



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

REOLOGIA $\mu(I)$ EM ESCOAMENTOS GRANULARES POR MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS

LETÍCIA OLIVEIRA SILVA

Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

BELO HORIZONTE
FEVEREIRO DE 2020

LETÍCIA OLIVEIRA SILVA

**REOLOGIA $\mu(I)$ EM ESCOAMENTOS GRANULARES
POR MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS**

Dissertação apresentado 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 Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
BELO HORIZONTE
FEVEREIRO DE 2020

Silva, Leticia Oliveira
S586r Reologia $\mu(I)$ em escoamentos granulares por método de elementos discretos / Leticia Oliveira Silva. – 2020.
xiii, 56 f.

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

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria.

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

1. Materiais granulares – Teses. 2. Dinâmica molecular – Teses.
3. Reologia – Teses. 4. Momentos de inercia – Teses. 5. Materiais nanoestruturados – Teses. 6. Método de elemento discreto – Teses. I. Faria, Allbens Atman Picardi. II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título.

CDD 511.3



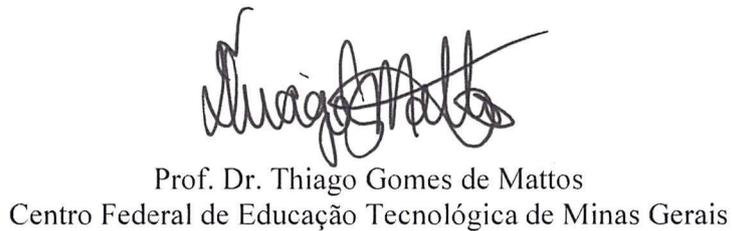
SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

“REOLOGIA $\mu(I)$ EM ESCOAMENTOS GRANULARES POR MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS”

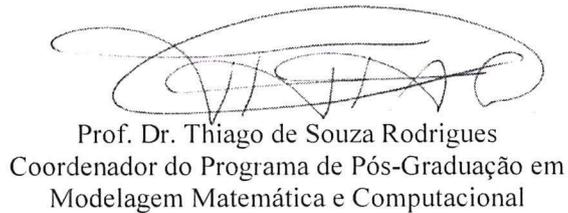
Dissertação de Mestrado apresentada por **Leticia Oliveira Silva**, em 27 de fevereiro de 2020, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:


Prof. Dr. Allbers Atman Picardi Faria (Orientador)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Felipe Galvão Rafael Magalhães
Universidade Federal de Minas Gerais


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

Visto e permitida a impressão,


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

Dedico este trabalho a todos aqueles que de alguma forma contribuíram com meu desenvolvimento.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por me dar o fôlego da vida e por me deixar ainda de pé a cada dia.

Ao Allbens, pela paciência de ouvir e ensinar, pelo exemplo como pessoa e como acadêmico. Agradeço por compartilhar seus ricos conhecimentos yogues.

Aos amigos e professores do MMC.

Ao CEFET-MG que nos forneceu materiais e condições para desenvolver essa pesquisa.

Agradecimento especial a CAPES e FAPEMIG pelo apoio financeiro.

“A persistência é o menor caminho do êxito.”
(Charles Chaplin)

Resumo

Neste trabalho, estudamos a reologia de um sistema granular utilizando o Método de Elementos Discretos (DEM). A reologia $\mu(I)$ é um problema conhecido intensamente estudado a partir do cisalhamento de um meio granular para diferentes valores do número de inércia (I), quantidade adimensional que relaciona a taxa de cisalhamento e a pressão imposta sobre o sistema. Um dos principais objetivos nos estudos relacionados à reologia $\mu(I)$ é a verificação do funcional que rege a dependência entre as variáveis reológicas, ou seja, a dependência do atrito efetivo em relação ao número de inércia. O objetivo deste trabalho foi estudar o comportamento de sistemas confinados sob cisalhamento plano, e verificar o comportamento reológico previsto pela reologia $\mu(I)$. Para isso, mediu-se o perfil de velocidades e tensões. Utilizou-se a técnica conhecida como Dinâmica Molecular (DM) um dos Métodos de Elementos Discretos. A simulação do Método de Elementos Discretos (DEM) foi a abordagem adotada, visto que é uma ferramenta poderosa presente em grande parte da literatura dos sistemas granulares. Os resultados obtidos foram parcialmente validados.

Palavras-chave: Materiais granulares. Dinâmica molecular. Reologia. Número de Inércia. Escoamento de grãos. Métodos de Elementos Discretos.

Abstract

In this work, we study the rheology of a granular system using the Discrete Element Method (DEM). The $\mu(I)$ rheology is a known problem intensively studied by application of shear a granular medium for different values of the number of inertia (I), a dimensionless quantity that relates the shear rate and pressure imposed on the system. The main objective verify to the rheology $\mu(I)$ is to verify the functional that regulates the dependence between the rheological variables, that is, the dependence of the effective attribute in relation to the number of inertia. The aim of this work was to study systems confined to the shear plane, and to verify the rheological behavior predicted by the $\mu(I)$ rheology. For this, we calculate the speed and tension profile. We used a technique known as Molecular Dynamics (DM) in Discrete Element Methods. The Discrete Element Method (DEM) simulation was adopted, as it is a powerful tool present in much of the granular systems literature. The results obtained were separated and validated.

Keywords: Granular materials. Molecular dynamics. Rheology. Inertia Number. Grain flow. Discrete Element Methods.

Lista de Figuras

Figura 1 – Classificação do material particulado em função do tamanho da partícula.	4
Figura 2 – Efeito castanha do Pará.	5
Figura 3 – Dilatância em meios granulares.	6
Figura 4 – Avalanche em meios granulares.	8
Figura 5 – Contato elástico entre duas esferas.	10
Figura 6 – Modelo reológico de Kelvin-Voigt.	13
Figura 7 – Atrito coulombiano. a) Gráfico de Coulomb. b) Gráfico de Coulomb regularizado.	14
Figura 8 – Atrito modelado por Cundall e Strack (1979).	15
Figura 9 – Forças em um sistema de discos polidispersos sem atrito sob compressão uniforme.	16
Figura 10 – Diferentes geometrias de cisalhamento.	18
Figura 11 – Esquema da célula de cisalhamento.	19
Figura 12 – Cisalhamento plano: a) Regime <i>quasi-estático</i> ($I = 10^{-2}$). b) Regime colisional ($I = 0.2$).	21
Figura 13 – Variação da compactação em função do número de inércia.	24
Figura 14 – Variação do coeficiente de atrito efetivo em função do número de inércia.	25
Figura 15 – Diagrama qualitativo dos regimes de fluxo.	26
Figura 16 – Empilhamento granular em repouso.	33
Figura 17 – Sistema de grãos.	37
Figura 18 – Sistema com 3600 grãos confinados submetidos ao cisalhamento.	39
Figura 19 – Célula de cisalhamento planar bidimensional destacada em amarelo, com condição periódica de contorno imposta na direção x do cisalhamento.	39
Figura 20 – Tensão normal em função da altura para vários passos de tempo (velocidade = 0,001).	40
Figura 21 – Tensão tangencial em função da altura para vários passos de tempo (velocidade = 0,001).	41
Figura 22 – <i>Packing fraction</i> em função da altura (velocidade = 0,001).	42
Figura 23 – Tensão normal em função da altura para vários passos de tempo e velocidades.	43
Figura 24 – Tensão tangencial em função da altura para vários passos de tempo e velocidades.	43
Figura 25 – <i>Packing fraction</i> em função da altura para vários passos de tempo e velocidades.	44
Figura 26 – Velocidade normal em função da altura para vários passos de tempo (velocidade = 0,001).	45

Figura 27 – Velocidade tangencial em função da altura para vários passos de tempo (velocidade = 0,001).	46
Figura 28 – Velocidade normal em função da altura para vários passos de tempo. . .	47
Figura 29 – Velocidade tangencial em função da altura para vários passos de tempo.	47
Figura 30 – Gráfico que representa a reologia $\mu(I)$	48

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Parâmetros do sistema.	36
Tabela 2 – Parâmetros utilizados	48

Lista de Abreviaturas e Siglas

DEM Método de Elementos Discretos

DM Dinâmica Molecular

Sumário

1 – Introdução	1
2 – Materiais Granulares	3
2.1 Fenomenologia de Sistemas Granulares	4
2.2 Forças de Contato	8
2.2.1 Força Elástica	11
2.2.2 Força de Amortecimento	13
2.2.3 Força de Atrito	14
2.2.4 Cadeias de Força	15
2.3 Cisalhamento Plano	16
2.4 Leis de Comportamento Reológico	19
2.4.1 Análise Dimensional	20
2.4.1.1 Regimes de Fluxo	22
3 – Metodologia	27
3.1 Métodos de Elementos Discretos (DEM)	27
3.2 <i>Velocity-Verlet</i>	29
3.3 Passo de Tempo	31
3.4 <i>Predictor-Corrector</i> e Listas de <i>Verlet</i>	32
3.5 Tensão em Sistemas Granulares	33
4 – Análise e Discussão dos Resultados	36
4.1 Cisalhamento Sistema Granular	36
5 – Conclusão	50
5.1 Trabalhos Futuros	50
Referências	51

Capítulo 1

Introdução

Sistemas granulares são uma das formas mais interessantes de organização da matéria (JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996) (LUDING, 1998) (CHEVOIR; ROUX, 2000) (DURAN, 2012). O estudo dos meios granulares na ciência moderna iniciou-se com o trabalho de Coulomb e seu artigo datado de 1773 (ALLEN M.P.; TILDESLEY, 1989), que investiga a estabilidade e as falhas de pilhas granulares. Após esse trabalho pioneiro desenvolvido por Coulomb, vários cientistas se interessaram pelo comportamento dos materiais granulares durante suas pesquisas: Chladni (1756-1827), Faraday (1791-1867), Hagen (1793-1884), Darcy (1803-1858), Rankine (1820-1872) e Reynolds (1842– 1912) (GENNES, 1998) (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

A física dos materiais granulares recebia pouca atenção por parte da comunidade de física estatística, sendo primordialmente um domínio da engenharia (TUZUN; HOULSBY, 1982) (MEHTA, 2007). A partir da década de 80, devido às inúmeras aplicações envolvendo materiais granulares e à melhoria da performance do processamento computacional, o assunto encontrou um interesse renovado na comunidade da física, que buscou compreender melhor o comportamento dos sistemas granulares (GENNES, 1998) (RAJCHENBACH, 2000) (DURAN, 2012). Com o constante aumento da capacidade de processamento dos computadores, é possível tratar sistemas de grãos descontínuos, com milhares de contatos, como compostos de partículas discretas que interagem entre si em microescala (NEDDERMAN, 2005). Esta abordagem de sistemas descontínuos é amplamente utilizada em diversas áreas da ciência e é comumente referida como o Método dos Elementos Discretos (DEM) (THORNTON, 2015). Como resultado, vários grupos de pesquisas dedicados ao trabalho em materiais granulares surgiram em todo o mundo nas últimas décadas. Tais grupos conceberam observações experimentais, simulações numéricas, novos conceitos e modelos teóricos (BROWN; JAEGER, 2014) (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Esse interesse é devido à grande relevância tecnológica desses materiais (THORNTON, 2015). Apesar de sua importância em muitas áreas da ciência e tecnologia, a maioria das descrições analíticas dos sistemas granulares permanece sem uma descrição teórica

abrangente (MATUTTIS; CHEN, 2014) (MELLO et al., 2017).

Os materiais granulares podem ser definidos como um sistema discreto compreendendo conjuntos de grãos individuais, ou aglomerados, que podem abranger diversas ordens de magnitude em tamanho, variando de alguns microns a milhares de metros (HUTTER; RAJAGOPAL, 1994) (GENNES, 1998) (DURAN, 2012). Os meios granulares são de forma e natureza extremamente variadas. A física dos materiais granulares trabalha principalmente com objetos macroscópicos. O termo “macroscópico” implica que os objetos que compõem esses materiais devem, no mínimo, ser visíveis a olho nu (MEHTA, 2007) e não dispor de influência das propriedades inerciais e térmicas devido ao meio intersticial (NEDDERMAN, 2005).

Os meios granulares são de extrema importância técnica e econômica em uma grande variedade de aplicações industriais (DURAN, 2012). A tecnologia industrial usada no tratamento de sistemas granulares envolve diversos processos. Assim sendo, as indústrias que lidam com materiais granulares, como é o caso dos setores de alimentos, construção, farmacêutico, produtos agrícolas e químicos, devem saber como manusear e armazenar de forma eficiente e segura esses materiais (RAJCHENBACH, 2000) (MEHTA, 2007). De fato, a maioria das indústrias tem que lidar com perda monetária devido a problemas no transporte e processamento desses materiais (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Por essa razão, surge a necessidade do estudo do comportamento de materiais granulares sujeitos a essas condições na indústria (SHINBROT; MUZZIO, 1998) (NEDDERMAN, 2005).

Neste trabalho, desenvolvemos códigos baseados em Dinâmica Molecular (DM) com o intuito de avaliar o comportamento de sistemas granulares confinados sob cisalhamento plano. Objetiva-se verificar o atrito efetivo em função do número de inércia através do perfil de velocidades e tensões. Dispomos como objetivo reproduzir os resultados no sistema estudado por Cruz et al. (2005).

A seguir, no Capítulo 2, será discutida a fenomenologia dos materiais granulares, muito rica e contra-intuitiva, caracterizando a relevância de seu estudo. Posteriormente, no Capítulo 3, apresentaremos os detalhes da simulação do Método dos Elementos Discretos (DEM) que usamos para nossa análise. A avaliação dos resultados obtidos é discutida no Capítulo 4.

Capítulo 2

Materiais Granulares

Os materiais granulares ocupam um lugar de destaque em nosso cotidiano. Estes materiais são onipresentes na natureza, como, por exemplo, minério, cascalho, areia, grãos de modo geral, como arroz, açúcar, café, entre muitos outros (POULIQUEN; CHEVOIR, 2002) (NEDDERMAN, 2005) (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Além do fato do fluxo granular estar ao nosso redor, estes são responsáveis por fenômenos como, formação de dunas de areia, avalanches e transporte de sedimentos em rios (NEDDERMAN, 2005) (MEHTA, 2007). A produção anual mundial de grãos é vasta, atingindo aproximadamente dez bilhões de toneladas (DURAN, 2012). O processamento de meios granulares consome cerca de 10% de toda a energia produzida no planeta (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). A classe de materiais granulares ocupa o segundo lugar, na escala de prioridades da atividade humana, ficando somente atrás da água (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Desse modo, qualquer avanço na compreensão da física dos sistemas granulados tem potencialmente um alto impacto econômico (DURAN, 2012).

Algumas propriedades dos materiais granulares são responsáveis por problemas observados em indústrias que os utilizam (DURAN et al., 1998) (NEDDERMAN, 2005). O comportamento dos materiais granulares é, muitas vezes, imprevisível, e esse se constitui como um dos principais motivos pelos quais ele é estudado. Nesse sentido, sanar as dificuldades encontradas por fenômenos gerados por esses materiais ainda é um desafio para a comunidade científica. Para um caso mais geral, o armazenamento e o transporte desses materiais podem acarretar perdas financeiras no processo industrial (LÄTZEL; LUDING; HERRMANN, 2000). Alguns dos problemas típicos dos meios granulares na indústria acontece durante seu transporte por meio de correias (TAVARES; FARIA, 2016) e passagem por funis (MAGALHAES, 2013), provocando engarrafamento. Tais adversidades instigam a comunidade científica a estudar os sistemas granulares.

Os materiais granulares podem abranger diversas ordens de tamanho, não há limite superior para o tamanho dos constituintes, porém existe uma faixa de tamanho mínimo para levarmos

em consideração (NEDDERMAN, 2005), como ilustra a Figura 1. Essa limitação no tamanho dos grãos corresponde a uma restrição quanto ao tipo de interações existentes entre eles. Isto é, para grãos de tamanho muito reduzido, seria esperado que estes interagissem devido às forças de Van der Waals, visto que, a interação entre os grãos (denominada coesão) é influenciada por uma variedade de forças, incluindo as forças de Van der Waals (SINGER, 1992), forças de Coulomb (SOKOLOVSKI, 1965) (NEDDERMAN, 2005) e forças capilares (POLLOCK, 1994) (JONES et al., 2002).

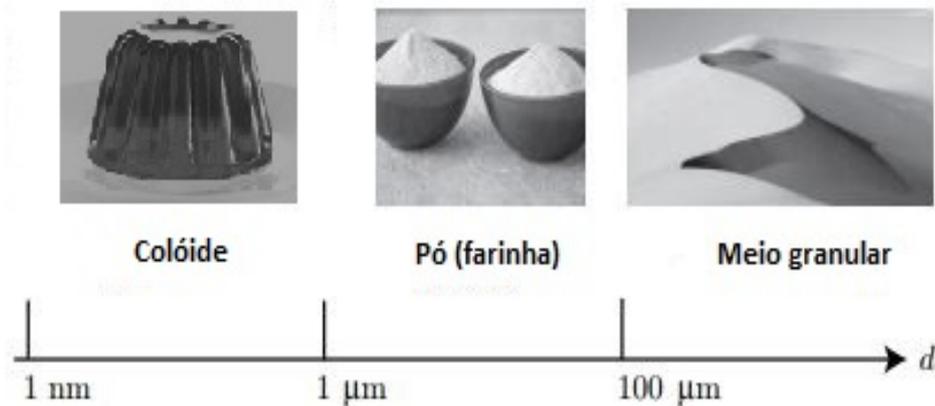


Figura 1 – Uma classificação do material particulado em função do tamanho da partícula: colóide (gelatina), pó (farinha) e meios granulares (duna de areia). Adaptado de (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

Em algumas análises acadêmicas, os pesquisadores não levam em consideração o fluido intersticial em contato com o meio granular estudado. Sendo assim, quando a influência do meio ambiente pode ser omitida, intitulamos de materiais granulares secos, nos quais as interações são resumidas ao atrito e às colisões entre os grãos do sistema ou entre os grãos e as paredes do recipiente de confinamento (LÄTZEL; LUDING; HERRMANN, 2000) (DURAN, 2012).

Para compreendermos melhor os materiais estudados neste trabalho, trataremos nas próximas sessões alguns pontos relevantes em relação às suas características, como, sua fenomenologia e as forças de contato envolvidas nos sistemas granulares.

2.1 Fenomenologia de Sistemas Granulares

Materiais granulares apresentam propriedades físicas interessantes e incomuns (GARCIMARTÍN et al., 2010). As propriedades dos meios granulares dependem principalmente da natureza das interações entre os próprios grãos, mas também entre eles e seu ambiente, podendo manifestar alguns fenômenos interessantes, como, por exemplo, metaestabilidade,

granulência, histerese, segregação e uma série de outros (BRENDÉL; UNGER; WOLF, 2004) (MEHTA, 2007) (MAGALHAES, 2013). Seu comportamento varia conforme as condições externas as quais está submetido. Por essa razão, os meios granulares exibem diversas propriedades coletivas intermediárias às dos sólidos e fluidos, isto é, podem suportar o estresse como um sólido ou um conjunto de grãos pode fluir aparentemente como um líquido e ocupar a forma do recipiente que os contém (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a) (MATUTTIS; CHEN, 2014).

