cadeias de forças.

Ultima técnica a ser utilizada é a construção do histograma de flutuações das frequências dos ângulos de contatos. A média das frequências do histograma dos ângulos de contatos é calculada como a soma das frequências dividida pelo número de barras. Após a determinação da média, cada flutuação é calculada como sendo a média subtraída do valor da frequência, obtendo, assim, 36 valores de flutuações. Para esse caso, os valores de frequências maiores que a média fornecem valores negativos de flutuação, e os valores menores que a média fornecem valores positivos de flutuação. Pela Figura 4.5, é possivel observar como essa técnica é executada. Após o cálculo das flutuações, seu histograma é construído. Para amostras com flutuações aleatórias, espera-se um histograma com média centrada próxima de zero e distribuição gaussiana, enquanto que em amostras onde não há flutuações aleatórias, não se espera encontrar uma gaussiana e espera-se uma média diferente de zero.

Todas essas técnicas foram utilizadas nas análises de todos os tipos de amostras geradas. Uma vez que, ao se utilizar uma mesma técnica para sistemas com comportamentos distintos, é possivel analisar onde estão suas diferenças.

4.4 Perfil de Tensão

A fim de observarmos a flutuação da tensão durante a injeção de um grão, uma amostra de cada combinação de geometria foi escolhida. Assim, dados foram coletados a cada 100 passos de tempo de Dinâmica Molecular e o perfil instantâneo de tensão foi calculado.

Uma abordagem *Coarse Graining* leva a expressões para a tensão e outros campos, em termo de informações microscópicas [1]. Aqui, apresentamos uma abordagem apenas espacial, e não temporal. Embora resultados experimentais são médias sobre várias configurações para decrescer as flutuações, ainda não é claro se existe um tipo de média que pode ser generalizada para todos os sistemas granulares. Portanto, a tensão será aqui definida em sentido que se aplica a realizações únicas [1].

Considere um sistema de grãos, cujas massas, centros de massas (posições) e velocidades em um tempo t são dados por, respectivamente: m_i , $\mathbf{r}_i(t)$ e $\mathbf{v}_i(t)$. A densidade de massa coarse grained do sistema é definida como: $\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_i m_i \phi[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)]$, e a densidade de momento é $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) \phi[\mathbf{r} - \mathbf{r}(t)]$, onde $\phi(\mathbf{R})$ é uma função Coarse-Graining não negativa (com um máximo único em $\mathbf{R} = 0$), de espessura w, na escala coarse-graining, e $\int \phi(\mathbf{R}), d\mathbf{R} = 1$. A densidade de energia é dada pela equação 4.13, onde se supõe que as partículas interagem por um potencial $\Phi(\mathbf{r}_{ij})$, tal suposição não é necessariamente para se obter equações contínuas, mas sim para simplificar a dedução.

$$e(\mathbf{r},t) \equiv \frac{1}{2} \sum_{i} m_i v_i^2(t) \phi[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)] + \frac{1}{2} \sum_{i,j;i\neq j} \Phi(\mathbf{r}_{ij}(t)) \phi[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)]$$
(4.13)

Para a obtenção de equações padrão para a mecânica contínua a partir de considerações microscópicas, o processo que promove uma expressão para o cálculo do tensor de tensões, $\sigma_{\alpha\beta}$, é dado pela equação 4.14,

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\sum_{i} m_{i} v_{i\alpha}'(\mathbf{r}, t) v_{i\beta}'(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}(t)) - \frac{1}{2} \sum_{ij; i \neq j} f_{ij\alpha} r_{ij\beta} \int_{0}^{1} ds \phi[\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}(t) + s\mathbf{r}_{ij}(t)]$$
(4.14)

onde $\mathbf{v}'(\mathbf{r},t) \equiv \mathbf{v}_i(t) - \mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ é a flutuação da velocidade, $\mathbf{f}_{ij} = -\nabla_i \Phi(\mathbf{r}_{ij})$ é a força exercida na partícula *i* pela partícula *j*, e $\mathbf{r}_{ij} \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. As letras gregas α e β representam coordenadas cartesianas. O primeiro termo é responsável pelo campo de tensão cinética, já o segundo termo refere-se ao termo de tensão estática. Em deformações quasi-estáticas, o primeiro termo pode ser negligenciado, e o tensor de tensões $\sigma_{\alpha\beta}$ pode ser calculado utilizando-se a equação 4.15.

