

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional

GEOMETRIA COMPUTACIONAL APLICADA À MECÂNICA DE MATERIAIS GRANULARES

EDUARDO CÉLIO BOAVENTURA

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria

BELO HORIZONTE AGOSTO DE 2020

EDUARDO CÉLIO BOAVENTURA

GEOMETRIA COMPUTACIONAL APLICADA À MECÂNICA DE MATERIAIS GRANULARES

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Sistemas Complexos

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional Belo Horizonte Agosto de 2020

Boaventura, Eduardo Célio

B662g Geometria computacional aplicada à mecânica de materiais granulares / Eduardo Célio Boaventura. – 2020. 128 f.

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria.

Tese (doutorado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Materiais granulares – Modelos matemáticos – Teses. 2. Dinâmica molecular – Teses. 3. Métodos de simulação – Teses. 4. Geometria – Processamento de dados – Teses. 5. Engenharia (Ciência dos materiais) – Teses. I. Faria, Allbens Atman Picardi. II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título.

CDD 511.13

Elaboração da ficha catalográfica pela bibliotecária Jane Marangon Duarte, CRB 6º 1592 / Cefet/MG



GEOMETRIA COMPUTACIONAL APLICADA À MECÂNICA DE MATERIAIS GRANULARES.

Tese de Doutorado apresentada por **Eduardo Célio Boaventura**, em 06 de agosto de 2020, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. **Pr. Allbens Atman Picardi Faria** Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Mongood

Prof. Dr. Welles Martinez Morgado Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Sidiney Geraldo Alves

Universidade Federal de São João del-Rei

An Mapin

Prof. Dr. Arthur Rodrigo Bosco de Magalhães Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Thiago Gomes de Mattos Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida à impressão,

Prof. Dr. Thiago de Souza Rodrigues Coordenador do Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Modelagem Matemática e Computacional

Este trabalho é dedicado aos meus pais, minha esposa e minhas filhas.

Agradecimentos

"Quem caminha sozinho pode até chegar mais rápido, mas aquele que vai acompanhado, com certeza vai mais longe." Clarice Lispector.

A realização desta obra tornou-se possível graças a ajuda e dedicação de várias pessoas que, mesmo sem ter a obrigação, dedicaram tempo, conhecimento, camaradagem, alegrias, sofrimentos... enfim, fizeram comigo a contínua caminhada do trabalho e do convívio.

Que me perdoem as pessoas que não serão citadas aqui, pois são várias as que merecem minha reverência e reconhecimento, mas não posso me fazer prolixo, devido a formalidade deste documento. Não obstante, saibam que permanecerão eternamente em minha mente e em meu coração.

Resumidamente, agradeço, então, a todos os colegas e amigos estudantes, do mestrado e doutorado, que fizeram junto a mim esta gratificante jornada de trabalho e de vida. Em especial, agradeço ao Gustavo Martins, pela ajuda incondicional, e ao Fernando Ducha, pela presteza e contribuição imprescindível a este trabalho.

Agradeço também a todos os professores que contribuíram nesta minha caminhada e em especial à Maria Elizabeth de Gouvêa (minha orientadora de Mestrado na UFMG), ao João Antônio Plascak (meu eterno mestre) e ao Allbens Atman Picardi Faria (meu orientador de Doutorado).

Não poderia deixar de agradecer a paciência e o apoio recebido por toda minha família.

O apoio dado a mim, pela instituição na qual trabalho (o CEFET-MG), por meio de seu programa de qualificação profissional, foi de fundamental valia para a conclusão deste trabalho. Desta forma, agradeço a esta instituição (CEFET-MG) e ao Governo Federal do Brasil, que em muitíssimas vezes é por mim criticado, mas que deve ser exaltado nas ações em que cumpre seu dever, principalmente no que tange ao incentivo à educação, ciência e tecnologia.

Por fim, agradeço a Deus por todas as oportunidades que me deu e por todas as portas abertas que colocou diante de mim.

"Na vida, não vale tanto o que temos, nem tanto importa o que somos. Vale o que realizamos com aquilo que possuímos e, acima de tudo, importa o que fazemos de nós!!" (Francisco Cândido Xavier)

Resumo

A geometria computacional é uma área de estudo intrinsecamente interdisciplinar, pois associa técnicas computacionais às propriedades geométricas de sistemas diversos. Neste trabalho aplicamos a tesselação de Voronoi, uma técnica de geometria computacional, para obtenção da pavimentação de sistemas granulares bidimensionais. Nosso objetivo é obter propriedades mecânicas a partir das propriedades geométricas da pavimentação do plano. Nesta tese aplicamos a metodologia em duas situações diferentes: 1) sistema dinâmico; 2) empilhamento quase estático de grãos. A partir da análise das propriedades da geometria dos polígonos obtidos realizamos uma comparação com as propriedades mecânicas do sistema em questão, buscando associar a evolução espácio-temporal da pavimentação à dinâmica do sistema granular. No sistema dinâmico, durante a penetração de um intruso em um material granular confinado, analisamos as mudanças nos polígonos da área da cavidade (espaço vazio atrás do intruso) e do número de lados do polígono gerado pelo intruso, obtendo indícios de uma transição de fase de engarrafamento. No empilhamento quase estático de grãos, utilizamos a tesselação de Voronoi para a obtenção da função resposta a tensões, a partir de um calibre, e fomos capazes de reproduzir os resultados mecânicos obtidos a partir das forças de contato, utilizando geometria computacional. O calibre é uma constante obtida na base da camada granular por meio da relação entre a função resposta a tensões e a função resposta à tesselação de Voronoi. Este protocolo nos permite calcular a função resposta a tensões em diferentes níveis da camada granular, sem a necessidade de se introduzir um sensor no bulk, ou seja, de uma forma não destrutiva e não invasiva.

Palavras-chave: Mecânica Granular. Tesselação de Voronoi. Simulação. Dinâmica Molecular. Geometria Computacional. Transição de fase. Função Resposta a Tensões.

Abstract

Computational geometry is an intrinsically interdisciplinary field of study because it associates computational techniques with the geometric properties of diverse systems. In this work we applied the Voronoi tessellation, a computational geometry technique, to obtain the paving of two-dimensional granular systems. Our goal is to obtain mechanical properties from the geometric properties of the plane paving. In this thesis we applied the methodology in two different situations: 1) dynamic system; 2) quasi-static grain stacking. From the analysis of the properties from the geometry of the obtained polygons, we made a comparison with the mechanical properties of the considered system, seeking to associate the spatial-temporal evolution of the paving with the dynamics of the granular system. In the dynamic system, when an intruder penetrates a confined granular material, we analyzed the changes in the polygons of the cavity (empty space behind the intruder) and the number of sides of the intruder-generated polygon, obtaining evidence of a jamming phase transition. In the quasi-static grain stacking, we used the Voronoi tessellation to obtain the stress response function from a gauge, and were able to reproduce the mechanical results obtained from contact forces, using computational geometry. Gauge is a constant obtained at the bottom of the granular layer through the relationship between the stress response function and the Voronoi tessellation response function. This protocol allows us to calculate the stress response function at different levels of the granular layer, without the need to introduce a sensor in the *bulk*, in a non-destructive and non-invasive way.

Keywords: Granular Mechanics. Voronoi Tessellation. Simulation. Molecular Dynamics. Computational Geometry. Phase Transition. Stress Response Function.

Lista de Figuras

Figura 1 – Instante da ocorrência de avalanche em empilhamento granular.	2
Figura 2 – Esquema da dilatância.	3
Figura 3 – Estrutura cooperativa estável - Arco.	4
Figura 4 – Caso especial de segregação devido ao BNE.	5
Figura 5 - Convecção e padrões coerentes em sistema bidisperso de esferas de vidro	. 6
Figura 6 – Simulando contato entre grãos.	8
Figura 7 – Contato entre duas partículas para o caso "soft-sphere".	9
Figura 8 – Modelo das forças atuantes entre dois grãos.	13
Figura 9 – Disposição da matéria no sistema solar e seus arredores, por Descartes.	15
Figura 10 – Área de comércio das capitais das 12 províncias da Holanda.	17
Figura 11 – Tesselação de Voronoi e triangulação de Delaunay	18
Figura 12 – Triangulação de Delaunay.	19
Figura 13 – Tesselação de Voronoi	19
Figura 14 – Cadeias de força e forças de contato em silo.	21
Figura 15 – Distribuição das forças em função da intensidade.	22
Figura 16 – Intruso perturbando sistema granular.	23
Figura 17 – Estrutura interna de uma pilha granular	24
Figura 18 – Vista de cima do esquema de preparação experimental do sistema com	
intruso	26
Figura 19 – Força de resistência ao escoamento sobre o intruso	27
Figura 20 – Cavidade formada no rasto do intruso	28
Figura 21 – Área média das cavidades atrás do intruso.	29
Figura 22 – Cadeias de forças em empacotamento de grãos.	29
Figura 23 – Distribuição de ângulos e forças de contato em deposição granular	30
Figura 24 – Bissetor definindo dois semiplanos.	35
Figura 25 – Célula de Voronoi	36
Figura 26 – Maior círculo vazio centrado em q	37
Figura 27 – Diretrizes do diagrama de Voronoi	38
Figura 28 – Divisão do conjunto de sítios	39
Figura 29 – Diagramas de Voronoi de dois subconjuntos.	39
Figura 30 – Mesclagem de dois subdiagramas	40
Figura 31 – Encontrando a aresta inicial da cadeia poligonal $B(S_L, S_R)$.	43
Figura 32 – "Costurando" a cadeia poligonal $B(S_L, S_R)$	44
Figura 33 – Sequência da "Costura" da cadeia poligonal $B(S_L, S_R)$.	45
Figura 34 – Diagrama de Voronoi resultante da "costura" de outros dois subdiagrams.	45

Figura 35 – Exclusão das semirretas e dos polígonos de áreas muito maiores que as	
do interior do sistema.	46
Figura 36 – Colapso de silo de armazenamento de material granular.	49
Figura 37 – Nuvem de poeira	49
Figura 38 – Sistema granular bidimensional e bidisperso, perturbado por um intruso.	50
Figura 39 – Configuração experimental típica para medir a SRF	53
Figura 40 – Branch vectors.	54
Figura 41 – Variação nas posiçõe dos vértices após a aplicação da sobrecarga	57
Figura 42 – Instantâneo de parte da tesselação de uma amostra GG	60
Figura 43 – Distribuição física da sobrecarga.	60
Figura 44 – Propriedade de aditividade da VTRF	61
Figura 45 – Propriedade de reversibilidade da VTRF	61
Figura 46 – Propriedade de linearidade da VTRF	62
Figura 47 – Distribuição das áreas dos polígonos de Voronoi	64
Figura 48 – Média das distribuições das áreas dos polígonos para cada ϕ	64
Figura 49 – Distribuição do número de lados dos polígonos.	65
Figura 50 – Frequência das áreas dos polígonos.	65
Figura 51 – Polígonos do intruso, da cavidade e dos demais grãos, em uma pequena	
região do sistema	66
Figura 52 – Evolução da força de resistência ao escoamento sobre o intruso	67
Figura 53 – Coeficiente angular da curva da força de resistência ao escoamento e	
média do valor desta força	67
Figura 54 – Evolução da soma das áreas dos polígonos da cavidade e do polígono	
do intruso.	68
Figura 55 – Soma das áreas dos polígonos da cavidade e da área do polígono do	
intruso em função de ϕ	69
Figura 56 – Valores dos parâmetros de transição de fase ($\phi_c \in \beta$) referentes à força	
de resistência ao escoamento e à área dos polígonos.	70
Figura 57 – Número de lados do polígono do intruso em função de ϕ	70
Figura 58 – Base e demais posições para o cálculo da SRF.	72
Figura 59 – Perfis das curvas de σ_{zz} e ϕ_{zz} - $h=0,125$ (base) e $h=0,062.$	73
Figura 60 – Perfis das curvas da SRF e da VTRF em diferentes posições do sistema -	
componente zz - sistema GG	74
Figura 61 – Efeito residual do deslocamento dos grãos na direção z	75
Figura 62 – Fator ϖ para o ajuste da VTRF - componente zz	76
Figura 63 – Perfis ajustados da VTRF.	76
Figura 64 – Comparação entre σ_{zz} calculado pelo uso da mecânica e $\sigma_{zz} = \Gamma_{zz} \phi_{zz}$.	77
Figura 65 – Calibre calculado na amostra A e aplicado na amostra B	78
Figura 66 – Perfis das curvas de σ_{zx} e ϕ_{zx} - base e topo.	78

Figura 67 - Perfis das curvas da SRF e da VTRF em diferentes posições do sistema	a -
componente zx - sistema GG.	. 79
Figura 68 – Fator ϖ para ajuste da VTRF - componente $zx. \ldots \ldots \ldots \ldots$. 80
Figura 69 - Representação do esquema da compressão exercida nas camadas infe	ri-
ores	. 80
Figura 70 - Esquema da interpenetração granular, na direção horizontal, na base c	lo
sistema.	. 81
Figura 71 – Detalhamento da relação microscópica entre SRF e VTRF na direção	х,
em função da técnica utilizada.	. 82
Figura 72 – Perfis ajustados da VTRF.	. 83
Figura 73 – Comparação entre σ_{zx} calculada pelo uso de mecânica e $\sigma_{zx} = \Gamma_{zx}\phi_{zx}$. 84
Figura 74 – Relação entre CN e PC.	. 85
Figura 75 – Aproximação da solução de EDO pelo método de Euler	. 99
Figura 76 – O método de Euler melhorado	. 102
Figura 77 - Comparativo entre os métodos de Euler melhorado e Runge-Kutta d	le
quarta ordem	. 103
Figura 78 – Linha de varredura passando por um virtual vértice de uma $\upsilon(p_i)$. 105
Figura 79 – Parábolas e linha de praia	. 105
Figura 80 - Formação das arestas do diagrama de Voronoi por meio dos pontos o	le
rompimento	. 106
Figura 81 – Evento de sítio.	. 107
Figura 82 – Construção de aresta em um evento de sítio	. 107
Figura 83 - Momento do desaparecimento de um arco da linha de praia	. 108
Figura 84 - Caixa delimitadora, com os vértices de Voronoi internos a ela	. 110
Figura 85 – Quatro sítios cocirculares.	. 114
Figura 86 – Sítio localizado abaixo do ponto de rompimento	. 114
Figura 87 – Curva de uma parábola	. 116
Figura 88 – Parábola e seus elementos	. 117
Figura 89 – Translação de eixos	. 118
Figura 90 – Translação do eixo de parábola	. 119
Figura 91 – ponto de rompimento	. 120
Figura 92 – Evolução das parábolas à medida em que d se desloca para baixo	. 121
Figura 93 – Equidistância entre dois focos.	. 123
Figura 94 – Distâncias entre pontos	. 124
Figura 95 – retângulo sobre as coordenadas da Figura 94	. 126
Figura 96 – Coordenadas do segundo ponto da reta geratriz da aresta de Voronoi	. 126

Lista de Tabelas

Tabela 1 –	Calibres das componentes zz , calculados nas bases dos sistemas GG e
	RL
Tabela 2 –	Calibres das componentes zx , calculados na base dos sistemas GG e RL. 8
Tabela 3 –	Média e largura do ajuste gaussiano das distribuições de CN e PCN 8
Tabela 4 –	Coordenadas dos pontos de rompimento

Lista de Algoritmos

Algoritmo 1 –	VORONOI_DIAGRAM - Algoritmo de Divisão e Conquista para o cál- culo do diagrama de Voronoi.	41
Algoritmo 2 –	MERGE_VORONOI - Sub-rotina do algoritmo de divisão e conquista, para o cálculo do diagrama de Voronoi.	41
Algoritmo 3 –	LOWER_COMMON_SUPPORT - Sub-rotina do algoritmo de divisão e conquista, para o cálculo do diagrama de Voronoi.	42
Algoritmo 4 –	VoronoiDiagram(P) - Algoritmo de Fortune para construção do dia- grama de Voronoi.	112
Algoritmo 5 –	HandleSiteEvent(P_i) - Sub-rotina para tratamento dos eventos de sítio.	112
Algoritmo 6 –	HandleCircleEvent(γ) - Sub-rotina para tratamento dos eventos de círculo.	113
Algoritmo 7 –	Algoritmo para cálculo das coordenadas do ponto <i>R</i> , por meio da interseção das parábolas e por meio da reta	128

Lista de Abreviaturas e Siglas

BNE	Brazil-Nut Effect
RBNE	Reverse Brazil-Nut Effect
DEM	Métodos de elementos discretos
ED	Evento dirigo
CD	Dinâmica de contato
MD	Dinâmica molecular
UMN	Unidade de massa normalizada
UCN	Unidade de comprimento normalizada
UFN	Unidade de força normalizada
UAN	Unidade de área normalizada
D(P)	Triangulação de Delaunay de um conjunto de pontos P
V(P)	Tesselação de Voronoi de um conjunto de pontos P
SOC	Criticalidade auto-organizada
GG	Deposição granular "grão a grão" (Grain-by-Grain)
RL	Deposição granular "tipo chuva" (<i>Rain-Like</i>)
Vor(P)	Diagrama de Voronoi do conjunto P de pontos p_1, p_2, \dots
SRF	Função resposta às tensões
VTRF	Função resposta à tesselação de Voronoi
CN	Número de coordenação de grão
PCN	Número de coordenação de polígono
Ac	Soma das áreas dos polígonos da cavidade mais do polígono do intruso
Ар	Soma das áreas dos polígonos da cavidade mais do polígono do intruso para a fraçãod de empacotamento de $80,5\%$

Lista de Símbolos

$ heta_r$	Ângulo abaixo do qual a pilha de grãos permanece estacionária
$ heta_m$	Ângulo acima do qual aparecerão avalanches espontâneas fluindo para a base da pilha.
C	Razão do volume líquido das esferas de vidro pelo volume do recipiente, em aparato para exibição de convecções e padrões coerentes.
$ec{F}$	Força
$\vec{\tau}$	Torque
m	Massa
\vec{r}	Vetor posição
arphi	Orientação angular
\vec{v}	Velocidade
ω	Velocidade angular
J	Momento de inércia
ξ_{ik}	Interpenetração entre dois grãos
R	Raio do grão
$ec{g}$	Aceleração da gravidade
$ec{f}$	Força de contato entre grãos vizinhos
heta	Ângulo de contato entre os grãos
\hat{n}	Vetor unitário normal
\hat{t}	Vetor unitário tangencial
v	Velocidade relativa entre dois grãos
ϵ	Coeficiente de restituição
μ_e	Coeficiente de atrito estático
μ_d	Coeficiente de atrito dinâmico

λ_n	Constante elástica normal
λ_t	Constante elástica tangencial
ζ	Deslocamento tangencial
ψ	Termo de amortecimento introduzido na simulação da dinâmica molecular
γ	Coeficiente de amortecimento
m_{ef}	Massa efetiva
dt	Passo de tempo
t_s	Período característico de oscilação do contato normal do grão com o grão de menor massa da camada
Р	Pressão relacionada ao peso dos grãos
L_0	Tamanho do sistema (na direção x)
r_{min}	Raio do menor grão
r_{max}	Raio do maior grão
m_0	maior massa de grão
w_0	Peso total do sistema
k_n	Mola normal
k_t	Mola tangencial
p(f)	Distribuição de probabilidade de forças de contato em sistemas granulares
ζ_f	Fator de forma
ϕ	Fração de empacotamento
ϕ_c	Fração de empacotamento crítica
$\upsilon(p_i)$	Célula de Voronoi referente ao sítio p_i
S_L	Subconjunto de sítios à esquerda de uma linha divisória
S_R	Subconjunto de sítios à direita de uma linha divisória
$B(S_L, S_R)$	Conjunto dos segmentos de reta que formam a costura dos diagramas de voronoi no algoritmo de divisão e coquista

h Espessura da camada granular (direção *z*)

r_h	Distância horizontal da sobrecarga até o sensor de força
L	Comprimento do sensor
$\sigma^{\lambda}_{\alpha\beta}(\vec{r})$	Fórmula de Born-Huang
b	branch vectors
G	Centro de massa
λ_x	Comprimento do volume de controle alongado
λ_z	Altura do volume de controle alongado
f_0	Módulo da sobrecarga aplicada na camada granular
f^z	Componente vertical da força de contato entre grãos
f^x	Componente horizontal da força de contato entre grãos
$\sigma_{zz}(x)$	Componente vertical (de compressão) do tensor tensão (componente de compressão da SRF)
$\sigma_{zx}(x)$	Componente horizontal (de cisalhamento) do tensor tensão (componente de cisalhamento da SRF)
$\phi_{zz}(x)$	Perfil vertical (de compressão) da deformação da tesselação de Voronoi (Perfil de compressão da VTRF)
$\phi_{zx}(x)$	Perfil horizontal (de cisalhamento) da deformação da tesselação de Voro- noi (Perfil de cisalhamento da VTRF)
Ζ	Coordenada vertical do vértice de Voronoi
Х	Coordenada horizontal do vértice de Voronoi
h_0	Variação da coordenada z do centro do grão onde a sobrecarga é aplicada
Γ_{zz}	Calibre para o cálculo da componente de compressão da SRF
Γ_{zx}	Calibre para o cálculo da componente de cisalhamento da SRF
$\overline{\omega}$	Fator de ajuste da VTRF

Sumário

1 – Intro	odução		1
1.1	Fenon	nenologia de Materiais Granulares	1
1.2	Simulação Computacional		
	1.2.1	Dinâmica Molecular	6
	1.2.2	Colisões e Forças de Contato	9
1.3	Diagra	ama de Voronoi e Triangulação de Delaunay	13
1.4	Sistemas e Propriedades de Interesse		
1.5	.5 Trabalhos Relacionados		
	1.5.1	Avalanche prediction in self-organized systems - Previsão de avalan-	
		ches em sistemas auto-organizados (RAMOS; ALTSHULER; MÅLØY,	
		2009)	22
	1.5.2	Rigid intruder inside a two-dimensional dense granular flow: Drag	
		force and cavity formation - Intruso rígido dentro de um fluxo gra-	
		nular denso, bidimensional: Força de resistência ao escoamento e	
		formação de cavidade (CIXOUS et al., 2009)	25
	1.5.3	Sensitivity of the stress response function to packing preparation -	
		Sensibilidade da função resposta às tensões em função da prepara-	
		ção do amostra (ATMAN et al., 2005)	27
2 – Obje	etivos		31
2.1	Organ	ização do trabalho	32
3 – Fun	damen	tação Teórica e Metodologia	33
3.1	Geom	etria computacional	33
	3.1.1	Tesselação (ou diagrama) de Voronoi	34
	3.1.2	Definição e propriedades básicas do diagrama de Voronoi	34
	3.1.3	Construindo o diagrama de Voronoi	37
	3.1.4	Algoritmo de divisão e conquista	38
	3.1.5	Python (Pyhull®/Qhull®) na obtenção dos diagramas de Voronoi	44
3.2	Materi	ais granulares e dinâmica newtoniana clássica	48
	3.2.1	Sistema granular bidimensional perturbado por intruso	48
	3.2.2	Sistema granular bidimensional por deposição	51
	3.2.3	Características gerais das tesselações de Voronoi calculadas a partir	
		de sistemas granulares sujeitos a sobrecarga	59
4 – Aná	lise e C	Discussão dos Resultados	63

4.1	Sistema perturbado por intruso				
4.2	Sistemas de deposição GG e RL				
	4.2.1 Componente <i>zz</i>	73			
	4.2.2 Componente <i>zx</i>	78			
	4.2.3 A Relação Entre CN e PCN	34			
5 – Con	clusões e Perspectivas	37			
5 – Con 5.1	clusões e Perspectivas8Sistemas Perturbados por Intruso8	37 37			
5 – Con 5.1 5.2	clusões e Perspectivas8Sistemas Perturbados por Intruso8Sistemas de Deposição8	37 37 38			
5 – Con 5.1 5.2 5.3	clusões e Perspectivas 8 Sistemas Perturbados por Intruso 8 Sistemas de Deposição 8 Perspectivas 8	37 37 38 39			
5 – Con 5.1 5.2 5.3	clusões e Perspectivas 8 Sistemas Perturbados por Intruso 8 Sistemas de Deposição 8 Perspectivas 8	37 37 38 39			

lices	95
ICE A – Equações Diferenciais e os Métodos de Runge-Kutta	96
ICE B – Algoritmo de varredura do plano (Algoritmo de Fortune)	104
ICE C – Prova da relação entre arestas e pontos de rompimento	116
Definição gométrica de parábola	116
Elementos de uma parábola	117
Equação reduzida	117
Translação de eixos	118
Outra forma da equação da parábola	118
Pontos de rompimento formando arestas	119
	lices ICE A – Equações Diferenciais e os Métodos de Runge-Kutta ICE B – Algoritmo de varredura do plano (Algoritmo de Fortune) ICE C – Prova da relação entre arestas e pontos de rompimento Definição gométrica de parábola Elementos de uma parábola Equação reduzida Translação de eixos Outra forma da equação da parábola Pontos de rompimento formando arestas

Capítulo 1

Introdução

Neste primeiro momento, daremos enfoque ao *"estado da arte"* em relação ao assunto da pesquisa deste trabalho, ou seja, em relação às características e fenômenos apresentados por materiais granulares.

Nas seções seguintes, abordaremos de forma pragmática a fenomenologia de materiais granulares e as ferramentas computacionais e matemáticas necessárias ao completo entendimento desta tese, tais como Simulação Computacional (Dinâmica Molecular), os métodos de Runge-Kutta e a tesselação de Voronoi.

1.1 Fenomenologia de Materiais Granulares

Materiais granulares estão presentes em toda parte. Constituem material básico, utilizado em diversas indústrias. Podem ser definidos como um conjunto de grãos sólidos, macroscópicos, discretos e com tamanho suficiente para que as flutuações térmicas sejam desprezíveis, pois a energia térmica do ambiente é de ordem de grandeza insignificante comparada à condição de inércia desses grãos (ARANSON; TSIMRING, 2006).

Estes materiais poderiam ser considerados um estado adicional da matéria, pois, apesar de sua aparente simplicidade, podem exibir comportamentos completamente diferentes dos outros estados já familiares – sólido, líquido ou gasoso. Podemos exemplificar tal situação observando que um empilhamento (ou um amontoado) de areia em repouso, cuja inclinação é menor do que determinado ângulo, denominado ângulo de repouso, comporta-se como um sólido, ou seja, apesar de haver forças gravitacionais atuando neste sistema ele permanece em repouso. Os grãos em questão começarão a fluir no momento em que se impuser uma inclinação, de alguns graus, acima do ângulo de repouso, conforme Figura 1. Nesta figura certa quantidade de grãos foi empilhada em uma prancha. Os grãos permaneceram em repouso enquanto a prancha era inclinada, mas, a partir de certo ângulo, uma camada superficial começou a se mover, ocasionando uma avalanche. No entanto, este fluxo será

bem diferente daquele observado em fluidos comuns, pois, diferentemente destes, somente uma pequena camada de grãos, localizada no limite, ou superfície da pilha, irá escoar, enquanto que a massa central permanecerá em repouso.



Figura 1 – Instante da ocorrência de avalanche em empilhamento granular. Nesta figura, uma prancha contendo uma pilha de grãos foi inclinada até que o ângulo de repouso fosse ultrapassado. Observe que o fluxo ocorre apenas na superfície da pilha enquanto que a massa central permanece em repouso.

Fonte: JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996

As interações entre grãos são dissipativas devido ao atrito estático e colisões inelásticas. Falharíamos, segundo Jaeger *et al.*, em tratá-los como gases, assim como fluidos, de maneira usual, ou seja, com base na teoria cinética dos gases ou na fluidodinâmica (JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996).

Se pensarmos em um sistema granular engarrafado, isto é, resistindo ao fluxo, podemos concluir que os grãos deste sistema não mais podem se rearranjar, ou seja, este sistema é **não-ergódico**, o que significa que algumas configurações microscópicas, ou disposições dos grãos deste sistema, são inacessíveis de forma espontânea, ou seja, sem uma perturbação externa ao sistema.

Se estivermos interessados em beber um copo d'água, muito provavelmente, estaremos interessados nos macroestados deste sistema (temperatura, densidade, volume e pressão), isto é, com certeza evitaríamos tomar um copo de água próximo à temperatura de fervura da água. No caso do copo d'água, não estaríamos pensando nos microestados do sistema (posição e velocidade de cada molécula de água dentro do copo). Além disso, há muitos microestados que resultam no mesmo macroestado. Devido ao movimento microscópico das moléculas, o sistema está, continuamente, mudando seu microestado, mas sempre de uma forma que é compatível com o macroestado observável. A ideia de ergodicidade é tal que, se esperarmos um tempo suficientemente grande, todos os microestados possíveis (compatíveis com aquele macroestado do sistema) serão vistos. Nenhum dos microestados é proibido de ocorrer.

Se aplicarmos a ideia a uma pilha de areia, teremos o macroestado descrito, por exemplo,

pela altura, forma da pilha, densidade etc. Vários microestados diferentes poderiam produzir o mesmo macroestado e, como antes, não nos preocupamos onde cada grão está mas apenas com a forma geral da pilha. Porém, se não perturbarmos este sistema, ele continuará perpetuamente sem mudar seu microestado (o que é diferente, por exemplo, de um sistema termodinâmico no equilíbrio). Como nenhum grão se move sem a ajuda de uma perturbação externa ao sistema, e desta forma os microestados não se alternam, podemos dizer que este sistema é um sistema *não-ergódico*.

Duas características adicionais de sistemas não-ergódicos são: (1) a constante de difusão D para o movimento das partículas tende a zero e, (2) a escala do tempo de relaxação τ (escala do tempo de atenuação da tensão, por exemplo) tende a ∞ , (WEEKS, 2007).

Podemos listar outros fenômenos interessantes observados em materiais granulares:

Dilatância – quando comprimimos um material granular ele pode expandir-se, pois sai de um estado ou configuração e passa a outro, isto é, a disposição dos grãos no sistema tornase outra. Para que isto aconteça, os grãos devem reorganizar suas posições internamente ao sistema, Figura 2, passando por regiões não ocupadas. O aumento destas regiões não ocupadas, para que haja a reorganização interna, é o responsável pela dilatância, que é o aumento do volume do sistema (REYNOLDS, 1885). Observa-se, então, neste fenômeno, uma alteração no grau de compactação do sistema. O fato de os espaços vazios do sistema aumentarem (para haver a reconfiguração dos grãos) está relacionando com o que chamamos de "exclusão de volume", ou "exclusão estérica", que significa que dois grãos não podem ocupar o mesmo espaço ao mesmo tempo.



Figura 2 – Esquema da dilatância. O esquema mostra um sistema granular ao mudar de uma configuração a outra - para que o sistema da figura A se apresentasse como na figura B, forças foram aplicadas nas paredes do recipiente, havendo um aumento dos espaços não ocupados e uma consequente reorganização dos grãos. O volume total do sistema aumentou durante esta mudança.

Fonte: <http://geology12-7.wikispaces.com/unit+2+internal+processes+and+plate+tectonic+theory> Acesso em: 27 out. 2015 **Formação de Arcos** – como consequência do comportamento atérmico dos materiais granulares, em sua dinâmica podem ocorrer formações estáveis de estruturas cooperativas, Figura 3, contribuindo para um fenômeno denominado "jamming" (engarrafamento, em português). Este fenômeno é o responsável pelo entupimento do fluxo de grãos em dispositivos (MEHTA, 2007), (MAGALHAES; MOREIRA; ATMAN, 2010).



Figura 3 – Estrutura cooperativa estável - Arco. Esta figura exibe a formação de um arco, em sua porção central inferior, em uma pilha de grãos.

Fonte: (MAGALHAES; MOREIRA; ATMAN, 2010)

Segregação – o fenômeno de segregação, Figura 4, ocorre, espontaneamente, quando uma mistura homogênea de diferentes tipos de grãos, sujeitos a forças externas, torna-se espacialmente não uniforme por meio de separação em termo de seus tamanhos e/ou massas. Como exemplo, ao sujeitarmos uma mistura de diferentes grãos, contidas em um recipiente, a vibrações verticais, os grãos maiores sobem até a superfície do sistema, fenômeno também conhecido como Brazil-Nut Effect (BNE), ou, Efeito da Castanha-do-Pará, (ALAM; TRUJILLO; HERRMANN, 2006). Esta denominação advém das observações feitas em containers de castanhas exportadas pelo Brasil, (SOTERRONI, 2007). O BNE ocorre quando temos grãos maiores, com densidade igual ou superior à densidade dos demais grãos do sistema. Existe, também, o efeito contrário, chamado Reverse Brazil-Nut Effect (RBNE), onde, sendo os grãos maiores mais leves que os demais, eles se deslocam para o fundo do recipiente. A agitação de materiais granulares distintos, confinados em um mesmo recipiente, pode gerar, inclusive, padrões de convecção, Figura 5, onde há separação dos grãos e fluxos destes, (ARANSON; TSIMRING, 2006), (BLAIR et al., 2000) e (RIETZ; STANNARIUS, 2012). No entanto, devemos esclarecer que, mesmo em sistemas monodispersos (com apenas um tipo de grão) podem ocorrer padrões de convecção em função da agitação do recipiente que os contém.