Um fenômeno importante observado em materiais granulares é o fenômeno de segregação (NEDDERMAN, 2005). Em grande parte dos casos, para a utilização dos materiais granulares nos setores das indústrias farmacêuticas, estes devem ser uniformemente misturados para que se alcance produtos com alto grau de qualidade. No entanto, inúmeras vezes, devido ao fenômeno de segregação, não é obtido um produto com elevado grau de homogeneidade. Este fenômeno se refere ao comportamento singular em que componentes similares em uma mistura tendem a se agrupar durante algum processo dinâmico (DURAN, 2012). Para o caso do efeito castanha do Pará, o principal mecanismo associado ao fenômeno de segregação é o empuxo reverso (SHINBROT; MUZZIO, 1998) (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Na Figura 2, ilustramos um grão chamado de “intruso”. Esse grão possui características diferentes dos grãos do meio em que está submerso, podendo emergir ou imergir através da vibração do meio granular.

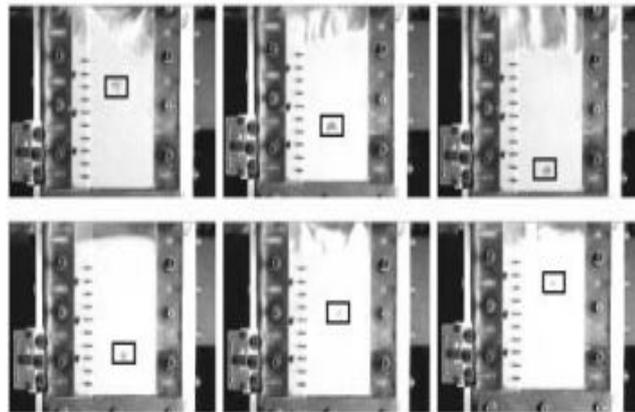


Figura 2 – Evolução temporal do sistema. Sequência de imagens de um vídeo digital de um sistema granular vibratório, com um intruso. Os três painéis superiores são de um intruso de baixa densidade $\rho_i = 0,26g/cm^3$, da esquerda para a direita $t = 0s$, $t = 3,83s$ e $t = 5,27s$. Os três painéis inferiores são de um intruso de alta densidade $\rho_i = 7,7g/cm^3$, da esquerda para a direita $t = 0s$, $t = 0,77s$ e $t = 1,10s$. Os retângulos indicam a posição do intruso. Retirado de (GUTIÉRREZ et al., 2004).

Outro exemplo de fenômeno recorrente em sistemas granulares é a dilatância de Reynolds.

Esse fenômeno se manifesta em algumas experiências simples, como a Figura 3 ilustra. O conceito de dilatância é geralmente entendido quando um arranjo granular altamente compactado sofre compressão, aumentando o espaço intersticial desse sistema (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). A Figura 3a, ilustra um balão carregado de material granular e água, de tal forma que o nível de água atinge o tubo contido acima do balão. Quando o balão é comprimido, o nível de água no tubo cai, o que não é o esperado por nossa intuição. Ou seja, o balão se expande ainda mais e a água que está contida nesse objeto desce para preencher o novo espaço intersticial formado pela compressão. O mesmo fenômeno explica por que a areia úmida ao redor dos pés fica seca quando se está andando pela praia, fenômeno este demonstrado pela Figura 3b. À medida que os pés transmitem o peso ao solo, a areia expande seu volume localmente absorvendo a água da superfície, dando a ilusão de que está seca (DURAN, 2012). A deformação induzida pelo pé produz o fenômeno da dilatância na areia.

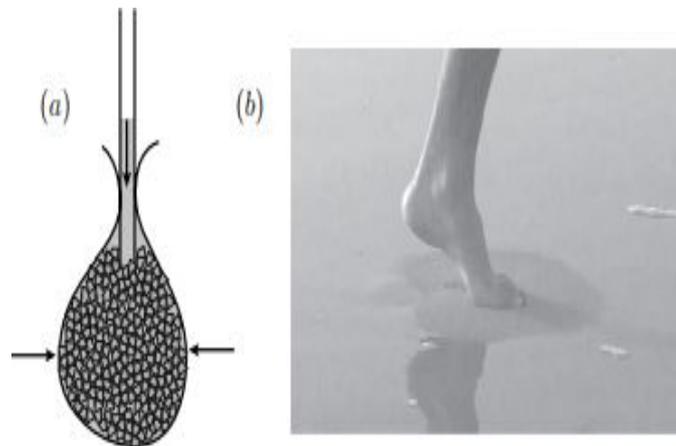


Figura 3 – Dilatância em meios granulares. (a) Dilatância de Reynolds. Temos um material granular juntamente com um líquido, confinado em um balão. Podemos analisar o nível do líquido no capilar saindo acima deste objeto. Quando o balão é pressionado, o líquido contido no capilar desce. (b) Areia secando sob os pés na praia. Retirado de (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

Uma característica importante dos materiais granulares é a formação de cadeias de força. As cadeias de força se caracterizam pela união de diversos grãos que formam estruturas coletivas capazes de sustentar esforços externos e o peso dos próprios grãos (NEDDERMAN, 2005) (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Um caso particular de cadeias de força é o arqueamento. O arqueamento remete à formação de estruturas coletivas estáveis, na presença de gravidade, que compreendem vários grãos que podem suportar o peso acima deles, acarretando como consequência a parada do fluxo granular na saída de um ambiente, como, por exemplo, de um silo (GARCIMARTÍN et al., 2010). Analogamente, o Efeito Janssen, através do arqueamento, provoca mudanças aleatórias na rede de tensões,

com isso o estresse tende a ser redirecionado lateralmente em direção às paredes verticais (SAKAGUCHI; OZAKI; IGARASHI, 1993) (NEDDERMAN, 2005). Nos silos, devido ao arqueamento, a pressão medida internamente no material, em função da altura, não acompanha a linha da pressão hidrostática, que aumenta linearmente com a profundidade, mas uma parte do peso é sustentado pelas paredes (DURAN, 2012) (MATUTTIS; CHEN, 2014).

Avalanches e deslizamentos de terra estão entre as mais críticas catástrofes naturais. Um fenômeno dos meios granulares é a existência de avalanches (NEDDERMAN, 2005), ou seja, o repentino colapso do sistema previamente paralisado em um estado de alta energia, é mais uma manifestação fundamental da natureza metaestável dos materiais granulares (TEGZES; VICSEK; SCHIFFER, 2002). Na Figura 4 apresentamos um exemplo de auto-organização em material granular por meio de uma pilha de sementes. Diferentemente dos líquidos, os meios granulares são estacionários desde que a superfície superior esteja a um declive inferior ao ângulo de repouso da pilha de grãos (JAEGER; NAGEL, 1992). Podemos observar pela Figura 4, nenhuma avalanche ocorre espontaneamente até que a inclinação seja aumentada acima do ângulo máximo de estabilidade (TEGZES; VICSEK; SCHIFFER, 2002). Quando o declive é aumentado ligeiramente acima do ângulo de repouso, os grãos começam a fluir e ocorre o fenômeno conhecido como avalanche. No entanto, ao invés do movimento uniforme ocorrer em toda a amostra, como esperado em fluidos comuns, este fluxo de avalanche é tal que todo o movimento ocorre em uma camada limite relativamente estreita perto da superfície (MEHTA, 2007) conforme as Figuras 4a e 4b demonstram.

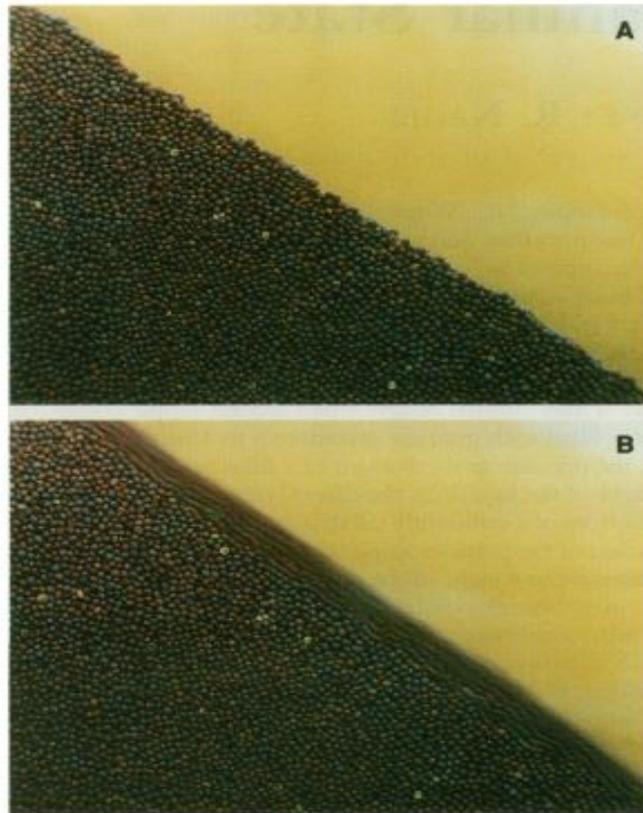


Figura 4 – (a) Uma pilha de sementes de mostarda à beira de uma avalanche e (b) durante uma avalanche. A pilha era estável até a inclinação ser aumentada acima do ângulo máximo de estabilidade. A camada de sementes que participam da avalanche é a região desfocada da imagem (b). Retirado de (JAEGER; NAGEL, 1992).

2.2 Forças de Contato

Para simular a interação entre os grãos do nosso sistema, um modelo de molas foi implementado, com base no modelo reológico de *Kelvin – Voigt* (CUNDALL; STRACK, 1979) (LUDING, 1997) (COMBE, 2001). Assim, empregamos uma “mola” na direção tangencial e outra na direção normal, para que fosse possível simular e caracterizar a atuação das forças de contato em cada direção e para sucessivamente calcularmos as forças resultantes em cada grão.

Utilizamos em nosso modelo grãos suscetíveis apenas à gravidade e às forças de contato. As forças de contato entre sólidos são altamente complexas e suas equações são derivadas para as forças de contato normal e tangencial entre dois grãos (LUDING, 1997). A aplicação de campos externos de tensão sob materiais granulares causa movimento relativo entre os grãos, como resultado dos deslocamentos relativos, forças são geradas nos contatos

entre os discos (THORNTON, 2015). Iremos considerar que os grãos se deformam sempre elasticamente. Além da força de natureza elástica \vec{F}_{el} , o modelo usado para descrever a interação entre os grãos leva em consideração forças dissipativas, como, força de amortecimento \vec{F}_{am} e força de atrito de Coulomb \vec{F}_{ac} . A força \vec{F}_{ij} que opera no grão i devido à interação com o grão j se escreve como (MAGALHAES, 2013),

$$\vec{F}_{ij} = \vec{F}_{el} + \vec{F}_{ac} + \vec{F}_{am} \quad (1)$$

Neste trabalho, o fluido intersticial não é considerado. Sendo assim, quando a influência do meio ambiente pode ser omitida, lidamos com o que intitulamos de materiais granulares secos, nos quais as interações são resumidas ao atrito e às colisões entre os grãos do sistema ou entre os grãos e as paredes do recipiente (DURAN, 2012). As forças de contato entre dois grãos secos podem ser classificadas como microscópicas. A origem física das forças no nível microscópico, força normal e força tangencial, envolve diversos fenômenos, como rugosidade superficial e propriedades mecânicas locais (elasticidade e plasticidade) (LANDAU; LIFSHITZ, 1976) (LÄTZEL; LUDING; HERRMANN, 2000). Sendo assim, essas leis são representadas pela repulsão elástica, conhecida como contato de Hertz, e pelo atrito pela lei de Coulomb (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

No modelo, a colisão entre dois grãos gera uma interpenetração, sendo indeformáveis, com caráter elástico. Essa interpenetração pode ser associada a deformação do material real e pode ser melhor interpretada através da Figura 5, que ilustra o contato elástico entre duas esferas de raio R , onde a deformação está localizada dentro da área destacada de tamanho $2a$. Presumimos a força de contato normal entre dois grãos comprimidos por uma carga externa F_N . Essa força vem da deformação elástica dos corpos em contato, que são agrupados a uma distância de 2δ (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

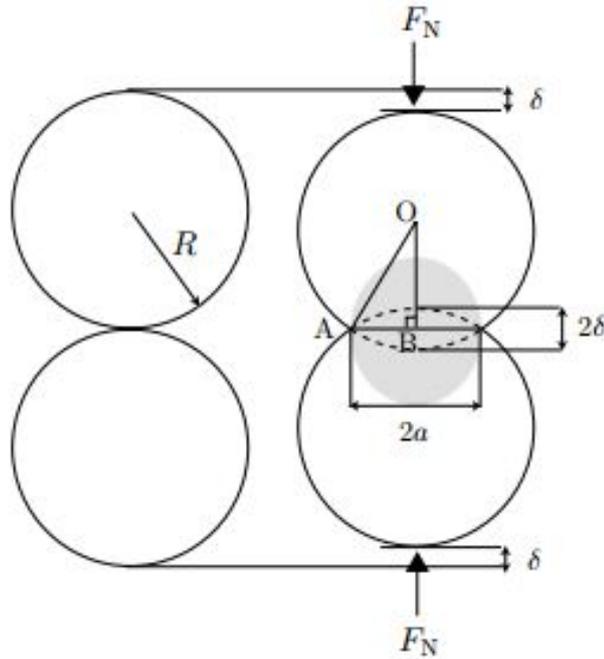


Figura 5 – Contato elástico entre duas esferas de raio R . Retirado de (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

Sendo δ a profundidade da penetração durante a colisão e R é o raio de cada esfera. Observa-se que o raio do círculo definido pela junção das superfícies dos dois grãos é representado por (a) na Figura 5. Para permanecer em regime elástico, devemos considerar $\delta \ll R$ (MAGALHAES, 2013),

$$R^2 = a^2 + \left(R - \frac{\delta}{2}\right)^2 \quad (2)$$

$$R^2 = a^2 + R^2 + \frac{\delta^2}{4} - R\delta \quad (3)$$

$$a^2 = R\delta - \frac{\delta^2}{4} \quad (4)$$

$$a \simeq \sqrt{R\delta} \quad (5)$$

A interpenetração das esferas possui profundidade aproximada equivalente ao raio (a) do círculo de contato, representado pela área em cinza, na presença de uma pressão (P). Nestas circunstâncias, a definição clássica do módulo de Young E , na presença de uma pressão (P) e deformação elástica h_{rel} é dada por:

$$E = \frac{P}{h_{rel}}$$

Devemos considerar $h_{rel} \simeq \delta$.

Para uma configuração em três dimensões, isto é, F/a , a força de contato sob o grão pela área de interpenetração dos grãos em contato. A força de contato pela lei de Hertz, demonstrada por [Landau e Lifshitz \(1959\)](#), é então dada aproximadamente por:

$$F \sim Pa^2 \sim E\sqrt{R}\delta^{3/2}$$

Aplicando o mesmo protocolo utilizado em 3D, para 2D, teremos a interpenetração de dois discos, cuja a superfície de contato corresponde a uma linha. Nesse caso, teremos a pressão sob a superfície, isto é, o comprimento da linha de interpenetração entre os grãos. Logo, F/s , em que s é o comprimento. Para a pressão P , em 2D, consideramos:

$$F \sim Ps = E\delta$$

Cada vez que um contato ocorre, a distância de interpenetração entre os dois grãos i e j é computada ([ALLEN M.P.; TILDESLEY, 1989](#)). Os discos rígidos interagem entre si nos pontos de contato, dessa forma, temos:

$$\delta = r_i + r_j - r_{ij} \quad (6)$$

onde a interpenetração δ é função da soma dos raios r_i e r_j , r_{ij} da distância entre os centros dos grãos i e j .

2.2.1 Força Elástica

A força elástica é uma força repulsiva que se opõe à interpenetração dos grãos. A força elástica que atua no grão i devido ao contato com o grão j pode ser calculada e assumida proporcionalmente a δ :

$$\vec{F}_{el} = -k_n\delta\vec{n}_{ij} \quad (7)$$

onde \vec{F}_{el} é a força elástica, k_n a constante elástica do material e δ a deformação na direção normal, respectivamente, do contato e \vec{n}_{ij} o vetor unitário que liga os centros de massa das duas esferas i e j .

A força de contato entre dois grãos é configurada por um componente elástico F_e^n e um componente viscoso F_d^n responsável pela dissipação de energia ([COULOMB, 2017](#)). Um modo de mensurarmos o amortecimento de um grão ao colidir com uma superfície é deter-

minando o coeficiente de restituição ϵ . Naturalmente, $\epsilon = 0$ para uma colisão completamente inelástica, ou seja, toda a energia é dissipada na colisão, e $\epsilon = 1$ para uma colisão perfeitamente elástica (DURAN, 2012). O coeficiente de restituição ϵ depende, conseqüentemente, das quantidades F_e^n e F_d^n . O componente normal F_n da força \vec{F}_{ij} pode ser representado pela Equação 8 (COULOMB, 2017):

$$F^n = F_e^n + F_d^n = k_n \delta_n + \gamma_n \frac{d\delta_n}{dt} \quad (8)$$

em que k_n equivale a constante de rigidez normal, γ_n o coeficiente de amortecimento viscoso e $\frac{d\delta_n}{dt}$ a velocidade relativa dos grãos i e j na direção normal de contato entre os grãos. O tempo de integração numérica adotado para as simulações pode ser definido em função do tempo característico de uma colisão τ_c (SHEN; SANKARAN, 2004). Definimos τ_c pela Equação 9 e a relação entre o coeficiente de amortecimento γ_n e o coeficiente de restituição ϵ pode ser escrito pela Equação 10,

$$\tau_c = \frac{\pi}{\sqrt{k_n/m_{ij} - \eta_n^2}} \quad (9)$$

$$\eta_n = \gamma_n/2m_{ij} \quad (10)$$

em que $m_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ caracteriza a massa reduzida do sistema (i, j) . Esse tempo de colisão possibilita incorporar o coeficiente de restituição ϵ do sistema, que estabelece o balanço de energia seguido de uma colisão (HINRICHSEN; WOLF, 2006). O coeficiente depende ligeiramente da velocidade do impacto e é considerado suficiente para descrever muitos fenômenos (LUDING, 2006). A existência de dissipação de energia durante as colisões entre os grãos é uma das principais propriedades dos fluxos granulares rápidos (MIDI, 2004). Sendo assim, a razão entre as velocidades antes v_{Antes} e após v_{Depois} as colisões entre os grãos, nos dá o coeficiente de restituição:

$$\epsilon = \frac{v_{Depois}}{v_{Antes}} \quad (11)$$

Além das forças envolvidas no contato entre dois grãos, devemos levar em consideração o tempo de colisão entre esses. Para descobrirmos o tempo de colisão entre duas esferas idênticas com velocidade v , massa m e raio R , devemos ter em mente que quando as esferas colidem, a energia cinética inicial do sistema é temporariamente convertida em energia elástica (NEDDERMAN, 2005). A energia elástica armazenada na área de contato é da ordem de $h_{rel} \sim F\delta$ onde F é a força de contato típica durante o impacto e $\delta \sim vt_c$ é a penetração típica, com o tempo de colisão (DURAN, 2012) (ANDREOTTI; FORTERRE;

POULIQUEN, 2013a). A aplicação da lei de Hertz, obtida anteriormente para três dimensões, $F \sim E\sqrt{R}\delta^{\frac{3}{2}}$ fornece um tempo de colisão τ_c representado pela Equação 12 (MAGALHAES, 2013):

$$\tau_c \sim \left(\frac{m^2}{RE^2v} \right)^{1/5} \quad (12)$$

2.2.2 Força de Amortecimento

Para alcançarmos os estados de equilíbrio, a energia interna do sistema deve ser amortecida (ALLEN M.P.; TILDESLEY, 1989), uma vez que, sem amortecimento, o sistema ficará oscilando com a mesma amplitude indeterminadamente, enquanto que, com a presença de amortecimento, a amplitude decairá exponencialmente. Dito isso, o termo que atua durante as colisões entre os grãos é o termo de amortecimento. A força de amortecimento (Equação 13) é conhecida como atrito viscoso, pois uma força dissipativa proporcional a velocidade é uma espécie de viscosidade do sistema (THORNTON, 2015). O termo de amortecimento resulta para o sistema em forças viscoelásticas, em que o modelo esquemático do contato é representado pela Figura 6 e é titulado de reologia de *Kelvin – Voigt* (HINRICHSEN; WOLF, 2006):

$$\vec{F}_{am} = -\gamma (\vec{v}_{ij} \cdot \hat{n}_{ij}) \hat{n}_{ij} \quad (13)$$

onde $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$ é a velocidade relativa entre os grãos.