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2} \sum_{ij;i\neq j} f_{ij\alpha} r_{ij\beta} \int_0^1 ds \phi[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t) + s\mathbf{r}_{ij}(t)]$$
(4.15)

A escolha da função *Coarse Graining* pode ser arbitrariamente definida por qualquer função "razoável", a ideia é que a tensão em cada região não dependa do tipo de função utilizada. Nesse caso, escolhemos uma função *Coarse Graining*, $\phi(R)$, Gaussiana com espessura característica w = 6d, onde d é o diâmetro médio do sistema [34], como pode ser vista na equação 4.16. O gráfico tridimensional dessa gaussiana pode ser visto na figura 4.6.

$$\phi = \frac{e}{\pi w^2} \frac{\frac{-(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i + s\mathbf{r}_{ij})^2}{w^2}}{(4.16)}$$

Na prática, para calcular a tensão de uma amostra em duas dimensões de materiais granulares, o sistema é discretizado em vários retângulos de mesmas dimensões e cada retângulo terá uma intensidade de tensão. A tensão em cada retângulo será dada pela somatória das forças entre partículas que estão a uma distância de até seis vezes o diâmetro médio do sistema, sendo que sua contribuição diminui à medida que essa distância aumenta em relação ao centro do retângulo, de acordo com a função *Coarse Graining* escolhida, que nesse caso é a Gaussiana tridimensional citada na equação 4.16. Um esquema de como realizar esses cálculos pode ser visto na Figura 4.7.



Figura 4.6: Gráfico da distribuição gaussiana tridimensional, ϕ , para cálculo da tensão em material granular.



Figura 4.7: Esquema representativo de como calcular um perfil de tensões para uma amostra de material granular bidimensional em escoamento quasi-estático.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

Neste capítulo, apresentamos os resultados obtidos referentes a amostras geradas através de simulações bidimensionais do deslocamento de grãos em meios granulares confinados. Vários parâmetros foram modificados para analisar a influência de cada um deles na formação de padrões, que foram: a distribuição de tamanhos de grãos inseridos (monodispersos, polidispersos e bidispersos), a distribuição de tamanhos de grãos da base (monodispersos e polidispersos) e o coeficiente de atrito entre os grãos. Em seguida, a evolução da componente radial de tensão é apresentada, tanto para amostras monodispersas, quanto para polidispersas (alta polidispersão). Vale a pena ressaltar que os resultados deste trabalho foram publicados em um artigo do periódico *Computational Particle Mechanics (JCPM)* da editora *Springer* [42].

5.1 Amostras geradas para configurações monodispersas, polidispersas e bidispersas

No trabalho experimental original de Pinto et al. [14], o coeficiente de atrito entre partículas foi fixado a $\mu = 0.5$. Sendo assim, decidimos variá-lo para determinar sua influência física no comportamento coletivo dos grãos. Para cada caso testado, dez amostras foram geradas a fim de observar as flutuações estocásticas. Alguns resultados são mostrados na Figura 5.1, onde a espessura das linhas pretas corresponde à magnitude da força de contato entre grãos. É possivel inferir que a geometria dos grãos da base quase não influencia na formação do padrão, a única diferença observada é a presença de algumas irregularidades nas fronteiras entre grãos inseridos e o substrato polidisperso. A magnitude das cadeias de forças nos sistemas aumenta com o aumento do atrito, como pode ser visto na Figura 5.1, e confirmamos que o valor do coeficiente de atrito de $\mu = 0.5$ auxilia na formação de padrões de seis dedos, porém, para todos os coeficientes de atrito testados, existe uma formação espontânea de dedos. Desde que a rigidez dos grãos inseridos foi fixada a 10 vezes maior que a rigidez dos grãos da base, concluímos que o coeficiente de atrito entre grãos e a geometria do substrato não desempenham papel central na formação de padrões.



Figura 5.1: Simulações de grãos inseridos monodispersos com diferentes coeficientes de atrito. a) Substrato polidisperso (30%), com grãos inseridos monodispersos. Coeficiente de atrito entre partículas igual a 0,5. b) Base e grãos inseridos monodispersos com coeficiente de atrito entre partículas igual a 0,1. c) Configuração monodispersa (base e grãos inseridos) com coeficiente de atrito igual a 0,9. Note que em a), podemos claramente observar as cadeias de forças orientadas nas direções dos dedos, bem como o aumento da tensão nestas regiões.



Figura 5.2: Cadeias de forças em amostras de simulações de materiais granulares. As três configurações foram geradas utilizando simulações de dinâmica molecular com diferentes amostras de grãos. a) Base e grãos inseridos monodispersos. b) Substrato polidisperso deslocado por grãos polidispersos (30%). c) Base monodispersa deslocada por uma amostra bidispersa. Note que apenas amostras de grãos inseridos monodispersos resultam em formação de dedos. A Figura 5.2 mostra as cadeias de forças para três diferentes amostras. Nessa figura, somente as forças com magnitude maior do que à da força média local são exibidas. Como os grãos são inseridos pelo centro, é natural inferir que a intensidade das forças decresce radialmente a partir do centro. Assim, determinamos a força média local com simetria radial comparando-se com a intensidade das forças de contatos que estão à mesma distância do centro. Nas configurações monodispersas, é claramente observado que as cadeias de forças estão orientadas ao longo das direções dos dedos. Em sistemas com alta polidispersão (30%), as direções das cadeias de forças parecem ser aleatórias, comportamento que se pronuncia em sistemas bidispersos. Todas as amostras com 30% de polidispersão e bidispersas resultaram em padrões circulares. No entanto, o substrato presente nas amostras bidispersas possui formato irregular, diferentemente do padrão circular apresentado no substrato da amostra polidispersa.