Biestabilidade – É o fenômeno da existência de dois ângulos característicos. O ângulo de repouso de uma pilha de grãos pode assumir valores entre θ_r (ângulo abaixo do qual a pilha de grãos permanece estacionária) e θ_m (ângulo acima do qual aparecerão avalanches espontâneas fluindo para a base da pilha). No intervalo $\Delta \theta = \theta_m - \theta_r$, a pilha de grãos manifesta metaestabilidade, ou seja, ela pode tanto permanecer estacionária, quanto fluir (avalanche) para a base (MEHTA, 2007).



Figura 4 – Caso especial de segregação devido ao BNE. A figura da esquerda mostra o sistema antes de sofrer vibrações verticais e a da direita após. Observe que os grãos maiores estavam no fundo do recipiente e subiram até a superfície, após as vibrações.

Fonte: SOTERRONI, 2007

Depois de termos descrito alguns dos interessantes fenômenos presentes em materiais granulares, dedicaremos, a seguir, um breve texto sobre simulação computacional, que é uma ferramenta necessária ao nosso trabalho.

1.2 Simulação Computacional

Os sistemas físicos, e incluindo neles os materiais granulares, são estudados, basicamente, de três formas: teórica, experimental e, mais recentemente, através de simulação computacional (que deve primar por considerar, na sua formulação, as propriedades físicas o mais próximas possível do sistema real).

Assim, "Simulação é o processo de projetar um modelo computacional para um sistema real e conduzir experimentos com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para a sua solução" (SOTERRONI, 2007).

O avanço computacional dos últimos tempos, juntamente com o fato de alguns experimentos envolverem altos custos financeiros, demandas temporais enormes e outros envolvendo riscos de segurança, impulsionaram as pesquisas feitas em simulações computacionais. Estas simulações permitem, inclusive, que se mude vários parâmetros do sistema pesquisado, que em experimentos reais seria muito difícil de se concretizar. Como exemplo dessa última vantagem, podemos citar a redução total de atrito, caso queiramos. Isto seria muito improvável ou dificultoso de se conseguir na maioria dos experimentos feitos em laboratório.



Figura 5 – Convecção e padrões coerentes em sistema bidisperso de esferas de vidro. Temos aqui grãos (esferas) que transitaram do regime de segregação, paiel (a), para o regime de convecção, painel (c). Esta transição se deu por meio da mudança do volume do recipiente durante a experiência, enquanto o recipiente girava em torno do eixo horizontal que passa pelo seu centro longitudinal. O volume do recipiente diminui, do primeiro para o terceiro painel. Podemos ver, então, que o nível de preenchimento C de um recipiente, definido como a razão do volume líquido das esferas de vidro pelo volume do recipiente, desempenha papel crucial nos padrões exibidos por sistemas granulares. (a) Padrão de segregação axial após 10.000 rotações em um recipiente com um nível de preenchimento $(C \approx 0.52)$ moderado. O padrão se formou durante as primeiras 1.000 rotações e permaneceu estacionário após isto. (b) Após 2.000 rotações adicionais, com a altura do recipiente reduzida, ($C \approx 0.64$), o material foi redistribuído. As esferas pequenas se acumularam no topo e na base e as estruturas de listras se dissolveram. (c) Uma estrutura de convecção é claramente estabelecida após mais 5.000 rotações.

Fonte: RIETZ; STANNARIUS, 2012.

1.2.1 Dinâmica Molecular

Para se fazer simulação de materiais granulares, geralmente, os pesquisadores empregam os métodos de elementos discretos (DEM), que são técnicas numéricas que calculam as trajetórias de cada partícula em virtude da interação entre partículas e o ambiente e entre si. Dentre as diversas técnicas de DEM, podemos citar 3 das mais utilizadas para o tratamento de sistemas discretos: *Event-Driven (ED), Contact Dynamics (CD) e Molecular Dynamics (MD)*. Na simulação por Evento Dirigido (ED) não há a garantia de que os eventos ocorram em intervalos regulares, ou seja, o passo temporal geralmente varia durante a simulação. Um exemplo típico é a simulação da fila de clientes em um banco, na qual os clientes não chegam em intervalos regulares de tempo. Esta abordagem utiliza uma lista de eventos que ocorrem em tempos diversos e irregulares. Esta simulação lança mão de "saltos" temporais para se alcançar o próximo evento. A simulação dura até que o tempo atinja certo ponto ou até que o sistema atinja certo estado. O método da Dinâmica de Contato (CD) considera que as partículas são perfeitamente rígidas, isto é, a interação de contato entre elas não as

deforma, o que também é conhecido como "exclusão de volume perfeita". Já no método de Dinâmica Molecular (MD) as partículas não são consideradas perfeitamente rígidas (UNGER; KERTESZ, 2002), podendo ocorrer interpenetração entre elas. Os métodos "CD" e "MD", diferem do "ED" principalmente no que diz respeito ao passo de tempo utilizado nos cálculos. Como dito antes, em "ED" não temos um passo de tempo constante, ou seja, a interação seguinte é guiada por evento, podendo coincidir com qualquer instante de tempo; em contraposição, nos métodos "CD" e "MD" as interações seguintes são realizadas em função de um passo temporal constante e pré-definido. Uma importante diferença entre dinâmica molecular e dinâmica granular é o fato de que as colisões entre grãos são inelásticas, diferentemente das colisões entre moléculas (MEHTA, 2007).

Sistemas de *hard-spheres*, ou *esferas duras*, são simulados por meio de ED. Neste tipo de sistema não há interpenetração de partículas (assim como na dinâmica de contato), o contato entre elas acontece apenas em um ponto da esfera e o tempo de duração é muitíssimo curto. Assim, ED é aplicado, geralmente, em fluxos granulares rápidos, gases granulares *etc.* Sistemas que possuem contatos persistentes, colisões frequentes e inelásticas, em problemas envolvendo pilhas, funis e materiais agitados, não são indicados para serem tratados com ED.

Sistemas de *soft-spheres*, ou *esferas macias*, são simulados lançando mão de MD. Os casos tratados por MD permitem pequenas sobreposições, ou interpenetrações de partículas, Figura 6, de forma a simular as deformações elásticas do material. A interpenetração, juntamente com outras quantidades físicas, são utilizadas na determinção da força de contato entre grãos. Assim, MD é largamente usada nas simulações de sistemas que envolvam contatos persistentes, colisões frequentes e inelásticas em problemas de formação de pilhas, formação de padrões em camadas sob vibração, cadeia de forças e segregação de partículas por tamanho, (BELL; YU; MUCHA, 2005).

Como os sistemas simulados nesta tese se enquadram nos problemas descritos no último parágrafo, nos ateremos, de agora em diante, apenas à *Dinâmica Molecular*.

Esta técnica, MD, simula a dinâmica dos sistemas por meio da integração das equações de Newton para o movimento, aplicadas a cada partícula (i = 1, 2, ..., N). Equação 1 e Equação 2.

$$\frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \varphi_j, \omega_j), \tag{1}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} = \frac{1}{J_i} \vec{\tau_i}(\vec{r_j}, \vec{v_j}, \varphi_j, \omega_j), \qquad (j = 1, 2, ..., N).$$



Figura 6 – Simulando contato entre grãos. À esquerda temos contato com interpenetração (representando o caso de *soft-sphere* bidimensional) e, à direita, contato em apenas um ponto (representando o caso de *hard-sphere* bidimensional).

Fonte: SOTERRONI, 2007.

A força $\vec{F_i}$ e o torque $\vec{\tau_i}$, que atuam sobre a partícula *i* de massa m_i , são funções das posições das partículas $\vec{r_j}$, orientações angulares φ_j , velocidades $\vec{v_j}$ e velocidades angulares ω_j . O momento de inércia da partícula *i* é J_i (SOTERRONI, 2007).

Em cada partícula *i* podemos calcular a força e o torque resultante da seguinte forma:

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{F}_{ij},\tag{3}$$

$$\vec{\tau_i} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \vec{\tau_{ij}},\tag{4}$$

Desta forma, para se realizar as simulações, por meio de MD, necessitamos saber os valores das forças e torques que atuam entre as partículas em contato. De posse destas informações e fazendo a integração numérica da Equação 1 e da Equação 2 obtemos as trajetórias de todas as partículas em estudo.

Também devemos fornecer, inicialmente, as condições de fronteiras, as coordenadas e as velocidades iniciais de cada partícula do sistema. Ainda sobre as fronteiras, podemos considerar as paredes como partículas fixas, mas sujeitas às demais condições das partículas móveis. Outro método muito utilizado é a condição periódica de contorno.

As técnicas de integração "MD" se baseiam nos métodos numéricos denominados *Runge-Kutta* (WAINER, 2008), que são descritos no Apêndice A.

1.2.2 Colisões e Forças de Contato

O contato mecânico simulado entre duas partículas, Figura 7, ou entre dois grãos, corresponde à lei de contato de Hertz, que em duas dimensões se reduz à lei de Hooke, ou seja, a força normal entre dois grãos é proporcional à interpenetração entre eles. Esta interpenetração é definida pela Equação 5 e o contato de Hertz será definido, formalmente, mais à frente, na Equação 14.

$$\xi_{ik} \equiv R_i + R_k - |r_i - r_k| \ge 0,$$
(5)



Figura 7 – Contato entre duas partículas para o caso "soft-sphere". Podemos observar, claramente, a interpenetração ξ_{ij} de duas partículas. (R_i, R_k) são os raios dos grãos envolvidos, $(\vec{r_i}, \vec{r_k})$ são as posições de seus centros. Os grãos estão sujeitos ao peso próprio $m_i \vec{g}$ e à força de contato $\vec{f_{k/i}}$ entre vizinhos. Note que $\vec{f_{k/i}}$ é igual a $\vec{f_{i/k}}$ em módulo, constituindo um par de ação e reação, representado pela seta de duas pontas (ou cabeças). $\theta_{i/k}$ é o ângulo de contato entre os grãos $i \in k$. Devido ao atrito intergranular, a direção da força de contato pode desviar da linha reta que conecta os centros de $k \in i$, isto é, o ângulo entre $f_{k/i}$ e a horizontal pode ser diferente de $\theta_{k/i}$. Esta figura também mostra os vetores de direção, normal $\hat{n}_{k/i}$ e tangencial $\hat{t_{k/i}}$, para o contato.

A Equação 5 nos diz que o contato entre duas partículas existe apenas quando a soma de seus raios é maior ou igual que a distância entre seus centros (SHAFER; DIPPEL; WOLF, 1996), (SOTERRONI, 2007), (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005).

As forças e velocidades envolvendo as partículas são decompostas em componentes normal

e tangencial, nas direções dos vetores unitários \hat{n}_{ki} e \hat{t}_{ki} , conforme Figura 7.

$$\hat{n}_{ki} = \frac{\vec{r_i} - \vec{r_k}}{|\vec{r_i} - \vec{r_k}|},$$
(6)

$$\hat{t}_{ki} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .\hat{n}_{ki},\tag{7}$$

Desta forma, as velocidades normal relativa $v_{n_{ki}}$ e tangencial relativa $v_{t_{ki}}$ são calculadas da seguinte forma:

$$v_{n_{ki}} = (\vec{v}_{ki}.\vec{n}_{ki})\vec{n}_{ki},$$
 (8)

$$v_{t_{ki}} = (\vec{v}_k - \vec{v}_i).\hat{t}_{ki} + R_k\omega_k + R_i\omega_i \tag{9}$$

onde ω_k e ω_i são, respectivamente, as velocidades angulares das partículas k e i.

Descrevemos a elasticidade das colisões entre partículas por meio do *coeficiente de restituição* ϵ , cuja expressão é dada na Equação 10.

$$\epsilon = -\frac{v_{n_{ki}}^*}{v_{n_{ki}}}, \quad \text{com} \quad \epsilon \in [0, 1], \tag{10}$$

Sendo a interação entre grãos feita por meio de contato mecânico, a força resultante entre dois destes, devido ao contato, é dada por

$$\vec{F}_{ki} = \begin{cases} \vec{F}_{n_{ki}} + \vec{F}_{t_{ki}}, & \text{se } \xi_{ki} \ge 0, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$
(11)

onde $\vec{F}_{n_{ki}}$ e $\vec{F}_{t_{ki}}$ são as componentes da força na direção normal (responsável pela translação do grão) e tangencial (responsável pela rotação do grão), respectivamente.

Ambas as forças, normal e tangencial, estão presentes em colisões oblíquas. Relacionamos a força tangencial à normal por meio da lei do atrito de Coulomb.

$$\vec{F}_t \le \mu_e \vec{F}_n$$
, para atrito estático, $(v_t = 0)$, (12)

$$\vec{F}_t = \mu_d \vec{F}_n$$
, para atrito dinâmico, $(v_t \neq 0)$, (13)

onde μ_e e μ_d são os coeficientes de atrito estático e dinâmico, respectivamente (SHAFER; DIPPEL; WOLF, 1996).

A força tangencial, $\vec{F_t}$ é avaliada a cada passo de tempo e caso ela se torne maior do que $\mu_e \vec{F_n}$ uma das partículas desliza sobre o contato, o que ocasiona perda de energia do sistema.

A modelagem das forças normal e tangencial, Figura 8, entre dois grãos, que são do tipo "colisões inelásticas", requerem no mínimo dois termos: "repulsão" e algum tipo de "dissipação" (SHAFER; DIPPEL; WOLF, 1996). Podemos então modelar tais forças, para o caso 2D, por

$$F_{n_{ki}} = -\lambda_n \xi_{ik},\tag{14}$$

$$F_{t_{ki}} = -\operatorname{sign}(v_{t_{ki}}) \cdot \min(|\lambda_t \zeta_{ik}|, \mu_{e,d}|F_{n_{ki}}|),$$
(15)

$$\zeta_{ki}(t) = \int_{t_0}^t v_{t_{ki}}(t')dt',$$
(16)

onde λ_n e λ_t são, respectivamente, as constantes elásticas normal e tangencial e o termo ζ_{ki} representa o deslocamento tangencial, que tem início no tempo t_0 e fim no tempo t, quando o contato entre as duas partículas se desfaz.

Para reproduzir a perda de energia devido às colisões inelásticas são introduzidos termos de amortecimento normal e tangencial, ψ_n e ψ_t , respectivamente, dados pela Equação 17.

$$\psi_n = \gamma_n v_{n_{ki}}$$
 e $\psi_t = \gamma_t v_{t_{ki}},$ (17)

Onde $v_{n_{ki}}$ e $v_{t_{ki}}$ são as velocidades relativas normal e tangencial, respectivamente.

O coeficiente de amortecimento crítico é o $\gamma_n = 2\sqrt{\lambda_n m}$ que, de forma similar em técnicas de ED, se relaciona com o coeficiente de restituição ϵ pela expressão

$$\gamma_n = \sqrt{\frac{4\lambda_n m_{ef}}{\left(\frac{\pi}{\ln(\epsilon)}\right)^2 + 1}} \tag{18}$$

onde m é a menor massa do sistema e $m_{ef} = m_i m_k / (m_i + m_k)$ é a massa efetiva, (SHAFER; DIPPEL; WOLF, 1996), (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005), (HINRICHSEN; WOLF, 2006), (MARTINS, 2016).

Em nossa simulação utilizamos $\gamma_t = 0$, $\gamma_n = 30 UMN/s$ (unidades explicadas no parágrafo seguinte), ou seja, a dissipação é feita somente pelo atrito coulombiano, pois no caso da direção tangencial os ângulos são muito pequenos, o que não justifica um termo de dissipação, visto que sua contribuição é muito menor do que a contribuição do termo coulombiano.

O passo de tempo é $dt = t_s/50$, em que $t_s = \sqrt{m/\lambda_n} \approx \sqrt{2.083 \times 10^{-3}/1000} \approx 1.443 \times 10^{-3}s$ é o período característico de oscilação do contato normal do grão com o grão de menor massa m na camada. A constante 50 é um fator de segurança para garantir que dt seja pequeno o suficiente. Assim, $dt \approx 2.89 \times 10^{-5}s$, em nossa simulação.

A relação $\lambda_n/P = 1000$, onde P é a pressão relacionada ao peso do conjunto de grãos. A razão λ_t/λ_n tem valor 0, 75. As medições e quantidades físicas desta tese foram normalizadas. Medidas lineares são normalizadas com respeito ao tamanho do sistema ($L_0 = 1 UCN$ - unidade de comprimento normalizada), na direção cartesiana x, de forma a assegurar a validade nas limitações consideradas nas aproximações, isto é, uma interpenetração máxima $\approx 0,001r_{min}$, onde r_{min} é o raio do menor grão. A massa está normalizada com respeito ao grão de maior massa ($m_0 = 1 UMN$ - unidade de massa normalizada). A força está normalizada com respeito ao peso total do sistema ($w_0 = 1 UFN$ - unidade de força normalizada). $w_0 = \langle m \rangle Ng$, onde $\langle m \rangle$ é a massa média, N é o número total de grãos e g é a gravidade normalizada. Detalhes desta normalização podem ser lidos na referência (ATMAN; CLAUDIN; COMBE, 2009).

As acelerações de translação e rotação dos grãos são estabelecidas pela segunda lei de Newton representada nas formulações do movimento retilíneo e rotacional, respectivamente. Desta forma, se um grão *i* sob a ação de um campo gravitacional \vec{g} interage com um grão *j*, teremos:

$$\vec{F}_{i}^{tot} = m\vec{g} + \sum_{j} (\vec{F}_{n_{ij}} + \vec{F}_{t_{ij}}),$$
(19)



Figura 8 – Modelo das forças atuantes entre dois grãos. As forças elásticas são representadas por molas ($k_n \in k_t$) e a dissipação de energia por amortecedores ($\gamma_n \in \gamma_t$), onde $n \in t$ são as direções normal e tangencial, respectivamente. Neste trabalho consideramos $\gamma_t = 0$, confome mencionado anteriormente.

Fonte: SOTERRONI2007

$$\vec{\tau}_i^{tot} = -\frac{1}{2} \sum_j \vec{r}_{ij} \times \vec{F}_{t_{ij}}, \tag{20}$$

onde \vec{F}_i^{tot} e $\vec{\tau}_i^{tot}$ são a força total e o torque total sobre o grão *i*, (SILBERT et al., 2001). Obviamente, para calcular a direção desses vetores no grão *j* basta utilizar a terceira lei de Newton, *Ação e Reação*.

1.3 Diagrama de Voronoi e Triangulação de Delaunay

Consideremos alguns problemas com pouquíssimas características em comum, pertencentes a uma variedade distinta de fenômenos em escalas variadas.

Podemos exemplificar tais problemas, dentre outros, da seguinte forma:

• um astrônomo estudando a estrutura do Universo;

- um arqueólogo tentando identificar as partes de uma região sob a influência de diferentes clãs neolíticos;
- um projetista urbano alocando escolas públicas em uma cidade ;
- um físico estudando o comportamento do argônio líquido;
- um fisiologista estudando a irrigação capilar em determinado tecido muscular;

Estes problemas diversos podem ser estudados por uma abordagem baseada em um conceito simples: dado um conjunto finito de pontos distintos e isolados em um espaço contínuo, associamos todos os locais daquele espaço com o membro mais próximo do conjunto de pontos. O resultado é o particionamento do espaço em um conjunto de regiões. Essas regiões são mais comumente conhecidas como *Regiões de Voronoi* e o conjunto destas regiões como **Diagrama de Voronoi** ou **Tesselação de Voronoi** (OKABE et al., 2009). O conjunto destas regiões de Voronoi (a tesselação de Voronoi) forma o que chamamos, no caso bidimensional, de pavimentação do plano.

As pavimentações do plano se constituem no recobrimento completo do mesmo, sem deixar lacunas ou sobreposições (CASTRO, 2009). As tesselações constituem-se de polígonos, regulares ou não. A palavra *"tesselation"*, em português, corresponde ao vocábulo tesselar, que indica a pavimentação de uma região através de peças de mosaico. Utilizamos, então, a palavra tesselação, pois, de acordo com Barbosa (1993), tecelação (de tecer – entrelaçar fios) não teria o mesmo sentido (SANTOS; MURARI, 2004).

Um segundo diagrama pode ser construído a partir do diagrama de Voronoi. Ele é conhecido como **Triangulação de Delaunay** e se constitui como um dual do diagrama de Voronoi. Em teoria dos grafos, um grafo dual G' de um grafo planar G é um grafo que tem um vértice por cada região (face) de G, e uma aresta por cada aresta em G que une duas regiões adjacentes. Esta triangulação também pode ser construída diretamente a partir do conjunto inicial de pontos .

Diagramas de Voronoi e triangulações de Delaunay são dois exemplos da geometria computacional de conceitos verdadeiramente interdisciplinares e com aplicações relevantes encontradas, mas não limitadas, em antropologia, arqueologia, atronomia, biologia, cartografia, química, geometria computacional, cristalografia, ecologia, silvicultura, geografia, geologia, linguística, marketing, metalografia, meteorologia, pesquisa operacional, física, fisiologia, sensores remotos, estatística e, mais recentemente, planejamento urbano e regional (OKABE et al., 2009), como foi o caso do estudo de diagramas de Voronoi para a definição de áreas de abrangência de hospitais públicos no município do Rio de Janeiro (REZENDE; ALMEIDA; NOBRE, 2000). Com isto, podemos concluir que seu caráter interdisciplinar está presente, pois constitui uma ferramenta, ou técnica, que, uma vez desenvolvida e bem estudada, pode ser expandida a sistemas diversos, em áreas distintas do conhecimento humano. É bastante provável que as ideias conceituais do diagrama de Voronoi sejam de considerável antiguidade.

Em seu trabalho sobre fragmentação cósmica, tanto em *Le Monde de Mr. Descartes, ou Le Trait de la Lumière*, publicado em 1644 (mas escrito entre 1629 e 1633) quanto na terceira parte de *Principia Philosophiae*, também publicado em 1644, Descartes usa diagramas do tipo Voronoi para mostrar a disposição da matéria no sistema solar e seus arredores, Figura 9, (OKABE et al., 2009).



Figura 9 – Disposição da matéria no sistema solar e seus arredores, por Descartes. "S" é o sol e "A", "E" e "ε" são estrelas. O sol e as estrelas são os centros de vértices circulares da matéria celestial.

Fonte: http://faculty.humanities.uci.edu/bjbecker/ExploringtheCosmos/lecture9.html Acessado em: 6 ago. 2020.

A primeira apresentação indiscutivelmente abrangente sobre os conceitos que hoje entendemos por diagramas de Voronoi apareceram nos trabalhos de Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805-1859) e Georgy Fedoseevich Voronoy (Georges Voronoi)(1868-1908) que, em seus estudos sobre formas quadráticas definidas positivas (Dirichlet, 1850; Voronoi, 1907,1908,1909), consideraram uma forma especial do diagrama de Voronoi (OKABE et al., 2009).

Para facilitar ainda mais nosso entendimento sobre diagramas de Voronoi, vamos considerar um caso prático: o conselho responsável pelo planejamento de uma cadeia de supermercados almeja abrir uma nova filial em determinado local (BERG et al., 2000).

Obviamente, a abertura desta filial deverá maximizar o lucro e, para isto, devemos prever o número de clientes que será alvo. Com esta finalidade, modelaremos o comportamento do potencial cliente: como as pessoas decidem onde comprar?

Em um cenário mais abstrato, podemos dizer que temos um conjunto de lugares centrais denominados *sítios*, que proveem certos bens ou serviços.

Façamos, agora, hipóteses simplificadas:

- o preço de determinado bem ou serviço é o mesmo em qualquer sítio;
- o custo em adquirir um bem ou serviço é igual ao preço mais o custo do transporte;
- o custo do transporte é proporcional à distância euclidiana percorrida pelo cliente;
- clientes tendem a minimizar o custo ao adquirir bens e serviços.

Bem, podemos resumir tudo que foi analisado anteriormente em: o consumidor irá comprar no ponto de venda mais próximo a sua casa.

Se na Figura 10 os sítios, ou pontos, são os supermercados, basta, então, traçarmos linhas na exata posição média entre cada sítio e seus vizinhos que conseguiremos prever quais clientes irão a determinado supermercado.

Assim, todos os moradores de dentro de um polígono que encerra determinado sítio fazem compras neste sítio, pois ele é o mais próximo da casa deles. Agora, cabe analisar quais sítios representam os supermercados de nossa rede e quais não, além de observar quais regiões estão mais saturadas e quais podem fornecer uma quantidade maior de clientes.

As propriedades gerais da tesselação de Voronoi serão descritas, em maiores detalhes, mais adiante, no Capítulo 3.

Boris Nikolajewitsch Delaunay (1890-1980), matemático russo, provou, em 1934, que, quando um grafo dual é desenhado com linhas retas, ele produz uma triangulação planar dos sítios S de Voronoi (se não ocorrerem quatro sítios cocirculares), conhecida, atualmente, como *triangulação de Delaunay* D(S).

A Figura 11 mostra uma tesselação de Voronoi com o seu dual, triangulação de Delaunay.

Visto que tesselações de Voronoi e triangulações de Delaunay são estruturas duais, em certo sentido, elas fornecem informações semelhantes, porém representadas de formas diferentes (O'ROURKE, 1998).

Para se compreender melhor estas complexas estruturas e a relação entre elas, descreveremos, agora, resumidamente e sem provas, algumas propriedades da triangulação de


Figura 10 – Área de comércio das capitais das 12 províncias da Holanda. Adaptando ao nosso problema, cada sítio representa um supermercado dominando certa região do mapa, ou seja, todos os pontos dentro do polígono onde se encontra determinado sítio estão mais próximos a este sítio do que de qualquer outro.

Fonte: BERG MARK; VAN KREVELD, 2000.

Delaunay e da tesselação de Voronoi (O'ROURKE, 1998).

Dado um conjunto P de pontos, ou sítios, no plano, onde denotamos por D(P) e V(P) a triangulação de Delaunay e a tesselação de Voronoi, respectivamente:

Triangulação de Delaunay

- D(P) é o dual de V(P), formado por linhas retas. Isto é uma definição.
- D(P) é uma triangulação se não existirem quatro pontos de P que sejam cocirculares.
 Cada face é um triângulo e estas faces, de D(P), são chamadas de triângulos de Delaunay.
- Cada face (ou triângulo) de D(P) corresponde a um vértice de V(P). Cabe mencionar que podemos ter triângulos de Delaunay sem qualquer vértice de Voronoi, enquanto outros acumulam mais de um, Figura 11.
- Cada aresta de D(P) corresponde a uma aresta de V(P).
- Cada nó, ou vértice, de D(P) corresponde a uma região, ou polígono, de V(P).
- A fronteira de D(P) é um fecho convexo para os sítios.
- O interior de cada face (triângulo) de D(P) não pode conter sítios.

Tesselação de Voronoi



Figura 11 – Tesselação de Voronoi (polígonos em vermelho), e seu dual (triângulos em preto), triangulação de Delaunay. Os pontos pretos, localizados nos vértices dos triângulos representam os sítios do plano euclidiano e os pontos vermelhos nos vértices dos demais polígonos são os vértices de Voronoi.

Fonte: http://www.etereaestudios.com/docs_html/nbyn_htm/about_index.htm Acesso em: 8 set. 2015.

- Cada região (polígono) de Voronoi $V(P_i)$ é convexa.
- *V*(*P_i*) é ilimitada, ou aberta, se, e somente se, *P_i* se encontra sobre a fronteira do fecho convexo do conjunto de pontos, ou sítios.
- Se v é um vértice de Voronoi na junção de V(P₁), V(P₂) e V(P₃), então v é o centro do círculo C(v) determinado por p₁, p₂ e p₃,.
- C(v), Figura 12, é o circuncírculo para o triângulo de Delaunay correspondente a v.
- O interior de C(v) não contém sítios.
- Se p_j é o vizinho mais próximo de p_i , então, (p_i, p_j) é uma aresta de D(P).
- Se há algum círculo sobre p_i e p_j que não contenha outros sítios, então (p_i, p_j) é uma aresta de D(P). A reciproca também é verdadeira: para cada aresta de Delaunay há algum círculo vazio.

Nosso trabalho consiste em correlacionar as distribuições estatísticas das propriedades mecânicas de materiais granulares com as distribuições estatísticas da geometria da tesselação de Voronoi, para que, assim, acessando as propriedades microscópicas, possamos conseguir uma extrapolação para se obter as grandezas macroscópicas a partir das informações geométricas.

Cada configuração do sistema granular, com as posições, velocidades, número de contatos, força atuante *etc.* das N partículas que o compõem - nos diferentes intervalos de tempo -



Figura 12 – Triangulação de Delaunay. Podemos observar os circuncírculos de cada triângulo de Delaunay.

Fonte: http://meemoo.org/blog/2014-07-14-noflo-geometry/ Acesso em: 8 set. 2015.

pode ser associada à disposição de pontos (que representam os centros de massa destas partículas – conforme Figura 13) no espaço Euclidiano e, consequentemente, a uma rede poligonal (formada por polígonos que encerram um único ponto em seu interior) e às suas propriedades geométricas.



Figura 13 – Tesselação de Voronoi. Os pontos encerrados dentro de cada polígono representam os centros de massa dos grãos do sistema.

Fonte: http://onionesquereality.wordpress.com/2008/12/13/voronoi-art/ Acesso em: 6 ago. 2020.

Um problema que surge naturalmente em várias aplicações é o problema de *vizinhos mais próximos*, ou seja, dada certa distribuição de pontos em um plano no qual, por exemplo, necessita-se encontrar os vizinhos mais próximos e suas distâncias (SHAMOS; HOEY, 1975). Usando a tesselação de Delaunay e Voronoi, podemos interpretar como vizinhos mais próximos os pontos, ou sítios, que estão encerrados em polígonos adjacentes.

Identificados os vizinhos mais próximos, podemos analisar distribuições estatísticas de dados geométricos (geradas pela configuração de polígonos), tais como: quantidade de vizinhos mais próximos (em função da distribuição estatística do número de arestas dos polígonos de Voronoi), área dos polígonos formados, distância entre vizinhos mais próximos (em função das distâncias entre os vértices dos triângulos de Delaunay) etc.

Enfatizamos, também, que o amplo número de cientistas que manifestam interesse em aplicações da tesselação de Voronoi o faz por três aspectos principais (AURENHAMMER, 1991):

- 1. Pelo fato de ser intrinsecamente adequada na análise de fenômenos naturais.
- 2. Porque fornece a possibilidade da investigação de propriedades matemáticas, especialmente as propriedades geométricas, combinatórias e estocásticas.
- 3. Devido à sua aplicabilidade na construção e representação computacional.

1.4 Sistemas e Propriedades de Interesse

Podemos estudar sistemas granulares preparados com uma grande variedade de disposições de seus componentes, dentre elas: pilhas granulares tridimensionais, camadas (layers) *etc.* Nesses estudos, os grãos são sujeitados aos mais diversos tipos de perturbações externas, que podem ser desde somente a atuação da gravidade, passando pela colisão de um *"intruso"*, por exemplo uma esfera (BRUYN; WALSH, 2004),(GOLDMAN; UMBANHOWAR, 2008), sobre uma pilha de grãos, ou o avançar de uma haste sobre um sistema bidimensional de grãos em repouso (CIXOUS et al., 2009), gerando o fenômeno de transição de engarrafamento e desengarrafamento (jamming and unjamming), a agitação ou rotação de uma caixa cheia de grãos (RIETZ; STANNARIUS, 2012), o escoamento de um fluido granular através de um funil ou silo (SAXCÉ; FORTIN; MILLET, 2004) *etc.*

Aplicando estas perturbações, em diferentes experimentos, os sistemas nos darão respostas também diferentes. Estas respostas, normalmente, são fornecidas sob a forma de uma distribuição estatística de fenômenos micromecânicos de interesse, tais como: força entre partículas, velocidades, número de contatos entre grãos (ATMAN et al., 2005), resistência à mudança de estado em função de força aplicada, engarrafamento e desengarrafamento (ATMAN et al., 2013), avalanches (RAMOS; ALTSHULER; MÅLØY, 2009) *etc.*

Em experimentos reais ou simulações numéricas padrão, usando dinâmica molecular (MD) ou dinâmica de contatos (CD), um estado estático final definido é alcançado a partir de dada configuração inicial. Assim, conseguimos uma distribuição espacial de forças, que se apresenta bastante heterogênea, representada pelas assim chamadas *"cadeias de força"*, que também podem ser observadas em experimentos com grãos fotoelásticos (GENG et al., 2001) e (DRESCHER; JONG, 1972). Na Figura 14, podemos observar algumas cadeias

de força e forças de contato simples, representadas pelas linhas pretas, na simulação de um silo contendo grãos (SAXCÉ; FORTIN; MILLET, 2004).



