



Lucas Mauricio Sigaud

**Estudos da Dinâmica de Materiais Granulares
Densos**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção Do título de Doutor em Física

Orientador : Prof. Welles Antonio Martinez Morgado
Co-Orientador: Prof. Geovan Tavares dos Santos

Rio de Janeiro
Junho de 2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



Lucas Mauricio Sigaud

**Estudos da Dinâmica de Materiais Granulares
Densos**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção Do título de Doutor em Física. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Welles Antonio Martinez Morgado

Orientador

Departamento de Física — PUC-Rio

Prof. Geovan Tavares dos Santos

Co-Orientador

Departamento de Matemática - PUC-Rio

Prof. Ney Augusto Dumont

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico — PUC-Rio

Rio de Janeiro, 16 de Junho de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Lucas Mauricio Sigaud

Possui graduação em Física pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (2002) e mestrado em Física pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (2005). Tem experiência na área de Física, com ênfase nas áreas de Física Atômica e Molecular e de Materiais Granulares, atuando principalmente nos seguintes temas: atmosfera, íons, colisões atômicas, materiais granulares e física estatística.

Ficha Catalográfica

Sigaud, Lucas Mauricio

Estudos da Dinâmica de Materiais Granulares Densos / Lucas Mauricio Sigaud; orientador: Welles Antonio Martinez Morgado; co-orientador: Geovan Tavares dos Santos. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Física, 2009.

v., 102 f: il. ; 29,7 cm

1. Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui referências bibliográficas.

1. Física – Tese. 2. Sistemas Granulares Densos. 3. Difusão Correlacionada. 4. Segregação Granular. 5. Bandas de Cisalhamento. 6. Arcos. 7. Processos Estocásticos. I. Morgado, Welles Antonio Martinez. II. Santos, Geovan Tavares dos. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. IV. Título.

CDD: 530

Aos Fiorentinos.
Aos meus irmãos, pais, avós, tios e amigos.
E especialmente à Tabitha, por tudo.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, à Tabitha por todo o amor, carinho, apoio, compreensão e, principalmente, paciência durante os últimos quatro anos, e por estar sempre ao meu lado - no matter what.

Ao meu orientador, Professor Welles Morgado, pela confiança e pelos ensinamentos. Pelas discussões, de Langevin a Kasparov, de Barack Obama a Halsey-Ertaş. Pelo exemplo.

Aos colaboradores do Departamento de Matemática da PUC-Rio, o doutorando Alex Laier Bordignon e os professores Hélio Lopes, Thomas Lewiner e Geovan Tavares, pelo trabalho e companheirismo.

Agradeço a toda a minha família, em especial meus pais, Glória e Geraldo, meus avós, Aldyr, Raimundo, Thereza e Vilma, e meus irmãos André e Marcelo.

À “gangue”, que sempre levarei comigo e que fazem de mim quem eu sou: Vini, Ju, Kmila, Julio, Troço, Lua, João, Bob, Rodrigo, Cadu, Mariana, Phils, Carol, Carlos, Natalia, Ian, Bruno e Touch.

Aos grandes amigos que me ajudaram a trilhar esse caminho: Flávia, Clara, Pedro, Ana, Renato, Diogo, Renata, Márcio, Samantha, Gabriel, Thiesen, Gustão, Cíntia, Dani, Bernardo, Bedois, Raíle, Dennis, Carina, Maria Fernanda, Pedro, Ricardo, Rodrigo Maier, Paulo, Rafael Coutinho, Rafael Fino, Leila, Paulinha, Fábio, César, FH, Thiago, Vanessa, Kelly, Mary, Eric, Jutta, Denis, Pat, Billy, Dipanwita, Jimena, Elisa, Marco, André Tavares, Luiza, Carol, Henrique, Mari, Thiago PES, Esther, Fernanda, Luana, Valéria, Jô, Zé, Homero...

Aos amigos e colaboradores do grupo de pesquisa do Laboratório de Colisões de Elétrons, da UFRJ: Natalia, Vitor, Ana, Faela, Toni, Wania, Hugo, Lúcia, Mansukh e, em especial, Eduardo Montenegro.

Aos Fiorentinos, pela constante inspiração e estímulo.

A todo o pessoal do OutraCoisa, principalmente os queridos Bruno, Eduardo e Sissi.

Aos Nicolettis e von Krügers, especialmente Marília e Pto, que me acolheram e se tornaram família.

A todos os colegas, professores, secretárias e funcionários do Departamento de Física, que contribuíram para o meu crescimento acadêmico.

Mais uma vez ao grande amigo Renato, pela disponibilização do computador no qual este trabalho foi redigido.

À FAPERJ e ao CNPq, pelas bolsas de estudo concedidas.

E, finalmente, a Sonia Rocha - simplesmente por existir.

Resumo

Sigaud, Lucas Mauricio; Morgado, Welles Antonio Martinez; Santos, Geovan Tavares dos. **Estudos da Dinâmica de Materiais Granulares Densos**. Rio de Janeiro, 2009. 102p. Tese de Doutorado — Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Materiais granulares, por sua enorme gama de aplicações industriais (da indústria alimentícia à astrofísica), vêm sendo cada vez mais estudados durante as últimas duas décadas. No entanto, muito da descrição física inerente ao comportamento deste tipo de material ainda elude os cientistas, tornando este um campo particularmente rico de investigação.

Dentre as questões insolutas, estão algumas de crescente interesse, como os mecanismos de fluxo e transporte de grãos, que descrevem fenômenos como a difusão correlacionada e a formação de bandas de cisalhamento, por exemplo. Através de modelos fenomenológicos e matemáticos, este trabalho visa melhorar a compreensão destes fenômenos e dos mecanismos por trás deles, em especial a participação fundamental dos arcos de forças formados pelos grãos.