5.2 Análises das amostras

Os resultados já discutidos referentes ao comportamento coletivo na formação de padrão para amostras monodispersas, polidispersas e bidispersas são bem definidos: as amostras com alta polidispersão (30%) e bidispersas formam padrões circulares, enquanto as monodispersas apresentam formação de dedos. No entanto, quando a polidispersão assume valores mais baixos, essa análise não é assim tão simples. Como pode ser visto na Figura 5.3, quanto menor é a polidispersão, maior é a tendência do sistema em formar dedos, portanto, maior sua tendência em se comportar como um sistema monodisperso. Esse resultado é interessante, pois mostra que a transição de um comportamento coletivo monodisperso para um comportamento polidisperso não é brusca, mas sim gradual. Outros resultados que demonstram essa transição gradual de comportamento podem ser vistos na Figura 5.4. Foram gerados histogramas dos ângulos de contatos para amostras de diferentes graus de polidispersão, uma amostra monodispersa e uma bidispersa. Através desses histogramas, é possível perceber qual é a tendência da orientação dos contatos entre os grãos para cada configuração. Como o ângulo de contato é calculado utilizando-se a função arco tangente, é natural que tenhamos valores de ângulos entre -90° e 90° , por isto os histogramas foram apresentados nessa faixa, variando-se de 5 $^{\circ}$ em 5 $^{\circ}$, portanto, obtendo 36 barras no histograma. Em amostras monodispersas (portanto, a polidispersão é nula), é possível ver três principais picos, mostrando que quase todos os contatos estão nas direcões dos dedos. Quando a polidispersão vai aumentando, os contatos começam a se distribuir em outros ângulos, até que não se tenha mais três direções preferenciais, sendo a distribuição dos ângulos de contatos aleatória, como é o caso de sistemas com polidispersão de 30% e sistemas bidispersos. É possível também que um sistema com polidispersão média apresente um padrão circular e ao mesmo tempo possua alguma preferência de ângulos de contatos, este caso já não ocorre em sistemas de baixa polidispersão (5%) e alta polidispersão (30%), uma vez que o primeiro tende a se comportar como um sistema monodisperso, e o segundo como um sistema bidisperso.

Outra técnica foi utilizada para verificar a aleatoriedade da distribuição dos contatos em sistemas de



Figura 5.3: Configurações de simulações de sistemas com diferentes granulometrias. a) Base e grãos inseridos monodispersos. b) Base e grãos inseridos com 5% de polidispersão. c) Base polidispersa (10%) deslocada por grãos polidispersos (também 10%). d) Base e grãos inseridos com 20% de polidispersão. e) Base e grãos inseridos com alta polidispersão (30%). f) Base monodispersa deslocada por grãos inseridos bidispersos.



Figura 5.4: Histogramas das frequências dos ângulos de contatos para diferentes sistemas granulares. a) Grãos inseridos e base monodispersos. b) Base e grãos inseridos com baixa polidispersão (5%). c) Base e grãos inseridos com polidispersão de 10%. d) Base e grãos inseridos de polidispersão de 20%. e) Base e grãos inseridos com alta polidispersão (30%). f) Base monodispersa deslocada por grãos bidispersos.

