



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-14808-TDI/1251

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DA DINÂMICA DE FLUIDOS GRANULARES

Aline Cristina Soterroni

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada,
orientada pelos Drs. Fernando Manuel Ramos e Elbert Einstein Neher Macau
., aprovada em 27 de fevereiro de 2007.

INPE
São José dos Campos
2007

Publicado por:

esta página é responsabilidade do SID

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

Gabinete do Diretor – (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 – CEP 12.245-970

São José dos Campos – SP – Brasil

Tel.: (012) 3945-6911

Fax: (012) 3945-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

**Solicita-se intercâmbio
We ask for exchange**

Publicação Externa – É permitida sua reprodução para interessados.



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-14808-TDI/1251

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DA DINÂMICA DE FLUIDOS GRANULARES

Aline Cristina Soterroni

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada,
orientada pelos Drs. Fernando Manuel Ramos e Elbert Einstein Neher Macau
., aprovada em 27 de fevereiro de 2007.

INPE
São José dos Campos
2007

519.6

Soterroni, A. C.

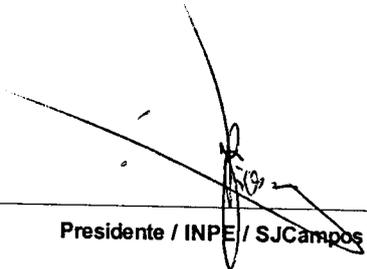
Simulação e análise da dinâmica de fluidos granulares /
Aline Cristina Soterroni. - São José dos Campos: INPE,
2007.

130 p. ; (INPE-14808 -TDI/1251)

1. Materiais granulares. 2. Simulações computacionais.
3. Segregação. 4. Formação de padrões. I. Título.

Aprovado (a) pela Banca Examinadora
em cumprimento ao requisito exigido para
obtenção do Título de Mestre em
Computação Aplicada

Dr. Reinaldo Roberto Rosa



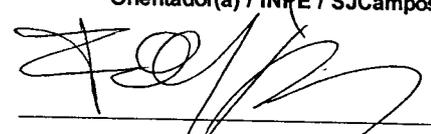
Presidente / INPE / SJC Campos - SP

Dr. Elbert Einstein Neher Macau



Orientador(a) / INPE / SJC Campos - SP

Dr. Fernando Manuel Ramos



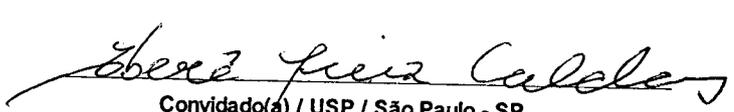
Orientador(a) / INPE / SJC Campos - SP

Dr. Joaquim José Barroso de Castro



Membro da Banca / INPE / SJC Campos - SP

Dr. Iberê Luiz Caldas



Convidado(a) / USP / São Paulo - SP


Aluno (a): Aline Cristina Soterroni

São José dos Campos, 27 de Fevereiro de 2007

“A mente que se abre a uma nova idéia jamais voltará ao seu tamanho original.”

ALBERT EINSTEIN

*A meu querido pai **Milton**.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por iluminar o meu caminho e por me conceder serenidade e sabedoria para enfrentar os mais diversos obstáculos.

À minha família que torce por mim em cada momento. Agradeço a meus irmãos Pedro e Chélida pelo apoio, à minha mãe Suely pelo amor e cuidado, e a meu pai Milton pela preocupação, compreensão, amor e ensinamentos de caráter, humildade, perseverança, dedicação e busca por ideais. Pai e mãe, obrigada por sempre me incentivarem nos estudos.

Ao Leonardo pela paciência, atenção e amor. Obrigada por me ensinar a crescer junto com você.

Aos meus orientadores Fernando Manuel Ramos e Elbert Einstein Nehrer Macau pelo apoio, orientação e conhecimento compartilhado. Em particular ao professor Fernando pela motivação, otimismo, e por sempre mostrar os caminhos da pesquisa e da ciência.

Agradeço ao professor José Roberto Nogueira, meu orientador de graduação, que me incentivou a dar os primeiros passos nessa longa caminhada em busca de conhecimento.

Agradeço aos amigos que me apoiaram, **acreditaram** e estiveram presentes nesta etapa e a todos que contribuíram direta e indiretamente para que este trabalho fosse concretizado.

Por fim, agradeço ao Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais pela oportunidade em prosseguir meus estudos. Aos professores do curso de Computação Aplicada - CAP - pelo conhecimento que adquiri ao longo das disciplinas. À banca examinadora pelos comentários e sugestões, visando o aprimoramento deste trabalho. E à FAPESP, Fundação de Amparo à Pesquisa de Estado de São Paulo, pelo apoio e incentivo financeiro.

RESUMO

Materiais granulares são freqüentemente manipulados pelo homem, encontrados de forma abundante na natureza e utilizados em diversas atividades agro-industriais. Dependendo das condições físicas a que são submetidos, eles são capazes de apresentar comportamentos não usuais, assumindo propriedades de sólidos, líquidos ou gases, além de exibir interessantes e diversificados fenômenos. Estas e outras características contribuem para a falta de uma teoria que forneça uma visão unificada de todos os fenômenos observados. Neste trabalho simula-se numericamente dois sistemas granulares a fim de estudar e investigar os fenômenos da segregação por tamanho (Sistema 1) e o da formação de padrões em finas camadas osciladas verticalmente (Sistema 2). As análises obtidas para o Sistema 1 sugerem que o fenômeno da segregação é o resultado da combinação de dois mecanismos distintos: empuxo e convecção. Já para o Sistema 2 encontramos algumas formas geométricas isoladas (quadrados, pentágonos e hexágonos) e a dinâmica observada é essencialmente difusiva, do tipo movimento browniano, em contraste com a dinâmica convectiva do Sistema 1, caracterizada pela presença de uma célula de convecção dentro do recipiente.

SIMULATION AND ANALYSIS OF THE GRANULAR FLUIDS DYNAMICS

ABSTRACT

Granular materials are ubiquitous in nature and in our daily lives, and used in many industrial processes. Depending on the physical conditions that they are subjected, granular materials may present unusual behavior, combining properties of solids, liquids or gases, and displaying interesting and diversified phenomena. In this work we numerically simulated two granular systems in order to investigate the phenomenon of size segregation (System 1) and pattern formation in vertically vibrated thin granular layers (System 2). Results for the System 1 suggest that the phenomenon of segregation is the effect of the combination of two distinct mechanisms: buoyancy and convection. For System 2, we found disordered patterns but with some isolated squares, pentagons and hexagons. The dynamics observed in System 2 is essentially diffusive, Brownian motion-type, in contrast with the convective dynamics displayed by System 1, characterized by the presence of a convection cell within the simulation box.

SUMÁRIO

Pág.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	29
CAPÍTULO 2 - MATERIAIS GRANULARES	33
2.1 - Principais Características e Propriedades	33
2.2 - Interações entre grãos	37
2.2.1 - Colisões	37
2.2.2 - Forças de Contato	39
2.3 - Segregação e Formação de Padrões	42
2.3.1 - Segregação	43
2.3.2 - Formação de Padrões	50
CAPÍTULO 3 - SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS	57
3.1 - Introdução	57
3.2 - Dinâmica Molecular	59
3.3 - Ferramentas Computacionais	60
3.4 - Software LAMMPS	61
CAPÍTULO 4 - SISTEMAS ANALISADOS	65
4.1 - Sistema 1: Efeito Castanha do Pará	66
4.2 - Sistema 2: Formação de Padrões	68
CAPÍTULO 5 - ANÁLISES E RESULTADOS	71
5.1 - Sistema 1	71
5.1.1 - Tamanho	72
5.1.2 - Atrito	77
5.1.3 - Frequência e Amplitude	84
5.1.4 - Análise das Características Dinâmicas	92

5.2 - Sistema 2	101
5.2.1 - Influência da Geometria da Fronteira	102
5.2.2 - Influência do Coeficiente de Atrito	104
5.2.3 - Distribuição de Velocidades	106
5.2.4 - Análise espectral	108
CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES	113
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	117
APÊNDICE A - DESCRIÇÃO DAS TÉCNICAS UTILIZADAS NA ANÁLISE DE CARACTERÍSTICAS DINÂMICAS	125
A.1 - Função de Autocorrelação	125
A.2 - Reconstrução do Espaço de Fase	126
A.3 - Estacionaridade	129
A.4 - Expoentes de Lyapunov	129
A.5 - Mapas de Recorrência	130

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
2.1 Inclinação de uma pilha de grãos de mostarda: (a) alguns graus abaixo do ângulo de repouso e (b) alguns graus acima.	35
2.2 Demonstração do princípio da dilatação de Reynolds. Uma bolsa de borracha é preenchida com areia grossa e um líquido colorido. Um fino tubo de vidro, que também contém este líquido é inserido na bolsa. Observa-se que o nível de líquido no tubo diminui quando a bolsa é apertada.	36
2.3 Colisão entre partículas. Em (a) com deformação, onde a região “achatada” é uma reta para o caso bidimensional e um círculo no caso tridimensional. Em (b) o contato é sem deformação e se dá através de um único ponto.	37
2.4 Contato entre duas partículas.	38
2.5 Colapso inelástico em simulação bidimensional de partículas rígidas colidindo inelasticamente, $\epsilon = 0.6$. Em preto tem-se as partículas envolvidas nas últimas colisões.	40
2.6 Modelo de forças mola-amortecedor.	41
2.7 Efeito Castanha do Pará. Inicialmente os maiores grãos estão por baixo (a), e após vibrações verticais os maiores grãos vão para o topo (b).	44
2.8 Diagrama esquemático do ciclo de convecção em um sistema composto por uma única partícula grande em meio a inúmeras partículas pequenas.	46
2.9 Segregação radial.	47
2.10 Experimento de Oyama: segregação axial.	48

2.11	Estratificação Granular. Em (a) e (b) temos sucessivas camadas de uma mistura granular composta por pequenas esferas de vidro com diâmetro médio igual a 0.27mm (branco) e cristais de açúcar com diâmetro médio de 0.8mm (vermelho). Em (c) e (d) a estratificação ocorre para uma mistura de três diferentes tipos de grãos: esferas de vidro em branco (diâmetro 0.15mm e ângulo de repouso 26°), areia em azul (diâmetro 0.4mm e ângulo de repouso 35°) e cristais de açúcar em vermelho (diâmetro 0.8mm e ângulo de repouso 39°).	49
2.12	<i>Oscillon</i> localizado.	51
2.13	Padrões: (a) quadrados ($f = 23.2Hz$, $\Gamma = 3.5$); (b)-(d) tiras com alguns desvios ($f = 27.6Hz$, $\Gamma = 4.23$); (e) e (f) desordem próxima da transição entre quadrados e tiras ($f = 25.1Hz$, $\Gamma = 4.3$).	51
2.14	Padrões: (a) tiras ($f/2$, $\Gamma = 3.3$); (b) hexágonos ($f/2$, $\Gamma = 4.0$); (c) superfície lisa com uma curva ($\Gamma = 5.8$); (d) competição entre quadrados e tiras ($f/4$, $\Gamma = 6.0$); (e) hexágonos ($f/4$, $\Gamma = 7.4$) e (f) desordem ($\Gamma = 8.5$).	52
2.15	Padrões (a) quadrados ($f = 33Hz$), (b) quadrados e tiras ($f = 37Hz$), (c) tiras ($f = 43Hz$) com $\Gamma = 2.5$	52
2.16	Comparação entre experimento e simulação: (a) quadrados, (b) tiras, (c)-(d) alternando fases de hexágonos, (e) superfície lisa, (f) quadrados, (g) tiras e (h) hexágonos.	53
2.17	Formação de meandros.	54
2.18	Surgimento de vórtices longitudinais de um rápido fluxo granular em plano inclinado. Três ampliações são selecionadas e em três localizações diferentes: início, meio e final da rampa.	54
2.19	Longas superfícies de ondas observadas em rápido fluxo de areia sobre um plano inclinado e rugoso.	55
2.20	Faixas indicando a separação de uma mistura binária (grandes esferas de vidro pretas e pequenas esferas brancas) em um longo cilindro rotacionado.	55

4.1	Sistema 1 (S1): 8000 partículas pequenas e uma única partícula grande. . .	67
4.2	Sistema 2 (S2): 30000 partículas.	68
5.1	Primeira parte da simulação do S1: inserção de partículas dentro do re- cipiente retangular.	71
5.2	Efeito Castanha do Pará: partícula grande tende à superfície e segrega em meio as demais.	72
5.3	Comportamento da partícula grande para $D/d = 1.5$. Os demais parâ- metros computacionais são: $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$. . .	73
5.4	Comportamento da partícula grande para $D/d = 3.0$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	73
5.5	Comportamento da partícula grande para $D/d = 4.0$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	74
5.6	Comportamento da partícula grande para $D/d : 4.0, 3.0$ e 1.5 ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	74
5.7	Trajetória da partícula grande para (a) $D/d = 1.5$, (b) $D/d = 3.0$ e (c) $D/d = 4.0$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	75
5.8	Trajetória da partícula grande no plano xz para $D/d = 1.5$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	76
5.9	Trajetória da partícula grande no plano xy (vista superior) para $D/d =$ 1.5 ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$). Note que a partícula se desloca sobre uma das diagonais do recipiente.	77
5.10	Comportamento da partícula grande para $D/d = 4.0$ (em vermelho) e de uma partícula pequena (em azul) com posição inicial próxima ao fundo do recipiente ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	78
5.11	Comportamento da partícula grande para $D/d = 4.0$ (em vermelho) e de uma partícula pequena (em azul) com posição inicial próxima a superfície ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	78

5.12	Projeções no plano (a) xz e (b) yz para a partícula pequena partindo de baixo ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	79
5.13	Projeções no plano (a) xz e (b) yz para a partícula pequena partindo de cima ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	79
5.14	Comportamento da partícula grande para $\mu_w = 0.5$ ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	80
5.15	Comportamento da partícula grande para $\mu_w = 0.5$ e $\mu_w = 0.0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	80
5.16	Comportamento da partícula grande e duas partículas pequenas na ausência de atrito nas paredes ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	81
5.17	Comportamento da partícula grande para $\mu_w = 0.5$, $\mu_w = 0.4$ e $\mu_w = 0.3$ ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	82
5.18	Definição das grandezas de caracterização de resposta transiente: tempo de subida (t_s), sobre-sinal (M_p) e tempo de pico (t_p). Consideramos aqui, a evolução da coordenada z da partícula grande com $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $D/d = 4.0$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$	82
5.19	Comportamento da partícula grande para μ_p : 0.00, 0.30, 0.40, 0.50 e 0.60 ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).	83
5.20	Movimento de oscilação da parede inferior do recipiente para $f = 0.125/t_0$ e amplitudes $3d$, $5d$ e $8d$	85
5.21	Comportamento da partícula grande para as amplitudes $8d$, $5d$ e $3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	85
5.22	Comportamento da partícula grande (vermelho) e várias partículas pequenas (azul) para $A = 3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	86
5.23	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz para a partícula grande com $A = 3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	86
5.24	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz para uma partícula pequena partindo de baixo com $A = 3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	87

5.25	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz para a partícula grande com $A = 8d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	87
5.26	Comportamento de duas partículas pequenas para $A = 8d$: (a) partindo de baixo e (b) partindo de cima ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	88
5.27	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de baixo) para $A = 8d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	89
5.28	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de cima) para $A = 8d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	89
5.29	Movimento de oscilação da parede inferior do recipiente para $A = 5d$ e frequências $0.25/t_0$, $0.125/t_0$ e $0.0625/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	90
5.30	Comportamento da partícula grande para as frequências $0.25/t_0$, $0.125/t_0$ e $0.0625/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	90
5.31	Comportamento da partícula grande e outras partículas pequenas para a frequência $0.0625/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	91
5.32	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz da partícula grande para $f = 0.25/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	92
5.33	Comportamento de duas partículas pequenas para $f = 0.25/t_0$: (a) partindo de baixo e (b) partindo de cima ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	92
5.34	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de baixo) para $f = 0.25/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	93
5.35	Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de cima) para $f = 0.25/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).	93
5.36	Séries temporais para $A = 3d$: (a) evolução da partícula grande (GA3) e (b) evolução de uma partícula pequena (PA3) ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	94

5.37 Séries temporais para $A = 5d$: (a) evolução da partícula grande (GA5) e (b) evolução de uma partícula pequena (PA5) ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	95
5.38 Séries temporais para $A = 8d$: (a) evolução da partícula grande (GA8) e (b) evolução de uma partícula pequena (PA8) ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).	95
5.39 Função de correlação integral para as séries (a) GA3 e (b) PA3.	96
5.40 Função de correlação integral para as séries (a) GA5 e (b) PA5.	97
5.41 Função de correlação integral para as séries (a) GA8 e (b) PA8.	97
5.42 Dimensão de correlação para as séries em estudo.	98
5.43 Evolução do expoente de Lyapunov para a série GA8.	99
5.44 Mapas de Recorrência para as séries (a) GA3 e (b) PA3.	99
5.45 Mapas de Recorrência para as séries (a) GA5 e (b) PA5.	100
5.46 Mapas de Recorrência para as séries (a) GA8 e (b) PA8.	100
5.47 Primeira parte da simulação: Inserção de partículas dentro do recipiente retangular para S2.	101
5.48 Instantes da simulação para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.50)$: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 152t_0$ e (d) $t = 160t_0$ ($\mu_w = \mu_p = 0.50$).	102
5.49 Instantes da simulação para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$ ($\mu_w = \mu_p = 0.50$).	103
5.50 Instante $t = 180t_0$ da simulação do S2 para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$	103
5.51 Instantes da simulação para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$, $\mu_w = \mu_p = 0.50$ e geometria cilíndrica: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$. . .	104
5.52 Comparando geometria retangular e cilíndrica para o ciclo $t = 188t_0$, com $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$ e $\mu_w = \mu_p = 0.50$. Note que uma mesma estrutura é encontrada para os dois casos no mesmo instante.	104

5.53	Comparando simulação para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$: (a) e (c) $\mu_w = \mu_p = 0.50$ (com atrito), (b) e (d) $\mu_w = \mu_p = 0.00$ (sem atrito); para os instantes $t = 180t_0$ (acima) e $t = 188t_0$ (abaixo).	105
5.54	Instante $t = 188t_0$ da simulação sem atrito entre partículas para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$.	106
5.55	Histogramas para as velocidades das partículas na direção x nos instantes: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.	107
5.56	Histogramas para as velocidades das partículas na direção y nos instantes: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.	107
5.57	Histogramas para as velocidades das partículas na direção z nos instantes: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.	108
5.58	Projeções no plano xy das posições de algumas partículas.	109
5.59	Trajetória tridimensional de algumas partículas.	109
5.60	GWS das velocidades nas direções (a) x , (b) y e (c) z .	110
5.61	GWS das posições nas direções (a) x , (b) y e (c) z .	111

LISTA DE TABELAS

	<u>Pág.</u>
4.1 Conjunto básico dos parâmetros computacionais	66
4.2 Parâmetros Computacionais para S1	67
4.3 Parâmetros Computacionais para S2	69
5.1 Tempo de pico (t_p), sobre-sinal (M_p), tempo de subida (t_s) e velocidade de subida (v_s) para diferentes coeficientes de atrito na parede	83
5.2 Tempo de pico (t_p), sobre-sinal (M_p), tempo de subida (t_s) e velocidade de subida (v_s) para diferentes coeficientes de atrito entre partículas	83

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CAP	–	Programa de Pós-Graduação em Computação Aplicada
DM	–	Dinâmica Molecular
ED	–	Evento Dirigido
FAPESP	–	Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo
GA3	–	Evolução da partícula grande para amplitude $3d$
GA5	–	Evolução da partícula grande para amplitude $5d$
GA8	–	Evolução da partícula grande para amplitude $8d$
GNU	–	General Public License
INPE	–	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
LAMMPS	–	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LLNL	–	Lawrence Livermore National Laboratory
MP	–	Mapas de Recorrência
PA3	–	Evolução da partícula pequena para amplitude $3d$
PA5	–	Evolução da partícula pequena para amplitude $5d$
PA8	–	Evolução da partícula pequena para amplitude $8d$
PFC2D	–	Particle Flow Code in 2 Dimension
PFC3D	–	Particle Flow Code in 3 Dimension
S1	–	Sistema 1
S2	–	Sistema 2
YADE	–	Yet Another Dynamic Engine

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

“Qui donc peut calculer le trajet d'une molécule? que savons-nous si des créations de mondes ne sont point déterminées par des chutes de grains de sable? qui donc connaît les flux et les reflux réciproques de l'infiniment grand et de l'infiniment petit, le retentissement des causes dans les précipices de l'être, et les avalanches de la création?”

(Victor Hugo, Les Misérables)

Grãos de areia, cereais, pílulas, cascalho, são alguns dos vários exemplos de materiais granulares. Eles estão presentes na natureza, na indústria e no cotidiano das pessoas. Diversos processos naturais evoluem segundo uma dinâmica típica de materiais granulares. É o que acontece, por exemplo, na evolução temporal das dunas, avalanches, desmoronamentos, erosão, sedimentação e formação de planetas e galáxias. Inúmeros setores da indústria frequentemente manipulam esses materiais em diversas etapas do processo de produção (DURAN, 2000).

Mas afinal, o que são materiais granulares? O que os tornam diferentes de sólidos comuns? Por que merecem um tratamento especial? Materiais granulares são coleções de partículas macroscópicas que se movem de forma independente e interagem entre si por meio de forças de contato dissipativas (UMBANHOWAR, 2003). Dependendo de certas circunstâncias, eles se comportam de forma complexa dificultando sua classificação tão somente como sólidos, líquidos ou gases. O mais preciso seria considerá-los um estado adicional da matéria (JAEGER *et al.*, 1996). A produção mundial de grãos e seus agregados alcança aproximadamente dez bilhões de toneladas por ano. Indústrias como a farmacêutica, a química, a metalúrgica e a de alimentos, por exemplo, manipulam materiais particulados através de misturas, transporte e armazenamento. Estima-se que o processamento desses materiais consome aproximadamente 10 % de toda energia produzida no planeta (DURAN, 2000). Dessa forma, compreender e prever o comportamento de materiais granulares, além de ser um dos desafios atuais da física é uma atividade de clara relevância econômica.

O estudo de materiais granulares não é recente. Cientistas como Charles de Coulomb (1736-1806), Michael Faraday (1791-1867), Osborne Reynolds (1842-1912), Ralph A.

Bagnold (1896-1990), entre outros, deixaram importantes contribuições (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005). Coulomb propôs idéias sobre o atrito estático; Faraday descobriu a instabilidade convectiva em recipientes vibrados preenchidos com pós; Reynolds introduziu a noção de dilatância, a qual implica que materiais granulares compactados devem necessariamente se expandir para que qualquer cisalhamento possa ocorrer; Bagnold estudou o movimento das areias, a formação de dunas, escreveu o livro *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes* em 1941, e suas contribuições levaram à compreensão de muitos fenômenos associados ao fluxo de grãos. No entanto, nos últimos anos vem sendo observado um crescente interesse na área. O número de artigos publicados na última década provavelmente excede o número total de artigos publicados até 1990 (GOLDHIRSCH, 2003). Cabe ressaltar que o advento dos computadores contribuiu significativamente neste sentido.

Três diferentes aspectos definem estes materiais: (i) *a natureza inelástica das colisões*; (ii) *a existência de atrito estático*; (iii) e o fato da *temperatura não exercer influência sobre o sistema* (JAEGER *et al.*, 2006). O comportamento de um único grão é facilmente compreendido, mas ao se tratar de uma coleção de grãos as propriedades se tornam complexas. Assim, materiais granulares constituem sistemas de n corpos, dissipativos e longe do equilíbrio quando sujeitos a forças externas. Frequentemente apresentam comportamentos não usuais e interessantes fenômenos, como a separação dos grãos e a formação de padrões. Finas camadas de grãos depositadas em recipientes submetidos a vibrações podem apresentar estruturas em forma de faixas, quadrados e hexágonos (ARANSON; TSIMRING, 2006). Nem sempre rotacionar ou vibrar um recipiente onde diferentes materiais granulares estão depositados implica na obtenção de misturas homogêneas, a separação dos grãos por tamanho é muito comum (OTTINO; KHAKHAR, 2002).

Do ponto de vista teórico, o grande desafio é o de se chegar a uma teoria que forneça uma visão unificada dos fenômenos observados e a elaboração de modelos que possibilitem a previsão confiável de comportamentos futuros. A física granular é ainda uma mistura de diferentes conceitos, ferramentas de modelagem e teorias fenomenológicas. Não existe uma teoria única que descreva tais sistemas na forma de um conjunto fundamental de equações como, por exemplo, as equações de Navier-Stokes para fluidos (ARANSON; TSIMRING, 2006). Vale ressaltar que avanços têm sido obtidos para fluxos granulares rápidos com o uso da teoria cinética dos gases e de equações da hidrodinâmica (ARANSON; TSIMRING, 2006; GOLDHIRSCH, 2003).

Desde que não existe uma teoria única para os diferentes sistemas granulares, vem sendo adotado o estudo de determinados sistemas e fenômenos através de simulações computacionais. Isso porque modelos computacionais podem ser construídos a partir de propriedades elementares do material em estudo e de propriedades sobre suas interações. E, muitas vezes, são capazes de prever o comportamento do sistema granular real em uma variedade de situações (DURAN, 2000). Além disso, sendo a realização de experimentos uma opção freqüentemente dispendiosa, simulações podem substituí-la parcialmente e ainda apresentar vantagens como a possibilidade de manipular parâmetros, testar modelos e armazenar informações em todos os instantes de tempo. Dentre os métodos numéricos utilizados, o uso de simulações de Dinâmica Molecular em sistemas granulares vem ganhando muitos adeptos nos últimos anos. A principal idéia do método é simular a dinâmica do sistema através da integração numérica das equações do movimento de Newton para cada partícula (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005).

A relevância do estudo de materiais granulares é devido a todos os motivos apresentados previamente, sobretudo pela sua ubiquidade nas atividades humanas. Dessa forma, criou-se uma linha de pesquisa sobre esses materiais na CAP/INPE. Com o objetivo de analisar e controlar a dinâmica de fluxos granulares, optou-se por utilizar um software que simule estes sistemas, uma vez que se está ingressando nesta área e tem-se o interesse em expandir as fronteiras do conhecimento no tema em questão.

Neste trabalho simula-se sistemas granulares compostos por partículas esféricas depositadas em recipientes retangulares sujeitos a vibrações verticais. Estuda-se dois fenômenos: o fenômeno da segregação por tamanho, para o caso de uma única partícula grande em meio a diversas partículas pequenas (amplamente conhecido como “Efeito Castanha do Pará”); e o fenômeno da formação de padrões em finas camadas de grãos.

De modo geral, o principal objetivo deste trabalho é o de criar uma competência local em relação ao software selecionado. Deseja-se também (i) realizar simulações tridimensionais significativas de sistemas granulares; (ii) analisar as dinâmicas em torno de diferentes condições; (iii) estudar os fenômenos da segregação e formação de padrões. Para nós, não apenas os resultados e análises das simulações são importantes, mas principalmente a geração desses dados.

Os capítulos seguintes desta dissertação se organizam da seguinte maneira:

- Capítulo 2: são descritas as principais características e propriedades de materiais granulares, alguns aspectos relevantes sobre a interação entre grãos, além dos fenômenos da segregação e da formação de padrões.
- Capítulo 3: abordagem sobre algumas vantagens e desvantagens de simulações computacionais, aspectos gerais do método de Dinâmica Molecular (amplamente utilizado em simulações de sistemas granulares), um relato sobre a busca de uma ferramenta computacional conveniente, e por fim a descrição da ferramenta escolhida: o software LAMMPS.
- Capítulo 4: descrição dos sistemas simulados, bem como a definição dos parâmetros computacionais utilizados.
- Capítulo 5: disseminação dos resultados para os fenômenos da segregação (Efeito Castanha do Pará) e da formação de padrões.
- Capítulo 6: com base nas análises realizadas no capítulo anterior, são apresentadas as conclusões obtidas, além de sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

MATERIAIS GRANULARES

Sistemas granulares são formados por partículas macroscópicas das mais variadas formas e tamanhos, que vão desde $1\mu m$ ($10^{-6} m$) a quilômetros ($10^3 m$) de diâmetro. Suas propriedades são freqüentemente diferentes das propriedades de sólidos, líquidos ou gases comuns. Isso porque a dinâmica desses sistemas é sensível a fatores como as condições físicas a que são submetidos, o grau de homogeneidade entre os grãos, a existência de uma substância preenchendo espaços no qual os grãos se encontram imersos, os mecanismos de agitação e de interação entre partículas, entre outros.

A literatura sobre este tema é vasta. O resultado de experimentos distintos são descritos por diferentes teorias o que conduz a falta de uma teoria única, de um denominador comum, capaz de descrever e prever o comportamento desses sistemas. Não existe até hoje um conjunto de equações fundamentais para sistemas granulares, em contraste ao que acontece com os fluidos que podem ser descritos pelas equações de Navier-Stokes. No entanto, consideráveis avanços têm sido obtidos através do uso da teoria cinética dos gases e da hidrodinâmica na modelagem de alguns sistemas (ARANSON; TSIMRING, 2006).

Um estudo completo e detalhado sobre os diversos sistemas granulares existentes vai além do escopo deste trabalho. Portanto, neste capítulo, descreve-se apenas as principais características e propriedades, alguns aspectos relevantes sobre a interação entre grãos, além de dois interessantes fenômenos: a *segregação* e a *formação de padrões*, que são investigados nas duas configurações de sistemas granulares estudadas nesta dissertação.

2.1 Principais Características e Propriedades

Materiais granulares são corpos sólidos capazes de oferecer resistência mecânica a forças externas. Eles são caracterizados pelo número elevado de átomos que os constituem, forma e tamanho irregulares, atrito na superfície e inelasticidade durante as colisões, além de resistência à compressão e ao cisalhamento. Se os grãos são muito pequenos, a proximidade entre eles faz com que forças de van der Waals se manifestem. Se para determinados tamanhos de grãos suas superfícies estiverem molhadas o suficiente e o ar intersticial for adequadamente úmido, forças coesivas se tornam cada vez mais relevantes. Na natureza, a maior parte dos sistemas granulares possuem

uma certa umidade, mas alguns são suficientemente secos e o efeito atrativo da água pode ser desprezado. Porém, sistemas demasiadamente secos podem adquirir cargas elétricas de superfície que deverão ser levadas em conta no cálculo das interações.

É importante também determinar o mecanismo dissipativo em um sistema de grãos, ou seja, deve-se avaliar a razão entre os dois principais tipos de forças atuando sobre esse sistema: a força dissipativa devido as interações entre grãos (F_c) e a força dissipativa devido à interação dos grãos com o fluido intersticial (F_v). Esta razão é chamada de número de Bagnold, $B = F_c/F_v$ (DURAN, 2000).

Frente a todas essas considerações é comum realizar simplificações a fim de estudar e explorar sistemas granulares. Portanto, consideramos aqui sistemas formados por partículas secas e não coesivas, ou seja, cujas forças de interação são somente as forças de contato e a força da gravidade. Se os grãos são considerados secos, então qualquer fluido intersticial, tal como o ar, pode ser desprezado no estudo de muitas propriedades do sistema (JAEGER *et al.*, 1996).

As duas principais características que definem os materiais granulares são: (i) a natureza dissipativa das interações entre os grãos, devido as colisões inelásticas e o atrito estático, e (ii) o fato da temperatura não exercer influência sobre o sistema. As partículas granulares são grandes o suficiente para que a gravidade e o atrito previnam o movimento randômico induzido pela temperatura (JAEGER, 2005). Assim, para um fluxo granular permanecer ativo, deve-se introduzir energia dentro do sistema na forma de forças externas, tais como vibrações (ARANSON; TSIMRING, 2006).

Em sistemas granulares, a escala de energia $k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura) é insignificante uma vez que a energia relevante é a energia potencial mgd (m é a massa do grão, d é o diâmetro e g é a aceleração da gravidade). Essa energia é cerca de 10^{12} vezes a energia $k_B T$ de um grão de areia a temperatura ambiente, o que torna os argumentos da termodinâmica não aplicáveis nesse caso. Assim, em sistemas granulares, é comum definir uma *temperatura granular* dada em função das variações de velocidade em torno da velocidade média do fluxo (JAEGER *et al.*, 1996). Entretanto, essa aproximação nem sempre é válida devido à natureza inelástica das colisões.

Materiais granulares apresentam comportamentos não usuais e podem assumir propriedades de sólidos, líquidos ou gases. Quando fortemente agitados, assemelham-se

a gases moleculares, mas com a diferença de que as colisões são inelásticas e a energia é dissipativa. São os chamados *gases granulares* ou *fluxos granulares rápidos*, freqüentemente modelados pelas equações da hidrodinâmica, que recebem o nome de *hidrodinâmica granular* (GOLDHIRSCH, 2003). Também podem apresentar propriedades de líquidos, como os finos grãos de areia fluindo em ampulhetas ou em avalanches. E ainda como sólidos, como uma pilha de areia em repouso.

Considere, por exemplo, uma pilha de grãos de mostarda. Dependendo do ângulo de inclinação, a mesma pilha pode se comportar tanto como um sólido quanto um líquido. Na Figura 2.1, em (a) a pilha está inclinada com um ângulo abaixo do ângulo de repouso e se comporta como um sólido. Em (b) está inclinada alguns graus acima do ângulo de repouso, o que provoca uma avalanche e os grãos na superfície se comportam como um fluido. Vale ressaltar que este fluxo de grãos é diferente de um fluxo comum, pois ele acontece apenas na superfície da pilha enquanto os grãos do interior permanecem em repouso.