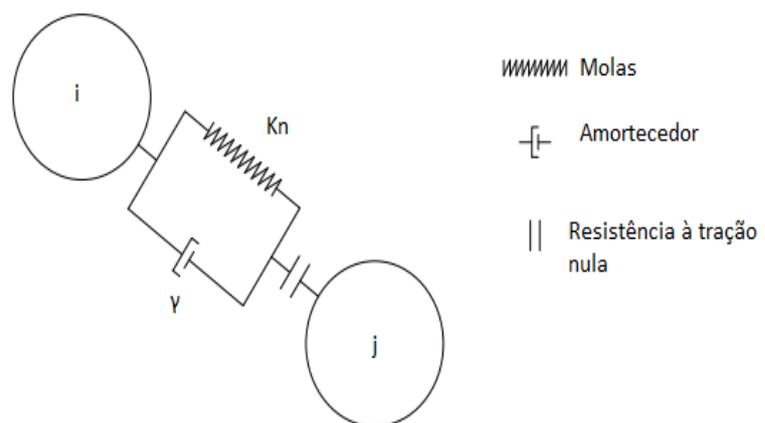


Figura 6 – Modelo reológico de *Kelvin – Voigt*. Adaptado de (NGUYEN, 2013).

Em que γ é o coeficiente de amortecimento viscoso imposto ao contato.

2.2.3 Força de Atrito

As leis macroscópicas que governam o atrito entre dois sólidos foram estabelecidas através de experimentos com sólidos e seu comportamento durante deslizamento em superfícies (ASTE, 2007). As experiências históricas de Leonardo da Vinci, e posteriormente de Guillaume d'Amontons, foram imprescindíveis para chegarmos as constatações do atrito entre dois sólidos que conhecemos hoje (NGUYEN, 2013). Para as leis de contato que governam as forças tangenciais, o uso de um modelo de força de atrito viscoso é delimitado pelo critério de Coulomb (CUNDALL P. A.; STRACK, 1979).

A condição do atrito de Coulomb nos contatos, envolve o coeficiente microscópico de atrito entre os grãos μ , a força tangencial f_t a cada contato entre as partículas (SCHUHMACHER, 2016). Assim, a força tangencial é acumulada desde o momento que o contato acontece, podendo assumir qualquer valor no intervalo $[-\mu f_n, \mu f_n]$, por sua vez, a força normal f_n é necessariamente positiva e pode ser arbitrariamente ampla (VOLFSON; TSIMRING; ARANSON, 2003). Sendo assim, a força tangencial limitada pela condição de Coulomb é dada pela Equação 14:

$$|f_t| \leq \mu f_n \quad (14)$$

A partir da Figura 7, gráfico da força de atrito estático f_{ac} em função da velocidade relativa $v_{ij,t}$ entre as superfícies em contato, verificamos que a força de atrito é indefinida quando não existe movimento.

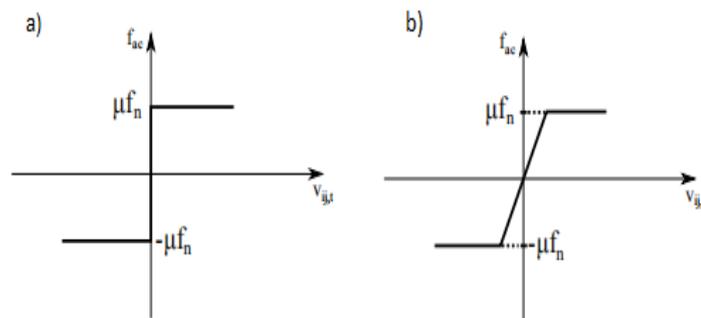


Figura 7 – Atrito coulombiano. a) Gráfico de Coulomb. b) Gráfico de Coulomb regularizado. Adaptado de (MAGALHAES, 2013).

Nos sistemas granulares, o atrito é considerado a cada contato. Assim, uma força tangente f_t é computada para cada contato entre os grãos (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Conforme a Figura 8 ilustra, enquanto o contato entre os dois grãos existe, uma mola orientada na direção tangencial influi sobre estes. Enquanto o contato entre os discos

permanece, a deformação da mola é estabelecida pelo deslocamento referente aos pontos que causaram o contato. No momento em que a deformação da mola alcança o valor equivalente ao atrito estático máximo, a força realizada pela mola satura, promovendo o início do modo cinético do atrito (MAGALHAES, 2013).

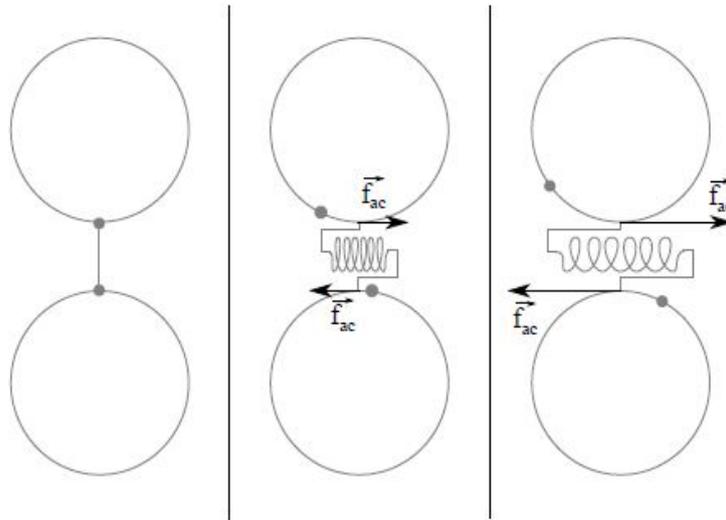


Figura 8 – Atrito modelado por Cundall e Strack. Retirado de (MAGALHAES, 2013).

Conforme foi proposto por Cundall e Strack (1979), a lei de Coulomb introduz uma rigidez tangencial k_t no nível de contato:

$$\vec{F}_{ac} = \begin{cases} -k_t \delta_{||} \vec{t}_{ij}, & k_t |\delta_{||}| \leq \mu f_n \\ \frac{\delta_{||}}{|\delta_{||}|} \mu f_n \vec{t}_{ij}, & k_t |\delta_{||}| > \mu f_n \end{cases} \quad (15)$$

onde \vec{F}_{ac} representa a força de atrito entre os grãos, k_t a constante elástica na direção tangencial, \vec{t}_{ij} o vetor perpendicular ao vetor \vec{n}_{ij} , μ o coeficiente de atrito, f_n a força na direção normal do contato e $\delta_{||}$ é deformação tangencial, que é acumulada desde o momento que o contato entre os grãos se formou.

2.2.4 Cadeias de Força

Chamamos cadeias de forças um conjunto de grãos em contato cujas forças são maiores que a média (WITTMER et al., 1996) (ASTE, 2007).

Para qualquer sistema de grãos discretos submetidos a cargas externas, a transmissão de força só pode ocorrer através de um caminho de contatos entre as partículas (HINRICHSEN; WOLF, 2006). Intuitivamente, portanto, esperamos que as cadeias de força possuam

heterogeneidade (THORNTON, 2015). Como exemplo, diversos experimentos e simulações demonstraram que forças aplicadas externamente a um meio granular são desproporcionalmente suportadas pelos contatos e, de tal modo, determinados contatos experimentam forças acima da média, formando as cadeias de forças (DRESCHER; JONG, 1972) (CUNDALL; STRACK, 1979) (RADJAI; ROUX; MOREAU, 1999) (HOWELL; BEHRINGER; VEJE, 1999) (GENG et al., 2003). Assim, a sustentação estrutural dos materiais granulares é feita por cadeias de força, bem como a propagação de estresse e tensões. (CAMBOU; MAGOARIEC; NGUYEN, 2016). Nesse sentido, a Figura 9 demonstra as cadeias de força proeminentes que são observadas em sistemas granulares.

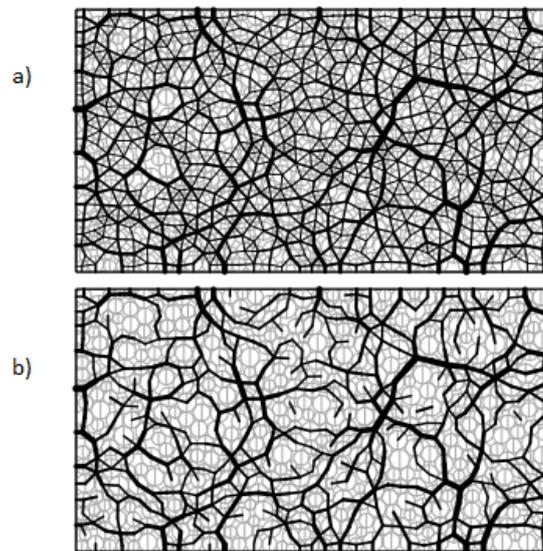


Figura 9 – As forças em um sistema de discos polidispersos sem atrito sob compressão uniforme. a) Todas as forças do sistema. b) Somente forças cuja magnitude é maior que a média. Adaptado de (HINRICHSEN; WOLF, 2006).

De acordo com Hinrichsen e Wolf (2006) as cadeias de força observadas, que quebram a isotropia, podem ser atribuídas ao fato de que o ambiente local de um grão em contato com um número finito de outros grãos não é capaz de ser isotrópico. Essa anisotropia é característica a qualquer sistema discreto (NGUYEN, 2013). Quando uma força localizada é empregada ao sistema, o grau de anisotropia e falta de homogeneidade é aumentado, principalmente na vizinhança do ponto de aplicação.

2.3 Cisalhamento Plano

A geometria de cisalhamento plano dos meios granulares, devido ao seu interesse reológico, já foi propósito de inúmeros estudos de simulação discretos (CUNDALL, 1989) (BABIĆ; SHEN; SHEN, 1990) (THOMPSON; GREY, 1991) (ZHANG; CAMPBELL, 1992) (DENT,

1993) (LUN; BENT, 1994) (SCHWARZ; HORIE; SHEARER, 1998) (AHARONOV; SPARKS, 1999) (HAYAKAWA, 2000) (RADJAI; ROUX, 2002) (JALALI et al., 2002) (CAMPBELL, 2002) (VOLFSON; TSIMRING; ARANSON, 2003) (IORDANOFF; KHONSARI, 2004) (SHEN; SANKARAN, 2004) (LOIS; LEMAÎTRE; CARLSON, 2005) (SCHALL; HECKE, 2010) (BROWN; JAEGER, 2014). Uma das formas de se obter a reologia local dos meios granulares é pela análise dimensional do problema que possibilita a descrição macroscópica desses fluxos. Para isso, existem dois principais métodos para cisalhar grãos de densidade ρ e diâmetro d que podem ser utilizados (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013b). O primeiro destes métodos é trabalhar com fração de volume fixo ν . O outro corresponde a fluxos de superfície livre, como avalanches (BOUZID, 2014). Nesses casos, é a pressão P que é imposta e a fração de volume se adapta às condições de confinamento e cisalhamento (SHEN; SANKARAN, 2004).

A formulação de equações constitutivas para fluxos granulares continua sendo um campo ativo de pesquisa (LAGRÉE; STARON; POPINET, 2011). Para isso, pode-se utilizar uma ferramenta de simulação contínua para fluxos granulares secos, implementando uma viscosidade dependente de $\mu(I)$ (SCHALL; HECKE, 2010). Em síntese, a lei constitutiva nos permite descrever os fluxos granulares homogêneos em diversas geometrias (LAGRÉE; STARON; POPINET, 2011) (BROWN; JAEGER, 2014). A Figura 10 mostra uma visão geral das configurações de interesse para o estudo dos fluxos granulares, em que o fluxo dos materiais granulares pode ser confinado, como, por exemplo, no cisalhamento anular, ou superfície livre, como no plano inclinado (CRUZ, 2004) (SCHALL; HECKE, 2010).

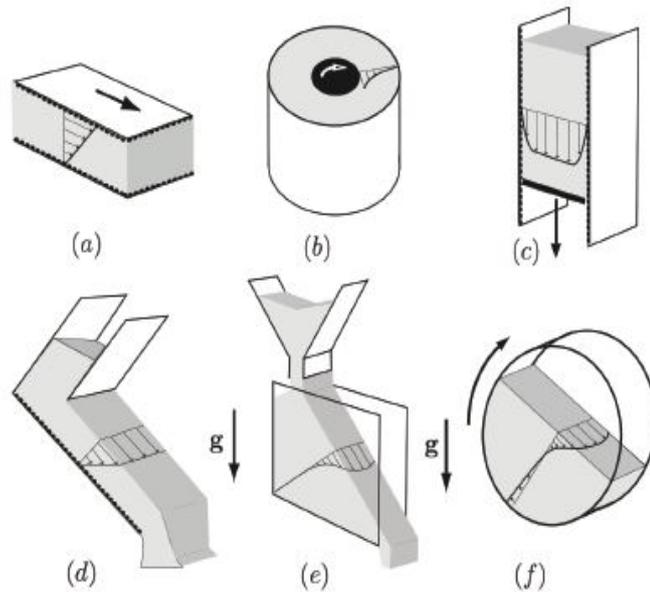


Figura 10 – Seis geometrias de interesse para o estudo dos fluxos granulares (a) Cisalhamento plano. (b) Célula cilíndrica. (c) Silo vertical. (d) Plano inclinado. (e) Fluxo em um canal direito. (f) Tambor rotativo. Retirado de (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013b).

Assumindo que o material granular pode ser considerado como um fluido incompressível, é então possível ajustar as características em cada uma das geometrias que nos interessam (SCHALL; HECKE, 2010) (BROWN; JAEGER, 2014). Neste trabalho, tratamos como geometria de interesse a de cisalhamento planar e homogêneo, que é conceitualmente a geometria mais simples. Geometria essa em que um meio granular é confinado entre duas paredes, em uma delas a pressão é imposta, então o meio é cisalhado pela imposição de uma velocidade constante nesta parede. Para grãos infinitamente rígidos, a única escala de estresse no sistema é dada pela pressão confinante P (LAGRÉE; STARON; POPINET, 2011) (BOUZID, 2014). Assim, deve ser comparada a tensão inercial devido ao cisalhamento $\rho\dot{\gamma}^2 d^2$, em que $\dot{\gamma}$ representa a taxa de deformação. E conseqüentemente, o número de inércia $I^2 = \frac{\rho\dot{\gamma}^2 d^2}{P}$ (JOP; FORTERRE; POULIQUEN, 2006) (BOUZID, 2014).

De acordo com Coulomb (2017), a Figura 12 ilustra o esquema da célula de cisalhamento, onde os grãos em violeta constituem as paredes. A velocidade V da parede superior também é imposta enquanto a parede inferior está parada. As partículas cinzentas representam o meio granular sob cisalhamento. Em vermelho, perfil de velocidade típico obtido em regime estacionário na espessura da célula de cisalhamento.

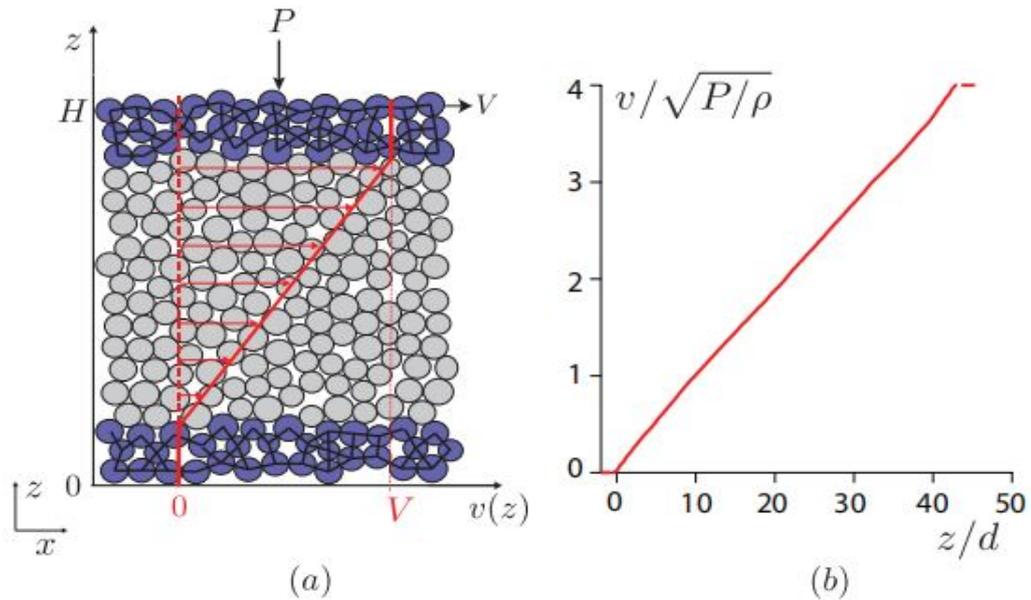


Figura 11 – a) Esquema da célula de cisalhamento de altura H , com pressão P aplicada. b) Velocidade média dos grãos da fatia de altitude z em função de z . Retirado de (COULOMB, 2017).