Através de um modelo fenomenológico razoavelmente simples e de simulações computacionais, o papel dos arcos fica evidente ao se observar, nas simulações, o comportamento característico da formação de bandas de cisalhamento, reproduzindo resultados experimentais e previsões de modelos teóricos encontrados na literatura. Concomitantemente, foi desenvolvido um modelo matemático teórico para se descrever a difusão correlacionada de grãos, fenômeno que acreditamos estar baseado no mesmo princípio de transporte através dos arcos, reproduzindo o comportamento qualitativo de simulações computacionais.

Palavras-chave

Sistemas Granulares Densos. Difusão Correlacionada. Segregação Granular. Bandas de Cisalhamento. Arcos. Processos Estocásticos.

Abstract

Sigaud, Lucas Mauricio; Morgado, Welles Antonio Martinez; Santos, Geovan Tavares dos. **Studies on the Dynamics of Dense Granular Systems**. Rio de Janeiro, 2009. 102p. PhD Thesis — Department of Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Granular materials, due to their huge amount of industrial applications (from food industry to astrophysics), have been the object of an increasing number of studies throughout the last couple of decades. Much of the physical description concerning the behaviour of this kind of material, however, still eludes scientists, turning this field of research into a particularly rich one.

Among the unsolved questions in this area there are some of growing interest, such as the mechanisms of grains transport and flux, which describe phenomena like correlated diffusion and the formation of shear bands, for example. By means of phenomenological and mathematical models, this work tries to improve the understanding of these phenomena and the mechanisms behind them, particularly the fundamental role of arches of forces created by the grains.

Using a relatively simple phenomenological model and computer simulations, the role of arches becomes evident when it is observed, in the simulations, the characteristic behaviour of shear bands formation, reproducing experimental results and the predictions of theoretical models found in the literature. Simultaneously, a theoretical mathematical model was developed to describe granular correlated diffusion, a phenomenon we believe is based on the same principle of transportation by means of arches, reproducing the qualitative behaviour of computer simulations.

Keywords

Dense Granular Systems. Correlated Diffusion. Granular Segregation. Shear Bands. Arches. Stochastic Processes.

Sumário

1	Introdução	15
1.1	Materiais Granulares	15
1.2	Densidade Granular	17
1.3	Superfícies Granulares	19
1.4	Areia Fluida	21
1.5	Padrões formados por camadas vibrantes	24
1.6	Acondicionamentos Granulares	25
1.7	Arcos de Grãos	26
1.8	Difusão Granular	28
1.9	Este Trabalho	28
2	Arcos em Meios Granulares Densos	36
2.1	Introdução: Estresses	36
2.2	O Efeito do Estresse	36
2.3	Dinâmica Estocástica para Arcos	41
2.4	Arcos Ramificados	43
2.5	Modelo Computacional 2D	44
2.6	Modelo Computacional Tridimensional	54
2.7	Sumário	58
3	Difusão Correlacionada	67
3.1	Introdução: Difusão	67
3.2	A Equação de Difusão Correlacionada	78
3.3	Simulações	88
3.4	Discussão	91
4	Conclusão	95

Lista de figuras

- 1.1 Exemplo real de uma distribuição de tamanhos granulares retirado de uma aplicação industrial (2). 16
- 1.2 Reprodução da experiência proposta por Reynolds: uma garrafa plástica, cheia de areia e água, é deformada, fazendo o nível da água baixar. Quando a garrafa volta ao normal, o nível da água sobe novamente. 18
- 1.3 Modelo simples para dilatação (6). 19
- 1.4 Representação do Efeito Castanha-do-Pará. As imagens acima estão em ordem cronológica, da esquerda para direita, demonstrando que o grão maior (a esfera de isopor, indicada pela seta vermelha) “sobe” após o recipiente ser submetido a vibrações verticais. 20
- 1.5 Sistema de discos de mesmo tamanho a frações volumétricas (a) $\rho = 0.5628$, (b) $\rho = \rho_R = 0.7394$ e (c) $\rho = 0.8681$, obtidas por simulação numérica (9). 21
- 1.6 Perfil de uma pilha de grãos de açúcar. Nota-se claramente a concordância com o modelo teórico de Alonso *et al.* (11), particularmente com o arredondamento próximo à base do cone. 22
- 1.7 Padrões representativos em camadas granulares sob vibração vertical para várias frequências e amplitudes de vibração diferentes: (a) linhas, (b) quadrados, (c) hexágonos, (d) espirais, (e) interfaces e (f) “oscillons” (21). 25
- 1.8 “Oscillon” obtido em uma plataforma vibrando verticalmente por Umbanhowar *et al.* (21). 30
- 1.9 Seqüência de fotos de uma camada de mistura de bolinhas de cobre e sementes de papoula em uma cavidade sob vibrações horizontais (frequência de 12,5 Hz e amplitude de 2mm), nos instantes $t = 5, 10, 15, 30, 60$ e 360 minutos, em ordem da esquerda para direita, de cima para baixo (22, 23). 31
- 1.10 O mesmo conjunto de moedas confinado entre duas paredes de vidro paralelas sob diferentes Ψ 's (25). 32
- 1.11 Representação ilustrativa da transmissão desigual e, principalmente, não-linear de forças em uma pequena pilha de grãos, devido à formação de arcos. 32
- 1.12 Esquema de forças em um silo repleto de grãos. Pode ser observado na figura que as forças originadas acima de uma certa altura tendem a ser aplicadas nas paredes do silo, em vez de em sua base (32). 33