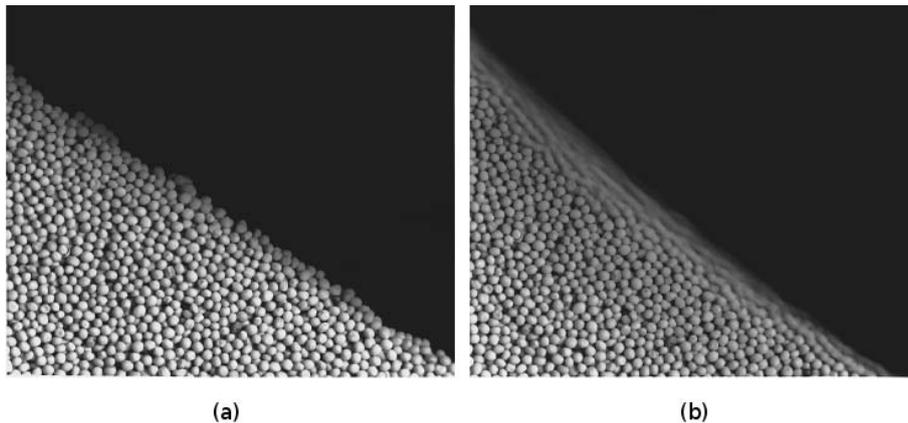


FIGURA 2.1 - Inclinação de uma pilha de grãos de mostarda: (a) alguns graus abaixo do ângulo de repouso e (b) alguns graus acima.

FONTE: Jaeger *et al.* (1996)

O conceito de *criticalidade auto-organizada* (SOC) foi introduzido por Bak *et al.* (1987) como uma possível explicação para a ubiquidade das leis de escala na natureza. A teoria do SOC propõe que sistemas complexos com muitos elementos que interagem entre si, evoluem naturalmente para um estado crítico e, neste estado, uma pequena mudança em um deles gera avalanches que podem atingir qualquer um dos outros elementos que fazem parte do sistema. A distribuição de probabilidade dos

tamanhos dessas avalanches obedece uma lei de potência, ou seja, a probabilidade de ocorrerem pequenas avalanches é maior, mas avalanches tão grandes quanto o sistema podem ocorrer com probabilidade não desprezível. Bak *et al.* (1988) estudaram o modelo da pilha de areia para ilustrar a idéia básica da criticalidade auto-organizada.

A noção de *dilatância*, a qual implica que materiais granulares compactados devem necessariamente se expandir para que qualquer cisalhamento possa ocorrer, foi introduzida por Reynolds e é conhecida como *Princípio da Dilatância de Reynolds*. Reynolds observou em 1885 que um sistema de grãos compactado dentro de uma bolsa de borracha vê seu volume aumentar quando submetido à compressão externa (DURAN, 2000). Em outras palavras, ao se aplicar uma força de compressão sobre o material, os grãos se afastam uns dos outros diminuindo, assim, a densidade do sistema. Na Figura 2.2 temos uma ilustração deste princípio. A razão para que o nível do líquido desça ao invés de subir no experimento é dada pelo fato que o sistema de grãos é de tal forma compacto antes da deformação que qualquer variação provocada pela mesma faz com que os grãos se separem por uma certa distância antes de haver um movimento de um grão em relação ao outro, permitindo assim que o líquido preencha os espaços vazios.



FIGURA 2.2 - Demonstração do princípio da dilatância de Reynolds. Uma bolsa de borracha é preenchida com areia grossa e um líquido colorido. Um fino tubo de vidro, que também contém este líquido é inserido na bolsa. Observa-se que o nível de líquido no tubo diminui quando a bolsa é apertada.

FONTE: Duran (2000)

Dependendo da velocidade do fluxo, sistemas granulares podem ser classificados em *fluxos rápidos*, *densos* e *quasi-estáticos*. Fluxos granulares rápidos ou gases granulares são sistemas constituídos por partículas rígidas, sujeitas a fortes agitações. Em regimes quasi-estáticos (por exemplo uma pilha de areia), a inércia dos grãos é desprezada e cada elemento interage com sua vizinhança através de contatos persistentes. Para fluxos densos, a inércia dos grãos é importante, as forças são transmitidas através de contatos persistentes e as colisões são freqüentes (MIDI, 2004).

2.2 Interações entre grãos

Além de grãos não-coesos e secos, consideramos também partículas esféricas, lisas e idênticas. A ferramenta computacional utilizada neste trabalho é baseada no método de Dinâmica Molecular (DM), onde as partículas admitem deformações (veja a Figura 2.3). Assim, a seguir são descritas as colisões e as forças de contato entre partículas levando em conta estas considerações.

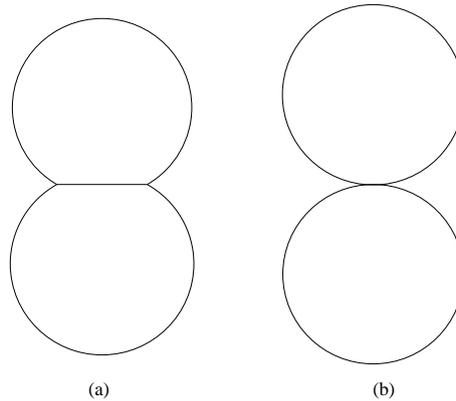


FIGURA 2.3 - Colisão entre partículas. Em (a) com deformação, onde a região “achatada” é uma reta para o caso bidimensional e um círculo no caso tridimensional. Em (b) o contato é sem deformação e se dá através de um único ponto.

2.2.1 Colisões

Duas partículas de raios (R_i, R_j) , posições $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, velocidades $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$ e velocidades angulares (ω_i, ω_j) , estão em contato mecânico se

$$\xi_{ij} \equiv R_i + R_j - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \geq 0, \quad (2.1)$$

ou seja, se a soma de seus raios é maior ou igual a distância entre seus centros (veja a Figura 2.4). Chamamos ξ_{ij} de *compressão mútua* das partículas i e j (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005).

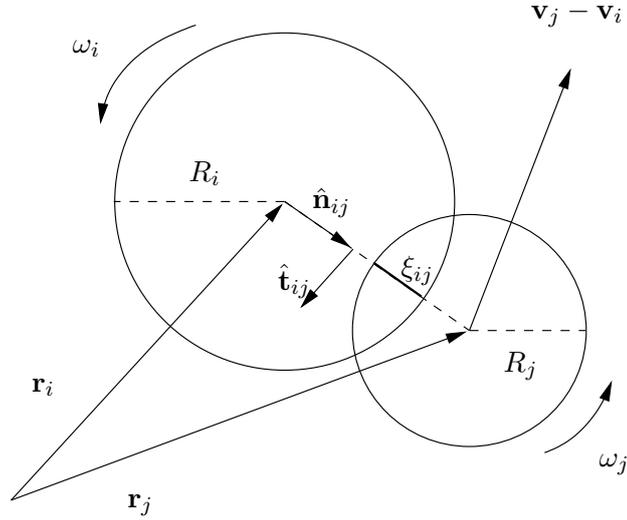


FIGURA 2.4 - Contato entre duas partículas.
 FONTE: Adaptado de Schäfer *et al.* (1996)

Os vetores unitários $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ e $\hat{\mathbf{t}}_{ij}$ são usados para decompor as forças e velocidades em componentes normal e tangencial

$$\hat{\mathbf{n}}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}, \quad (2.2)$$

$$\hat{\mathbf{t}}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (2.3)$$

Assim, a velocidade normal relativa $\mathbf{v}_{n_{ij}}$ e a velocidade tangencial relativa $\mathbf{v}_{t_{ij}}$ são dadas por

$$\mathbf{v}_{n_{ij}} = (\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}) \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{v}_{t_{ij}} = \mathbf{v}_{ij} - \mathbf{v}_{n_{ij}} - \frac{1}{2}(\omega_i + \omega_j) \times \mathbf{r}_{ij}, \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ e $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ (SILBERT *et al.*, 2001).

A elasticidade das colisões entre partículas é descrita pelo *coeficiente de restituição*

ϵ ,

$$\epsilon = -\frac{\mathbf{v}'_{n_{ij}}}{\mathbf{v}_{n_{ij}}}, \quad \epsilon \in [0, 1], \quad (2.6)$$

onde $\mathbf{v}_{n_{ij}}$ e $\mathbf{v}'_{n_{ij}}$ são as velocidades normais relativas antes e depois da colisão, respectivamente (BERNU; MAZIGHI, 1990).

Considere duas partículas esféricas i e j , rígidas, sem atrito, com coeficiente de restituição fixo $\epsilon \in [0, 1]$ e colidindo frontalmente. A relação entre as velocidades antes (\mathbf{v}_{ij}) e depois (\mathbf{v}'_{ij}) da colisão é dada por (ARANSON; TSIMRING, 2006):

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_i &= \mathbf{v}_i - \frac{1 + \epsilon}{2} [\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)] \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \\ \mathbf{v}'_j &= \mathbf{v}_j + \frac{1 + \epsilon}{2} [\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)] \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \end{aligned}$$

onde $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ é o vetor unitário na direção da linha de impacto, ou seja, a linha conectando os centros das esferas. Para $\epsilon = 1$ as colisões são perfeitamente elásticas, e para $\epsilon = 0$ as colisões são totalmente inelásticas. A energia perdida no sistema devido as colisões inelásticas tem a forma (ARANSON; TSIMRING, 2006):

$$\Delta E = -\frac{1 - \epsilon^2}{4} |\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)|^2. \quad (2.7)$$

Muitos modelos de colisões entre partículas utilizam coeficiente de restituição fixo. No entanto, em alguns casos, como o de um gás granular de partículas rígidas colidindo inelasticamente, esta aproximação pode levar o sistema a apresentar um fenômeno conhecido como *colapso inelástico*: partículas realizam um número infinito de colisões em um tempo finito (GOLDHIRSCH, 2003), como ilustrado na Figura 2.5. Para que isso não ocorra, ϵ deve se aproximar de 1 quando a velocidade normal relativa $\mathbf{v}_{n_{ij}}$ se aproxima de zero, ou seja, ϵ deve ser definido como uma função de $\mathbf{v}_{n_{ij}}$ (SWINNEY; RERICHA, 2004).

2.2.2 Forças de Contato

Materiais granulares interagem entre si por meio de contato mecânico. A força resultante entre duas partículas, i e j , em contato é descrita por

$$\mathbf{F}_{ij} = \begin{cases} \mathbf{F}_{n_{ij}} + \mathbf{F}_{t_{ij}} & , \text{ se } \xi_{ij} \geq 0 \\ 0 & , \text{ caso contrário} \end{cases} \quad (2.8)$$

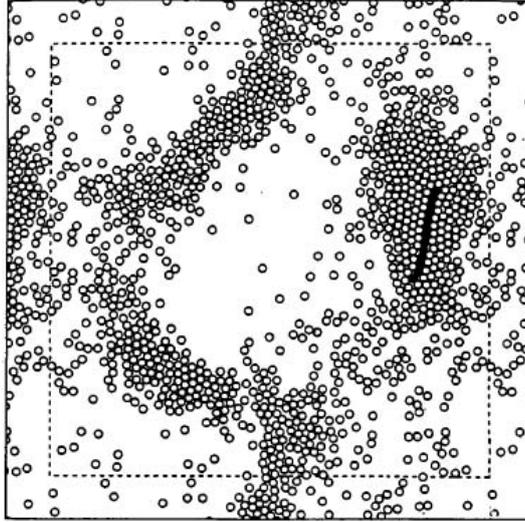


FIGURA 2.5 - Colapso inelástico em simulação bidimensional de partículas rígidas colidindo inelasticamente, $\epsilon = 0.6$. Em preto tem-se as partículas envolvidas nas últimas colisões.
 FONTE: [McNamara e Young \(1996\)](#)

onde $\mathbf{F}_{n_{ij}}$ e $\mathbf{F}_{t_{ij}}$ são as componentes na direção normal e tangencial, respectivamente. A força normal é responsável pelo movimento de translação e a força tangencial pelo movimento de rotação das partículas ([PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005](#)).

Em colisões oblíquas, além de forças normais existem forças tangenciais. Em geral, a força tangencial está relacionada a força normal pela lei de atrito de Coulomb,

$$\mathbf{F}_t \leq \mu_e \mathbf{F}_n \text{ para atrito estático } (v_t = 0) \quad (2.9)$$

$$\mathbf{F}_t = \mu_d \mathbf{F}_n \text{ para atrito dinâmico } (v_t \neq 0) \quad (2.10)$$

onde μ_e e μ_d são os coeficientes de atrito estático e dinâmico, respectivamente ([SCHÄFER et al., 1996](#)).

Um simples modelo para as forças de contato é o mola-amortecedor (*spring-dashpot*), utilizado pela ferramenta computacional adotada. Este modelo é constituído de uma parte elástica e outra dissipativa, como mostra a [Figura 2.6](#).

Considerando duas partículas i e j , as forças normal e tangencial atuando sobre a

partícula i são dadas por (SILBERT *et al.*, 2001):

$$\mathbf{F}_{n_{ij}} = f(\xi_{ij}/d)(k_n \xi_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{ij} - \gamma_n m_{ef} \mathbf{v}_{n_{ij}}), \quad (2.11)$$

$$\mathbf{F}_{t_{ij}} = f(\xi_{ij}/d)(-k_t \mathbf{u}_{t_{ij}} - \gamma_t m_{ef} \mathbf{v}_{t_{ij}}), \quad (2.12)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ é o vetor normal unitário (2.2), d é o diâmetro das partículas, ξ_{ij} é a compressão mútua (2.1), $\mathbf{v}_{n_{ij}}$ é velocidade normal relativa (2.4), $\mathbf{v}_{t_{ij}}$ é a velocidade tangencial relativa (2.5), $m_{ef} \equiv m_i m_j / (m_i + m_j)$ é a massa efetiva das partículas colidindo, $k_{n,t}$ e $\gamma_{n,t}$ são as constantes elásticas e viscoelásticas, e $\mathbf{u}_{t_{ij}}$ é o deslocamento tangencial elástico entre as esferas dado por (SILBERT *et al.*, 2001)

$$\frac{d\mathbf{u}_{t_{ij}}}{dt} = \mathbf{v}_{t_{ij}} - \frac{(\mathbf{u}_{t_{ij}} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2}, \quad (2.13)$$

com $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ e $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$. Para contatos lineares $f(x) = 1$ e para contatos Hertzianos $f(x) = \sqrt{x}$.

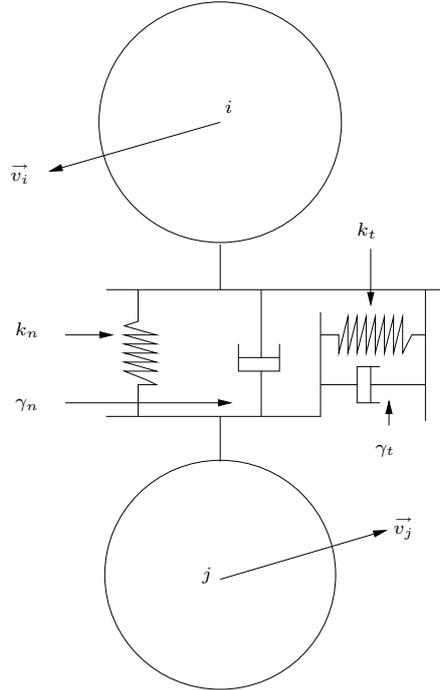


FIGURA 2.6 - Modelo de forças mola-amortecedor.
 FONTE: Adaptado de Duran (2000)

Assim, em um campo gravitacional g , as acelerações translacional e rotacional das

partículas são determinadas pela segunda lei de Newton em termos das forças totais e torques sobre cada partícula i (SILBERT *et al.*, 2001):

$$\mathbf{F}_i^{tot} = m\mathbf{g} + \sum_j \mathbf{F}_{n_{ij}} + \mathbf{F}_{t_{ij}}, \quad (2.14)$$

$$\tau_i^{tot} = -\frac{1}{2} \sum_j \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{F}_{t_{ij}}, \quad (2.15)$$

e a correspondente força de contato para a partícula j é dada pela terceira lei de Newton.

A quantidade de energia perdida nas colisões é caracterizada pela inelasticidade através do valor do coeficiente de restituição. No modelo mola-amortecedor linear, o coeficiente de restituição é fixo e calculado em função da massa efetiva e das constantes elásticas e viscoelásticas. Considerando esferas de massas idênticas $m_i = m_j = m$, existem coeficientes de restituição na direção normal ϵ_n e na direção tangencial ϵ_t , dados por (SILBERT *et al.*, 2001):

$$\epsilon_{n,t} = \exp(-\gamma_{n,t} t_{col}/2), \quad (2.16)$$

onde t_{col} é o tempo de colisão

$$t_{col} = \pi(2k_n/m - (\gamma_n/2)^2)^{-1/2}. \quad (2.17)$$

Após estas considerações sobre algumas das propriedades, características e interações entre partículas, descrevemos dois interessantes fenômenos muito observados em sistemas granulares densos.

2.3 Segregação e Formação de Padrões

A mistura de materiais granulares é amplamente utilizada em diversos segmentos da indústria. Líquidos, em geral, possuem uma pré-disposição para se misturarem, já os materiais granulares não. Para se obter misturas homogêneas de diferentes grãos é necessário executar vibração ou rotação do recipiente onde eles estão depositados, ou seja, inserir energia dentro do sistema. Entretanto, esse procedimento muitas vezes não é alcançado. Frequentemente se observa separação parcial ou completa, o que pode comprometer a qualidade final de um produto ou dificultar as etapas no

processo de produção (DURAN, 2000).

Diferentes grãos colocados aleatoriamente dentro de um recipiente profundo sujeito a vibrações verticais tendem a se separar por tamanho: os maiores em cima e os menores em baixo. A isso denomina-se *segregação*. Uma fina camada de grãos depositada em um recipiente também submetido a vibrações verticais podem se aglomerar em diferentes regiões, fenômeno esse conhecido como *formação de padrões*. A seguir, esses dois fenômenos comuns em materiais granulares são descritos em mais detalhes.

2.3.1 Segregação

O fenômeno da *segregação* é uma característica pertinente aos materiais granulares. Em uma mistura de materiais particulados distintos, ou seja, com diferentes propriedades mecânicas tais como tamanho, forma, rugosidade ou densidade, os grãos tendem a se separar quando submetidos à agitação externa.

Existem, basicamente, dois diferentes tipos de segregação granular: *segregação por vibração* e *segregação por rotação*, ou mais precisamente, *segregação por cisalhamento* (*shearing*). Na segregação por vibração o movimento relativo das partículas é dado pela agitação do recipiente, usualmente na direção vertical. A segregação por cisalhamento é causada por um fluxo diferencial entre as partículas que estão na camada superior do volume de grãos (DURAN, 2000).

A segregação é muito observada na indústria, que freqüentemente manipula materiais granulares através de misturas, transporte e armazenamento. Estratégias são usadas para minimizar este efeito, mas sem um entendimento completo do fenômeno (OTTINO; KHAKHAR, 2002). Em misturas de partículas de diferentes tamanhos, utilizadas na fabricação de medicamentos como comprimidos, cápsulas ou pílulas, a segregação é um fenômeno indesejado, pois é interessante obter misturas tão homogêneas quanto possível. Por outro lado, um exemplo de processo que se beneficia deste efeito é o peneiramento. Para peneirar uma mistura de diferentes grãos deve-se aplicar uma vibração e esta ação faz com que os menores movam-se para a parte inferior onde se encontram os orifícios da peneira. Assim, as partículas pequenas atravessam essas aberturas até que restem apenas as partículas maiores que não ultrapassam os orifícios.

Separação entre grãos pequenos e grandes, levando em conta apenas o tamanho recebe o nome de *segregação por tamanho*. Um exemplo canônico desse tipo de se-

gregação é o “Efeito Castanha do Pará”, amplamente conhecido como *Brazil Nut Effect* (BNE), onde em uma mistura de diferentes grãos depositados em um recipiente submetido a vibrações, os maiores vão para o topo enquanto os menores para o fundo, e isso acontece mesmo se as partículas maiores forem mais densas (veja a Figura 2.7). O nome sugestivo vem do fato que em pacotes contendo diferentes cereais, as castanhas do Pará (que são os maiores grãos) sempre ficam por cima. Este termo surgiu em 1987 quando Rosato *et al.* (1987) publicaram um artigo cujo título trazia a seguinte questão: “*Why the brazil nuts are on top?*”

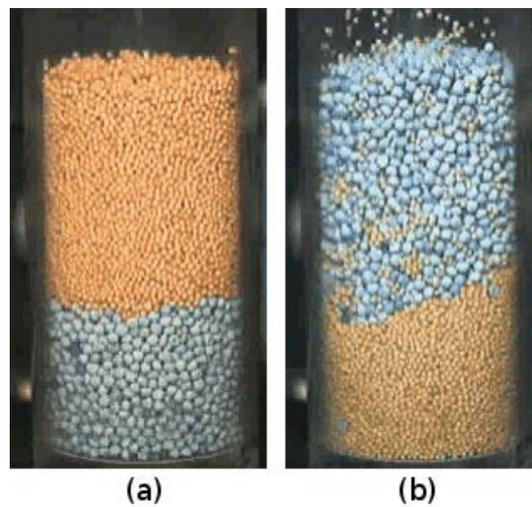


FIGURA 2.7 - Efeito Castanha do Pará. Inicialmente os maiores grãos estão por baixo (a), e após vibrações verticais os maiores grãos vão para o topo (b).

FONTE: Vandu *et al.* (2005)

De um modo geral, observa-se em sistemas granulares com partículas de diferentes tamanhos, que as maiores e mais densas tendem à superfície (BNE). No entanto, se estas mesmas partículas grandes forem mais leves, elas vão para o fundo do recipiente. Este efeito reverso é conhecido como RBNE, *Reverse Brazil Nut Effect* (SHINBROT, 2004). Shinbrot e Muzzio (1998) observaram este comportamento em experimentos com finos grãos depositados em um recipiente formando uma camada profunda sujeita a altas amplitudes de vibração. Os autores acreditam que a inércia faz com que as partículas grandes e mais pesadas sigam para o topo, permitindo que as partículas menores se infiltrem por baixo delas beneficiando a subida. Já o movimento das partículas grandes e mais leves, por contraste, é de flutuação desordenada o que impede a infiltração das partículas menores e conseqüentemente as

maiores não tendem ao topo (SHINBROT; MUZZIO, 1998).

Um dos mais interessantes fenômenos em materiais granulares é justamente a segregação por tamanho induzida por vibrações. Muitos estudos teóricos, experimentos físicos e computacionais vêm sendo realizados nos últimos anos neste sentido (CIAMARRA *et al.*, 2006; SUN *et al.*, 2006; JAEGER *et al.*, 2006; SHINBROT, 2004; HUERTA; RUIZ-SUÁREZ, 2004; BURTALLY *et al.*, 2002; HONG *et al.*, 2001; SHINBROT; MUZZIO, 1998; PÖSCHEL; HERRMANN, 1995; KNIGHT *et al.*, 1993; DURAN *et al.*, 1993; ROSATO *et al.*, 1987). No entanto, este fenômeno ainda não é completamente entendido. Cabe ressaltar que progressos têm sido alcançados. Estudos mostram a influência de parâmetros como tamanho, atrito e densidade das partículas, além da frequência e da amplitude de vibração.

Através de simulações de Dinâmica Molecular, Ciamarra *et al.* (2006) estudaram para duas espécies de partículas (grandes e pequenas) a influência da razão entre os diâmetros (D_g/D_p), da razão entre densidades (ρ_g/ρ_p) e a influência da intensidade de vibração (Γ) no fenômeno da segregação. Os autores construíram um “diagrama de segregação” dependente desses parâmetros ($\rho_g/\rho_p, D_g/D_p, \Gamma$) e definiram a linha de cruzamento entre o BNE e o RBNE, ou seja, eles determinaram em quais situações as partículas grandes tendem ao topo ou ao fundo do recipiente. As conclusões mostram que o BNE ocorre sempre que a razão entre os diâmetros é grande. O RBNE é favorecido quando a razão entre as densidades aumenta. Já a linha que define o cruzamento entre as regiões em que ocorre o BNE ou o RBNE, depende da intensidade de vibração.

Sun *et al.* (2006) estudaram a dinâmica de subida de uma única partícula grande em meio a diversas partículas pequenas em torno de vibrações verticais. Eles mostraram, através de simulações computacionais, uma forte sensibilidade da dinâmica de subida da partícula grande em relação ao atrito na parede, ou seja, na ausência deste atrito a partícula grande não tende ao topo.

Existem diferentes explicações para o mecanismo por trás desse fenômeno, entre eles tem-se percolação, convecção, empuxo, inércia, efeitos de arcos, e mais recentemente, influência do ar. O mecanismo da percolação sugere que as partículas menores se infiltram nos pequenos espaços vazios que são criados em baixo da partícula grande quando o recipiente é submetido a vibrações. Dessa forma, a partícula grande se apoia nas menores e tende ao topo (ROSATO *et al.*, 1987). Esse mecanismo pode

contar com a ajuda de repetidos eventos de arqueação, onde as partículas grandes são apoiadas por arcos de pequenas partículas (DURAN *et al.*, 1993). Um trabalho experimental estudou a influência da resistência do ar na segregação de uma mistura binária de finas esferas de bronze e vidro de mesmo tamanho, mas de densidades diferentes. Os autores observaram que a segregação é reduzida se o ar for removido do sistema (BURTALLY *et al.*, 2002).

Outro importante mecanismo é a convecção (KNIGHT *et al.*, 1993), onde os grãos maiores entram no fluxo de convecção ascendente que se dá na região central do recipiente, permanecendo nele até atingirem a superfície. Uma vez no topo, as partículas grandes, devido ao tamanho, não podem seguir os grãos menores no fluxo de convecção descendente que ocorre em uma estreita região ao longo das paredes. Knight *et al.* (1993) acreditam que a ausência de um comportamento convectivo nas simulações de Rosato *et al.* (1987) se deve ao uso de condições de fronteiras periódicas. A Figura 2.8 ilustra este mecanismo. Em (a) tem-se a configuração inicial; (b) o sistema após uma ou duas vibrações; (c) após mais vibrações, ambas as partículas grandes e pequenas que estão no centro do cilindro seguem para cima no rolo de convecção ascendente e as partículas pequenas, que desceram pelas laterais, atingem o fundo e movem-se para o interior iniciando novamente o movimento de subida.

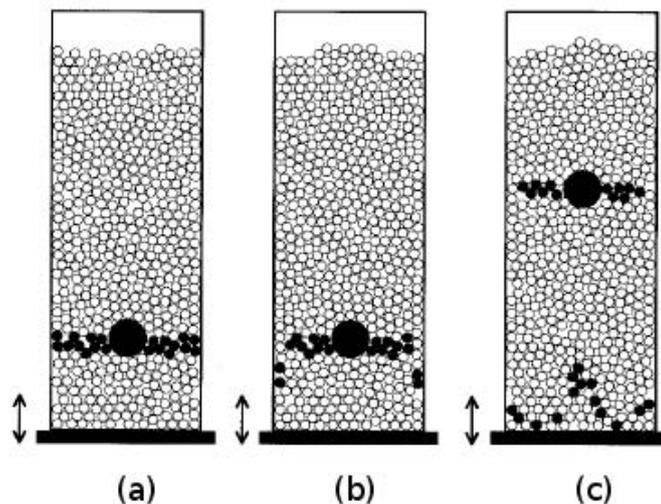


FIGURA 2.8 - Diagrama esquemático do ciclo de convecção em um sistema composto por uma única partícula grande em meio a inúmeras partículas pequenas.

FONTE: Knight *et al.* (1993)

Huerta e Ruiz-Suárez (2004) afirmaram recentemente que existem apenas três mecanismos físicos por trás da segregação de uma partícula grande ou pequena, mais ou menos densa, em sistemas vibrados verticalmente, são eles: inércia, convecção e empuxo (*buoyancy*). Eles mostraram também que existem dois regimes distintos de segregação, um para altas e outro para baixas frequências de vibração. A inércia e a convecção estão sempre presentes para $\Gamma > 1$ e baixas frequências. É a relação entre as densidades que determina o mecanismo de subida das partículas grandes, isto é, a inércia é dominante se a densidade da partícula grande é alta ($\rho_r > 1$, onde ρ_r é a razão entre as densidades das partículas grandes e pequenas), mas quando a densidade é baixa ($\rho_r < 1$) o que predomina é a convecção. Já para altas frequências e pequenas amplitudes, o mecanismo que impera é empuxo.

O outro tipo de segregação mencionado anteriormente, a segregação por cisalhamento, é freqüentemente observada em recipientes cilíndricos preenchidos parcialmente com uma mistura de diferentes grãos e rotacionados em torno de seu eixo. Em geral, observa-se dois tipos de separação: segregação axial e segregação radial.

Na segregação radial, as partículas menores ou mais densas migram em direção ao centro do cilindro após poucas rotações, veja a Figura 2.9. Para baixas velocidades de rotação, a percolação domina. Assim, as menores partículas seguem para os níveis inferiores da camada e para o interior, formando um aglomerado de pequenas partículas no centro do recipiente. No entanto, para altas velocidades de rotação, acontece o contrário, com as maiores partículas no centro e as menores na periferia do cilindro (OTTINO; KHAKHAR, 2002).

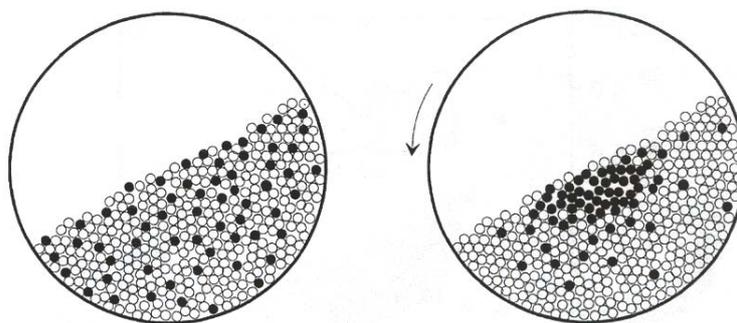


FIGURA 2.9 - Segregação radial.
FONTE: Duran (2000)

Já a segregação axial ocorre em recipientes cilíndricos horizontais preenchidos parcialmente com partículas dissimilares (diferentes no tamanho ou densidade), onde observa-se uma separação dessas partículas em faixas que se alternam ao longo do cilindro. Uma explicação para este tipo de segregação está nas diferenças entre os ângulos de repouso dos dois materiais, o que pode produzir pequenas diferenças no fluxo de cada tipo de partícula. As faixas surgem após inúmeras rotações executadas em altas velocidades (OTTINO; KHAKHAR, 2002).

A primeira observação tridimensional de segregação em materiais granulares foi a segregação axial descrita por Oyama em 1939 (DURAN, 2000). O experimento de Oyama consiste na mistura binária de partículas do mesmo tipo, mas de diferentes tamanhos e cores depositadas em um recipiente cilíndrico rotacionado em torno de seu eixo horizontal. Oyama observou que as partículas grandes e pequenas se separam em faixas verticais ao longo do cilindro (veja a Figura 2.10 para uma ilustração deste experimento).

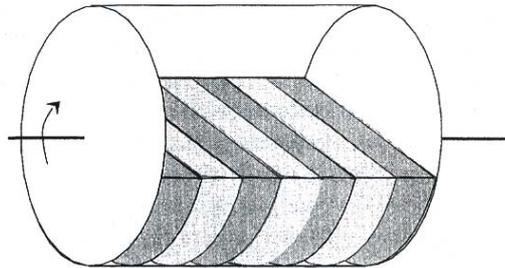


FIGURA 2.10 - Experimento de Oyama: segregação axial.
FONTE: Duran (2000)

Misturas de diferentes grãos também podem se separar na ausência de forças externas. É o que acontece, por exemplo, na *estratificação granular* que ocorre quando uma mistura binária de partículas com diferentes tamanhos e propriedades físicas é depositada lentamente entre duas placas verticais como mostra a Figura 2.11 (MAKSE *et al.*, 1997; MAKSE, 1997).

Porém, para a estratificação ocorrer os grãos maiores devem ser mais ásperos que os menores. Se os grãos maiores são mais lisos não ocorre estratificação e sim segregação

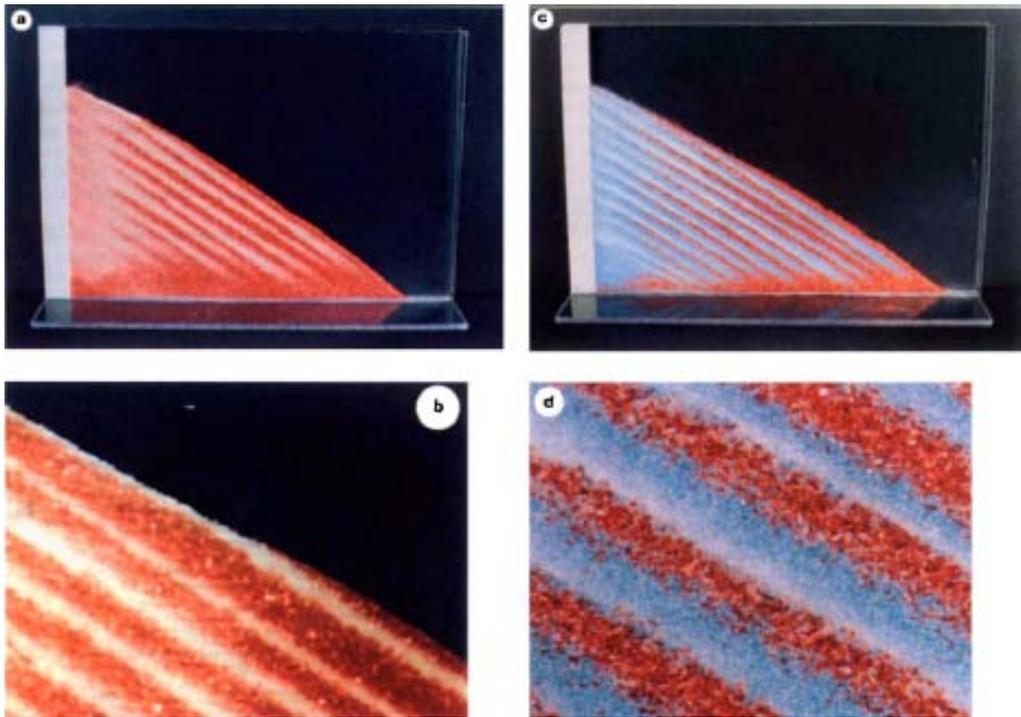


FIGURA 2.11 - Estratificação Granular. Em (a) e (b) temos sucessivas camadas de uma mistura granular composta por pequenas esferas de vidro com diâmetro médio igual a 0.27mm (branco) e cristais de açúcar com diâmetro médio de 0.8mm (vermelho). Em (c) e (d) a estratificação ocorre para uma mistura de três diferentes tipos de grãos: esferas de vidro em branco (diâmetro 0.15mm e ângulo de repouso 26°), areia em azul (diâmetro 0.4mm e ângulo de repouso 35°) e cristais de açúcar em vermelho (diâmetro 0.8mm e ângulo de repouso 39°).