Figura 14 – Cadeias de forças e forças de contato em silo. Cadeias de forças são sequências de forças de contato cujas magnitudes são maiores do que o valor médio das forças nas vizinhanças. Geralmente são formadas por, aproximadamente, 5 grãos (PETERS et al., 2005). Os círculos vermelhos representam grãos de 2 mm e o os círculos azuis grãos de 1,5 mm.

Fonte: SAXCÉ; FORTIN; MILLET, 2004

Para dadas condições de fronteira (geometria, carga externa) e diferentes configurações iniciais de grãos (posição, velocidades), os arranjos estáticos finais (posições, contatos, forças) serão diferentes. A hipótese implícita é que todos estes estados finais são estatisticamente equivalentes e podem ser usados para calcular quantidades médias ou funções de distribuição estatística. Pode-se dizer que, quase todos os dados experimentais e numéricos podem ser razoavelmente ajustados em uma distribuição de probabilidade de forças (MEHTA, 2007), da forma:

$$p(f) \propto \begin{cases} (f/\overline{f})^{\alpha} & \text{se } f < \overline{f}; \\ e^{-\beta f/\overline{f}} & \text{se } f > \overline{f}. \end{cases}$$
(21)

Onde \overline{f} é o valor médio das forças de contato, β está sempre entre 1 e 2 e, α situase bem próximo de 0 (positivo ou negativo) (MEHTA, 2007). As distribuições de forças apresentam dois regimes, sendo que as forças acima da média se mostram como um decaimento exponencial, enquanto as forças abaixo da média se distribuem em uma forma aproximadamente plana.

Concluindo, forças em materiais granulares variam muito entre um contato e outro, entre dois grãos e, portanto, exibem ampla distribuição de probabilidades. Como dito há pouco,



Figura 15 – Distribuição das forças em função da intensidade. Observe o comportamento mais plano à esquerda da distribuição P(f), onde localizam-se os menores valores de f.

Fonte: MEHTA,2007

esta função p(f) é quase plana para forças menores que a força média, o que significa que estas pequenas forças são muito frequentes, Figura 15, (MEHTA, 2007).

Enquanto muitos estudos caracterizam propriedades de fluxo ou engarrafamento em materiais granulares aplicando cisalhamento macroscópico ou vibração global, poucos experimentos ou estudos numéricos testam, diretamente, as propriedades reológicas locais estudando um fluxo granular denso e lento, na presença de um obstáculo (*"intruso"*) imerso, (APPERT-ROLLAND et al., 2009), Figura 16. E isto se constituiu como um dos eventos motivadores para que tomássemos esta empreitada, ou seja, esta tese.

1.5 Trabalhos Relacionados

Nesta seção, mostramos alguns importantes trabalhos que motivaram os estudos dos sistemas que escolhemos.

 1.5.1 Avalanche prediction in self-organized systems - Previsão de avalanches em sistemas auto-organizados (RAMOS; ALTSHULER; MÅLØY, 2009)

Até pouco tempo, prevalecia a crença de que avalanches eram inerentemente imprevisíveis. Esta crença procedia do conceito de "criticalidade auto-organizada", ou SOC. Estudos da cri-



Figura 16 – Intruso perturbando sistema granular. Os grãos são representados pelas partículas azuis e o intruso pela esfera preta. Os diferente tons de azul indicam a intensidade das forças, ou seja, quanto mais forte o tom de azul maior a força sobre aqueles grãos. Este é um sistema gravitacional e a área em preto é somente um fundo para a figura.

Fonte: http://maklamper.blogspot.com.br/20110629archive.html - Acesso em: 9 set. 2015.

ticalidade de fenômeno tais como avalanches afirmam que em qualquer momento, qualquer pequena avalanche pode, eventualmente, transformar-se em um enorme evento. Porém, o trabalho ralizado por (RAMOS; ALTSHULER; MÅLØY, 2009) demonstra experimentalmente a possibilidade da previsão de avalanches no paradigma clássico da SOC: uma pilha de grãos.

Foi demonstrado, (RAMOS; ALTSHULER; MÅLØY, 2009), que, conhecendo a posição de cada grão, em uma pilha bidimensional, o tamanho e a duração das avalanches de grãos seguem distribuições em leis de potência.

O que diferencia as grandes da pequenas avalanches é que as grandes, embora não correlacionadas, são, na média, precedidas por variações detectáveis, contínuas, na estrutura interna de empilhamentos monitorados.

Para prever, no curto prazo, quando uma avalanche ocorreria, Ramos *et al.* analisaram as correspondentes mudanças na estrutura interna da pilha. O fato de as posições dos centros de todas as partículas serem conhecidas em cada passo do experimento posibilitou a construção da tesselação de Voronoi da pilha. Definiram algumas variáveis estruturais da pilha e analisaram como elas evoluíam, juntamente com as propriedades dos polígonos de Voronoi, durante o tempo, particularmente nas proximidades de grandes avalanches. Neste trabalho o estudo foi concentrado em dois parâmetros: o tamanho do sistema, definido como

o número de grãos na pilha e o fator de forma, ζ_f , que é a medida da desordem local no sistema, Figura 17. O fator de forma é calculado em função das propriedades dos polígonos de Voronoi.



Figura 17 – Estrutura interna de uma pilha granular. Vista aproximada de uma porção da pilha, juntamente com uma reflexão (abaixo) no espaço do fator de forma ζ_f . Após encontrar os centros de todos os grãos e construir uma tesselação (ou diagrama) de Voronoi para os grãos internos (isto é, excluindo aqueles localizados na base e aqueles que formam a linha da superfície da pilha), definiram $\zeta_f = C^2/4\pi S$, onde C é o perímetro e S a área de cada célula de Voronoi. O fator de forma ζ_f é a medida da desordem local na pilha [por exemplo, para um hexágono regular $\zeta_f = 1, 103$ (maior ordem na pilha), e, para um quadrado $\zeta_f = 1, 273$]. Inserção: A pilha em sua totalidade, onde o retângulo indica a vista de aproximação da área.

Fonte: RAMOS; ALTSHULER; MÅLØY, 2009

A utilização da tesselação de Voronoi para previsão das propriedades do sistema granular deste artigo foi o fato inspirador do assunto desta tese.

1.5.2 Rigid intruder inside a two-dimensional dense granular flow: Drag force and cavity formation - Intruso rígido dentro de um fluxo granular denso, bidimensional: Força de resistência ao escoamento e formação de cavidade (CIXOUS et al., 2009)

Neste trabalho, foi investigada, experimentalmente, Figura 18, a força de resistência ao escoamento experimentada por um intruso imerso em um fluxo granular (bidimensional) desordenado e denso, bem como os campos de deslocamento de grãos ao redor dele.

O experimento foi realizado colocando-se cerca de 6.800 discos em uma bandeja. As áreas dos discos ocupavam cerca de 80% da área da bandeja. Esse percentual de ocupação (chamado de fração de empacotamento) é uma das variáveis de controle.

A bandeja é formada por quatro paredes e uma base retangular com atrito. Estas paredes são ajustáveis para se modificar a fração de empacotamento. Os discos ficam confinados juntamente com um intruso. O intruso é um disco de diâmetro razoavelmente maior que os demais discos (grãos). Para evitar o atrito entre o intruso e a bandeja, quando esta última se move, o intruso atravessa o sistema de grãos sem tocar a base.

Devido ao movimento da bandeja em relação ao intruso, em algumas ocasiões, certa quantidade de grãos se acumula à frente deste último e ocorre a formação de uma pequena região vazia atrás dele. Quanto maior a fração de empacotamento do sistema, menor a área vazia atrás do intruso (cavidade). Sendo assim, em nosso trabalho estabeleceu-se uma relação entre a soma das áreas dos polígonos de Voronoi da região da cavidade, em função da fração de empacotamento, e a transição de fase de engarrafamento. O primeiro parâmetro de ordem, neste caso, é o valor da soma das áreas dos polígonos da cavidade. Observamos o estado engarrafado do sistema para certo valor limite da soma das áreas citadas e fase não engarrafada para valores maiores do que este limite. Temos, também, um segundo parâmetro de ordem, que é número de lados do polígono do intruso. A fase de engarrafamento ocorre para um número de lados maior do que certo limite e não engarrafada para um número de lados maior do que certo limite e não

Sobre os grãos acumulados à frente do intruso, ocorre, periodicamente, uma cooperação de grãos formando uma aglomeração resistente ao deslocamento para, em seguida, ocorrer uma desconstrução deste aglomerado. Chamamos este fenômeno de transição de engarrafamento e desengarrafamento, local. Próximo à transição de engarrafamento temos um crescimento drástico do nível da força de resistência ao escoamento que atua sobre o intruso. Esta força é medida por meio de sensores acoplados ao suporte do intruso.

As observações descritas no parágrafo anterior foram avaliadas em diferentes valores da fração de empacotamento.



Figura 18 – Vista de cima do esquema de preparação experimental so sistema com intruso. O intruso rígido, cilíndrico, de diâmetro D, está conectado, via um pequeno braço, a uma travessa rígida, que está ligada a dois sensores de força, S_1 e S_2 . Estes elementos estão fixos à estrutura do laboratório. Um prato inferior, homogeneamente iluminado de cima, suporta uma célula retangular (retângulos vermelhos cruzados por linhas finas) de comprimento L e largura W, preenchida por cilindros de dois diferentes tamanhos a uma fração de empacotamento inicial ϕ .

Fonte: CIXOUS et al., 2009

Alguns dos interessantes resultados são:

- Comportamento da força de resistência ao escoamento, exercida sobre o intruso, produzida pelos eventos de engarrafamento e desengarrafamento, ou seja, pelo acúmulo ou esvaziamento de grãos à frente do intruso, Figura 19.
- Evolução da área da cavidade atrás do intruso em função da mudança da compactação do sistema, ou seja, em função da fração de empacotamento φ, Figura 20.
- Evidência do aparecimento de uma fração de empacotamento crítica ϕ_c , Figura 21.

Cabe chamar a atenção na Figura 21 para o fato de que quando a área da cavidade tende para zero, a fração de empacotamento ϕ tende para o valor crítico ϕ_c .

Nos interessamos, então, em estudar os indícios de uma transição de fase de engarrafamento por meio da aplicação da tesselação de Voronoi em sistemas perturbados por



Figura 19 – Força de resistência ao escoamento sobre o intruso. A figura mostra a força de resistência ao escoamento *F* exercida sobre o intruso como uma função do deslocamento *d* do prato (normalizado pelo diâmetro de um grão grande d_2) para um intruso de diâmetro D = 20mm, uma célula com W = 269, 5mm, e uma fração de empacotamento inicial $\phi = 82, 6\%$. A inserção mostra um "zoom" de uma transição de fase engarrafamento-desengarrafamento. A força que cresce entre um mínimo local e o subsequênte máximo é denotada por δ_{FJ} .

Fonte: CIXOUS et al., 2009

intruso.

1.5.3 Sensitivity of the stress response function to packing preparation -Sensibilidade da função resposta às tensões em função da preparação do amostra (ATMAN et al., 2005)

Um conjunto granular composto de uma coleção de grãos idênticos pode se acondicionar sob diferentes configurações microscópicas apresentando características também microscópicas que são sensíveis ao modo de preparação. Uma dada configuração pode, também, mudar sua resposta a ações externas tais como compressão, Figura 22, e cisalhamento.

Neste artigo, mostrou-se que, usando o método de função resposta a tensões, os perfis das tensões geradas em empilhamentos granulares não se mostraram suficientemente diferentes para se distinguir entre as preparações *Grain-by-Grain* ou GG e *Rain-Like* ou RL, ou seja, a resposta macroscópica foi muito parecida. Porém, as distribuições dos ângulos de contato são fortemente dependentes do procedimento de preparação. Assim, sob um dado modo de preparação, Figura 23, a simetria da distribuição dos ângulos dos contatos



Figura 20 – Cavidade formada no rasto do intruso. Observação da cavidade formada no rasto atrás do intruso (D = 20mm): (a) para uma célula de largura W = 269, 5mm e crescente frações de empacotamento, de cima para baixo, $\phi = 80, 5\%$, $\phi = 82, 1\%$ e $\phi = 83\%$; e (b) para uma fração de empacotamento $\phi = 80, 4\%$ e decrescente largura de célula, de cima para baixo, W = 218mm, W = 170mm e W = 138mm. As setas negras indicam a direção reversa do deslocamento do prato

Fonte: CIXOUS et al., 2009

dos grãos é afetada e, em muitos casos, significantes desvios desta simetria podem ser observados.

Decidimos seguir, também, a linha de pesquisa descrita neste último artigo e estudar as propriedades geométricas da tesselação de Voronoi como alternativa para a obtenção da função resposta ao estresse, bem como para a análise das propriedades mecânicas dos dois tipos de deposição, GG e RL.



Figura 21 – Área média das cavidades atrás do intruso, normalizada pela superfície de um grão grande como função da fração de empacotamento ϕ . As áreas são médias realizadas sobre cinco experimentos e sobre uma distância percorrida de cerca de 50mm, como função da fração de empacotamento inicial ϕ para diferentes diâmetros D de intrusos, de acordo com a legenda, e para uma largura de célula W = 269, 5mm. A linha pontilhada, azul, é um ajuste. Neste gráfico observamos que a área média das cavidades se estabiliza, próximo de zero, em $\phi \approx 83\%$

Fonte: CIXOUS et al., 2009



Figura 22 – Cadeias de forças em um empacotamento bidimensional de grãos fotoelásticos em resposta a uma força localizada no topo (a contribuição gravitacional fora subtraída). Zonas escuras indicam grande estresse. Estruturas do tipo cadeia de forças são claramente visíveis.

Fonte: ATMAN et al., 2005



Figura 23 – Distribuição de ângulos e forças de contato para procedimentos de deposição tipo chuva, ou RL, à esquerda e, grão-a-grão, ou GG, à direita. Linhas escuras são para os ângulos de contato ao passo que linhas cinzas são para a orienta-ção das forças - todos os ângulos são medidos com respeito ao eixo horizontal. Os círculos são guias indicativos de distribuição equânime em relação aos ântulos. A textura com ângulos preferenciais na deposição grão-a-grão é notável. Estas estatísticas foram obtidas com cerca de 50.000 pares de contato RL e 32.000 GG, e com intervalos de largura de 5º para cada histograma

Fonte: ATMAN et al., 2005

Capítulo 2

Objetivos

Os objetivos gerais desta tese são: 1) aplicar a tesselação de Voronoi na simulação de sistemas bidimensionais similares aos estudados por Cixous *et al.*, (CIXOUS et al., 2009), no qual um intruso perturba grãos dispostos no fundo de uma caixa, e identificar indícios de transição de fase de engarrafamento; 2) aplicar a tesselação de Voronoi na simulação de sistemas obtidos por diferentes tipos de deposição, GG e RL, e relacionar a função resposta ao *stress* à função resposta à tesselação de Voronoi.

Objetivos específicos para os sistemas perturbados por intruso:

- simular, por meio de MD, um sistema representado por uma caixa contendo uma camada de grãos dispostos em seu fundo. Nesta simulação, um grão diferenciado, muito maior que os demais do sistema, cruza o fundo da caixa longitudinalmente interagindo com os grãos à sua frente;
- repetir o procedimento descrito anteriormente para diferentes frações de empacotamento;
- 3. calcular a tesselação de Voronoi destes sistemas para diferentes instantes de tempo;
- 4. verificar as mudanças nos polígonos de Voronoi, tanto as mudanças de área quanto as mudanças no número de arestas;
- 5. Utilizar ferramentas matemáticas para analisar as mudanças descritas e concluir se há indícios de transição de fase de engarrafamento;

Objetivos específicos para os sistemas de deposição GG e RL:

- 1. simular, por meio de MD, sistema granular construído por deposição "Grão-a-Grão" e também sistema construído por deposição "Tipo Chuva";
- calcular as tesselações de Voronoi dos sistemas quando os mesmos estiverem no equilíbrio estático;
- calcular as distribuições estatísticas dos atributos dos polígonos de Voronoi tais como área e número de arestas, bem como a distribuição de forças nos sistemas;

- Simular a aplicação de uma sobrecarga no topo das camadas dos sistemas de deposição;
- 5. calcular, novamente, as tesselações de Voronoi dos sistemas no equilíbrio estático;
- calcular, novamente, as distribuições estatísticas dos atributos dos polígonos de Voronoi, bem como a nova distribuição de forças nos sistemas;
- calcular as diferenças de áreas, número de arestas e de forças para cada polígono e o grão nele encerrado;
- calcular a função resposta às tensões e a função resposta à tesselação de Voronoi. Verificar se há correspondência entre estas duas funções e se a primeira pode ser calculada a partir da última;
- relacionar o número de coordenação, referente aos grãos, com o número de coordenação de polígono para investigar diferença de assinatura dos dois tipos de deposição e também diferentes propriedades.

2.1 Organização do trabalho

A seguir, no Capítulo 3, descreveremos as bases teóricas para a construção da tesselação de Voronoi, no âmbito da geometria computacional, ou seja, descreveremos as propriedades matemáticas desta ferramenta e discutiremos sobre dois algoritmos úteis à sua construção. Delinearemos, também, as características dos sistemas simulados e a ferramenta computacional (Pyhull®) utilizada na obtenção de dados. Discutiremos as técnicas de aplicação da tesselação de Voronoi nos diferentes sistemas granulares bem como os tipos de dados que se mostraram proficientes para a análise de resultados.

No Capítulo 4 abordaremos os dados, por meio de distribuições estatísticas, ajustes de curvas *etc* e faremos uma detalhada discussão baseada nos resultados obtidos.

No Capítulo 5 faremos uma síntese geral das características globais e relações encontradas entre os sistemas e suas tesselações.

Os *Apêndices* contêm maior aprofundamento em determinados assuntos que, no decorrer desta tese, foram citados de forma superficial e visa, também, complementar alguns tópicos que prentendíamos abranger de forma mais significativa ou focada.

Capítulo 3

Fundamentação Teórica e Metodologia

Neste capítulo, faremos uma ampla abordagem dos processos e técnicas da geometria computacional necessários à obtenção de dados provenientes dos sistemas estudados.

Descrevemos a preparação e as variáveis de controle utilizadas para estudar o sistema planar perturbado por intruso e as camadas granulares estáticas provenientes das deposições GG e RL.

3.1 Geometria computacional

A Geometria computacional surgiu a partir do estudo de projetos e análise de algoritmos no final da década de 1970. Ela cresceu tornando-se uma disciplina reconhecida, com suas revistas próprias, conferências e uma grande comunidade de pesquisadores ativos. O êxito como disciplina de pesquisa pode, por um lado, ser explicado a partir da beleza dos problemas estudados e pelas soluções obtidas e, por outro lado, pelo vasto campo de aplicação, no qual algoritmos geométricos desempenham um papel fundamental (BERG et al., 2000).

Então, geometria computacional, em sentido amplo, é o estudo dos algoritmos de resolução de problemas geométricos com o auxílio de um computador. Os problemas em Geometria Computacional são tratados em termos dos vários objetos geométricos elementares como pontos, retas, segmentos de reta, polígonos, etc (O'ROURKE, 1998).

Agora, imagine que temos um conjunto de pontos espalhados em uma superfície plana horizontal cercada por quatro lados, ou seja, esta superfície se encontra encerrada em um retângulo. Imagine, também, que cada ponto representa o centro de um pequeno disco. Assim, se indexarmos coordenadas x e y aos pontos, saberemos a localização exata do centro de cada disco. Em geometria computacional, estes pontos recebem o nome de *sítios*.

Dentro do escopo desta tese lidamos com material granular e, ao atribuirmos um raio para

cada sítio, teremos discos, ou grãos, distribuídos em uma superfície.

Podemos, agora, relacionar um polígono a cada sítio do nosso sistema. Sob determinadas condições esses polígonos formarão uma pavimentação do plano euclidiano.

Analisando o conjunto desses polígonos, que formam a pavimentação, ou recobrimento, do plano euclidiano, podemos obter um conjunto de dados referentes a:

- Distribuição de polígonos em função do número de lados;
- Distribuição de polígonos em função da área;
- Distribuição de polígonos em função do perímetro;
- Distribuição de polígonos em função do valor dos ângulos internos;
- Distribuição de sítios em função do número de primeiros vizinhos;
- Distribuição de sítios em função da distância entre primeiros vizinhos;

As provas dos teoremas e lemas citados nas próximas seções e subseções, e que foram omitidas, podem ser encontradas em (BERG et al., 2000), capítulo 7.

3.1.1 Tesselação (ou diagrama) de Voronoi

O modelo em que cada ponto *q* é atribuído ao sítio *p* mais próximo é chamado *modelo de atribuição de Voronoi*. A subdivisão induzida por este modelo é chamada de *tesselação (ou diagrama) de Voronoi* do conjunto de sítios (BERG et al., 2000).

O diagrama de Voronoi é uma estrutura geométrica versátil. Ele tem aplicações em física, astronomia, robótica, e muitos outros campos. Ele também está intimamente ligado a outra estrutura geométrica importante, a chamada *triangulação de Delaunay* (BERG et al., 2000). Para o momento, vamos nos limitar à discussão das propriedades básicas e à construção do diagrama de Voronoi a partir de um conjunto de sítios/pontos no plano.

3.1.2 Definição e propriedades básicas do diagrama de Voronoi

Definimos a distância euclidiana entre dois pontos p e q como sendo dist(p, q). No plano, temos

$$dist(p,q) := \sqrt{(p_x - q_x)^2 + (p_y - q_y)^2}$$
(22)

Seja $P := \{p_1, p_2, ..., p_n\}$ um conjunto de n pontos distintos no plano; estes pontos são os sítios. Definimos o diagrama de Voronoi de P como sendo a subdivisão do plano em n células, uma para cada sítio em P, com a propriedade de que um ponto q situa-se na célula correspondente a um sítio p_i se, e somente se, dist $(q, p_i) < \text{dist}(q, p_j)$ para cada $p_j \in P$

com $j \neq i$. Denotamos o diagrama de Voronoi de P por Vor(P). abusando ligeiramente da terminologia, vamos, às vezes, usar "Vor(P)" ou "diagrama de Voronoi" para indicar apenas as arestas e vértices da subdivisão. Quando dizemos que um diagrama de Voronoi é conexo significa que a união de suas arestas e vértices forma um conjunto conexo. A célula de Vor(P) que corresponde a um sítio p_i é denotada por $v(p_i)$ e nós a chamamos de célula de Voronoi de p_i (BERG et al., 2000). Em outras palavras, $v(p_i)$ é o polígono que circunscreve o sítio p_i ou, ainda, $v(p_i)$ é o lugar geométrico do plano que está mais próximo de p_i do que de qualquer outro sítio.

Inicialmente, vamos estudar a estrutura de uma única célula de Voronoi. Para dois pontos p e q no plano, definimos o bissetor de p e q como a mediatriz do segmento de reta \overline{pq} . Este bissetor divide o plano em dois semiplanos. Denotamos o semiplano aberto que contém p por h(p,q) e o semiplano aberto que contém q por h(q,p). Note que $r \in h(p,q)$ se, e somente se, dist(r,p) < dist(r,q) (BERG et al., 2000).



Figura 24 – Bissetor definindo dois semiplanos. Este bissetor divide o plano entre os pontos que estão mais próximos de p e os que estão mais próximos de q.

Para construir o diagrama de Voronoi basta encontrar o conjunto dos pontos que estão mais próximos de p_i do que de qualquer outro sítio, e para isto usamos a interseção de todos os semiplanos $h(p_i, p_j)$. Assim, a célula de Voronoi, $v(p_i)$, contendo o sítio p_i é dada por

$$v(p_i) = \cap_j h(p_i, p_j) \tag{23}$$

Onde podemos entender a notação do lado direito da Equação 23 como sendo a interseção entre os semiplanos que dividem os sítios $p_i \in p_j$, fixando-se *i* e fazendo *j* passar por todos os outros n - 1 sítios do plano, tendo em mente que o total de sítios é *n*, incluindo o ponto p_i .

É claro que, como a Figura 25 mostra, parte do nosso trabalho pode ser poupado, ou seja, alguns dos sítios relativamente distantes de p_i não têm qualquer influência sobre a célula de Voronoi de p_i . Na verdade, quando existe um grande número de sítios, seria de se esperar

que a célula de Voronoi de um ponto particular seja determinada por, relativamente, poucos outros sítios.



Figura 25 – Célula de Voronoi representada pela área sombreada, contendo o síto p_i e formada pela interseção de todos os semiplanos $h(p_i, p_j)$, mantendo-se p_i fixo e variando P_j entre os n-1 sítios restantes

Fonte: http://www.ams.org/samplings/feature-column/fcarc-voronoi - Acesso em: 6 ago. 2020.

Assim, o diagrama de Voronoi é uma subdivisão planar cujas fronteiras, ou arestas, são linhas retas. Algumas destas arestas são segmentos de linha e outras são semirretas. A menos que todos os sítios sejam colineares não haverá arestas que sejam retas inteiras.

Teorema:

Seja P um conjunto de n sítios no plano. Se todos os sítios são colineares, então Vor(P) é constituído por n - 1 retas paralelas. Caso contrário, Vor(P) é conexo e suas arestas são segmentos de linha ou semirretas.

Teorema:

Para $n \ge 3$, o número de vértices no diagrama de Voronoi de um conjunto de n sítios no plano é, no máximo, 2n - 5 e o número de arestas é, no máximo, 3n - 6.

No diagrama de Voronoi, as arestas são segmentos de linha dos bissetores de pares de sítios e os vértices são pontos de interseção entre esses bissetores. Há um número quadrático de bissetores, ao passo que a complexidade do Vor(P) é apenas linear. Por isso, nem todos os bissetores definirão arestas de Vor(P) e nem todas as interseções serão vértices de Vor(P).

Se usarmos o método até agora descrito, quando tivermos n sítios, precisaremos considerar os outros n - 1 sítios para encontrarmos a célula de Voronoi de um sítio determinado. Uma vez que cada sítio tem a sua própria célula de Voronoi, precisaremos construir n células de Voronoi, o que exigiria construir $n(n-1) = n^2 - n \approx n^2$ semiplanos. Com isto, estaríamos fazendo muito trabalho desnecessário, uma vez que os sítios mais afastados não influenciam na célula de Voronoi de determinado sítio. Este argumento justifica também a afirmação de um número quadrático de bissetores no parágrafo anterior, ou seja, tendo-se um número quadrático de semiplanos teremos também um número quadrático de bissetores, (BERG et al., 2000).

Para distinguirmos quais bissetores e interseções caracterizam o diagrama de Voronoi fazemos a seguinte definição: determinaremos o maior círculo vazio de certo ponto q, em relação a P, denotado por $C_P(q)$, como o maior círculo com centro em q e que não contém qualquer sítio de P em seu interior (somente no limite da circunferência). O teorema a seguir caracteriza os vértices e arestas do diagrama de Voronoi.



Figura 26 – Maior círculo vazio centrado em *q*. O maior círculo vazio contendo 3 ou mais sítios em seu limite é condição para se achar os vértices de Voronoi.



Teorema:

O diagrama de Voronoi, Vor(P), de um conjunto de pontos P obedece às seguintes diretrizes, Figura 27:

- 1. Um ponto q é um vértice de Vor(P) se, e somente se, seu maior círculo vazio $C_P(q)$ passa por três ou mais sítios em seu limite.
- 2. O bissetor entre os sítios $p_i e p_j$ define uma aresta de Vor(P) se, e somente se, houver um ponto q sobre ele (bissetor) tal que $C_P(q)$ contém tanto p_i quanto p_j em seu limite, mais nenhum outro sítio.

3.1.3 Construindo o diagrama de Voronoi

De acordo com o que vimos até agora, uma maneira simples de construir o diagrama de Voronoi é a seguinte: para cada sítio p_i , calculamos a interseção comum dos semiplanos $h(p_i, p_j)$, com $j \neq i$. Desta forma, chegaremos a um algoritmo $\approx O(n^2)$, conforme explicado



Figura 27 – Diretrizes do diagrama de Voronoi. O ponto não preenchido de preto, no centro do círculo que, em seu perímetro, possui três pontos preenchidos (três sítios), constitui um vértice de Voronoi e, o ponto não preenchido de preto, no centro do círculo que, em seu perímetro, possui dois pontos preenchidos (dois sítios), constitui um ponto sobre uma aresta de veronoi.

Fonte: BERG et al., 2000

anteriormente, para calcular todo o diagrama de Voronoi. No entanto, a construção do diagrama pode ser mais rápida, haja vista a existência de algoritmos mais eficientes.

Neste trabalho descrevemos, dois dos mais eficientes algoritmos para a construção do diagrama de Voronoi: o algoritmo de Divisão e Conquista e o algoritmo de Varredura do Plano, ou Algoritmo de Fortune. Este último é descrito no Apêndice.

3.1.4 Algoritmo de divisão e conquista

Quando lidamos com uma quantidade grande de pontos, digamos, em torno de 3700, que é o nosso caso, a construção do diagrama (ou tesselação) de Voronoi, com um custo computacional $\approx O(n^2)$, leva um tempo físico relativamente grande.

(SHAMOS; HOEY, 1975) apresentaram o primeiro algoritmo determinístico com custo $\mathcal{O}(n \log n)$ para o cálculo do diagrama de Voronoi no plano. A estratégia adotada por Shamos e Hoey foi a utilização do paradigma da Divisão e Conquista. Este paradigma é considerado um dos fundamentais em projetos de algoritmos eficientes.

Na técnica de divisão e conquista, o problema original é recursivamente dividido em vários subproblemas mais simples, de tamanhos, aproximadamente, iguais. A solução do problema original é conseguida mesclando-se as soluções dos subproblemas.

Na abordagem de Shamos e Hoey, um conjunto de sítios, S, é repartido por uma linha divisória, Figura 28, em dois subconjuntos, S_L e S_R , de, aproximadamente, mesmo tamanho.



Figura 28 - Divisão do conjunto de sítios

Fonte: http://sweet.ua.pt/leslie/Geocomp/Slides/GC_09_10_7_Diagramas_Voronoi.pdf - Acesso em: 6 ago. 2020.

Em seguida, o diagrama de Voronoi, $Vor(S_L)$, do subconjunto S_L e o diagrama de Voronoi, $Vor(S_R)$, do subconjunto S_R , são computados recursivamente, Figura 29.



Figura 29 – Diagramas de Voronoi de dois subconjuntos. À esquerda da cadeia divisória azul, em vermelho, temos o diagrama de S_L e à direita da cadeia divisória, em preto, temos o diagrama de S_R

Fonte:

http://www.personal.kent.edu/~rmuhamma/Compgeometry/MyCG/Voronoi/DivConqVor/divConqVor.htm - Acesso em: 11 set. 2015.

Na Figura 30, podemos ver a mesclagem dos dois subdiagramas.

O algoritmo de divisão e conquista, VORONOI_DIAGRAM, pode ser visualizado a seguir.



Figura 30 – Mesclagem de dois subdiagramas. Na mesclagem, exluímos as indesejadas linhas vermelhas (tracejadas) à direita da cadeia divisória azul e, também, as indesejadas linhas pretas (tracejadas) à esquerda da mesma cadeia divisória.

Fonte:

http://www.personal.kent.edu/~rmuhamma/Compgeometry/MyCG/Voronoi/DivConqVor/divConqVor.htm - Acesso em: 11 set. 2015.

Note que a união dos diagramas separados é feita pelos algoritmos MERGE_VORONOI e LOWER_COMMON_SUPPORT, mostrados mais à frente.

A parte principal do algoritmo consiste em encontrar uma linha divisória, calcular os subdiagramas e mesclar $Vor(S_L)$ e $Vor(S_R)$ para obter Vor(S), do conjunto original S.

Segundo Aurenhammer, (AURENHAMMER, 1991), calcular a linha divisória e mesclar dois subdiagramas leva um tempo $\mathcal{O}(n)$, desta forma, o tempo total será $\mathcal{O}(n \log n)$, da relação de recorrência $T(n) = 2T(n/2) + \mathcal{O}(n)$.

O cálculo das linhas divisórias é simples, a partir de uma recursão, caso os sítios estejam ordenados de antemão. Algoritmos como *heap sort* ou *merge sort* fazem esta tarefa em tempo $O(n \log n)$ (CORMEN, 2002).

Mesclando os diagramas de Voronoi

O passo da mesclagem envolve calcular o conjunto de bissetores perpendiculares dos conjuntos S_L e S_R , isto é, $B(S_L, S_R)$, de todas as arestas de Voronoi de Vor(S) que separam os sitios em S_L das regiões dos sítios em S_R . A ideia de mesclagem baseia-se no

Algoritmo 1: VORONOI_DIAGRAM - Algoritmo de Divisão e Conquista para o cálculo do diagrama de Voronoi.

Input: Um número n > 3 de sítios com uma lista $S = \{s_1, ..., s_n\}$ dos sítios em ordem crescente com respeito à coordenada x.