- 1.13 Experiência demonstrando o Efeito Janssen: em ordem cronológica, de cima para baixo, pode-se ver na coluna da esquerda o recipiente (que não encosta na balança) sendo preenchido por areia, enquanto a balança continua marcando o mesmo valor, pois o peso dos grãos é transmitido por meio de arcos de força para as laterais do recipiente. Na coluna da direita, após o recipiente ser retirado, permitindo que toda a areia se espalhe na balança, pode-se ver o medidor marcando o peso real da pilha de grãos. 34
- 1.14 Ilustração de como os grãos seriam transportados em um meio granular denso: cunhas de arcos, movendo-se com velocidade v , arrastariam o material granular enquanto as forças transmitidas fossem fortes o suficiente para mover os grãos e manter o arco intacto. 35
- 2.1 Uma ilustração do nosso arranjo experimental modelado. Dois cilindros concêntricos, de raios diferentes, entre os quais preenchemos de grãos, giram com velocidades fixas em sentidos opostos, induzindo o aparecimento de um cisalhamento no material granular em seu interior. 38
- 2.2 Esquema ilustrativo da banda de cisalhamento. Regiões com velocidades opostas, gerando uma região de velocidade zero no meio (hachurada na figura). 39
- 2.3 Foto da estrada A6187, na Inglaterra, próximo a Castleton. Cisalhamento do solo tornou-a destruída e impossível de se trafegar. 40
- 2.4 Ilustração do modelo computacional 2D. O espaço entre as células é apenas um recurso gráfico para facilitar a visualização das forças ao longo das bordas - ele não existe na simulação. 42
- 2.5 Um diagrama simples da ramificação dos arcos e suas forças (T) a intervalos regulares (L). 43
- 2.6 Imagens da simulação computacional. **a**, **b** e **c** mostram três estágios diferentes da simulação, respectivamente: nos estágios iniciais, onde as velocidades (representadas por flechas) estão todas distribuídas aleatoriamente ao longo do meio, à exceção das paredes (flechas vermelhas); em um estágio intermediário, onde podem ser vistas várias fileiras de células com velocidades orientadas da mesma forma; e no estado de equilíbrio, com quase metade dos grãos se movendo para um lado, e metade para o outro, com a banda de cisalhamento formada no centro. **d** mostra um zoom desta área central, onde a velocidade é distribuída aleatoriamente e o seu módulo é praticamente zero, resultando em uma banda de cisalhamento (56). 52
- 2.7 Gráficos dos perfis de velocidade (em módulo) e densidade para três configurações diferentes do modelo computacional simplificado: $F_1 = F_2$ (vermelho), $F_1 > F_2$ (verde) e $F_2 = 0$ (azul). É fácil ver a formação análoga a uma banda de cisalhamento no primeiro gráfico (de velocidade), enquanto o segundo mostra que a densidade dos grãos no interior das células se mantém razoavelmente constante em todo o sistema (56). 53

- 2.8 Gráficos dos perfis de magnitude da velocidade (primeira coluna) e densidade (segunda coluna) para três diferentes configurações do modelo computacional completo, de cima para baixo, respectivamente: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. As linhas coloridas diferentes representam configurações diferentes dos parâmetros da simulação (56). 59
- 2.9 Gráficos dos perfis de velocidade (em módulo) média e densidade média (primeira e segunda colunas, respectivamente) para três diferentes configurações do nosso modelo computacional completo, respectivamente de cima para baixo: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. Os perfis acima representam médias feitas sobre todas as configurações de parâmetros testadas. É fácil perceber a formação da banda de cisalhamento - em todos os três casos - na primeira coluna, enquanto a segunda mostra que não há formação de aglomerado e que a densidade das células se mantém constante através do meio (56). 60
- 2.10 Acima, representação do experimento a ser simulado, em 3 dimensões. Abaixo, ilustração do experimento conduzido por Fenistein *et al.* (49, 50). É bastante similar ao experimento modelado, como pode ser visto acima, mas com alturas menores do cilindro e com grãos o preenchendo completamente. R_S representa aqui o raio do disco girante da base. 61
- 2.11 Gráficos obtidos por Török *et al.* (51, 52) para modelar os experimentos realizados por Fenistein *et al.* (49, 50). Nele está disposta a variação do raio da banda de cisalhamento com a sua altura. Abaixo, olhando o gráfico original de lado (tomando r/R_s como base), pode-se ver o formato do perfil da banda de cisalhamento sendo delineado pelas linhas do mesmo. 62
- 2.12 Célula 3D cúbica. Cada borda é identificada por um código de duas letras. 63
- 2.13 Imagens da simulação com o sistema em equilíbrio. Nota-se claramente o domo colapsado nas imagens de cima (onde as setas representam a velocidade dos grãos), conforme modelo de Török (51). As imagens inferiores mostram o diagrama de forças horizontais com dois cortes em alturas diferentes, onde percebe-se a formação de vórtices. 64
- 2.14 Resultados observados para preenchimentos H rasos (com $H < R$) e profundos (com $H > R$). Os resultados obtidos por Fenistein (49) são reproduzidos para o cilindro raso, bem com as previsões teóricas de Török (51) para os dois casos. Nota-se claramente na comparação entre as áreas coloridas a diferença do formato da banda de cisalhamento de um caso para outro. 65
- 2.15 Imagem do sistema em equilíbrio para o caso $r > R/2$, onde em vez de colapsar para o centro do cilindro, o colapso da banda de cisalhamento ocorre em direção às paredes, onde os coeficientes de atrito cinético e estático são nulos, o que é coerente com a mínima dissipação (51, 52). 66