FONTE: [Makse et al. \(1997\)](#)

da mistura em diferentes regiões. Dois efeitos competem entre si, de um lado se os grãos tem a mesma forma (esférica, por exemplo) os maiores rolarão mais facilmente, o que conduz a segregação com os maiores em baixo e os menores por cima; por outro lado, se os grãos têm o mesmo tamanho mas são diferentes na rugosidade, os mais ásperos terão um coeficiente de fricção maior e a segregação se dará com os grãos mais ásperos no topo. Assim, para o caso dos maiores grãos serem mais ásperos, esses dois efeitos competirão dando origem a uma instabilidade que resulta na estratificação granular.

A seguir, apresentamos em linhas gerais o fenômeno da formação de padrões.

2.3.2 Formação de Padrões

Recentemente, [Aranson e Tsimring \(2006\)](#) definiram o fenômeno da formação de padrões como um processo dinâmico que leva ao surgimento espontâneo de uma estrutura espacial não-uniforme, a qual é fracamente dependente das condições iniciais e de fronteira.

Padrões podem surgir durante a dinâmica de diferentes sistemas, como em uma fina camada de grãos sujeito a vibrações, em fluxos conduzidos pela gravidade ou em cilindros submetidos a rotações. A separação de grãos, em alguns casos, produz interessantes padrões como os observados na estratificação granular e na segregação axial de misturas binárias de diferentes tamanhos em longos cilindros rotacionados.

Experimentos com finas camadas de materiais granulares sujeitas a vibrações verticais podem exibir padrões como tiras, quadrados e hexágonos, além de estruturas localizadas como *oscillons*, dependendo dos parâmetros de vibração, frequência f e amplitude A , e da profundidade da camada H :

$$H = \frac{P(\pi/6)(D^3/L^2)}{\phi}, \quad (2.18)$$

onde P é o número de partículas, D é o diâmetro, L é o lado do recipiente e ϕ é a fração de empacotamento (*packing fraction*) ([BIZON et al., 1998](#)). Os parâmetros de vibração, em geral, são dados em função da frequência adimensional f^* , e da aceleração adimensional Γ :

$$f^* = f \sqrt{\frac{H}{g}}, \quad (2.19)$$

$$\Gamma = \frac{4\pi^2 f^2 A}{g}, \quad (2.20)$$

onde g é a aceleração da gravidade ([BIZON et al., 1998](#)).

A Figura 2.12 ilustra um *oscillon* isolado e as Figuras 2.13, 2.14 e 2.15, ilustram padrões obtidos em experimentos. A Figura 2.13 mostra padrões tiras e quadrados para partículas de vidro de diâmetro 0.2 mm, depositadas em um recipiente cilíndrico formando uma camada com profundidade igual a 1.75 mm.

Na Figura 2.14 os padrões se formam a partir de vibrações verticais com frequência



FIGURA 2.12 - *Oscillon* localizado.
FONTE: Aranson e Tsimring (2006)

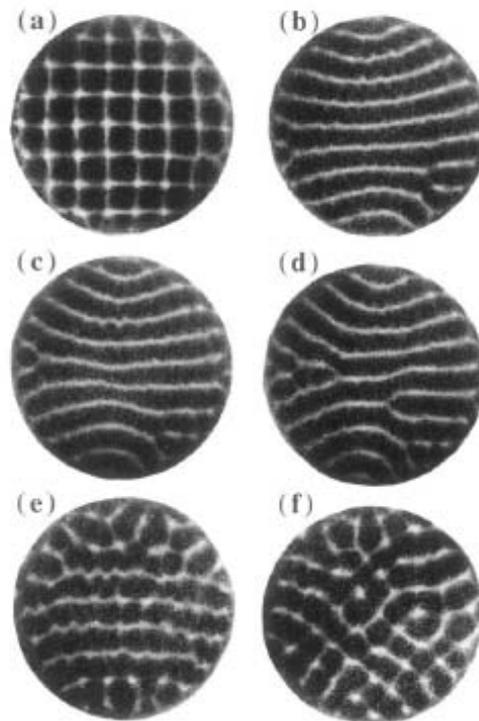


FIGURA 2.13 - Padrões: (a) quadrados ($f = 23.2Hz$, $\Gamma = 3.5$); (b)-(d) tiras com alguns desvios ($f = 27.6Hz$, $\Gamma = 4.23$); (e) e (f) desordem próxima da transição entre quadrados e tiras ($f = 25.1Hz$, $\Gamma = 4.3$).
FONTE: Melo *et al.* (1994)

$f = 67Hz$ em uma camada granular de profundidade 1.2 mm , aproximadamente, composta por esferas de bronze de diâmetro $0.15 - 0.18\text{ mm}$. E na Figura 2.15 são observados quadrados e tiras para experimentos realizados com esferas de bronze de diâmetro 0.17 mm , formando uma camada com profundidade igual a 0.68 mm .

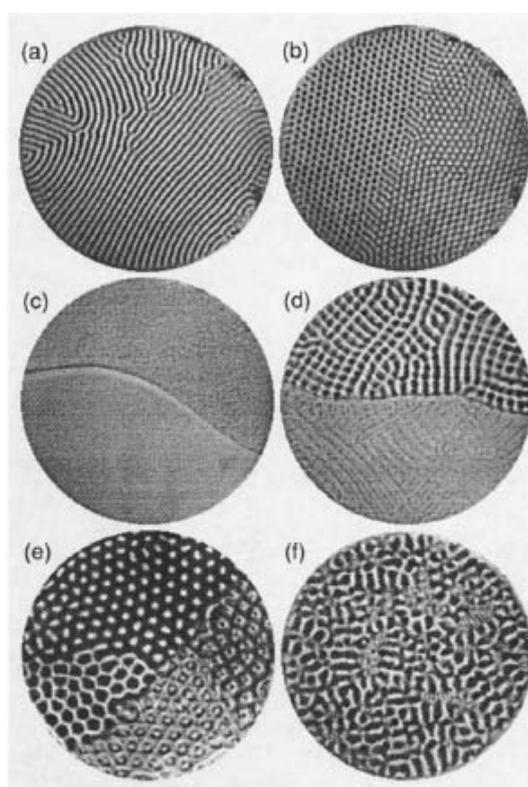


FIGURA 2.14 - Padrões: (a) tiras ($f/2$, $\Gamma = 3.3$); (b) hexágonos ($f/2$, $\Gamma = 4.0$); (c) superfície lisa com uma curva ($\Gamma = 5.8$); (d) competição entre quadrados e tiras ($f/4$, $\Gamma = 6.0$); (e) hexágonos ($f/4$, $\Gamma = 7.4$) e (f) desordem ($\Gamma = 8.5$).
 FONTE: [Melo et al. \(1995\)](#)

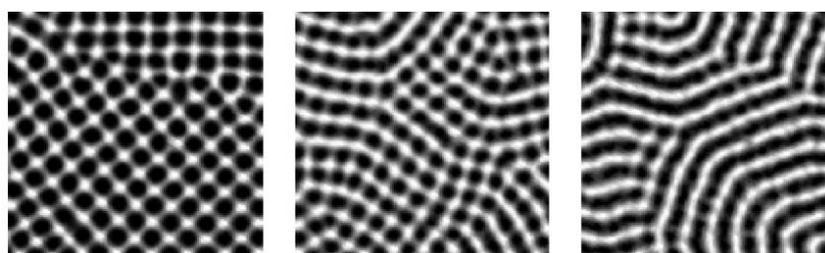


FIGURA 2.15 - Padrões (a) quadrados ($f = 33Hz$), (b) quadrados e tiras ($f = 37Hz$), (c) tiras ($f = 43Hz$) com $\Gamma = 2.5$.
 FONTE: [Umbanhowar e Swinney \(2000\)](#)

Simulações numéricas desses sistemas foram mostradas pela primeira vez por [Aoki et al. \(1996\)](#). [Bizon et al. \(1998\)](#) também reproduziram padrões através de simulações computacionais, conforme ilustra a Figura 2.16. Eles utilizaram simulações de Evento Dirigido e compararam resultados experimentais com resultados numéricos, preservando para os dois casos parâmetros como o mesmo número de partículas, frequência, amplitude, tamanho e forma do recipiente.

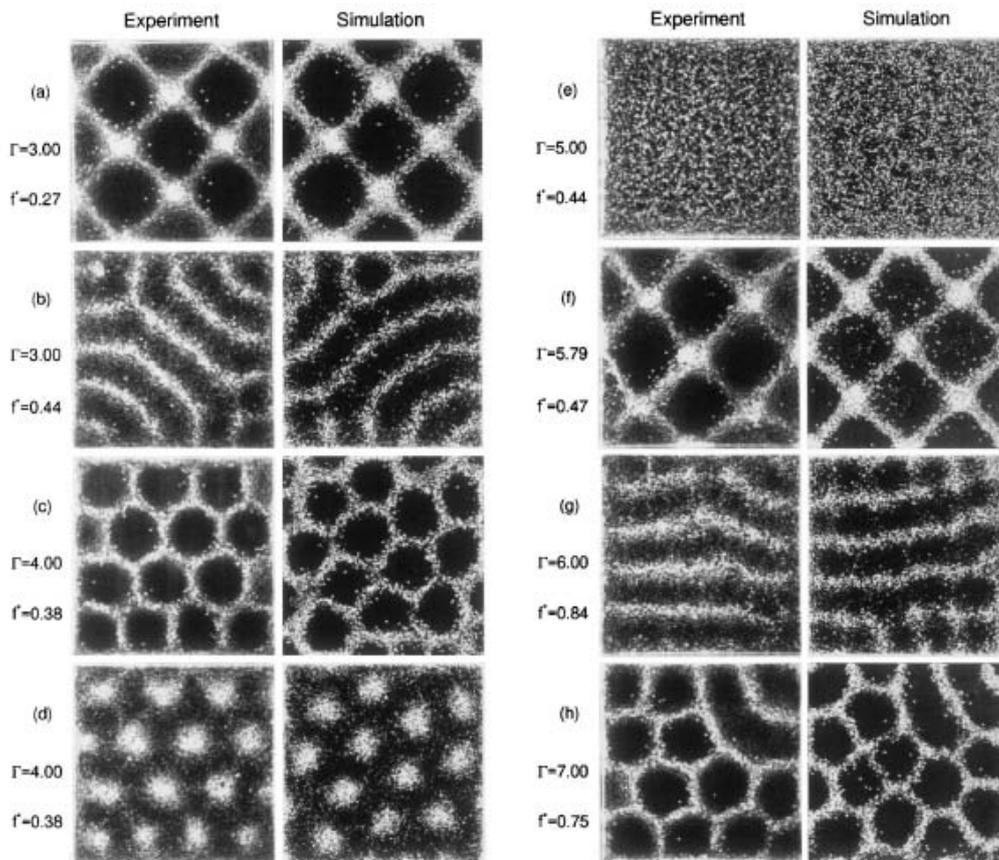


FIGURA 2.16 - Comparação entre experimento e simulação: (a) quadrados, (b) tiras, (c)-(d) alternando fases de hexágonos, (e) superfície lisa, (f) quadrados, (g) tiras e (h) hexágonos.
 FONTE: [Bizon et al. \(1998\)](#)

Sistemas granulares conduzidos pela gravidade são comuns em processos naturais como migração de dunas, erosão, deposição e desmoronamento. Fluxos de material granular em planos inclinados são exemplos desses sistemas e podem exibir várias instabilidades resultando na formação de padrões como a *formação de meandros (fingering)* (Figura 2.17), *vórtices longitudinais* (Figura 2.18), *longas superfícies de onda* (Figura 2.19), *estratificação* (Figura 2.11), entre outros.

Formação de meandros é uma instabilidade que ocorre quando o material granular se propaga em um plano rugoso e inclinado. O material que inicialmente é uniforme, rapidamente se quebra em vários “dedos” (fingers) (POULIQUEN *et al.*, 1997).

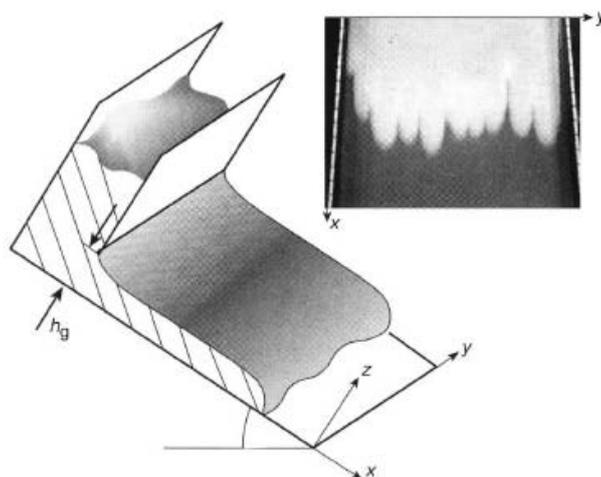


FIGURA 2.17 - Formação de meandros.
 FONTE: Pouliquen *et al.* (1997)

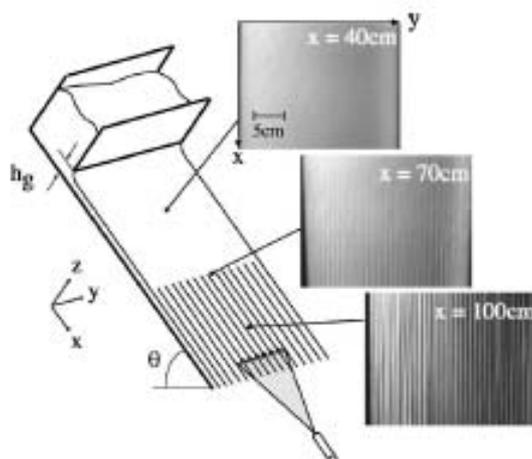


FIGURA 2.18 - Surgimento de vórtices longitudinais de um rápido fluxo granular em plano inclinado. Três ampliações são selecionadas e em três localizações diferentes: início, meio e final da rampa.
 FONTE: Aranson e Tsimring (2006)

Rotacionar um recipiente cilíndrico preenchido com uma mistura de diferentes grãos,



FIGURA 2.19 - Longas superfícies de ondas observadas em rápido fluxo de areia sobre um plano inclinado e rugoso.

FONTE: [Aranson e Tsimring \(2006\)](#)

muitas vezes, leva a segregação dos mesmos. Em alguns casos, esta separação pode formar padrões como os observados na segregação axial, onde faixas são formadas ao longo do eixo horizontal do cilindro, como mostra a Figura 2.20.

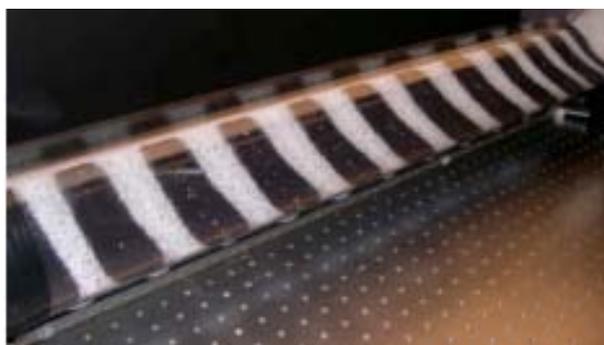


FIGURA 2.20 - Faixas indicando a separação de uma mistura binária (grandes esferas de vidro pretas e pequenas esferas brancas) em um longo cilindro rotacionado.

FONTE: [Aranson e Tsimring \(2006\)](#)

Neste trabalho simulamos numericamente a dinâmica de uma fina camada granular submetida a vibrações verticais com o objetivo de verificar a eventual formação de padrões como os observados nas Figuras 2.13, 2.14, 2.15 e 2.16. Simulamos também o “Efeito Castanha do Pará” para investigar o fenômeno da segregação de uma

única partícula grande em meio a diversas partículas pequenas. Essas simulações se encontram detalhadas nos capítulos que se seguem.

CAPÍTULO 3

SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Neste capítulo são feitas considerações sobre as vantagens e desvantagens de simulações computacionais, aspectos gerais do método de Dinâmica Molecular, amplamente utilizado em simulações de sistemas granulares, além de um relato sobre a busca de uma ferramenta computacional conveniente. Por fim, descrevemos a ferramenta escolhida: o software LAMMPS.

3.1 Introdução

A simulação computacional de sistemas consiste na utilização de determinadas técnicas matemáticas, empregadas em computadores digitais, as quais permitem reproduzir o funcionamento de, praticamente, qualquer tipo de operação ou processo do mundo real. Na década de 70 pensava-se que “*simulação implica na modelagem de um processo ou sistema, de tal forma que o modelo imite as respostas do sistema real numa sucessão de eventos que ocorrem ao longo do tempo*”. Nesta definição não fica explícito que o modelo deva ser computacional, isso porque naquela época era comum utilizar modelos analógicos e físicos para se estudar e analisar o comportamento de sistemas. Já na década de 90 tem-se que “*simulação é o processo de projetar um modelo computacional de um sistema real e conduzir experimentos com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua solução*”. Note que simulações computacionais começaram a ser entendidas como um processo mais amplo, compreendendo não somente a construção do modelo, mas também todo o método de experimentação aplicado a ele, buscando descrever o comportamento do sistema, construir teorias e hipóteses a partir de observações e fazer uso do próprio modelo para prever comportamentos futuros. Dessa forma, simulações têm sido cada vez mais aceitas e empregadas devido, principalmente, a atual facilidade de uso e sofisticação dos ambientes de desenvolvimento de modelos computacionais, aliadas ao crescente poder de processamento, além de contar com o uso de ferramentas que podem, por exemplo, “animar” os sistemas simulados (FILHO, 2001).

Atualmente, simulações computacionais são consideradas uma ferramenta importante e fundamental no estudo de sistemas granulares. O avanço dos computadores impulsionou o interesse nesta área nas últimas décadas. Isso porque a realização de

determinados experimentos físicos é dispendiosa, consome tempo e em alguns casos pode ser perigosa. A ausência de uma teoria capaz de prever de forma geral o comportamento desses sistemas também contribui neste sentido (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005).

Além disso, simulações apresentam inúmeras vantagens, como o armazenamento de informações sobre cada elemento em todos os instantes de tempo; a realização de diferentes configurações de sistemas através de pequenas modificações; a manipulação e a exploração dos efeitos de diversos parâmetros como, por exemplo, o coeficiente de restituição e o coeficiente de atrito. Note que, simulações possibilitam a análise de situações que são dificilmente reproduzidas em experimentos, como a ausência de atrito entre partículas. Em compensação, as desvantagens muitas vezes podem ser proibitivas. A principal delas é o custo computacional requerido. Enquanto experimentos podem ser observados em laboratórios durante um tempo indeterminado, em simulações este tempo se reduz a segundos. Outro aspecto diz respeito as simplificações que os sistemas simulados numericamente sofrem a fim de reduzir e facilitar os cálculos levando a soluções pobres e, até mesmo, pouco confiáveis.

O principal desafio de simulações numéricas é incorporar na sua formulação as propriedades físicas básicas que descrevem as interações e características relevantes do sistema, de forma que sejam tão aproximadas quanto possível do sistema real. Diversas simplificações são feitas para reduzir as dificuldades de modelagem. Em sistemas granulares, a primeira simplificação que podemos pensar é em relação a forma das partículas, que na maioria dos modelos é considerada esférica. Quanto ao tipo de colisão, duas aproximações muito utilizadas são: esferas duras (*hard-spheres*) e esferas macias (*soft-spheres*). No contexto de simulações numéricas, a palavra “dura” não implica necessariamente em colisões perfeitamente elásticas, mas significa que não existem interpenetrações ou deformações durante o impacto - o contato entre duas partículas se dá apenas em um único ponto. Para o caso de esferas duras, o tempo de contato é considerado infinitamente pequeno. Já para esferas macias, os contatos são persistentes e ocorrem em um tempo finito (DURAN, 2000).

Existem muitas técnicas e algoritmos destinados à simulação de sistemas granulares. Dentre os métodos discretos mais conhecidos, tem-se simulações de Dinâmica Molecular (DM) e Evento Dirigido (ED) (*Event-Driven Molecular Dynamics*).

ED é um tipo de simulação de Dinâmica Molecular numericamente mais eficiente

quando se trata de sistemas de partículas duras (*hard-spheres*), cuja dinâmica é determinada principalmente por colisões (eventos) instantâneas (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005). É aplicado em fluxos granulares rápidos e inadequado para sistemas com contatos persistentes e colisões freqüentes como, por exemplo, pilha de areia ou escoamento em funil. A introdução desse método no campo de gases granulares permitiu a simulação computacional de sistemas de muitas partículas, da ordem de 10^6 (GOLDHIRSCH, 2003).

Simulações DM foram desenvolvidas inicialmente para sistemas de gases moleculares e líquidos simples (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005). Neste método, as partículas são consideradas macias, ou seja, admitem interpenetrações. Essa característica permite que DM modele de forma eficiente sistemas com contatos persistentes e colisões freqüentes (BELL *et al.*, 2005). Uma vez que este trabalho utiliza uma ferramenta computacional que simula sistemas granulares através da técnica de Dinâmica Molecular, é conveniente descrever alguns aspectos gerais desse método numérico.

3.2 Dinâmica Molecular

O uso de simulações de Dinâmica Molecular em sistemas granulares se tornou popular nos últimos anos. A principal idéia do método é simular a dinâmica do sistema através da integração numérica das equações do movimento de Newton para cada partícula i ($i = 1, \dots, N$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j) \\ \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} &= \frac{1}{\hat{J}_i} \tau_i(\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \varphi_j, \omega_j), \quad (j = 1, \dots, N). \end{aligned} \tag{3.1}$$

A força \mathbf{F}_i e o torque τ_i , que atuam sobre a partícula i de massa m_i e momento de inércia \hat{J}_i , são funções das posições das partículas \mathbf{r}_j , orientações angulares φ_j , velocidades \mathbf{v}_j e velocidades angulares ω_j (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005). Existem vários modelos que definem as forças de interação entre partículas, na Seção 2.2 é apresentado o modelo mola-amortecedor que é utilizado pela ferramenta computacional adotada.

A força e o torque resultantes atuando em cada partícula i são dados pela soma das interações entre pares, ou seja, interações da partícula i com as demais partículas

do sistema:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}, \quad (3.2)$$

$$\tau_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \tau_{ij}. \quad (3.3)$$

Assim, o método de Dinâmica Molecular requer apenas uma pré-condição: conhecer o valor das forças e torques atuando entre as partículas em contato. Após esses cálculos, as equações (3.1) são integradas numericamente e a sua solução fornece as trajetórias de todas as partículas do sistema.

A descrição do método fica completa se o comportamento na fronteira, as coordenadas e as velocidades iniciais de cada partícula são especificadas. Um método eficiente que pode ser usado como condição de fronteira consiste em definir as paredes do recipiente também como partículas, chamadas de *partículas da parede*, as quais obedecem as mesmas regras de interações das partículas do sistema granular. As *partículas da parede* podem ser incorporadas na simulação de dinâmica molecular sem a necessidade de definir forças extras, ou seja, às leis de forças aplicadas sobre as partículas móveis também podem ser aplicadas sobre as partículas imóveis das paredes. As forças entre as *partículas da parede* e as demais partículas do sistema afetam apenas o comportamento dessas últimas. Dois tipos de condições de fronteira muito utilizadas são: fronteiras fixas e fronteiras periódicas. Em fronteiras periódicas, qualquer partícula que deixa o sistema em um de seus lados é inserida novamente no lado oposto (PÖSCHEL; SCHWAGER, 2005).

As condições iniciais definem os valores das coordenadas, velocidades, orientações angulares e velocidades angulares para todas as partículas em $t = 0$. Para a resolução das equações do movimento de Newton, um esquema numérico deve ser utilizado, o qual requer condições iniciais também para as derivadas de alta ordem. A desvantagem deste método é o alto custo computacional. Assim simulações DM são restritas a sistemas com número de partículas limitado.

3.3 Ferramentas Computacionais

Com o objetivo de analisar e controlar a dinâmica de fluxos granulares, optamos por utilizar um software que simule esses sistemas, uma vez que estamos ingressando

nesta área e temos interesse em expandir nossos conhecimentos.

Existem inúmeras ferramentas computacionais livres e pagas que contribuem neste sentido. O software PFC2D e PFC3D, *Particle Flow Code in 2 and 3 Dimensions*, é um exemplo de software pago que utiliza o método dos elementos discretos para a análise micromecânica de geomateriais e sistemas particulados em 2 e 3 dimensões, cuja licença chega a custar mais de 20 mil dólares (HCITASCA, 2005).

Com softwares livres, tentativas foram feitas com o YADE, “*Yet Another Dynamic Engine*”, que modela sistemas granulares utilizando o método dos elementos discretos e está disponível em (KOZICKI *et al.*, 2005). Por ser um software criado recentemente, em 2005, ainda está em fase de desenvolvimento. No período em que manipulamos esta ferramenta, a documentação fornecia apenas algumas instruções referentes a sua instalação.

Para este trabalho escolhemos o software LAMMPS, descrito na próxima seção. Além de ser desenvolvido em um importante e conceituado laboratório, o software é livre, referenciado em inúmeros artigos, oferece completa documentação e uma excelente lista de discussões.

3.4 Software LAMMPS

A fim de realizarmos simulações numéricas significativas de sistemas granulares, optamos pelo uso de uma ferramenta numérica eficiente e capaz de reproduzir características desses sistemas. Escolhemos o software LAMMPS – *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* – um código de Dinâmica Molecular clássico capaz de modelar sistemas atômicos, biológicos, poliméricos, metálicos ou granulares através de uma variedade de campos de forças e condições de fronteira, com milhões ou até bilhões de partículas. O LAMMPS integra as equações do movimento de Newton para coleções de átomos, moléculas ou partículas macroscópicas que interagem entre si através de forças de curto ou longo alcance e para várias condições iniciais e de contorno. O software é distribuído por Steve Plimpton do *Sandia National Laboratories* (PLIMPTON *et al.*, 2006).

O LAMMPS é um software livre, distribuído de acordo com os termos da Licença Pública GNU. A versão utilizada neste trabalho é escrita em C++ e está disponível em (PLIMPTON *et al.*, 2006), onde diversas informações como documentação completa, artigos publicados, vídeos, lista de discussão, entre outros, podem ser encontradas.

O software pode ser executado de forma eficiente em um único processador, mas foi projetado para ser executado em paralelo. Neste trabalho, utilizamos apenas um único processador em todas as simulações e cálculos.

O software foi inicialmente desenvolvido em 1990 pelos laboratórios Sandia e LLNL, *Lawrence Livermore National Laboratorie*, ambos pertencentes ao Departamento de Energia dos Estados Unidos, e pelas companhias Cray, Bristol Myers Squibb e Dupont, através de uma pesquisa cooperativa. A primeira versão do código, escrita em F77, foi disponibilizada em 1999. Depois o código foi escrito em F90 e disponibilizado em 2001. A atual versão escrita em C++, que inclui características para a simulação de fluxos granulares, foi oferecida pela primeira vez em 2004. Novos comandos são incorporados e periodicamente versões mais atuais são liberadas.

O LAMMPS é executado através da leitura de comandos a partir de um arquivo de entrada. Assim, este arquivo deve seguir a seguinte estrutura: i) inicialização; ii) definição dos átomos; iii) operações e iv) execução. São mais de 100 comandos disponíveis capazes de:

- definir o tipo de sistema que será simulado (atômico, molecular, granular, polimérico, metálico ou híbrido);
- criar a geometria;
- criar as partículas;
- estabelecer as forças de interação entre as partículas;
- definir as ações que serão aplicadas no conjunto de partículas durante a simulação, como a aplicação de forças externas ou cálculo de diagnósticos;
- definir os integradores numéricos da simulação;
- exibir saídas com diversas informações sobre os elementos do sistema.

Ao executar o arquivo de entrada, se não houver erros, o software imprime na tela informações como a quantidade de memória requerida pela simulação e o estado termodinâmico inicial do sistema. Durante a execução, informações como a energia rotacional e translacional são impressas periodicamente, a cada N passos de tempo.

Para sistemas granulares, o software oferece um código baseado em simulações DM de acordo com as considerações feitas anteriormente. O método utilizado para integrar as equações do movimento de Newton é o algoritmo de Verlet (SILBERT *et al.*, 2001). Para esta “opção granular” uma lista de comandos específicos é oferecida e para cada comando, argumentos devem ser informados como, por exemplo, o coeficiente de atrito entre partículas, constantes elásticas e viscoelásticas.

Nas simulações realizadas, foram utilizados comandos que definem a dimensão (tridimensional), o tipo de “átomo” (granular), as fronteiras (fixas ou periódicas), a geometria (retangular ou cilíndrica), as interações entre pares, as interações com as paredes, além de operações que determinaram a inclusão da força da gravidade, oscilação de uma das paredes do recipiente, e inserção de partículas. O comando que insere os elementos dentro da caixa de simulação requer a informação de argumentos como o número (N), o diâmetro (d), a densidade (ρ) e a fração de volume (ϕ) de cada partícula.

Os argumentos para o comando que define as interações entre pares são: constante elástica e viscoelástica na direção normal (k_n e γ_n , respectivamente), coeficiente de atrito entre partículas (μ_p) e opção (sim ou não) para amortecimento tangencial. Os valores para a constante elástica e viscoelástica na direção tangencial (k_t e γ_t , respectivamente) são definidos a partir dos valores de k_n e γ_n e dados por $k_t = 2/7 k_n$ e $\gamma_t = 1/2 \gamma_n$. Escolhemos o modelo de forças mola-amortecedor linear.

Para o comando que define as interações das partículas com as paredes do recipiente, os argumentos devem informar os valores para a constante viscoelástica na direção normal (γ_n) e o coeficiente de atrito (μ_w), ambos para a parede.

Os diagnósticos obtidos são: as coordenadas nas posições x , y e z , a energia cinética translacional e rotacional, a velocidade, as forças e tensões para cada partícula ou um grupo de partículas, a cada N passos no tempo. Eles são gravados em arquivos de saída e devem ser analisados com outras ferramentas.

Resultados de simulações no LAMMPS para sistemas granulares são encontrados, por exemplo, nos trabalhos de Sun *et al.* (2006), Ciamarra *et al.* (2006), Janssens *et al.* (2006), Cheng *et al.* (2006), Brewster *et al.* (2005), Landry *et al.* (2004), Landry *et al.* (2003), Silbert *et al.* (2002) e Silbert *et al.* (2001). Mais publicações podem ser encontradas em (PLIMPTON *et al.*, 2006).

O LAMMPS não fornece ferramentas para a visualização de suas simulações, mas oferece uma lista de programas auxiliares que podem ser utilizados. Um conjunto de ferramentas indicado é o *Pizza.py Toolkit* que está disponível em (PLIMPTON, 2005). O *Pizza.py* é uma coleção de ferramentas escritas em Python, as quais possuem capacidade de pré e pós-processamento para o LAMMPS. As ferramentas podem criar arquivos de entrada, converter os dados em vários formatos, processar os arquivos de saída liberados pelo software, criar gráficos, visualizar e animar instantes das simulações (PLIMPTON, 2005). O usuário pode criar novas funcionalidades ou combinar as ferramentas da maneira que lhe for mais agradável. Justamente dessa característica que surgiu o nome *Pizza.py*, pois como em uma “pizza” as diversas opções de recheio também podem ser combinadas de diferentes maneiras.

CAPÍTULO 4

SISTEMAS ANALISADOS

Neste capítulo descrevemos as duas configurações de sistemas analisados. Utilizamos o pacote granular do LAMMPS com o objetivo de realizar simulações tridimensionais de sistemas de partículas granulares. As simulações, de um modo geral, mostram a dinâmica de um conjunto de N partículas esféricas e monodispersas de diâmetro d e massa m , inseridas em um recipiente retangular submetido a vibrações verticais.

A solução numérica, obtida das simulações, é dada em quantidades adimensionais para valores de distância, tempo, velocidade, força, constantes elásticas e tensões que são, respectivamente, medidos em unidades de d , $t_0 = \sqrt{d/g}$, $v_0 = \sqrt{gd}$, $F_0 = mg$, $k_0 = mg/d$ e $\sigma_0 = mg/d^2$ (SILBERT *et al.*, 2001).

Considerando esferas de vidro de diâmetro $100\mu m$, a constante elástica apropriada para simulações é da ordem de 10^{10} , o que requer um passo de integração muito pequeno, impossibilitando o estudo numérico (SILBERT *et al.*, 2001). Trabalhos que utilizam o pacote granular do LAMMPS como, por exemplo, Sun *et al.* (2006), Ciamarra *et al.* (2006), Cheng *et al.* (2006) e Silbert *et al.* (2001), definem $k_n = 2 \times 10^5$, com um passo de integração da ordem de 10^{-4} . Para esses valores, o tempo computacional requerido é muito alto, mesmo quando se executa em um *cluster* a versão do código em paralelo. Utilizamos $k_n = 2 \times 10^3$ com um passo de integração igual a 2×10^{-3} , que são valores encontrados nos exemplos de simulações para o pacote granular oferecido pelo software e que requerem um custo computacional menor, embora continue grande, uma vez que as simulações foram realizadas em um único processador.

A Tabela 4.1 exhibe os parâmetros computacionais básicos utilizados nas simulações das duas configurações de sistema. Os parâmetros específicos para cada um desses sistemas como, por exemplo, o número de partículas, o diâmetro de cada uma delas, entre outros, serão definidos mais adiante.

Conforme descrito na Seção 3.4, são parâmetros de entrada: constante elástica normal (k_n), constante viscoelástica normal (γ_n), coeficiente de atrito entre partículas (μ_p) e coeficiente de atrito nas paredes (μ_w). As constantes elásticas e viscoelásticas na direção tangencial (k_t e γ_t , respectivamente), tanto para interações entre partículas quanto para interações das partículas com a parede, são definidas em função

TABELA 4.1 - Conjunto básico dos parâmetros computacionais

Parâmetros	Valores Adimensionais
Coeficiente de atrito nas paredes (μ_w)	0.5
Coeficiente de atrito entre partículas (μ_p)	0.5
Constante elástica normal (k_n)	$2 \times 10^3 k_0$
Constante viscoelástica normal (γ_n)	$40/t_0$
Passo de integração (δt)	1×10^{-3}

dos valores das respectivas constantes na direção normal, ou seja, $k_t = (2/7)k_n$ e $\gamma_t = (1/2)\gamma_n$ (SILBERT *et al.*, 2001). Para interações entre partículas, existe ainda uma opção (sim ou não) para incluir o amortecimento tangencial. Para esta opção, a escolha tomada foi “não”, assim, $\gamma_t = 0$ para interações entre partículas. Esses parâmetros foram retirados do trabalho de Silbert *et al.* (2001), com exceção de k_n e δt .