2.4 Leis de Comportamento Reológico

O estudo do fluxo dos materiais granulares, para prever propagação e vazão são de uso extensivo em muitas aplicações industriais (VOLFSON; TSIMRING; ARANSON, 2003) (SCHUHMACHER, 2016). Conhecer as leis que regem o fluxo dos materiais granulares permite até mesmo compreender melhor fenômenos físicos, como propagação de avalanches, migração de dunas e terremotos (CRUZ, 2004). Um dos principais objetivos desses estudos reofísicos é determinar as leis reológicas desses materiais, com base em sua origem física na escala dos grãos e de suas propriedades de interações (RAJCHENBACH, 2000).

A reologia é o estudo das deformações e fluxo da matéria (MEZGER, 2006). O termo “reologia” tem origem no grego: “rheos”, significa “fluir”. Assim, a reologia é literalmente “estudo do fluxo”. No entanto, os experimentos reológicos não revelam apenas informações sobre o comportamento do fluxo de líquidos, mas também o comportamento de deformação dos sólidos (TANNER, 2000). Desse modo, uma grande deformação produzida por forças de cisalhamento faz com que muitos materiais fluam (MEZGER, 2006).

O estudo reológico dos meios granulares tem sido de grande interesse para a comunidade científica (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013b) e é ditado pela transferência de momento e dissipação de energia que ocorre nos contatos diretos entre grãos e dos grãos com as paredes do sistema (CRUZ, 2004). Contudo, ainda não há teoria ou uma lei constitutiva abrangente para descrever todos os comportamentos observados em materiais

granulares de regime denso (MIDI, 2004) (COULOMB, 2017). Essa dificuldade vem da complexidade dos diversos comportamentos observados (SCHALL; HECKE, 2010) (BROWN; JAEGER, 2014).

Diversas experiências em materiais granulares mostraram que a reologia é realmente não local, isto é, o estresse em um determinado local depende não apenas da taxa de deformação local, mas também da mobilidade em uma região circundante (BOUZID et al., 2015). O material apresenta episódios elasto-plásticos locais de curta duração, em regiões chamadas de “zonas de transformação de cisalhamento” (BARENBLATT; BARENBLATT; ISAAKOVICH, 1996), no qual o material é cisalhado de maneira *quasi-estática* (DAHMEN; BEN-ZION; UHL, 2011).

Para definirmos o comportamento reológico dos materiais granulares, é necessário saber qual parâmetro de estado os controla (COULOMB, 2017). Sendo assim, uma variável de estado que é significativa para um sistema granular é a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$, visto que esta estabelece se o meio está fluindo ou não, uma vez que o meio é estático quando $\dot{\gamma} = 0$ e deformado quando $\dot{\gamma} \neq 0$ (DAHMEN; BEN-ZION; UHL, 2011).

2.4.1 Análise Dimensional

Com o propósito de diminuir o número de parâmetros, é conveniente usar análise dimensional, que assegura que quaisquer que sejam os parâmetros do sistema, eles podem ser expressos como relações entre quantidades adimensionais (CRUZ, 2004). Entre as várias opções possíveis, o estudo da reologia $\mu(I)$, a partir do cisalhamento de um meio granular pode ser feito em função da quantidade adimensional denominada como número de inércia (I) (BARENBLATT; BARENBLATT; ISAAKOVICH, 1996), como pode ser visto na Equação 16,

$$I = \frac{\dot{\gamma}}{\sqrt{P}} \quad (16)$$

usando a densidade dos grãos Equação 17,

$$I = \dot{\gamma} d \sqrt{\rho_g / P} \quad (17)$$

em que $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento, ρ_g densidade do grão e P a pressão.

Este número adimensional mede o papel da inércia e, portanto, será chamado de número de inércia (IORDANOFF; KHONSARI, 2004). Pode ser interpretado como a razão de uma força de troca de momento resultante entre dois grãos em uma colisão de força típica sob o efeito da pressão confinante (SCHUHMACHER, 2016), ou seja, a razão entre as forças inerciais

e as forças elásticas. O número de inércia I caracteriza o estado de cisalhamento. Este é um número adimensional válido para todo o sistema. Seu valor está vinculado diretamente às particularidades do regime. Ou seja, o regime *quasi-estático* é definido para ($I \leq 10^{-2}$) e para ($I \geq 0.2$) corresponde ao regime dinâmico ou colisional (CRUZ et al., 2005). A variação de I permite estudar a transição entre esses dois regimes extremos, conforme a Figura 12 ilustra:

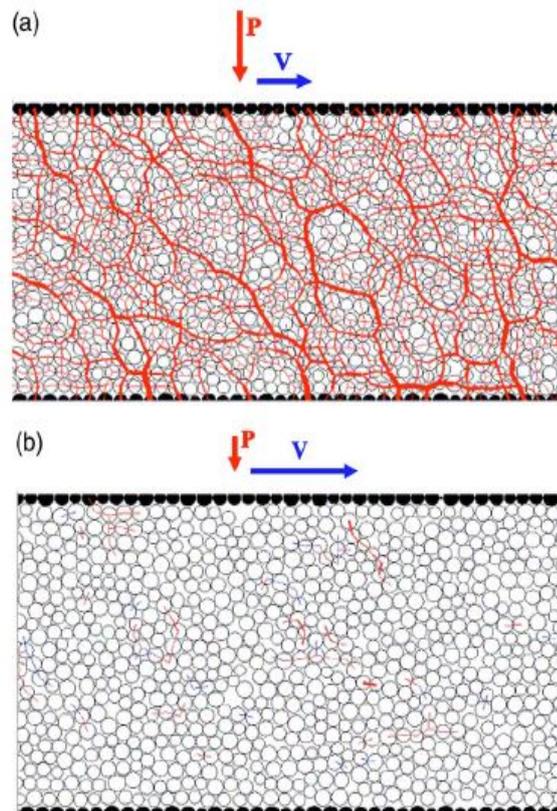


Figura 12 – Cisalhamento plano: a) Regime *quasi-estático* ($I = 10^{-2}$). b) Regime colisional ($I = 0.2$). Grãos pretos representam as paredes ásperas. Retirado de (CRUZ, 2004).

Notamos, então, que o regime *quasi-estático* é identificado por uma densa rede de contatos. Sendo assim, a maioria dos grãos possuem três ou quatro contatos e o número médio de contatos por grão é próximo a 3,5. A densa rede de contatos gradualmente desaparece à medida que I aumenta (CRUZ, 2004) .

Considerando $F = ma$, onde a é a aceleração e F a força média sofrida pelos grãos. Conforme solução dada por Cruz (2004) em que a é estimado por $d\dot{\gamma}^2$, em que $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento, F é estimado por Pd^2 , de modo que $ma/F = m\dot{\gamma}^2/Pd$. Dito isso, em três

dimensões, temos:

$$I = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{m}{Pd}} \quad (18)$$

Para duas dimensões, a força é estimada por Pd , neste caso dispomos:

$$I = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{m}{P}} \quad (19)$$

No estado estacionário, a taxa de cisalhamento normalizada pela pressão $\frac{\tau}{P}$, usando a densidade dos grãos ρ , pode ser descrita $\frac{\tau}{P} = \mu$ com $I = \frac{\dot{\gamma}d}{\sqrt{P/\rho}}$. Então, número de inércia I compara a taxa de cisalhamento macroscópico $\dot{\gamma}$ com o tempo de rearranjo microscópico na escala de grãos (MIDI, 2004) (JOP; FORTERRE; POULIQUEN, 2006). A fração sólida ν é, portanto, uma função do número inercial (BROWN; JAEGER, 2014).

Em termos simplificados, a reologia dos materiais é caracterizada por relacionar a taxa de fluxo (a taxa de cisalhamento) à sua resistência ao escoamento (tensão de cisalhamento) (MEZGER, 2006). Por exemplo, a viscosidade aparente de um fluido é definida como a razão entre a taxa de cisalhamento e a tensão de cisalhamento. Para nosso sistema, a análise dimensional nos diz que um sistema de grãos rígidos possui parâmetros de controle microscópicos, diâmetro de grão d e a densidade ρ , já macroscopicamente a taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$ e a pressão de confinamento P (BOUZID, 2014).

A partir dos parâmetros já mencionados, pressão, taxa de cisalhamento e constante elástica do material na direção normal, o trabalho de Cruz (2004) propõe outro número adimensional, além do número de inércia já citado, expresso a seguir pela Equação 20

$$\kappa = \frac{k_n}{P} \quad (20)$$

onde κ representa o número de rigidez do contato e será relacionado nas sessões seguintes a fração sólida ν e ao atrito efetivo μ^* .

2.4.1.1 Regimes de Fluxo

Os grãos interagem através de colisões binárias instantâneas quando são sujeitos a alta agitação. Então, a generalização da teoria cinética de gases densos para grãos ligeiramente dissipativos nos leva aos componentes do estresse que dependem da fração sólida ν e as

flutuações de velocidade δv (GOLDHIRSCH, 2003). Para um sistema formado por grãos com diâmetro d e massa m a Equação 21 e Equação 22,

$$P = F_p(\nu) m(\delta v/d)^2 \quad (21)$$

$$S = F_S(\nu) m(\delta v/d) \dot{\gamma} \quad (22)$$

em que a pressão de confinamento P e a tensão de cisalhamento S .

Um fluxo requer uma equação adicional de energia na qual uma taxa de dissipação Γ associada as colisões deve ser adicionada aos termos usuais (CRUZ et al., 2005) Equação 23:

$$\Gamma = F_\Gamma(\nu) m(\delta v/d)^3 \quad (23)$$

No caso de um fluxo de cisalhamento homogêneo, onde a taxa de cisalhamento e as flutuações de velocidade são uniformes, a equação da energia reduz-se à Equação 24 (CRUZ, 2004) (MIDI, 2004):

$$S\dot{\gamma} = \Gamma \quad (24)$$

Um dos principais objetivos nos estudos relacionados à reologia $\mu(I)$ é a verificação do funcional que rege a dependência entre as variáveis reológicas. O atrito microscópico desempenha um papel importante no que diz respeito ao comportamento dos meios granulares (CRUZ, 2004). De um modo geral, coeficiente de atrito efetivo μ^* em um material granular é definido de acordo com:

$$\mu^* = \frac{S}{P} \quad (25)$$

em que a pressão de confinamento P e a tensão de cisalhamento S , interferem efetivamente na taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$. A variação do atrito efetivo com a taxa de cisalhamento nos dá informações sobre o comportamento do meio granular (CRUZ et al., 2005).

O atrito efetivo pode ser descrito também como:

$$\mu^* = \frac{\tau}{\sigma} \quad (26)$$

em que τ representa as tensões tangenciais e σ as tensões normais.

Os atritos nas camadas granulares incluem características essenciais da reologia granular, como a coexistência de uma fase fluida e sólida, e a conversão entre si (HAYAKAWA, 2000). A reologia $\mu(I)$ possui intuito de verificar a dependência do atrito efetivo μ^* em função do número de inércia I . Nesta dissertação, estamos motivados unicamente pelo plano de cisalhamento sem gravidade, isto é, na situação mais simples de um cisalhamento homogêneo. A análise desta situação nos permite mensurar a lei constitutiva do material (LAGRÉE; STARON; POPINET, 2011). Esses estados homogêneos permitem uma medição direta da lei constitutiva através de duas variáveis fundamentais: dilatância, ou seja, variações da compactação ν e atrito efetivo μ^* . Sabemos que toda deformação de um sólido pode ser reduzida em uma dilatação ou contração e um cisalhamento. Neste trabalho estudaremos o cisalhamento puro.

Para que o fluxo do meio granular aconteça, deve ocorrer uma expansão do meio. Essa expansão é medida através das variações da compactação ν . A dependência da compactação é medida como uma função do número de inércia I . Conforme explanação feita por Cruz et al. (2005), podemos classificar os regimes de fluxo em relação à compactação ν do meio granular, como: no regime *quasi-estático*, as forças são apoiadas pelas cadeias de forças geradas pela compactação. Porém, quando a compactação diminui, as cadeias de forças tornam-se intermitentes, ou seja, são permanentemente destruídas e geradas pelo movimento dos grãos. Para uma menor compactação o regime é de múltiplas colisões. Enfim, para compacidades ainda menores, o movimento dos grãos fica ainda mais agitado. Este é o regime de colisões binárias.

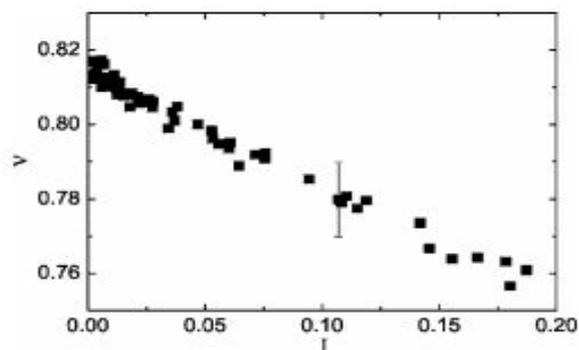


Figura 13 – Variação da compactação em função do número de inércia I . $\mu = 0.4$ e diversos e e κ . Retirado de (CRUZ, 2004)

A relação entre as variações da fração sólida média ν em função do número de inércia I pode ser vista na figura Figura 13. Conseguimos verificar que ν diminui aproximadamente linearmente com o aumento de I , partindo de um valor máximo ν_{max} . Para $I < 0.2$, a compactação do meio granular se dá por uma função do número de inércia (CRUZ, 2004):

$$\nu(I) \simeq \nu_{max} - aI.$$

O atrito efetivo pode ser medido em função do número de inércia como a Figura 14 demonstra. O coeficiente de atrito efetivo foi estabelecido como a relação entre a tensão de cisalhamento e a pressão dentro do material, como vimos na Equação 26 anteriormente.

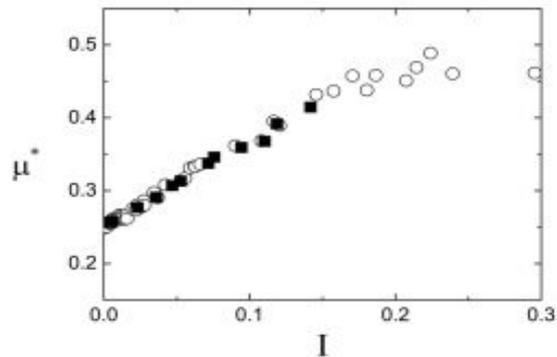


Figura 14 – Variação do coeficiente de atrito efetivo em função de I . Para os círculos $\mu = 0.4, e = 0.1$ para os quadrados pretos $e = 0.9$ e diversos κ . Retirado de (CRUZ, 2004).

Analisando a Figura 14, podemos notar que o coeficiente de atrito efetivo aumenta aproximadamente linearmente com o número de inércia I , a partir de um valor mínimo μ^*_{min} e que μ^* remete a saturação em $I \geq 0.2$ (CRUZ, 2004).

Podemos observar, conforme Figura 15 ilustra, o regime *quasi-estático* do estado crítico corresponde a valores muito pequenos do número de inércia, praticamente sem alternância do coeficiente de atrito efetivo. Conjuntos granulares densos e confinados em um fluxo de cisalhamento extremamente lento são geralmente descritos como sólidos que obedecem a leis constitutivas elastoplásticas (NEDDERMAN, 2005). Posteriormente a uma tensão de cisalhamento suficientemente ampla, o material atinge o estado crítico (WOOD, 1990), que não depende de sua disposição inicial.

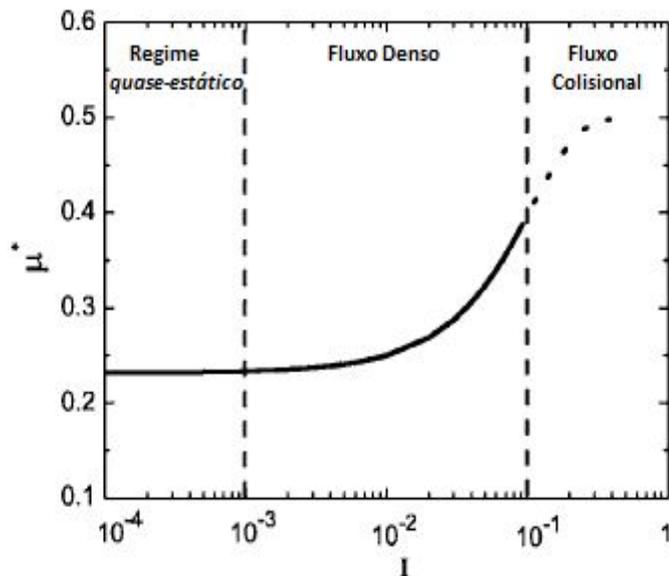


Figura 15 – Diagrama qualitativo dos regimes de fluxo. Adaptado de (CRUZ, 2004).

Outro comportamento esperado dos meios granulares, é se comportar como gases densos contanto que haja forte agitação ou como fluidos viscoplásticos quando um fluxo é produzido (NEDDERMAN, 2005). Ainda analisando a Figura 15, a transição entre o regime de fluxo denso e o regime de fluxo totalmente colisional ocorre para $I \simeq 10^{-1}$. O coeficiente de atrito efetivo aumenta no regime de fluxo denso e deve saturar no regime totalmente colisional, conforme os resultados obtidos por Cruz (2004).

Dentre os dois regimes de fluxos extremos, *quasi-estático* e colisional, em seu artigo Cruz (2004) optou por dedicar seu estudo ao regime intermediário de fluxo denso, pelo fato de que este regime em um estado de cisalhamento homogêneo estável (componentes de tensão uniformes: taxa de cisalhamento e fração sólida) (LAGRÉE; STARON; POPINET, 2011), a distribuição de tensão é uniforme no interior da camada de cisalhamento, ao contrário da heterogeneidade com distribuição de tensões e a existência de paredes que prejudicam a avaliação da lei constitutiva (MIDI, 2004).

Para colocarmos em prática esses parâmetros citados acima, com a finalidade de alcançarmos as tensões e os perfis de velocidade desse sistema, utilizaremos as simulações numéricas do método da Dinâmica Molecular (DM). Este método e as equações de movimento serão abordados no capítulo seguinte.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo, iremos abordar a técnica computacional de Dinâmica Molecular (DM) em duas dimensões, na qual as trajetórias dos grãos individuais serão calculadas à medida que interagirem com seus vizinhos, através do algoritmo de *Velocity-Verlet*. O método de Dinâmica Molecular se classifica dentro da classe de Métodos de Elementos Discretos (DEM). Apresentaremos também o sistema a ser estudado, baseado no trabalho desenvolvido por (CRUZ et al., 2005).

3.1 Métodos de Elementos Discretos (DEM)

As simulações computacionais têm um papel valioso no fornecimento de resultados precisos para problemas que, de outro modo, seriam solucionados analiticamente, além de os resultados de simulações poderem ser verificados com os de experimentos reais. Desta forma, as simulações computacionais são de grande interesse acadêmico.