- 3.1 Descrição satírica do movimento browniano como o andar de um cavalheiro bêbado (62). 69
- 3.2 Segregação granular em um fluxo inclinado gerado pela gravidade (75), em instantes diferentes de tempo (consecutivos de a a d). 74
- 3.3 Diagrama espaço-tempo de segregação granular em um longo cilindro girante, demonstrando segregação oscilatória por tamanho. No experimento acima, $2400s$ equivalem a 1850 revoluções. As bandas negras correspondem a areia preta ($45 - 250\mu m$) e as brancas a sal de cozinha ($300 - 850\mu m$) (78). 75
- 3.4 Diagramas espaço-tempo demonstrando oscilações de bandas iniciais e o engrossamento das mesmas com o tempo (81), modelando o experimento de Choo (78). 76
- 3.5 Exemplos de campos de velocidades obtidos por Baran *et al.* (44) no plano xy para as camadas de superfície a ângulos de 21 e 23 graus (figura da esquerda e direita, respectivamente), com $h/d = 20$ e $\delta t/\tau_0 = 1$ (onde δt é o *time-step* e τ_0 é o tempo característico $\tau_0 = \sqrt{d/g}$). O movimento correlacionado é claramente observado, em especial a $\theta = 21$. 78
- 3.6 Gráfico da transformada de Fourier da distribuição escolhida para o modelo-teste, com os três picos indicados pelas setas. Nota-se também a evolução com o tempo, mostrando que o pico central permanece constante enquanto os laterais diminuem, em processo difusivo. 86
- 3.7 Gráfico da distribuição granular, a partir de uma distribuição inicial delta, para passos sucessivos de tempo, representado pela numeração da seqüência, à direita. É evidente que o centro da distribuição não permanece em zero, mas varia com o tempo, demonstrando uma influência clara da correlação, enquanto o pico da distribuição vai diminuindo e alargando, indicando um processo difusivo. 89
- 3.8 Gráfico da evolução temporal da média, a partir de uma distribuição inicial delta - o deslocamento em relação ao zero demonstra que este não é um processo difusivo usual. 90
- 3.9 Gráfico da evolução temporal da variância, a partir de uma distribuição inicial delta, incluindo um ajuste linear - o crescimento linear com o tempo é típico de um processo difusivo, verificando a validade da simulação. 91
- 3.10 Gráfico da variação do módulo da transformada de Fourier em $q = \pm k$ com o tempo, que apresenta um decaimento linear. Está disposto também ajuste linear razoável para o decaimento linear ($R^2 = 0,9955$). 92
- 3.11 Gráfico da variação do módulo da transformada de Fourier em $q = \pm k$ com o tempo, mas com um passo de tempo maior que na Figura 3.10. O ajuste linear neste caso mostra maior precisão ($R^2 = 0,9995$), mostrando que as oscilações em torno da reta de ajuste tornam-se desprezíveis com a passagem do tempo. 93

3.12 Gráfico da variação do módulo da transformada de Fourier em $q = \pm k$ com o tempo, para dois valores diferentes da razão $\frac{\psi_0}{\psi_{10}}$, com $\psi_0^B = \psi_0^A$ e $\psi_{10}^B = \frac{1}{2}\psi_{10}^A$. Pelos ajustes para A ($y = -0,008x + 0,988$) e para B ($y = -0,016x + 0,948$), nota-se claramente que o ajuste linear denota processos difusivos correlacionados, ao contrário do esperado para uma difusão usual, onde não deveria haver variação.

The time will come when diligent research over long periods will bring to light things which now lie hidden. A single lifetime, even though entirely devoted to it, would not be enough for the investigation of so vast a subject... And so this knowledge will be unfolded only through long successive ages. There will come a time when our descendants will be amazed that we did not know things that are so plain to them... Many discoveries are reserved for ages still to come, when memory of us will have been effaced. Our universe is a sorry little affair unless it has in it something for every age to investigate... Nature does not reveal her mysteries once and for all.

Seneca, *Natural Questions* - Book VII.

1

Introdução

1.1

Materiais Granulares

Material granular (a areia é o exemplo clássico, mas a definição engloba desde sal e bolinhas de chumbo e soja até asteróides) é um sistema de diversos grãos macroscópicos. O tamanho de um grão genérico pode ser, dependendo das dimensões do sistema, de vários metros de diâmetro (caso de asteróides) a alguns microns. Materiais granulares podem ser encontrados em astrofísica (no caso mencionado acima), em geofísica, na medicina e, claro, na cozinha (açúcar, sal, arroz).

Assim sendo, há diversas aplicações industriais para estes tipos de materiais - como exemplos podemos citar mineração, transporte e armazenamento de alimentos (como soja e arroz), indústria farmacêutica (pílulas e granulatos), cerâmicas, catalisadores e pós (com aplicações diversas na indústria química), etc. Isto sem mencionar exemplos de materiais granulares em fluidos, na forma de suspensões, sedimentos, lamas, etc. Não à toa, materiais granulares são, depois da água, o tipo de material mais manipulado na indústria (1).

Primeiramente, temos que definir o que são materiais granulares. Os grãos, individualmente, são tipicamente rígidos e podem ter densidades, formatos, tamanhos e rugosidades diferentes entre si. Misturas reais são caracterizadas por uma distribuição de tamanhos, o que pode ser observado na Figura 1.1, onde uma larga distribuição de tamanhos pode ser vista (2). Um dos efeitos mais conhecidos da matéria granular, mas que ainda é objeto de intensa discussão e pesquisa, é o efeito Castanha-do-Pará (*Brazil-Nut Effect*), onde, em um sistema de grãos idênticos, um grão maior é inserido no meio, e mediante vibrações verticais o grão maior “sobe” até a superfície da pilha, segregando-se dos demais (3).

É possível haver interações entre os grãos. Na região de contato entre grãos, forças de van der Waals são encontradas facilmente, as quais se tornam relevantes quando o diâmetro do grão é inferior a $80\mu m$, aproximadamente. Da mesma forma, o ar geralmente tem um grau de humidade considerável, e se a