A primeira parte da simulação consiste na inserção das partículas dentro do recipiente e em seguida elas são submetidas a vibrações verticais. Essas vibrações consistem na oscilação da base do recipiente de acordo com a equação:

$$z(t) = z_0 + A - A \cos(2\pi ft), \quad (4.1)$$

onde z_0 é a posição inicial, A é a amplitude, f é a frequência, e t é o tempo transcorrido (PLIMPTON *et al.*, 2006).

Ao final da simulação, as posições x , y e z de cada partícula são fornecidas, além de outros diagnósticos como velocidades e forças. Assim, dada a trajetória dos grãos é possível visualizar os instantes da simulação e animá-los com o uso de ferramentas do Pizza.py.

4.1 Sistema 1: Efeito Castanha do Pará

Para o que denominamos de Sistema 1 (S1), consideramos um sistema composto por 8000 partículas pequenas de diâmetro d e uma única partícula grande de diâmetro D , totalizando $N = 8001$ partículas depositadas em um recipiente retangular com base de lado $L = 12d$ (veja a Figura 4.1).

Estamos interessados em reproduzir e estudar o “Efeito Castanha do Pará”, ou seja, analisar os mecanismos que fazem a partícula grande segregar em meio as demais.

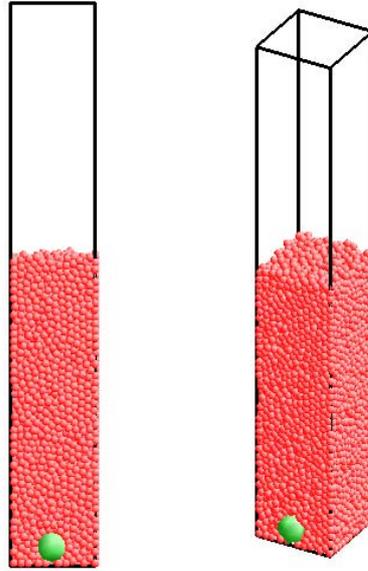


FIGURA 4.1 - Sistema 1 (S1): 8000 partículas pequenas e uma única partícula grande.

Para isso, investigamos a influência de parâmetros como o tamanho das partículas, o atrito nas paredes, o atrito entre partículas, a amplitude e a frequência de vibração. A Tabela 4.2 fornece mais informações sobre os parâmetros definidos nas simulações do S1.

TABELA 4.2 - Parâmetros Computacionais para S1

Parâmetros	Part. Pequenas	Part. Grande
Número (N)	8000	1
Diâmetro	$d = 0.5$	$D = \alpha d$
Densidade (ρ)	$1m/d^3$	$3m/d^3$
Fração de empacotamento (ϕ)	0.07	0.21
Frequência de vibração (f)	$0.125/t_0$	
Amplitude de vibração (A)	$5d$	

Cabe ressaltar que várias simulações foram realizadas com o intuito de definir um conjunto básico de parâmetros, principalmente os valores para a frequência e amplitude. Após os testes, julgamos conveniente os resultados obtidos para $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$.

Para todas as simulações definimos fronteiras fixas com a característica reflexiva. No trabalho de [Ciamarra et al. \(2006\)](#), cujas simulações são realizadas com o pacote

granular do LAMMPS, foram utilizadas fronteiras periódicas com o objetivo de evitar a convecção.

Na Tabela 4.2, note que o diâmetro da partícula grande aparece como $D = \alpha d$, isso porque utilizamos três valores diferentes para α : 0.75, 1.50 e 2.0, que fornecem as razões D/d : 1.5, 3.0 e 4.0, respectivamente. Os valores definidos para μ_p , μ_w , f e A na Tabela 4.2 são valores básicos, utilizados na maioria das nossas simulações, mas para alguns casos eles também sofrem alterações. Todas as análises sobre as diferentes simulações são descritas no próximo capítulo.

4.2 Sistema 2: Formação de Padrões

O segundo sistema de interesse, denominado S2, consiste em um sistema composto por $N = 30000$ partículas esféricas e monodispersas de diâmetro d , depositadas em um recipiente quadrado de lado $L = 100d$ formando uma fina camada de partículas submetidas a vibrações verticais (veja a Figura 4.2). Os demais parâmetros estão definidos na Tabela 4.3 a seguir.

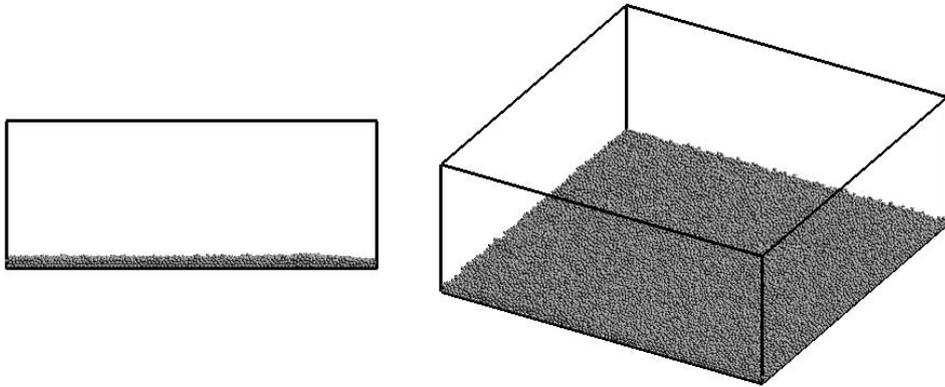


FIGURA 4.2 - Sistema 2 (S2): 30000 partículas.

Estamos interessados em obter padrões como os observados nos trabalhos de Umbanhowar e Swinney (2000), Bizon *et al.* (1998), Melo *et al.* (1994) e Melo *et al.* (1995) apresentados na Seção 2.3.2. Nas simulações deste sistema, os parâmetros fundamentais que devem ser modificados são os parâmetros de vibração: a frequência f e a amplitude A . Utilizamos diferentes valores para f e A , por isso eles estão definidos como * e ** na Tabela 4.3. Além deles, para alguns casos, variamos o co-

TABELA 4.3 - Parâmetros Computacionais para S2

Parâmetros	Valores Adimensionais
Número (N)	30000
Diâmetro (d)	1.0
Densidade (ρ)	$1m/d^3$
Fração de empacotamento (ϕ)	0.58
Frequência de vibração (f)	*
Amplitude de vibração (A)	**

eficiente de atrito e também a geometria do sistema, de retangular para cilíndrica, com o objetivo de investigar a influência da geometria do contorno na dinâmica do sistema.

O processamento do código para as simulações do S1 apresentaram em média um custo computacional de 5 horas. Já as simulações do S2 levaram 4 horas, aproximadamente. Vale dizer que para os parâmetros $k_n = 2 \times 10^5$ e $\delta t = 10^{-4}$, o tempo computacional gasto em uma das simulações do S1, levando em consideração o mesmo número de ciclos, foi de aproximadamente 18 horas. Os cálculos foram realizados em um único processador Athlon 64 4000+, com 1GB de memória RAM e operando em Linux. As visualizações tridimensionais e animações das trajetórias das partículas também consumiram tempo computacional. Todos os resultados e demais análises são apresentadas no próximo capítulo.

CAPÍTULO 5

ANÁLISES E RESULTADOS

A influência de parâmetros sobre o fenômeno da segregação, mais precisamente, para o caso em que uma única partícula grande segrega em meio a diversas partículas pequenas (Efeito Castanha do Pará) é investigado. Estudamos também a formação de padrões em finas camadas de grãos submetidas a vibrações verticais.

5.1 Sistema 1

Conforme descrito na Seção 4.1, o S1 é composto por $N = 8000$ partículas de diâmetro d e uma única partícula grande de diâmetro D , depositadas em um recipiente retangular formando uma coluna de profundidade $H = 40d$, aproximadamente (veja a Figura 5.1). Note que a partícula grande é depositada próxima ao centro do recipiente.

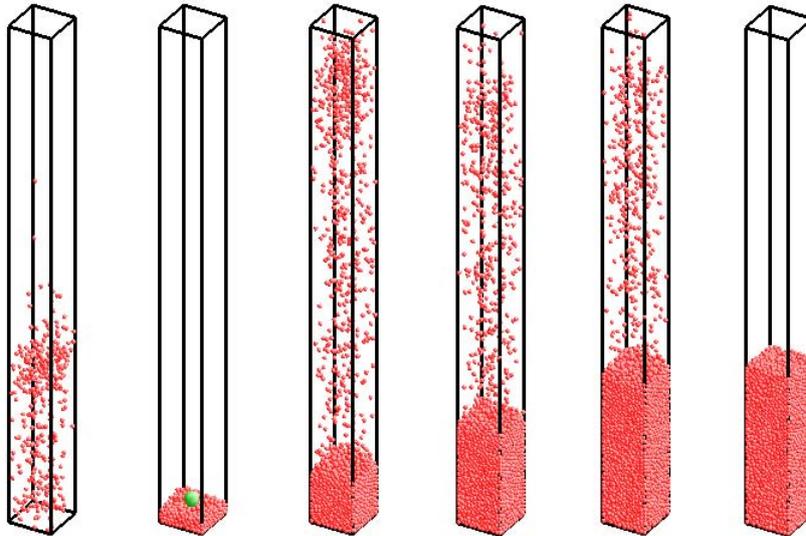


FIGURA 5.1 - Primeira parte da simulação do S1: inserção de partículas dentro do recipiente retangular.

Com o objetivo de verificar a influência de parâmetros sobre o fenômeno da segregação (veja a Figura 5.2), apresentamos, a seguir, resultados para diversas simulações levando em consideração o tamanho da partícula grande em relação às pequenas (razão D/d), o atrito nas paredes do recipiente, o atrito entre as partículas, a frequência e a amplitude de vibração. Os gráficos são apresentados em função dos ciclos das si-

mulações, onde cada ciclo corresponde ao período que a parede inferior do recipiente leva para executar uma oscilação completa.

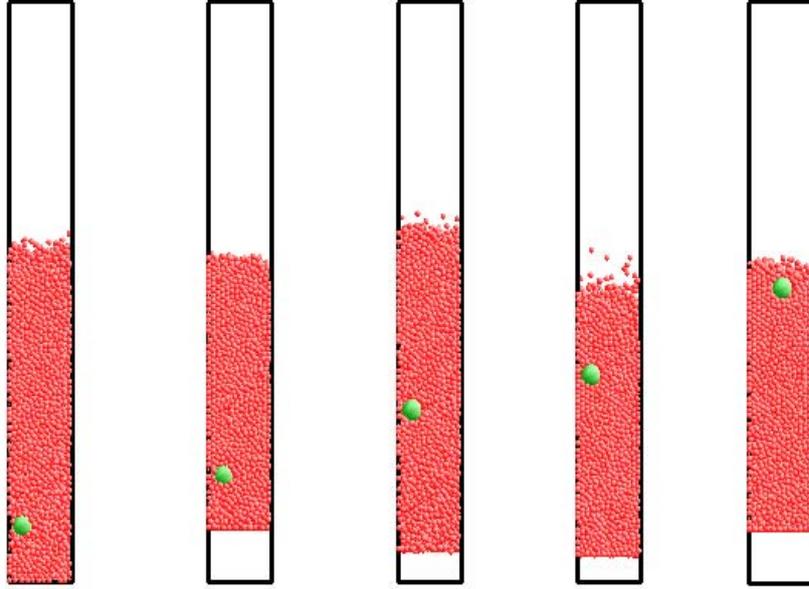


FIGURA 5.2 - Efeito Castanha do Pará: partícula grande tende à superfície e segrega em meio as demais.

5.1.1 Tamanho

Investigamos a influência do tamanho da partícula grande através de variações da relação D/d . Os demais parâmetros computacionais para estas simulações estão definidos nas Tabelas 4.1 e 4.2. Reiterando, para estas simulações fixamos: $\mu_w = 0.5$ (coeficiente de atrito nas paredes), $\mu_p = 0.5$ (coeficiente de atrito entre partículas), $f = 0.125/t_0$ (frequência) e $A = 5d$ (amplitude).

Utilizamos três valores diferentes para D : 0.75, 1.5 e 2.0, que fornecem as razões D/d : 1.5, 3.0 e 4.0, respectivamente. Assim, para o menor valor de D/d , ou seja, $D/d = 1.5$ ($D = 0.75$ e $d = 0.5$), a partícula grande inicia seu movimento próximo ao fundo do recipiente e atinge a superfície em poucos ciclos. No entanto, conforme ilustra a Figura 5.3, a partícula grande não consegue se manter no topo, caindo em seguida em direção ao fundo e tornando novamente a subir. A repetição deste movimento oscilatório de subida e descida é conhecido na literatura como *efeito baleia* (PÖSCHEL; HERRMANN, 1995).

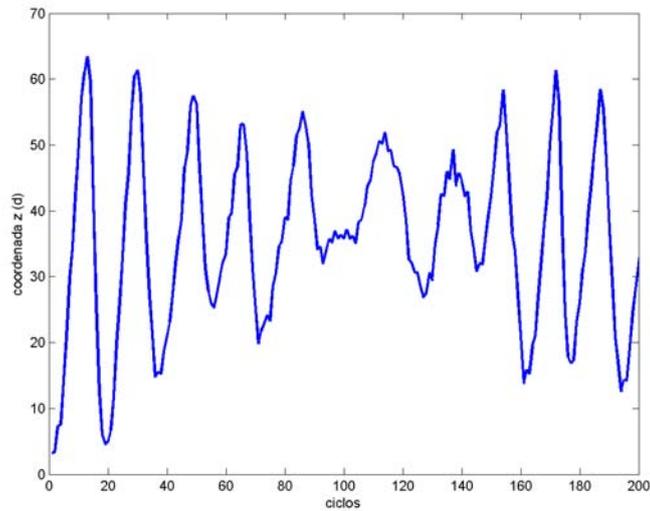


FIGURA 5.3 - Comportamento da partícula grande para $D/d = 1.5$. Os demais parâmetros computacionais são: $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$.

Para $D/d = 3.0$ ($D = 1.5$ e $d = 0.5$), a partícula grande também atinge a superfície em poucos ciclos e apresenta movimento oscilatório, porém este é menos regular que o observado anteriormente, como mostra a Figura 5.4.

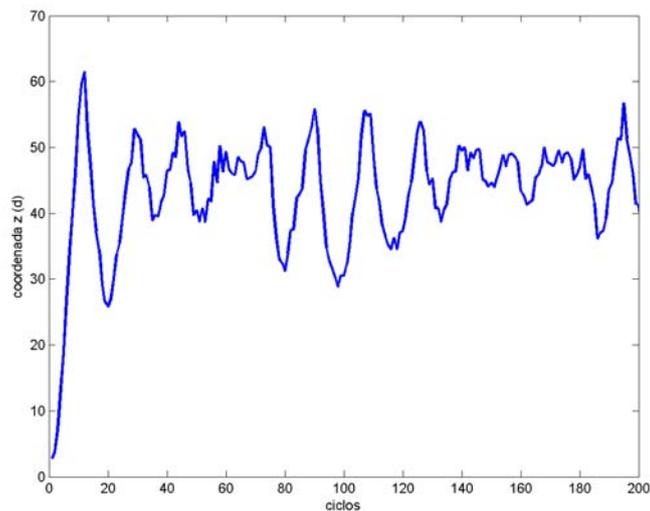


FIGURA 5.4 - Comportamento da partícula grande para $D/d = 3.0$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

Já para uma relação D/d maior, $D/d = 4.0$ ($D = 2.0$ e $d = 0.5$), a partícula grande tende ao topo e permanece na superfície ao longo dos ciclos, como ilustra a Figura 5.5. A Figura 5.6 compara o comportamento da partícula grande para os três valores distintos de D/d .

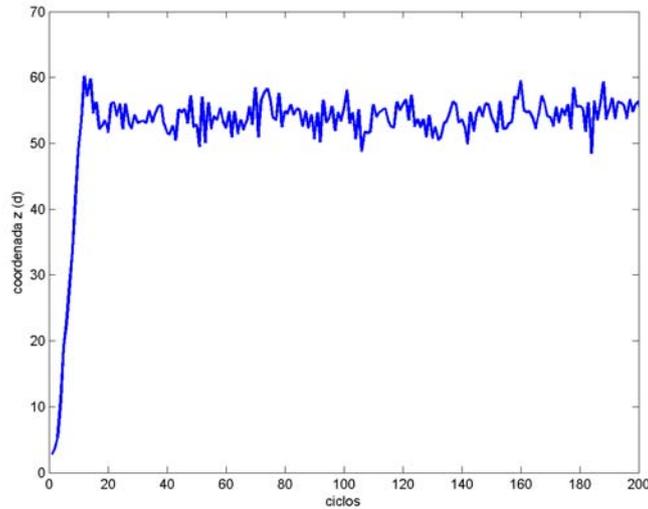


FIGURA 5.5 - Comportamento da partícula grande para $D/d = 4.0$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

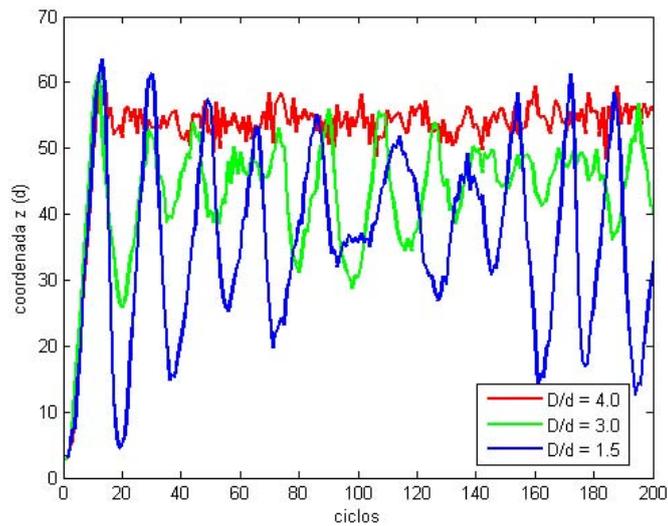


FIGURA 5.6 - Comportamento da partícula grande para $D/d : 4.0, 3.0$ e 1.5 ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

A Figura 5.7 ilustra a trajetória da partícula grande para os três casos simulados. Os pontos em vermelho indicam a posição inicial de cada partícula. Observe um movimento circular que se atenua à medida que o tamanho da partícula grande aumenta.

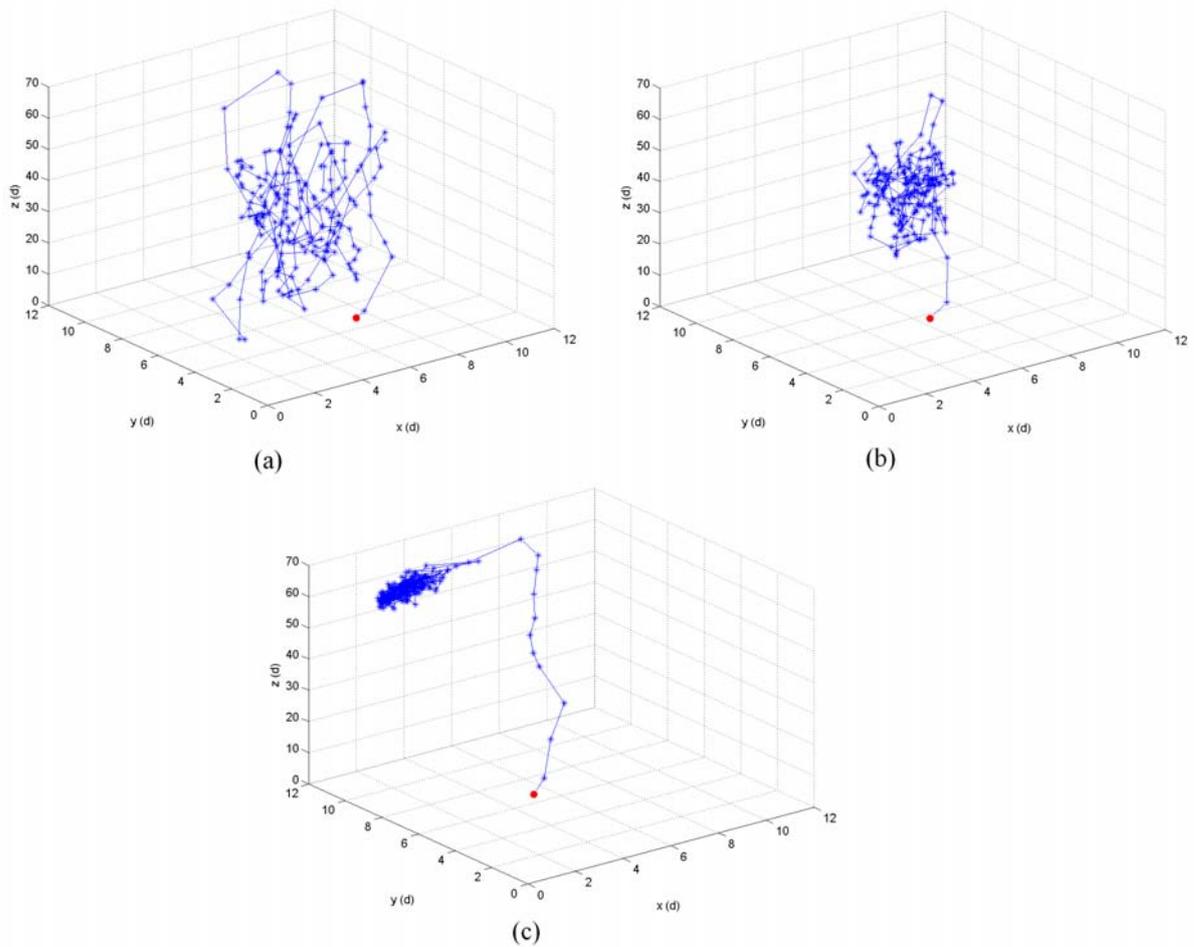


FIGURA 5.7 - Trajetória da partícula grande para (a) $D/d = 1.5$, (b) $D/d = 3.0$ e (c) $D/d = 4.0$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

A partir desses resultados, verificamos, em nossas simulações, que o movimento de ascensão da partícula grande, como evidenciado na Figura 5.2, é o resultado da combinação de mecanismos como convecção e empuxo. O empuxo depende, entre outros fatores, do tamanho relativo da partícula grande, enquanto a convecção está mais associada a dinâmica de agitação e a geometria do recipiente. Assim, para valores de D/d relativamente modestos, (veja a Figura 5.3), a partícula grande inicia

seu movimento próximo ao fundo e atinge a superfície em poucos ciclos, resultado da presença de uma célula convectiva bem desenvolvida dentro do recipiente. No entanto, devido ao fraco empuxo, a partícula grande não consegue se manter no topo, caindo em seguida em direção ao fundo e tornando novamente a subir. Para a maior relação D/d , a partícula grande, devido ao forte empuxo, não é capturada pelo movimento giratório empreendido pelas partículas menores na célula de convecção. Assim, ao chegar ao topo, ela permanece na superfície ao longo dos ciclos.

O desenvolvimento de uma estrutura coerente do tipo célula de convecção é melhor evidenciado por meio de projeções nos planos xz e yz . Observe na Figura 5.8 um movimento circular, ilustrado através da projeção no plano xz , da trajetória da partícula grande com $D/d = 1.5$, quando esta, devido ao seu fraco empuxo, é plenamente capturada pelo escoamento das partículas menores. Para a sua projeção no plano xy (vista superior) como ilustra a Figura 5.9, note que a célula de convecção se forma na direção de uma das diagonais, ocupando a maior distância possível dentro do recipiente.

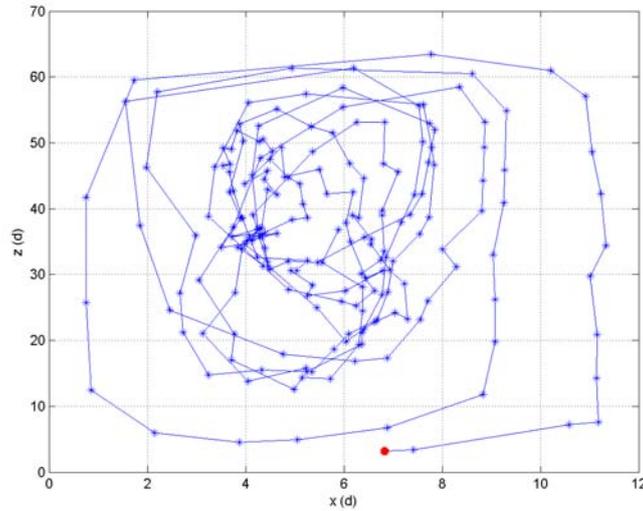


FIGURA 5.8 - Trajetória da partícula grande no plano xz para $D/d = 1.5$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

Finalmente, nas Figuras 5.10 a 5.11, ilustramos a formação da célula de convecção do ponto de vista de duas partículas pequenas, uma tendo sua posição inicial próxima ao fundo do recipiente e outra junto à superfície. Observamos nessas figuras

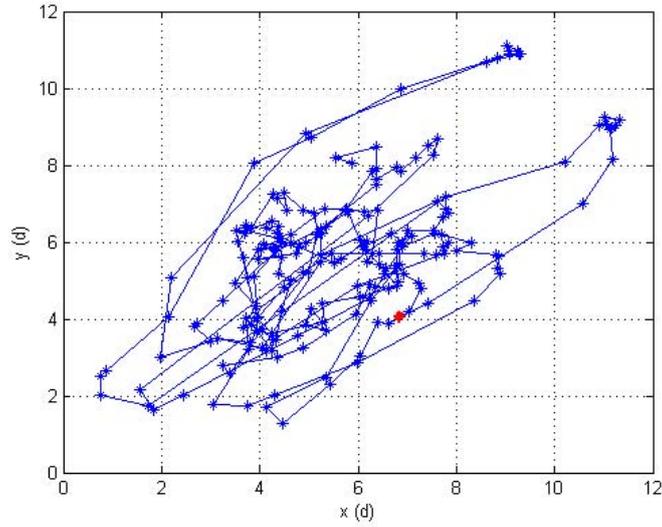


FIGURA 5.9 - Trajetória da partícula grande no plano xy (vista superior) para $D/d = 1.5$ ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$). Note que a partícula se desloca sobre uma das diagonais do recipiente.

que, enquanto a partícula grande sobe e permanece na superfície, pois $D/d = 4.0$, as partículas pequenas apresentam um movimento oscilatório alternando subidas e descidas durante os ciclos. Analisando a trajetória dessas duas partículas pequenas a partir de suas projeções nos planos xz e yz (veja as Figuras 5.12 e 5.13) observamos que elas realizam o movimento circular característico de uma célula de convecção.

5.1.2 Atrito

Outro fator relevante para a ocorrência do fenômeno de segregação em fluidos granulares é a existência ou não de atrito na parede ou entre as partículas. Para os resultados das simulações apresentados a seguir, utilizamos a razão $D/d = 4.0$ e os parâmetros computacionais definidos nas Tabelas 4.1 e 4.2. Novamente, para estas simulações fixamos: $f = 0.125/t_0$ (frequência) e $A = 5d$ (amplitude). Já os valores estabelecidos para os coeficientes de atrito entre partículas (μ_p) e o atrito nas paredes do recipiente (μ_w) sofrem alterações, mas estão indicados no texto.

5.1.2.1 Atrito na Parede

Para avaliar a influência do coeficiente de atrito na parede, fixamos o atrito entre partículas em $\mu_p = 0.50$ e ajustamos o atrito na parede μ_w para os seguintes valores: 0.00, 0.30, 0.40 e 0.50. A Figura 5.14 mostra que para $\mu_w = 0.0$, ou seja, na ausência

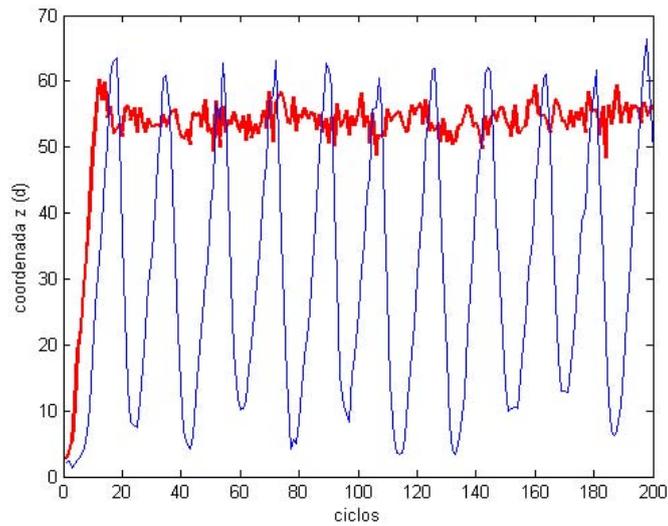


FIGURA 5.10 - Comportamento da partícula grande para $D/d = 4.0$ (em vermelho) e de uma partícula pequena (em azul) com posição inicial próxima ao fundo do recipiente ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

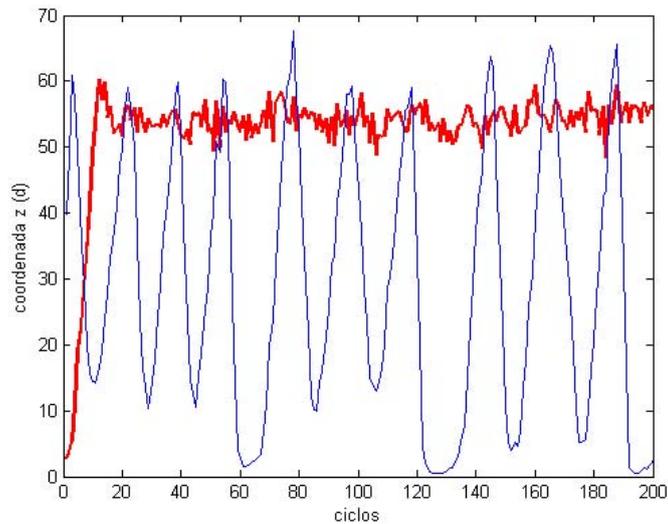


FIGURA 5.11 - Comportamento da partícula grande para $D/d = 4.0$ (em vermelho) e de uma partícula pequena (em azul) com posição inicial próxima a superfície ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

de atrito nas paredes, a partícula grande não sobe para a superfície. Ela oscila pouco e permanece no fundo ao longo dos ciclos. Este comportamento fica ainda mais evidente na Figura 5.15, onde comparamos a posição vertical da partícula grande

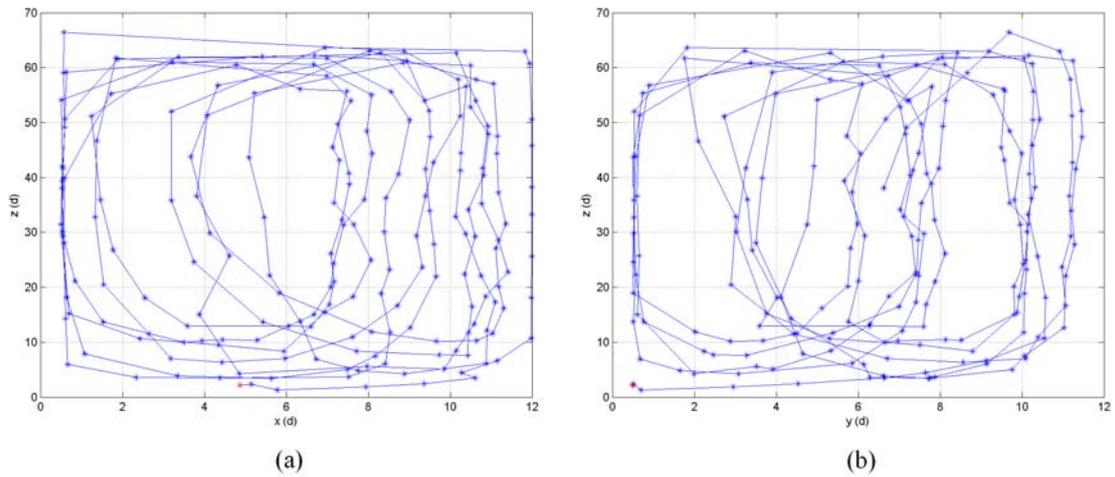


FIGURA 5.12 - Projeções no plano (a) xz e (b) yz para a partícula pequena partindo de baixo ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

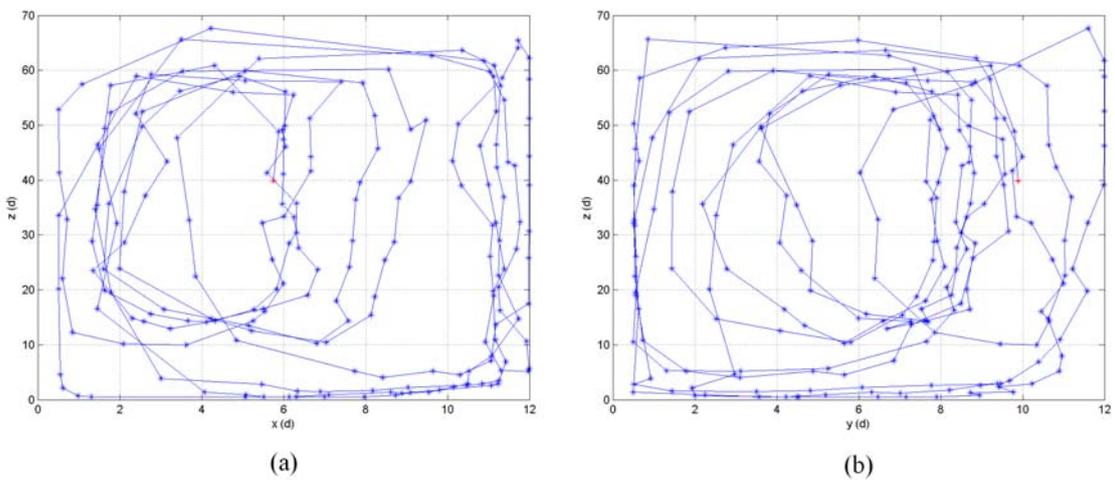


FIGURA 5.13 - Projeções no plano (a) xz e (b) yz para a partícula pequena partindo de cima ($\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

para $\mu_w = 0.00$ e $\mu_w = 0.50$.