alta polidispersão e bidispersos, e a preferência de direções de contatos em sistemas de baixa polidispersão e monodispersos. A técnica consiste em utilizar os histogramas presentes na Figura 5.4, calcular o valor médio, que é a soma das frequências dividida pelo número de barras (neste caso, 36). Ao realizar o valor da média menos o valor de cada frequência, obtemos as flutuações. Essas flutuações, por sua vez, foram utilizadas para gerar outros histogramas, que são apresentados na Figura 5.5. Observa-se que, no caso de sistemas com polidispersão de 5% e 0% (monodisperso), existe um valor preferencial da frequência das flutuações, pois, se há três picos na distribuição dos contatos, a maioria das flutuações serão das barras cujas frequências são menores do que o valor médio. Esses resultados mostram que, para estes sistemas, as flutuações não são aleatórias, como era de se esperar. Já em casos de sistemas com polidispersão de 30% e bidispersos, os histogramas das flutuações possuem médias próximas de zero e as distribuições possuem a tendência de formar uma Gaussiana, isto mostra que as flutuações são aleatórias, confirmando que não existem direções preferenciais dos ângulos de contatos para estes sistemas. Para confirmar que estes dois últimos sistemas possuem comportamento aleatório, resultados de uma deposição aleatória são apresentados na Figura 5.6. Nesse experimento, uma deposição aleatória de grãos é realizada em um substrato de 36 posições (similarmente ao histograma dos ângulos de contatos). Uma posição do substrato é sorteada aleatoriamente e a altura daquela posição é incrementada de um grão, e este processo é repetido $250 \ge 36 = 9000$ vezes, uma vez que 250 é um valor próximo das médias dos histogramas dos sistemas polidispersos (30%) e bidispersos, e 36 é o número de barras em seus histogramas. Comparandose os resultados dessa deposição aleatória, que é garantidamente aleatória devido à utilização do gerador de números pseudo-aleatórios congruencial [43], com os resultados das amostras polidispersas (30%) e bidispersas, podemos concluir que os comportamentos dos três casos são similares, portanto, os sistemas granulares citados comprovadamente possuem orientação dos ângulos de contatos aleatória.

Para confirmar a conjectura qualitativa de que a existência de direções preferenciais dos contatos é o principal motivo da formação de dedos em sistemas monodispersos e de baixa polidispersão (5%) [14], testamos uma verificação quantitativa desta conjectura. No caso de sistemas com alta polidispersão e bidispersos, esperamos que os ângulos de contatos não tenham as mesmas direções dos ângulos onde possuem o maior número de grãos. Para provar isso, quatro gráficos foram gerados, para cada configuração testada, como pode ser visto na Figura 5.7. Aqui, a correlação entre as principais direções dos dedos medidas nas amostras e as direções mais frequentes dos ângulos de contatos são mostradas (lembrando que, para cada amostra, são necessários três pontos, como cada gráfico é construído com resultados de 10 amostras, 30 pontos são apresentados). Para os casos de polidispersão de 5% (portanto, baixa) e monodisperso, uma forte correlação é claramente observada, sendo que, no caso do sistema monodisperso, a correlação é ainda mais forte, evidenciando que as direções preferenciais dos contatos estão, de fato, nas direções dos dedos. Já no caso de sistemas de polidispersão de 30% (portanto, alta) e bidisperso, nenhuma correlação é claramente observada.

Portanto, podemos assegurar que a formação de dedos está associada com a cristalização dos grãos inseridos, como foi conjecturado por Pinto et al. [14]. A formação do padrão hexagonal resultante deve estar relacionada à rede espontânea hexagonal, que é formada quando grãos monodispersos são confinados



Figura 5.5: Histogramas das flutuações das frequências dos ângulos de contatos para vários sistemas. a) Base e grãos inseridos monodispersos. b) Grãos inseridos e base com polidispersão de 5%. c) Base e grãos inseridos polidispersos (30%). d) Base monodispersa com grãos inseridos bidispersos.



Figura 5.6: Deposição aleatória realizada em duas dimensões.

a) Alturas das posições do substrato ao final da deposição aleatória de 9000 grãos. b) Histograma das flutuações, que são os valores da média das alturas subtraída dos valores das alturas de cada posição do substrato.



Figura 5.7: Ângulos da distribuição espacial dos grãos em função dos ângulos de contatos. a) Base e grão inseridos monodispersos. b) Base e grãos inseridos com baixa polidispersão (5%). c) Base e grãos inseridos com alta polidispersão (30%). d) Base monodispersa deslocada por grãos bidispersos.

(um grão está, em geral, em contato com seis vizinhos). É interessante notar que esta configuração é a que possui menor relação entre área ocupada e perímetro, como conhecido pelas abelhas, que constroem suas colméias em formatos hexagonais [44]. Em sistemas confinados, os grãos são distriuídos em uma configuração *close-packed*, assim, existe a tendência da formação regular de estruturas e então o sistema cristaliza. Em uma amostra cristalizada, quando um grão recebe uma força vinda de um grão vizinho, ela pode se propagar ao longo da direção radial, ou pode se dividir em duas partes, geralmente com um ângulo de 60°, entre dois vizinhos opostos do grão; os grãos se moverão na direção da força, e, considerando a simetria da vizinhança, resulta na formação de padrões de seis dedos observados nos experimentos e nas simulações. Em sistemas bidispersos e de alta polidispersão, a cristalização é impedida devido à dispersão dos tamanhos dos grãos; quando um grão recebe uma força de um contato, não existe uma direção preferencial onde a tensão se propaga, resultando em padrões circulares deformados que foram observados.