Output: O diagrama de Voronoi Vor(S).

1. Faça t a parte inteira de n/2 e divida S em $S_L = \{s_1, s_2, ..., s_t\}$ e

 $S_R = \{s_{t+1}, s_{t+2}, \dots, s_n\}.$

2. Construa o diagrama de Voronoi $Vor(S_L)$ recursivamente.

3. Construa o diagrama de Voronoi $Vor(S_R)$ recursivamente.

4. Mescle $Vor(S_L)$ e $Vor(S_R)$ no diagrama de Voronoi Vor(S), isto é,

 $Vor(S) = Vor(S_L) \cup Vor(S_R)$ por meio do algoritmo MERGE_VORONOI.

5. Retorne Vor(S)

Fonte:

http://www.personal.kent.edu/ rmuhamma/Compgeometry/MyCG/Voronoi/DivConqVor/divConqVor.htm - Acesso em: 4 nov. 2015.

Algoritmo 2: MERGE_VORONOI - Sub-rotina do algoritmo de divisão e conquista, para o cálculo do diagrama de Voronoi.

Input: Diagramas de Voronoi $Vor(S_L)$ e $Vor(S_R)$

Output: Diagrama de Voronoi Vor(S)

1. Construa os fechos convexos de S_L e S_R .

2. Encontre a mais baixa linha suporte comum, $L(S_L, S_R)$ por meio do algoritmo LOWER_COMMON_SUPPORT.

3. $w_0 \leftarrow$ O ponto no infinito descendente sobre o bissetor perpendicular dos sítios $s_L \in S_L$ e $s_R \in S_R$, isto é, $B(S_L, S_R)$. $i \leftarrow 0$.

4.while $L(S_L, S_R)$ não é o suporte superior do

 $i \longleftarrow i+1$

Encontre o ponto de interseção de $B(S_L, S_R)$ com a fronteira de $V(s_L)$, isto é, a_L . Encontre o ponto de interseção de $B(S_L, S_R)$ com a fronteira de $V(s_R)$, isto é, a_R . if *A coordenada* y de a_L é menor do que a coordenada y de a_R then $w_i \longleftarrow a_L$

 $s_L \leftarrow$ sítios do outro lado da aresta de Voronoi contendo a_L .

end

else $w_i \leftarrow a_R$

 $s_R \leftarrow$ o sítio do outro lado da aresta de Voronoi contendo a_R .

end

end

5. $m \leftarrow i. w_{m+1} \leftarrow o$ ponto no infinito ascendente sobre o bissetor perpendicular de s_L , pertencente a S_L , e s_R , pertencente a S_R , isto é, $B(S_L, S_R)$.

6. Adicione a linha poligonal $(w_0w_1, w_1w_2, ..., w_mw_{m+1})$, e apague, de $Vor(S_L)$, a parte localizada à direita da linha poligonal. Apague, também, em $Vor(S_R)$, a parte localizada à esquerda da linha poligonal.

7. Retorne o diagrama de Voronoi resultante.

Fonte:

http://www.personal.kent.edu/~rmuhamma/Compgeometry/MyCG/Voronoi/DivConqVor/divConqVor.htm - Acesso em: 11 set. 2015. **Algoritmo 3:** LOWER_COMMON_SUPPORT - Sub-rotina do algoritmo de divisão e conquista, para o cálculo do diagrama de Voronoi.

Input: Dois polígonos convexos, P_L e P_R , de forma que o primeiro esteja completamente à esquerda do segundo.

Output: Um par, consistindo do vértice u pertencente a P_L e do vértice v pertencente a P_R , de forma que L(u, v) forma o suporte comum inferior dos polígonos P_L e P_R

1. Encontre o vértice u, com a maior coordenada x, pertencente a P_L e o vértice v,com a menor coordenada x, pertencente a P_R .

2. Repetir os subpassos 2.1 e 2.2, alternadamente.

2.1.while próximo vértice[u] é menor que L(u, v) do | Repita $u \leftarrow$ próximo[u] end 2.2.while próximo vértice[v] é menor que L(u, v) do

| Repita $v \leftarrow \text{próximo}[v]$

end

3. Retorne L(u, v).

Fonte: http://www.personal.kent.edu/~rmuhamma/Compgeometry/MyCG/Voronoi/DivConqVor/divConqVor.htm - Acesso em: 11 set. 2015.

fato de que as arestas de $B(S_L, S_R)$ formam uma única cadeia poligonal monótona em y.

Lema:

As arestas de $B(S_L, S_R)$ formam uma cadeia poligonal única monótona em y. Em Vor(S), as regiões de todos os sítios em S_L estão à esquerda de $B(S_L, S_R)$, ao passo que, as regiões dos sítios de S_R estão à sua direita.

Prova. Seja *b* uma aresta arbitrária de $B(S_L, S_R)$, e sejam $l \in S_L$ e $r \in S_R$ os sítios cujas regiões são adjacentes a *b*. Visto que *l* tem uma coordenada x menor do que *r*, *b* não pode ser horizontal, e a região de *l* deve estar à sua esquerda, obedecendo o desenho da Figura 28.

Continuando, "costuramos" a parte de $Vor(S_L)$ à esquerda de $B(S_L, S_R)$ junto à parte de $Vor(S_R)$ à direita de $B(S_L, S_R)$ para obtermos Vor(S).

A "costura" se inicia com o cálculo de uma aresta inicial, que chega do infinito e, a partir dela, construiremos a cadeia poligonal $B(S_L, S_R)$ em função dos bissetores dos sítios, $l \in r$, vizinhos, na região de encontro dos dois diagramas de Voronoi, $Vor(S_L) \in Vor(S_R)$, que se unirão.

Esta aresta inicial é determinada por meio de uma linha tangente aos fechos convexos, Figura 31, de S_L e S_R , utilizando-se um tempo $\mathcal{O}(n)$ para isto.





Fonte: http://students.info.uaic.ro/~emilian.necula/vor2.pdf - Acesso em: 11 set. 2015.

Os passos para continuar a "costura" podem ser vistos na Figura 32 e na Figura 33, e o resultado final na Figura 34.

O algoritmo VORONOI_DIAGRAM nos leva, então, a um custo computacional $O(n \log n)$ no pior caso e requer espaço linear para o diagrama de Voronoi de *n* sítios no plano. Existem muitas variações para a abordagem de divisão e conquista clássica apresentada por (SHAMOS; HOEY, 1975). Como exemplos, podemos citar (GUIBAS; STOLFI, 1985) e (DWYER, 1987).

Podemos inscrever o diagrama de Voronoi em uma caixa, com a finalidade de tratar as arestas que se estendem ao infinito, ou seja, limitando-as. Porém, podemos optar por



Figura 32 – "Costurando" a cadeia poligonal $B(S_L, S_R)$. (a) A mediatriz de $p \in q$ vinda do infinito, intersecta uma reta de $Vor(S_2)$, sendo assim, atualiza-se o ponto q, ou seja, o ponto q passa a ser o sítio azul (de $Vor(S_2)$) abaixo do ponto qanterior. Este novo ponto q deve ocupar um polígono fechado ou "aberto" que ultrapassa a linha vertical de separação de $Vor(S_1) \in Vor(S_2)$, caso contrário, atualiza-se o ponto p, que passa a ser o sítio laranja (de $Vor(S_1)$) abaixo do ponto p anterior e que também ocupe um polígono fechado ou "aberto" que ultrapassa a mesma linha de separação citada anteriormente. (b) Com o ponto q atualizado, calcula-se a nova mediatriz entre $p \in q$ e, caso ela intersecte uma reta de $Vor(S_1)$, atualiza-se o ponto p, caso contrário, atualiza-se o ponto q. Procedemos assim até o fim dos fechos.

Fonte: http://sweet.ua.pt/leslie/Geocomp/Slides/GC_09_10_7_Diagramas_Voronoi.pdf - Acesso em: 6 ago. 2020.

outro artifício no intuito de tornar o diagrama manipulável, excluir as arestas que divergem, Figura 35. A escolha do método fica a critério do usuário, pois tanto um quanto outro faz aproximação do sistema real, que possui semirretas. Podemos não só eliminar as semirretas como também as retas que descrevem polígonos de tamanho muito maior que os polígonos do interior do sistema.

3.1.5 Python (Pyhull®/Qhull®) na obtenção dos diagramas de Voronoi

Descrevemos, anteriormente, um algoritmo que calcula o diagrama de Voronoi em tempo otimizado ($O(n \log n)$ para o pior caso: o Algoritmo de Divisão e Conquista.

Salientamos, também, a existência de outros algoritmos para a construção do diagrama, porém, com custos computacionais muito mais elevados, o que torna a obtenção de dados algo muito improdutivo. Como exemplos, podemos citar o *Naive Algorithm*, com uma complexidade de tempo $\mathcal{O}(n^2 \log n)$ e o *Incremental Algorithm*, cuja complexidade, no pior caso é $\mathcal{O}(n^2)$. (OKABE et al., 2009)



Figura 33 – Sequência da "Costura" da cadeia poligonal $B(S_L, S_R)$.

Fonte: http://sweet.ua.pt/leslie/Geocomp/Slides/GC_09_10_7_Diagramas_Voronoi.pdf - Acesso em: 6 ago. 2020.





Fonte: http://sweet.ua.pt/leslie/Geocomp/Slides/GC_09_10_7_Diagramas_Voronoi.pdf - Acesso em: 6 ago. 2020.

Se, por um lado, os algoritmos otimizados são um ganho em termos de complexidade temporal, por outro, a implementação deles se torna muito mais sofisticada e difícil do que a dos algoritmos com baixo desempenho. Sendo assim, a implementação desses



Figura 35 – Exclusão das semirretas e dos polígonos de áreas muito maiores que as do interior do sistema. (a) Diagrama com semirretas e polígonos de áreas muito maiores do que as áreas dos polígonos do interior do sistema. (b) Diagrama sem semirretas e somente com poligonos com áreas aproximadamente do tamanho das áreas dos polígonos do interior do sistema.

algoritmos eficientes se torna um agravante dificultador para pesquisadores inexperientes em relação à atividade de programar. Felizmente, há, disponível ao público em geral, via internet, soluções para programação, cujos códigos são abertos e disponíveis a qualquer um.

Dentro desta perspectiva, a linguagem de programação denominada **Python** é uma linguagem de alto nível, interpretada, imperativa, orientada a objeto e com uma vasta biblioteca de funções:

> A linguagem Python foi lançada por "Guido Van Rossum" em 1991. Atualmente possui um modelo de desenvolvimento comunitário, aberto e gerenciado pela organização sem fins lucrativos **Python Software Foundation**. Apesar de várias partes da linguagem possuírem padrões e especificações formais, a linguagem como um todo não é formalmente especificada. O padrão de fato é o CPython (que é a implementação principal da linguagem de programação Python, escrita em Linguagem C). Python é, provavelmente, a primeira linguagem a tentar atingir, ao mesmo tempo, iniciantes em programação, profissionais e cientistas da computação. Para iniciantes,

a linguagem oferece a simplicidade, interatividade e várias bibliotecas inclusas, permitindo que seja possível criar algo interessante e utilizável com grande facilidade. Aos profissionais, Python permite a criação de algoritmos complexos de forma simples e legível, permitindo a fácil manutenção do código. Para os cientistas da computação, a possibilidade de utilizar múltiplos paradigmas, possuir muitas bibliotecas e ser facilmente legível, tornam o Python uma excelente opção <<u>https://pt.wikipedia.org/wiki/Python</u>> (Acesso em: 14 set. 2015).

Uma dentre as várias ferramentas da biblioteca padrão do Python que nos chamou a atenção foi o **Pyhull**®, que é um *wrapper* (encapsulamento, em português), Python, do **Qhull**® (código explicado mais adiante). Vide <<u>http://www.qhull.org/</u>> Acesso em: 14 set. 2015.

A finalidade do Pyhull® é o cálculo de fecho convexo, triangulação de Delaunay e diagrama de Voronoi. É escrito como uma extensão Python/C.

O Pyhull[®] foi testado em uma escala de 10.000 pontos, 7D, para cálculos de fecho convexo (resultados em \approx 10 segundos), e 10.000 pontos, 6D, para triangulações Delaunay e tesselações de Voronoi (\approx 100 segundos) <<u>https://pypi.python.org/pypi/pyhull</u>> Acesso em: 14 set. 2015.

Para maiores detalhes, acesse os seguintes sítios:

- <https://pypi.python.org/pypi/pyhull>;
- <https://github.com/materialsvirtuallab/pyhull>;
- <https://pythonhosted.org/pyhull/>.

O Qhull®, citado anteriormente, é um código de dimensão geral para calcular fechos convexos, triangulações de Delaunay, interseção de semiplanos sobre um ponto, diagramas de Voronoi, sítios mais distante em triangulações de Delaunay, e sítios mais distante em diagramas de Voronoi. Estas estruturas têm aplicações em ciências, engenharia, estatística e matemática.

O código Qhull® é escrito em C e combina o algoritmo Quickhull bidimensional com o algoritmo de dimensão geral Beneath-Beyond (PREPARATA; SHAMOS, 2012). É similar ao Algoritmo Incremental Aleatório, (CLARKSON; SHOR, 1989), (MULMULEY, 1994), para fechos convexos e triangulações de Delaunay, (BARBER; DOBKIN; HUHDANPAA, 1996).

O algoritmo Quickhull foi assim batizado por Preparata e Shamos devido sua semelhança com o algoritmo Quicksort. Assim, ambos, Quickhull e Quicksort, pertencem à classe de técnicas de projeto de algoritmos chamada Divisão e Conquista.

Para fechos convexos e interseções de semiplanos, Qhull® pode ser usado para sistemas de 2D a 8D. Para obter os diagramas de Voronoi e as triangulações de Delaunay, Qhull® pode ser utilizado em sistemas de 2D até 7D. Em dimensões mais elevadas o tamanho da saída cresce rapidamente e o Qhull® não funciona bem com memória virtual.

Informações detalhadas sobre o Qhull® podem ser encontradas em <<u>http://www.qhull.org/html/</u>>, (SKIENA, 1998).

Os interessados em baixar e utilizar/estudar o código Qhull®, completo, para sistemas operacionais diversos podem encontrá-lo em: <<u>http://www.qhull.org/download/></u> Acesso em: 14 set. 2015.

Desta forma, tendo em vista as facilidades de programação em Python e os já comprovados resultados das ferramentas Pyhull®/Qhull®, optamos por implementar o algoritmo utilizando esta linguagem (Python), fazendo uso das ferramentas nela existentes e que facilitam enormemente o processo da pesquisa.

3.2 Materiais granulares e dinâmica newtoniana clássica

3.2.1 Sistema granular bidimensional perturbado por intruso

Como dito no Capítulo 1, na indústria, há, atualmente, vários processos que envolvem armazenamento, fluxo e transporte de materiais granulares. Para se ter uma ideia, eles são o segundo tipo de material mais manipulado nas indústrias, perdendo apenas para a água, (DURAN; BEHRINGER, 2001) e (RICHARD et al., 2005). Em vista disso, a ocorrência de entupimentos em equipamentos que trabalham com grãos é um fato indesejado e muitas vezes dispendioso (LIU; NAGEL, 1998).

Tais entupimentos estão relacionados a possíveis transições de um estado fluido para um estado sólido (ou engarrafado), o qual pode ser caracterizado por uma estabilidade mecânica, uma resistência finita ao cisalhamento e à deformação isotrópica. Esta estabilidade, em sólidos cristalinos, se deve a uma ordem de longo alcance, mas em sistemas granulares ainda não há um consenso sobre a dinâmica das cadeias de força, que são os mecanismos que mantêm a estabilidade do sistema. (MAJMUDAR et al., 2007).

Há situações, porém, como o armazenamento de grãos em silos, em que esta estabilidade é benéfica. A quebra desta estabilidade ocasiona uma dinâmica ainda por ser explicada e pode promover situações indesejadas como o colapso de silos, como visto na Figura 36.

Os argumentos que acabamos de apresentar são justificativas claramente suficientes para que nos interessemos em estudar a possível transição de fase que ocorre nos sistemas granulares, isto é, o fenômeno que representa a passagem de um estado fluido para um



Figura 36 – Colapso de silo de armazenamento de material granular. As causas da dinâmica que levam ao colapso de silos que armazenam materiais granulares são diversas e controversas, não havendo ainda uma explicação geral para o problema.

Fonte: http://www.phy.duke.edu/ bob/ Acessado em: 8 fev. 2017.

estado engarrafado. Não podemos esquecer de mencionar que esses sistemas também podem se apresentar em um estado semelhante ao gasoso, por exemplo, quando carregados pelo vento, Figura 37.



Figura 37 – Nuvem de poeira. Esta nuvem de poeira partiu do continente africano e atravessou o oceano Atlântico em direção ao continente americano (estendendo-se, mais significativamente, do golfo do México à amazônia). Este é um exemplo de material granular comportando-se como material gasoso.

Fonte: http://earthsky.org/earth/dust-from-africa-arrives-in-florida-july-19 Acessado em: 6 ago. 2020.

A partir destas observações, nos propusemos a estudar a reologia de sistemas granulares por meio da imersão de um objeto no fluxo granular. Historicamente esta foi a forma pela qual os cientistas iniciaram os estudos da força de arrasto, escoamento em fronteiras, turbulência *etc.* em fluidos mecânicos, (KOLB et al., 2013). Ressaltamos que quando uma bandeja contendo grãos (com uma fração de empacotamento relativamente pequena) se move contra um intruso fixo, temos uma transição de fase local para os grãos que oferecem resistência à frente do intruso. Estes grãos, que a princípio mostram um comportamento local parecido com um sistema sólido, desfazem as estruturas de cooperação que oferecem a resistência ao intruso e se fluidificam, passando para um estado semelhante a um líquido local.

Sendo assim, simulamos a perturbação, por um intruso, de um sistema bidimensional e bidisperso de grãos localizados em uma bandeja delimitada por paredes retangulares, Figura 38(a). Calculamos a tesselação de Voronoi, Figura 38(b), desse sistema, em momentos distintos e analisamos o comportamento do polígono do intruso e dos polígonos que se formaram na cavidade.



(a)

(b)

Figura 38 – Sistema granular bidimensional e bidisperso, perturbado por um intruso. Em (a) A circunferência maior representa o intruso, o espaço atrás do intruso é a cavidade, as linhas vermelhas representam as cadeias de forças do sistema, as setas externas indicam o movimento da bandeja e a seta sobre o intruso, apesar de este ser fixo, indica o seu "deslocamento relativo" com referencial na caixa . Em (b) temos, em laranja os grãos, em azul o intruso e a tesselação de Voronoi de uma pequena região próxima ao intruso. Obs: as duas figuras retratam o sistema em momentos diferentes.

O programa utilizado simula o movimento da bandeja, juntamente com seus grãos, em detrimento ao intruso que permanece parado, (ATMAN et al., 2013). Desta forma, aparece uma cooperação de grãos na frente deste intruso ocoasionando o fenômeno de engarrafamento e desengarrafamento. Ocorre também o surgimento de um espaço vazio atrás do intruso, chamado cavidade.

Inicialmente, os grãos, cujos raios eram $r_{max} \approx 1.7 r_{min}$, possuiam velocidades aleatórias. r_{max} e r_{min} são os raio máximo e raio mínimo, respectivamente. Uma importante observação é que utilizamos unidades normalizadas para os valores de todos os parâmetros. Por exemplo, a largura do sistema é $L_0 = 1$ UCN, uma unidade de comprimento normalizado. Já $r_{min} \approx$ $8, 7 \times 10^{-3} L_0$ UCN. Para uma definição mais precisa sobre unidades normalizadas veja a referência (ATMAN; CLAUDIN; COMBE, 2009). Os grãos de raio mínimo representavam 4/7 do total de grãos, o diâmetro do intruso era 4 vezes maior que o grão de maior raio. A posição inicial do intruso era em 1/4 do comprimento da caixa e a sua posição final era em 3/4 do mesmo comprimento.

Preparamos 5 amostras, com 3.200 grãos, e, em cada uma, simulamos 12 diferentes frações de empacotamento ϕ . Estas frações variaram de $\phi = 0,75\%$ até $\phi = 0,84\%$. O intervalo de tempo das simulações variou de 0 a 100.000 passos de tempo. Coletamos dados de 100 tesselações de Voronoi de cada ϕ , ou seja, a cada 1.000 passos de tempo extraíamos os resultados. Com isto, examinamos os dados de 6.000 tesselações.

Analisamos, em cada ϕ , durante o movimento da bandeja, as distribuições estatísticas das áreas e do número de lados dos polígonos, bem como o tamanho da soma das áreas dos polígonos da cavidade e do intruso. Analisamos também, de forma isolada, o número de lados do polígono do intruso. Outros importantes parâmetros observados foram a força de resistência ao escoamento resultante sobre o intruso e a taxa de variação desta força em relação ao tempo.

3.2.2 Sistema granular bidimensional por deposição

Continuando os estudos, já bastante justificados na subseção anterior, sobre fenômenos e características de materiais granulares, comentaremos, agora, a proposta da metodologia "função resposta à tesselação de Voronoi - VTRF" para a obtenção da "função resposta às tensões - SRF".

O estudo de tensões em pilhas granulares estáticas é de interesse junto às técnicas de construção civil tendo em vista que o solo pode ser considerado como um sistema granular sujeito à sobrecarga quando suporta uma construção. São de interesse, também, para as técnicas de estabilidade de encostas, muros de gabião, represas *etc*, (DURAN; BEHRINGER, 2001).

As propriedades estáticas de grupamentos granulares são assunto de grande interesse para pesquisadores em diferentes áreas, como geologia, engenharia civil, física, *etc* (HER-

RMANN; HOVI; LUDING, 2013) e (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013). Uma característica chave nestes materiais é a dependência da história, isto é, suas propriedades podem ser diferentes dependendo do procedimento utilizado ao longo da preparação da montagem do grupamento. Quando uma pilha granular é construída ao despejar areia de uma fonte pontual, com ajuda de uma tremonha, por exemplo, um particular perfil de pressão pode ser observado na parte inferior da camada. O perfil de tensão, neste caso, apresenta dois picos, exibindo um "mergulho" central exatamente abaixo do ápice da pilha (ŠMID; NOVOSAD, 1981) e (BROCKBANK; HUNTLEY; BALL, 1997). Caso contrário, construindo uma pilha granular com uma peneira, em analogia a uma "chuva"de grãos, esse "mergulho" central desaparece, e observamos uma protuberância central no perfil de tensão (VANEL et al., 1999).

Outro efeito interessante no perfil de tensão medido no fundo de uma camada granular está relacionado ao ordenamento do grupamento. Para amostras ordenadas (tipicamente compostas por grãos monodispersos), o perfil de tensão exibe uma estrutura de pico duplo, enquanto para grupamentos (polidispersos), é sempre obtido um único pico (GENG et al., 2001) e (GENG et al., 2003). Essas observações intrigantes levaram os pesquisadores a procurarem abordagens alternativas para estudar esses materiais. Claramente, a distribuição de forças e tensões em pilhas estáticas de materiais granulares não é um problema simples e mostra uma forte dependência com o histórico de preparação das amostras (GENNES, 1999). Para ilustrar esse comportamento complexo, Goldenberg e Goldhirsch, (GOLDENBERG; GOLDHIRSCH, 2002), demonstraram que é possível passar de um único pico a uma resposta de pico duplo, variando o coeficiente de atrito.

Dentre essas abordagens, uma em particular foi aplicada com sucesso nos últimos anos para estudar a propagação de tensão em sistemas granulares e determinar os parâmetros elásticos de uma camada (ATMAN et al., 2013) e (ATMAN et al., 2014), a Função Resposta à Tensão - SRF (D. Serero et al., 2001) e (BOUCHAUD et al., 2002). Em suma, a SRF consiste em medir o perfil de tensão em resposta a uma pequena força de sobrecarga aplicada em um único grão em uma camada. A partir das variações na rede de forças de contato, devido a esta perturbação da força, é possível obter as componentes de tensão (ver (GOLDENBERG; GOLDHIRSCH, 2002)) e calcular as diferenças entre os perfis de tensão obtidos antes e depois da aplicação da sobrecarga. Tipicamente, a SRF é calculada no fundo de camadas de areia ou camadas granulares em experimentos (REYDELLET; CLÉMENT, 2001) ou estimado indiretamente usando análise de imagem de grãos fotoelásticos (GENG et al., 2003). Uma montagem experimental típica para realizar a medição da SRF em camadas granulares é mostrada no esquema da Figura 39.

Além disso, é possível construir um diagrama de fases dependendo de dois parâmetros elásticos reduzidos (OTTO et al., 2003), variando de propagação de tensão hiperbólica


Figura 39 – Esboço de uma configuração experimental típica para medir a função de resposta à tensão no fundo de uma camada granular. F é a magnitude de uma sobrecarga vertical aplicada na superfície da camada, h é a espessura da camada (direção z), r_h é a distância horizontal da sobrecarga até o sensor de força. L é o comprimento do sensor. O comprimento horizontal do sistema varia de x = -0, 5 a x = 0.5 NLU (unidade de comprimento normalizado).

(picos duplos) até propagação de tensão elíptica (pico único) (CATES et al., 1998), (GOL-DENBERG; GOLDHIRSCH, 2002) e (KASAHARA; NAKANISHI, 2004). Analogamente ao perfil de tensão, para camadas bem ordenadas de grãos monodispersos, a SRF apresenta dois picos, compatíveis com uma descrição hiperbólica de propagação de tensão (HEAD; TKACHENKO; WITTEN, 2001), similarmente ao caso de sólidos cristalinos. Caso contrário, para camadas desordenadas com material polidisperso, a SRF de pico único, compatível com a propagação elíptica, é observada. De fato, mesmo na situação desordenada, é possível observar a SRF de pico duplo para uma única realização, mas, após um adequado procedimento de cálculo de médias, a SRF deve exibir um único perfil de pico (BRETON et al., 2002). A SRF medida no fundo de camadas granulares com diferentes alturas *h* entrará em colapso em uma única curva quando normalizamos o comprimento do sistema por *h* e redimensionamos as forças com a magnitude da sobrecarga (MEHTA, 2007).

Para se calcular a SRF, obtendo informações das forças de contato em escala granular até uma descrição contínua em termos do campo de tensão, pode-se usar uma função de *coarse-graining*, por exemplo, uma função gaussiana ou uma função de Heaviside, (GOLDENBERG; GOLDHIRSCH, 2002) e (GOLDENBERG et al., 2006). Por meio desta última, é possível obter uma expressão analítica geral, Equação 24, para os componentes do tensor de tensões. Esta expressão é a conhecida Fórmula de Born-Huang, (MEHTA, 2007):

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\lambda}(\vec{r}) = \frac{1}{2V} \sum_{i,j;i\neq j} f_{ij\alpha} \ b_{ij\beta} = \frac{1}{V} \sum_{contatos \ c} f_{c\alpha} \ b_{c\beta}, \tag{24}$$

onde α e β representam as direções x, y ou z. As variáveis $f_{ij\alpha}$ e $f_{c\alpha}$ são as forças de contato e $b_{ij\beta}$ e $b_{c\beta}$ são conhecidos como *branch vectors*.

O fator $\frac{1}{2V}$ multiplicando a primeira soma está relacionado à superfície ocupada pelos grãos e a soma é tomada sobre todos os pares de partículas que têm pelo menos uma delas com seu centro de massa dentro da área V. A segunda soma é feita sobre todos os contatos entre pares de partículas, não há necessidade do fator 2 no denominador já que para cada contato há um par (i; j) de partículas que devem ser contadas apenas uma vez (CLAUDIN, 2007).



Figura 40 – *Branch vectors*. Podemos ver o volume de controle alongado, linhas tracejadas, para uma medição, do tipo fronteira, dos componentes de tensão σ_{zz} e σ_{zx} . Nesta figura, consideramos o grupo de grãos como um único objeto de centro de massa *G*. As linhas contínuas, em negrito, são os *branch vectors* \vec{b} (de alguns grãos) e os parâmetros λ_z e λ_x definem o "volume alongado", que em 2D é uma superfície. A linha vermelha sólida é a linha de referência. Por meio da figura podemos concluir que a componente b_z entre o centro *G* do grupo e os grãos superiores e inferiores em contato com a superfície de controle é $\frac{\lambda_z}{2}$ e $-\frac{\lambda_z}{2}$, respectivamente (CLAUDIN, 2007).

Tomando um volume alongado, Figura 40, contendo um grupo de grãos em contato, e considerando que o centro de massa deste grupo de grãos está dentro do volume alongado, esse grupo de grãos pode ser assumido como um objeto único de centro G. Esse volume terá o papel de um "sensor" para calcular as componentes de tensão. Desta forma, $\sigma_{z\alpha}^{\lambda}$, da Equação 24, se torna (CLAUDIN, 2007):

$$\sigma_{z\alpha}^{\lambda} = \frac{1}{\lambda_x \lambda_z} \sum_{contatos \ c} f_{c\alpha} b_{cz}, \tag{25}$$

Se este volume for grande o suficiente, o centro de massa G estará, razoavelmente, localizado em seu centro geométrico. Nesse caso, as componentes *z* dos *branch vectors* dos contatos acima e abaixo do centro G do sensor podem ser, aproximadamente, considerados como tendo o mesmo tamanho. Além disso, por construção, a largura do sensor na direção z é muito menor do que sua largura na direção x, ou seja, se $\lambda_z \ll \lambda_x$, a contribuição dos contatos laterais é insignificante. As medições de força são feitas quando o conjunto de grãos está em equilíbrio (veja, mais adiante, a definição de equilíbrio), quando a força total deve estar balanceada. Assim, a componente z dos *branch vectors* é $\lambda_z/2$ para os contatos acima e $-\lambda_z/2$ para os contatos abaixo. Como o volume está em repouso, a força total deve se equilibrar, ou seja, $\sum_c f_{c\alpha}^{up} = -\sum_c f_{c\alpha}^{down}$, de forma que teremos (CLAUDIN, 2007):

$$\sigma_{z\alpha}^{\lambda} = \frac{1}{\lambda_x} \sum_{contatos-acima \ c} f_{c\alpha},$$
(26)

Neste trabalho calculamos as componentes da SRF, $\sigma_{zz} \in \sigma_{zx}$. Os eixos $z \in x$ representam coordenadas cartesianas que coincidem com as direções normal (vertical) e tangencial (horizontal) da camada depositada. Como estamos trabalhando com sistema bidimensional e usando uma quantidade razoável de amostras para garantir a representatividade estatística, definimos:

$$\sigma_{zz}(x) = \left\langle \frac{1}{L} \sum_{x-L/2 \le \xi < x+L/2} \frac{f_{\xi}^{z,final} - f_{\xi}^{z,inicial}}{f_0} \right\rangle,\tag{27}$$

$$\sigma_{zx}(x) = \left\langle \frac{1}{L} \sum_{x-L/2 \le \xi < x+L/2} \frac{f_{\xi}^{x,final} - f_{\xi}^{x,inicial}}{f_0} \right\rangle,\tag{28}$$

Onde L (mesmo tamanho de λ_x) é a largura do sensor e f_0 é o módulo da sobrecarga. As componentes de força f^z e f^x são as componentes vertical e horizontal, respectivamente. A variável ξ é o índice que conta os contatos dos grãos, sobre o sensor, usados no cálculo. As palavras sobrescritas "inicial" e "final" se referem aos estados de equilíbrio antes e depois da aplicação da sobrecarga, respectivamente. Os *Brackets* indicam a média sobre todas as amostras e seus ensaios.

Nos cálculos usamos somente forças de contato de grãos cortados por uma linha de referência, isto é, somente grãos cortados pela linha que contém os sensores. O propósito desta linha de referência é definir a coordenada *z* onde a SRF será calculada. Esta definição permite medições de forças até mesmo nas regiões internas da camada, Figura 42. As forças usadas no cálculo de σ_{zz} são apenas aquelas que estão nos contatos acima da linha de referência que cruza o grão. As forças usadas no cálculo de σ_{zx} são aquelas que estão nos contatos do lado esquerdo do centro dos grãos cruzados pela linha de referência.

Como a geometria do sensor é alongada ao longo da direção x, apenas as componentes de tensão medidas ao longo desta direção, isto é, as componentes da direção z, têm

significância estatística. Estudos realizados por Goldenberg *et al.* (GOLDENBERG et al., 2006) mostram que a largura L, do sensor, necessária para uma boa representatividade estatística é da ordem de $(0.9\langle d \rangle \leq L \leq 6.0\langle d \rangle)$, onde $\langle d \rangle$ é o diâmetro médio dos grãos. Desta forma, arbitramos $L = 5.0\langle d \rangle$ como o comprimento de nosso sensor. Optamos por esta geometria para podermos realizar comparações com trabalhos anteriores que utilizaram a mesma geometria, e também devido à semelhança com os sensores experimentais. Assim, apenas σ_{zz} e σ_{zx} foram calculados, associados às componentes normal e de cisalhamento do tensor de tensão.