Se analisarmos o comportamento de duas partículas pequenas, uma com posição inicial próxima ao fundo e outra próxima ao topo, para a simulação com $\mu_w = 0.0$, verificaremos que as partículas não realizam movimento convectivo (veja a Figura 5.16). Algumas apresentam pequenas flutuações, como a partícula pequena que parte de baixo, e outras grandes, como a partícula que parte de cima, mas nenhuma realiza

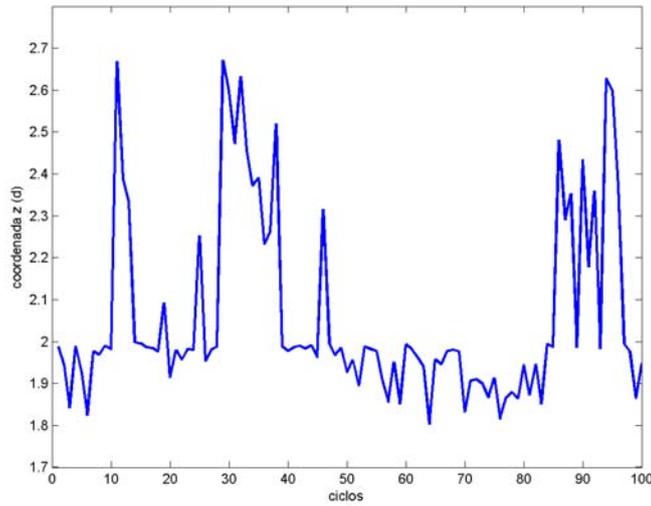


FIGURA 5.14 - Comportamento da partícula grande para $\mu_w = 0.5$ ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

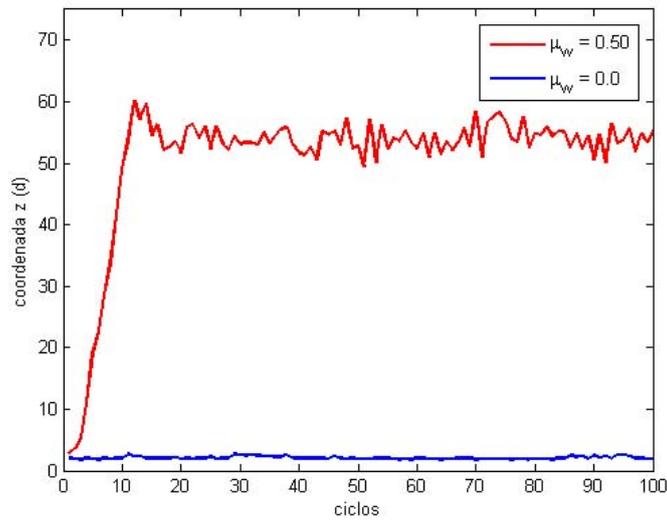


FIGURA 5.15 - Comportamento da partícula grande para $\mu_w = 0.5$ e $\mu_w = 0.0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

um movimento oscilatório regular alternando subidas e descidas, o que caracteriza a presença de uma célula de convecção no escoamento. Assim, verificamos que o coeficiente de atrito nas paredes é determinante para a ocorrência da segregação e para a formação da célula convectiva.

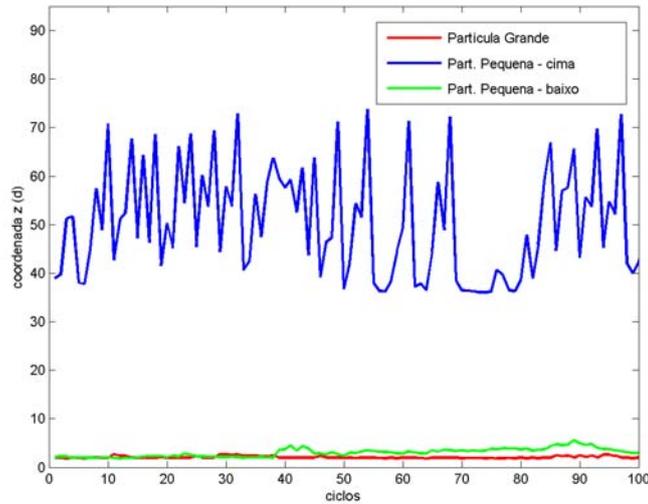


FIGURA 5.16 - Comportamento da partícula grande e duas partículas pequenas na ausência de atrito nas paredes ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

Deste resultado observamos que a dinâmica do sistema é sensível ao atrito nas paredes, corroborando com os resultados apresentados por Sun *et al.* (2006). Portanto, diminuímos o valor deste parâmetro para analisar esta sensibilidade. Utilizamos $\mu_w = 0.30$ e $\mu_w = 0.40$ (veja a Figura 5.17) e nos dois casos a partícula grande tende ao topo, porém o tempo de subida depende do atrito. Quanto maior o atrito na parede menor é o tempo de subida da partícula grande.

Com o objetivo de calcular este tempo de subida, levamos em consideração algumas definições de resposta transitória muito utilizadas em sistemas dinâmicos. São elas: *instante do pico* (t_p), *sobre-sinal* (M_p) e *tempo de subida* (t_s). O instante do pico é o tempo necessário para a resposta alcançar o primeiro pico do sobre-sinal; sobre-sinal é o máximo valor de pico da curva, e tempo de subida é o tempo necessário para a resposta passar de 10% a 90%, 5% a 95%, ou 0% a 100% do seu valor final (OGATA, 1993). A Figura 5.18 ilustra estas especificações para a trajetória da partícula grande, com $\mu_w = 0.5$. A Tabela 5.1 exhibe os valores de t_p , M_p , t_s e velocidade de subida v_s da partícula grande para os diferentes coeficientes de atrito na parede. A velocidade de subida foi calculada através do deslocamento da partícula grande (coordenada z) e do tempo de subida de 10% a 90%.

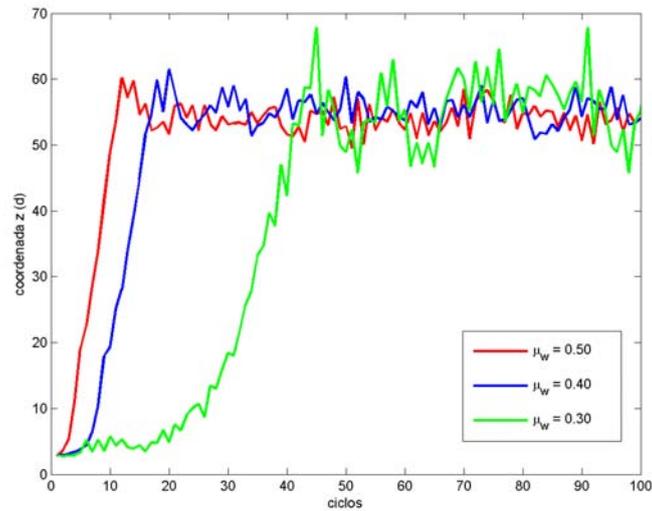


FIGURA 5.17 - Comportamento da partícula grande para $\mu_w = 0.5$, $\mu_w = 0.4$ e $\mu_w = 0.3$ ($D/d = 4.0$, $\mu_p = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

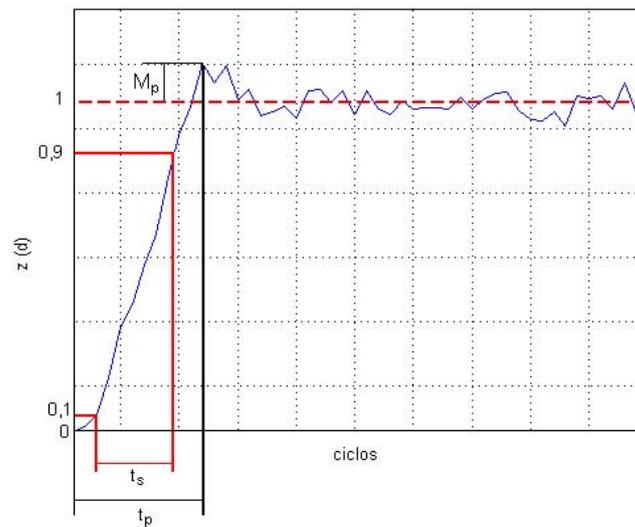


FIGURA 5.18 - Definição das grandezas de caracterização de resposta transiente: tempo de subida (t_s), sobre-sinal (M_p) e tempo de pico (t_p). Consideramos aqui, a evolução da coordenada z da partícula grande com $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $D/d = 4.0$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$.

5.1.2.2 Atrito entre Partículas

Analizamos separadamente a influência do atrito entre as partículas. Para isso, fixamos o atrito na parede em $\mu_w = 0.50$ e variamos o coeficiente de atrito entre partículas μ_p em 0.00, 0.30, 0.40, 0.50 e 0.60, veja a Figura 5.19. Observamos que a

TABELA 5.1 - Tempo de pico (t_p), sobre-sinal (M_p), tempo de subida (t_s) e velocidade de subida (v_s) para diferentes coeficientes de atrito na parede

Coeficiente de Atrito (μ_w)	t_p (ciclos)	M_p (d)	t_s (ciclos)	v_s (d/ciclos)
0.50	11	6.11	6.78	6.06
0.40	19	10.65	8.54	4.50
0.30	44	11.75	22.22	1.92

dinâmica do sistema não sofre grandes mudanças com μ_p , pois o tempo de subida da partícula grande é muito próximo para todos os casos, com uma notável exceção: quando o atrito na parede é nulo ($\mu_p = 0$), a partícula grande não consegue subir. Na Tabela 5.2, recalculamos os valores de t_p , M_p , t_s e v_s , para diferentes valores de $\mu_p > 0$.

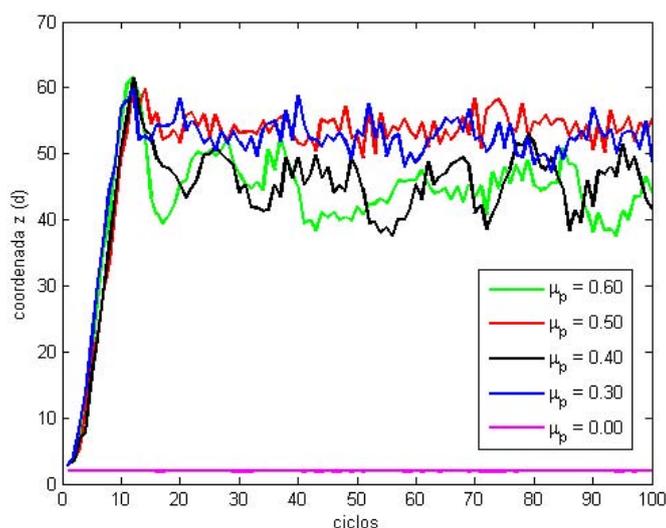


FIGURA 5.19 - Comportamento da partícula grande para μ_p : 0.00, 0.30, 0.40, 0.50 e 0.60 ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$).

TABELA 5.2 - Tempo de pico (t_p), sobre-sinal (M_p), tempo de subida (t_s) e velocidade de subida (v_s) para diferentes coeficientes de atrito entre partículas

Coeficiente de Atrito (μ_p)	t_p (ciclos)	M_p (d)	t_s (ciclos)	v_s (d/ciclos)
0.60	11	15	5.78	6.30
0.50	11	6.11	6.78	6.06
0.40	11	16.25	6.06	5.60
0.30	11	7.23	6	6.68

5.1.3 Freqüência e Amplitude

Os parâmetros de vibração são de extrema importância, pois somente através de forças externas o sistema é energizado e entra em movimento. Os valores de frequência e amplitude utilizados em nossos experimentos numéricos foram definidos após várias simulações do S1. Ao final, escolhemos $f = 0.125/t_0$ e $A = 5d$, como sendo de uma situação típica. A partir desta especificação, perturbamos estes valores para cima e para baixo com o objetivo de investigar diferentes regimes de vibração. Para estas simulações, em que variamos apenas os parâmetros de vibração, utilizamos $\mu_w = \mu_p = 0.50$ e a razão $D/d = 4.0$. Os demais parâmetros computacionais estão definidos nas Tabelas 4.1 e 4.2.

5.1.3.1 Amplitude

Inicialmente, fixamos a frequência em $f = 0.125/t_0$ e variamos a amplitude em $A : 3d, 5d$ e $8d$. É importante observar que o volume total de partículas forma uma camada de altura $40d$, aproximadamente, e a cada ciclo todas as partículas são impulsionadas para cima através do movimento da parede inferior, que oscila de acordo com a Equação 4.1 apresentada no Capítulo 4. Assim, a parede realiza um ciclo completo quando parte da posição inicial, sobe até uma determinada altura e retorna à posição inicial. A Figura 5.20 mostra o movimento da parede inferior do recipiente durante um ciclo, para uma dada frequência ($f = 0.125/t_0$) e diferentes amplitudes ($3d, 5d$ e $8d$). Note que, dependendo do valor da amplitude a parede atinge uma determinada altura. Assim, a “altura máxima” atingida pelo conjunto de partículas depende da frequência e principalmente da amplitude de vibração. A Figura 5.21 mostra o comportamento da partícula grande para as diferentes amplitudes.

Observe para $A = 3d$ na Figura 5.21, que a partícula grande leva mais ciclos para atingir o topo. Como a amplitude é menor, a altura máxima atingida é de aproximadamente $40d$, a altura de repouso. A Figura 5.22 mostra o comportamento da partícula grande e de outras partículas pequenas, umas com posições iniciais próximas ao fundo e outras próximas à superfície, para $A = 3d$. As Figuras 5.23 e 5.24 ilustram as projeções nos planos xz e yz da partícula grande e de uma partícula pequena partindo de baixo, respectivamente.

Observe na Figura 5.22, que as partículas pequenas não exibem movimento oscilatório como as partículas pequenas para $A = 5d$. Observe também, nas Figuras 5.23

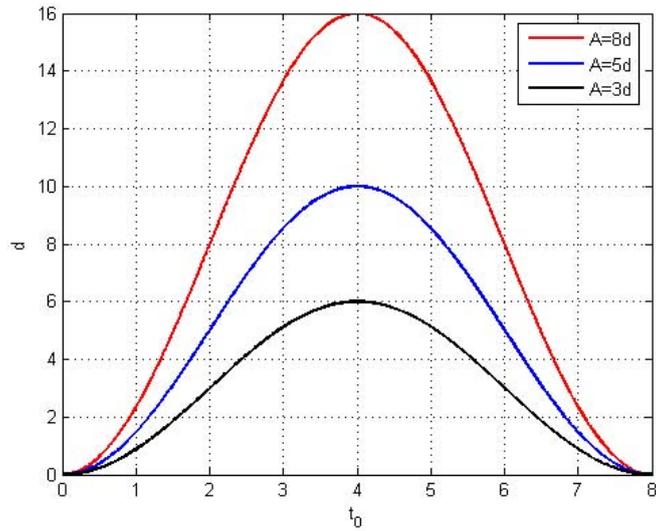


FIGURA 5.20 - Movimento de oscilação da parede inferior do recipiente para $f = 0.125/t_0$ e amplitudes $3d$, $5d$ e $8d$.

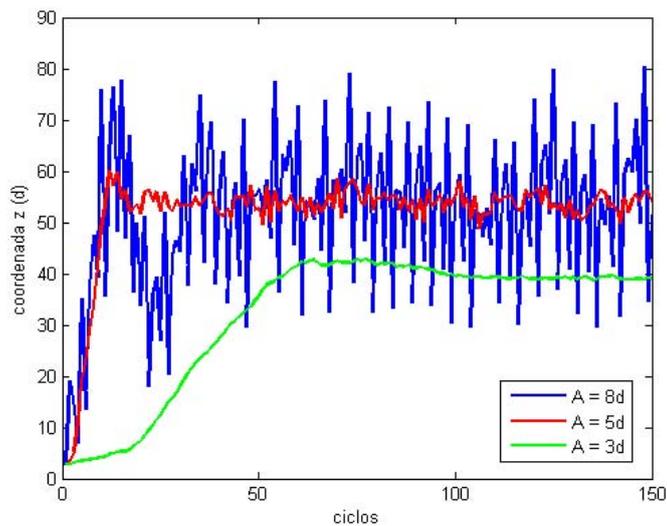


FIGURA 5.21 - Comportamento da partícula grande para as amplitudes $8d$, $5d$ e $3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

e 5.24, a ausência de um movimento circular. Dessa forma, fica claro que não existe uma célula de convecção que induza as partículas a um constante movimento oscilatório dentro do recipiente. Desses resultados, observamos que o sistema de grãos tem o aspecto de um fluido fortemente viscoso e não há a formação de uma célula convectiva. A partícula grande tende à superfície, mais lentamente, apenas pelo efeito

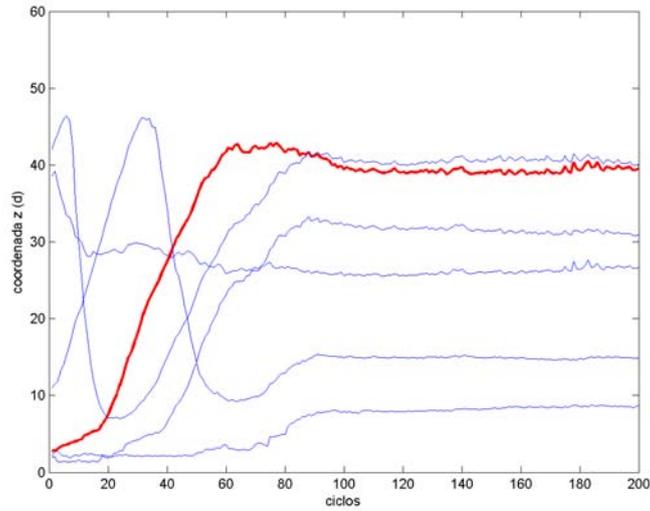


FIGURA 5.22 - Comportamento da partícula grande (vermelho) e várias partículas pequenas (azul) para $A = 3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

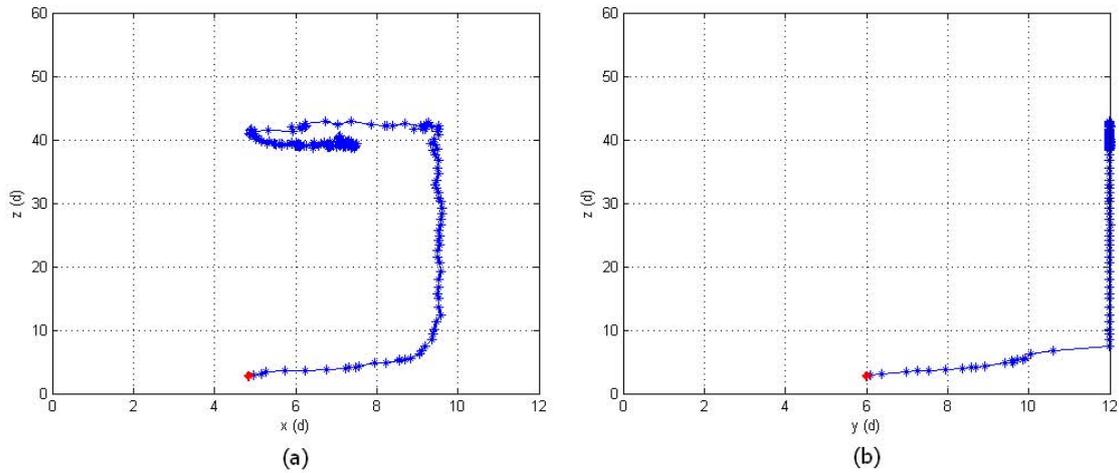


FIGURA 5.23 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz para a partícula grande com $A = 3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

de empuxo.

Já para $A = 8d$, observe na Figura 5.21 que a partícula grande realiza um movimento oscilatório muito mais irregular que o observado para $A = 5d$. Analisando as projeções nos planos xz e yz para a partícula grande quando $A = 8d$ (veja a Figura 5.25), observamos que a partícula constantemente desce abaixo da superfície dos grãos e

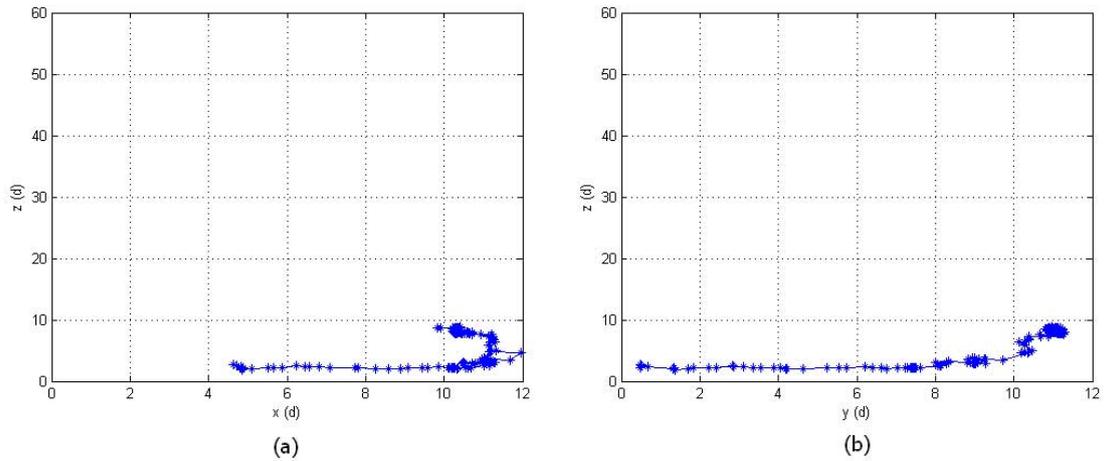


FIGURA 5.24 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz para uma partícula pequena partindo de baixo com $A = 3d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

torna a subir rapidamente, oscilando em uma altura (coordenada z) delimitada por uma faixa entre $30d$ e $75d$, enquanto para $A = 5d$ a partícula grande oscila entre $50d$ e $60d$. Desta forma, observe que para grandes amplitudes, como $A = 8d$, o volume de grãos é fortemente energizado pelo movimento da parede inferior e apresenta um aspecto *fluidizado* e fracamente turbulento.

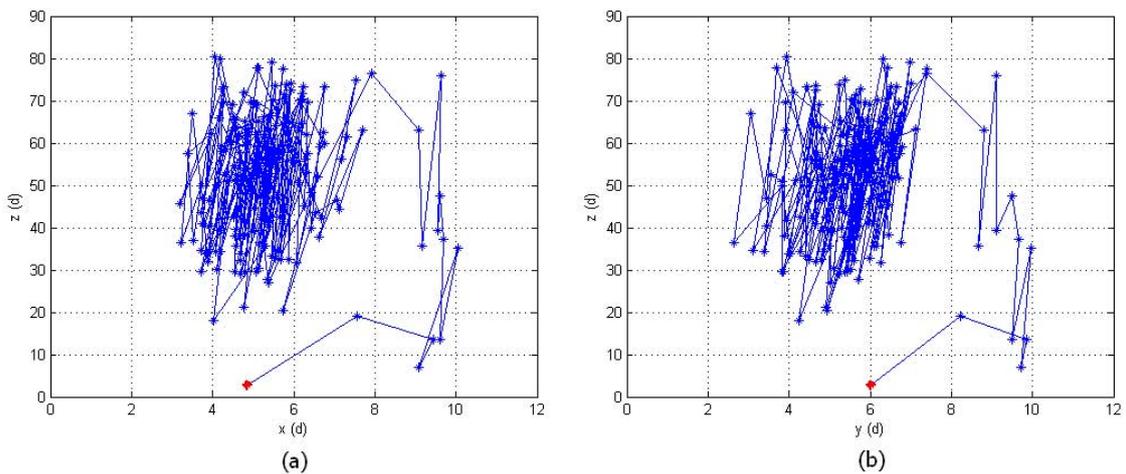


FIGURA 5.25 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz para a partícula grande com $A = 8d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

Selecionamos duas partícula pequenas, uma com posição inicial próxima ao fundo

(Figura 5.26 (a)) e outra próxima à superfície (Figura 5.26 (b)), e também observamos suas trajetórias através de projeções nos planos xz e yz como ilustram as Figuras 5.27 e 5.28, respectivamente. É interessante comparar estes resultados com os das Figuras 5.12 e 5.13, obtidas com $A = 5d$. Para $A = 8d$, ainda é possível discernir um movimento circular que é típico da presença da célula de convecção dentro do recipiente. No entanto, este movimento é agora bem menos regular, apresentando uma complexidade de padrões que lembra a transição para turbulência em um fluido comum.

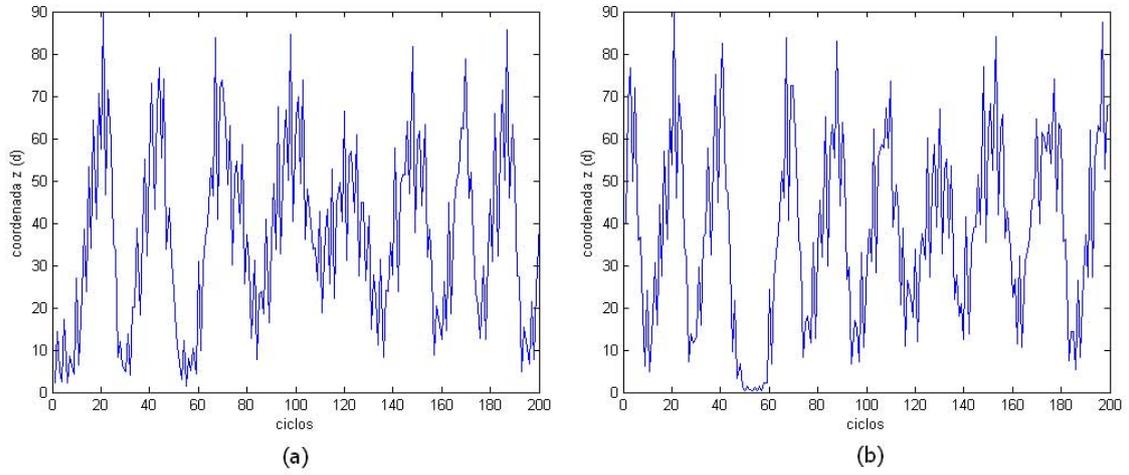


FIGURA 5.26 - Comportamento de duas partículas pequenas para $A = 8d$: (a) partindo de baixo e (b) partindo de cima ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

5.1.3.2 Freqüência

Para analisarmos o efeito da freqüência, fixamos a amplitude no valor intermediário $A = 5d$ e simulamos o S1 para as freqüências: $0.0625/t_0$, $0.125/t_0$ e $0.25/t_0$, ou seja, dado que $f = 0.125/t_0$ é a freqüência utilizada na maioria de nossas simulações, utilizamos um valor de freqüência que é a metade ($f = 0.0625/t_0$) e outro que é o dobro ($f = 0.25/t_0$) de seu valor. Reiterando, para estas simulações fixamos: $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$, $A = 5d$ e $D/d = 4.0$.

Note que o fundo do recipiente vibra de acordo com a Equação 4.1. A Figura 5.29 mostra o movimento da parede inferior durante um ciclo, para uma dada amplitude ($A = 5d$) e diferentes freqüências: 0.0625, 0.125 e 0.25. Assim, para $f = 0.0625$, por exemplo, é preciso o dobro do tempo para que a parede realize uma oscilação

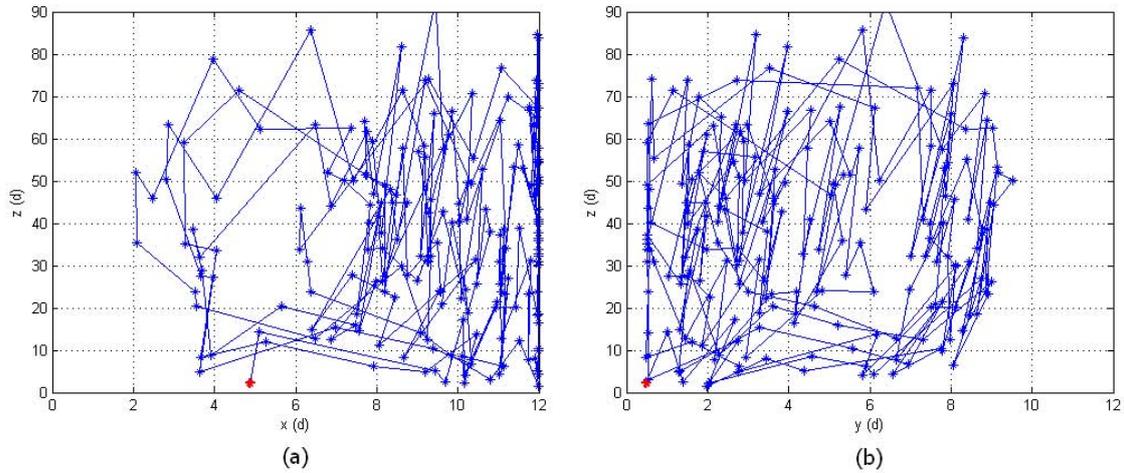


FIGURA 5.27 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de baixo) para $A = 8d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

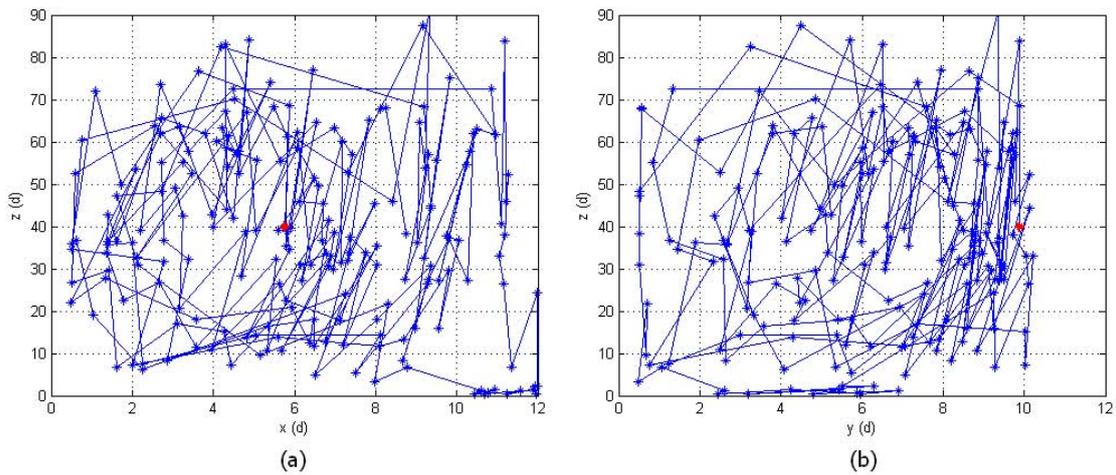


FIGURA 5.28 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de cima) para $A = 8d$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

completa em relação à frequência $f = 0.125$. A Figura 5.30 mostra o comportamento da partícula grande para as diferentes frequências.

Para frequências menores, $f = 0.0625/t_0$ por exemplo, a partícula grande não tende ao topo. Analisando melhor este caso, consideramos a trajetória de uma partícula pequena com posição inicial próxima a superfície e outra próxima ao fundo, conforme ilustra a Figura 5.31. Observe que estas partículas exibem trajetórias correspon-

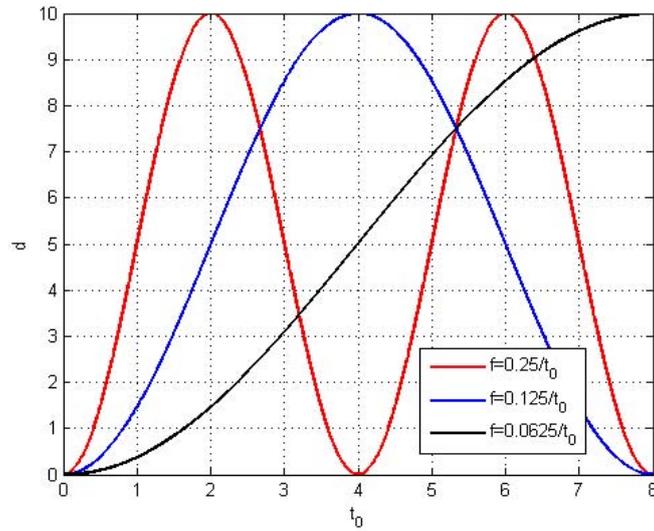


FIGURA 5.29 - Movimento de oscilação da parede inferior do recipiente para $A = 5d$ e frequências $0.25/t_0$, $0.125/t_0$ e $0.0625/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

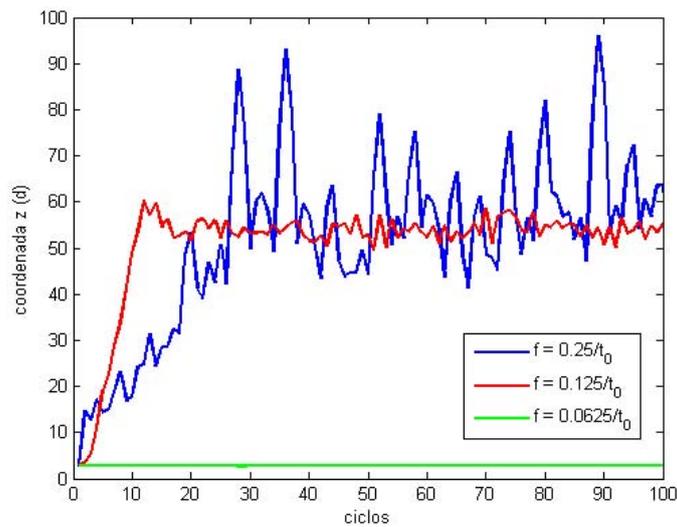


FIGURA 5.30 - Comportamento da partícula grande para as frequências $0.25/t_0$, $0.125/t_0$ e $0.0625/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

tes a velocidades muito baixas, pois todo o sistema oscila praticamente junto com a parede inferior. Em outras palavras, o conjunto de partículas se comporta quase como um “sólido”, porque esta frequência é insuficiente para promover o movimento relativo entre grãos. Dessa forma, não ocorre a formação de uma célula de convecção dentro do recipiente e nem o empuxo é suficiente para promover a segregação da

partícula maior.