5.3 Resultados da evolução de tensão em amostras monodispersas e polidispersas

Já foi mostrado que as forças de contatos estão orientadas em direções preferenciais em amostras monodispersas e de baixas polidispersão (5%), e as forças se orientam de forma aleatória em amostras de alta polidispersão (30%) e bidispersas. No entanto, a existência dessas direções preferenciais e o surgimento de cadeias de forças não são suficientes para concluir que a tensão se propaga anisotropicamente em um caso, e isotropicamente em outro caso. Somente a construção do perfil de tensão permitirá inferir tais conjecturas. Partimos do princípio que a propagação da tensão em amostras cristalizadas (monodispersas) segue um modelo anisotrópico [39], enquanto que em amostras onde os grãos estão dispostos aleatoriamente (alta polidispersão), a propagação segue um modelo isotrópico [45]. Para confirmarmos essas suposições, a evolução da tensão na inserção de um grão foi observada para ambos os casos.

As figuras 5.8 e 5.9 representam, respectivamente, a evolução do perfil de tensão radial para simulações de amostras monodispersa e polidispersa (30%). No caso do sistema monodisperso, observamos a heterogeneidade do campo de tensões, particularmente, um aumento da tensão nas direções dos dedos. A magnitude da tensão é maior no centro, pois os grãos são inseridos nesta região. A tensão parece se propagar do centro ao longo de duas direções preferenciais. Esses resultados estão de acordo com modelos hiperbólicos de propagação de tensão em sistemas granulares anisotrópicos [36]. Os perfis instantâneos de tensão para a amostra polidispersa possui um padrão circular, sem direções preferenciais. Nesse caso, as abordagens de propagação de tensão se aproximam aos modelos difusivos em amostras granulares isotrópicas, mostrando a transição do padrão do centro até as bordas.



Figura 5.8: Evolução do perfil de tensão ao se inserir um grão em um sistema monodisperso. Cada painel corresponde a um campo de tensão instantâneo calculado após 100 passos de tempo. Note a existência da heterogeneidade do campo de tensão, com valores mais elevados ao longo das direções dos dedos.



Figura 5.9: Evolução do perfil de tensão ao se inserir um grão em um sistema polidisperso. Cada perfil foi gerado após 100 passos de tempo após o perfil anterior. Nesse caso, o campo de tensão é muito mais homogêneo que no caso monodisperso. A sequência de imagens corresponde às flutuações de tensão devido à inserção de um grão em uma amostra de 30% de polidispersão.

As figuras 5.10 e 5.11 apresentam, nas primeiras colunas, a evolução do perfil instantâneo de tensão, onde cada perfil foi gerado 100 passos de tempo após o perfil anterior. Esse número de passos de tempo foi escolhido, pois foi o valor mais adequado para analisar a evolução da tensão, uma vez que, caso fosse utilizado um valor muito baixo, o perfil quase não mudaria, ou então se fosse um valor muito elevado, o perfil mudaria de maneira tão brusca, que uma comparação passaria a não ser mais possível. Já na coluna da direita, são representados perfis de tensão gerados pela subtração de um perfil pelo seu perfil anterior (coluna da esquerda). Através da análise das colunas da direita, é possivel observar que os mecanismos de propagação de tensão para os casos monodisperso e polidisperso ocorrem similarmente, com a única diferença que a tensão na amostra monodispersa se propaga nas direções de dois dedos e, na amostra polidispersa, a tensão se propaga em uma direção aleatória. Em ambos os casos, existe um ciclo da propagação de tensão, onde ocorre compressão e descompressão; uma região que era comprimida em um determinado passo de tempo, 100 passos de tempo após, está descomprimida e, uma região descomprimida passa a ser comprimida, e este comportamente de alternância ocorre até que o perfil de tensões modifique seu estado, criando, assim, um novo ciclo. No caso de amostras monodispersas, a formação de dedos está associada com a variação local de tensão em analogia ao fenômeno de Saffman-Taylor [15], onde dedos são formados durante o deslocamento de líquidos de diferentes viscosidades. Por isso é de suma importância que as amostras monodispersas possuam diferenças entre módulos de elasticidade entre partículas da base e partículas inseridas e diferentes tamanhos entre grãos de base e grãos inseridos, estes parâmetros auxiliam a formação de dedos, e podem ser comparados aos dois diferentes fluidos utilizados nos experimentos de Saffman & Taylor [15]. Os grãos da base comportam-se como o fluido de maior viscosidade do experimento de Saffman & Taylor [15], portanto, possuem "viscosidade efetiva" maior do que os grãos inseridos, que possuem maior granulometria. O conceito de "viscosidade efetiva" em meios granulares foi bem explorado no artigo onde foram publicados os resultados deste trabalho [42].