Estamos interessados em obter as componentes zz e zx da SRF de uma camada granular 2D depositada sob gravidade em uma superfície horizontal. Nesta tese propomos um método para se calcular a SRF a partir da função resposta à tesselação de Voronoi (VTRF). Consideramos, em nossa simulação, que uma sobrecarga aplicada provoca interpenetração entre os grãos e muda ligeiramente suas posições, inclusive de seus centros. Desta forma, ela também deforma os polígonos de Voronoi que englobam esses grãos, modificando, assim, suas áreas e posições de seus vértices. Quanto maior as forças normais, maior a interpenetração entre grãos e mais próximos serão seus centros. As simulações realizadas consideram forças de sobrecarga muito pequenas, de tal forma que não há rearranjos significativos nos sistemas estudados.

Neste limite, a camada pode ser considerada elástica e assumimos que existe uma relação direta entre SRF e VTRF, como será mostrado mais adiante. Como qualquer sobrecarga aplicada sobre um grão implica deslocamentos e regularização de forças de contato sobre o sistema, é razoável supor que os polígonos de Voronoi sejam deformados de maneira semelhante, alterando suas posições de vértices. Entretanto, como em sistemas reais as forças são funções não lineares das deformações das partículas e sabendo que a razão de Poison induz forças na direção transversal durante as deformações, essa aproximação pode ser menos válida em tais sistemas. Como a deformação dos polígonos em 2D pode ser reduzida à dilatação e compressão da área e à deformação por compressão e cisalhamento, pretendemos relacionar essas deformações geométricas com as componentes de tensão correspondentes.

Para calcular a VTRF, definimos duas equações ($\phi_{zz} \in \phi_{zx}$) análogas à Equação 27 e Equação 28,

$$\phi_{zz}(x) = \left\langle \frac{1}{L} \sum_{x-L/2 \le \xi < x+L/2} \frac{Z_{\xi}^{inicial} - Z_{\xi}^{final}}{h_0} \right\rangle,\tag{29}$$

$$\phi_{zx}(x) = \left\langle \frac{1}{L} \sum_{x-L/2 \le \xi < x+L/2} \frac{X_{\xi}^{inicial} - X_{\xi}^{final}}{h_0} \right\rangle,\tag{30}$$

onde L é o comprimento do sensor. As variáveis Z e X são as coordenadas z e as coordenadas x dos vértices. A variável ξ é o índice que conta os vértices dos polígonos que correspondem aos grãos que são considerados parte do sensor. A variável h_0 é a variação da coordenada z do centro do grão onde a sobrecarga é aplicada. Os sobrescritos "inicial" e "final" referem-se aos estados de equilíbrio antes e depois da aplicação da sobrecarga, respectivamente. Os *brackets* representam a média do conjunto. A Figura 41 ilustra os vétices dos polígonos dos grãos delimitados pela linha de referência. Em estrita analogia com o cálculo da SRF, consideramos apenas deslocamentos de vértices dos grãos delimitados pela linha de referência. Em estrita analogia com o cálculo do VTRF, uma vez que os polígonos de Voronoi dos grãos delimitados pelo sensor são adjacentes.



Figura 41 – Esta figura mostra um exemplo de variação das coordenadas dos vértices utilizados nos cálculos da VTRF. A linha vermelha representa a linha de referência. As linhas pontilhadas representam os polígonos antes de aplicarmos a sobrecarga. As linhas contínuas representam os polígonos após aplicarmos a sobrecarga. Em (a) os vértices (*i* variando de 1 a 8) são aqueles usados para calcular σ_{zz} . Em (b) os vértices (*i* variando de 1 a 10) são aqueles usados para o cálculo de σ_{zx} . Observe que os vértices 1 and 2 estão no lado esquerdo do centro do grão 1, os vértices 3 e 4 estão no lado esquerdo do centro do grão 2 e assim por diante.

Os sistemas estudados são camadas granulares estáticas preparadas por dois diferentes protocolos. Esses sistemas são a camada de deposição "Grão-a-Grão" ou GG e camada de deposição "Tipo Chuva" ou RL. Essas camadas são verticais, ou seja, são formadas pela deposição de grãos uns acima de outros. Pelo fato de esses sistemas serem não ergódicos

e não markovianos eles apresentam forte dependência com o método de preparação (dependência com a história de preparação), (ATMAN et al., 2005).

O primeiro sistema a ser estudado, GG, foi preparado depositando-se apenas um grão por vez, sem velocidade inicial, em posições aleatórias sobre a superfície da camada granular.

Já o segundo, o RL, foi preparado posicionando-se, inicialmente, todos os grãos em uma grade. Em seguida, esta grade é removida e os grãos caem, na superfície da camada, sob a ação da gravidade. O posicionamento dos grãos na grade é de tal forma que não há interpenetração entre eles (ATMAN et al., 2005).

Em ambos os casos, GG e RL, simulamos camadas com 3720 grãos polidispersos. Os raios dos grãos foram programados para estarem entre R_{min} e $R_{max} = 2R_{min}$.

Após a construção das camadas, calculamos as tesselações de Voronoi antes e depois da aplicação de uma sobrecarga na superfície delas (camadas). Construímos 5 amostras GG e 5 amostras RL. Para cada uma destas amostras, simulamos 30 ensaios com diferentes posições para a aplicação da sobrecarga, o que nos levou a análise de 310 tesselações. Após isto, tivemos que transladar as coordenadas x de todos os grãos dos sistemas de forma que a coordenada x dos grãos onde havíamos aplicado a sobrecarga coincidisse com x = 0. Adotamos este procedimento para que pudéssemos comparar todas as amostras com os resultados prévios, (ATMAN et al., 2005).

Os grãos localizados na superfície da camada granular podem produzir polígonos com áreas extremamente grandes em relação às demais áreas do sistema. Estes mesmos grãos podem produzir, inclusive, semiplanos na superfície. Estes semiplanos (ou "polígonos abertos") e as áreas anomalamente grandes são considerados efeitos de borda e são descartados do estudo dos sistemas.

Um importante conceito é o de número de coordenação (CN), que representa o número de contatos de determinado grão. Sabendo que cada grão permanece confinado em um polígono de Voronoi, definimos os vizinhos deste polígono como sendo todos os polígonos que compartilham uma aresta com ele. Assim, o número de vizinhos do polígono pode ser entendido como o número de lados deste polígono e, analogamente ao CN, podemos definir o número de coordenação de polígono (PCN) da tesselação de Voronoi, ou seja, o PCN é definido como o número de lados do polígono, o qual pode, inclusive, ser relacionado com o CN.

As tesselações de Voronoi desses sistemas de deposição (antes e depois da sobrecarga) somente foram calculadas após eles alcançarem um relativo equilíbrio estático. As condições ideias de equilíbrio para os sistemas são aquelas que obedecem à Equação 31 e à

Equação 32

$$\sum_{k=1}^{N_i} \vec{f}_{k/i} + m_i \vec{g} = \vec{0},$$
(31)

$$\sum_{k=1}^{N_i} R_i \hat{n}_{k/i} \times \vec{f}_{k/i} = \vec{0}.$$
(32)

Onde N_i é o número de vizinhos do grão i, o termo $\vec{f}_{k/i}$ é a força de contato de seu vizinho k, sua massa é m_i , seu raio é R_i , a aceleração da gravidade é \vec{g} e $\hat{n}_{k/i}$ é o vetor normal que aponta do centro do grão i para o centro do grão k.

Mas, sabendo que condições ideais são inalcançáveis, adotamos um critério de equilíbrio que se compõe de cinco testes que são aplicados a cada período de 100 passos de tempo: (1) o número de contatos perdidos/ganhados entre partículas durante o período é zero, (2) da mesma forma, o número de deslizes entre os contatos é zero, (3) a força integral, medida no fundo da camada é igual à soma do peso de todos os grãos (ou do peso dos grãos mais a sobrecarga aplicada no topo) dentro de uma tolerância, (4) todas as partículas devem ter no mínimo 2 contatos e, (5) a energia cinética total deve estar abaixo de limite muito pequeno, (ATMAN et al., 2005).

Figura 42 mostra um exemplo de uma tesselação de Voronoi de amostra GG.

A sobrecarga, de valor ($\approx 0.1 \times \langle m \rangle g$) foi aplicada em um grão da superfície superior da camada, em posição x aleatória. $\langle m \rangle$ é a massa média dos grãos e g é a aceleração da gravidade. Não houve mudanças significativas nos resultados quando usamos sobrecargas ligeiramente maiores.

No lado esquerdo da Figura 43 mostramos as forças de contato em resposta à aplicação de uma força extra na superfície superior de uma camada granular de sistema RL.

3.2.3 Características gerais das tesselações de Voronoi calculadas a partir de sistemas granulares sujeitos a sobrecarga

Para validar a técnica proposta, demonstramos nesta seção que a VTRF exibe linearidade, reversibilidade e aditividade, propriedades básicas necessárias para calcular uma resposta de tensão elástica. Nesta seção, consideramos apenas uma realização da VTRF, portanto, os resultados são mais ruidosos do que os mostrados na seção de resultados.

Aditividade. Consideramos duas realizações individuais de VTRF, $\phi_1 e \phi_2$, na Figura 44, e comparamos a resposta combinada com uma única realização de VTRF com duas forças



Figura 42 – Instantâneo de uma tesselação obtida de uma amostra GG. O nó contido em um polígono é representado, em nosso trabalho, pelo centro de massa do grão. Esta figura mostra parte de uma camada granular. As linhas pretas horizontais, contínuas, definem as posições z onde fazemos os cálculos da SRF e da VTRF. Os grãos em azul, cruzados pelas linhas pretas, são aqueles em que analisamos as forças e os polígonos de Voronoi. A primeira linha é chamada de base. Em laranja, temos os outros grãos do sistema. Na base, calculamos a SRF, a VTRF e o calibre. Assim, as VTRF das linhas acima da base são multiplicadas pelo calibre para se obter as SRF em cada posição.



Figura 43 – Distribuição física da sobrecarga. À esquerda temos as cadeias de força em resposta à sobrecarga aplicada na superfície superior de uma camada. Linhas pretas representam variações positivas da magnitude da sobrecarga (compressão), linhas vermelhas representam variações negativas (descompressão). Quanto mais grossa a linha, maior o valor da variação. À direita, mostramos as variações nas áreas dos polígonos. As cores preto e azul indicam compressão da área e a cor laranja descompressão da área. Quanto mais escura a cor do círculo ou disco que representa a célula de Voronoi, maior a variação no tamanho da área.

de sobrecarga aplicadas nas mesmas posições de ϕ_1 e ϕ_2 . O resultado mostra que a VTRF é aditiva em relação às sobrecargas aplicadas.

Reversibilidade. Neste teste, obtemos inicialmente a VTRF devido a uma única sobrecarga



Figura 44 – Acima, perfis VTRF, ϕ_{zz} , devido a sobrecargas aplicadas individualmente e devido a sobrecargas aplicadas concomitantemente. Abaixo, diferença entre as duas situações.



Figura 45 – Acima: perfis de VTRF calculados após a aplicação de uma sobrecarga (curva verde) e após a remoção dessa sobrecarga (teste de reversibilidade - curva rosa). ϕ_{+F} representa a VTRF devido à aplicação da sobrecarga e ϕ_{-F} representa a VTRF devido à remoção da sobrecarga. Depois que a sobrecarga foi removida, os vértices dos polígonos retornaram praticamente às posições originais. Abaixo, a soma dos dois perfis é aproximadamente zero, o que demonstra que o recurso de reversibilidade é válido para o VTRF.

aplicada ao sistema granular. Em seguida, removemos essa sobrecarga e aguardamos um novo equilíbrio. Depois disso, recalculamos o VTRF. Dessa forma, as variações das posições dos vértices dos polígonos ocorrem em direções opostas, considerando as duas



Figura 46 – Acima, os perfis da VTRF, ou seja, a variação das coordenadas *z* dos vértices do polígono como uma função de 3 sobrecargas diferentes. No gráfico da esquerda as sobrecargas são F, 4F e 8F. Abaixo, vemos que a diferença entre a VTRF da sobrecarga 8F/8 e a VTRF de F é aproximadamente zero.

situações. Com a aplicação da sobrecarga, os vértices se movem, por exemplo, para baixo e com a remoção da sobrecarga, eles retornam à posição inicial. Assim, a VTRF exibe reversibilidade, considerando a sobrecarga local, como atestado pelos valores muito pequenos da soma dos dois perfis, Figura 45.

Linearidade. Finalmente, testamos a linearidade da VTRF considerando sobrecargas com diferentes magnitudes, como mostrado na Figura 46. A notável linearidade observada nos perfis VTRF garante que cada realização seja uma resposta elástica à força aplicada.

Em resumo, todos os testes confirmaram as propriedades elásticas da camada granular por meio da VTRF, o que garante a validade desta técnica para estudar as propriedades mecânicas de montagens granulares.

Capítulo 4

Análise e Discussão dos Resultados

4.1 Sistema perturbado por intruso

Fizemos análises das distribuições estatísticas das áreas dos polígonos de Voronoi em 5 amostras diferentes. Obtivemos distribuições com ajustes gaussianos de dois picos, pois as amostras eram bidispersas, Figura 47. Analisamos as distribuições de áreas em 4 momentos distintos (25.000, 50.000, 75.000 e 95.000 passos de tempo) de $\phi = 76\%$. Não percebemos variação considerável entre os valores da média e da largura dos ajustes gaussianos para aqueles tempos. A mesma análise foi feita para $\phi = 79, 80.5$ e 82% e a conclusão foi a mesma de $\phi = 76\%$, ou seja, se fixarmos determinado ϕ e analisarmos os ajustes gaussianos das distribuições das áreas de todos os polígonos em cada diferente passo de tempo, não perceberemos diferença significativa em seus valores.

Em seguida fizemos uma comparação entre as médias dos ajustes gaussianos, Figura 48, entre os diferentes $\phi's$.

Nas análises estatísticas que fizemos para o número de lados dos polígonos verificamos que as flutuações da média e da largura gaussiana são pequenas o suficiente para serem desprezadas. A média fica bem próxima de 6 lados, ou seja, esta média se aproxima de um hexágono. Podemos ver um exemplo na Figura 49.

Os ajustes gaussianos das distribuições das áreas e do número de lados dos polígonos não mostraram um comportamento sugestivo de uma mudança de fase de engarrafamento, mas uma análise na frequência destas áreas nos indicou onde procurar este comportamento, Figura 50. Cabe lembrar que enquanto a bandeja se desloca contra o intruso uma pequena quantidade de polígonos com áreas relativamente grandes se forma por detrás do intruso, no rastro ou cavidade, e também no entorno do intruso. A Figura 51 mostra a diferença entre as áreas dos polígonos do intruso, da cavidade e dos demais grãos do sistema em 3 diferentes $\phi's$.



Figura 47 – Distribuição das áreas dos polígonos de Voronoi. $\phi = 76\%$ no passo de tempo 25.000. Temos a ocorrência de dois picos, pois a amostra é bidispersa. Em verde vemos, separadamente, os ajustes gaussianos das distribuições de áreas poligonais oriundas dos grãos menores e também dos grãos maiores. Em vermelho vemos uma distribuição conjunta das áreas poligonais, delineando os pontos exibidos pelo gráfico.



Figura 48 – Média das distribuições das áreas dos polígonos para cada ϕ . A letra (a) representa a média dos picos dos ajustes gaussiano das distribuições das áreas dos polígonos dos grãos menores e a letra (b) a média dos picos dos ajustes gaussianos das distribuições das áreas dos polígonos dos grãos maiores.

O gráfico da Figura 50 mostra que, para um dado sistema, os $\phi's$ exibem frequências semelhantes para a ocorrência de polígonos de áreas pequenas (fora da região do intruso e da cavidade) e uma grande divergência na ocorrência dos poucos polígonos de áreas maiores, nas regiões do intruso e da cavidade. Como estas áreas maiores somente ocorrem nos polígonos do intruso e na região da cavidade, passamos a analisar, separadamente, as



Figura 49 – Distribuição do número de lados dos polígonos. $\phi = 78\%$ no passo de tempo 25.000.Em vermelho vemos o ajuste gaussiano. As ocorrências relevantes são 5, 6 e 7 lados, sendo que a maior ocorrência é a de 6 lados.



Figura 50 – Frequência das áreas dos polígonos. Tempo de passo 95.000. Apenas uma das 5 amostras. Repare que somente conseguimos distinguir os diferentes $\phi's$ em função das poucas áreas de maior tamanho.

variações ocorridas nos polígonos desta região.

Voltaremos a analisar estas áreas em breve, mas antes falaremos um pouco sobre a força de resistência ao escoamento sofrida pelo intruso.

Tendo em vista que em nossa simulação um sistema de grãos espalhados no fundo de uma caixa, ou bandeja, se desloca contra um intruso, chocando os grãos contra ele, podemos



Figura 51 – Polígonos do intruso, da cavidade e dos demais grãos, em uma pequena região do sistema. (a) $\phi = 76\%$, 42.000 passos de tempo (b) $\phi = 79\%$, 40.000 passos de tempo e (c) $\phi = 83\%$, 36.000 passos de tempo. Repare que quanto maior o valor de ϕ , menor o número de polígonos de áreas grandes na região da cavidade.

inferir que este intruso sofre uma força de resistência ao escoamento durante este processo. Esta força, obviamente, se opõe ao movimento relativo entre o intruso e a bandeja e quanto maior esta força, maior a força, sobre o intruso, que a bandeja deverá fazer para continuar seu caminho. Sabendo disso, medimos a força de resistência ao escoamento sobre o intruso em todos os $\phi's$, partindo do passo 25.000 e findando no passo 95.000. O passo inicial foi escolhido de forma que o sistema esteja "termalizado", ou seja, de forma que as flutuações locais de forças se atenuem. A dinâmica do sistema também favoreceu a escolha daquele passo inicial, pois para $\phi's$ menores as forças oscilam muito perto de zero durante toda a simulação, já nos $\phi's$ maiores as forças oscilam de maneira não uniforme em tempo inferior a 25.000 passos de tempo. A Figura 52 mostra como variou a força de resistência ao escoamento sobre o intruso para alguns valores de ϕ .

No gráfico da Figura 52 vimos que, para $\phi < 81\%$, o intruso atravessa o sistema sem que a força sobre ele seja alterada, de forma significativa, visando vencer a força de resistência ao escoamento. Para estes valores, as flutuações da força de resistência ao escoamento são desprezíveis. Porém, para $\phi \ge 81\%$ a força sobre o intruso tem que aumentar, paulatinamente, caso contrário a força de resistência ao escoamento não será vencida e o sistema ficará estático. Este é um bom argumento para um parâmetro que nos mostre uma transição de fase de engarrafamento, ou seja, não há engarrafamento enquanto a taxa de variação da força de resistência ao escoamento é zero. Podemos, então, inferir que a fase engarrafada começa quando a inclinação da reta que representa a variação da força de resistência ao escoamento se torna maior que zero e inicia um crescimento. A inclinação da reta, que é uma função da taxa de variação da força em relação ao tempo, ou coeficiente angular, pode ser vista na Figura 53, juntamente com a força média de



Figura 52 – Evolução da força de resistência ao escoamento sobre o intruso. Em frações de empacotamento menos densas a força de resistência ao escoamento descreve um comportamento praticamente constante mas, em $\phi \geq 81\%$ é possível observar que a taxa de variação da força é diferente de zero e cresce com o aumento de ϕ .

resistência ao escoamento sobre o intruso.



Figura 53 – Coeficiente angular da curva da força de resistência ao escoamento e média do valor desta força. Em torno de $\phi = 80,5\%$ a taxa de variação da força de resistência ao escoamento muda de um comportamento constante e próximo de zero para um comportamento crescente. O mesmo ocorre com o valor médio da força de resistência ao escoamento. Isto representa forte indício de uma transição de fase de engarrafamento no ponto crítico $\phi_c \approx 80,5\%$.

A intenção deste trabalho é identificar a transição de fase de engarrafamento por meio da tesselação de Voronoi. Para verificar se os parâmetros da tesselação são confiáveis, deveremos compará-los a outros que representem esta transição. Sabendo disto e confiando que o gráfico da Figura 53 esteja exibindo tal transição, com uma fração crítica $\phi_c \approx 80, 5\%$, basta calcularmos os parâmetros da tesselação em função dos $\phi's$ e observar se algum deles descreve o mesmo ϕ_c comentado anteriormente.

Como justificado anteriormente, passamos a analisar os polígonos do intruso e da cavidade. Primeiramente, estudamos a soma das áreas dos polígonos da cavidade e da área do polígono do intruso. Na figura Figura 54 podemos ver a evolução temporal da soma das áreas para alguns valores de ϕ .





Figura 54 – Evolução da soma das áreas dos polígonos da cavidade e do polígono do intruso. Note que os $\phi's$ menores crescem muito e demoram a alcançar um "equilíbrio" em torno do qual oscilam. Já os $\phi's$ maiores crescem pouco e alcançam, cedo, um valor de equilíbrio em torno do qual oscilam. As linhas horizontais contínuas representam o intervalo de tempo em que consideramos alguns valores de ϕ oscilando em torno de uma linha de equilíbrio. As linhas horizontais tracejadas representam o aproximado valor das linhas de equilíbrio sobre o qual a área dos polígonos flutua. Ac é a soma das áreas dos polígonos da cavidade mais do polígono do intruso. Ap é a soma padrão. Como já tínhas indícios, observados na Figura 53, de que $\phi_c \approx 80, 5\%$, utilizamos a soma das áreas dos polígonos da cavidade mais do polígono do intruso. Ap=Ac_{$\phi=80.5\%$}.

A Figura 54 mostra que a soma das áreas dos polígonos da cavidade e do polígono do intruso flutua em torno de um valor cada vez menor à medida em que aumentamos o valor de ϕ . Este comportamento acontece até $\phi = 80\%$. A partir de $\phi = 81\%$ a referida soma toma

valores aproximadamente constantes. Então, a mudança de comportamento ocorreu no intervalo $80\% < \phi < 81\%$. Observando o gráfico da Figura 55, podemos dizer que a fração de empacotamento crítica, onde ocorre a mudança de comportamento, é $\phi_c \approx 80, 5\%$, ou seja, este valor de ϕ_c coincide com o valor encontrado na Figura 53.



Figura 55 – Soma das áreas dos polígonos da cavidade e da área do polígono do intruso em função de ϕ . Este gráfico sugere $\phi_c \approx 80, 5\%$. Os valores exibidos são as médias calculadas a partir das regiões de equilíbrio, citadas na Figura 54.

Os ajustes das curvas, Figura 56, dos gráficos da Figura 53 e da Figura 55 demostraram excelente conformidade entre os valores da fração de empacotamento crítica ϕ_c e do expoente crítico β . Esses valores foram $\phi_c = (80, 4 \pm 0, 2)$ %; $\beta = 1, 3 \pm 0, 1$; e $\phi_c = (80, 5 \pm 0, 5)$ %; $\beta = 1, 4 \pm 0, 1$; respectivamente.

Passando agora a análise do número de lados dos polígonos, seguimos o mesmo critério de "termalização", ou equilíbrio, adotado anteriormente. Calculamos o número de lados apenas do polígono do intruso mas somente a partir dos passos onde a soma das áreas dos polígonos da cavidade e do polígono do intruso flutuam em torno de um aproximado valor de equilíbrio, conforme Figura 54.

A Figura 57 mostra o valor médio, para cada ϕ , do número de vizinhos do polígono do intruso. Os dados foram submetidos a um ajuste sigmoidal. O ponto de inflexão da curva ocorre em $\phi = (80, 2 \pm 0, 1)\%$. Este valor está de acordo com os valores de $\phi_c \approx 80, 5\%$ encontrados na análise da força de resistência ao escoamento sobre o intruso e na análise da soma das áreas dos polígonos da cavidade e do intruso. Este fato vem corroborar a afirmativa de que, por meio da análise dos polígonos da tesselação de Voronoi é possível identificar uma transição de fase de engarrafamento de fluxo granular.



Figura 56 – Valores dos parâmetros de transição de fase ($\phi_c \in \beta$) referentes à força de resistência ao escoamento e à área dos polígonos. Em (a) os pontos foram ajustados pela expressão $f = C + A(\phi - \phi_c)^{\beta}$, onde f é a força, C e A são constantes, ϕ_c é o ponto crítico e β é o expoente crítico, cujos valores encontrados foram $C = 0, 25, A = 1, 6 \pm 0, 4, \phi_c = 80, 4 \pm 0, 2 \text{ e } \beta = 1, 3 \pm 0, 1$. Em (b) os pontos foram ajustados pela expressão $y = C + A(\phi_c - \phi)^{\beta}$, onde y = Ac/Ap, C, A, $\phi_c \in \beta$ são as mesmas grandezas descritas em (a), cujos valores encontrados foram $C = 1, 0 \pm 0, 2, A = 0, 5 \pm 0, 1, \phi_c = 80, 5 \pm 0, 5 \in \beta = 1, 4 \pm 0, 1$.



Figura 57 – Número de lados do polígono do intruso em função de ϕ . Em vermelho vemos o ajuste sigmoidal. O ponto de inflexão, que pode ser interpretado como o ponto crítico da mudança de fase de engarrafamento é $\phi = (80, 2 \pm 0, 1)\%$

A seguir, mostraremos os resultados encontrados nas análises dos sistemas de deposição.

4.2 Sistemas de deposição GG e RL

Como no caso do sistema perturbado por intruso, fizemos análises das distribuições estatísticas das áreas dos polígonos de Voronoi. Devido ao fato de as amostras serem polidispersas, obtivemos distribuições com ajustes gaussianas de um pico. Não percebemos variações consideráveis entre os valores da média e da largura dos ajustes gaussianos entre os sistemas GG e RL, e também não percebemos variações consideráveis para aqueles valores entre um mesmo sistema antes e depois da aplicação da sobrecarga. Desta forma, estas distribuições estatísticas não se mostraram eficientes para a distinção entre os dois tipos de preparação nem entre um mesmo sistema com ou sem sobrecarga.

Visto que a anlálise da distribuição das áreas dos polígonos não se mostrou eficiente para as distinções citadas anteriormente, voltamos nossa atenção para a análise das variações relativas das coordenadas dos vértices dos polígonos de Voronoi. Estas variações foram calculadas, em princípio, na base dos sistemas, medindo-se as coordenadas dos vértices antes e depois da aplicação da sobrecarga. Paralelamente, calculamos também as variações relativas das componentes das forças sobre os grãos da base, isto é, subtraímos os valores das componentes das forças sobre os grãos, antes da aplicação da sobrecarga, dos valores das componentes das forças sobre estes mesmos grãos após a aplicação da sobrecarga. Esta diferença de forças foi, em seguida, dividida pelo valor da sobrecarga.

O processo descrito anteriormente pode ser sintetizado nas seguintes equações da Subseção 3.2.2: Equação 27, Equação 28, Equação 29 e Equação 30.

Para realizar os cálculos da SRF e da VRTF, dividimos o comprimento total do sistema, na direção *x*, em 30 partes, ou intervalos, iguais. Cada uma dessas partes atua como se fosse um sensor individual.

A proposta principal desta parte da pesquisa é calcular um calibre por meio da relação entre a SRF e a VTRF, na base do sistema, e utilizar este calibre, multiplicando-o pela VTRF calculada em outras posições da camada granular para assim obter a SRF sem precisar calculá-la mecanicamente, ou seja, sem precisar acessar todas as forças de contato a que os grãos estão sujeitos. Sendo isto possível, levanta-se, também, a possibilidade de se utilizar este mesmo calibre na VTRF de outros sistemas, com grãos de mesma característica e preparação idêntica, para a obtenção da SRF sem a necessidade de cálculos mecânicos.

A base do sistema e as outras posições onde estudaremos as SRF's e as VTRF's são mostradas na Figura 58.



Figura 58 – Base e demais posições para o cálculo da SRF. Esta figura mostra parte de uma camada granular. As linhas pretas, contínuas, definem as posições z onde faremos os cáculos das SRF's e das VTRF's. Os grãos em azul, cortados pelas linhas pretas, são aqueles nos quais analisamos as forças e os polígonos de Voronoi. Contando de baixo para cima, denominamos a primeira linha preta de Base, localizada, em média, na posição $z = 1,02 \times 10^{-2}$. As demais linhas se localizam, em média, em $z = 2,60 \times 10^{-2}$, $z = 4,17 \times 10^{-2}$, $z = 5,75 \times 10^{-2}$, $z = 7,32 \times 10^{-2}$. A sobrecarga é aplicada em $z = 13,60 \times 10^{-2}$. Os grãos mais elevados situam-se em torno de $z = 14,70 \times 10^{-2}$. Todos os valores em UCN.

Verificada a proporcionalidade entre os perfis da SRF e da VTRF, conforme veremos mais além, definimos a expressão $\sigma_{z\alpha} = \Gamma_{z\alpha}\phi_{z\alpha}$, onde $\Gamma_{z\alpha}$ é o calibre e α representa as componentes z ou x. Em nossos cálculos, utilizamos os "estimadores de mínimos quadrados" para encontrar o valor de Γ que minimiza o erro quadrático total das amostras, ou seja, calculamos o valor de Γ que minimiza a seguinte função:

$$S(\Gamma) = \sum_{i=1}^{30} (\sigma_i - \Gamma \phi_i)^2.$$
(33)

Para encontrarmos o mínimo da Equação 33, derivamos $S(\Gamma)$ em relação a Γ , igualamos a derivada a zero e isolamos Γ , de acordo com a Equação 34

$$\Gamma = \frac{\sum_{i=1}^{30} \phi_i \sigma_i}{\sum_{i=1}^{30} \phi_i^2},$$
(34)

onde 30 é o número de intervalos/sensores aplicados no sistema, ou o número de bins, utilizado no cálculo da VTRF. $\phi_i \in \sigma_i$ são, respectivamente, os pontos da VTRF e da SRF, calculados junto ao sensor "i". Usamos a notação genérica "i" para evitar rescrever duas equações, uma para a direção z (usando $\phi_{zz_i} \in \sigma_{zz_i}$) e outra para a direção x (usando $\phi_{zx_i} \in \sigma_{zx_i}$).

Normalmente, a SRF, $\sigma_{z\alpha}$, é medida em N/m^2 mas como estamos trabalhando com um sistema de unidades normalizadas, em 2D sua unidade é $(UCN)^{-1}$, de acordo com a Equação 27 e Equação 28. A VTRF, $\phi_{z\alpha}$, também tem unidade $(UCN)^{-1}$, de acordo com a Equação 29 e Equação 30. Sendo assim, $\Gamma_{z\alpha}$ é um parâmetro adimensional.

A seguir, apresentamos os resultados obtidos com as duas componentes zz e zx.

4.2.1 Componente *zz*

Na Figura 59, comparamos a SRF com o perfil VTRF correspondente. Embora os perfis SRF e VTRF exibam uma correspondência muito boa na base da camada, à medida que nos aproximamos da superfície, essa correspondência perde precisão. Apesar disso, essa pequena perda de precisão não impede um resultado global satisfatório.



Figura 59 – Perfis das curvas de σ_{zz} e ϕ_{zz} em h = 0,125 (base) e h = 0,062 (linha de referência mais elevada). Em (a) o gráfico mostra o ajuste entre σ_{zz} , mecanicamente calculado, e ϕ_{zz} , na base. Em (b) o ajuste perde qualidade, em h = 0,062. A unidade de h é UCN. Observe que as barras de erro são aproximadamente do mesmo tamanho que os símbolos da curva. Por esse motivo, não exibiremos mais essas barras.

Não obstante os perfis da SRF e da VTRF tenham um bom ajuste na base, a evolução de cada uma dessas funções ocorre de forma diferente à medida em que passamos a analisá-las em posições acima da base. Na Figura 60, para que o entendimento da figura fique mais claro, mostramos os perfis da SRF e da VTRF em apenas três das cinco posições analisadas.



Figura 60 – Perfis das curvas da SRF e da VTRF em diferentes posições do sistema - componente zz - sistema GG. Em (a) temos a evolução dos perfis da SRF e em (b) a evolução dos perfils da VTRF. A difença entre eles é bastante explícita.

Devido às diferenças observadas na Figura 60, a multiplicação do calibre, calculado na base, pela VTRF em qualquer outra posição, que não a base, não reproduz o perfil correto da SRF naquela posição.

Uma característica importante nos perfis da SRF é que a integral da curva, ou área, desses perfis resulta sempre no mesmo valor, ou seja, no valor da sobrecarga aplicada, porém o mesmo não ocorre com os perfil da VTRF. O valor da integral dos perfis da VTRF aumenta à medida em que a calculamos em coordenadas *z* maiores. Ao analisarmos estes comportamentos concluímos que, à medida em que a sobrecarga aplicada em um grão do alto da camada se distribui pelos grãos abaixo, a soma das componenetes *z* das forças que atuam nos grãos que são cortados por uma linha horizontal é sempre igual ao valor da sobrecarga. Mas o mesmo não ocorre com a variação das coordenadas *z* dos vértices dos polígonos de Voronoi. Como dito antes, a soma destas variações destas coordenadas aumenta com o aumento da coordenada *z*.