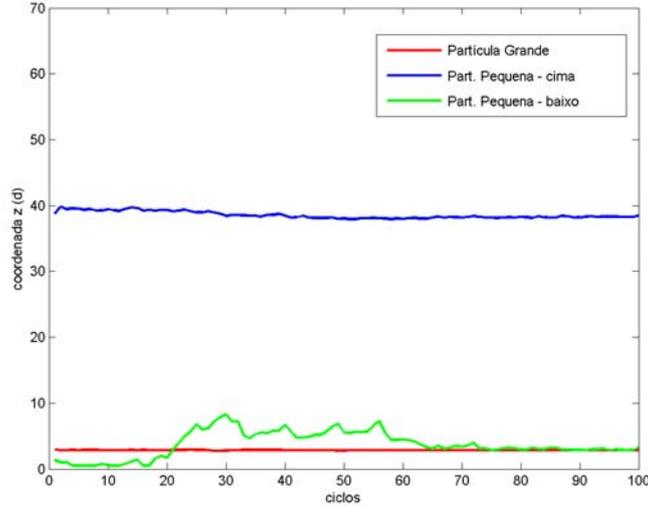


FIGURA 5.31 - Comportamento da partícula grande e outras partículas pequenas para a frequência $0.0625/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

Observamos que para altas frequências, $f = 0.25/t_0$ por exemplo, a partícula grande tende ao topo, mas depois de atingir a superfície, oscila irregularmente acima dela. Analisando as projeções nos planos xz e yz para a partícula grande (veja a Figura 5.32), notamos que esta oscilação ocorre em uma faixa entre $40d$ e $100d$, enquanto que para $f = 0.125/t_0$ a partícula grande oscila entre $50d$ e $60d$. Isto acontece porque, para essa frequência maior a parede inferior realiza um ciclo completo em um período menor, e dessa forma, a vibração é mais rápida implicando na *fluidização* do conjunto de grãos somente nas camadas superiores.

Analisamos também o comportamento de duas partículas pequenas, uma com posição inicial próxima ao fundo do recipiente e outra próxima a superfície, conforme mostra a Figura 5.33. As projeções nos planos xz e yz para estas partículas estão ilustradas nas Figuras 5.34 e 5.35, respectivamente. Observe nestas figuras, que não existe mais um movimento oscilatório regular. A célula de convecção deixa de ser uma estrutura coerente dentro da dinâmica do sistema, tornando-se irregular e “intermitente”. Novamente, estas são características comumente encontradas em fluidos turbulentos.

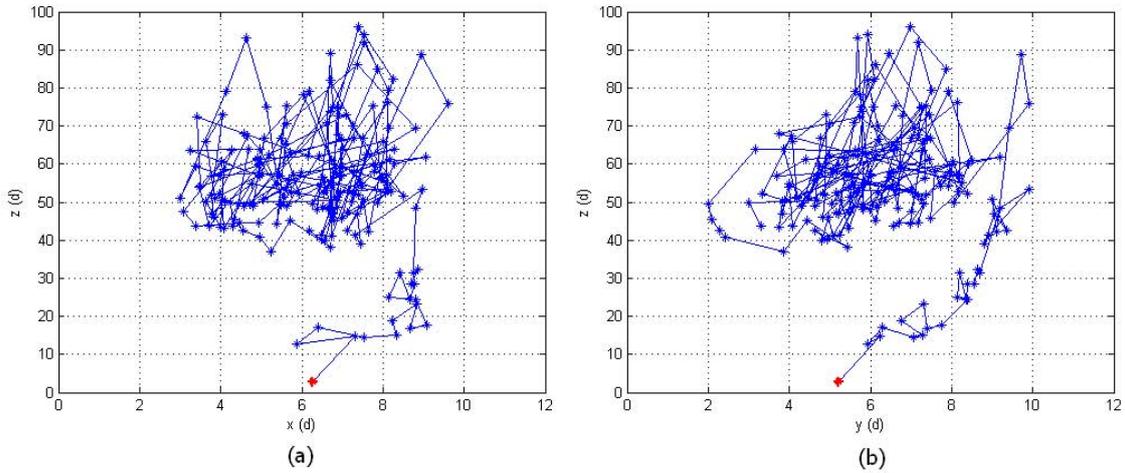


FIGURA 5.32 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz da partícula grande para $f = 0.25/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

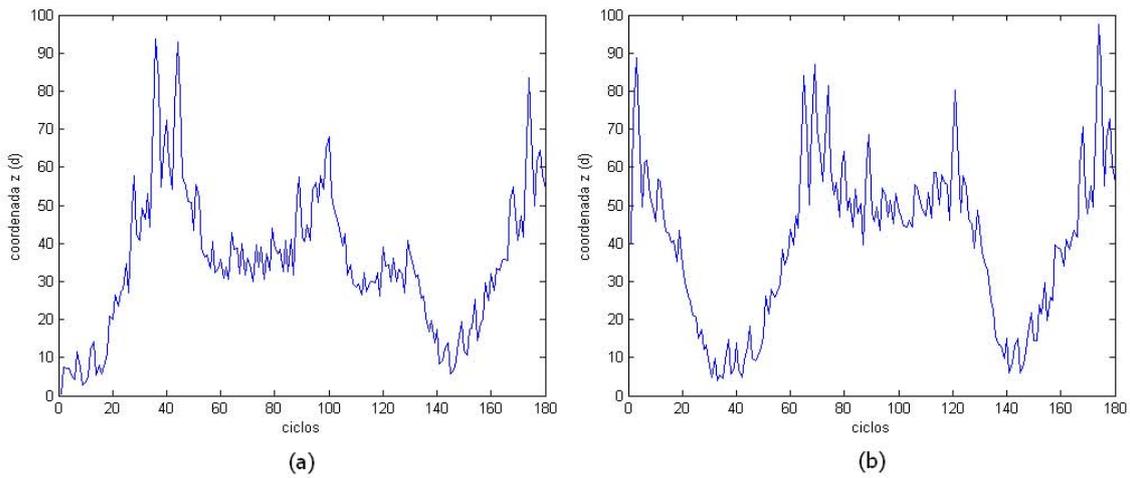


FIGURA 5.33 - Comportamento de duas partículas pequenas para $f = 0.25/t_0$: (a) partindo de baixo e (b) partindo de cima ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

5.1.4 Análise das Características Dinâmicas

Tendo em vista o aparecimento de evidências de um processo de transição laminar/turbulento quando aumentamos, por exemplo, a amplitude de vibração (ver Figura 5.21), decidimos empreender uma avaliação rústica e preliminar do comportamento dinâmico do S1 através da análise de séries temporais provenientes da evolução da coordenada z de algumas partículas ao longo dos ciclos de excitação.

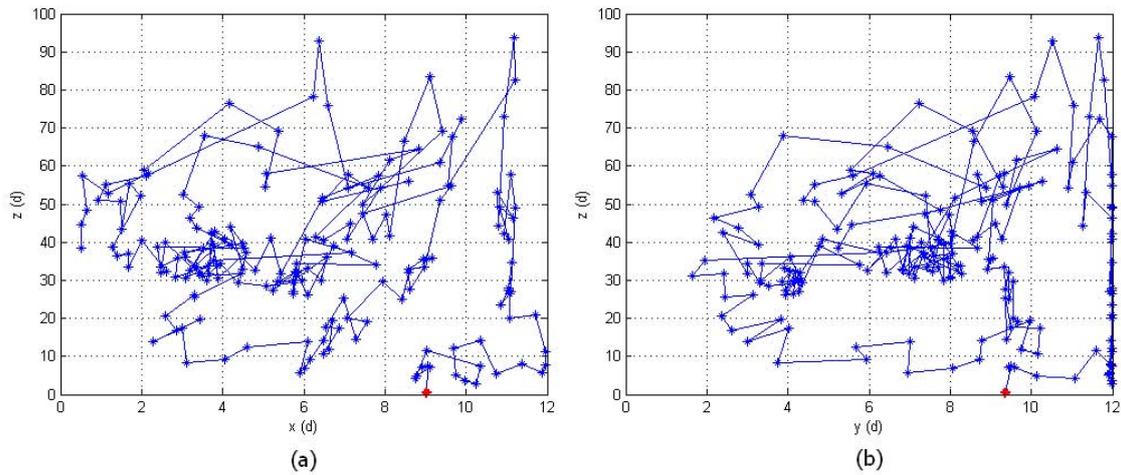


FIGURA 5.34 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de baixo) para $f = 0.25/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

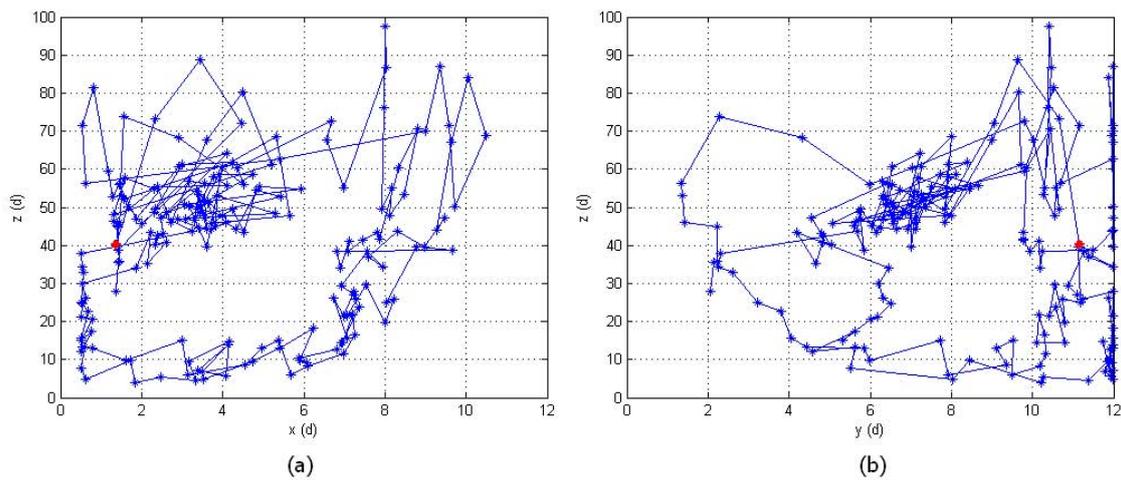


FIGURA 5.35 - Projeções nos planos (a) xz e (b) yz de uma partícula pequena (partindo de cima) para $f = 0.25/t_0$ ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $A = 5d$).

As diferentes séries analisadas são: evolução da partícula grande e de uma partícula pequena para o S1 com $A = 3d$ (Figura 5.36), $A = 5d$ (Figura 5.37) e $A = 8d$ (Figura 5.38). Note que para estas diferentes amplitudes, o S1 apresenta claramente os dois mecanismos diferentes que levam à segregação da partícula grande em meio às demais (empuxo para $A = 3d$ e convecção para $A = 5d$ e $A = 8d$) e ainda para $A = 8d$ o conjunto de partículas apresenta um aspecto *fluidizado*.

Definimos, a partir de agora, siglas para as seis séries analisadas:

- GA3: evolução da partícula grande para $A = 3d$;
- GA5: evolução da partícula grande para $A = 5d$;
- GA8: evolução da partícula grande para $A = 8d$;
- PA3: evolução de uma partícula pequena para $A = 3d$;
- PA5: evolução de uma partícula pequena para $A = 5d$;
- PA9: evolução de uma partícula pequena para $A = 8d$.

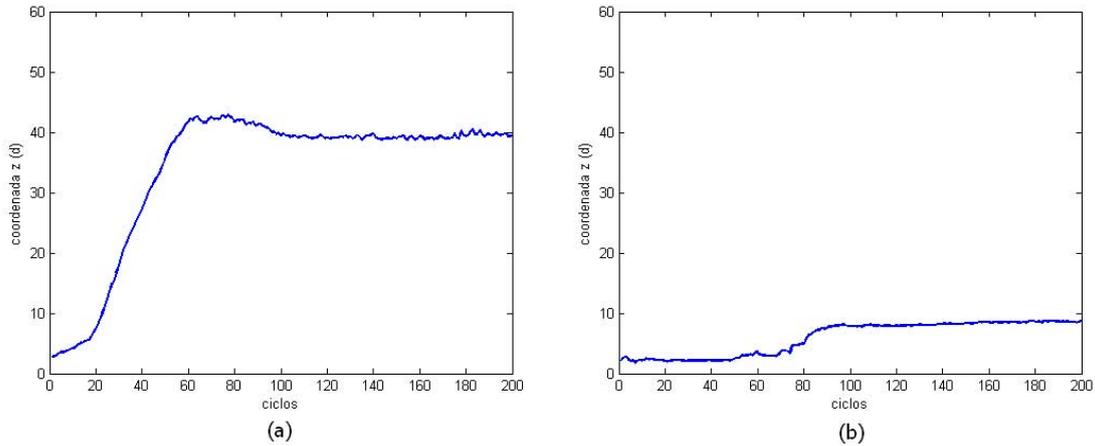


FIGURA 5.36 - Séries temporais para $A = 3d$: (a) evolução da partícula grande (GA3) e (b) evolução de uma partícula pequena (PA3) ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

Os algoritmos das técnicas utilizadas a seguir foram disponibilizados por Campanharo (CAMPANHARO, 2005) e são decorrentes de um minucioso trabalho desenvolvido em sua dissertação, objetivando a caracterização de componentes e estruturas de baixa dimensão imersas na dinâmica turbulenta da camada limite atmosférica. Essa investigação foi realizada através da análise de séries temporais que medem a temperatura no interior e acima da copa da floresta Amazônica.

Inicialmente calculamos a *função de autocorrelação*, um método clássico muito utilizado na análise de séries temporais. Posteriormente, foi feita a *reconstrução de espaço de fase* e para isso foi preciso calcular o *atraso* (obtido a partir da função de autocorrelação) e a *dimensão de imersão*. Esta, por sua vez, foi obtida através da

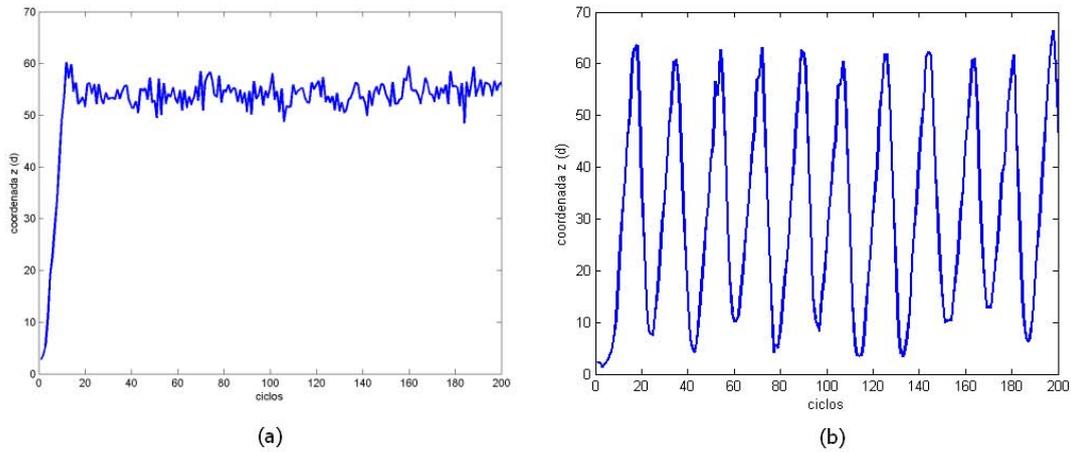


FIGURA 5.37 - Séries temporais para $A = 5d$: (a) evolução da partícula grande (GA5) e (b) evolução de uma partícula pequena (PA5) ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

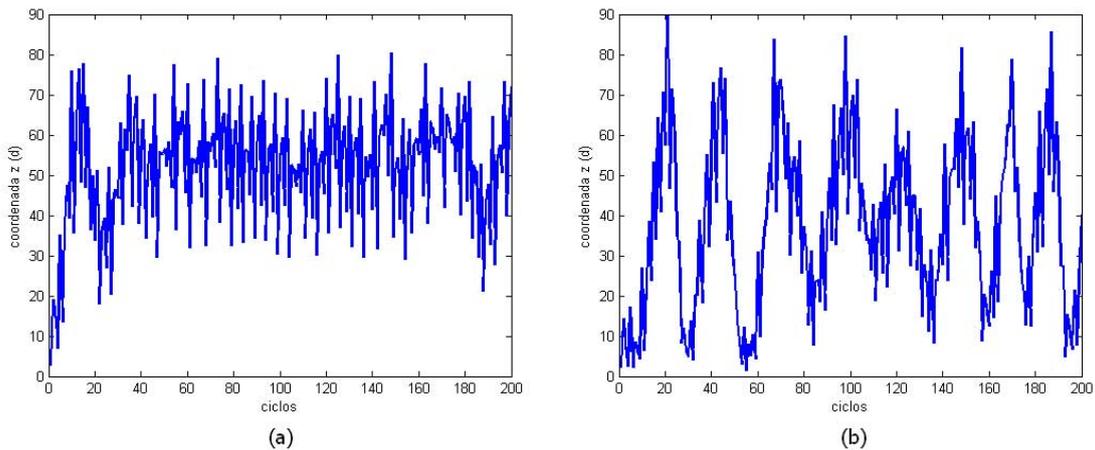


FIGURA 5.38 - Séries temporais para $A = 8d$: (a) evolução da partícula grande (GA8) e (b) evolução de uma partícula pequena (PA8) ($D/d = 4.0$, $\mu_w = 0.5$, $\mu_p = 0.5$ e $f = 0.125/t_0$).

dimensão de correlação, que depende do cálculo da função de *correlação integral*. Foi feito ainda um teste de *estacionaridade* e calculado o *expoente de Lyapunov* através do algoritmo de Wolf. Por fim, aplicamos a técnica conhecida como *Mapas de Recorrência* (MR).

Todos esses métodos devem ser usados apenas diante de condições próprias de estacionaridade e sem a presença de componentes aleatórias dominantes. A validade dessas condições não foi aqui objeto de avaliação criteriosa. Entretanto, foram utilizadas

com o intuito de se vislumbrar a complexidade dos processos dinâmicos envolvidos, cuja melhor caracterização será objeto de um desenvolvimento posterior deste trabalho. As técnicas aqui empregadas, juntamente com as referências pertinentes, encontram-se descritas no Apêndice A.

As Figuras 5.39, 5.40 e 5.41 mostram as correlações integrais $C(r)$ versus a escala r (em escala log-log), considerando dimensões de imersão que variam de 1 a 5, para as diferentes séries temporais em estudo. Observe que estas curvas possuem seções lineares cujos valores das inclinações, calculados via regressão linear, saturam ou não quando as dimensões de imersão arbitradas são incrementadas. Estes valores de inclinações para cada dimensão de imersão m determinam a dimensão de correlação D_2 , como ilustra a Figura 5.42. Caos determinístico, em geral, é identificado se a dimensão de correlação D_2 converge para um valor de saturação a medida que a dimensão de imersão aumenta (GRASSBERGER; PROCACCIA, 1983). Note na Figura 5.42, que a dimensão de correlação obtida de uma série aleatória não satura quando as dimensões de imersão são incrementadas. Este é um comportamento esperado, pois um ruído branco está associado a um processo estocástico e não a uma dinâmica caótica.

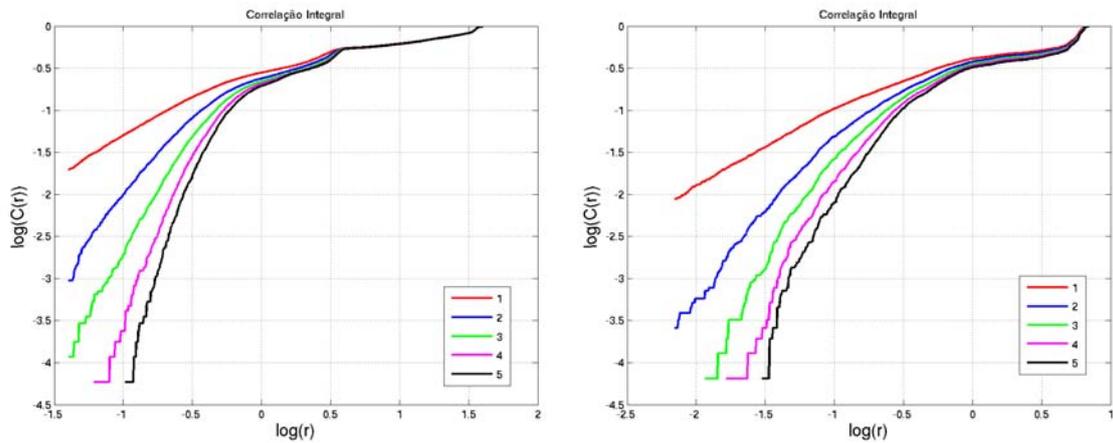


FIGURA 5.39 - Função de correlação integral para as séries (a) GA3 e (b) PA3.

A partir dos resultados apresentados na Figura 5.42, não se pode afirmar com certeza que ocorre saturação para as séries analisadas. Porém, como o comportamento para a série GA8 em seus dois últimos valores para a dimensão de imersão m , tende a

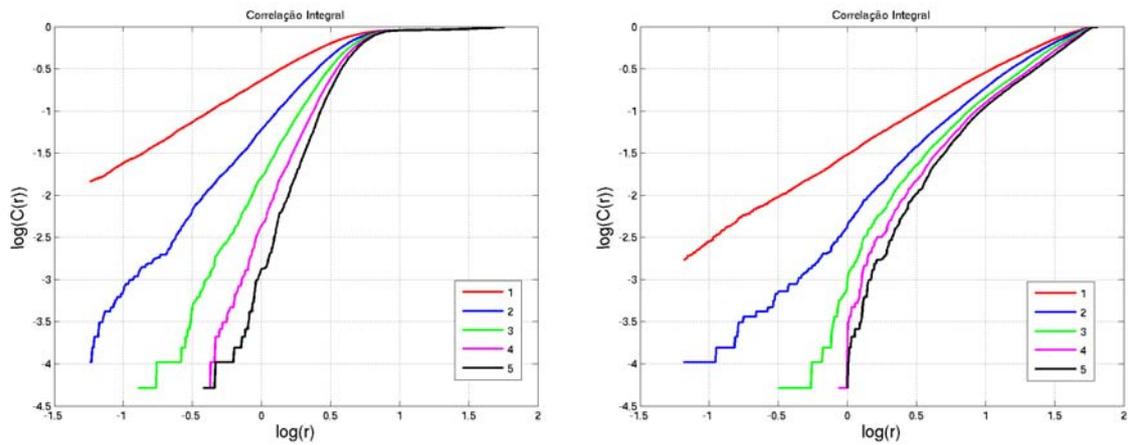


FIGURA 5.40 - Função de correlação integral para as séries (a) GA5 e (b) PA5.

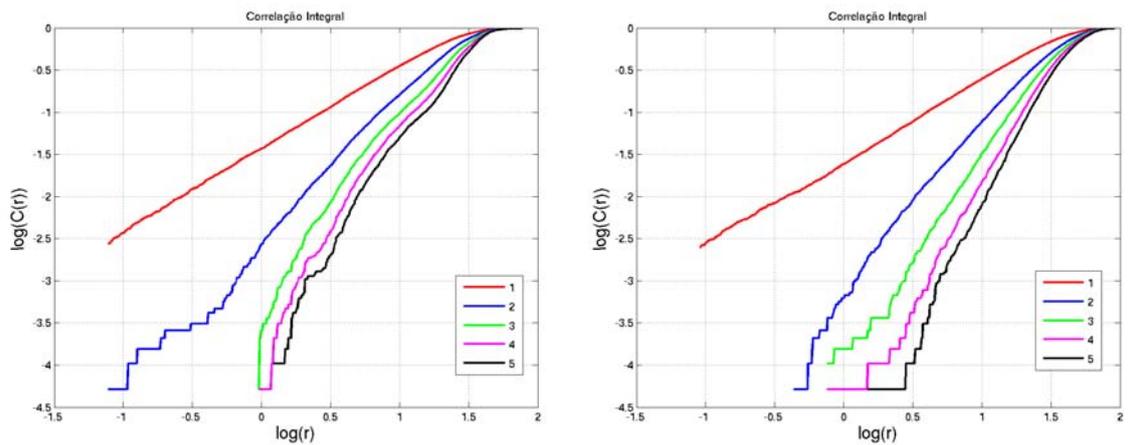


FIGURA 5.41 - Função de correlação integral para as séries (a) GA8 e (b) PA8.

ser mais horizontal, decidimos considerar, por hipótese, uma eventual dimensão de correlação $D_2 = 2.4$ e ir adiante nas análises. Este resultado, sugeriria a presença de uma estrutura geométrica de baixa dimensão na série. A partir deste resultado para a série GA8 e tomando-se o atraso $\tau = 1$ (1/10 do primeiro zero da função de autocorrelação) e a dimensão de imersão $m = 3.0$ (obtida através da relação A.4, descrita no Apêndice A), decidiu-se utilizar o método de [Wolf et al. \(1985\)](#) que permitiria, se a dinâmica presente fosse caótica e sem a presença de componentes aleatórias, chegar a uma estimativa do valor do maior expoente de Lyapunov.

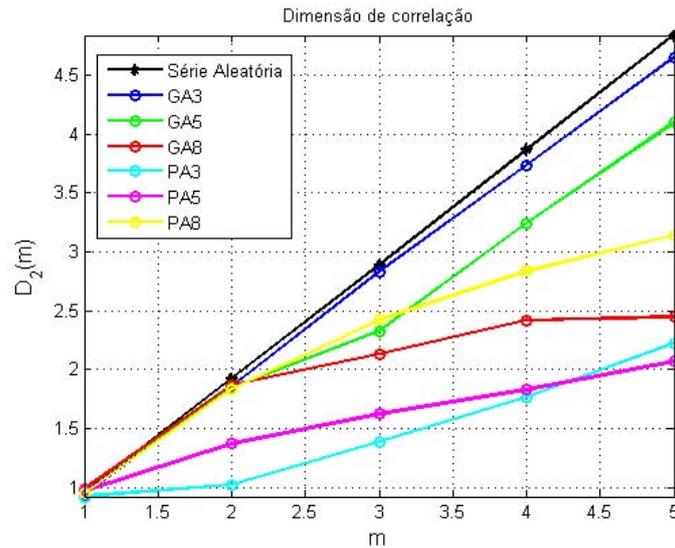


FIGURA 5.42 - Dimensão de correlação para as séries em estudo.

Como se sabe, os expoentes de Lyapunov, no caso de sistemas determinísticos, contêm informações sobre a taxa média com que as trajetórias exponencialmente divergem ou convergem dentro do atrator. Eles estão relacionados as direções de expansão ou contração no espaço de fase. Um sistema determinístico caótico é caracterizado por uma divergência exponencial de condições iniciais próximas, o que implica em pelo menos um expoente de Lyapunov estritamente positivo (ALLIGOOD *et al.*, 1997).

O algoritmo de Wolf *et al.* (1985) estima os expoentes de Lyapunov não negativos de uma série temporal e tem como ponto de partida a reconstrução de Takens numa dimensão de imersão adequada. Mais detalhes encontram-se na Seção A.4. A Figura 5.43 mostra a evolução do expoente de Lyapunov para a série GA8. Observe que o algoritmo converge para um valor positivo, em torno de 1.6. Este resultado, embora no contexto em que foi obtido tenha aplicabilidade limitada, indica a presença de uma dinâmica elaborada com componentes de expansão e que merece uma cuidadosa análise futura.

A última técnica utilizada foi a dos *Mapas de Recorrência* (MR), descrita na Seção A.5. Através destes mapas é possível visualizar o comportamento de trajetórias no espaço de fase, e em quais tempos um estado de um sistema dinâmico se repete. Essa repetição de estados é uma característica de sistemas dinâmicos determinísticos, caóticos ou não-lineares (ECKMAN *et al.*, 1987). As Figuras 5.44, 5.45 e 5.46 mostram

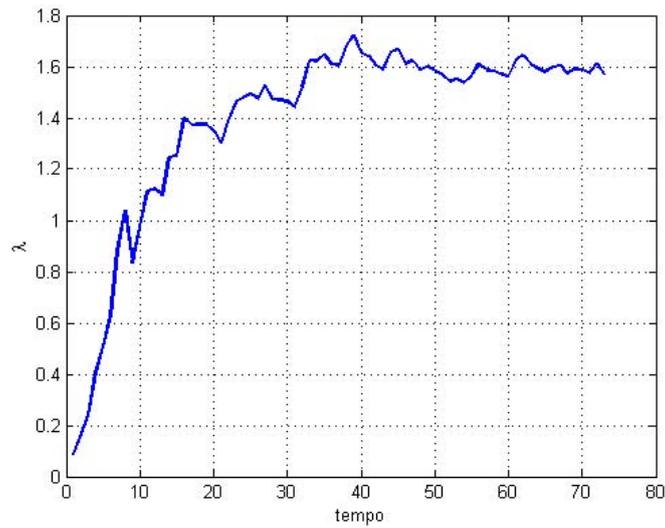


FIGURA 5.43 - Evolução do expoente de Lyapunov para a série GA8.

os MP's, para $A = 3d$, $A = 5d$ e $A = 8d$, respectivamente.

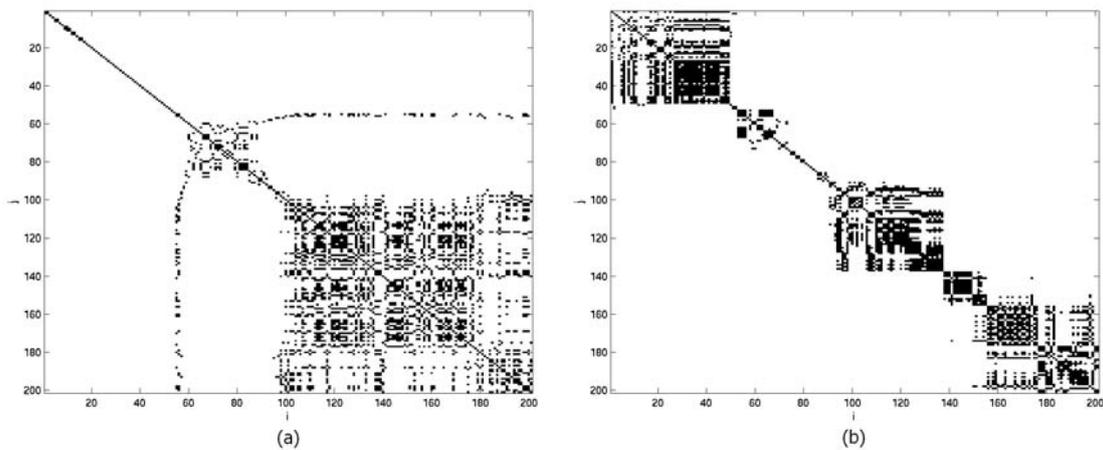


FIGURA 5.44 - Mapas de Recorrência para as séries (a) GA3 e (b) PA3.

O MR associado à série GA5 (Figura 5.45 (a)) apresenta uma homogeneidade em relação à distribuição de seus pontos, o que é um comportamento típico de sistemas estocásticos. A série PA5 é quasi-periódica, devido à presença de uma célula de convecção no S1, e o MR mostra isso através de padrões regulares (Figura 5.45 (b)). Já para a série GA8, o MR evidencia a existência de estruturas diagonais paralelas

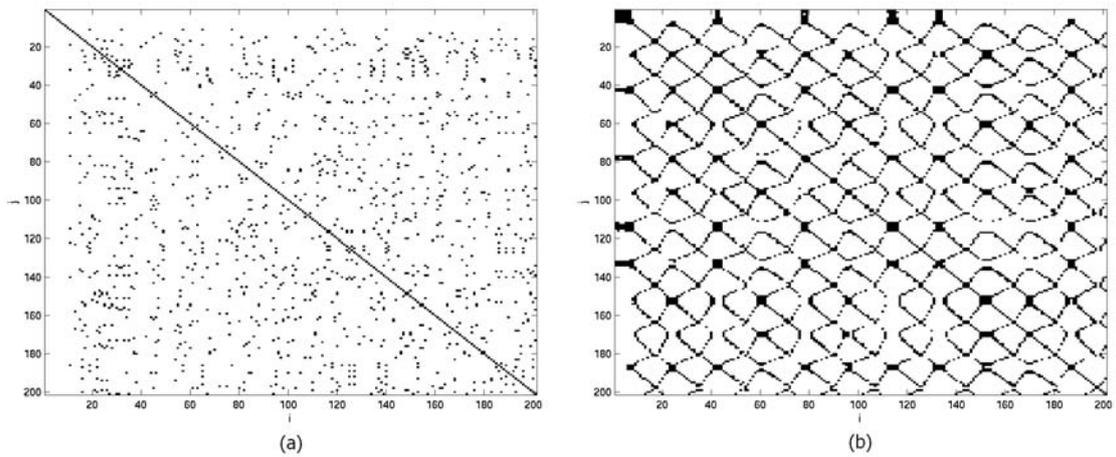


FIGURA 5.45 - Mapas de Recorrência para as séries (a) GA5 e (b) PA5.