Figura 5.10: Perfil e variação de tensão ao se inserir um grão em uma amostra monodispersa. A primeira coluna representa quatro configurações de perfis instantâneos de tensão, onde cada perfil foi gerado 100 passos de tempo após o perfil anterior. A segunda coluna representa a diferença entre perfis consecutivos da primeira coluna, realizado a fim de se observar a variação de tensão entre estas duas etapas.



Figura 5.11: Perfil e variação de tensão ao se inserir um grão em uma amostra polidispersa. A primeira coluna representa quatro perfis instantâneos de tensão ao se colocar um grão em uma amostra polidispersa (30%), onde existe uma diferença progressiva de 100 passos de tempo entre cada perfil. A segunda coluna representa a diferença do perfil de tensão entre os perfis apresentados na coluna da esquerda.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Ao realizar simulações de Dinâmica Molecular de amostras de materiais granulares em duas dimensões escoando quasi-estaticamente, grão por grão, pelo centro de uma célula de *Hele-Shaw*, pode-se concluir que os parâmetros que possuem maior tendência na formação de padrões de dedos em forma hexagonal são: coeficiente de atrito entre partículas igual a 0,5, razão de constantes de elasticidade entre grãos inseridos e grãos da base igual a 10, grãos monodispersos, grãos inseridos 1,5 vezes maiores do que os grãos da base. Embora, percebemos que o coeficiente de atrito não é o principal parâmetro que influencia na formação de padrões, e o tipo da base e sua geometria também não infuenciam significativamente. O principal parâmetro que determina o tipo de padrão formado é a granulometria das partículas inseridas, podendo se distribuir de modo monodisperso (todos os grãos possuem mesmo tamanho), de modo polidisperso (grãos possuem tamanhos aleatórios dentro de uma faixa determinada de valor, portanto, existem vários graus de polidispersão), e de modo bidisperso (metade dos grãos possuem um tamanho, e a outra metade, um tamanho diferente).

Sistemas monodispersos apresentam a formação de padrão hexagonal, embora tais padrões também são observados em sistemas com polidispersão de 5% (baixa polidispersão). Já os sistemas de alta polidispersão (30%) e bidispersos apresentam padrões circulares, onde os grãos são distribuídos radialmente de forma aleatória. Já para graus de polidispersão intermediários (10% e 20%), padrões circulares e de dedos podem ser encontrados. Portanto, quanto menor é a polidispersão, maior é a tendência da formação de padrões com dedos, levando o sistema se comportar cada vez mais como um sistema monodisperso.

As cadeias de forças em amostras monodispersas estão orientadas ao longo das direções dos dedos. Já nas amostras de alta polidispersão e bidispersas, as cadeias de forças ocorrem de forma aleatória. Em geral, não somente as cadeias de forças possuem esses comportamentos, como também as direções dos contatos entre partículas, sendo que, ao se aumentar a polidispersão, as direções preferenciais dos ângulos de contatos vão aos poucos desaparecendo. Existe uma transição gradual, e não brusca, de um comportamento monodisperso para um comportamento polidisperso aleatório à medida que a polidispersão aumenta.

Os mecanismos de propagação de tensão para amostras monodispersas e de alta polidispersão são

similares, os sistemas se comportam em ciclo, onde regiões comprimidas passam a se descomprimir ao longo do tempo, enquanto regiões distendidas passam a se comprimir. Esse comportamento ocorre de maneira cíclica até que o estado de tensões mude e um novo ciclo é estabelecido. A diferença entre sistemas monodispersos e polidispersos (30%) é que o primeiro possui um perfil instantâneo de tensão heterogêneo, onde a tensão é maior nas direções dos dedos, e o segundo possui um perfil circular, sendo a tensão de maior magnitude, quanto menor for a distância do ponto analisado até o centro (já que os grãos são inseridos nestas regiões). Sistemas monodispersos comportam-se de acordo com os modelos de propagação de tensão para amostras anisotrópicas (modelos hiperbólicos), e possuem analogia com o problema de *Saffman-Taylor*, onde fluidos de diferentes viscosidades são escoados através de uma célula de *Hele-Shaw* [15]. Já os sistemas com polidispersão de 30% comportam-se de acordo com os modelos elípticos apresentados para amostras granulares isotrópicas.