Este trabalho de pesquisa apresenta uma modelagem do comportamento mecânico de materiais granulares coesos por uma abordagem do Método dos Elementos Discretos (DEM). A Dinâmica Molecular (DM) é um método de simulação computacional que pertence a classe do Método dos Elementos Discretos e tem como objetivo calcular e prever a evolução do sistema através da determinação do movimento de partículas individuais.

Importante salientar que o método de Dinâmica Molecular (DM) é um dos únicos que possui cálculo direto das forças a partir das configurações microscópicas dos grãos. Este método se baseia na segunda lei de Newton (Equação 27), conhecida como princípio fundamental da dinâmica. Para um meio granular, dada a soma de forças que atuam sobre o grão, o problema é reduzido à integração das equações de movimento de Newton para os graus de liberdade translacional e rotacional (LUDING, 2008). A Equação 28 por sua vez, representa as forças que não atuam sob o centro de massa do grão, retratando o avanço do momento angular do mesmo.

A aplicação da segunda lei de Newton ao movimento dos grãos do sistema, resulta nas seguintes equações (MAGALHAES, 2013),

$$\sum_j \frac{\vec{F}_{ij}}{m_i} = \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad (27)$$

$$\sum_j \frac{\vec{\tau}_{ij}}{I_i} = \frac{d^2 \theta_i}{dt^2} \quad (28)$$

onde \vec{F}_{ij} e $\vec{\tau}_{ij}$ representam a somatória das forças e dos torques realizados pelo ângulo de rotação do grão i , r representa a posição, m a massa, I o momento de inércia e Θ representa a rotação em torno do centro de massa do grão.

A segunda lei de Newton correlaciona causa e efeito, conforme o movimento dos corpos (ASTE, 2007). A causa seria o agente de força representado por F , sendo o agente físico que pode provocar modificação no ambiente. E a aceleração a é a grandeza cinemática para apontar ao grão o que ele irá fazer no próximo passado de tempo e de que maneira (THORNTON, 2015). Diversas técnicas são usadas para resolver as equações clássicas de movimento. Essas equações podem ser escritas de diversas maneiras, conforme a Equação 29 (BARANYAI; EVANS, 1989) demonstra:

$$\vec{F}_i = \vec{\nabla} \mathcal{L} = -\vec{\nabla} U \quad (29)$$

em que \mathcal{L} representa a função Lagrangiana que governa a dinâmica do sistema, U a energia potencial, \vec{F}_i a força desempenhada no grão i originada pelo gradiente do potencial U .

Para um sistema com N grãos, temos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{F}_1 = m\vec{a}_1 = -\vec{\nabla}_1 U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \\ \vec{F}_2 = m\vec{a}_2 = -\vec{\nabla}_2 U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \\ \vdots \\ \vec{F}_N = m\vec{a}_N = -\vec{\nabla}_N U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \end{array} \right.$$

As equações da cinemática 30, 31, 32 e 33, referem-se a integração das equações de movimento, onde $\vec{r}_i(t)$ é a posição translacional do grão i , $\vec{v}_i(t)$ é a velocidade translacional do grão i , $\vec{a}_i(t)$ a aceleração translacional, $\vec{\Theta}_i(t)$ é a posição angular do grão i , $\vec{\omega}_i(t)$ é a velocidade angular do grão i e $\vec{\alpha}_i(t)$ representa a aceleração angular do grão i no tempo t .

Estas equações precisam ser atendidas para todos os grãos, afim de determinar o estado no sistema.

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + \int_0^t \vec{v}_i(t) dt \quad (30)$$

$$\vec{v}_i(t) = \vec{v}_i(0) + \int_0^t \vec{a}_i(t) dt \quad (31)$$

$$\Theta_i(t) = \Theta_i(0) + \int_0^t \vec{\omega}_i(t) dt \quad (32)$$

$$\vec{\omega}_i(t) = \vec{\omega}_i(0) + \int_0^t \vec{\alpha}_i(t) dt \quad (33)$$

Existem diversas formas de discretização para simularmos o comportamento de um material granular. Com isso, o cisalhamento de um sistema granular pode ser simulado pelo método de Dinâmica Molecular adaptado ao meio granular. Neste trabalho, realizamos simulações utilizando o método de Dinâmica Molecular através da técnica *Gear Predictor-Corrector* de 3ª ordem empregando o algoritmo *Velocity Verlet*.

3.2 *Velocity-Verlet*

Existe uma variedade de métodos para a integração numérica de sistemas de equações diferenciais. Nesta seção, apresentamos um método eficiente que provou ser eficaz para a Dinâmica Molecular. Realizamos a integração das equações de movimento de Newton pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem (LUDING, 2008) (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005). Para as simulações, empregamos o método de Dinâmica Molecular através da técnica *Gear Predictor-Corrector* de 3ª ordem (ALLEN; TILDESLEY, 1989).

Para a solução de equações diferenciais, uma alternativa é a abordagem de diferenças finitas. Dadas as posições dos grãos, velocidades e outras informações dinâmicas no tempo t , obtemos as posições, velocidades e acelerações em um momento posterior $t + \Delta t$ para um grau de precisão suficiente (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005). Uma estimativa das posições, velocidades e acelerações no tempo $t + \Delta t$ pode ser obtida pela expansão de Taylor,

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

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

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

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

O sobrescrito p se refere às quantidades preditas.

Os valores dos coeficientes para a correção das variáveis no tempo, dependem da ordem da equação diferencial a ser resolvida e do método utilizado,

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

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

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

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

onde o índice c representa a quantidade corrigida. Os coeficientes do método apresentado, *Gear Predictor-Corrector* de terceira ordem para uma equação de segunda ordem são providos por (ALLEN M.P.; TILDESLEY, 1989),

$$c_0 = 0; c_1 = 1; c_2 = 1.$$

Implementamos até a terceira ordem somente. Este método mantém a previsão da posição, devido a $c_0 = 0$ e corrige a velocidade e aceleração no passo de tempo seguinte. Os coeficientes fornecidos acima para o método de terceira ordem são valores que correspondem ao algoritmo *Velocity-Verlet*. Este algoritmo é utilizado para integrar as equações de movimento de Newton, Equações 27 e 28, citadas anteriormente.

$$\vec{a}_i(t + \Delta t) = \frac{\sum \vec{F}_i(t + \Delta t)}{m_i} \quad (34)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{a}_i(t + \Delta t) + \vec{a}_i(t)}{2} \Delta t \quad (35)$$

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t) \Delta t + \frac{\vec{a}_i(t)}{2} \Delta t^2 \quad (36)$$

onde \vec{r}_i , \vec{v}_i e \vec{a}_i são respectivamente a posição, velocidade e aceleração linear.

$$\vec{\alpha}_i(t + \Delta t) = \frac{\sum \vec{\tau}_i(t + \Delta t)}{I_i} \quad (37)$$

$$\vec{\omega}_i(t + \Delta t) = \vec{\omega}_i(t) + \frac{\vec{\alpha}_i(t + \Delta t) + \vec{\alpha}_i(t)}{2} \Delta t \quad (38)$$

$$\vec{\Theta}_i(t + \Delta t) = \vec{\Theta}_i(t) + \vec{\omega}_i(t) \Delta t + \frac{\vec{\alpha}_i(t)}{2} \Delta t^2 \quad (39)$$

em que Θ_i , ω_i e α_i são, na devida ordem, a posição, velocidade e aceleração angular.

Para obtermos as Equações 35 e 38, conforme a elucidação feita por (MAGALHAES, 2008), primeiramente calculamos as velocidades em $t + \Delta t/2$ usando a aproximação linear em torno de t , com a força e o torque obtidos da configuração no instante t ,

$$\vec{v}_i(t + \Delta t/2) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{F}_i(t) \Delta t}{m_i},$$

$$\omega_i(t + \Delta t/2) = \vec{\omega}_i(t) + \frac{\tau_i(t) \Delta t}{I_i},$$

Desse modo, obtemos as forças e os torques na nova configuração, que serão utilizados na apuração das velocidades no momento $t + \Delta t$, a começar das velocidades em $t + \Delta t/2$,

$$v_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t + \Delta t/2) + \frac{\vec{F}_i(t + \Delta t) \Delta t}{m_i},$$

$$\omega_i(t + \Delta t) = \omega_i(t + \Delta t/2) + \frac{\tau_i(t + \Delta t) \Delta t}{I_i}$$

Omitindo os termos no instante $t + \Delta t/2$, as equações 35 e 38 são recuperadas.

Em síntese, dadas as posições e velocidades dos grãos no tempo t , podemos prever as posições, velocidades e acelerações em um tempo $t + \Delta t$, usando os valores atuais dessas grandezas.

3.3 Passo de Tempo

As equações são resolvidas passo a passo e a escolha do intervalo de tempo Δt dependerá do método de solução. Por essa razão, devemos nos atentar referente a escolha do passo de tempo de discretização, visto que o espaço de tempo entre duas previsões seguidas das variáveis dinâmicas não deve exceder um montante tal que ocasionaria situações falsas (ALLEN; TILDESLEY, 1989), como um grão atravessar outro sem reconhecer sua presença, em razão de as posições previstas de ambos coincidirem, mas os campos de força gerados por eles não estarem atualizados (ASTE, 2007) (MAGALHAES, 2008).

Escolhemos trabalhar com o regime levemente supercrítico, que é o regime típico dos materiais granulares na natureza. Portanto, consideramos como tempo característico da colisão o período de uma mola elástica (ATMAN et al., 2005b). Assim, com o passo de

tempo de discretização Δt , dado pela [Equação 40](#) é estabelecido então em termos do tempo decorrido até a deformação máxima ([MAGALHAES, 2013](#)),

$$\Delta t \equiv \frac{1}{20} \sqrt{\frac{m_{ij, \min}}{k_n}} \quad (40)$$

Em que a [Equação 40](#) representa o período característico de oscilação do contato normal entre os grãos, onde $1/20$ representa o fator de segurança, m_{ij} a massa do menor grão e k_n a constante elástica do material.

Para evitar adversidades e nos prevenir em relação ao alto custo computacional, o passo de tempo escolhido deverá ser menor que o tempo de interação entre dois grãos da simulação, ou seja, Δt deve ser muito menor que a duração do contato mais breve ([ALLEN; TILDESLEY, 1989](#)). Portanto, o valor de passo de tempo utilizado neste trabalho será este intervalo dividido por um fator de segurança.

3.4 *Predictor-Corrector* e Listas de *Verlet*

A ideia geral de um passo de simulação de Dinâmica Molecular é baseada em um algoritmo *Predictor-Corrector*: primeiramente se faz a lista de grãos vizinhos (Procura de Vizinhos), então prediz onde estarão os grãos no instante de tempo subsequente (Preditor), busca os contatos que foram formados com a predição (Detectar Contatos), calcula as forças entre cada grão em contato (Cálculo de Forças) e corrige as predições de velocidade e aceleração de cada grão (Corretor) ([PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005](#)).

As listas de *Verlet* são utilizadas em simulações de Dinâmica Molecular para manter eficiente a procura de vizinhos com o aumento do número de grãos no sistema. Assim, o sistema é dividido em “caixas” e cada caixa tem sua vizinhança definida. A ideia do algoritmo de *Verlet* é baseada nas relações de vizinhança entre os grãos, ou seja, dois grãos próximos uns dos outros em um dado momento permanecerão próximos, pelo menos nas próximas etapas de tempo ([PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005](#)). Na simulação, o cálculo das forças é feito tendo em vista unicamente os grãos contidos na lista ([ALLEN; TILDESLEY, 1989](#)). O uso de listas para identificar os vizinhos mais próximos reduz o custo computacional. A complexidade total desse algoritmo, pela teoria de análise de complexidade é $n \log(n)$, sendo n o número de grãos do sistema, lembrando que para procura direta a complexidade do algoritmo seria igual a $O(n^2)$.

3.5 Tensão em Sistemas Granulares

Descrever a distribuição de tensões em um sistema formado por grãos não coesivos não é tarefa fácil, além de ser um problema em aberto atualmente. As tensões em um meio granular podem ser calculadas a partir das forças entre os grãos (GOLDHIRSCH; GOLDENBERG, 2002). A distribuição estatística de forças de contato na escala de grãos pode ser vista na Figura 16, em que o grão i , está em contato com os grãos vizinhos k .

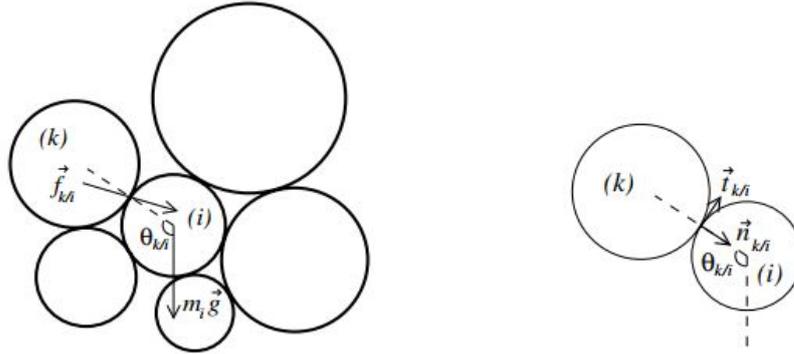


Figura 16 – A figura a esquerda representa o grão i que é submetido ao seu próprio peso $m_i \vec{g}$ junto com as forças $\vec{f}_{k/i}$ de seus vizinhos diferentes k . $\Theta_{k/i}$ representa o ângulo de contato entre os grãos i e k . Devido ao atrito entre os grãos, a orientação da força de contato pode desviar deste ângulo. A figura a direita retrata $\vec{n}_{k/i}$ como vetor unitário na direção de $\Theta_{k/i}$. Da mesma forma, $\vec{t}_{k/i}$ é o vetor unitário perpendicular à direção do contato. Retirado de (MEHTA, 2007).

Para encontrar a definição adequada do tensor de tensões, os autores escrevem o princípio fundamental da dinâmica, $\vec{F} = m\vec{a}$, para cada grão individualmente, ponderando as equações de equilíbrio individuais com a função de média (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a). Um processo de média similar também fornece o tensor de deformação das posições e deslocamentos dos grãos (GOLDHIRSCH; GOLDENBERG, 2002).

O tensor de tensões σ pode ser escrito como a soma de duas contribuições: uma contribuição puramente cinética σ^k , que é induzida pelo movimento dos grãos, e uma contribuição de contato σ^c , relacionada às forças de contato. Ou seja, para um sistema cuja a velocidade média é baixa, utilizaremos somente a parte estática da equação. Tomaremos aqui a abordagem popularizada por Goldhirsch e Goldenberg (2002) em que uma derivação completa é apresentada por Andreotti, Forterre e Pouliquen (2013a).

$$\sigma_{ij}(x, t) = \sigma_{ij}^k(x, t) + \sigma_{ij}^c(x, t) \quad (41)$$

Em problemas estáticos ou *quasi-estáticos*, a contribuição cinética $\sigma_{ij}^k(x)$ desaparece

e a tensão é dada unicamente pela tensão de contato $\sigma_{ij}^c(x)$ (ANDREOTTI; FORTERRE; POULIQUEN, 2013a).

A partir das propriedades microscópicas do sistema, como as forças calculadas na interação e as coordenadas de posição dos grãos, é possível extrair as propriedades macroscópicas do sistema, como as tensões. O tensor de tensões é calculado a partir da fórmula de Goldhirsch e Goldenberg (2002) e pela função de *coarse – grainning* (MEHTA, 2007). A tensão é representada por uma quantidade macroscópica determinada pelo produto da força pela posição sobre um volume do espaço e, portanto, o tensor de tensão é determinado por uma média de forças (GOLDENBERG; GOLDHIRSCH, 2002). A derivação aqui seguirá o trabalho de Goldhirsch e Goldenberg (2002), onde a massa microscópica e a densidade são dadas por:

$$\rho_{mic}(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N m_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (42)$$

$$\vec{p}_{mic}(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (43)$$

em que \vec{r}_i e \vec{v}_i correspondem a posição e velocidade do grão i .

Com a finalidade de demonstrar como modificar das forças de contato na escala dos grãos para uma descrição contínua de um campo de tensão, ou seja, para as escalas micro a macroscópica, onde todos os detalhes microscópicos do sistema são conhecidos, o sistema é discretizado em várias regiões, permitindo calcular os campos macroscópicos de tensão ou deformação (BRENDDEL; UNGER; WOLF, 2004). Essa abordagem *coarse – grainning* é geralmente conhecida como “homogeneização” (MEHTA, 2007). Para uma descrição contínua, essas quantidades devem ser calculadas com Gaussiana. Para esse fim, introduzimos uma função de *coarse – grainning* $\phi(\vec{R})$:

$$\phi(\vec{R}) = (2\pi\lambda^2)^{-D/2} e^{-R^2/(2\lambda^2)} \quad (44)$$

onde λ é o comprimento de *coarse – grainning*.

Com esta função ϕ , a densidade de massa e momento podem ser expressas como (MEHTA, 2007):

$$\rho(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \phi(\vec{r} - \vec{r}') \rho_{mic}(\vec{r}', t) = \sum_{i=1}^N m_i \phi(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (45)$$

$$\vec{p}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \phi(\vec{r} - \vec{r}') \vec{p}_{mic}(\vec{r}', t) = \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i(t) \phi(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \quad (46)$$

A partir do algebrismo desenvolvido por [Mehta \(2007\)](#), obtemos a expressão final do tensor de tensões:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} f_{ij\alpha} r_{ij\beta} \int_0^1 ds \phi(\vec{r} - \vec{r}_i + s\vec{r}_{ij}) \quad (47)$$

A integral da função de *coarse – graining* atribui um peso que vai definir a contribuição da força de contato de interesse para o tensor de tensões, portanto realizar a suavização da curva da tensão do sistema. Ou seja, considera o quanto o contato entre o grão i e j vai influenciar na tensão do sistema. O tensor considera as propriedades microscópicas como a força de interação entre o grão i e j na direção α e a distância entre os grãos i e j na direção β da força que é medida.

Capítulo 4

Análise e Discussão dos Resultados

4.1 Cisalhamento Sistema Granular

A fim de caracterizar diferentes regimes, delimitamos este trabalho à modelagem de fluxos de grãos que interagem entre si apenas por forças de contato. Assim, explanamos a reologia na geometria de cisalhamento homogêneo simples através de um sistema granular constituído por discos de diâmetro d e densidade ρ , confinados a uma pressão P entre duas paredes rígidas, também formadas por grãos. Definimos nossa implementação com conjuntos de grãos sem coesão, levemente polidispersos, para evitar cristalização do meio, sem fluido intersticial. Essas particularidades correspondem a grãos macroscópicos de diâmetro superior a $100 \mu\text{m}$ em um fluido de baixa viscosidade.

Neste trabalho, as simulações são executadas em sistemas granulares bidimensionais. Os grãos podem ser variados, porém para simplificar o problema, consideramos a seguir, discos na dimensão 2 (2D). Esses grãos estão sujeitos a colisões a cada par de grãos. Os algoritmos foram implementados na linguagem C, utilizando um computador com processador Intel XEON E5506 @2.13GHz; 128 GB de memória RAM; Sistema Operacional Linux CentOS 6.6 64 bits, empregando os parâmetros descritos na Tabela 1. Estes parâmetros se tornam adimensionais através de uma redistribuição de normalização.