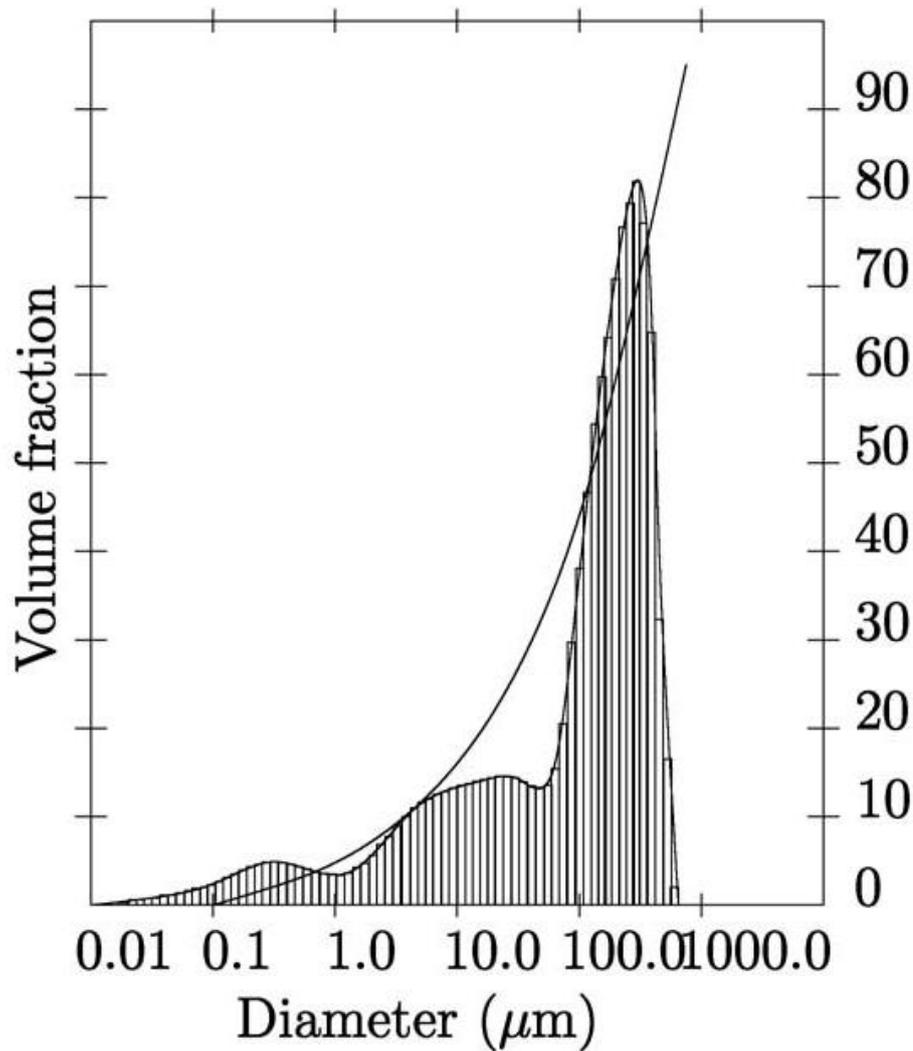


Figura 1.1: Exemplo real de uma distribuição de tamanhos granulares retirado de uma aplicação industrial (2).

superfície dos grãos são hidrofílicas, filmes de água podem cobri-los e se juntar nas regiões de contato, criando tensões superficiais que podem manter os grãos unidos. Essas forças atrativas, chamadas globalmente de coesão, também se tornam relevantes abaixo de um certo tamanho granular, que depende do grau de humidade do ar. Para humidade do ar em torno de cinquenta por cento e esferas de vidro, essas forças começam a aparecer tipicamente entre 80 e $100\mu m$.

Além dessas forças atrativas, há também o surgimento de forças eletrostáticas repulsivas em decorrência de distribuições de cargas nas superfícies dos grãos devido ao atrito. Essas forças podem ser altamente relevantes para certos tipos de meios granulares, como grãos de latex.

O parâmetro mais importante na caracterização do comportamento de um sistema granular é a sua densidade - é ela que define o estado físico

do material granular observado. Matéria granular solta pode se comportar como um fluido, e.g. escoando em uma ampulheta, enquanto “pacotes” densos se comportam como um sólido. Tanto materiais granulares compactados ou fluidizados têm a sua própria “física” e efeitos próprios surpreendentes. O caso de densidades intermediárias, no qual o material granular pode mudar do estado fluido para o sólido (e vice-versa), como no caso particular das avalanches, é ainda mais rico e difícil de ser compreendido.

1.2

Densidade Granular

Um dos pioneiros na pesquisa de meios granulares foi Osborne Reynolds. Em seu último trabalho (4), de 1885, ele tentou descrever praticamente todo fenômeno físico envolvendo materiais granulares através da interação de esferas duras, introduzindo inclusive o conceito de dilatância (5), um efeito observado por qualquer um que já tenha caminhado na areia molhada de uma praia: quando pressionamos o pé com força na areia, um contorno seco surge ao redor dele. Poderia-se imaginar, ingenuamente, que a pressão do pé iria, ao invés disso, produzir um buraco na areia que se encheria de água, mas não. Reynolds propôs então um experimento no qual uma garrafa elástica (de plástico, por exemplo), cheia de areia e água, é deformada. Esta pressão faz o nível de água no interior da garrafa diminuir, em vez de aumentar, como pode ser observado na Figura 1.2, abaixo. A razão física para este fenômeno é que os grãos estavam empilhados de forma tão densa antes (densidade acima da densidade de Reynolds ρ_R), que para um grão se mover em relação a outro, ele precisa ser separado de uma certa distância primeiro. Com isso, os grãos, que são essencialmente rígidos, afastam-se ligeiramente uns dos outros, e a água passa a ocupar este espaço aberto, diminuindo o seu nível.

Isso pode ser explicado pelo espaço intersticial entre os grãos (que gera a dilatância), existente mesmo quando eles estão em seu maior estado de compactação, como pode ser observado no modelo bidimensional simples da Figura 1.3, abaixo (6). Dados o comprimento vertical h_V e o comprimento horizontal h_H do paralelogramo da Figura 1.3, a área do mesmo será $S = \frac{1}{2}h_V h_H$. Portanto, uma vez que a soma das áreas dos círculos no interior do paralelogramo correspondem à área de um único grão circular de raio R , a área intersticial não ocupada pelos grãos será $S_{int} = S - \pi R^2$, que varia com o ângulo θ do paralelogramo - ou seja, com a compactação da pilha.