Seria interessante a realização de novos experimentos do escoamento de grãos fotoelásticos [46, 47] em uma célula de *Hele-Shaw*, uma vez que, nos experimentos anteriores já reportados [14] não foram apresentadas as forças entre os grãos que estão em contato nem o perfil de tensão das configurações. Com a utilização de grãos fotoelásticos, será possível a comparação de perfis experimentais de tensão com os perfis gerados a partir das simulações deste trabalho. Outra ideia interessante que pode contribuir na avaliação da propagação da tensão é a realização de simulações onde, em uma configuração já pronta, começasse a inserir novamente grãos diferentes, por exemplo, em amostras monodispersas, começar a inserir grãos polidispersos, e em amostras polidispersas, começar a inserir grãos monodispersos. Essma ideia foi proposta pelo Professor Doutor Jason Alfredo Carlson Gallas da *Universidade Federal da Paraíba* em apresentação oral deste trabalho na *Conferência Nacional de Dinâmica, Controle e Aplicações* (DIN-CON 2015). Também seria interessante a criação de modelos analíticos da formação de dedos em meios granulares, assim como já existem para o escoamento de fluidos em uma célula de *Hele-Shaw*, para que possam ser comparados com as simulações e os resultados experimentais. Todas essas perspectivas sugeridas com certeza poderão se mostrar muito úteis no aprofundamento do estudo dos mecanismos que levam à formação de padrões em sistemas granulares confinados.

Referências Bibliográficas

- [1] H. Hinrichsen and D. E. Wolf. The Physics of Granular Media. Wiley, 2004.
- [2] A. Mehta. Granular Physics. Cambridge University Press, 2007.
- [3] G. Garcia. Descoberta espécie de caramujo que usa insulina para atordoar sua presa. Disponível em: http://info.abril.com.br/noticias/ciencia/2015/01/descoberta-especie-de-caramujo-queusa-insulina-para-atordoar-sua-presa.shtm, 2015.
- [4] T. Gallo, A. Jurjiu, R. Biscarini, A. Volta, and F. Zerbetto. Thermal collapse of snowflake fractals. *Chemical Physics Letters*, 543:82 – 85, 2012.
- [5] G. Steinmetz. Sand Dunas. Disponível em: http://photography.nationalgeographic.com/ photography/photo-of-the-day/sand-dunes-aerial-brazil/, 2010.
- [6] R. Godoy. Akhenaton, um deus egípcio na terra. Disponível em: http://contatoalienigena. blogspot.com.br/2012/08/akhenaton-um-deus-na-terra.html, 2012.
- [7] L. B. H. May, L. A. Golick, K. C. Phillips, M. Shearer, and K. E. Daniels. Shear-driven size segregation of granular materials: Modeling and experiment. *Phys. Rev. E*, 81:051301, May 2010.
- [8] I. Aranson and L. Tsimring. Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts. *Reviews of Modern Physics*, 78(2):641–692, June 2006.
- [9] J. Duran, S. Luding, S. Clément, and J. Rajchenbach. Decompaction, fragmentation and self organization of granular materials. *Journal of Molecular Liquids*, 76(3):221 – 235, 1998.
- [10] K. Viswanathan, A. Mahato, T. G. Murthy, T. Koziara, and S. Chandrasekar. Kinematic flow patterns in slow deformation of a dense granular material. *Granular Matter*, 17(5):553–565, 2015.
- [11] C. M. Pooley, A. C. Balazs, and J. M. Yeomans. Pattern formation arising from condensation of a homogeneous gas into a binary, phase-separating liquid. *Phys. Rev. E*, 72:021505, Aug 2005.
- [12] G. Seiden and P. J. Thomas. Complexity, segregation, and pattern formation in rotating-drum flows. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1323–1365, Nov 2011.
- [13] S. Wolfram. A New Kind of Science. Wolfram Media, January 2002.

- [14] S. F. Pinto, M. S. Couto, A. P. F. Atman, S. G. Alves, A. T. Bernardes, H. F. V. de Resende, and E. C. Souza. Granular fingers on jammed systems: New fluidlike patterns arising in grain-grain invasion experiments. *Physical Review Letters*, 99(6), 2007.
- [15] P. G. Saffman and G. Taylor. The penetration of a fluid into a porous medium or hele-shaw cell containing a more viscous liquid. Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 245(1242):312–329, 1958.
- [16] J. Escher and G. I. Simonett. Classical solutions for hele-shaw models with surface tension. Adv. Differential Equations, 2(4):619–642, 1997.
- [17] A. G. Banpurkar, A. V. Limaye, and S. B. Ogale. Occurrence of coexisting dendrite morphologies: Immiscible fluid displacement in an anisotropic radial hele-shaw cell under a high flow rate regime. *Phys. Rev. E*, 61:5507–5511, May 2000.
- [18] C.-Y. Chen, Y.-S. Huang, and J. A. Miranda. Radial hele-shaw flow with suction: Fully nonlinear pattern formation. *Phys. Rev. E*, 89:053006, May 2014.
- [19] L. M. Martyushev and A. I. Birzina. Entropy production and stability during radial displacement of fluid in hele-shaw cell. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(46):465102, 2008.
- [20] J. A. Miranda. Interfacial instabilities in confined ferrofluids. Brazilian Journal of Physics, 31:423 432, 09 2001.
- [21] Ø. Johnsen, R. Toussaint, K. J. Måløy, and E. G. Flekkøy. Pattern formation during air injection into granular materials confined in a circular hele-shaw cell. *Phys. Rev. E*, 74:011301, Jul 2006.
- [22] H. Huang, F. Zhang, P. Callahan, and J. Ayoub. Granular fingering in fluid injection into dense granular media in a hele-shaw cell. *Phys. Rev. Lett.*, 108:258001, Jun 2012.
- [23] Viscous fingering in a hele-shaw cell. Disponível em: http://n-e-r-v-o-u-s.com/projects/albums/puzzle-inspiration/content/viscous-fingering-in-a-hele-shaw-cell-3/, 2007.
- [24] P. Allen and D.J. Tildesley. Computer Simulation of Liquids. Clarendon, 1987.
- [25] F. Radjaï and F. Dubois, editors. Discrete-element modeling of granular materials. ISTE Hoboken, N.J. Wiley, London, 2011.
- [26] A. P. F. Atman, P. Claudin, and G. Combe. Departure from elasticity in granular layers: Investigation of a crossover overload force. *Computer Physics Communications*, 180(4):612–615, 2009.
- [27] J. Tang and R. P. Behringer. How granular materials jam in a hopper. Chaos, 21(4):-, 2011.
- [28] Hopper project. Disponível em: http://www.phy.duke.edu/ jt41/research.html, 2012.