Tabela 1 – Parâmetros do sistema.

Número de Grãos	Raio (mín/máx)	Pressão de Confinamento	Constante de mola normal e tangencial	Coefficiente de atrito
3600	0,3 e 0,5	2000	1000 e 750	0,5

As unidades dos parâmetros utilizados na Tabela 1 estão normalizadas conforme descrito por [Atman et al. \(2005b\)](#).

Inicialmente, os grãos são depositados e caem sobre sua base a partir de uma altura fixa, com velocidades aleatórias e diferentes. Os sistemas que foram gerados consistem em uma célula contendo 3600 grãos (60×60) confinados. Esses grãos possuem raio mínimo e máximo entre 0,3 e 0,5, cuja distribuição pode ser definida entre Gaussiana, uniforme, monodispersa ou bidispersa. Os demais parâmetros do sistema são: constante de mola normal $k_n=1000$, constante de mola tangencial $k_s=750$ e coeficiente de atrito de contato $\mu = 0,5$. Todos estes parâmetros foram normalizados. Na amostra gerada, há condições periódicas de contorno aplicadas ao longo do eixo horizontal x .

A reologia dos contatos é modelada por meio de duas molas, com k_n e k_t para a rigidez de contato normal e tangencial, respectivamente, e um coeficiente de amortecimento g_n escolhido para obtermos um amortecimento crítico na direção normal (ATMAN et al., 2005a). Após tal preparação do sistema, a simulação é iniciada e executada até atingir o estado estacionário, como a Figura 17 ilustra.

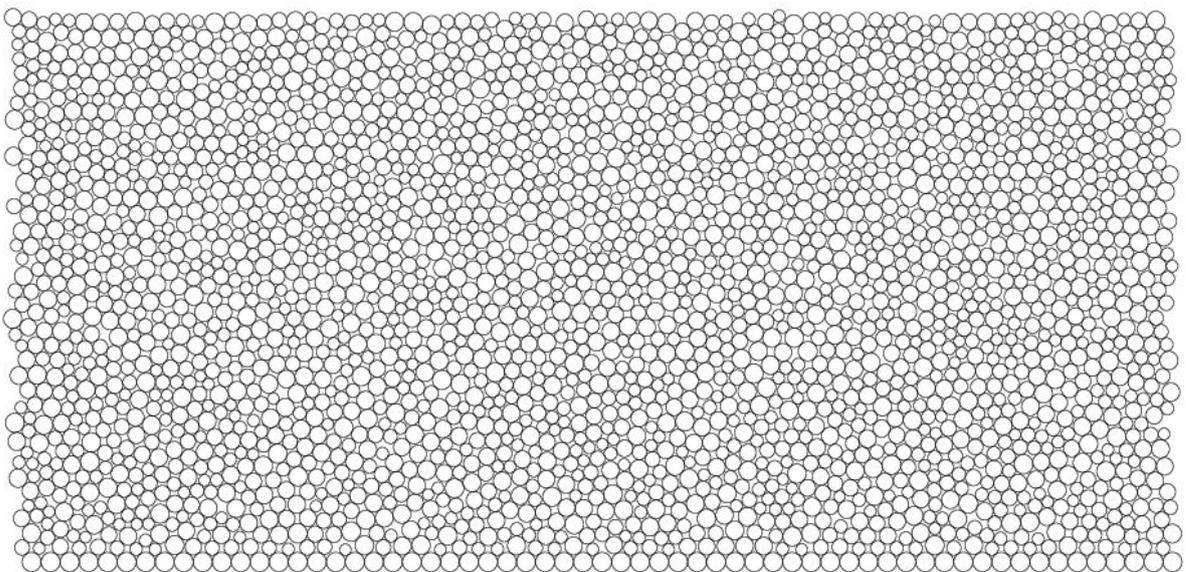


Figura 17 – Sistema com 3600 grãos confinados.

Após a célula ser obtida através da implementação do primeiro algoritmo de preparação da amostra (Figura 17), estudamos o fluxo de grãos submetidos a colisões inelásticas confinados em um sistema sob cisalhamento. Para isso, consideramos a geometria de fluxo mais acessível, isto é, cisalhamento plano sem gravidade: uma deformação é imposta a uma amostra de grãos confinados sob pressão, movendo a parede superior do sistema a uma velocidade constante na direção horizontal, sendo possível medir a variação do volume ocupado pelos grãos. Quando a placa superior é acionada a uma velocidade, o material é imposto a um gradiente homogêneo da taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}=V/H$, em que H é a distância entre as duas placas.

Para implementarmos o cisalhamento, após a deposição dos grãos, foram feitas algumas alterações no código. Inicialmente, precisou-se determinar a superfície fixa que se comportará como uma tampa para o cisalhamento ocorrer. Entende-se como “tampa” a superfície que agirá como um só grão e sofrerá uma pressão superior para gerar o cisalhamento. Como foi dito nas seções anteriores, para aplicar o cisalhamento nas amostras geradas, a preparação inicial da amostra não influencia a dinâmica do sistema dos grãos. Para inserir o cisalhamento no código, foi preciso estabelecer algumas alterações, criando uma nova função. Nesta nova função, a parede superior (tampa) está se movendo ao longo da direção x em velocidade constante, através da inserção de uma velocidade constante no eixo x do sistema granular, enquanto a parte inferior está imóvel. A posição vertical da parede superior é ajustada a cada passo para manter a pressão de confinamento P constante. Esse deslocamento implica que os cálculos dinâmicos de aceleração e rotações dos grãos sejam zerados. Além dessa função, foi necessário criar uma nova para o cálculo das forças de contato entre os grãos. Tendo em vista a tampa do sistema, foi preciso verificar quais dos grãos em contato pertencem à tampa e, se pertencem, a força resultante foi somada pela [Equação 48](#).

$$\sum_j \vec{F}_{resultante} = m_{tampa} a_{eixo_y} \quad (48)$$

em que a_{eixo_y} representa a aceleração no eixo y , $\vec{F}_{resultante}$ a força resultante da tampa e m_{tampa} massa da tampa. Já em relação ao eixo y , manteve-se a velocidade e a aceleração utilizada anteriormente na função original.

Após um fluxo homogêneo, com um longo tempo de cisalhamento, a [Figura 18](#) e [Figura 19](#) destacam o bloco formado na célula de grãos confinados submetidos ao cisalhamento. É nessa configuração que analisamos a célula de cisalhamento planar homogênea. O meio é confinado entre duas paredes rugosas, uma das quais está em movimento. Sendo assim, o meio é forçado a fluir.

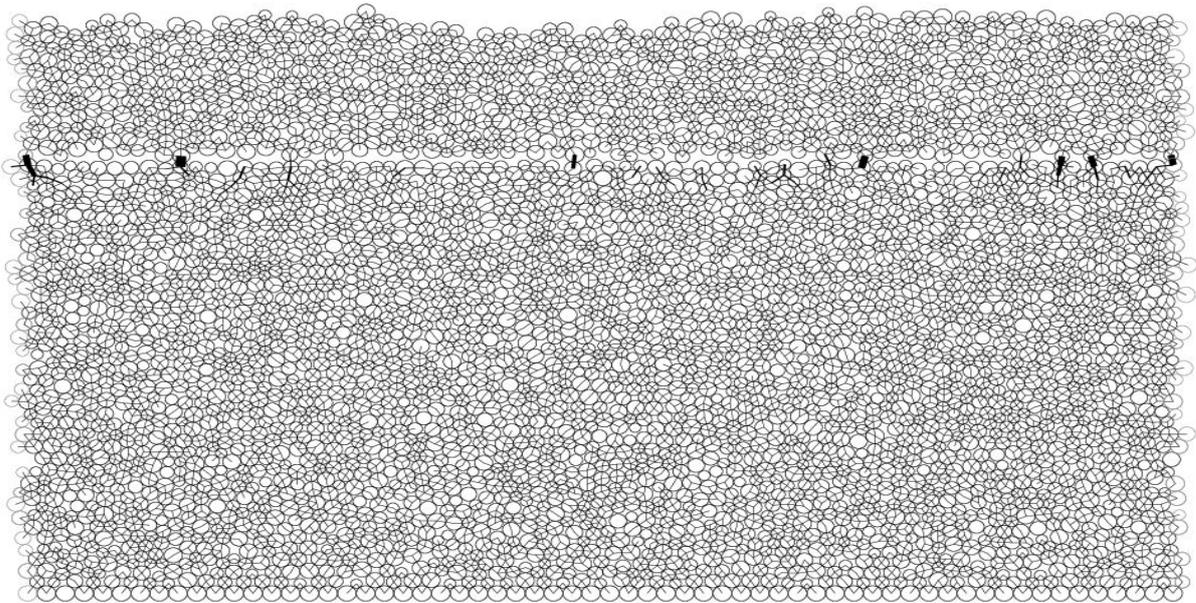


Figura 18 – Sistema com 3600 grãos confinados submetidos ao cisalhamento.

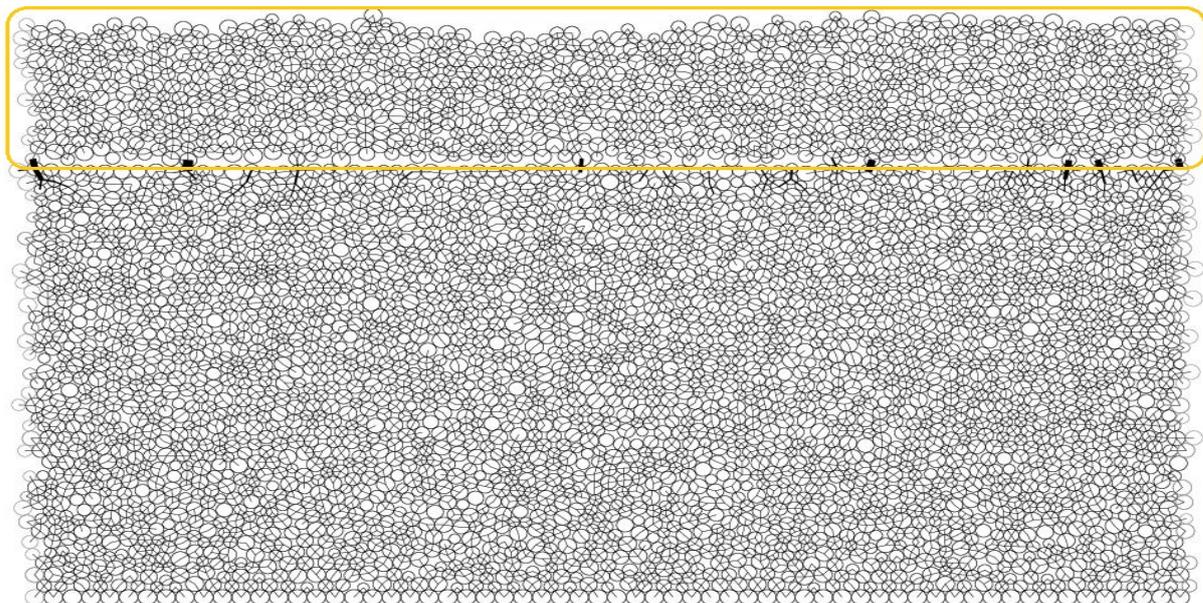


Figura 19 – Célula de cisalhamento planar bidimensional destacada em amarelo, com condição periódica de contorno imposta na direção x do cisalhamento.

Na prática, os presentes resultados representam um período de vários dias de simulações em um núcleo de computador, pois focamos no estado estacionário, onde as tensões normal e de cisalhamento, portanto, o coeficiente de atrito, são homogêneos em todo o sistema.

A próxima etapa deste trabalho consiste em aperfeiçoar o estudo do cálculo de tensões, que baseia-se em retirar informações microscópicas do sistema para construir um campo

macroscópico. Este tipo de operação envolve diversas etapas e não é um cálculo trivial, como demonstrado por Goldhirsch e Goldenberg (2002) e Atman et al. (2014). Assim, a partir disso, podemos avaliar os resultados das amostras cisalhadas com o estudo feito por Cruz et al. (2005).

As amostras que foram submetidas ao cisalhamento foram utilizadas como entrada de um terceiro algoritmo, que é responsável por calcular as tensões do sistema granular. A partir dessa etapa, foi possível calcular a média das tensões na direção normal e tangencial. Assim, a razão entre esses parâmetros nos dá o coeficiente de atrito efetivo μ^* .

A compilação do código, com variações na velocidade implicada na tampa, resultou na impressão dos valores de altura e tensões do sistema. Os dados foram trabalhados no *software* estatístico *Origin*, onde foram plotados para doze diferentes velocidades: 0,001; 0,002; 0,003; 0,004; 0,005; 0,006; 0,007; 0,008; 0,01; 0,03; 0,05 e 0,09. Tais dados foram tratados no *Origin* e estão representados nos gráficos a seguir.

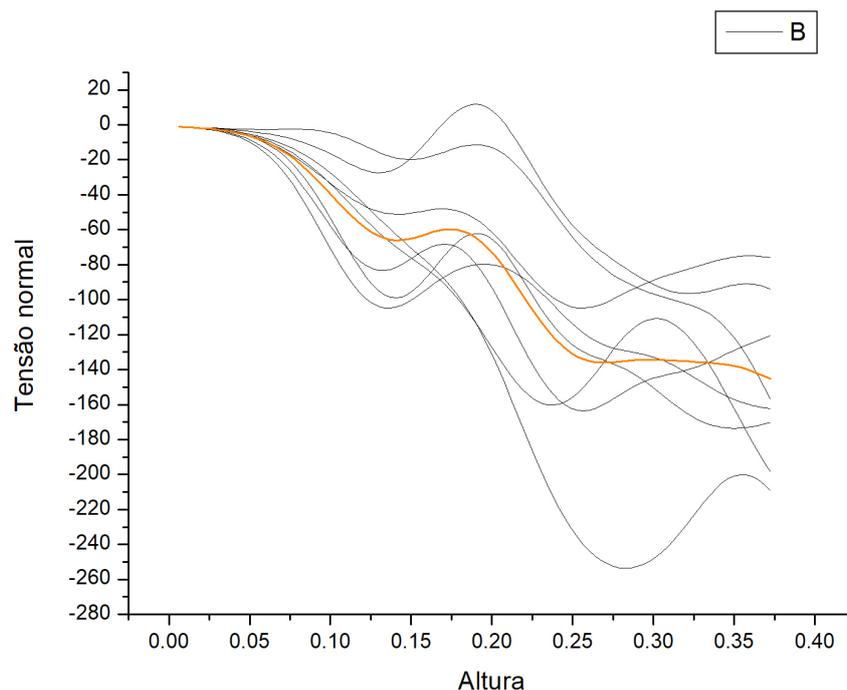


Figura 20 – Amostras que correspondem às últimas configurações do sistema. Curvas da tensão normal em função da altura para vários passos de tempo (velocidade aplicada na tampa = 0,001). A curva destacada representa a média de todas as curvas.

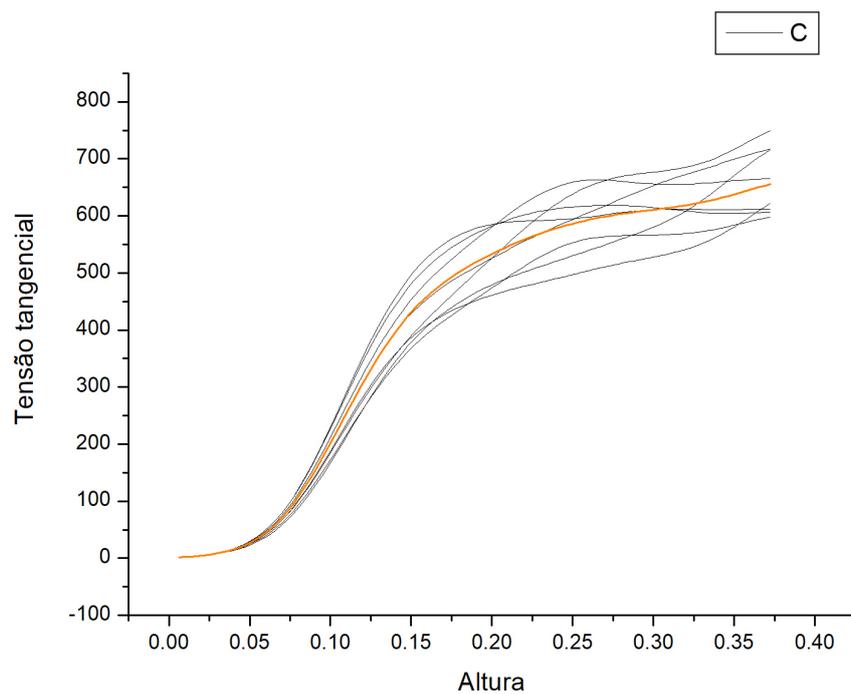


Figura 21 – Amostras que correspondem às últimas configurações do sistema. Curvas de tensão tangencial em função da altura para vários passos de tempo (velocidade aplicada na tampa = 0,001). A curva destacada representa a média de todas as curvas.

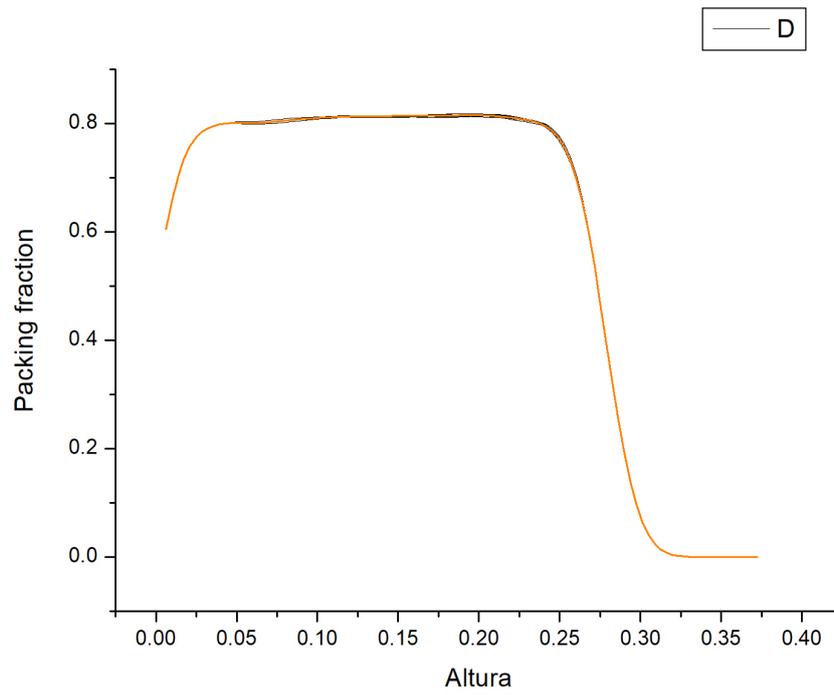


Figura 22 – Amostras que correspondem às últimas configurações do sistema. *Packing fraction* em função da altura para vários passos de tempo (velocidade aplicada na tampa = 0,001). A curva destacada representa a média de todas as curvas.