Outro efeito interessante observado em materiais granulares é o efeito Castanha-do-Pará, onde, por meio de vibrações verticais em um acondicionamento granular, um grão maior localizado próximo à base da pilha é levado



Figura 1.2: Reprodução da experiência proposta por Reynolds: uma garrafa plástica, cheia de areia e água, é deformada, fazendo o nível da água baixar. Quando a garrafa volta ao normal, o nível da água sobe novamente.

gradativamente para cima, até chegar à superfície de mesma (7), como ilustrado na Figura 1.4.

Esse acondicionamento granular denso também pode ser observado em outro experimento extremamente simples. Enchendo-se um tubo com areia, pode-se enfiar um lápis nele, e depois retirá-lo com facilidade. No entanto, se após enfiar o lápis no tubo, alguém bater algumas vezes de leve nas paredes do tubo, a compactação dos grãos prende o lápis de tal forma em seu interior que não apenas não é mais fácil retirá-lo, mas o tubo inteiro pode ser levantado pelo lápis.

A densidade, na verdade, controla todo o comportamento mecânico do material granular. A Figura 1.5, abaixo, mostra simulações computacionais (8, 9) de um sistema de discos de mesmo tamanho a densidades diferentes. Quanto mais denso o meio, percebe-se o surgimento de estruturas ordenadas, típicas de sistemas a altas densidades (maiores que ρ_R), particularmente em duas dimensões. Neste regime, muitos efeitos interessantes ocorrem devido à inelasticidade das colisões.

A forma mais simples de se caracterizar a dissipação que ocorre em uma colisão inelástica é através do coeficiente de restituição r , que é, essencialmente,

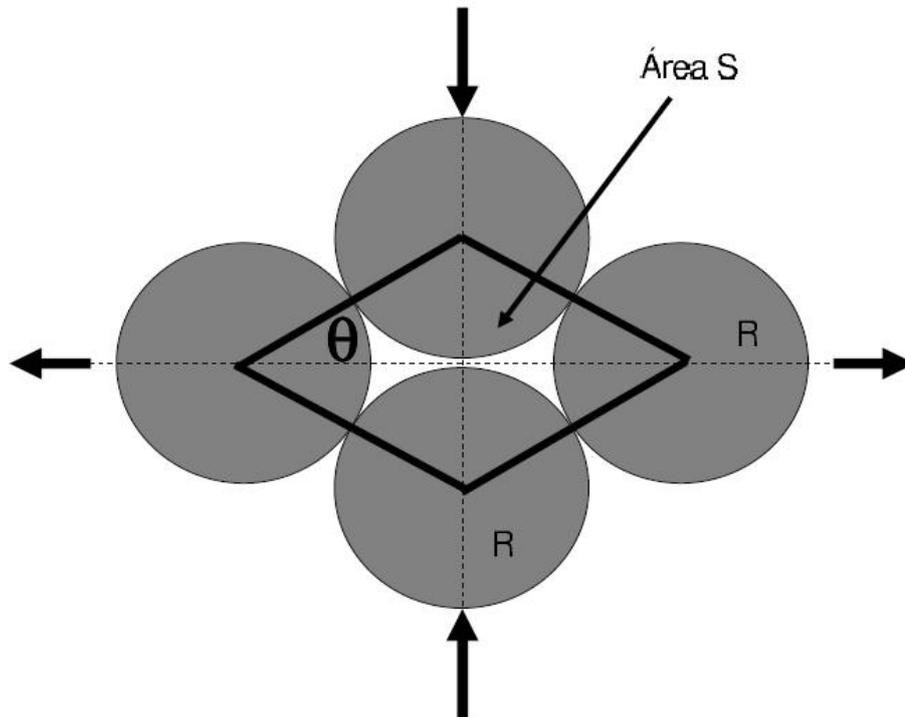


Figura 1.3: Modelo simples para dilatação (6).

uma função do material. Ele caracteriza a quantidade de perda de energia em uma colisão e vai de zero a um, onde zero é o caso perfeitamente inelástico e um o perfeitamente elástico. A dissipação introduz uma escala de comprimento característica em um sistema granular, a saber a distância onde a energia decai por um fator $1/e$, uma vez que o coeficiente de restituição multiplicativo implica em uma relaxação exponencial.

1.3 Superfícies Granulares

Quando um determinado material granular é solto de um recipiente sobre uma superfície, uma pilha (cônica) é formada. Se a superfície for uma mesa circular, e o material for despejado em seu centro, após um tempo toda a mesa será coberta, e o material granular vai deslizar pela superfície do cone formado e “escorrer” da mesa. O cone é caracterizado por um ângulo máximo chamado ângulo de repouso Θ_R , o qual é uma propriedade do material (10). Este ângulo de repouso é tipicamente da ordem de $25 - 35^\circ$ para areias e $10 - 15^\circ$ para bolinhas de vidro. Sua dependência é principalmente com o formato e rugosidade dos grãos e com a humidade do ar.

O interessante é que se a mesa tiver o formato de um quadrado, será formada uma pirâmide, com cada lado tendo, novamente, um ângulo Θ_R .