- [29] L. Vanel, D. Howell, D. Clark, R. P. Behringer, and E. Clément. Memories in sand: Experimental tests of construction history on stress distributions under sandpiles. *Phys. Rev. E*, 60:R5040–R5043, Nov 1999.
- [30] G. H. Ristow. Pattern Formation in Granular Materials. Springer, 2000.
- [31] F. Radjai and V. Richefeu. Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. *Mechanics of Materials*, 41:715–728, 2009.
- [32] J.-N. Roux. Geometric origin of mechanical properties of granular materials. Phys. Rev. E, 61:6802– 6836, Jun 2000.
- [33] C. Goldenberg and I. Goldhirsch. Force Chains, Microelasticity, and Macroelasticity. *Physical Review Letters*, 89(8):084302+, 2002.
- [34] C. Goldenberg, A. P. F. Atman, P. Claudin, G. Combe, and I. Goldhirsch. Scale separation in granular packings: stress plateaus and fluctuations. *Phys Rev Lett*, 96(16), April 2006.
- [35] A. P. F. Atman, P. Brunet, J. Geng, G. Reydellet, G. Combe, P. Claudin, R. P. Behringer, and E. Clément. Sensitivity of the stress response function to packing preparation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17(24):S2391, 2005.
- [36] C. Goldenberg and I. Goldhirsch. Friction enhances elasticity in granular solids. Nature, 435(7039):188–191, 2005.
- [37] M. Otto, J. P. Bouchaud, P. Claudin, and J. E. S. Socolar. Anisotropy in granular media: Classical elasticity and directed-force chain network. *Physical Review E*, 67:031302, March 2003.
- [38] A. P. F. Atman, P. Brunet, J. Geng, G. Reydellet, P. Claudin, R. P. Behringer, and E. Clément. From the stress response function (back) to the sand pile "dip". *European Physical Journal E*, 17:93–100, April 2005.
- [39] M. E. Cates, J. P. Wittmer, J.-P. Bouchaud, and P. Claudin. Jamming and static stress transmission in granular materials. *Chaos*, 9(3):511–522, 1999.
- [40] I. Goldhirsch and C. Goldenberg. On the microscopic foundations of elasticity. European Physical Journal E, 9:245–251, November 2002.
- [41] J. Nase, D. Derks, and A. Lindner. Dynamic evolution of fingering patterns in a lifted hele-shaw cell. *Physics of Fluids*, 23(12):-, 2011.
- [42] Nathália M. P. Mello, Humberto A. Paiva, G. Combe, and A. P. F. Atman. Fingering phenomena during grain-grain displacement. *Computational Particle Mechanics*, 4(2):153–164, 5 2017.
- [43] N. A. Gershenfeld. The Nature of Mathematical Modeling. Cambridge University Press, 1999.
- [44] T. C. Hales. The honeycomb conjecture. Discrete and Computational Geometry, 25(1):1–22, 2001.

- [45] D. Serero, G. Reydellet, P. Claudin, É. Clément, and D. Levine. Stress response function of a granular layer: Quantitative comparison between experiments and isotropic elasticity. 6(2):169–179, 2001.
- [46] G. Cloud. Optical methods in experimental mechanics. Experimental Techniques, 32(1):13–16, 2008.
- [47] T. S. Majmudar and R. P. Behringer. Contact force measurements and stress-induced anisotropy in granular materials. *Nature*, 435:1079–1082, 2005.