Ao analisarmos a dinâmica de atuação da sobrecarga conseguimos elaborar um modelo que explica este diferente comportamento da VTRF. Na verdade, o que ocorre é que os grãos das camadas superiores têm seus centros deslocados para baixo não somente pela força que neles atua mas também pelo efeito residual do deslocamento de todos os grãos abaixo dele, Figura 61.



Figura 61 – Efeito residual do deslocamento dos grãos na direção z. Na figura da esquerda os grãos não estão sujeitos a uma sobrecarga. Na figura da direita aplicou-se uma sobrecarga. Observe que há interpenetração em todos os grãos, da figura da direita, e que o deslocamento do ponto vermelho se dá não só pela força aplicada em seu grão mas também pelo deslocamento dos grãos abaixo dele. As linhas tracejadas servem de parâmetro para a comparação, qualitativa, entre os deslocamentos do ponto vermelho, na parte superior da camada e do ponto preto, na parte inferior da camada. Veja que na parte inferior do sistema o delocamento do ponto preto se deve somente à força que lá atua, pois não há grãos abaixo, que causem o mesmo efeito que acontece na parte superior do sistema.

Fizemos uma análise do crescimento da área da curva da VTRF e percebemos que ele é linear. Desta forma, partindo do argumento exposto na legenda da Figura 61, ou seja, de que a variação das posições nas camadas mais inferiores se devem exclusivamente às forças que lá atuam, pois não há grãos abaixo para propiciar o efeito cumulativo de deslocamento, utilizamos a área do perfil da VTRF da base como um padrão. Dividimos as áreas de todos os perfis da VTRF pela área do perfil da base. Desta forma, encontramos um fator ϖ para a correção da VTRF, conforme Figura 62. Nesta mesma figura, mostramos, também, a invariabilidade da área dos perfis da SRF.

Ajusta-se determinada VTRF dividindo sua curva pelo fator ϖ calculado na coordenada "z" onde esta VTRF foi calculada. Este cálculo adequa as variações das coordenadas z dos vértices dos polígonos, eliminando o excesso, ou seja, eliminando o efeito cumulativo de deslocamento dos grãos e, consequentemente, dos vértices dos polígonos.



Figura 62 – Fator ϖ para o ajuste da VTRF - componente zz. Esta figura mostra uma representação gráfica de ϖ_{VTRF} , o valor da divisão das áreas dos perfis da VTRF pelo valor da área do perfil da VTRF da base em função da posição z onde a VTRF é calculada. Plotamos, também, ϖ_{SRF} , o valor da divisão das áreas dos perfis da SRF pelo valor da área do perfill da SRF da base. O ajuste linear dos pontos forneceu, para a VTRF, a função $\varpi = 86z + 0, 11$.

Na Figura 63, podemos ver os novos perfis ajustados da VTRF. Compare esses novos perfis da VTRF com os perfis da VTRF sem ajuste e com os perfis da SRF na Figura 60.



Figura 63 – Perfis ajustados da VTRF. O ajuste desses perfis eliminou o excesso de deslocamento dos grãos (em virtude do efeito acumulativo) e, consequentemente, das posições *z* dos vértices dos polígonos. As áreas das curvas destes perfis têm, agora, valores aproximadamente iguais.

Os calibres, calculados na base, para a componente zz, para os sistemas GG e RL, podem ser vistos na Tabela 1.

Sistema	Γ_{zz}
GG	$0,67 \pm 0,02$
RL	$0,47\pm0,03$
GG/RL	$1,4\pm0,1$

Tabela 1 – Calibres das componentes zz, calculados nas bases dos sistemas GG e RL.

A Figura 64 compara σ_{zz} calculado mecanicamente com $\sigma_{zz} = \Gamma_{zz}\phi_{zz}$, para os sistemas GG e RL em três diferentes posições da camada. Os perfis da SRF medidos na base de camadas granulares e em diferentes alturas, ou seja, perfis com diferentes distâncias h entre a sobrecarga e a posição onde se calculam as funções resposta, colapsam em uma única curva quando reescalados por h, (MEHTA, 2007). O mesmo ocorre com a VTRF.



Figura 64 – Comparação entre σ_{zz} calculado pelo uso da mecânica e $\sigma_{zz} = \Gamma_{zz}\phi_{zz}$. As letras de (a) a (c) se referem ao sistema GG. Em (a) o calibre calculado na base do sistema GG foi aplicado na VTRF da base (h=0,125), em (b) o calibre foi aplicado na VTRF de h=0,093 e em (c) o calibre foi aplicado na VTRF de h=0,062. As letras de (d) a (f) se referem ao sistema RL. Em (d) o calibre calculado na base do sistema RL foi aplicado na VTRF da base (h=0,125), em (e) na VTRF de h=0,093 e em (f) na VTRF de h=0,062. Os valores dos pefis foram reescalados por h. À medida em que fazemos os cálculos em coordenadas *z* mais elevadas o ajuste entre SRF e VTRF perde qualidade e, consequentemente, a paridade entre as curvas calculadas de forma mecânica e por meio do calibre também perde qualidade.



Figura 65 – Em (a), vemos os perfis σ_{zz} e ϕ_{zz} na base da amostra A - GG . Esses perfis foram usados para calcular o calibre na base desta amostra. Em (b), multiplicamos o calibre da amostra A por ϕ_{zz} da base da amostra B - GG, para calcularmos o σ_{zz} . No gráfico da direita, os perfis foram reescalados por h.

A Figura 65(a) mostra o σ_{zz} e o ϕ_{zz} usados para calcular o Γ_{zz} em uma amostra "A". A Figura 65(b) apresenta o resultado da multiplicação do Γ_{zz} da amostra A pelo ϕ_{zz} da amostra B, para o cálculo do σ_{zz} nesta última. Este resultado confirma o uso do calibre, calculado em uma dada amostra, na obtenção de σ_{zz} de outra amostra.



4.2.2 Componente zx

Figura 66 – Perfis de curvas de σ_{zx} e ϕ_{zx} . As distâncias entre linha de referência e a sobrecarga são h = 0, 125 e h = 0, 062. SRF e VTRF não se ajustam tão bem em coordenadas *z* mais elevadas.

Na Figura 66 mostramos os perfis SRF e VTRF para a componente zx em h = 0,125 (base) e h = 0.062. Como na componente zz, há perda na qualidade do ajuste entre esses dois

perfis quando fazemos os cálculos em coordenadas z superiores.

Não obstante os perfis da SRF e da VTRF tenham um bom ajuste na base, a evolução de cada uma dessas funções ocorre de forma diferente à medida em que passamos a analisá-las em posições acima da base. Na Figura 67, para que o entendimento da figura fique mais claro, mostramos os perfis da SRF e da VTRF em apenas três das cinco posições analisadas.



Figura 67 – Perfis das curvas da SRF e da VTRF em diferentes posições do sistema componente zx - sistema GG. Em (a) temos a evolução dos perfis da SRF e em (b) a evolução dos perfils da VTRF. Os perfis evoluem de formas diferentes.

Devido às diferenças observadas na Figura 67, a multiplicação do calibre, calculado na base, pela VTRF em qualquer outra posição, que não a base, não reproduz o perfil correto da SRF naquela posição.

Para este caso, analisamos a área da metade esquerda dos perfis da SRF e da VTRF, pois a área da curva total resulta em um valor próximo de zero. Da mesma forma que acontece com a componente zz, nos perfis da SRF a integral das curvas resultam sempre em valores bem próximos, porém o mesmo não ocorre com os perfis da VTRF. O valor da integral dos perfis da VTRF aumenta à medida em que a calculamos em coordenadas z maiores. O crescimento das áreas das curvas da VTRF em função de x mostrou-se não linear, Figura 68.



Figura 68 – Fator ϖ para ajuste da VTRF - componente zx. Esta figura mostra uma representação gráfica de ϖ_{VTRF} , o valor da divisão das áreas dos perfis da VTRF pelo valor da área do perfil da VTRF da base em função da posição z onde a VTRF é calculada. Plotamos, também, ϖ_{SRF} , o valor da divisão das áreas dos perfis da SRF pelo valor da área do perfill da SRF da base. O resultado de ϖ_{SRF} é aproximadamente constante, mas o resultado de ϖ_{VTRF} é claramente não-linear.



Figura 69 – Representação do esquema da compressão exercida nas camadas inferiores. Observando a figura, é fácil ver que todas as componentes z das forças de contato, em azul, no topo da camada 1, são dirigidas para baixo. Este fato torna o deslocamento/acoplamento acumulado dos grãos uma função linear em z. Porém, observando os grãos A e B vemos que eles possuem componentes x, de forças de contato, em ambos os sentidos, direita e esquerda. Observem que as componentes x das forças que atuam em A e B não são um par de ação e reação, pois estas componentes atuam no mesmo corpo, ou seja, no mesmo grão. O problema é que a dinâmica da atuação das componentes horizontais da sobrecarga é muitíssimo mais complexa do que a dinâmica das componentes verticais. As componentes verticais, ou z, são todas dirigidas para baixo, mas as componentes horizontais, ou x, podem ser dirigidas tanto para a direita quanto para a esquerda, em qualquer dos grãos. Inclusive, há componentes x em ambos os sentidos em praticamente todos os grãos, Figura 69. Além disso, devido á heterogeneidade dos raios e posições dos grãos, o desenho da figura mencionada não é capaz de representar, de forma completa, a complexidade horizontal referida anteriormente.

Pela Figura 70 percebemos que, mesmo na base do sistema, os grãos são pressionados, horizontalmente, e interpenetram uns aos outros em função da resultante de todas as componentes *x* que neles atuam. Os sentidos destas resultantes são, aparentemente imprevisíveis, visto que não há direção privilegiada para as forças de contato dos grãos. Somando-se a isto o efeito da interpenetração acumulada na direção *x*, mesmo na base do sistema, cuja parâmetro de correção, nesta direção, não é trivial de se conseguir, o problema, como um todo, se torna muito mais complexo.



Figura 70 – Esquema da interpenetração granular, na direção horizontal, na base do sistema. A figura da esquerda mostra uma pilha sem sobrecarga e a figura da direita mostra as interpenetrações horizontais entre grãos da base, devido à sobrecarga vertical. As componentes horizontais das forças fazem com que os grãos, mesmo da base, se interpenetrem no sentido do cisalhamento. Sendo assim, mesmo a integral (área) do gráfico da base é muito imprecisa para a VTRF de cisalhamento (componente *x*), pois não temos como excluir o deslocamento residual horizontal.

Além das dificuldades mencionadas, a SRF pressupõe que, para ser calculada, escolhamos um lado do grão para medir as forças, por exemplo, podemos escolher todas as componentes x das forças de contato que atuem no lado esquerdo dos centros dos grãos. E, de fato, foi isto que fizemos. Como as intepenetração e deslocamentos horizontais dependem das resultantes, há de se esperar que a SRF e a VTRF não se ajustem tão bem conforme na direção z.

Argumentamos de forma mais detalhada, na Figura 71, o que foi dito sobre as componentes horizontais das forças de contato e os delocamentos dos vértices de Voronoi.



Figura 71 – Detalhamento da relação microscópica entre SRF e VTRF na direção x, em função da técnica utilizada. Os números representam forças, as letras maiúsculas os grãos e as letras minúsculas os vértices de Voronoi. O grão B será deslocado (por interpenetração) pela resultante das componentes horizontais de F3 e de F4, consequentemente, o vértice b também será deslocado por esta resultante mas a SRF considera somente a componente horizontal de F3 em seu cálculo, pois somente F3 está à esquerda do centro de B. As componentes horizontais de F3 e de F4 não são um par de ação e reação, pois são aplicadas no mesmo grão, ou seja, no grão B. O vértice b também é deslocado pelas componentes horizontais de F2 e de F1, mas F2 não entra no cálculo da SRF, pois não está à esquerda do centro de A. De fato, um vértice de Voronoi pode compartilhar três, quatro e talvez mais grãos. Sendo assim, seu deslocamento não pode ser previsto pelas forças dos contatos à esquerda do centro de apenas um dos grão, pois cada um dos grãos pode estar sofrendo pressão em direções e sentidos diferentes. Aparentemente, a resultante das forças que deslocam tal vértice é produzida por componentes horizontais que, talvez, não tenham sido consideradas no cálculo.

Sendo assim, de acordo com a Figura 71, enquanto consideramos apenas as componentes que deslocam o vértice b para a direita, na verdade ele pode estar se deslocando para a esquerda. Por exemplo, se as componentes horizontais de F4 e F2 forem maiores do que as componentes horizontais de F1 e F3, a força resultante será para a esquerda e o deslocamento do vértice b também. Porém, como consideramos apenas as resultantes horizontais de F1 e F3, teremos um paradoxo, ou seja, consideramos resultantes para a direita, enquanto que o deslocamento do vértice é para a esquerda. Na direção *z* este problema não ocorre, pois as componentes de todas as forças são para baixo e o deslocamento de todos os vértices também são para baixo.

Na Figura 72, podemos ver os novos perfis ajustados da VTRF. Compare esses novos perfis

da VTRF com os perfis da VTRF sem ajuste e com os perfis da SRF na Figura 67. O ajuste não é satisfatório, para esta componente.



Figura 72 – Perfis ajustados da VTRF. O mesmo método de ajuste aplicado à componente zz da VTRF não mostrou-se eficiente para o tratamento da componente zx.

Os calibres, calculados na base, para a componente zx, para os sistemas GG e RL, podem ser vistos na Tabela 2.

Sistema	Γ_{zx}
GG	$0,33 \pm 0,02$
RL	$0,18\pm0,01$
GG/RL	1.8 ± 0.2

Tabela 2 – Calibres das componentes zx, calculados na base dos sistemas GG e RL.

A Figura 73 compara σ_{zx} calculado mecanicamente com $\sigma_{zx} = \Gamma_{zx}\phi_{zx}$ para os sistemas GG e RL em três diferentes posições da camada.

Nós ainda não entendemos completamente quais são as particularidades da direção de cisalhamento que fazem os resultados divergirem mais significativamente em comparação com a direção normal. Uma das hipóteses para tal comportamento pode ser porque, na direção *x*, o sistema tem condições de contorno periódica. Outra possibilidade é a dimensão estreita do sensor quando usado na direção *z* para medir as forças horizontais, que pode implicar em mais flutuações na deformação de cisalhamento. No entanto, ainda não temos uma conclusão satisfatória para as diferenças que relatamos. Devemos dedicar mais tempo de pesquisa a esse ponto, mas decidimos mostrar esse resultado na esperança de lançar alguma luz sobre o assunto.

Podemos dizer que, como nosso objetivo era determinar as relações entre $\sigma_{zz} e \phi_{zz}$, observe que o volume de controle, Figura 40, não é adequado para cálculos de componentes de tensão na direção x, σ_{zx} . Para isso, uma forma alongada verticalmente seria mais adequada (CLAUDIN, 2007). Como, em nosso caso, $\lambda_z \ll \lambda_x$ e os sistemas são altamente heterogêneos (em relação a forças, tamanhos de grão *etc.*), além dos resultaos inadequados para a técnica neste direção (x), não esperamos, também, uma forte simetria de σ_{zx} . Essas diferenças podem explicar por que temos uma forte simetria nas curvas que representam a direção z e uma assimetria notável nas que representam a direção x.

Observe que a curva ϕ_{zx} exibe simetria mais alta do que a curva σ_{zx} . Não sabemos ao certo o motivo desse comportamento, mas uma hipótese é que a VTRF tem menos dependência das flutuações locais e, dessa forma, é capaz de exibir uma simetria maior que a SRF.



Figura 73 – Comparação entre σ_{zx} calculada pelo uso de mecânica e $\sigma_{zx} = \Gamma_{zx}\phi_{zx}$. O calibre calculados na base foi aplicado na VTRF de três diferentes coordenadas z do interior da camada, para os sistemas GG e RL. À medida que fazemos os cálculos em coordenadas z mais elevadas, o ajuste entre SRF e VTRF perde qualidade e, consequentemente, a similaridade entre as curvas calculadas mecanicamente e aquela calculada com o uso do calibre também perde a qualidade. Todos os gráficos são reescalados com h.

4.2.3 A Relação Entre CN e PCN

Não é difícil imaginar que sistemas granulares cujos grãos possuem um maior número de contatos são mais estáveis e robustos do que aqueles sistemas cujos grãos possuem

menos contatos. Podemos estender esta intuição ao número de lados dos polígonos de Voronoi, relacionando o CN e o PCN nos diferentes sistemas de deposição. Em nossas simulações, o PCN variou de 4 a 8, e o CN variou de 2 a 7.

Mostramos os resultados para as médias, Xc, e para as larguras dos ajustes gaussianos, ω , das distribuições de CN e PCN na Tabela 3. Observando esta tabela podemos constatar que tanto o PCN quanto o CN possuem valores médios maiores para o sistema GG do que para o sistema RL. Isso nos leva a acreditar que o sistema GG é um sistema mais estável e robusto do que o sistema RL e demonstra que a tesselação de Voronoi constitui um ferramenta adequada na análise de estabilidade e robustez de sistemas granulares.

	PCN		CN	
System	Xc	ω	Xc	ω
GG	5.995 ± 0.008	1.62 ± 0.04	3.68 ± 0.02	1.83 ± 0.03
RL	5.965 ± 0.008	1.59 ± 0.03	3.38 ± 0.02	2.12 ± 0.03

Tabela 3 – Média e largura do ajuste gaussiano das distribuições de CN e PCN.

Além de analisar os valores demonstrados na Tabela 3, podemos, também, confirmar a maior estabilidade e robustez do sistema GG pela frequência de grãos e seus CN's presentes nos polígonos de diferentes valores de PCN. O resultado pode ser visto na Figura 74.



Figura 74 – Relação entre CN e PC. Porcentagem de grãos com x CN presentes nos polígonos com z número de lados. Na legenda temos os 5 diferentes tipos de PCN. (a) Sistema GG e (b) sistema RL. Note que no sistema GG os grãos de coordenação 4 são maioria em todos os PCN's. No sistema RL a maior presença é compartilhada entre grãos com coordenação 3 e 4.

Outro argumento que reforça a afirmação de maior estabilidade e robustez do sistema GG é que todos os PCN's relevantes possuem uma maior concentração de CN=4 no GG,

enquanto que no RL, esta concentração é dividida entre grãos com CN=3 e CN=4, como visto na Figura 74. Intuitivamente, podemos inferir que quanto maior o número de contatos (CN) maior a estabilidade e robutez.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

5.1 Sistemas Perturbados por Intruso

Devemos lembrar que a letra grega ϕ usada no estudo de sistemas perturbados por intruso representa a fração de empacotamento. Não confundir este símbolo com o $\phi_{z\alpha}$ utilizado no sistema de deposição, o qual representa a VTRF.

Fixando-se ϕ , não percebemos diferenças significativas entre os valores da média e da largura do ajuste gaussiano das distribuições estatísticas das áreas dos polígonos de Voronoi na medida em que a caixa se move contra o intruso, ou seja, em diferentes passos de tempo.

Quando fixamos um número de passos e analisamos a média das distribuições das áreas dos polígonos para diferentes valores de ϕ encontramos valores diferentes para esta média, com um aparente crescimento à medida em que ϕ cresce, mas sem demonstrar um padrão claro para este crescimento, Figura 48.

As variações da média do número de lados dos polígonos são desprezíveis, não permitindo a distinção entre diferentes passos de tempo nem entre diferentes ϕ 's. O valor médio do número de lados ficou próximo de um hexágono, o que demonstra um arranjo de rede, aproximadamente, triangular entre os centros dos grãos.

Em resumo, as médias das áreas e do número de lados dos polígonos não indicaram uma transição de fase de engarrafamento.

Ocorrem poucos polígonos com áreas de tamanhos diferenciados (áreas, aproximadamente, maiores do que o dobro das áreas médias). Eles localizam-se no intruso e na cavidade, Figura 51. Esses polígonos de áreas com tamanhos diferenciados são bons fatores de distinção entre os diferentes $\phi's$, Figura 50.

Como parâmetro de comparação para a mudança de fase de engarrafamento, usamos a inclinação da reta que representa a variação da força de resistência ao escoamento sobre o intruso. Consideramos que o sistema está mudando de fase no momento em que esta inclinação deixa de ser zero e inicia um crescimento constante. Este fato ocorreu no intervalo $80\% < \phi < 81\%$, Figura 52 e Figura 53. De fato, esta última figura nos levou a crer que temos $\phi_c \approx 80, 5\%$.

Os ajustes realizados nas curvas da Figura 56 e Figura 57 nos forneceu um valor médio de $\phi_c = (80, 4 \pm 0, 2)\%$ para a fração crítica. Obtivemos, também, um valor médio de $\beta = 1, 4 \pm 0, 1$ para o expoente crítico.

Todos esses argumentos demonstram fortemente a ocorrência de uma transição de fase de engarrafamento e demonstram também que a análise dos polígonos de Voronoi constitui uma ferramenta adequada para este cálculo.

5.2 Sistemas de Deposição

As distribuições estatísticas das áreas dos polígonos de Voronoi não se mostraram eficientes na distinção dos dois tipos de sistema, GG e RL, pois as médias e as larguras dos ajustes gaussianos desses sistemas não exibiram variações consideráveis. Também não foram observadas variações consideráveis da média das áreas, para um mesmo sistema, antes e depois da aplicação da sobrecarga.

As curvas SRF e VTRF se ajustaram perfeitamente nas bases dos sistemas GG e RL. Isto proporcionou o cálculo de calibres para as duas componentes de estresse ($zz \ e \ zx$). O cálculo indireto da SRF por meio dos calibres e das VTRF's foi efetuado com total sucesso para a base dos sistemas, Figura 64 e Figura 73.

Nas outras posições, afastadas da base, obtivemos sucesso no cálculo indireto da SRF, por meio do calibre calculado na base, somente na componente zz, Figura 64. Os resultados na componente zx se mostraram insatisfatórios, pois as curvas SRF e VTRF não se ajustaram, à medida em que nos afastamos da base, Figura 73. Os resultados são similares tanto para o sistema GG quanto para o RL.

Na componente *zz*, para que o calibre da base seja utilizado nas posições acima (da base) a VTRF da posição em questão deve ser ajustada conforme a Figura 62.

Conforme já discutido na Seção 4.2, na componente *zz* o valor da integral da SRF não varia de forma significativa mas o valor da integral da VTRF varia (devido ao efeito de sobreposição acumulada dos grãos), porém esta variação é linear. Após ajustar a VTRF, conseguimos, para a direção *zz*, por meio do calibre calculado na base dos sistemas,
encontrar o valor da SRF em diferentes posições de uma mesma camada granular e também calculamos a SRF de determinada amostra por meio do calibre calculado na base de outra amostra, preparada de forma similar.

Demonstramos que a VTRF obedece aos princípios de adição, reversibilidade e linearidade necessários para obter uma resposta elástica adequada, o que a torna uma ferramenta muito útil no tratamento de sistemas mecânicos.

No caso da componente zx um vértice do polígono de Voronoi pode ser deslocado de sua posição inicial devido à influência de três, quatro e, talvez, mais grãos. Esses grãos podem ter resultantes, diferentes entre si, para qualquer um dos dois sentidos do eixo x. Sendo assim, é muito difícil prever uma resultante que determine a variação x de um vértice. Com isto, a curva da VTRF não se ajusta à curva da SRF, pois de acordo com a definição de cálculo desta última devemos considerar apenas as componentes das forças que atuam à esquerda do centro do grão em questão.

A técnica do VTRF abre a possibilidade de estudar cadeias de força em contatos de grãos em estudos experimentais de maneira inovadora, com a aquisição e tratamento apropriado de imagens.

A utilização da tesselação de Voronoi e a relação entre CN e PCN, nesses diferentes sistemas, GG e RL, apresentaram-se como ferramentas adequadas na distinção entre eles e também na comparação entre estabilidade e robustez para diferentes tipos de deposição. Em nosso estudo, o sistema GG mostrou-se mais estável e robusto que o sistema RL, Tabela 3 e Figura 74

5.3 Perspectivas

Continuaremos os estudos com diferentes coeficientes de dureza e tipos (formatos, mono, bidispersão *etc*) de grãos e procuraremos experimetalistas que estejam interessados na aplicação das técnicas aqui descritas em experimentos reais, com o intuito de validar os resultados da simulação.

Referências

ALAM, M.; TRUJILLO, L.; HERRMANN, H. J. Hydrodynamic theory for reverse brazil nut segregation and the non-monotonic ascension dynamics. **Journal of statistical physics**, v. 124, n. 2-4, p. 587–623, 2006. Citado na página 4.

ANDREOTTI, B.; FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O. **Granular media: between fluid and solid**. [S.I.]: Cambridge University Press, 2013. Citado na página 52.

APPERT-ROLLAND, C. et al. **Traffic and Granular flow'07**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 2009. Citado na página 22.

ARANSON, I. S.; TSIMRING, L. S. Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts. **Reviews of modern physics**, v. 78, n. 2, p. 641, 2006. Publisher APS. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 4.

ATMAN, A. et al. Sensitivity of the stress response function to packing preparation. **Journal** of **Physics: Condensed Matter**, v. 17, n. 24, p. S2391, 2005. Citado 5 vezes nas páginas xviii, 20, 27, 58 e 59.

ATMAN, A.; CLAUDIN, P.; COMBE, G. Departure from elasticity in granular layers: Investigation of a crossover overload force. **Computer physics communications**, v. 180, n. 4, p. 612–615, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 51.

ATMAN, A. et al. Non-gaussian behavior in jamming/unjamming transition in dense granular materials. In: AIP PUBLISHING. **POWDERS AND GRAINS 2013: Proceedings of the 7th International Conference on Micromechanics of Granular Media**. [S.I.], 2013. v. 1542, n. 1, p. 381–384. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 50.

ATMAN, A. P. F. et al. Mechanical response of an inclined frictional granular layer approaching unjamming. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 101, n. 4, p. 44006, 2013. Citado na página 52.

ATMAN, A. P. F. et al. Mechanical properties of inclined frictional granular layers. **Granular Matter**, v. 16, n. 2, p. 193–201, 2014. Citado na página 52.

AURENHAMMER, F. Voronoi diagrams—a survey of a fundamental geometric data structure. **ACM Computing Surveys (CSUR)**, v. 23, n. 3, p. 345–405, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 40.

BARBER, C. B.; DOBKIN, D. P.; HUHDANPAA, H. The quickhull algorithm for convex hulls. **ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)**, v. 22, n. 4, p. 469–483, 1996. Citado na página 47.

BELL, N.; YU, Y.; MUCHA, P. J. Particle-based simulation of granular materials. In: **Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation**. [S.I.: s.n.], 2005. p. 77–86. Citado na página 7.

BERG, M. D. et al. **Computational geometry**. [S.I.]: Springer, 2000. Citado 14 vezes nas páginas 16, 33, 34, 35, 37, 104, 105, 106, 108, 110, 111, 113, 114 e 119.

BLAIR, D. et al. Patterns in thin vibrated granular layers: Interfaces, hexagons, and superoscillons. **Physical Review E**, v. 61, n. 5, p. 5600, 2000. Citado na página 4.

BOUCHAUD, J.-P. et al. The stress response function in granular materials. **Comptes Rendus Physique**, v. 3, n. 2, p. 141–151, 2002. Citado na página 52.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.; HAINES, C. W. Elementary differential equations and boundary value problems. [S.I.]: Wiley New York, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 99, 101 e 103.

BRETON, L. et al. Stress response function of a two-dimensional ordered packing of frictional beads. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 60, n. 6, p. 813, 2002. Citado na página 53.

BROCKBANK, R.; HUNTLEY, J.; BALL, R. Contact force distribution beneath a threedimensional granular pile. **Journal de Physique II**, v. 7, n. 10, p. 1521–1532, 1997. Citado na página 52.

BRUYN, J. R. de; WALSH, A. M. Penetration of spheres into loose granular media. **Canadian Journal of Physics**, v. 82, n. 6, p. 439–446, 2004. Citado na página 20.

CASTRO, R. F. C. R. **Tesselação de Voronoi em Empilhamentos Granulares**. Dissertação (Mestrado) — CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS, 2009. Citado na página 14.

CATES, M. et al. Jamming, force chains, and fragile matter. **Physical review letters**, v. 81, n. 9, p. 1841, 1998. Citado na página 53.

CIXOUS, P. et al. Jamming and unjamming by penetration of a cylindrical intruder inside a 2 dimensional dense and disordered granular medium. In: AIP PUBLISHING. **POWDERS AND GRAINS 2009: PROCEEDINGS OF THE 6TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON MICROMECHANICS OF GRANULAR MEDIA**. [S.I.], 2009. v. 1145, n. 1, p. 539–542. Citado 4 vezes nas páginas xviii, 20, 25 e 31.

CLARKSON, K. L.; SHOR, P. W. Applications of random sampling in computational geometry, ii. **Discrete & Computational Geometry**, v. 4, n. 1, p. 387–421, 1989. Citado na página 47.

CLAUDIN, P. Static properties of granular materials. In: Mehta, Anita. Granular Physics. [S.I.]: Cambridge University Press, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 54, 55 e 84.

CORMEN, T. H. Algoritmos: teoria e prática. [S.I.]: Elsevier, 2002. Citado na página 40.

D. Serero et al. Stress response function of a granular layer: Quantitative comparison between experiments and isotropic elasticity. **Eur. Phys. J. E**, v. 6, n. 2, p. 169–179, 2001. Citado na página 52.

DRESCHER, A.; JONG, G. J. D. Photoelastic verification of a mechanical model for the flow of a granular material. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 20, n. 5, p. 337–340, 1972. Citado na página 20.

DURAN, J.; BEHRINGER, R. P. Sands, powders, and grains: an introduction to the physics of granular materials. **Physics Today**, v. 54, n. 4, p. 63–64, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 51.

DWYER, R. A. A faster divide-and-conquer algorithm for constructing delaunay triangulations. **Algorithmica**, v. 2, n. 1-4, p. 137–151, 1987. Citado na página 43.

FORTUNE, S. A sweepline algorithm for voronoi diagrams. **Algorithmica**, v. 2, n. 1-4, p. 153–174, 1987. Springer. Citado na página 104.

GENG, J. et al. Footprints in sand: the response of a granular material to local perturbations. **Physical Review Letters**, v. 87, n. 3, p. 035506, 2001. Citado na página 52.

GENG, J. et al. Memory in two-dimensional heap experiments. **Physical Review E**, v. 64, n. 6, p. 060301, 2001. Citado na página 20.

GENG, J. et al. Green's function measurements of force transmission in 2d granular materials. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 182, n. 3-4, p. 274–303, 2003. Citado na página 52.

GENNES, P.-G. de. Granular matter: a tentative view. **Reviews of modern physics**, v. 71, n. 2, p. S374, 1999. Citado na página 52.

GOLDENBERG, C. et al. Scale separation in granular packings: stress plateaus and fluctuations. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 16, p. 168001, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 56.

GOLDENBERG, C.; GOLDHIRSCH, I. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. **Physical Review Letters**, v. 89, n. 8, p. 084302, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 53.

GOLDMAN, D. I.; UMBANHOWAR, P. Scaling and dynamics of sphere and disk impact into granular media. **Physical Review E**, v. 77, n. 2, p. 021308, 2008. Citado na página 20.

GUIBAS, L.; STOLFI, J. Primitives for the manipulation of general subdivisions and the computation of voronoi. **ACM transactions on graphics (TOG)**, v. 4, n. 2, p. 74–123, 1985. Citado na página 43.

HEAD, D.; TKACHENKO, A.; WITTEN, T. Robust propagation direction of stresses in a minimal granular packing. **The European Physical Journal E**, v. 6, n. 1, p. 99–105, 2001. Citado na página 53.

HERRMANN, H. J.; HOVI, J.-P.; LUDING, S. **Physics of dry granular media**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 2013. Citado na página 52.

HINRICHSEN, H.; WOLF, D. E. **The physics of granular media**. [S.I.]: John Wiley & Sons, 2006. Citado na página 12.

JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 68, n. 4, p. 1259, 1996. Citado na página 2.

JENSEN, M. H. Computational physics. Lecture notes, 2011. Citado na página 98.

KASAHARA, A.; NAKANISHI, H. Isostaticity and mechanical response of two-dimensional granular piles. **Physical Review E**, v. 70, n. 5, p. 051309, 2004. Citado na página 53.

KOLB, E. et al. Rigid intruder inside a two-dimensional dense granular flow: Drag force and cavity formation. **Physical Review E**, v. 87, n. 3, p. 032207, 2013. Citado na página 50.

LIU, A. J.; NAGEL, S. R. Nonlinear dynamics: Jamming is not just cool any more. **Nature**, v. 396, n. 6706, p. 21–22, 1998. Citado na página 48.