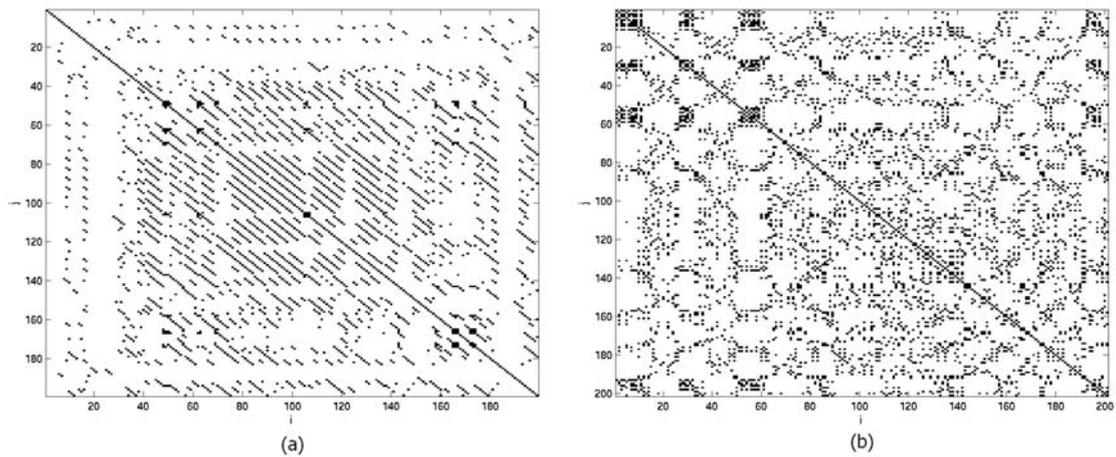


FIGURA 5.46 - Mapas de Recorrência para as séries (a) GA8 e (b) PA8.

à diagonal principal. Estas estruturas ocorrem quando um segmento da trajetória reconstruída é paralelo a outro segmento, ou seja, a trajetória visita a mesma região do espaço de fase em diferentes instantes. Todas estas evidências para a evolução da partícula grande quando $A = 8d$ no S1, sugerem que a dinâmica da mesma é acentuadamente elaborada, merecendo cuidadosos estudos posteriores.

A seguir introduzimos as análises realizadas para o Sistema 2.

5.2 Sistema 2

O S2 é composto por $N = 30000$ partículas esféricas e monodispersas de diâmetro d , depositadas em um recipiente quadrado de lado $L = 100d$, formando uma fina camada de profundidade $H = 2.71d$, onde H é dado pela equação 2.18. A primeira parte da simulação consiste na inserção das partículas dentro do recipiente, como ilustra a Figura 5.47.

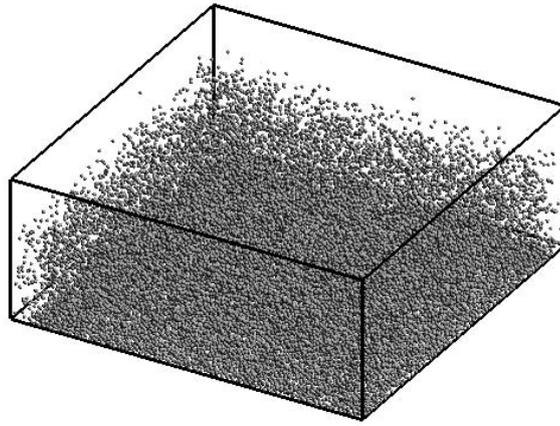


FIGURA 5.47 - Primeira parte da simulação: Inserção de partículas dentro do recipiente retangular para S2.

Estamos interessados em obter padrões como os observados em experimentos e simulações apresentados na Seção 2.3.2. Para isso, os parâmetros computacionais relevantes são a frequência e amplitude de vibração. Na maioria dos trabalhos, esses parâmetros são dados em função de f^* e Γ , conforme as equações 2.19 e 2.20, respectivamente.

Inicialmente, fixamos a frequência em $f = 0.25/t_0$ e ajustamos a amplitude em $1d$, $2d$, $3d$ e $4d$, ou seja, simulamos o S2 para (f^*, Γ) iguais a $(0.13, 0.25)$, $(0.13, 0.50)$, $(0.13, 0.75)$ e $(0.13, 1.0)$, respectivamente. Utilizamos também os valores para f^* e Γ encontrados em Bizon *et al.* (1998), são eles (f^*, Γ) : $(0.27, 3.0)$, $(0.44, 3.0)$ e $(0.38, 4.0)$. Os demais parâmetros para estas simulações estão definidos nas Tabelas 4.1 e ??.

Simulamos o S2 durante um período de $200t_0$. Para as simulações onde fixamos a frequência em $f = 0.25/t_0$ e variamos a amplitude não observamos padrões para $A = 1d$ e $A = 4d$. No entanto, para $A = 2d$ e $A = 3d$ alguns padrões foram obtidos, conforme apresentado nas Figuras 5.48 e 5.49. Note que os resultados são apresentados por meio de projeções no plano xy (isto é, vista “de cima”), e representam alguns instantâneos da evolução temporal do sistema granular.

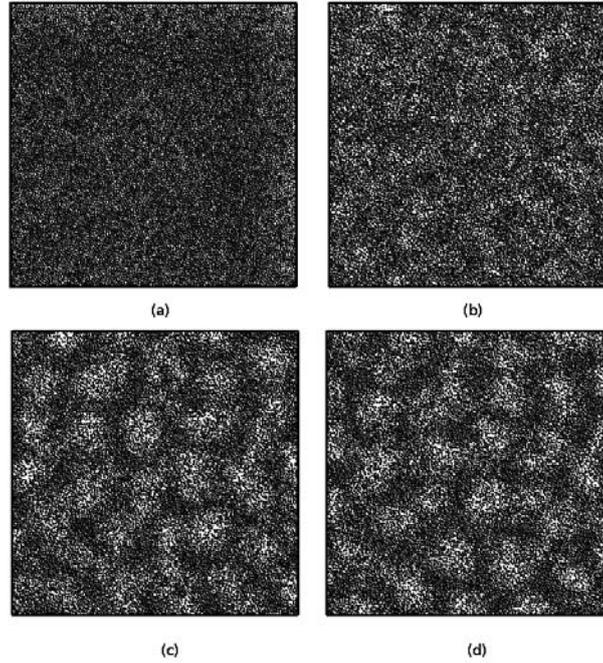


FIGURA 5.48 - Instantes da simulação para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.50)$: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 152t_0$ e (d) $t = 160t_0$ ($\mu_w = \mu_p = 0.50$).

Também não foram observados padrões para (f^*, Γ) iguais a $(0.27, 3.0)$, $(0.44, 3.0)$ e $(0.38, 4.0)$. Os padrões mais relevantes foram encontrados para $(f^*, \Gamma)=(0.13, 0.75)$, ou seja, $f = 0.25/t_0$ e $A = 3d$, como ilustra a Figura 5.49. Note que as partículas formam quadrados, pentágonos e hexágonos em algumas regiões do recipiente. A Figura 5.50, evidencia algumas dessas formas geométrica para um dado instante da simulação.

5.2.1 Influência da Geometria da Fronteira

Alteramos a forma do recipiente, de retangular para cilíndrica, com o objetivo de analisar a influência da geometria da fronteira na dinâmica do S2. Definimos um

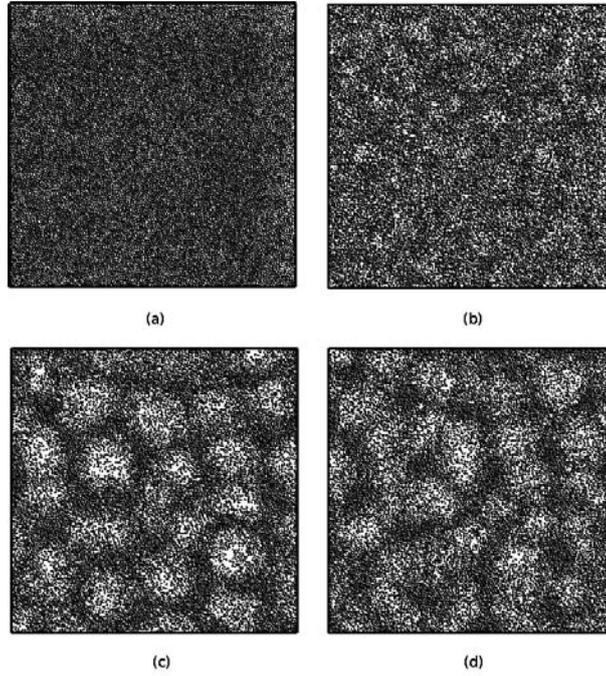


FIGURA 5.49 - Instantes da simulação para $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$ ($\mu_w = \mu_p = 0.50$).

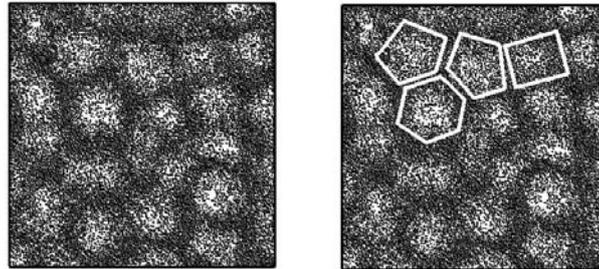


FIGURA 5.50 - Instante $t = 180t_0$ da simulação do S2 para $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$.

cilindro de raio $r = 56.42d$, pois com este raio obtemos uma área próxima à área do quadrado de lado $L = 100d$, isto é, $A_{cil} = \pi r^2 = \pi(56.42d)^2 \approx 10.000d^2 = (100d)^2 = L^2 = A_{qua}$. Observamos que os resultados alcançados são qualitativamente os mesmos, ou seja, os “padrões” obtidos para a geometria retangular também são encontrados para a geometria cilíndrica em todas as simulações para as diferentes amplitudes e frequências utilizadas. A Figura 5.51 mostra os resultados da simulação para geometria cilíndrica, com $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$. A Figura 5.52 compara essas duas geometrias para o instante $t = 188t_0$.

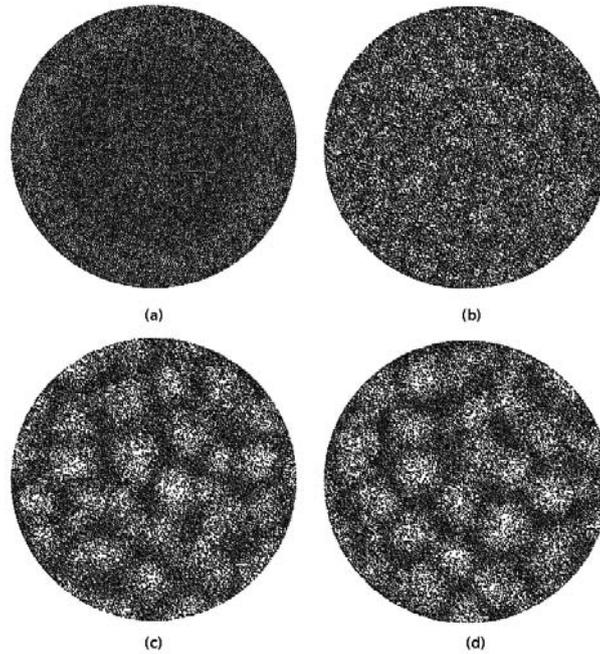


FIGURA 5.51 - Instantes da simulação para $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$, $\mu_w = \mu_p = 0.50$ e geometria cilíndrica: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.

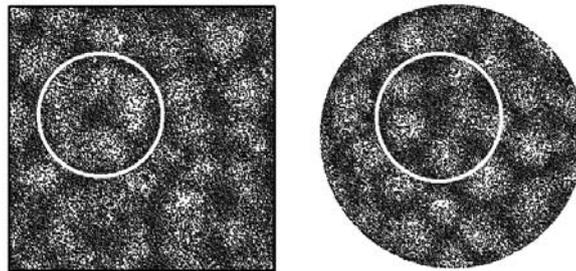


FIGURA 5.52 - Comparando geometria retangular e cilíndrica para o ciclo $t = 188t_0$, com $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$ e $\mu_w = \mu_p = 0.50$. Note que uma mesma estrutura é encontrada para os dois casos no mesmo instante.

5.2.2 Influência do Coeficiente de Atrito

Investigamos também a influência do coeficiente de atrito na formação de padrões em camadas granulares osciladas. Simulamos o S2 para $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$, com $\mu_w = 0.00$ e $\mu_p = 0.00$, ou seja, na ausência de atrito nas paredes do recipiente e entre as partículas. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 5.53.

Destes resultados, concluímos que a ausência de atrito impede a formação de padrões

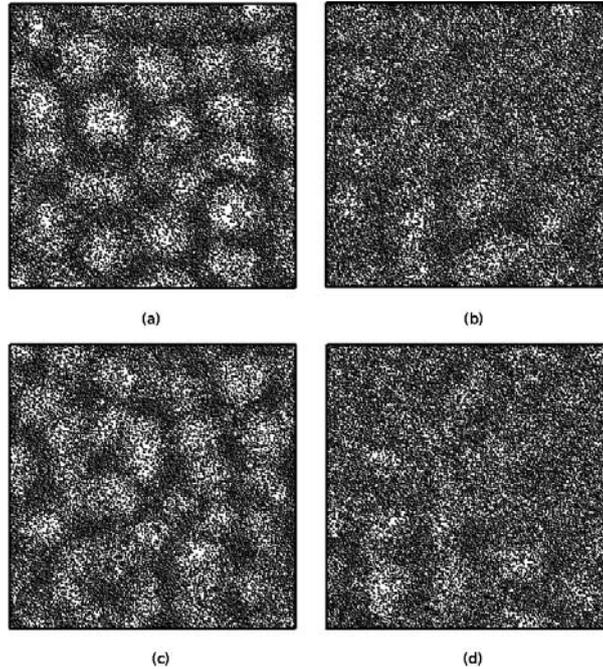


FIGURA 5.53 - Comparando simulação para $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$: (a) e (c) $\mu_w = \mu_p = 0.50$ (com atrito), (b) e (d) $\mu_w = \mu_p = 0.00$ (sem atrito); para os instantes $t = 180t_0$ (acima) e $t = 188t_0$ (abaixo).

mais complexos no sistema, como hexágonos ou pentágonos. Este resultado corrobora a afirmação de Moon, Swift e Swinney, segundo os quais, o atrito não pode ser omitido em modelagens realísticas de formação de padrões (MOON *et al.*, 2004).

É preciso ressaltar, no entanto, que alguns padrões mais simples observados na presença de atrito, também são encontrados em simulações sem atrito. Moon *et al.* (2004), por exemplo, observaram em suas simulações que apenas o padrão do tipo tira é estável na ausência de atrito. Este mesmo resultado foi “aproximadamente” reproduzido em nossas simulações. A Figura 5.54 mostra o instante $t = 188t_0$ da simulação sem atrito, onde, ao invés de hexágonos ou quadrados isolados, encontramos algumas tiras.

Por hora, através das simulações do S2 conseguimos identificar padrões desordenados com alguns quadrados, pentágonos e hexágonos isolados. Acreditamos que, para se obter padrões como os observados na literatura, é preciso utilizar diversos valores para os parâmetros de vibração, além de experimentar uma extensa combinação dos mesmos.

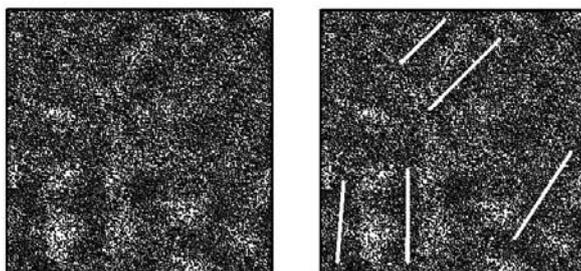


FIGURA 5.54 - Instante $t = 188t_0$ da simulação sem atrito entre partículas para $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$.

Analisamos também a distribuição de velocidades e o espectro global de ondas para a simulação do S2 com $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$, $\mu_w = \mu_p = 0.50$ e geometria retangular (juntamente com os parâmetros das Tabelas 4.1 e ??), pois para estes parâmetros foram encontrados os padrões mais bem definidos.

5.2.3 Distribuição de Velocidades

Sistemas granulares são freqüentemente tratados estatisticamente devido ao grande número de graus de liberdade e a complexidade das forças entre partículas. Materiais granulares fortemente excitados são muitas vezes estudados através de teorias para gases moleculares clássicos. Similaridades têm sido encontradas entre eles, porém uma diferença crucial é a inelasticidade das colisões entre as partículas granulares que implica em dissipação de energia cinética do sistema. Assim, observa-se que distribuições de velocidade de sistemas granulares desviam da distribuição normal (LOSERT *et al.*, 1999; KUDROLLI; HENRY, 2000; BLAIR; KUDROLLI, 2001).

As Figuras 5.55, 5.56 e 5.57 apresentam, respectivamente, os histogramas para as velocidades nas direções horizontais x e y , e vertical z para os quatro instantes observados na Figura 5.49, ou seja, para os instantes 0, $40t_0$, $180t_0$ e $188t_0$ da simulação do S2 com $(f^*, \Gamma) = (0.13, 0.75)$, $\mu_w = \mu_p = 0.50$ e geometria retangular. A curva em vermelho corresponde ao ajuste de uma gaussiana aos dados. Note que as distribuições de velocidade empíricas desviam claramente da normal, o que indica a presença de correlações de longo alcance entre os grãos, fundamentais para o surgimento de padrões.

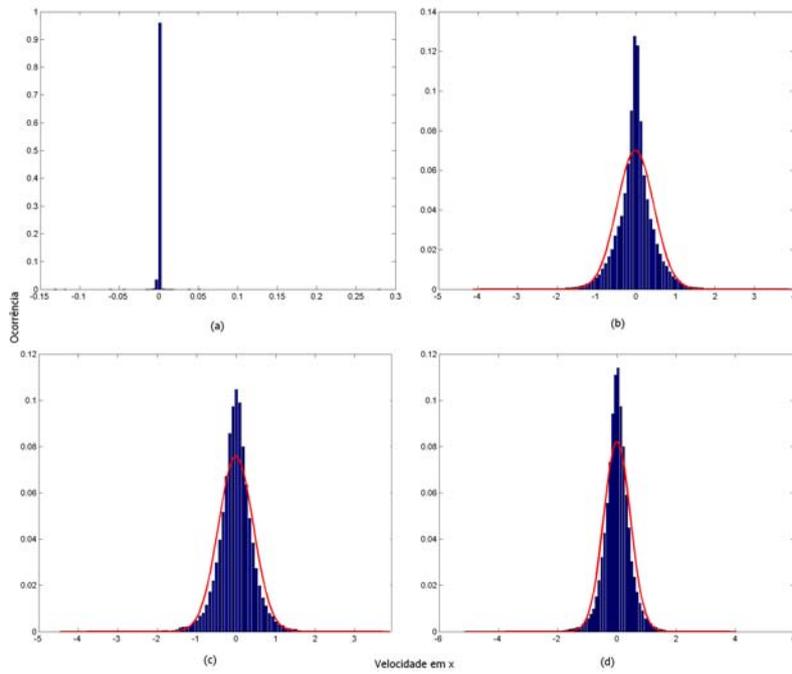


FIGURA 5.55 - Histogramas para as velocidades das partículas na direção x nos instantes: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.

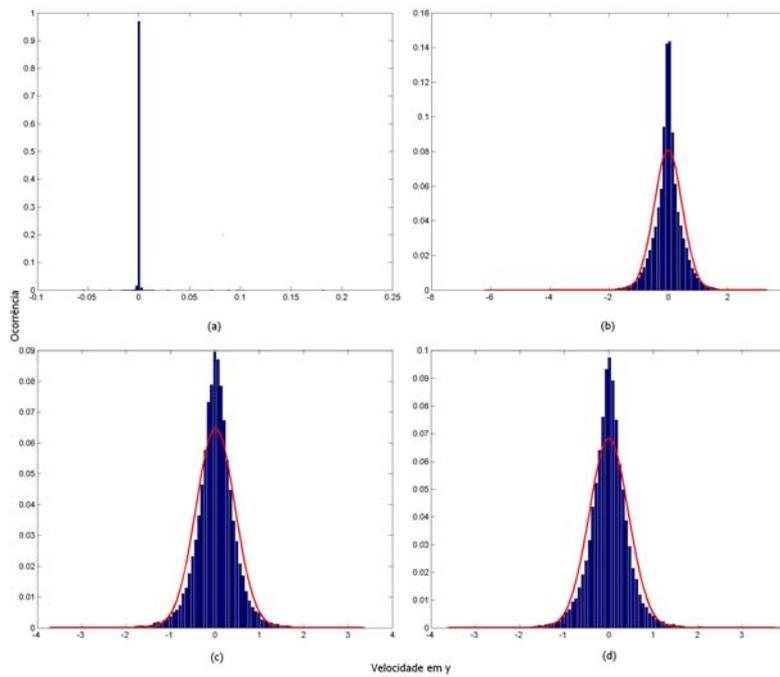


FIGURA 5.56 - Histogramas para as velocidades das partículas na direção y nos instantes: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.

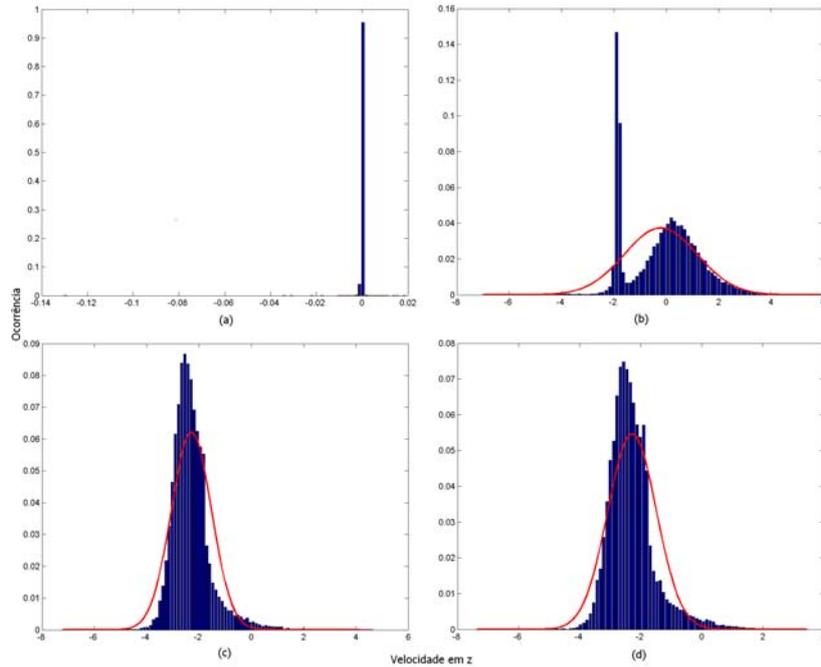


FIGURA 5.57 - Histogramas para as velocidades das partículas na direção z nos instantes: (a) $t = 0$, (b) $t = 40t_0$, (c) $t = 180t_0$ e (d) $t = 188t_0$.

5.2.4 Análise espectral

Analisando as trajetórias das partículas do S2, observamos que elas se deslocam em uma pequena região em torno de sua posição inicial. Dificilmente uma partícula que inicia seu movimento próximo de um dos lados do recipiente é capaz de se deslocar para o lado oposto. A dinâmica observada é essencialmente difusiva, do tipo movimento browniano, bem diferente da célula de convecção encontrada no S1. As Figuras 5.58 e 5.59 mostram as trajetórias de seis partículas ao longo de um período de $200t_0$ para a simulação do S2 com $f^* = 0.13$, $\Gamma = 0.75$, $\mu_w = \mu_p = 0.50$ e geometria retangular.

Um sistema granular é um conjunto de partículas que interagem entre si por meio de forças de contato e exibem um grande número de graus de liberdade. Além disso, tais sistemas se encontram fora do equilíbrio no sentido da termodinâmica, uma vez que a energia térmica $k_B T$ é muito pequena para induzir o movimento dos grãos. No entanto, devido ao grande número de graus de liberdade, espera-se que uma analogia ao movimento browniano seja possível quando o sistema é submetido a forças externas e o movimento dos grãos ocorre pela contínua injeção de energia (D'ANNA *et al.*, 2003).

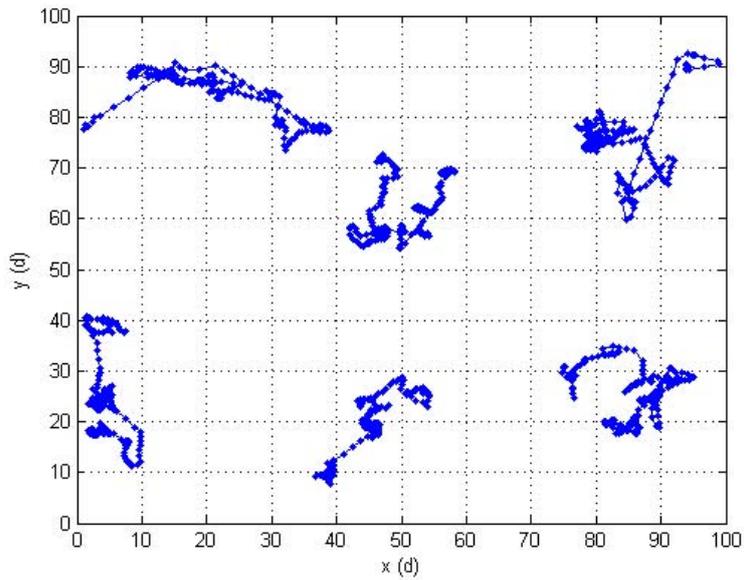


FIGURA 5.58 - Projeções no plano xy das posições de algumas partículas.

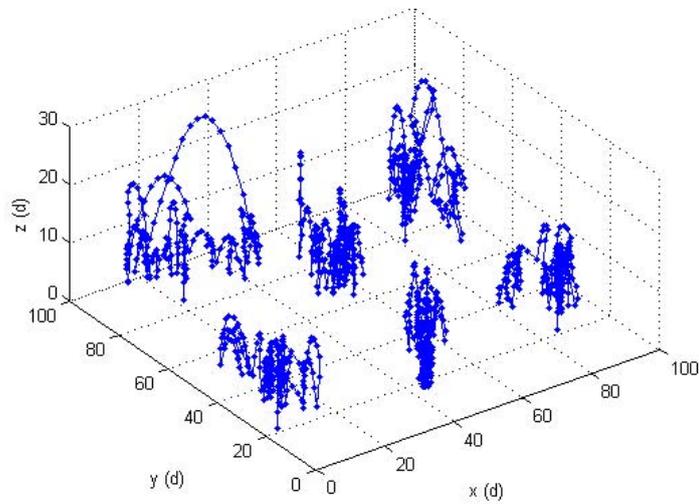


FIGURA 5.59 - Trajetória tridimensional de algumas partículas.

D'Anna *et al.* (2003) analisaram, através de experimentos, o comportamento de um oscilador de torção imerso em um sistema granular *fluidizado*, ou seja, submetido a fortes agitações verticais. Eles observaram que o oscilador se comporta como um oscilador browniano, o que corrobora nossas observações.

Consideramos as informações de posições e velocidades dessas partículas como séries temporais e realizamos uma análise espectral através do espectro global de ondeletas (*global wavelet spectrum* - GWS), com o auxílio do *Wavelet Toolbox* do MATLAB. Os resultados obtidos para as velocidades e posições nas direções x , y , z são apresentados nas Figuras 5.60 e 5.61, respectivamente.

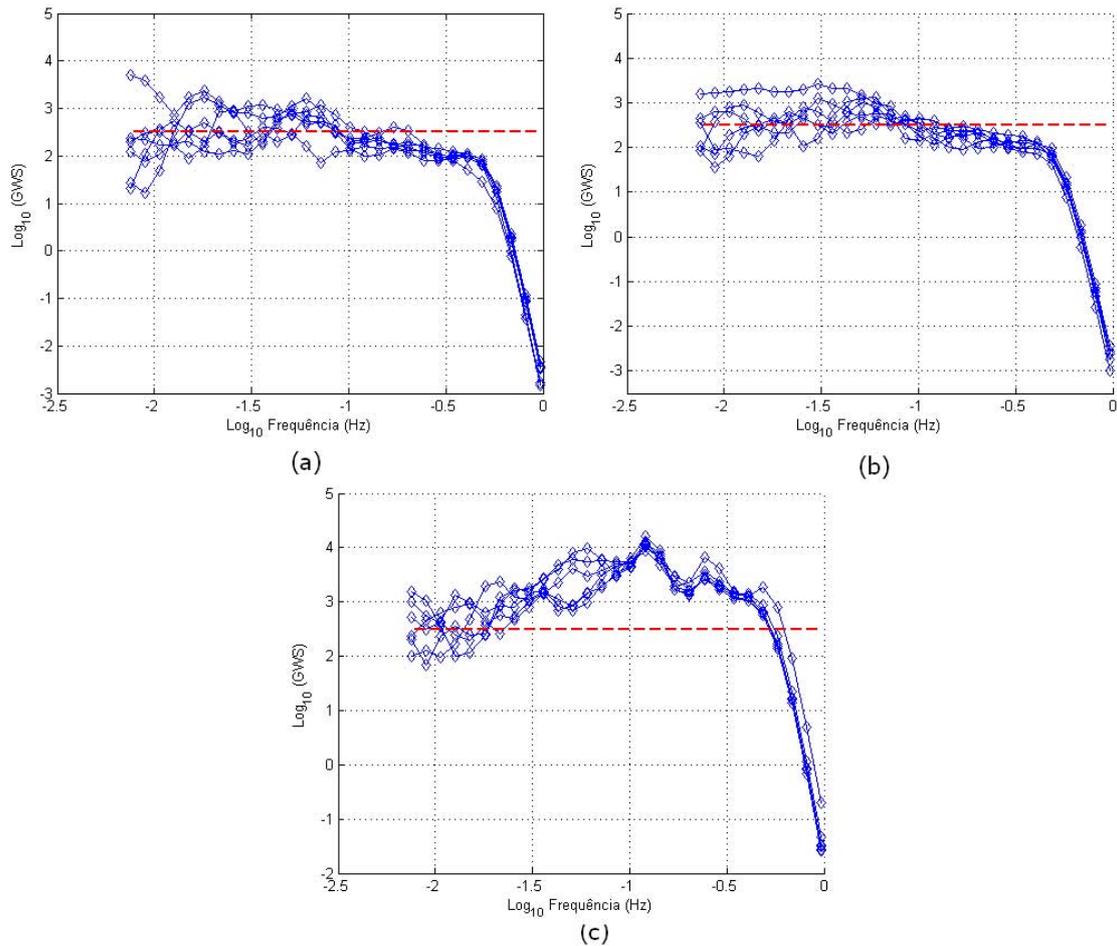


FIGURA 5.60 - GWS das velocidades nas direções (a) x , (b) y e (c) z .

Nossos resultados indicam que, para as velocidades em todas as direções (Figura 5.60), os espectros são os característicos de um ruído branco. Em outras palavras, as velocidades no S2 não têm memória. Já as posições no plano xy (Figura 5.61 (a) e (b)), são a simples integração das velocidades correspondentes, e apresentam um espectro com uma inclinação (em escala log-log) de aproximadamente -2 , que de acordo com esse tipo de análise, é característica de um movimento browniano

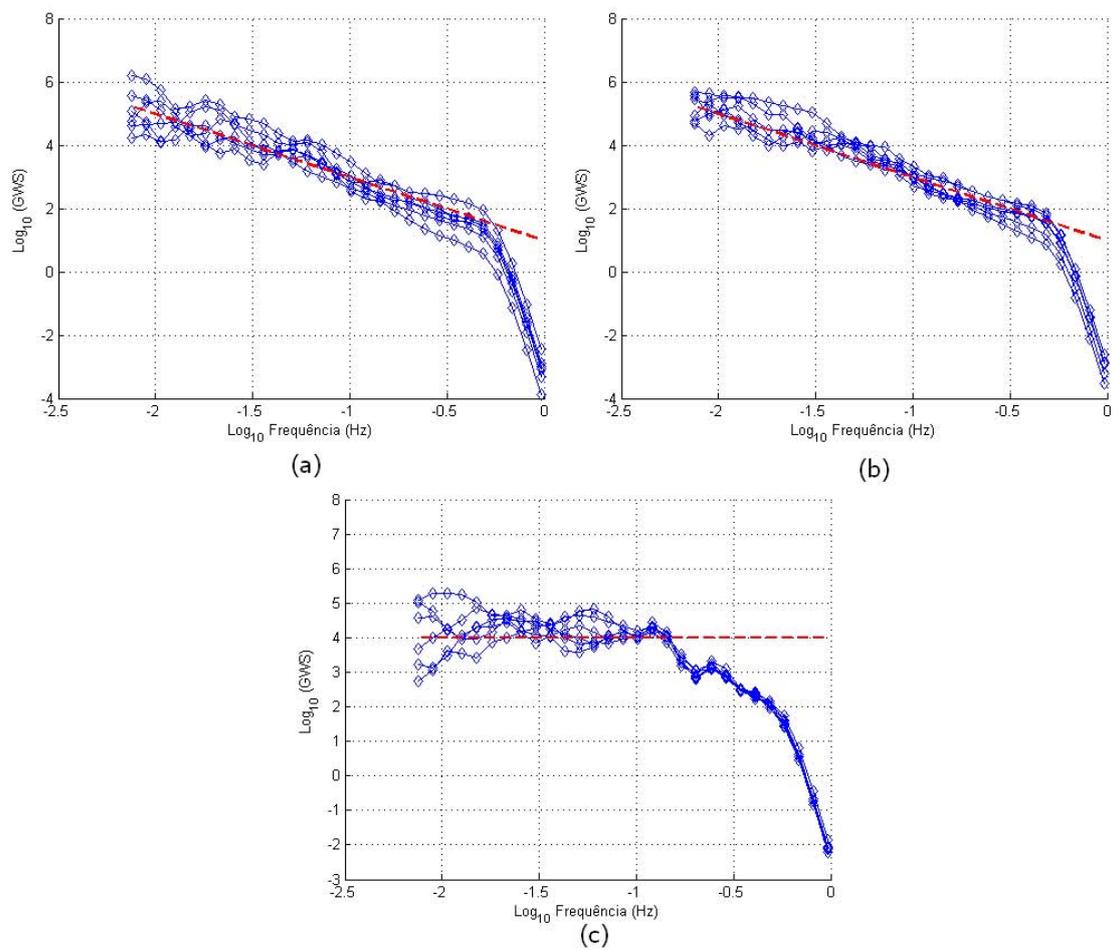


FIGURA 5.61 - GWS das posições nas direções (a) x , (b) y e (c) z .