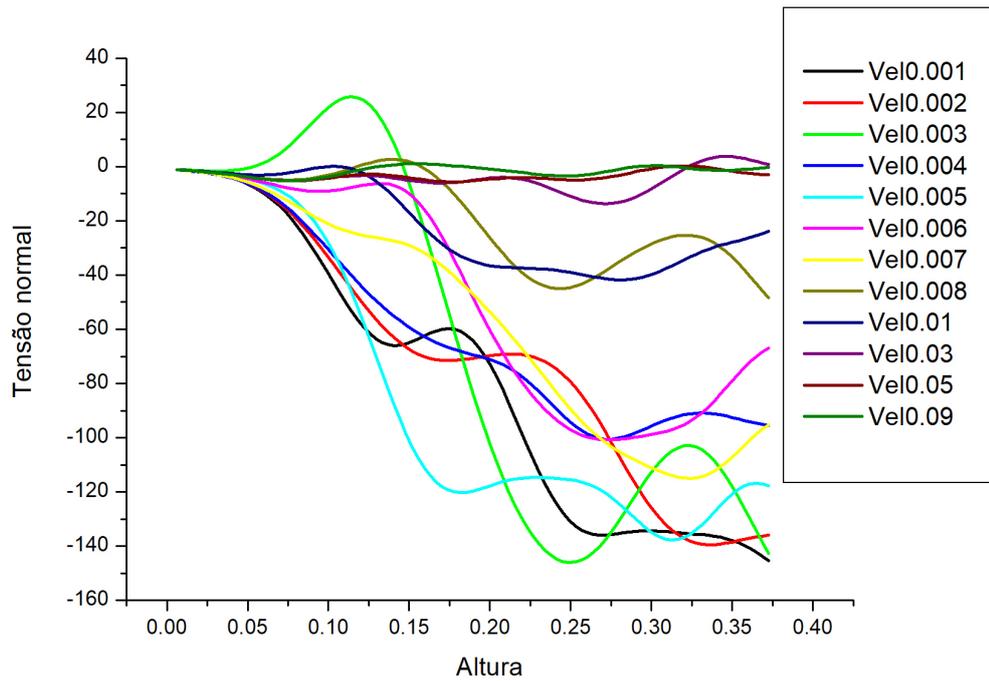


Figura 23 – Média das últimas configurações para tensão normal em função da altura para vários passos de tempo e velocidades da tampa.

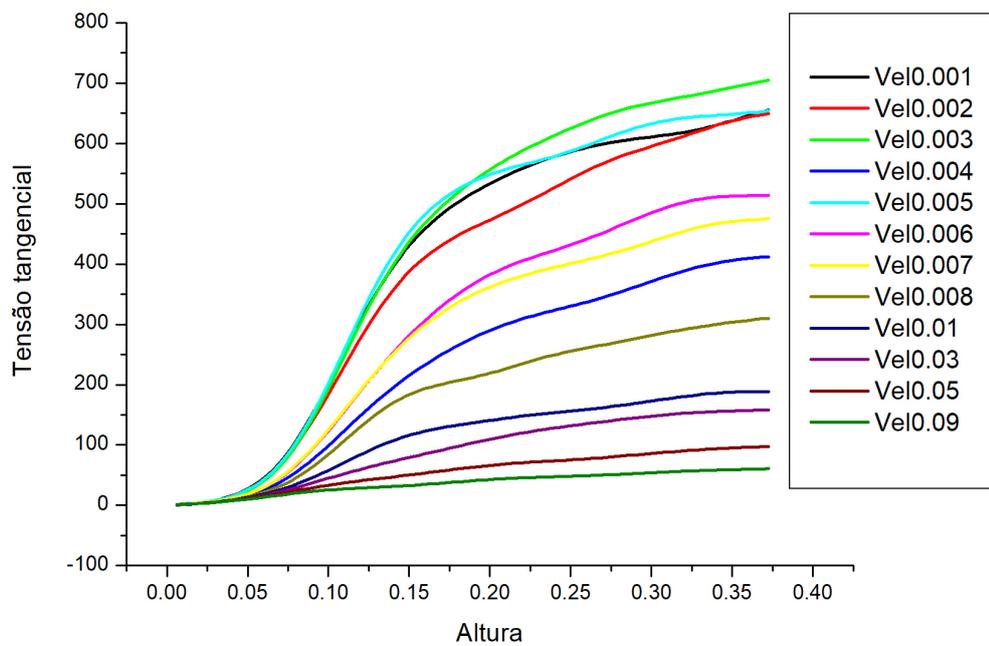


Figura 24 – Média das últimas configurações para tensão tangencial em função da altura para vários passos de tempo e velocidades da tampa.

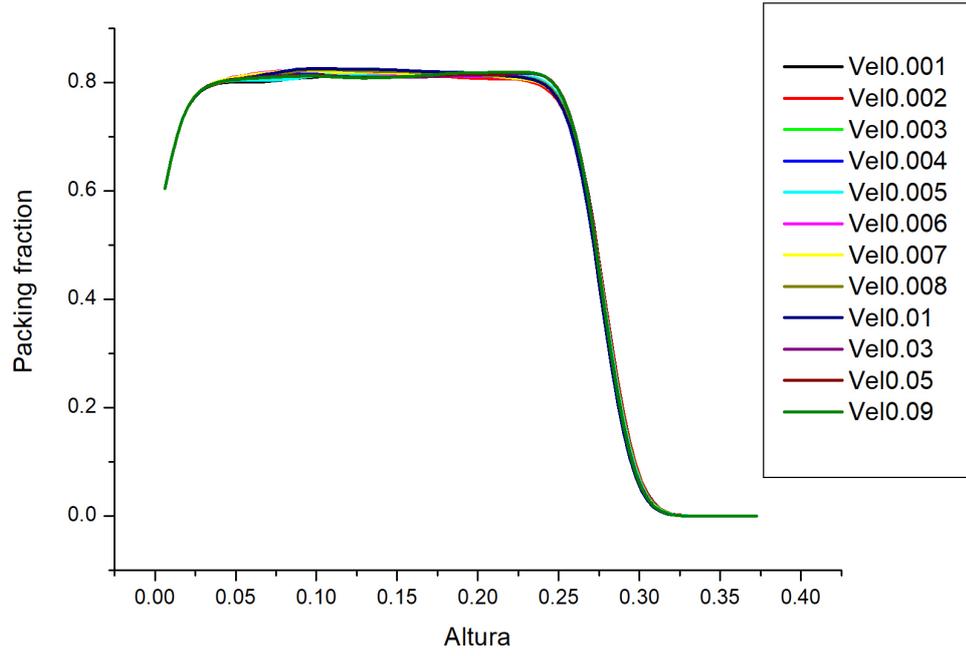


Figura 25 – Média das últimas configurações para *Packing fraction* em função da altura para vários passos de tempo e velocidades da tampa.

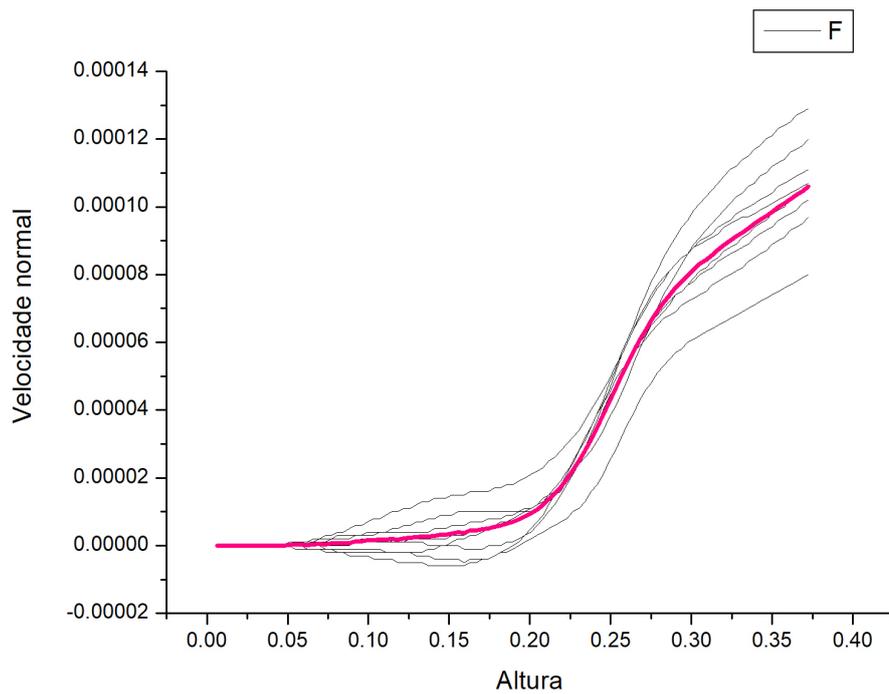


Figura 26 – Amostras que correspondem às últimas configurações do sistema. Curvas para a velocidade normal em função da altura para vários passos de tempo (velocidade aplicada na tampa = 0,001). A curva destacada representa a média de todas as curvas.

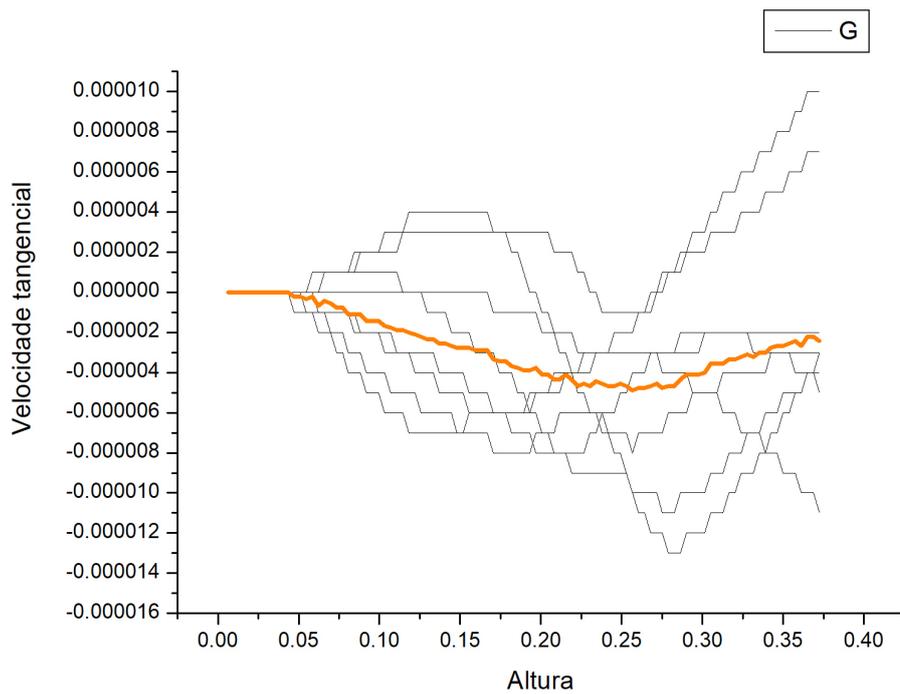


Figura 27 – Amostras que correspondem às últimas configurações do sistema. Curvas para a velocidade tangencial em função da altura para vários passos de tempo (velocidade aplicada na tampa = 0,001). A curva destacada representa a média de todas as curvas.

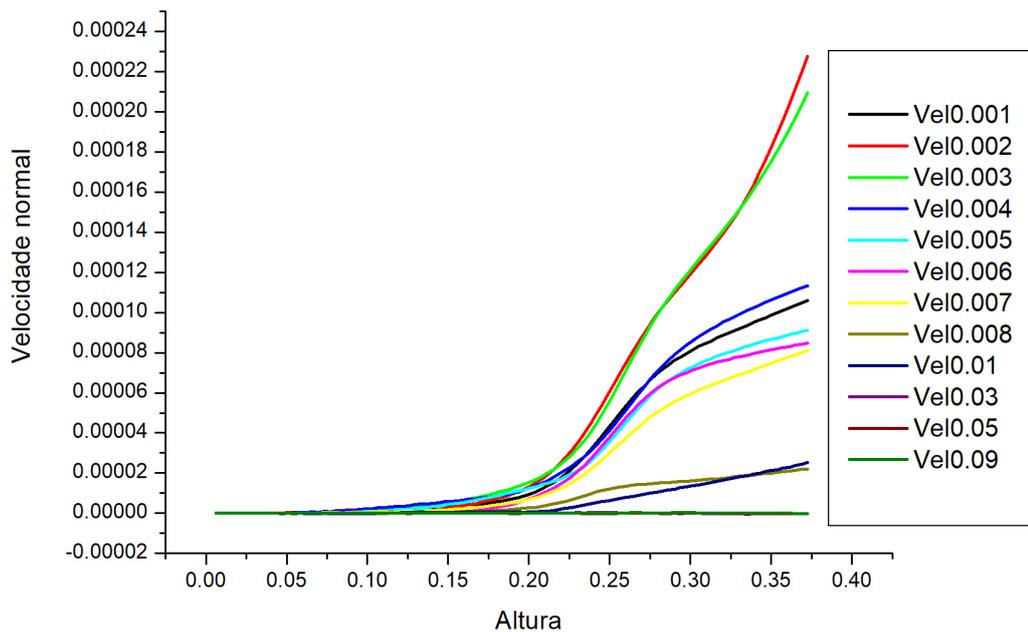


Figura 28 – Média das últimas configurações para a velocidade normal em função da altura para vários passos de tempo.

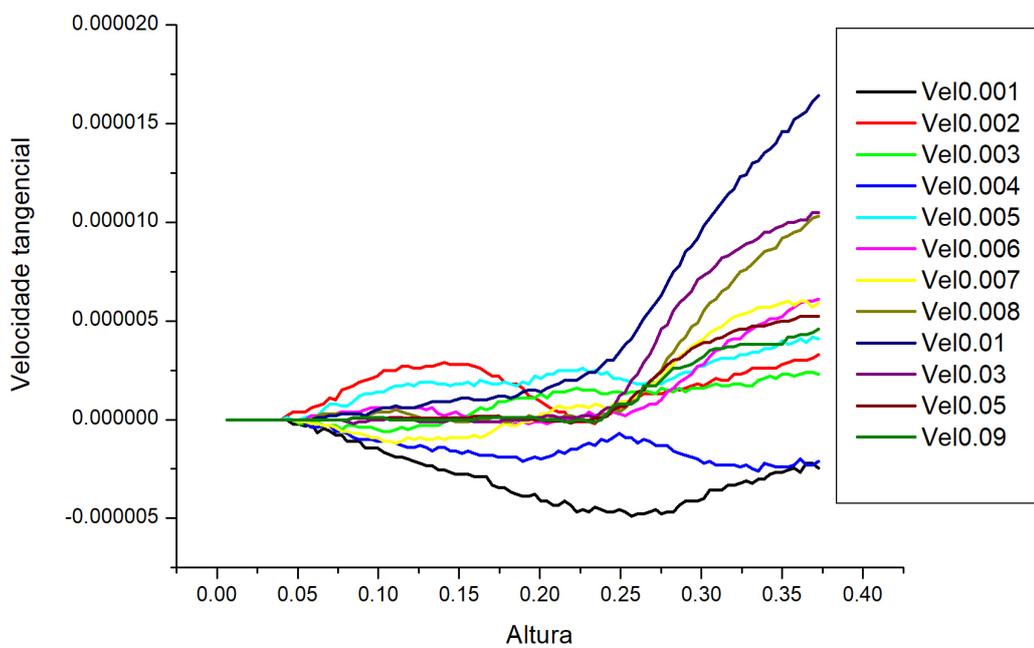


Figura 29 – Média das últimas configurações para a velocidade tangencial em função da altura para vários passos de tempo.

Para as diversas velocidades aplicadas nas simulações, alcançamos os seguintes valores de taxa de cisalhamento, conforme a [Tabela 2](#):

Velocidades	Taxa de cisalhamento
0,001	0,001615211
0,002	0,003230423
0,003	0,004845634
0,004	0,006460845
0,005	0,008076056
0,006	0,009691268
0,007	0,011306479
0,008	0,01
0,01	0,02
0,03	0,05
0,05	0,08
0,09	0,145369013

Após os valores de tensões obtidos através do algoritmo utilizado, foi possível produzir o gráfico que relaciona a reologia $\mu(I)$, com o propósito de entender o aumento de μ e sua dependência com o número de inércia I ([Figura 30](#)):

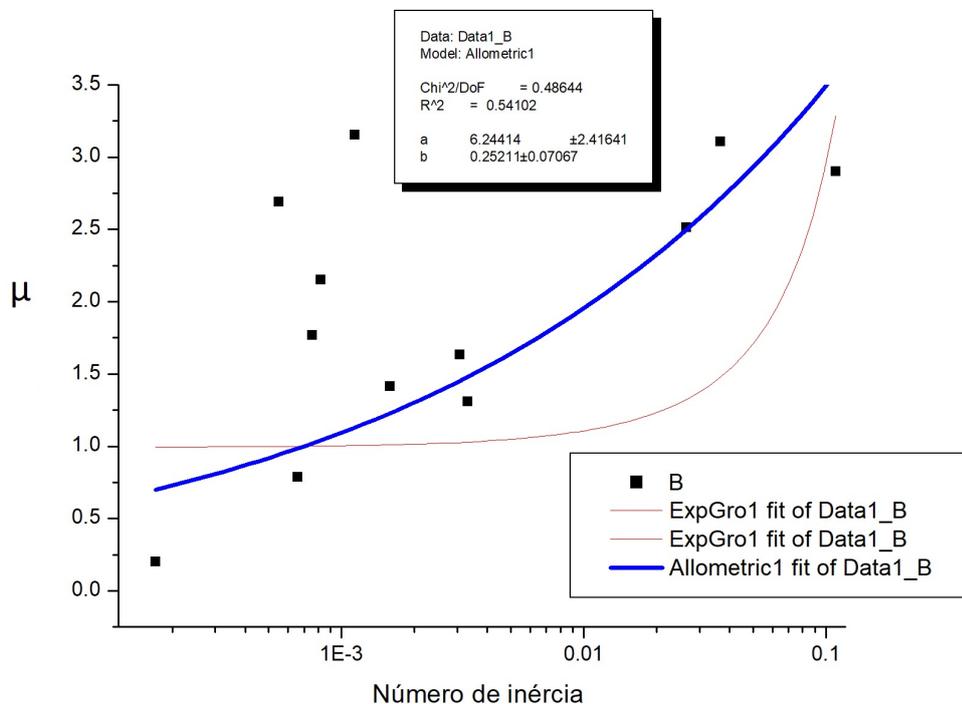


Figura 30 – Gráfico representa a reologia $\mu(I)$.