MAGALHAES, C.; MOREIRA, J.; ATMAN, A. Catastrophic regime in the discharge of a granular pile. **Physical Review E**, v. 82, n. 5, p. 051303, 2010. Citado na página 4.

MAJMUDAR, T. et al. Jamming transition in granular systems. **Physical review letters**, v. 98, n. 5, p. 058001, 2007. Citado na página 48.

MARTINS, G. H. B. **Simulação Paralela de Materiais Granulares**. Dissertação (Mestrado) — Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFETMG, 2016. Citado na página 12.

MEHTA, A. **Granular physics**. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. Citado 6 vezes nas páginas 4, 7, 21, 22, 53 e 77.

MULMULEY, K. Computational geometry: An introduction through randomized algorithms. [S.I.]: Prentice Hall, 1994. Citado na página 47.

OKABE, A. et al. **Spatial tessellations: concepts and applications of Voronoi diagrams**. 2. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2009. v. 501. Citado 3 vezes nas páginas 14, 15 e 44.

O'ROURKE, J. **Computational geometry in C**. [S.I.]: Cambridge university press, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 16, 17 e 33.

OTTO, M. et al. Anisotropy in granular media: Classical elasticity and directed-force chain network. **Phys. Rev. E**, v. 67, p. 031302, 2003. Citado na página 52.

PETERS, J. et al. Characterization of force chains in granular material. **Physical review E**, v. 72, n. 4, p. 041307, 2005. Citado na página 21.

PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. **Computational granular dynamics: models and algorithms**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 12.

PREPARATA, F. P.; SHAMOS, M. **Computational geometry: an introduction**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 47.

RAMOS, O.; ALTSHULER, E.; MÅLØY, K. Avalanche prediction in a self-organized pile of beads. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 7, p. 078701, 2009. Citado 4 vezes nas páginas xviii, 20, 22 e 23.

REYDELLET, G.; CLÉMENT, E. Green's function probe of a static granular piling. **Phys. Rev.** Lett., v. 86, p. 3308–3311, 2001. Citado na página 52.

REYNOLDS, O. On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. with experimental illustrations. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, v. 20, n. 127, p. 469–481, 1885. Citado na página 3.

REZENDE, F. A. V. S.; ALMEIDA, R. M. V.; NOBRE, F. F. Diagramas de voronoi para a definição de áreas de abrangência de hospitais públicos no município do rio de janeiro defining catchment areas for public hospitals in the municipality of rio de janeiro through. **Cad. Saúde Pública**, v. 16, n. 2, p. 467–475, 2000. Citado na página 14.

RICHARD, P. et al. Slow relaxation and compaction of granular systems. **Nature materials**, v. 4, n. 2, p. 121–128, 2005. Citado na página 48.

RIETZ, F.; STANNARIUS, R. Convection and segregation in a flat rotating sandbox. **New Journal of Physics**, v. 14, n. 1, p. 015001, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 20.

SANTOS, M. R.; MURARI, C. Aprendendo tesselações de forma lúdica. In: **VIII Encontro Nacional de Educação Matemática**. Recife: [s.n.], 2004. Citado na página 14.

SAXCÉ, G. D.; FORTIN, J.; MILLET, O. About the numerical simulation of the dynamics of granular media and the definition of the mean stress tensor. **Mechanics of Materials**, v. 36, n. 12, p. 1175–1184, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.

SHAFER, J.; DIPPEL, S.; WOLF, D. Force schemes in simulations of granular materials. **Journal de physique I**, v. 6, n. 1, p. 5–20, 1996. Citado 3 vezes nas páginas 9, 11 e 12.

SHAMOS, M. I.; HOEY, D. Closest-point problems. In: IEEE. **Foundations of Computer Science, 1975., 16th Annual Symposium on**. [S.I.], 1975. p. 151–162. Citado 3 vezes nas páginas 19, 38 e 43.

SILBERT, L. E. et al. Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology. **Physical Review E**, v. 64, n. 5, p. 051302, 2001. Citado na página 13.

SKIENA, S. S. **The algorithm design manual: Text**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 1998. v. 1. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 115.

ŠMID, J.; NOVOSAD, J. Pressure distribution under heaped bulk solids. I. Chem. E. Symposium Series, 63: D3. [S.I.], 1981. Citado na página 52.

SOTERRONI, A. C. **Simulação e Análise da Dinâmica de Fluidos Granulares**. Dissertação (Dissertação de Mestrado em Computação Aplicada) — Instituto Nacional de Pesquisas espaciais – INPE, São José dos Campos – SP – Brasil, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 4, 5, 8 e 9.

UNGER, T.; KERTESZ, J. The contact dynamics method for granular media. **arXiv preprint cond-mat/0211696**, 2002. Citado na página 7.

VANEL, L. et al. Memories in sand: Experimental tests of construction history on stress distributions under sandpiles. **Physical Review E**, v. 60, n. 5, p. R5040, 1999. Citado na página 52.

WAINER, G. A. **Discrete-event modeling and simulation: a practitioner's approach**. Boca Raton: CRC Press, 2008. Citado na página 8.

WEEKS, E. R. Soft jammed materials. **Statistical Physics of Complex Fluids**, p. 243–255, 2007. Citado na página 3.

WINTERLE, P. Vetores e geometria analítica. [S.I.]: Pearson Makron Books, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 116 e 119.

Apêndices

APÊNDICE A – Equações Diferenciais e os Métodos de Runge-Kutta

Equações diferenciais são utilizadas na resolução de problemas das mais diversas áreas do conhecimento, tais como química, física, engenharia, medicina, biologia etc.

Descreveremos, a seguir, um tipo de equação diferencial denominado *Equação Diferencial Ordinária*, ou **EDO**, pois são desse tipo as equações de Newton para o movimento que utilizamos para resolver o modelo matemático da dinâmica granular de nossos sistemas de interesse.

Sendo assim, as EDO's podem ser classificadas baseadas em algumas particularidades:

 A ordem de uma EDO é dada pela ordem da derivada do lado esquerdo da equação. Descrevemos, a seguir, uma EDO de primeira ordem e uma EDO de segunda ordem, respectivamente.

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \tag{35}$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} = f(t, \frac{dy}{dt}, y), \tag{36}$$

onde f é uma função arbitrária. Um caso particular da segunda lei de Newton, Equação 37, é um exemplo clássico de uma EDO de segunda ordem.

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx,\tag{37}$$

onde k é uma constante de força.

 EDO's dependem apenas de uma variável, ao passo que Equações Diferenciais Parciais, ou EDP's podem depender de várias variáveis. A equação de Schrödinger, dependente do tempo, Equação 38, é um exemplo de EDP.

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\varphi(\vec{r},t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi(\vec{r},t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi(\vec{r},t)}{\partial z^2}\right) + V(\vec{x})\varphi(\vec{x},t), \quad (38)$$

3. EDO,s podem ser lineares ou não-lineares de acordo com o expoente da função y à direita do sinal de igual. Quando y é elevada à primeira potência temos uma EDO linear e, para potências superiores à primeira a EDO é não-linear. As equações a seguir mostram um exemplo de cada (linear e não-linear), respectivamente.

$$\frac{dy}{dt} = g^3(t)y(t),\tag{39}$$

$$\frac{dy}{dt} = g^{3}(t)y(t) - g(t)y^{2}(t),$$
(40)

Lembre-se que a função que está sendo derivada, nas equações anteriores, é a função y(t) e não a função g(t).

Para continuarmos nosso propósito, que é a resolução de EDO's por meio de cálculos numéricos, conceituaremos, agora, os chamados *Métodos das Diferenças Finitas*.

Os métodos das diferenças finitas pertencem a uma classe mais geral denominada *métodos* de um passo. Para entendê-lo, suponha que a função y(t) tenha seu valor inicial dado por

$$y_0 = y(t = t_0),$$
 (41)

Estamos interessados no resultado de uma equação diferencial no intervalo [a, b]. Definiremos, então, o passo h por meio da divisão do intervalo citado em N subintervalos, ou seja

$$h = \frac{b-a}{N},\tag{42}$$

O valor seguinte da função y(t) pode ser calculado utilizando-se o passo e a derivada de y(t). Logo

$$y_1 = y(t_1 = t_0 + h),$$
 (43)

E assim por diante.

Se a função é bem comportada no intervalo descrito, podemos usar passos fixos, caso contrário podemos usar passos adaptativos, se necessário.

Usando passo fixo e generalizando a Equação 43 teremos

$$y_{i+1} = y(t = t_i + h) = y(t_i) + h\Delta(t_i, y_i(t_i)) + O(h^{p+1}),$$
(44)

onde $O(h^{p+1})$ representa o erro de truncamento. Fazendo uma expansão de nossa função y(t) em série de Taylor, Equação 45, determinaremos o termo Δ da seguinte forma

$$f(x) = \frac{f^0(a)(x-a)^0}{0!} + \frac{f'(a)(x-a)^1}{1!} + \dots + \frac{f^p(a)(x-a)^p}{p!} + \frac{f^{p+1}(a)(x-a)^{p+1}}{(p+1)!},$$
 (45)

Expandindo y(t) em torno do valor t_i .

$$y(t) = \frac{y^0(t_i)(t-t_i)^0}{0!} + \frac{y'(t_i)(t-t_i)^1}{1!} + \dots + \frac{y^p(t_i)(t-t_i)^p}{p!} + \frac{y^{p+1}(t_i)(t-t_i)^{p+1}}{(p+1)!},$$
 (46)

Lembrando que $t = t_i + h$,

$$y(t) = \frac{y^0(t_i)(h)^0}{0!} + \frac{y'(t_i)(h)^1}{1!} + \dots + \frac{y^p(t_i)(h)^p}{p!} + \frac{y^{p+1}(t_i)(h)^{p+1}}{(p+1)!}.$$
(47)

Reajeitando a Equação 47,

$$y(t) = y(t_i) + h\left[y'(t_i) + \dots + \frac{y^p(t_i)(h)^{p-1}}{p!}\right] + O(h)^{p+1}.$$
(48)

Comparando a Equação 44 com a Equação 48 obteremos

$$\Delta(t_i, y_i(t_i)) = \left[y'(t_i) + \dots + \frac{y^p(t_i)(h)^{p-1}}{p!} \right]$$
(49)

Se definirmos

$$y'(t_i) = f(t_i, y_i) \tag{50}$$

e se truncarmos o Δ na primeira derivada, teremos

$$y_{i+1} = y(t_i) + hf(t_i, y_i) + O(h^2),$$
(51)

Considerando $t_{i+1} = t_i + h$ chegamos no conhecido "método de Euler". Somando $O(h^2)$ com todos os demais erros da série teremos o "erro global", (JENSEN, 2011), que podemos escrever como

$$NO(h^2) \approx O(h),$$
 (52)

Podemos, obviamente, melhorar a precisão do método diminuindo o valor de h com consequente aumento do valor de N. Mas se diminuirmos o valor de h, continuamente, podemos nos deparar com dois problemas principais: o custo em termos de tempo (para concluirmos os cálculos) e a questão dos erros de arredondamentos, pois $f(x + h) - f(x) \approx 0$. Para se compreender melhor a proximação de soluções de EDO's pelo método de Euler, vamos analisá-lo de forma geométrica.

Tomemos o problema de valor inicial (BOYCE; DIPRIMA; HAINES, 1992)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y) \qquad y(t_0) = y_0,$$
(53)

Seja $y = \phi(t)$ a única solução em torno do ponto inicial $t = t_0$. Esta solução passa pelo ponto inicial (t_0, y_0) , Figura 75, bem como uma reta tangente cuja inclinação é fornecida pela derivada de y, que chamaremos de $f(t_0, y_0)$, ou seja, $y'(t_0, y_0) = f(t_0, y_0)$. Sendo assim, podemos escrever a equação desta linha tangente à curva solução, no ponto (t_0, y_0) , como



Figura 75 – Aproximação da solução de EDO pelo método de Euler. Quanto mais próximo t_1 for de t_0 mais próximo será o valor de y_1 em relação à solução exata $\phi(t_1)$

Fonte: BOYCE; DIPRIMA; HAINES, 1992

Se observarmos a Figura 75 podemos concluir que a linha tangente se mostra uma boa aproximação para a curva solução real somente se o intervalo $[t_0, t_1]$ for suficientemente curto, de forma que a tangente não se distancie muito da curva solução. Logo, se t_1 é próximo o bastante de t_0 podemos aproximar $\phi(t_1)$ pelo valor y_1 , por meio da substituição $t_1 = t$ na Equação 54, que assume a forma

$$y_1 = y_0 + f(t_0, y_0)(t_1 - t_0),$$
(55)

Podemos proceder da mesma forma para acharmos a aproximação do passo seguinte, porém, desta vez, não sabemos o valor da solução $\phi(t_1)$ em t_1 , como sabíamos no ponto

 $\phi(t_0) \text{ em } t_0$, dado pelas condições iniciais . O melhor que podemos fazer é utilizar o valor aproximado y_1 e calcularmos a linha tangente no ponto (t_1, y_1) , com inclinação dada por $f(t_1, y_1)$, obtendo

$$y_2 = y_1 + f(t_1, y_1)(t_2 - t_1),$$
(56)

Generalizando,

$$y_{n+1} = y_n + f(t_n, y_n)(t_{n+1} - t_n), \qquad n = (0, 1, 2, ...).$$
 (57)

Chamando $f_n = f(t_n, y_n)$ e $h = t_{n+1} - t_n$, podemos reescrever a Equação 57 como

$$y_{n+1} = y_n + hf_n, \qquad n = (0, 1, 2, ...).$$
 (58)

que descreve o método de Euler.

Devido ao fato de o método de Euler acumular um valor de erro considerável, para passos *h* muito grandes ou, por outro lado, exigir muitos cálculos, para um valor pequeno de *h*, esforços foram dedicados no sentido de estabelecer um método de Euler melhorado.

Analisando a Figura 76 percebemos que para calcular o passo seguinte a y_1 , ou seja, para calcularmos y_2 , procedemos conforme a Equação 56, onde $f(t_1, y_1)$ é a derivada no ponto (t_1, y_1) . Este ponto deve ser utilizado para se calcular y_2 , pois não sabemos o valor de $(t_1, \phi(t_1))$ (solução exata), muito menos o valor de $f(t_1, \phi(t_1))$. Na verdade, este processo funciona como se, devido ao erro de truncamento, tívessemos movido a solução exata $\phi(t)$ para a solução aproximada $\phi^*(t)$. com isto, nossos erros de cálculo iriam se acumulando com o avanço dos passos de tempo. Note que os elementos com asterísco "*", na Figura 76, são aproximações atualizadas no passo seguinte.

Podemos observar, de forma clara, que, quando usamos o parâmetro $f(t_0, \phi(t_0))$, ou seja, $f(t_0, y_0)$, na Equação 55, para encontrarmos y_1 , fomos conduzidos a um erro. Agora, usando $f(t_1, \phi(t_1))^*$, que já é um valor aproximado, carregando determinado erro, seremos conduzidos a um outro erro relativo, ou seja, somente a reta inclinada não se mostra um bom parâmetro para aproximação da curva $\phi(t)$.

Para minimizar o problema do erro e colocar o ponto (t_1, y_1) mais próximo da solução exata $(t_1, \phi(t_1))$, digamos, fazendo o ponto (t_1, y_1) se localizar em $(t_1, y_1)^{**}$, podemos tomar a

média das inclinações $f(t_0, y_0)$ e $f(t_1, y_1)$, que daria

$$f_{med} = \frac{f(t_0, y_0) + f(t_1, y_1)}{2}.$$
(59)

Com isto, se usarmos f_{med} no lugar de $f(t_0, y_0)$, para o cálculo de y_1 , teríamos, ao invés da Equação 55,

$$y_1 = y_0 + f_{med}(t_1 - t_0),$$
 ou $y_1 = y_0 + h \frac{f(t_0, y_0) + f(t_1, y_1)}{2},$ (60)

que, generalizando, daria

$$y_{i+1} = y_i + h \frac{f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})}{2},$$
(61)

Na verdade, não conhecemos o termo y_{i+1} que aparece no argumento de f no lado direito da Equação 61 mas, para calculá-lo, podemos lançar mão do próprio método de Euler, ou seja,

$$y_{i+1} = y_i + h \frac{f(t_i, y_i) + f[t_i + h, y_i + hf(t_i, y_i)]}{2},$$
(62)

que, simplificando a notação

$$y_{i+1} = y_i + h \frac{f_i + f[t_i + h, y_i + hf_i]}{2},$$
(63)

A Equação 63 é conhecida como *Fórmula de Euler Melhorada*, ou *Fórmula de Heun*. O erro de trucamento local é proporcional a h^3 (BOYCE; DIPRIMA; HAINES, 1992).

Os métodos de Euler e de Euler melhorado pertencem a uma classe de métodos denominada **Métodos de Runge-kutta**.

Discutiremos, agora, um método desenvolvido por Carl David Runge (1856-1927), matemático e físico alemão, e por M. Wilhelm Kutta (1867-1944), matemático e aerodinamicista alemão, chamado *Métodos de Runge-Kuta de Quatro Estágios e Quarta Ordem* ou, mais simplificadamente, *Os Métodos de Runge-Kutta*.

Os métodos de Ruge-Kutta são muito mais precisos que os métodos de Euler e Euler melhorado. Seu erro local é proporcional a h^5 (BOYCE; DIPRIMA; HAINES, 1992).



Figura 76 – O método de Euler melhorado. Neste método, o valor calculado de y_1 se aproxima mais do resultado exato da função, ou seja, sofre um deslocamento de (t_1, y_1) para $(t_1, y_1)^{**}$, pois ao invés de usarmos, no cálculo, apenas a derivada $f(t_0, y_0)$, usamos uma média desta derivada com a derivada de $f(t_1, y_1)$. Esta média, chamada de f_{med} , é representada pela linha azul pontilhada.

A fórmula para o método de Runge-Kutta envolve médias ponderadas dos valores de f(t, y)em diferentes pontos no intervalo $t_i \le t \le t_{i+1}$ e é dada por

$$y_{i+1} = y_i + h \left[\frac{k_{i1} + 2k_{i2} + 2k_{i3} + k_{i4}}{6} \right],$$
(64)

onde

$$k_{i1} = f(t_i, y_i),$$
 (65)

$$k_{i2} = f(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_{i1}),$$
(66)

$$k_{i3} = f(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_{i2}),$$
(67)

$$k_{i4} = f(t_i + h, y_i + hk_{i3}), (68)$$

A soma $(k_{i1} + 2k_{i2} + 2k_{i3} + k_{i4})/6$ pode ser interpretada como uma média de retas tangente, onde k_{i1} é a reta tangente ao ponto mais à esquerda do intervalo $[t_i, t_{i+1}]$, k_{i2} é a reta tangente ao ponto médio, usando a fórmula de Euler para o interstício t_i a $t_i + h/2$, k_{i3} é a segunda aproximação para a reta tangente ao ponto médio e, finalmente, k_{i4} é a reta tangente em $t_i + h$, usando a fórmula de Euler e a reta tangente k_{i3} no interstício t_i a $t_i + h$ (BOYCE; DIPRIMA; HAINES, 1992).

O processo para os cálculos de Runge-Kutta é muito parecido com o processo para se chegar ao método de Euler melhorado, porém muito mais trabalhoso e, em vista disso, serão omitidos.

Na Figura 77 temos um comparativo de precisão entre os métodos de Euler melhorado e o Runge-Kutta de quarta ordem para o problema de valor inicial y' = 1 - t + 4y, y(0) = 1, onde foi variado (na tabela) o valor de h.

	Improved				
	Euler	Runge–Kutta			
t	h = 0.025	h = 0.2	h = 0.1	h = 0.05	Exact
0	1.0000000	1.0000000	1.0000000	1.0000000	1.0000000
0.1	1.6079462		1.6089333	1.6090338	1.6090418
0.2	2.5020619	2.5016000	2.5050062	2.5053060	2.5053299
0.3	3.8228282		3.8294145	3.8300854	3.8301388
0.4	5.7796888	5.7776358	5.7927853	5.7941198	5.7942260
0.5	8.6849039		8.7093175	8.7118060	8.7120041
1.0	64.497931	64.441579	64.858107	64.894875	64.897803
1.5	474.83402		478.81928	479.22674	479.25919
2.0	3496.6702	3490.5574	3535.8667	3539.8804	3540.2001

Figura 77 – Comparativo entre os métodos de Euler melhorado e Runge-Kutta de quarta ordem.

Fonte: BOYCE; DIPRIMA; HAINES, 1992

Os método de Euler e Euler melhorados são conhecidos também como métodos de Runge-Kutta de primeira e de segunda ordem, respectivamente.

APÊNDICE B – Algoritmo de varredura do plano (Algoritmo de Fortune)

O algoritmo de varredura do plano é comumente chamado de algoritmo de Fortune em homenagem ao seu inventor (FORTUNE, 1987). Com este algoritmo, podemos calcular todo o diagrama de Voronoi com um tempo $O(n \log n)$, no pior caso (BERG et al., 2000).

A estratégia em um algoritmo de varredura de plano é varrer o plano de cima a baixo com uma linha horizontal, chamada *linha de varredura*. Enquanto a varredura é realizada, a informação, no que se refere à estrutura que se deseja calcular, é mantida. Mais precisamente, mantemos a informação sobre a interseção da estrutura com a linha de varredura. Ao passo em que a linha de varredura se move para baixo a informação não muda, exceto em certos pontos especiais chamados *pontos de evento*.

De acordo com o paradigma de varredura do plano, movemos uma linha de varredura horizontal l de cima para baixo ao longo do plano. O paradigma implica no arquivamento da interseção do diagrama de Voronoi com a linha de varredura. Mas isto não é tão trivial, porque a parte de Vor(P) acima de l não depende apenas dos sítios que estão acima de l, mas também dos sítios abaixo de l. Dito de outra forma, quando a linha de varredura atinge o vértice superior da célula de Voronoi $v(p_i)$, Figura 78, ela ainda não alcançou o sítio p_i correspondente. Desta forma, não temos todas as informações necessárias para calcular o vértice. Aplicaremos, então, o paradigma da varredura de plano de um jeito um pouco diferente para contornarmos este problema: em vez de arquivarmos a interseção do diagrama de Voronoi com a linha de varredura, arquivaremos informações sobre a parte do diagrama de Voronoi referente aos sítios acima de l que não podem ser alteradas pelos sítios abaixo de l, (BERG et al., 2000).

Chamaremos de l^+ o semiplano fechado acima de l. Qual é a parte do diagrama de Voronoi, acima de l, que não pode mais ser alterada? Em outras palavras, para quais pontos $q \in l^+$ sabemos ao certo qual sítio está mais próximo? A distância de um ponto $q \in l^+$ a qualquer sítio abaixo de l é maior do que a distância de q à própria l. Portanto, o sítio mais próximo de q não pode situar-se abaixo de l se q está, pelo menos, tão próximo de algum sítio $p_i \in l^+$ quanto está de l. O lugar geométrico dos pontos que estão mais próximos de algum sítio $p_i \in l_+$ do que de l é delimitado por uma parábola (Apêndice C). Assim, o lugar geométrico dos pontos que estão mais próximos de qualquer sítio acima de l do que da própria l está delimitado por arcos parabólicos. Chamamos essa sequência de arcos parabólicos de *linha de praia* (sequência de curvas mais grossas na Figura 79). Outra forma de visualizar a



Figura 78 – Linha de varredura passando por um virtual vértice de uma $v(p_i)$

Fonte: BERG et al., 2000

linha de praia é a seguinte: todo sítio p_i acima da linha de varredura define uma parábola β_i completa. A linha de praia é a função que, para cada coordenada x, toca o mais baixo ponto de todas as parábolas (BERG et al., 2000).



Figura 79 – Parábolas e linha de praia. A união das partes das parábolas, desenhadas com linhas mais grossas, formam a linha de praia.

Fonte: http://www.ams.org/samplings/feature-column/fcarc-voronoi - Acesso em: 10 set. 2015.

Observação: A linha de praia é x-monótona, ou seja, qualquer linha vertical a intercepta em exatamente um ponto.

É fácil ver que uma parábola pode contribuir mais do que uma vez para a linha de praia (vide Figura 79). Podemos definir agora os *pontos de rompimento* como sendo os pontos de interseção entre os arcos parabólicos que formam a linha de praia. Alertamos para o fato de que somente os pontos de rompimento sobre a linha de praia são de nosso interesse e isto porque os pontos de rompimento entre os diferentes arcos parabólicos que formam a linha de praia situam-se sobre as arestas do diagrama de Voronoi, ou seja, cada ponto de uma aresta do diagrama de Voronoi é um ponto de rompimento. Isso não é uma coincidência: os pontos de rompimento traçam exatamente o diagrama de Voronoi enquanto a linha de varredura se move de cima para baixo, Figura 80. Estas propriedades da linha de praia

podem ser provadas utilizando argumentos de geometria elementar conforme mostrado no Apêndice C.



Figura 80 – Formação das arestas do diagrama de Voronoi por meio dos pontos de rompimento

Fonte: http://pt.slideshare.net/sandpoonia/lecture25-33728790 - Acesso em: 10 set. 2015.

Desta forma, em vez de guardarmos a interseção de Vor(P) com l, guardamos a linha de praia à medida que movemos nossa linha de varredura l. Não guardamos a linha de praia explicitamente, visto que ela muda continuamente à medida que l se move. Por enquanto vamos ignorar a questão de como representar a linha de praia, até entendermos onde e como sua estrutura combinatória muda. Isto acontece quando um novo arco parabólico aparece sobre ela, e quando um arco parabólico encolhe em determinado ponto e desaparece. Resumindo, o que queremos dizer é que os eventos de interesse, que gravamos como dados, são o surgimento de novas parábolas, pois nestes pontos sabemos que existem sítios; e o desaparecimento de arcos de parábola, justamente na interseção de três delas, denotando vértices de Voronoi.

Inicialmente, consideraremos os eventos nos quais um novo arco surge na linha de praia. Uma ocasião em que isto ocorre é quando a linha de varredura *l* alcança um novo sítio. A parábola definida por este sítio é, a princípio, uma parábola degenerada com largura zero, um segmento de linha vertical que conecta o novo sítio à linha de praia. À medida em que a linha de varredura continua a se mover para baixo a nova parábola vai tornando-se mais e mais larga. A parte da nova parábola abaixo da antiga linha de praia é, agora, uma parte da nova linha de praia, Figura 81. Chamamos o evento em que um novo sítio é encontrado de *evento de sítio*, (BERG et al., 2000).

Em um evento de sítio surgem dois novos pontos de rompimento, os quais iniciam o traçado



Figura 81 – Evento de sítio. Quando a linha de varredura encontra um sítio (evento de sítio) inicia-se uma nova parábola.

Fonte: BERG et al., 2000

de novas arestas. Inicialmente, os novos pontos de rompimento compartilham as mesmas coordenadas para, em seguida, se moverem em direções opostas e traçarem alguma nova aresta, Figura 82. Em princípio, esta aresta não está conectada ao resto do diagrama de Voronoi acima da linha de varredura. Mais adiante, veremos rapidamente o momento exato em que isso acontece, a crescente aresta culminará em uma aresta conectada ao restante do diagrama.



Figura 82 – Construção de aresta em um evento de sítio

Fonte: BERG et al., 2000

Resumindo o que acontece em um evento de sítio: surge um novo arco na linha de praia e uma nova aresta do diagrama de Voronoi começa a ser traçada. Uma informação importante é que é impossível o surgimento de um novo arco na linha de praia por qualquer outro meio.

Lema:

A única maneira pela qual um novo arco pode surgir na linha de praia é por meio de um evento de sítio.

Uma consequência imediata deste último lema é que a linha de praia consiste de no máximo 2n - 1 arcos parabólicos, pois cada sítio encontrado origina um novo arco e a divisão de um arco já existente em, no máximo, dois arcos, e não há nenhuma outra maneira de um arco surgir na linha de praia (BERG et al., 2000).

O segundo tipo de evento no algoritmo de varredura do plano acontece quando um arco já existente na linha de praia encolhe a um ponto e desaparece, conforme a Figura 83. Sejam α' o arco que desaparecerá e α e α'' os dois arcos vizinhos de α' antes que ele desapareça. Os arcos α e α' não podem fazer parte da mesma parábola; esta possibilidade pode ser excluída da mesma maneira como a primeira possibilidade na prova do último lema o foi. Assim, os três arcos α , α' e α'' são definidos por três sítios distintos: p_i , p_j e p_k . No momento em que α' desaparece, as parábolas definidas por estes três sítios passam por um ponto q em comum. O ponto q é equidistante a l e a cada um dos três sítios. Deste modo, existe um círculo passando por p_i , p_j , p_k e tendo q como seu centro cujo ponto mais baixo situa-se sobre l.



Figura 83 – Momento do desaparecimento de um arco da linha de praia

Fonte: BERG et al., 2000

Não pode haver um sítio no interior deste círculo, pois tal sítio estaria mais perto de *q* do que *q* estaria de *l*, contrariando o fato de que *q* está na linha de praia. Disto segue que o ponto *q* é um vértice do diagrama de Voronoi. Isto não é muito surpreendente, uma vez que observamos anteriormente que os pontos de rompimento da linha de praia traçam o diagrama de Voronoi. Assim, quando um arco desaparece da linha de praia e dois pontos de rompimento se encontram, duas arestas do diagrama de Voronoi também se encontram. Chamamos o evento em que a linha de varredura atinge o ponto mais baixo de um círculo através de três sítios definindo arcos consecutivos na linha de praia de um *evento de círculo*, (BERG et al., 2000).

Lema:

A única maneira pela qual um novo arco existente pode desaparecer da linha de praia é por meio de um evento de círculo.

Agora sabemos onde e como a estrutura combinatória da linha de praia muda: no evento de sítio aparece um novo arco e, em um evento de círculo um arco existente desaparece. Nós também sabemos como isso se relaciona com o diagrama de Voronoi sob construção: no evento de sítio uma nova aresta começa a crescer e, em um evento de círculo duas arestas crescentes se encontram para formar um vértice.

Resta, agora, encontrar a correta estrutura de dados para manter as informações necessárias durante a varredura. Nosso objetivo é construir o diagrama de Voronoi, por isso precisamos de uma estrutura de dados que armazene a parte do diagrama de Voronoi computada até o momento. Precisamos também de duas estruturas de dados "padrão" para qualquer algoritmo de linha de varredura: uma fila de eventos e uma estrutura que represente o estado da linha de varredura. A última estrutura é uma representação da linha de praia. Estas estruturas de dados são implementadas da seguinte forma:

- Armazenamos o diagrama de Voronoi em construção em uma habitual estrutura de dados para subdivisões, a *lista de arestas duplamente encadeada*. Um diagrama de Voronoi, no entanto, não é uma verdadeira subdivisão, ele tem arestas que são semi-retas ou retas completas, e estas não podem ser representados em uma lista de arestas duplamente encadeadas. Durante a construção isto não é um problema, pois a representação da linha de praia, descrita a seguir, tornará possível acessar eficientemente as partes relevantes desta lista. Mas, após o término dos cálculos, queremos ter uma lista de arestas duplamente encadeada válida. Para este propósito, adicionamos à nossa cena uma grande caixa delimitadora, que seja grande o suficiente para que contenha todos os vértices do diagrama de Voronoi. A subdivisão final estabelecida conterá então a caixa delimitadora, Figura 84, mais a parte do diagrama de Voronoi dentro dela;
- A linha de praia é representada por uma árvore de busca binária equilibrada τ ; ela é a estrutura de status. Suas folhas correspondem aos arcos da linha de praia, que é x-monótona, em uma forma ordenada: a folha mais à esquerda representa o arco mais à esquerda, a próxima folha representa o segundo arco mais à esquerda, e assim por diante. Cada folha μ armazena o sítio que define o arco que ela representa. Os nós internos de τ representam os pontos de rompimento sobre a linha de praia. Um ponto de rompimento é armazenado em um nó interno por uma tupla ordenada de sítios p_i, p_j , onde p_i define a parábola à esquerda do ponto de rompimento e p_j define a parábola à direita. Usando esta representação da linha de praia, podemos encontrar em um tempo $\mathcal{O}(n \log n)$ o arco da linha de praia situada acima de um novo

sítio. Em um nó interno, nós simplesmente comparamos a coordenada x do novo sítio com a coordenada x do ponto de rompimento, que pode ser calculado a partir da tupla de sítios e da posição da linha de varredura em tempo constante. Observe que não armazenamos explicitamente as parábolas.