(MALAMUD; TURCOTTE, 1999). Note que na direção z (Figura 5.61 (c)), o espectro desvia deste padrão, pois é fortemente influenciado pela profundidade limitada da camada granular e pela parede oscilante.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

É indiscutível a ubiquidade dos materiais granulares. A relevância de seu estudo é devido a todos os motivos apresentados ao longo dos capítulos desta dissertação. Por ser o primeiro trabalho nesta área na CAP/INPE, diversas dificuldades foram encontradas. O primeiro obstáculo foi o tempo despendido na procura de uma ferramenta computacional que simulasse de forma confiável a dinâmica desses materiais. Por se tratar de um pacote grande e complexo, o processo de instalação e implementação das simulações foi longo e trabalhoso. Assim, não podemos deixar de mencionar que um dos grandes resultados desta dissertação foi a criação de uma “cultura” local no estudo de fluidos granulares, em geral, e do pacote de simulação escolhido, em particular.

No plano computacional, esta dissertação ofereceu a oportunidade de trabalhar com uma ferramenta que se mostra poderosa, desenvolvida em um laboratório de grande renome (*Sandia National Laboratories*) e amplamente citada em inúmeros artigos. A manipulação da ferramenta, desde sua instalação, criação do executável até a execução do código propriamente dita, exigiu o aprendizado aprofundado do Sistema Operacional Linux e conhecimento básico em linguagem C. Diversos comandos do Linux/UNIX também foram utilizados no pós-processamento dos dados gerados nas simulações, bem como nas animações dos sistemas simulados.

No plano científico, concentramo-nos no estudo de duas configurações dentre as muitas possíveis em sistemas granulares. Na primeira, chamada de S1, 8000 partículas pequenas e uma grande são depositas em um recipiente retangular alto e estreito. Nesta configuração simulamos sob diferentes condições o fenômeno da segregação por tamanho, Efeito Castanha do Pará. Para o S2 o recipiente é bem maior e as partículas formam uma fina camada. Neste sistema investigamos a formação de padrões em camadas granulares osciladas verticalmente.

Nas simulações do S1, verificamos que o fenômeno de segregação é o resultado da combinação de mecanismos como empuxo e convecção. O empuxo depende principalmente do tamanho da partícula grande, enquanto a convecção está mais associada à dinâmica de agitação e a geometria do recipiente. Seja pela amplitude ou pela frequência de vibração, o sistema apresenta transições de um estado sólido para um

estado *fluidizado* através de sua energização. Inicialmente, verificamos a influência de diversos parâmetros sobre o efeito da segregação. Em relação ao diâmetro das partículas, o aumento da razão D/d beneficiou a segregação da partícula grande. Observamos uma sensibilidade em relação ao atrito na parede, pois na ausência deste atrito a partícula grande não tende ao topo e para valores menores a partícula sobe, mas o tempo de subida aumenta. Já para o atrito entre partículas, a dinâmica do sistema não muda muito, com exceção de $\mu_p = 0$, em que a partícula grande não tende a superfície.

Uma vez definidos os parâmetros chaves para o diâmetro e atrito, investigamos os parâmetros de vibração. Para “baixas” amplitudes o sistema apresenta aspectos de um fluido fortemente viscoso; não há formação de uma célula de convecção e a partícula grande tende ao topo lentamente apenas pelo efeito do empuxo. Em “altas” amplitudes o conjunto de partículas apresenta um aspecto fluidizado e fracamente turbulento; verificamos ainda a existência de uma célula de convecção menos regular. Para “baixas” frequências o conjunto de partículas se comporta quase como um sólido, ou seja, a energia inserida no sistema é insuficiente para promover o movimento relativo entre as partículas. Já para “altas” frequências verificamos uma fluidização das partículas apenas nas camadas superiores e a célula de convecção se torna irregular e intermitente, deixando de ser uma estrutura coerente no sistema. Para a amplitude e frequência intermediárias, a partícula grande segrega rapidamente, o que é resultado do empuxo e da convecção; para este caso a célula de convecção se encontra plenamente desenvolvida.

Nas simulações do S2, as partículas se deslocam em uma pequena região em torno de sua posição inicial. A dinâmica observada é essencialmente difusiva, do tipo movimento browniano, bem diferente da célula de convecção encontrada no S1. Para o S2 obtivemos apenas padrões “desordenados” com alguns quadrados, pentágonos e hexágonos isolados. Acreditamos que para se obter padrões como os observados na literatura, é preciso utilizar diversos valores para os parâmetros de vibração (frequência e amplitude), além de experimentar uma extensa combinação dos mesmos. Para o caso em que obtivemos os padrões mais significativos, $f = 0.25/t_0$ e $A = 3d$, ou $f^* = 0.13$ e $\Gamma = 0.75$, variamos a geometria e simulamos o sistema para $\mu_w = \mu_p = 0.00$ (ausência de atrito nas paredes e entre partículas). Tanto para a geometria retangular quanto a cilíndrica, os resultados obtidos foram os mesmos. Na ausência de atrito, o único padrão observado é o do tipo tira, encontrados em algumas regiões

do recipiente. Analisamos, também para este caso, a distribuição de velocidades de todas as partículas para quatro diferentes instantes, e o espectro de ondas global (GWS) para algumas partículas ao longo de toda a simulação. Observamos que as distribuições de velocidade empíricas desviam claramente da normal, o que indica a presença de correlações de longo alcance entre os grãos. Através da análise espectral observamos que as velocidades das partículas no S2 não têm memória. Já as posições no plano xy são a simples integração das velocidades correspondentes, e apresentam um espectro com uma inclinação (em escala log-log) de aproximadamente -2 , típica de um movimento browniano.

Finalmente, como linhas de pesquisa para trabalhos futuros sugere-se o estudo da influência de outros parâmetros sobre os sistemas granulares estudados (a aceleração da gravidade e a densidade das partículas, por exemplo), um estudo mais sistemático dos parâmetros já abordados nesta dissertação, e a simulação de outras configurações. Utilizamos neste trabalho a versão serial do código, porém existe uma versão paralela. Desta forma sugere-se o uso do código paralelizado a fim de obter um custo computacional menor, uma vez que o tempo computacional gasto nas simulações é bastante alto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALLIGOOD, K. T.; SAUER, T. D.; YORKE, J. A. **Chaos: an introduction to dynamical systems**. 2. ed. New York: Springer-Verlag, 1997. [98](#)
- AOKI, K. M.; AKIYAMA, T.; MAKI, Y.; WATANABE, T. Convective roll patterns in vertically vibrated beds of granules. **Physical Review E**, v. 54, n. 1, p. 874, 1996. [53](#)
- ARANSON, I. S.; TSIMRING, L. S. Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts. **Reviews of Modern Physics**, v. 78, n. 2, p. 641–692, 2006. [30](#), [33](#), [34](#), [39](#), [50](#), [51](#), [54](#), [55](#)
- BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality: An explanation of 1/f noise. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 4, p. 381–384, 1987. [35](#)
- _____. Self-organized criticality. **Physical Review A**, v. 38, n. 1, p. 364–374, 1988. [36](#)
- BELL, N.; YU, Y.; MUCHA, P. J. Particle-based simulation of granular materials. In: ACM SIGGRAPH/EUROGRAPHICS SYMPOSIUM ON COMPUTER ANIMATION, 2005, Los Angeles, California. **Proceedings...** New York, NY, USA: ACM Press, 2005. p. 77–86. ISBN 1-7695-2270-X. [59](#)
- BERNU, B.; MAZIGHI, R. One-dimensional bounce of inelastically colliding marbles on a wall. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 23, n. 24, p. 5745–5754, 1990. [39](#)
- BIZON, C.; SHATTUCK, M. D.; SWIFT, J. B.; MCCORMICK, W. D.; SWINNEY, H. L. Patterns in 3d vertically oscillated granular layers: Simulation and experiment. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 1, 1998. [50](#), [53](#), [68](#), [101](#)
- BLAIR, D. L.; KUDROLLI, A. Velocity correlations in dense granular gases. **Physical Review E**, v. 64, n. 5, p. 050301, 2001. [106](#)
- BREWSTER, R.; GREY, G. S.; LANDRY, J. W.; LEVINE, A. J. Plug flow and the breakdown of bagnold scaling in cohesive granular flows. **Physical Review E**, v. 72, n. 6, p. 061301, 2005. [63](#)
- BURTALLY, N.; KING, P. J.; SWIFT, M. R. Spontaneous air-driven separation in vertically vibrated fine granular mixtures. **Science**, v. 295, n. 5561, p. 1877, 2002. [45](#), [46](#)

CAMPANHARO, A. S. L. O. **Análise de sinais turbulentos na copa da floresta amazônica: em busca de comportamento caótico e estruturas coerentes**. 117 p. Dissertação de (Mestrado em Computação Aplicada) — Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos, 2005. (INPE-14604-TDI/1184). [94](#), [125](#), [128](#), [129](#), [130](#)

CHENG, X.; LECHMAN, J. B.; FERNANDEZ-BARBERO, A.; GREY, G. S.; JAEGER, H. M.; KARCZMAR, G. S.; MOBIUS, M. E.; NAGEL, S. R. Three-dimensional shear in granular flow. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 3, p. 038001, 2006. [63](#), [65](#)

CIAMARRA, M. P.; VIZIA, M. D. D.; FIERRO, A. Granular species segregation under vertical tapping: Effects of size, density, friction, and shaking amplitude. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 6, p. 058001, 2006. [45](#), [63](#), [65](#), [67](#)

D'ANNA, G.; MAYOR, P.; BARRAT, A.; LORETO, V.; NORI, F. Observing brownian motion in vibration-fluidized granular matter. **Nature**, v. 424, n. 6951, p. 909–912, 2003. [108](#), [109](#)

DING, M.; GREBOGI, C.; SAUER, E. O. and T.; YORK, J. A. Plateau onset for correlation dimension: when does it occur? **Physical Review Letters**, v. 70, n. 25, p. 3872–3875, 1993. [127](#)

DURAN, J. **Sands, powders and grains: an introduction to the physics of granular materials**. 1. ed. New York: Springer, 2000. [29](#), [31](#), [34](#), [36](#), [41](#), [43](#), [47](#), [48](#), [58](#)

DURAN, J.; RAJCHENBACH, J.; CLÉMENT, E. Arching effect model for particle size segregation. **Physical Review Letters**, v. 70, n. 16, p. 2431–2434, 1993. [45](#), [46](#)

ECKMAN, J. P.; KAMPHORST, O.; RUELLE, D. Recurrence plots of dynamical systems. **Europhysics Letters**, v. 4, p. 973–977, 1987. [98](#), [130](#)

FILHO, P. J. de F. **Introdução à modelagem e simulação de sistemas**. 1. ed. Florianópolis: Visual Books, 2001. [57](#)

GOLDHIRSCH, I. Rapid granular flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 35, p. 267–293, 2003. [30](#), [35](#), [39](#), [59](#)

GRASSBERGER, P.; PROCACCIA, I. Characterization of strange attractors. **Physical Review Letters**, v. 50, n. 5, p. 346–349, 1983. [96](#), [128](#), [129](#)

HCITASCA. **Distinct element modeling for micromechanical analysis of geomaterials and particulate systems in two and three dimensions**. 2005. Disponível em: <<http://www.itascacg.com/pfc.html>>. Acesso em: 11 mai. 2005. [61](#)

HENTSCHEL, H. G. E.; PROCACCIA, I. The infinite number of generalized dimensions of fractals and strange attractors. **Physica D**, v. 8, n. 3, p. 435–444, 1983. [127](#)

HONG, D. C.; QUINN, P. V.; LUDING, S. Reverse brazil nut problem: Competition between percolation and condensation. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 15, p. 3423, 2001. [45](#)

HUERTA, D. A.; RUIZ-SUÁREZ, J. C. Vibration-induced granular segregation: A phenomenon driven by three mechanisms. **Physical Review Letters**, v. 92, n. 11, p. 114301, 2004. [45](#), [47](#)

JAEGER, H.; KADANOFF, L.; KARZMAR, G.; MAZENKO, G.; NAGEL, S.; VENKATARAMANI, S. C.; WITTEN, T. **An introduction to granular physics**. 2006. Disponível em: <<http://jfi.uchicago.edu/~jaeger/granular2/introduction.html>>. Acesso em: 06 jan. 2006. [30](#), [45](#)

JAEGER, H. M. Sand, jams and jets. **Physics World**, v. 18, p. 34–39, 2005. [34](#)

JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 68, n. 4, p. 1259–1273, 1996. [29](#), [34](#), [35](#)

JANSSENS, K. G. F.; OLMSTED, D.; HOLM, E. A.; FOILES, S. M.; PLIMPTON, S. J.; DERLET, P. M. Computing the mobility of grain boundaries. **Nature Materials**, v. 5, n. 2, p. 124–127, 2006. [63](#)

KNIGHT, J. B.; JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. Vibration-induced size separation in granular media: The convection connection. **Physical Review Letters**, v. 70, n. 24, p. 3728–3731, 1993. [45](#), [46](#)

KOZICKI, J.; CHAREYRE, B.; OSZER, A.; GALIZZI, O. **YADE: yet another dynamic engine**. 2005. Disponível em:

<<http://yade.berlios.de/index.php?m=100>>. Acesso em: 11 abr. 2005. 61

KUDROLLI, A.; HENRY, J. Non-gaussian velocity distributions in excited granular matter in the absence of clustering. **Physical Review E**, v. 62, n. 2, p. R1489, 2000. 106

LANDRY, J. W.; GREY, G. S.; PLIMPTON, S. J. Discrete element simulations of stress distributions in silos: Crossover from two to three dimensions. **Powder Technology**, v. 139, n. 3, p. 233–239, 2004. 63

LANDRY, J. W.; GREY, G. S.; SILBERT, L. E.; PLIMPTON, S. J. Confined granular packings: Structure, stress, and forces. **Physical Review E**, v. 67, n. 4, p. 041303, 2003. 63

LOSERT, W.; COOPER, D. G. W.; DELOUR, J.; KUDROLLI, A.; GOLLUB, J. Velocity statistics in excited granular media. **Chaos**, v. 9, n. 3, p. 682–690, 1999. 106

MAKSE, H. A. Stratification instability in granular flows. **Physical Review E**, v. 56, n. 6, p. 7008, 1997. 48

MAKSE, H. A.; HAVLIN, S.; KING, P. R.; STANLEY, H. E. Spontaneous stratification in granular mixtures. **Nature (London)**, v. 386, n. 6623, p. 379, 1997. 48, 49

MALAMUD, B. D.; TURCOTTE, D. L. Self-affine time series: measures of weak and strong persistence. **Journal of statistical planning and inference**, v. 80, n. 1, p. 173–196, 1999. 111

MCNAMARA, S.; YOUNG, W. R. Dynamics of a freely evolving, two-dimensional granular medium. **Physical Review E**, v. 53, n. 5, p. 5089–5100, 1996. 40

MELO, F.; UMBANHOWAR, P. B.; SWINNEY, H. L. Transition to parametric wave patterns in a vertically oscillated granular layer. **Physical Review Letters**, v. 72, n. 1, p. 172–175, 1994. 51, 68

_____. Hexagons, kinks, and disorder in oscillated granular layers. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 21, p. 3838–3841, 1995. 52, 68

MIDI, G. On dense granular flows. **The European Physical Journal E**, v. 14, n. 4, p. 341–365, 2004. [37](#)

MOON, S. J.; SWIFT, J. B.; SWINNEY, H. L. Role of friction in pattern formation in oscillated granular layers. **Physical Review E**, v. 69, n. 3, p. 031301, 2004. [105](#)

OGATA, K. **Engenharia de controle moderno**. 2. ed. Rio de Janeiro: Prentice Hall do Brasil, 1993. [81](#)

OTTINO, J. M.; KHAKHAR, D. V. Mixing and segregation of granular materials. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 32, p. 55–91, 2002. [30](#), [43](#), [47](#), [48](#)

PACKARD, N. H.; CRUTCHFIELD, J. P.; FARMER, J. D.; SHAW, R. S. Geometry from a time series. **Physical Review Letters**, v. 45, n. 9, p. 712–716, 1980. [126](#)

PLIMPTON, S. **Pizza.py documentation**. Sandia National Laboratories, 2005. 283 p. Versão 01 out. 2006. Disponível em: <http://www.cs.sandia.gov/~sjplimp/pizza.html>. Acesso em: 01 out. 2006. [64](#)

PLIMPTON, S.; CROZIER, P.; THOMPSON, A. **LAMMPS documentation**. Sandia National Laboratories, 2006. 283 p. Versão 01 out. 2006. Disponível em: <http://lammeps.sandia.gov/doc/Manual.html>. Acesso em: 01 out. 2006. [61](#), [63](#), [66](#)

PÖSCHEL, T.; HERRMANN, H. J. Size segregation and convection. **Europhysics Letters**, v. 29, p. 123–129, 1995. [45](#), [72](#)

PÖSCHEL, T.; SCHWAGER, T. **Computacional granular dynamics**. 1. ed. Berlin: Springer, 2005. [30](#), [31](#), [38](#), [40](#), [58](#), [59](#), [60](#)

POULIQUEN, O.; DELOUR, J.; SAVAGE, S. B. Fingering in granular flows. **Nature**, v. 386, n. 6627, p. 816–817, 1997. [54](#)

ROSATO, A.; STRANDBURG, K. J.; PRINZ, F.; SWENDSEN, R. H. Why the brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking. **Physical Review Letters**, v. 58, n. 10, p. 1038–1040, 1987. [44](#), [45](#), [46](#)

- SCHÄFER, J.; DIPPEL, S.; WOLF, D. E. Force schemes in simulations of granular materials. **J. Phys. I**, v. 6, n. 1, p. 5–20, 1996. [38](#), [40](#)
- SHINBROT, T. Granular materials : the brazil nut effect - in reverse. **Nature**, v. 429, n. 6990, p. 352–353, 2004. [44](#), [45](#)
- SHINBROT, T.; MUZZIO, F. J. Reverse buoyancy in shaken granular beds. **Physical Review Letters**, v. 81, n. 20, p. 4365–4368, 1998. [44](#), [45](#)
- SILBERT, L. E.; ERTAS, D.; GREY, G. S.; HALSEY, T. C.; LEVINE, D.; PLIMPTON, S. J. Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology. **Physical Review E**, v. 64, n. 5, p. 051302, 2001. [38](#), [41](#), [42](#), [63](#), [65](#), [66](#)
- SILBERT, L. E.; GREY, G. S.; PLIMPTON, S. J.; LEVINE, D. Boundary effects and self-organization in dense granular flows. **Physics of Fluids**, v. 14, p. 2637–2646, 2002. [63](#)
- SOUZA, A. V. P. **Modelagem e análise não lineares de sinais respiratórios cardiovasculares**. 175 p. Dissertação de (Mestrado em Engenharia Elétrica) — Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2001. [129](#)
- SUN, J.; BATTAGLIA, F.; SUBRAMANIAN, S. Dynamic and structures of segregation in a dense, vibration granular bed. **Physical Review E**, v. 74, n. 6, p. 061304, 2006. [45](#), [63](#), [65](#), [81](#)
- SWINNEY, H. L.; RERICHA, E. C. Pattern formation and shocks in granular gases. In: THE INTERNATIONAL SCHOOL OF PHYSICS ENRICO FERMI, 2004, Amsterdam. **Proceedings...** Amsterdam: IOS Press, 2004. p. 1–34. [39](#)
- TAKENS, F. Detecting strange attractors in turbulence. In: RAND, D. A.; YOUNG, L. S. (ED.). **Proceedings of a symposium held at the university of warwick**. Berlin: Springer-Verlag, 1980. v. 898, p. 366–381. [126](#)
- UMBANHOWAR, P. B. Shaken sand - a granular fluid? **Nature**, v. 424, p. 886–887, 2003. [29](#)
- UMBANHOWAR, P. B.; SWINNEY, H. L. Wavelength scaling and square/stripe and grain mobility transitions in vertically oscillated granular layer. **Physica A**, v. 288, p. 344–362, 2000. [52](#), [68](#)

VANDU, C.; ELLENBERGER, J.; KRISHNA, R. **Vibration-induced granular segregation: the brazil nut and reverse brazil nut effects**. 2005. 1

fotografia, color. Disponível em:

<<http://www.science.uva.nl/research/cr/GranularSegregation/>>. Acesso em: 09 jan. 2007. 44

WOLF, A.; SWIFT, J. B.; VASTANO, J. A. Determining lyapunov exponents from a time series. **Physica D**, v. 16, n. 3, p. 285–317, 1985. 97, 98, 125, 129

APÊNDICE A

DESCRIÇÃO DAS TÉCNICAS UTILIZADAS NA ANÁLISE DE CARACTERÍSTICAS DINÂMICAS

Descrevemos aqui as técnicas utilizadas para a análise caótica, cujos resultados são apresentados na Seção 5.1.4. Os algoritmos das técnicas utilizadas a seguir foram disponibilizados por [Campanharo \(2005\)](#) e são decorrentes de um minucioso trabalho desenvolvido em sua dissertação.

Para as séries temporais consideradas, inicialmente calculamos a *função de autocorrelação*. Reconstruímos o espaço de fase através do *método dos atrasos temporais de Takens* e para isso foi preciso calcular o *atraso*, obtido a partir da função de autocorrelação, e a *dimensão de imersão*. Esta, por sua vez, foi obtida através da *dimensão de correlação*, que depende do cálculo da função de *correlação integral*. Foi feito ainda um teste de *estacionaridade* e calculado o *expoente de Lyapunov* através do algoritmo de [Wolf et al. \(1985\)](#). Por fim, aplicamos a técnica conhecida como *Mapas de Recorrência* (MR). Todas estas técnicas são descritas a seguir.

A.1 Função de Autocorrelação

Considere que a evolução de um sistema dinâmico pode ser representada por uma função $f(t)$, ou por uma sequência de medidas realizadas em intervalos de tempo regulares (Δt), dada por:

$$x_n = x(t_n), \quad t_n = n\Delta t, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (\text{A.1})$$

Assim, a função de autocorrelação da série temporal [A.1](#) é definida por:

$$A(\tau) = \frac{1}{N - \tau} \sum_{n=1}^{N-\tau} \frac{(x_n - \bar{x})(x_{n+\tau} - \bar{x})}{\sigma^2}, \quad (\text{A.2})$$

onde N é o número de pontos da série, \bar{x} é a sua média e σ^2 sua variância.

A função de autocorrelação mede o grau de dependência temporal de um sinal, ou seja, mede o grau de semelhança existente em um sinal à medida que o tempo evolui. Para sistemas caóticos $A(\tau) \rightarrow 0$ quando $\tau \rightarrow \infty$, isto é, a semelhança da série consigo mesma tende a diminuir com o passar do tempo até desaparecer

completamente. Vale ressaltar que $A(\tau)$ não é suficiente para a caracterização de uma dinâmica caótica determinística, pois a função de autocorrelação de um sinal multi-periódico com muitas frequências independentes e incomensuráveis, também se confunde com aquela de um sinal caótico, logo, é necessária a aplicação de outras ferramentas. Porém, a reconstrução do espaço de fase utiliza a função de autocorrelação para estimar o atraso τ . Um dos critérios para a escolha do passo correto é determinar o primeiro “zero” da função de autocorrelação e depois utilizar uma modesta fração deste valor.

A.2 Reconstrução do Espaço de Fase

Um método muito utilizado em análises de séries temporais caóticas é a *reconstrução do espaço de fase*. A idéia básica desta reconstrução está no fato de que a “história” de uma série temporal contém informações sobre variáveis de estado não observáveis e que podem ser usadas para determinar um estado presente. A partir da reconstrução do espaço de fase, dada pela evolução temporal de uma única variável de estado, o atrator caótico de um sistema dinâmico desconhecido pode ser reconstruído e ainda, quantidades invariantes do sistema como dimensão do atrator e expoentes de Lyapunov podem ser determinadas. Esta técnica é decorrente dos trabalhos de [Packard *et al.* \(1980\)](#) e [Takens \(1980\)](#).

Problemas constatados com o método de [Packard *et al.* \(1980\)](#) são evitados utilizando um procedimento proposto por [Takens \(1980\)](#). Considerando $x(t)$ uma variável de estado, Takens provou que no espaço de fase formado pelos eixos $x(t), x(t+\tau), x(t+2\tau), \dots, x(t+(m-1)\tau)$, onde m é a dimensão de imersão (*embedding dimension*) e τ o atraso (*time delay*), o atrator reconstruído é topologicamente equivalente ao atrator “real”, sobre o qual sabe-se apenas a evolução em tempo discreto da variável de estado x . Takens assumiu em sua prova que a série é formada por infinitos pontos e que não há ruído. Segundo ele, se essas condições são satisfeitas, as propriedades topológicas do atrator reconstruído são preservadas, e a reconstrução do mesmo pode ser feita com base na relação:

$$m \geq 2D_0 + 1, \tag{A.3}$$

onde D_0 é a dimensão de contagem de caixas do atrator associado. Esta condição é suficiente, porém não necessária. Desta forma, a dimensão do atrator reconstruído

pode obedecer a relação:

$$m \geq [D_0] + 1, \quad (\text{A.4})$$

onde $[]$ representa a parte inteira de um número real (DING *et al.*, 1993).

Pelo *método dos atrasos temporais de Takens*, a cada instante t_i , assinala-se o ponto de coordenadas $x(t_i), x(t_i + \tau), x(t_i + 2\tau), \dots, x(t_i + (m - 1)\tau)$ no espaço de imersão. Variando-se i de 1 até N , obtém-se a trajetória reconstruída. Supondo que $\vec{\xi}_\alpha$ represente a posição de um ponto no espaço de imersão no instante t_α , a trajetória reconstruída é formada pela seqüência:

$$\vec{\xi}_\alpha = (x(t_\alpha), x(t_\alpha + \tau), x(t_\alpha + 2\tau), \dots, x(t_\alpha + (m - 1)\tau)), \quad (\text{A.5})$$

com $\alpha = 1, \dots, M$. As constantes m, τ, N e M relacionam-se por $N = M + (m - 1)\tau$. Logo, para reconstruir o espaço de fase é necessário estimar o atraso τ e a dimensão de imersão m .

Como descrito anteriormente, o critério utilizado para estimar o atraso consiste em examinar a correlação entre os pares de pontos em função de seu tempo de separação, ou seja, após determinar o tempo do primeiro “zero” da função de autocorrelação, considera-se uma pequena fração deste valor.

Para o cálculo da dimensão de imersão, calcula-se primeiro a dimensão de correlação. Existe um conjunto infinito de dimensões generalizadas, D_q , que definem propriedades métricas ou probabilísticas de um atrator (HENTSCHEL; PROCACCIA, 1983). Deixe um atrator caótico ser coberto por $m(\epsilon)$ quadrados de lado ϵ , e seja M o número total de pontos observados no atrator. Então, a probabilidade de que um ponto se encontre no i -ésimo quadrado é obtida pela razão $p_i = M_i/M$, onde M_i é o número de pontos do atrator que se encontra no i -ésimo quadrado. O conjunto infinito de dimensões generalizadas é dado por:

$$D_q = \frac{1}{q - 1} \lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{\ln \sum_{i=1}^{m(\epsilon)} p_i^q}{\ln \epsilon}, \quad (\text{A.6})$$

onde q está relacionado as possíveis definições da dimensão. Quando $q = 0$, a relação A.6 produz a dimensão de contagem de caixas D_0 sobre o atrator. A dimensão de informação D_1 e a dimensão de correlação D_2 , são obtidas no limite da Equação A.6 quando q tende a 1 e 2, respectivamente. Em diversos sistemas, a dimensão de contagem de caixas D_0 e a dimensão de correlação D_2 são muito próximas uma

da outra. Assim, podemos utilizar o valor de D_2 no lugar de D_0 na relação A.4 (CAMPANHARO, 2005).

A dimensão de correlação utilizada em Campanharo (2005) foi proposta por Grassberger e Procaccia (1983) e é dada por:

$$D_2 = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log C(r)}{\log r}, \quad (\text{A.7})$$

onde $C(r)$ é a função de correlação integral, que calcula a frequência relativa de pares cuja separação é menor que a escala r :

$$C(r) = \frac{1}{M^2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^M \Theta \left(r - \left\| \vec{\xi}_i - \vec{\xi}_j \right\| \right), \quad (\text{A.8})$$

onde M é o número de pontos no atrator, $\| \cdot \|$ denota a norma euclidiana que quantifica a distância entre os pares de vetores em espaços de imersão arbitrários e $\Theta(x)$ é uma função degrau de Heavyside, definida por:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \geq 0 \\ 0, & \text{se } x < 0. \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Para calcular a dimensão de correlação D_2 , é preciso calcular a função de correlação integral $C(r)$ que por sua vez é definida a partir da distância entre pares de vetores da trajetória do atrator reconstruído. Logo, é necessário reconstruir o espaço de fase para as séries temporais a partir da Equação A.5. Como mencionado anteriormente, a reconstrução de Takens requer o passo τ e a dimensão de imersão m , que ainda não foi calculada. Uma estratégia é arbitrar valores para a dimensão de imersão e reconstruir a trajetória do atrator para cada uma dessas dimensões, ou seja, construir pseudo-fases. Consideramos, para as séries em estudo descritas na Seção 5.1.4, a dimensão de imersão até 5, assim as pseudo-fases variam de 1 a 5. Desta forma, foi possível calcular a função de correlação integral A.8 entre os pares de pontos reconstruídos.

Cada uma das curvas obtidas a partir da função de correlação integral para as cinco pseudo-fases, possui seções lineares cujos valores das inclinações, calculados via regressão linear, saturam ou não quando as dimensões de imersão são incrementadas. Caos determinístico, em geral, é identificado se a inclinação de $C(r)$ versus r , ou seja, se a dimensão de correlação D_2 , converge para um valor de saturação a medida que

a dimensão de imersão aumenta (GRASSBERGER; PROCACCIA, 1983). Este valor de saturação será a dimensão de correlação D_2 , e a partir da relação A.4, o valor da dimensão de imersão m pode ser estimado.

A.3 Estacionaridade

Após a estimativa da dimensão de imersão, foi realizado um teste de estacionaridade para as séries. O critério de estacionaridade utilizado por Campanharo (2005), emprega janela de dados deslizantes ao longo da série, ou seja, dada uma série temporal pode-se definir como janelas de dados deslizantes todos os subconjuntos de amostras subsequêntes possíveis de comprimento L . Testes que envolvem tais janelas analisam e quantificam as propriedades que se alteram ao longo da série temporal, como a média e variância, com base em um determinado intervalo de confiança. Desta forma, médias parciais ($m_{parcial}$) e variâncias parciais ($\sigma_{parcial}$) devem satisfazer as relações:

$$\begin{aligned} m_{total} - \sigma_{total} &\leq m_{parcial} \leq m_{total} + \sigma_{total} \\ \sigma_{total}^2 - \sigma_{total} &\leq \sigma_{parcial}^2 \leq \sigma_{total}^2 + \sigma_{total} \end{aligned}$$

onde m_{total} , σ_{total} e σ_{total}^2 são a média, desvio padrão e variância da série temporal respectivamente (SOUZA, 2001). Todas as séries respeitaram este critério de estacionaridade.

A.4 Expoentes de Lyapunov

A partir do atraso e da dimensão de imersão é possível obter, com base no algoritmo de Wolf *et al.* (1985), as aproximações numéricas dos maiores expoentes de Lyapunov associados a uma série temporal. O método proposto por Wolf *et al.* (1985) permite calcular com boa precisão o maior expoente de Lyapunov.

Considere uma trajetória descrita pela seqüência de pontos $y(t_0), y(t_1), y(t_2), \dots$ no atrator reconstruído. Seja $z_0(t_0)$ o vizinho no atrator reconstruído mais próximo de $y(t_0)$, e L_0 a distância entre $y(t_0)$ e $z_0(t_0)$, isto é, $L_0 = |y(t_0) - z_0(t_0)| < \varepsilon$, e desta forma, $z_0(t_0)$ está dentro da hipersfera de raio ε centrada em $y(t_0)$. Acompanha-se a evolução temporal de z_0 e y_0 até que num instante t_1 , a distância entre esses pontos (L'_0) exceda ε . Quando isto acontece, substitui-se z_0 por um novo vizinho, mais próximo de $y(t_1)$, que esteja na direção do segmento L'_0 e tal que $L_1 = |y(t_1) - z_1(t_1)| < \varepsilon$. O processo continua até que todos os pontos $y(t_i)$ tenham sido percorridos. O maior

expoente de Lyapunov positivo é obtido como a média de $\log_2(L'_i/L_i)$, ao longo da trajetória de referência, ou seja,

$$\lambda_1 = \frac{1}{t_M - t_0} \sum_{i=0}^{M-1} \log_2 \frac{L'_i}{L_i}, \quad (\text{A.10})$$

onde M é o número total de vezes que um novo vizinho é escolhido próximo a trajetória de referência. Mais detalhes do algoritmo se encontram em (CAMPANHARO, 2005).

A.5 Mapas de Recorrência

A representação gráfica bidimensional de uma matriz da forma:

$$R_{i,j} = \Theta(\epsilon - \|\xi_i - \xi_j\|), \quad i, j = 1, \dots, M \quad (\text{A.11})$$

é definida como MR e foi introduzida por Eckman *et al.* (1987). Desta forma, $\xi_i \in \mathbb{R}$ são vetores de dimensão m obtidos através da reconstrução do espaço de fase dada pela Equação A.5, ϵ é um valor limite pré-definido e Θ é uma função degrau de Heavyside (Equação A.9). Se a distância entre dois vetores ξ_i e ξ_j sobre a trajetória reconstruída for menor que ϵ , a função de Heavyside assume valor 1, e neste caso a posição (i, j) da matriz A.11 é representada por um ponto preto, caso contrário tal posição é representada por um ponto branco. Assim, através de Mapas de Recorrência é possível visualizar o comportamento de trajetórias no espaço de fase. Um MR também é capaz de mostrar todos os tempos no qual um estado de um sistema dinâmico se repete. Essa repetição de estados é uma característica de sistemas dinâmicos determinísticos, um comportamento típico em sistemas caóticos ou não-lineares (ECKMAN *et al.*, 1987).

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)

Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

Manuais Técnicos (MAN)

São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.

Notas Técnico-Científicas (NTC)

Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programa de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados, atlas, e documentação de projetos de engenharia.

Relatórios de Pesquisa (RPQ)

Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.

Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)

São propostas de projetos técnico-científicos e relatórios de acompanhamento de projetos, atividades e convênios.

Publicações Didáticas (PUD)

Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

Publicações Seriadas

São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Constam destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.

Programas de Computador (PDC)

São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. São aceitos tanto programas fonte quanto executáveis.

Pré-publicações (PRE)

Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.