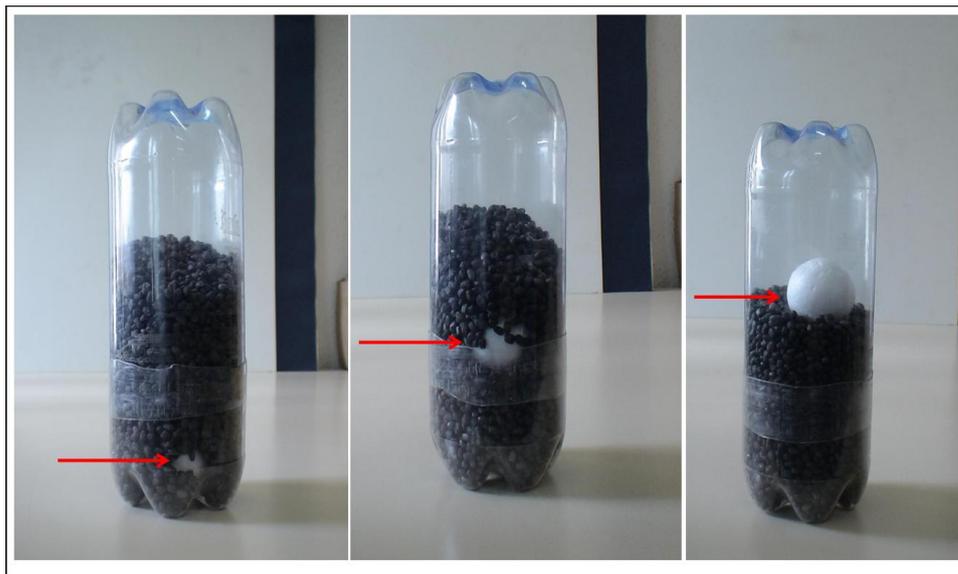


Figura 1.4: Representação do Efeito Castanha-do-Pará. As imagens acima estão em ordem cronológica, da esquerda para direita, demonstrando que o grão maior (a esfera de isopor, indicada pela seta vermelha) “sobe” após o recipiente ser submetido a vibrações verticais.

Ainda, se o material for despejado em um ponto deslocado do centro, um cone irá surgir até que sua base atinja a borda mais próxima da mesa. Então, o máximo da pilha irá se mover lentamente para fora da mesa e os grãos despejados subsequentemente irão escoar diretamente para além da borda. Antes de uma pilha atingir a borda da mesa, sua base não é perfeitamente cônica, pois uma fraca trilha formada por grãos que rolaram da pilha pode ser vista.

Um ângulo similar ao ângulo de repouso pode ser observado em um plano inclinado granular, no qual uma caixa cheia de material granular é inclinada até que os grãos comecem a se mover. Então, uma avalanche aparece, a qual, sendo de massa finita, vai mudar ligeiramente o ângulo da superfície granular. O ângulo imediatamente antes do início da avalanche (ou seja, o ângulo crítico de estabilidade da superfície granular) é chamado de ângulo de “estabilidade máxima” Θ_s . O ângulo após a avalanche é próximo de Θ_R , com uma diferença de alguns poucos graus (muitas vezes em torno de 1°).

Uma das grandes questões teóricas em aberto na área de estudo de materiais granulares é como obter, das propriedades dos grãos, o ângulo de repouso. Alguns modelos simples já existem, em geral construindo-se uma pilha adicionando grão a grão, que podem dar uma idéia dos ingredientes essenciais (11). Baseando-se apenas em propriedades granulares (como diâmetro, coeficiente de restituição e massa) e em um parâmetro de relaxação Γ , Alonso *et al.* con-

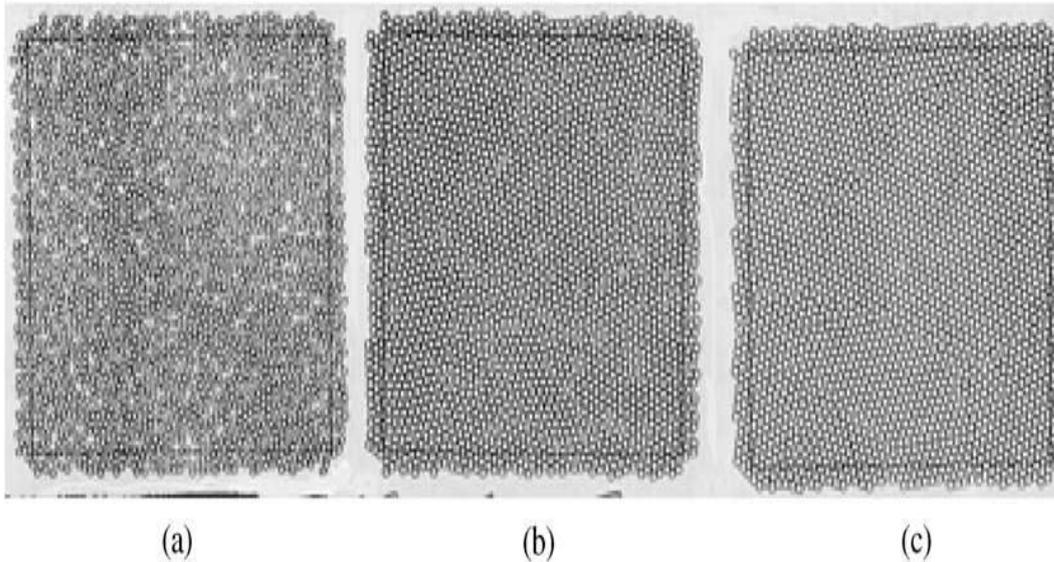


Figura 1.5: Sistema de discos de mesmo tamanho a frações volumétricas (a) $\rho = 0.5628$, (b) $\rho = \rho_R = 0.7394$ e (c) $\rho = 0.8681$, obtidas por simulação numérica (9).

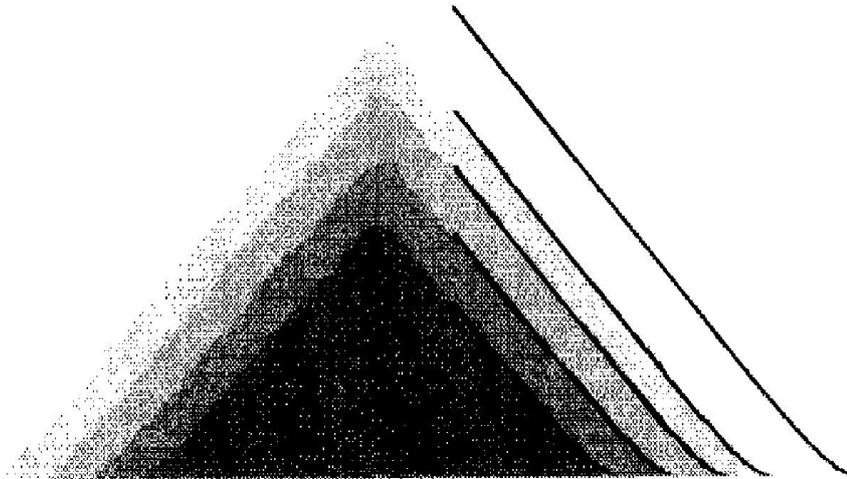
seguem resultados bastante bons, que podem ser vistos na Figura 1.6, abaixo, com apenas um parâmetro de fitting.