Em τ nós também armazenamos ponteiros para as outras duas estruturas de dados usadas durante a varredura. Cada folha de τ , representando um arco α , armazena um ponteiro para um nó na fila de eventos, ou seja, para o nó que representa o evento de círculo no qual α desaparecerá. Esse ponteiro é nulo se nenhum evento de círculo existe onde α desaparecerá ou se este evento de círculo ainda não fora detectado. Finalmente, cada nó interno ν tem um ponteiro para uma meia-aresta da lista de arestas duplamente conectada do diagrama de Voronoi. Mais precisamente, ν tem um ponteiro para uma das metades de uma aresta sendo traçada pelo ponto de rompimento representado por ν , (BERG et al., 2000);

 A fila de eventos Q é implementada como uma fila de prioridade, onde a prioridade de um evento é a sua coordenada y. Ela armazena os eventos seguintes que já são conhecidos. Para um evento de sítio, nós simplesmente armazenamos o próprio sítio. Para um evento de círculo, o ponto evento que armazenamos é o ponto mais baixo do círculo, com um ponteiro para a folha em τ que representa o arco que desaparecerá no evento.



Figura 84 – Caixa delimitadora, com os vértices de Voronoi internos a ela. Esta caixa serve para limitar as arestas (dos polígonos) que se extendem ao infinito ou a distâncias muito grandes.

Fonte: BERG et al., 2000

Todos os eventos de sítio são conhecidos de antemão, mas os eventos de círculo não. E isto nos leva a um assunto final, que devemos discutir: a chamada detecção de eventos de círculo.

Durante a varredura, a linha de praia muda sua estrutura topológica a cada evento. Isto pode ocasionar o aparecimento de novas triplas de arcos consecutivos na linha de praia, e também o desaparecimento de triplas existentes. O algoritmo que estamos descrevendo (algoritmos de varredura do plano) se assegurará que para cada três arcos consecutivos

na linha de praia, que definem um potencial evento de círculo, este potencial evento está armazenada na fila de eventos Q. Há duas sutilezas envolvidas nisto:

Primeiramente, pode haver triplas consecutivas das quais dois pontos de rompimento não convirjam, isto é, as direções nas quais eles se movem são tais que eles não se encontrarão no futuro; isto acontece quando os pontos de rompimento movem-se ao longo de dois bissetores a partir do ponto de interseção. Neste caso, a tripla não define um potencial evento de círculo.

Em segundo lugar, mesmo se a tripla possuir pontos de rompimento convergentes, o correspondente evento de círculo pode não acontecer: pode ocorrer de a tripla desaparecer (por exemplo, devido ao surgimento de um novo sítio na linha de praia) antes de o evento acontecer. Neste caso, chamamos o evento de um alarme falso.

Resumindo, em cada evento, o algoritmo verifica todas as novas triplas de arcos consecutivos que aparecem. Por exemplo, em um evento de sítio podemos obter três novas triplas: uma onde o novo arco é o arco esquerdo da tripla, uma onde ele é o arco do meio, e uma onde ele é o arco da direita. Quando tal nova tripla tem pontos de rompimento convergentes, o evento é inserido na fila de eventos Q. Observe que, no caso de um evento de sítio, a tripla com o novo arco sendo o arco do meio nunca proporcionará um evento de sítio, a pois os arcos da esquerda e da direita, da tripla, são procedentes da mesma parábola, portanto, os pontos de rompimento devem divergir. Além disso, para todas as triplas que desaparecem é verificado se elas têm um correspondente evento em Q. Se assim for, o evento é, aparentemente, um alarme falso, e é excluido de Q. Isto pode ser feito por meio dos ponteiros das folhas em τ para o correspondente evento de ciclo em Q, (BERG et al., 2000).

Lema:

Todo vértice de Voronoi é detectado por meio de um evento de círculo.

Descreveremos, então, o algoritmo de varredura do plano em detalhes. Observe que, depois que todos os eventos foram tratados e a fila de eventos Q está vazio, a linha de praia ainda não desapareceu. Os pontos de rompimento que ainda estão presentes correspondem às arestas semi-infinitas do diagrama de Voronoi. Como afirmado anteriormente, um lista duplamente encadeada de arestas não pode representar arestas semi-infinitas, por isso devemos adicionar uma caixa delimitadora à superfície, na qual estas arestas possam ser atadas. A estrutura geral do algoritmo é como se segue:

Lema:

O algoritmo é executado em um tempo $O(n \log n)$ e utiliza O(n) para armazenamento.

Algoritmo 4: VoronoiDiagram(P) - Algoritmo de Fortune para construção do diagrama de Voronoi.

Input: Um conjunto $P := \{p_1, ..., p_n\}$ de sítios (pontos) no plano.

Output: O diagrama de Voronoi Vor(P) dentro de uma caixa delimitadora, em uma lista D duplamente encadeada de arestas.

1. Inicialize a fila de eventos Q com todos os eventos de sítio, inicialize uma estrutura τ com um estatus vazio e uma lista D de arestas, vazia, duplamente encadeada.

while Q não está vazia do

Remova o evento de Q com a maior coordenada y.

if o evento é um evento de sítio, ocorrendo no sítio p_i then | HandleSiteEvent(p_i).

end

else

HandleCircleEvent(γ), onde γ é a folha de τ representando o arco que desaparecerá.

end

end

2. O nó interno, ainda presente em τ corresponde à aresta semi-infinita do diagrama de Voronoi. Calcule a caixa delimitadora que contém todos os vértices do diagrama em seu interior, e anexe a aresta semi-infinita ao a ela atualizando a lista de arestas, duplamente encadeada, de forma apropriada.

3. Examine as semi-arestas da lisa de arestas duplamente encadeadas para adicionar os registros da célula e os ponteiros direcionados para eles e saindo deles.

Algoritmo 5: HandleSiteEvent(P_i) - Sub-rotina para tratamento dos eventos de sítio.

1. Se τ esta vazia, insira p_i nela (de forma que se constitua de uma única folha, armazenando p_i) e retorne. De outra forma, continue com os passos do bloco *while*, excluindo o bloco *else*.

2. Procure, em τ , pelo arco α verticalmente acima de p_i . Se a folha representante de α tem um ponteiro para um evento de círculo em Q, então, este evento de círculo é um falso alarme e ele deve ser excluído de Q.

- 3. Substitua a folha de τ que representa α por uma subárvore contendo três folhas. A folha do meio armazena o novo sítio p_i e as outras duas folhas armazenam o sítio p_j que era originalmente armazenado com α . Armazene as tuplas p_j, p_i e p_i, p_j representando os novos pontos de rompimento nos dois novos nós internos. Faça um rebalanceamento de τ se necessário.
- 4. τ cria registros de semi-aresta na estrutura do diagrama de Voronoi para a aresta que separa V(p_i) e V(p_j), a qual será traçada pelos dois novos pontos de rompimento.
- 5. Verifique a tripla de arcos consecutivos onde o novo arco para p_i é o arco esquerdo, para ver se os pontos de rompimento convergem. Se sim, insira o evento de círculo em Q e adicione ponteiros entre o nó em τ e o nó em Q. Faça o mesmo para a tripla onde o novo arco é o arco direito.

Algoritmo 6: HandleCircleEvent(γ) - Sub-rotina para tratamento dos eventos de círculo.

- 1. Apagar a folha γ que representa o arco α em processos de exclusão de τ . Atualize as tuplas que representam os pontos de rompimento nos nós internos. Faça a operação de rebalanceamento de τ , se necessário. Apague todos os eventos de círculo em Q que envolvam α ; estes podem ser encontrados por meio dos ponteiros do predecessor e do sucessor de γ em τ . (O evento de círculo no qual α é o arco central está, em tempo presente, sendo tratado, e já foi excluído de Q).
- 2. Adicione o centro do círculo que causa o evento como um registro de vértice na lista D (duplamente encadeada) de arestas, que armazena o diagrama de Voronoi em construção. Crie dois registros de semi-aresta, correspondentes ao novo ponto de rompimento da linha de praia. Defina os ponteiros, de forma adequada, entre esses registros. Anexe os três novos registros aos registros de semi-aresta que findam no vértice.
- 3. Verifique a nova tripla de arcos consecutivos que contém o vizinho esquerdo anterior de α como seu arco médio para ver se os dois pontos de rompimento da tripla convergem. Se sim, insira o correspondente evento de círculo em Q e estabeleça ponteiros entre o novo evento de círculo em Q e a correspondente folha em τ . Faça o mesmo para a tripla onde o antigo vizinho direito é o arco central.

Fonte: BERG et al., 2000

Agora, algumas palavras sobre os casos degenerados. O algoritmo manipula os eventos de cima para baixo. Há, então, uma degenerecência quando dois ou mais eventos situam-se sobre uma linha horizontal comum. Isto acontece, por exemplo, guando há dois sítios com a mesma coordenada y. Esses eventos podem ser tratatados em qualquer ordem quando suas coordenadas x são distintas. Assim, quebramos os laços entre eventos com a mesma coordenada y mas com diferentes coordenadas x, arbitrariamente. Contudo, se isto acontece logo no início do algoritmo, isto é, se o segundo evento de sítio tem a mesma coordenada y que o primeiro, então, um código especial é necessário, pois ainda não há arco acima do segundo sítio. Agora, suponha que haja pontos de evento que coincidam. Por exemplo, haverá vários eventos de círculo coincidentes quando há quatro ou mais sítios cocirculares, Figura 85, tal que o interior do círculo através deles esteja vazio. O centro do círculo é um vértice do diagrama de Voronoi. O grau deste vértice é, pelo menos, quatro. Poderíamos escrever um código especial para tratar tal caso degenerado, mas não há necessidade de assim proceder. O que acontecerá se deixarmos o algoritmo tratar estes eventos em uma ordem arbitrária? Em vez de produzir um vértice de grau quatro, ele apenas produzirá dois vértices de grau três no mesmo local, com uma aresta de comprimento zero entre eles. Estas arestas degeneradas podem ser removidas em um passo posterior, se desejado, (BERG et al., 2000).

Além dessas degenerecências na escolha da ordem dos eventos, podemos, também, encontrar degenerecências enquanto manipulamos um evento. Isto ocorre quando o sítio p_i que processamos esta localizado exatamente abaixo do ponto de rompimento entre dois



Figura 85 – Quatro sítios cocirculares. Este é um caso degenerado, onde ocorrem dois vértices (no centro) com grau 3 e uma aresta de comprimento zero entre eles.

Fonte: BERG et al., 2000

arcos sobre a linha de praia, Figura 86. Neste caso, o algoritmo separa os dois arcos e insere um arco para p_i entre os dois pedaços, um dos quais possui comprimento zero. Este pedaço, de comprimento zero, agora é o arco central de uma tripla que define um círculo de evento. O ponto mais baixo deste círculo coincide com p_i . O algoritmo insere este evento de círculo na fila de eventos Q, pois há três arcos consecutivos na linha de praia que o define. Quando este evento de círculo é manipulado, um vértice do diagrama de Voronoi é, corretamente, criado e um arco de comprimento zero pode ser excluído posteriormente. Uma outra degenerecência ocorre quando três arcos consecutivos, sobre a linha de praia, são definidos por três sítios colineares. Assim, estes sítios não definem um círculo, nem um evento de círculo, (BERG et al., 2000).



Figura 86 – Sítio localizado abaixo do ponto de rompimento. Este é mais um caso de degenerecência.

Fonte: BERG et al., 2000

Teorema:

O diagrama de Voronoi de um conjunto de n pontos (ou sítios) no plano pode ser calculado com o algoritmo de linha de varredura em um tempo $O(n \log n)$, usando O(n) para o

armazenamento.

Um algoritmo chamado *sweep2*, desenvolvido por Steve Fortune, que se baseia na linha de varredura do plano, está disponível no sítio <<u>http://www.netlib.org/voronoi/</u>> (Acesso em: 11 set. 2015.). Este algoritmo está escrito em C e é largamente utilizado na construção de diagramas de Voronoi e triangulações de Delaunay, em sistemas de duas dimensões (SKIENA, 1998).

APÊNDICE C – Prova da relação entre arestas e pontos de rompimento

C.1 Definição gométrica de parábola

Parábola é o conjunto de todos os pontos de um plano, equidistantes de um ponto fixo e de uma reta fixa desse plano (WINTERLE, 2010).

Obeservando a Figura 87



Figura 87 – Curva de uma parábola

Fonte: WINTERLE, 2010

e considerando a reta d e um ponto F, o qual se situa fora de d, podemos dizer que um ponto P qualquer pertence à parábola se, e somente se, a distância de P a F é igual à distância mínima entre P e d, ou seja

$$dist(P, F) = minima dist(P, d)$$
(69)

que, de acordo com a Figura 87, pode ser generalizada da forma

$$dist(P,F) = minima dist(P,P')$$
(70)

Assim, podemos afirmar que a distância entre os pontos $(P_1, P_2, P_3 \in P)$ e o ponto F é a mesma entre eles e a reta d.

C.2 Elementos de uma parábola



Figura 88 – Parábola e seus elementos

Fonte: WINTERLE, 2010

Abaixo, temos a definição dos elementos da parábola:

Foco é o ponto F.

Diretriz \acute{e} a reta d.

Eixo é a reta que passa por F e é perpendicular a d. Toda parábola é simétrica com relação ao seu eixo.

Vértice é o ponto V de interseção da parábola com o seu eixo.

C.3 Equação reduzida

Consideremos a parábola da Figura 88, onde temos V(0,0), um ponto P(x,y) qualquer da parábola, $F(0, \frac{p}{2})$, e a equação de d sendo $y = -\frac{p}{2}$. Cuidado para não confundir o ponto P com a distância p.

Pela definição de parábola, dada no apêndice anterior, $|\overline{FP}| = |\overline{P'P}|$. O cálculo destes segmentos de reta é trivial e direto, bastando para isto o uso do teorema de Pitágoras

$$|\overline{FP}| = |\overline{P'P}| \Longrightarrow \sqrt{(x-0)^2 + (y-\frac{p}{2})^2} = \sqrt{(x-x)^2 + (y+\frac{p}{2})^2}$$
 (71)

Elevando ambos os membros da Equação 71 ao quadrado e simplificando, chegaremos em

$$x^2 = 2py \tag{72}$$

que é a equação *reduzida* para este caso, onde temos V(0,0).

Observações

- O número real $p \neq 0$ é chamado *parâmetro da parábola*.
- Da Equação 72, concluimos que py ≥ 0, ou seja, se p > 0 a parábola tem concavidade para cima e vice-versa.
- O gráfico da Equação 72 é simétrico em relação ao eixo dos y, pois substituindo-se x por -x a equação não se altera.

C.4 Translação de eixos

Consideremos no plano cartesiano xOy um ponto O'(h, k), arbitrário. Vamos introduzir um novo sistema x'O'y' tal que os eixos O'x' e O'y' tenham a mesma unidade de medida, a mesma direção e o mesmo sentido dos eixos Ox e Oy. Assim, todo ponto P do plano tem duas representações: P(x, y) no sistema xOy e P(x', y') nos sistema x'O'y', conforme a Figura 89.



Figura 89 – Translação de eixos

Fonte: WINTERLE, 2010

Da Figura 89 podemos inferir que

$$x = x' + h$$
 e $y = y' + k;$ ou $x' = x - h$ e $y' = y - k$ (73)

que são as fórmulas de translação.

C.5 Outra forma da equação da parábola

Seja a parábola de vértice $V(h,k) \neq (0,0)$, conforme a Figura 90.



Figura 90 - Translação do eixo de parábola

Fonte: WINTERLE, 2010

Esta parábola, em relação ao sistema x'O'y'(O' = V) tem vértice na origem e, portanto, sua equação reduzida é

$$x^{\prime 2} = 2py^{\prime} \tag{74}$$

Substituindo a Equação 73 na Equação 74, teremos

$$(x-h)^2 = 2p(y-k)$$
(75)

que é a forma padrão para este caso e referida ao sistema xOy.

As observações em relação ao parâmetro *p* e a concavidade da parábola continuam as mesmas relatadas anteriormente (WINTERLE, 2010).

C.6 Pontos de rompimento formando arestas

Neste momento, após termos feito uma revisão sobre parábolas, demonstraremos que a reta que liga o caminho percorrido por um *ponto de rompimento* (ponto de interseção entre duas parábolas) de determinada *linha de praia* (a função que, para cada coordenada *x*, toca o mais baixo ponto de todas as parábolas (BERG et al., 2000)) forma uma aresta de Voronoi.

Decidimos por fazer esta demonstração devido à importância de sua compreensão e devido ao fato de ela não estar presente em nenhum dos livros citados nesta tese.

Da Figura 91, podemos extrair algumas relações geométricas que conduzem à comprovação da afirmação acima.



Figura 91 – ponto de rompimento

Temos, agora, uma situação inicial com dois sítios $F1(V_{1x}, b)$ e $F2(V_{2x}, a)$. Estes sítios poderiam estar em quaisquer posições do plano-xy, não havendo prejuízo algum para o raciocínio matemático aplicado. A linha reta mais grossa, na coordenada y = c, representa a diretriz, que chamamos de d, e os sítios citados anteriormente representam os focos de duas parábolas que formam uma linha de praia. Como sabemos, a interseção de duas parábolas forma o que chamamos de ponto de rompimento R. V_1 e V_2 representam os vértices das parábolas y_1 e y_2 que relacionam os focos (F1, F2) com a linha diretriz (linha cujo seguimento de reta que nasce de qualquer de seus pontos e que a ela é perpendicular, alcançando a parábola em determinado pontos, possui o mesmo comprimento que a distância que une este ponto da parábola até seu foco). A referida linha diretriz se move de cima para baixo. A medida em que d avanca para baixo, as parábolas, juntamente com a linha de praia (linha preta pontilhada) e o ponto de rompimento (interseção das parábolas sobre a linha de praia) também se movem, Figura 92. Na verdade, as parábolas se tornam outras, ou seja, teremos novas equações à medida que o sistema evolui. O que queremos demonstrar é que o deslocamento do ponto de rompimento traça uma aresta (linha preta contínua - Figura 92) do diagrama de Voronoi.

Uma informação importante é que os focos são imutáveis, ou seja, eles representam os sítios fixos. Mas a linha diretriz movimenta-se constantemente para baixo. Bem, se os focos são fixos, mas *d* muda constantemente, o que mais deverá mudar? A resposta é simples e óbvia: a equação das parábolas, juntamente com todos os seus pontos.



Figura 92 – Evolução das parábolas à medida em que d se desloca para baixo. Posição da linha de praia nos tempos $t_0, t_1 e t_2$.

Usando os parâmetros da Figura 91 e um pouco de álgebra é fácil ver que

$$\frac{P_1}{2} = V_{1y} - c \implies c = \frac{2V_{1y} - P_1}{2}$$
(76)

$$\frac{P_1}{2} = b - V_{1y} \implies b = \frac{2V_{1y} + P_1}{2}$$
(77)

$$\frac{P_1}{2} + \frac{P_1}{2} = b - c + V_{1y} - V_{1y} \implies P_1 = b - c$$
(78)

$$\frac{P_1}{2} - \frac{P_1}{2} = b - V_{1y} - V_{1y} + c \implies b + c = 2V_{1y}$$
(79)

$$\frac{P_2}{2} = V_{2y} - c \implies c = \frac{2V_{2y} - P_2}{2}$$
(80)

$$\frac{P_2}{2} = a - V_{2y} \implies a = \frac{2V_{2y} + P_2}{2}$$
 (81)

$$\frac{P_2}{2} + \frac{P_2}{2} = a - c + V_{2y} - V_{2y} \implies P_2 = a - c$$
(82)

$$\frac{P_2}{2} - \frac{P_2}{2} = a - V_{2y} - V_{2y} + c \implies a + c = 2V_{2y}$$
(83)

Igualando a Equação 76 e a Equação 80, teremos

$$\frac{2V_{1y} - P_1}{2} = \frac{2V_{2y} - P_2}{2} \implies P_2 - P_1 = 2(V_{2y} - V_{1y})$$
(84)

Dividindo por 2 a subtração da Equação 77 em relação á Equação 81, e utilizando a Equação 84

$$\frac{a-b}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{2(V_{2y} - V_{1y}) + (P_2 - P_1)}{2} \right]$$
$$= \frac{1}{2} \left[\frac{2(V_{2y} - V_{1y}) + 2(V_{2y} - V_{1y})}{2} \right]$$
$$= (V_{2y} - V_{1y})$$
(85)

Dividindo por 2 a adição da Equação 77 com a Equação 81.

$$\frac{a+b}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{2(V_{2y} + V_{1y}) + P_2 + P_1}{2} \right]$$
$$= \frac{2(V_{2y} + V_{1y}) + P_2 + P_1}{4}$$
(86)

De acordo com a Equação 75

$$(x - V_x)^2 = 2P(y - V_y) \implies y = \frac{(x - V_x)^2 + 2PV_y}{2P}$$
 (87)

Assim, teremos como equações genéricas das parábolas y_1 e y_2

$$y_1 = \frac{(x - V_{1x})^2 + 2P_1 V_{1y}}{2P_1}$$
(88)

е

$$y_2 = \frac{(x - V_{2x})^2 + 2P_2 V_{2y}}{2P_2} \tag{89}$$

lgualando y_1 e y_2 acharemos a coordenada x do ponto de rompimento R

$$\frac{(x - V_{1x})^2 + 2P_1V_{1y}}{2P_1} = \frac{(x - V_{2x})^2 + 2P_2V_{2y}}{2P_2}$$
$$P_2(x - V_{1x})^2 - P_1(x - V_{2x})^2 = 2P_1P_2(V_{2y} - V_{1y})$$

Expandindo os quadrados e sustituindo o último termo pela Equação 84

$$(P_2 - P_1)x^2 + 2(P_1V_{2x} - P_2V_{1x})x + P_2V_{1x}^2 - P_1V_{2x}^2 - P_1P_2(P_2 - P_1) = 0$$
(90)

Resolvemos a Equação 90 sabendo que, para equações do tipo $ax^2 + bx + cx = 0$, $x = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a}$, onde $\Delta = b^2 - 4ac$. Assim:

$$\Delta = 4(P_1V_{2x} - P_2V_{1x})^2 - 4(P_2 - P_1)[P_2V_{1x}^2 - P_1V_{2x}^2 - P_1P_2(P_2 - P_1)]$$

Que, após expandirmos o termo quadrado, efetuarmos as multiplicações e cancelarmos os termos de sinais opostos se torna

$$\Delta = 4P_1P_2[-2V_{1x}V_{2x} + V_{1x}^2 + V_{2x}^2 + (P_2 - P_1)^2] \text{ ou } \Delta = 4P_1P_2[(V_{2x} - V_{1x})^2 + (P_2 - P_1)^2]$$

E com isto, teremos

$$x = \frac{(P_2 V_{1x} - P_1 V_{2x}) \pm \sqrt{P_1 P_2 [(V_{2x} - V_{1x})^2 + (P_2 - P_1)^2]}}{P_2 - P_1}$$
(91)

A coordenada y de R pode ser encontrada, levando-se esta última equação em y_1 ou em y_2 .

Sabemos que os pontos de uma aresta de Voronoi são equidistantes aos sítios que por ela são separados. Dessa forma a distância entre F1 e R deve ser igual à distância entre F2 e R. Além disso, a aresta de Voronoi entre estes dois sítios deve correspondere ao segmento de reta que passa por R e pelo centro exato da reta que une F1 e F2, constituindo-se assim um bissetor entre estes dois pontos, conforme a Figura 93.



Figura 93 – Equidistância entre dois focos.

Fonte: http://slideplayer.pl/slide/425531/# - Acesso em: 10 set. 2015

De acordo com as propriedades das parábolas, já estudadas, sabemos que a distância dist(F1, R) é igual à distância mínima dist(R, d), mas como R é um ponto de intereseção entre y_1 e y_2 , concluímos que a distância dist(F2, R) também é igual à distância mínima dist(R, d), assim, teremos dist(F1, R) = dist(F2, R). Então, provando que essas premissas são verdadeiras, estaremos provando que R faz parte de uma aresta de Voronoi. Para tanto, consideraremos a Figura 94, de onde podemos inferir que

$$\kappa^{2} = (b - y)^{2} + (x - V_{1x})^{2}$$

$$\xi^{2} = (a - y)^{2} + (V_{2x} - x)^{2}$$

$$\psi^{2} = (y - c)^{2} + (x - x)^{2}$$



Figura 94 – Distâncias entre pontos

 $\operatorname{\mathsf{Em}} R \operatorname{\mathsf{temos}} y_1 = y$

$$y_1 = y = \frac{(x - V_{1x})^2}{2P_1} + V_{1y} \implies y = \frac{(x - V_{1x})^2}{2P_1} + \frac{2V_{1y}}{2}$$

Utilizando, agora a Equação 79 e a Equação 78

$$y = \frac{-(x - V_{1x})^2}{2(-P_1)} + \frac{c+b}{2} \implies y = \frac{-(x - V_{1x})^2}{2(-P_1)} + \frac{c+b}{2} \times \frac{c-b}{c-b}$$
$$y = \frac{-(x - V_{1x})^2}{2(c-b)} + \frac{c^2 - b^2}{2(c-b)} \implies 2(c-b)y = -(x - V_{1x})^2 + c^2 - b^2$$

Fazendo a multiplicação do termo à direita do sinal de igual, transferindo alguns termos para o outro lado do sinal de igual e somando y^2 em ambos os lados

$$b^{2} - 2by + y^{2} + (x - V_{1x})^{2} = y^{2} - 2cy + c^{2} \implies (b - y)^{2} + (x - V_{1x})^{2} = (y - c)^{2}$$

Que podemos escrever como

y

$$\kappa^2 = \psi^2 \quad \Longrightarrow \quad \kappa = \pm \psi.$$

Em R temos, também, $y_2 = y$ e, sabendo que $(\alpha - \beta)^2 = (\beta - \alpha)^2$

$$y_2 = y = \frac{(x - V_{2x})^2}{2P_2} + V_{2y} \implies y = \frac{(V_{2x} - x)^2}{2P_2} + \frac{2V_{2y}}{2}$$

Utilizando a Equação 83 e a Equação 82

$$y = \frac{-(V_{2x} - x)^2}{2(-P_2)} + \frac{a+c}{2} \implies y = \frac{-(V_{2x} - x)^2}{2(-P_2)} + \frac{a+c}{2} \times \frac{c-a}{c-a}$$
$$= \frac{-(V_{2x} - x)^2}{2(c-a)} + \frac{c^2 - a^2}{2(c-a)} \implies 2(c-a)y = -(V_{2x} - x)^2 + c^2 - a^2$$
Fazendo a multiplicação do termo à direita do sinal de igual, transferindo alguns termos para o outro lado do sinal de igual e somando y^2 em ambos os lados

 $a^{2} - 2ay + y^{2} + (V_{2x} - x)^{2} = y^{2} - 2cy + c^{2} \implies (a - y)^{2} + (V_{2x} - x)^{2} = (y - c)^{2}$

Que podemos escrever como

$$\xi^2 = \psi^2 \quad \Longrightarrow \quad \xi = \pm \psi.$$

Obviamente, se $\kappa = \pm \psi$ e $\xi = \pm \psi$, então $\kappa = \xi$, provando, ao mesmo tempo, que a relação de nossos sítios/focos com a linha diretriz obedece à definição de parábola e que o ponto de rompimento entre elas (parábolas) está sobre uma reta que obedece à definição de aresta de Voronoi.

Para acharmos a equação da reta que gera a aresta de Voronoi basta termos dois pontos. Um ponto nós acabamos de descobrir, é o ponto *R*. O outro ponto nós ainda não mencionamos mas está facilmente ao nosso alçance. Para determiná-lo, basta lembrarmos que, de acordo com a definição da aresta de Voronoi, todos os pontos equidistantes dos dois sítios separados por esta aresta fazem parte dela, então, o ponto que se situa entre estes dois sítios (que no nosso caso são os focos das parábolas) e que faz parte da reta que os uni também é um ponto da reta que representa a aresta de Voronoi, lembrando que estas duas retas devem fazer um ângulo de noventa graus entre si.

Desta forma, para acharmos as coordenadas do segundo ponto e encontrarmos a reta que gera a aresta de Voronoi, construimos um retângulo e suas diagonais (linhas tracejadas) sobre o sistema de coordenadas da Figura 94.

Por meio da Figura 95 podemos concluir facilmente quais são as coordenadas do ponto central C_T do retângulo desenhado.

Essas coordenadas, vistas no desenho à esquerda da Figura 96, são (ρ, τ) , ou, explicitamente

$$\left(\frac{V_{2x}+V_{1x}}{2},\frac{a+b}{2}\right) \tag{92}$$

Lembrando da Equação 86, podemos reescrever a Equação 92 como

$$\left(\frac{V_{2x}+V_{1x}}{2},\frac{2(V_{2y}+V_{1y})+P_2+P_1}{4}\right)$$
(93)

Sabendo que a reta $\overline{F_1F_2}$ é a base de um triângulo isósceles, conforme o desenho do lado direito da Figura 96, é fácil perceber que a reta $\overline{RC_T}$ faz, obrigatoriamente, um ângulo de 90° com ela, ou seja, $\overline{F_1F_2} \perp \overline{RC_T}$.



Figura 95 – retângulo sobre as coordenadas da Figura 94



Figura 96 - Coordenadas do segundo ponto da reta geratriz da aresta de Voronoi

Agora que temos as coordenadas de R e C_T , achar a reta que gera a aresta de Voronoi torna-se um trabalho muito tranquilo

$$Y = AX + B \tag{94}$$

Que nos leva em

$$\frac{2(V_{2y} + V_{1y}) + P_2 + P_1}{4} = A\left(\frac{V_{2x} + V_{1x}}{2}\right) + B$$
(95)

Chamando as coordenadas (x, y), do nosso primeiro ponto de rompimento R, de (λ, γ) .

$$\gamma = A\lambda + B \tag{96}$$

Subraindo a Equação 95 da Equação 96 e isolando o A teremos

$$\gamma - \frac{2(V_{2y} + V_{1y}) + P_2 + P_1}{4} = A\left[\lambda - \frac{V_{2x} + V_{1x}}{2}\right]$$
(97)

$$A = \frac{4\gamma - 2(V_{2y} + V_{1y}) - P_2 - P_1}{2(2\lambda - V_{2x} - V_{1x})}$$
(98)

Voltando com a Equação 98 na Equação 96

$$B = \gamma - \left[\frac{4\gamma - 2(V_{2y} + V_{1y}) - P_2 - P_1}{2(2\lambda - V_{2x} - V_{1x})}\right]\lambda$$
(99)

Agrupando os dois termos do lado direito do sinal de igual com o auxilio do mmc, procedendo as multiplicações e cortando os termos iguais mas de sinais contrários, chegamos em

$$B = \frac{2\lambda(V_{2y} + V_{1y}) - 2\gamma(V_{2x} + V_{1x}) + \lambda(P_2 + P_1)}{2(2\lambda - V_{2x} - V_{1x})}$$
(100)

Voltando com a Equação 100 e a Equação 98 na Equação 94

$$Y = \frac{4\gamma - 2(V_{2y} + V_{1y}) - P_2 - P_1}{2(2\lambda - V_{2x} - V_{1x})} X + \frac{2\lambda(V_{2y} + V_{1y}) - 2\gamma(V_{2x} + V_{1x}) + \lambda(P_2 + P_1)}{2(2\lambda - V_{2x} - V_{1x})}$$
(101)

Agora, testamos quatro valores diferentes de *c*, na Figura 91, simulando, assim, os passos de tempo na evolução do sistema, conforme Figura 92. As coordenadas dos pontos, calculadas através das interseções das parábolas, coincidiram, perfeitamente, com os valores calculados por meio da equação da reta, ou seja, da Equação 101.

Tabela 4 – Coordenadas dos pontos de rompimento.

	Valores X	$Y_{par{\acute{a}}bolas}$	Y_{reta}
R 1	11,4499443206	5,55005567936	5,55005567936
R 2	13,1424945589	3,85750544106	3,85750544106
R 3	14,8230690506	2,17693094942	2,17693094942
R 4	16,4968353163	0,50316468373	0,50316468373

Para os cálculos anteriores, utilizamos o seguinte algoritmo

Algoritmo 7: Algoritmo para cálculo das coordenadas do ponto R, por meio da interseção das parábolas e por meio da reta

Input: valores de a, b, c, V_{1x}, V_{2x}

Output: Coordenadas $x \in y$ dos pontos R

 $a \leftarrow 14; b \leftarrow 10; V_{1x} \leftarrow 3; V_{2x} \leftarrow 7$

function - Xromp Calcula a coordenada x do ponto R por meio das parábolas function - Yromp Calcula a coordenada y do ponto R por meio das parábolas

function - Yreta Calcula a coordenada y do ponto R por meio da reta

 $listac \leftarrow (-4, -8, -12, -16)$

for $c \in listac$ do

calcula parâmetros de *Xromp* e de *Yromp*

 $x \leftarrow Xromp$

 $y \gets Yromp$

Print $x \in y$

end

Calcula parâmetros de Xromp e de Yromp para c=-4

 $\lambda \leftarrow Xromp$

 $\gamma \leftarrow Yromp$

for $c \in listac$ do

```
calcula parâmetros de Xromp
```

 $x \leftarrow Xromp$

```
y \leftarrow Yreta
```

Print $x \in y$

end