O comportamento esperado era de uma exponencial crescente, porém evidentemente que

através desses pontos o ajuste obtido não está em conformidade com o aguardado. Sendo assim, apresentamos outro ajuste, lei de potência, sendo que este é o melhor que ajusta os dados. Uma das justificativas que acreditamos é que o sistema se encontra distante do seu estado estacionário.

Capítulo 5

Conclusão

Estudamos o fluxo do material granular através do cisalhamento homogêneo por simulações computacionais. O fluxo de grãos tem sido objeto de grande interesse acadêmico e ainda é um campo ativo de pesquisa. A simulação do Método de Elementos Discretos (DEM) foi a abordagem adotada, visto que é uma ferramenta poderosa presente em uma parte significativa da literatura dos sistemas granulares.

Nossas análises foram focadas nos conjuntos densos de grãos a uma dada pressão e taxa de cisalhamento. Observamos fluxos de cisalhamento uniformes e constantes, que se tornam intermitentes no regime *quasi-estático*. Mostramos que, no limite de grãos rígidos, o estado de cisalhamento é determinado por um único número adimensional, chamado número de inércia I .

5.1 Trabalhos Futuros

Este trabalho pode ser estendido e aprimorado a partir do estudo de geometrias inovadoras para sistemas granulares. Temos como perspectiva, propor e explorar geometrias inovadoras para estudarmos o cisalhamento em função do número de inércia e determinar o atrito efetivo de diferentes meios granulares. Dessa forma, temos expectativa de estudar uma geometria inovadora para avaliarmos suas vantagens em relação ao que já foi feito pela academia. Como, por exemplo, um sistema que consiste na remoção dos grãos de uma “pia” localizada no centro do sistema e que serão reinseridos no limite externo, com condição periódica ao longo da direção radial. Mediremos o coeficiente de atrito efetivo dos componentes radial e iremos comparar com a medida análoga feita em uma caixa de cisalhamento padrão. A vantagem da geometria considerada aqui é a possibilidade de medir uma gama de números inerciais em uma única forma de realização, ao contrário do caso do cisalhamento simples. Assim, implementar um algoritmo para construir uma solução para o problema do cisalhamento em uma geometria inovadora do meio granular e estudar a dependência das gradezas medidas em função da granulometria e parâmetros microscópicos.

Referências

- AHARONOV, E.; SPARKS, D. Rigidity phase transition in granular packings. **Physical Review E**, APS, v. 60, n. 6, p. 6890, 1999. Citado na página 17.
- ALLEN, M.; TILDESLEY, D. Computer simulation of liquids. 1987. **New York: Oxford**, v. 385, 1989. Citado 3 vezes nas páginas 29, 31 e 32.
- ALLEN M.P.; TILDESLEY, D. J. **Computer simulation of liquids**. Oxford University Press, USA, 1989. ISBN 9780198556459,0198556454. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=60CEF71C2F11C21318B7F21C813A262B>>. Citado 4 vezes nas páginas 1, 11, 13 e 30.
- ANDREOTTI, B.; FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O. **Granular media: between fluid and solid**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013. Citado 12 vezes nas páginas 1, 2, 3, 4, 5, 6, 9, 10, 13, 14, 33 e 34.
- ANDREOTTI, B.; FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O. **Granular media: between fluid and solid**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 17, 18 e 19.
- ASTE, T. **Granular and complex materials**. [S.l.]: World Scientific, 2007. v. 8. Citado 4 vezes nas páginas 14, 15, 28 e 31.
- ATMAN, A. P. F. et al. From the stress response function (back) to the sand pile “dip”. **The European Physical Journal E**, Springer, v. 17, n. 1, p. 93–100, 2005. Citado na página 37.
- ATMAN, A. P. F. et al. Sensitivity of the stress response function to packing preparation. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 17, n. 24, p. S2391, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 36.
- ATMAN, A. P. F. et al. Mechanical properties of inclined frictional granular layers. **Granular Matter**, Springer, v. 16, n. 2, p. 193–201, 2014. Citado na página 40.
- BABIĆ, M.; SHEN, H. H.; SHEN, H. T. The stress tensor in granular shear flows of uniform, deformable disks at high solids concentrations. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 219, p. 81–118, 1990. Citado na página 16.
- BARANYAI, A.; EVANS, D. J. Direct entropy calculation from computer simulation of liquids. **Physical Review A**, APS, v. 40, n. 7, p. 3817, 1989. Citado na página 28.
- BARENBLATT, G. I.; BARENBLATT, G. I.; ISAAKOVICH, B. G. **Scaling, self-similarity, and intermediate asymptotics: dimensional analysis and intermediate asymptotics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1996. v. 14. Citado na página 20.
- BOUZID, M. Comportement rhéologique et effets non locaux dans les écoulements granulaires denses. 2014. Citado 3 vezes nas páginas 17, 18 e 22.
- BOUZID, M. et al. Non-local rheology in dense granular flows. **The European Physical Journal E**, Springer, v. 38, n. 11, p. 125, 2015. Citado na página 20.

- BRENDEL, L.; UNGER, T.; WOLF, D. E. Contact dynamics for beginners. **The Physics of Granular Media**, Wiley-VCH: Weinheim, p. 325–343, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 34.
- BROWN, E.; JAEGER, H. M. Shear thickening in concentrated suspensions: phenomenology, mechanisms and relations to jamming. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 77, n. 4, p. 046602, 2014. Citado 5 vezes nas páginas 1, 17, 18, 20 e 22.
- CAMBOU, B.; MAGOARIEC, H.; NGUYEN, N.-S. **Granular Materials at Meso-scale: Towards a Change of Scale Approach**. [S.l.]: Elsevier, 2016. Citado na página 16.
- CAMPBELL, C. S. Granular shear flows at the elastic limit. **Journal of fluid mechanics**, Cambridge University Press, v. 465, p. 261–291, 2002. Citado na página 17.
- CHEVOIR, F.; ROUX, J. Colloque physique et mécanique des matériaux granulaires. **Laboratoire Central des Ponts et Chaussées, Paris**, 2000. Citado na página 1.
- COMBE, G. **Origines géométriques du comportement quasi-statique des assemblages granulaires denses: Etude par simulations numériques**. Tese (Doutorado) — Marne-la-vallée, ENPC, 2001. Citado na página 8.
- COULOMB, A. F. de. **Etude de la transition de rigidité et de l'hystérésis dans les écoulements denses de granulaires**. Tese (Doutorado) — Université de Grenoble, 2017. Citado 5 vezes nas páginas 11, 12, 18, 19 e 20.
- CRUZ, F. D. **Friction and jamming in dry granular flows**. Tese (Doutorado) — Ecole des Ponts ParisTech, 2004. Citado 9 vezes nas páginas 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25 e 26.
- CRUZ, F. D. et al. Rheophysics of dense granular materials: Discrete simulation of plane shear flows. **Physical Review E**, APS, v. 72, n. 2, p. 021309, 2005. Citado 6 vezes nas páginas 2, 21, 23, 24, 27 e 40.
- CUNDALL, P. A. Numerical experiments on localization in frictional materials. **Ingenieur-archiv**, Springer, v. 59, n. 2, p. 148–159, 1989. Citado na página 16.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. A discrete numerical model for granular assemblies. **geotechnique**, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979. Citado 4 vezes nas páginas ix, 8, 15 e 16.
- CUNDALL P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, Thomas Telford, v. 29, 1979. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1680/geot.1979.29.1.47>>. Citado na página 14.
- DAHMEN, K. A.; BEN-ZION, Y.; UHL, J. T. A simple analytic theory for the statistics of avalanches in sheared granular materials. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 7, n. 7, p. 554, 2011. Citado na página 20.
- DENT, J. The dynamic friction characteristics of a rapidly sheared granular material applied to the motion of snow avalanches. **Annals of Glaciology**, Cambridge University Press, v. 18, p. 215–220, 1993. Citado na página 17.
- DRESCHER, A.; JONG, G. D. J. D. Photoelastic verification of a mechanical model for the flow of a granular material. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, Elsevier, v. 20, n. 5, p. 337–340, 1972. Citado na página 16.

DURAN, J. **Sands, powders, and grains: an introduction to the physics of granular materials**. [S.I.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado 9 vezes nas páginas [1](#), [2](#), [3](#), [4](#), [5](#), [6](#), [7](#), [9](#) e [12](#).

DURAN, J. et al. Decompaction, fragmentation and self organization of granular materials. **Journal of molecular liquids**, Elsevier, v. 76, n. 3, p. 221–235, 1998. Citado na página [3](#).

GARCIMARTÍN, A. et al. Shape of jamming arches in two-dimensional deposits of granular materials. **Physical review E**, APS, v. 82, n. 3, p. 031306, 2010. Citado 2 vezes nas páginas [4](#) e [6](#).

GENG, J. et al. Green's function measurements of force transmission in 2d granular materials. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, Elsevier, v. 182, n. 3-4, p. 274–303, 2003. Citado na página [16](#).

GENNES, P. D. Reflections on the mechanics of granular matter. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 261, n. 3-4, p. 267–293, 1998. Citado 2 vezes nas páginas [1](#) e [2](#).

GOLDENBERG, C.; GOLDHIRSCH, I. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. **Physical review letters**, APS, v. 89, n. 8, p. 084302, 2002. Citado na página [34](#).

GOLDHIRSCH, I. Rapid granular flows. **Annual review of fluid mechanics**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 35, n. 1, p. 267–293, 2003. Citado na página [23](#).

GOLDHIRSCH, I.; GOLDENBERG, C. On the microscopic foundations of elasticity. **The European Physical Journal E**, Springer, v. 9, n. 3, p. 245–251, 2002. Citado 3 vezes nas páginas [33](#), [34](#) e [40](#).

GUTIÉRREZ, G. et al. Simple model for reverse buoyancy in a vibrated granular system. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 67, n. 3, p. 369, 2004. Citado na página [5](#).

HAYAKAWA, H. Simulation of granular friction and its effective theory. **Progress of Theoretical Physics Supplement**, Oxford University Press, v. 138, p. 537–542, 2000. Citado 2 vezes nas páginas [17](#) e [24](#).

HINRICHSEN, H.; WOLF, D. E. **The physics of granular media**. [S.I.]: John Wiley & Sons, 2006. Citado 4 vezes nas páginas [12](#), [13](#), [15](#) e [16](#).

HOWELL, D. W.; BEHRINGER, R.; VEJE, C. Fluctuations in granular media. **Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science**, AIP, v. 9, n. 3, p. 559–572, 1999. Citado na página [16](#).

HUTTER, K.; RAJAGOPAL, K. On flows of granular materials. **Continuum Mechanics and Thermodynamics**, Springer, v. 6, n. 2, p. 81–139, 1994. Citado na página [2](#).

IORDANOFF, I.; KHONSARI, M. Granular lubrication: toward an understanding of the transition between kinetic and quasi-fluid regime. **Journal of Tribology**, American Society of Mechanical Engineers, v. 126, n. 1, p. 137–145, 2004. Citado 2 vezes nas páginas [17](#) e [20](#).

JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. Physics of the granular state. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 255, n. 5051, p. 1523–1531, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 8.

JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. **Reviews of modern physics**, APS, v. 68, n. 4, p. 1259, 1996. Citado na página 1.

JALALI, P. et al. Particle interactions in a dense monosized granular flow. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, Elsevier, v. 162, n. 3-4, p. 188–207, 2002. Citado na página 17.

JONES, R. et al. Adhesion forces between glass and silicon surfaces in air studied by afm: Effects of relative humidity, particle size, roughness, and surface treatment. **Langmuir**, ACS Publications, v. 18, n. 21, p. 8045–8055, 2002. Citado na página 4.

JOP, P.; FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O. A constitutive law for dense granular flows. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 441, n. 7094, p. 727, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 22.

LAGRÉE, P.-Y.; STARON, L.; POPINET, S. The granular column collapse as a continuum: validity of a two-dimensional navier–stokes model with a $\mu(i)$ -rheology. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 686, p. 378–408, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 17, 18, 24 e 26.

LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. Theory of elasticity", pergamon press london. 1959. Citado na página 11.

LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. **Mechanics, 1st edn.** [S.l.]: Pergamon Press, Oxford, 1976. Citado na página 9.

LÄTZEL, M.; LUDING, S.; HERRMANN, H. J. Macroscopic material properties from quasi-static, microscopic simulations of a two-dimensional shear-cell. **Granular Matter**, Springer, v. 2, n. 3, p. 123–135, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 3, 4 e 9.

LOIS, G.; LEMAÎTRE, A.; CARLSON, J. M. Numerical tests of constitutive laws for dense granular flows. **Physical Review E**, APS, v. 72, n. 5, p. 051303, 2005. Citado na página 17.

LUDING, S. Stress distribution in static two-dimensional granular media in the absence of friction. **Physical Review E**, APS, v. 55, n. 4, p. 4720, 1997. Citado na página 8.

LUDING, S. Collisions & contacts between two particles. In: **Physics of dry granular media.** [S.l.]: Springer, 1998. p. 285–304. Citado na página 1.

LUDING, S. About contact force-laws for cohesive frictional materials in 2d and 3d. **Behavior of granular media**, Shaker Verlag Germany, v. 9, p. 137–147, 2006. Citado na página 12.

LUDING, S. Cohesive, frictional powders: contact models for tension. **Granular matter**, Springer, v. 10, n. 4, p. 235, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.

LUN, C.; BENT, A. Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 258, p. 335–353, 1994. Citado na página 17.

MAGALHAES, C. F. M. Simulação de materiais granulares. UFMG, 2008. Citado na página 31.

MAGALHAES, C. F. M. Engarrafamento e segregação em empilhamentos abertos de grãos. 2013. Citado 9 vezes nas páginas 3, 5, 9, 10, 13, 14, 15, 28 e 32.

MATUTTIS, H.-G.; CHEN, J. **Understanding the discrete element method: simulation of non-spherical particles for granular and multi-body systems**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 2, 5 e 7.

MEHTA, A. **Granular physics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. Citado 8 vezes nas páginas 1, 2, 3, 5, 7, 33, 34 e 35.

MELLO, N. M. et al. Fingering phenomena during grain–grain displacement. **Computational Particle Mechanics**, Springer, v. 4, n. 2, p. 153–164, 2017. Citado na página 2.

MEZGER, T. G. **The rheology handbook: for users of rotational and oscillatory rheometers**. [S.l.]: Vincentz Network GmbH & Co KG, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 22.

MIDI, G. On dense granular flows. **The European Physical Journal E**, Springer, v. 14, n. 4, p. 341–365, 2004. Citado 5 vezes nas páginas 12, 20, 22, 23 e 26.

NEDDERMAN, R. M. **Statics and kinematics of granular materials**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005. Citado 10 vezes nas páginas 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 12, 25 e 26.

NGUYEN, T. K. **Modelisation multi-echelle des materiaux granulaires frottant-cohesifs**. Tese (Doutorado) — Université de Grenoble, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 13, 14 e 16.

POLLOCK, H. The forces acting between dry powder particles. **IFPRI Report SAR**, p. 12–09, 1994. Citado na página 4.

PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. **Computational granular dynamics: models and algorithms**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 32.

POULIQUEN, O.; CHEVOIR, F. Dense flows of dry granular material. **Comptes Rendus Physique**, Elsevier, v. 3, n. 2, p. 163–175, 2002. Citado na página 3.

RADJAI, F.; ROUX, S. Turbulentlike fluctuations in quasistatic flow of granular media. **Physical review letters**, APS, v. 89, n. 6, p. 064302, 2002. Citado na página 17.

RADJAI, F.; ROUX, S.; MOREAU, J. J. Contact forces in a granular packing. **Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science**, AIP, v. 9, n. 3, p. 544–550, 1999. Citado na página 16.

RAJCHENBACH, J. Granular flows. **Advances in physics**, Taylor & Francis, v. 49, n. 2, p. 229–256, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 1, 2 e 19.

SAKAGUCHI, H.; OZAKI, E.; IGARASHI, T. Plugging of the flow of granular materials during the discharge from a silo. **International Journal of Modern Physics B**, World Scientific, v. 7, n. 09n10, p. 1949–1963, 1993. Citado na página 7.

SCHALL, P.; HECKE, M. van. Shear bands in matter with granularity. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 42, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 17, 18 e 20.

SCHUHMACHER, P. **Rhéologie des écoulements granulaires: variables internes et effets d'échelle**. Tese (Doutorado), 2016. Citado 3 vezes nas páginas 14, 19 e 20.

SCHWARZ, O.; HORIE, Y.; SHEARER, M. Discrete element investigation of stress fluctuation in granular flow at high strain rates. **Physical Review E**, APS, v. 57, n. 2, p. 2053, 1998. Citado na página 17.

SHEN, H. H.; SANKARAN, B. Internal length and time scales in a simple shear granular flow. **Physical Review E**, APS, v. 70, n. 5, p. 051308, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 17.

SHINBROT, T.; MUZZIO, F. J. Reverse buoyancy in shaken granular beds. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 81, p. 4365–4368, Nov 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.4365>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 5.

SINGER, I. Solid lubrication processes. In: **Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes**. [S.l.]: Springer, 1992. p. 237–261. Citado na página 4.

SOKOLOVSKI, V. **Statics of granular media, pp. I-270**. [S.l.]: Oxford: Pergamon, 1965. Citado na página 4.

TANNER, R. I. **Engineering rheology**. [S.l.]: OUP Oxford, 2000. v. 52. Citado na página 19.

TAVARES, A. M.; FARIA, A. A. Estudo do aumento espontâneo na velocidade de partículas em transportadores de correia. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 4, n. 1, 2016. Citado na página 3.

TEGZES, P.; VICSEK, T.; SCHIFFER, P. Avalanche dynamics in wet granular materials. **Physical review letters**, APS, v. 89, n. 9, p. 094301, 2002. Citado na página 7.

THOMPSON, P. A.; GREY, G. S. Granular flow: friction and the dilatancy transition. **Physical Review Letters**, APS, v. 67, n. 13, p. 1751, 1991. Citado na página 16.

THORNTON, C. **Granular dynamics, contact mechanics and particle system simulations**. [S.l.]: Springer, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 1, 9, 13, 16 e 28.

TUZUN, U.; HOULSBY, G. Rm nedderman and sb savage. velocity distribution in slow flow. **Chemical Engineering Science**, v. 37, n. 12, p. 1691–1982, 1982. Citado na página 1.

VOLFSON, D.; TSIMRING, L. S.; ARANSON, I. S. Partially fluidized shear granular flows: Continuum theory and molecular dynamics simulations. **Physical Review E**, APS, v. 68, n. 2, p. 021301, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 14, 17 e 19.

WITTMER, J. et al. An explanation for the central stress minimum in sand piles. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 382, n. 6589, p. 336, 1996. Citado na página 15.

WOOD, D. M. **Soil behaviour and critical state soil mechanics**. [S.l.]: Cambridge university press, 1990. Citado na página 25.

ZHANG, Y.; CAMPBELL, C. S. The interface between fluid-like and solid-like behaviour in two-dimensional granular flows. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 237, p. 541–568, 1992. Citado na página 16.