Também é interessante notar que a avalanche denota uma das características mais fundamentais de materiais granulares, a saber: que ele pode se comportar tanto como sólido quanto como fluido, às vezes com ambos os estados coexistindo em um mesmo sistema (12). No exemplo acima, a pilha de areia, em si, comporta-se como uma massa sólida, fixa e rígida, enquanto os grãos que deslizam por sobre a superfície granular comportam-se como fluido, “escoando” como um líquido o faria. Mais curioso ainda é quando executa-se o descrito no experimento da caixa inclinada - neste caso, parte da areia localizada nas camadas superiores, em “estado sólido”, transforma-se em areia no “estado fluido”, saindo da pilha e escorrendo pela superfície.

1.4

Areia Fluida

A areia fluindo pela parte mais estreita de uma ampulheta, ou “saltando” em um uma placa vibrante, é fluidizada no sentido que ela se move analogamente a um fluido. A fase fluida granular ocorre para sistemas com densidades inferiores à densidade crítica de Reynolds ρ_R . Bagnold foi o primeiro a introduzir o conceito de viscosidade η para fluxos de areia, em 1954, e encontrou empiricamente a lei de Bagnold ($\eta \propto v$, onde v é a velocidade de cisalhamento em si - diferentemente de $\eta \propto C$, onde C é uma constante, caso este de fluidos



(a)

Figura 1.6: Perfil de uma pilha de grãos de açúcar. Nota-se claramente a concordância com o modelo teórico de Alonso *et al.* (11), particularmente com o arredondamento próximo à base do cone.

newtonianos como água ou ar) (10).

Na década de oitenta, uma teoria cinética de gases foi desenvolvida no contexto de sistemas granulares por Savage e Jenkins (13). Ela descreve meios granulares agitados no *framework* da dinâmica de fluidos, com uma única adição importante - um termo de dissipação nas equações de fluxo de energia. A forma clássica de se obter equações de movimento contínuas para um fluido a partir das leis de conservação locais dos números de moléculas, momento e energia faz um certo número de suposições. Em primeiro lugar, o “limite contínuo” tem de existir, i.e., quando o número de moléculas se torna infinito ou os seus tamanhos e as distâncias entre eles vai a zero, um resultado único e independente dos detalhes do procedimento tem de ser obtido. Tem que se supor também que um elemento de volume representativo pode ser criado, i.e., que uma pequena caixa de volume l^3 pode ser definida contendo uma quantidade de moléculas N_e tal que a média de densidade, momento e energia dessas moléculas sejam representativas dessa região. Médias sobre elementos volumétricos vizinhos devem dar resultados muito similares: ou seja, o sistema deve ser homogêneo quando olhando para ele com uma resolução l . O tamanho da caixa l^3 também deve ser suficientemente pequeno para que eventuais gradientes de velocidades ou densidades macroscópicas sejam desprezíveis em seu interior. Em outras palavras, as flutuações estatísticas entre os valores

médios de células vizinhas têm que ser pequenas, mas não menores que as variações sistemáticas nos valores médios de cada célula. Para um fluido, um milímetro cúbico (que é hoje a precisão experimental acessível) para medidas de campos de velocidades contém em torno de 10^{20} moléculas, o que dá excelentes médias. Para a areia, um milímetro cúbico contém entre um e cem grãos, o que é claramente insuficiente para atender às condições acima.

E em cima disso, há ainda o problema que a dissipação introduz naturalmente gradientes altos nas energias médias. Considere uma cadeia de n grãos de diâmetros δ e aplique uma força instantânea em um dos lados, a fim de injetar uma certa energia no sistema. A cada colisão, apenas uma fração r da energia é transmitida, tal que no n -ésimo grão apenas uma fração r^{n-1} da energia inicial é recebida. O decaimento de energia ao longo de uma cadeia deste tipo é, portanto, exponencial:

$$e(x) = e^{\frac{x}{\delta} \ln r} = e^{-\frac{x}{l_1}},$$

onde $l_1 = -\delta / \ln r$ é o comprimento de dissipação característico, i.e., a distância na qual a energia cai a $1/e$ devido à dissipação. Para bolas de aço ($r = 0.95$) este valor é $l_1 \approx 20\delta$, enquanto para bolas de vidro ($r = 0.7$), $l_1 \approx 3\delta$. Logo, o maior elemento volumétrico representativo tem que atender à condição $l < l_1$, o que também limita a precisão.

Essas são algumas das dificuldades encontradas ao se tentar lidar com a teoria cinética de gases em ambientes de sistemas granulares.

Outro conceito importante ao se lidar com fluidos granulares é a temperatura granular, que pode ser definida como

$$T_g = \frac{1}{2} \rho u^2, \quad (1-1)$$

onde ρ é a densidade e u representa as flutuações de velocidade dentro de um elemento volumétrico representativo (que possuem média $\langle u \rangle = 0$). O uso do conceito de temperatura granular causa um problema fundamental à termodinâmica. Uma das formas de colocar a temperatura granular em um *framework* consistente é considerar as flutuações no fornecimento e na subsequente dissipação de energia como um banho térmico, definindo um tipo de ensemble canônico, que parece ser razoável enquanto as flutuações de energia sigam uma distribuição de Maxwell-Boltzmann (14).

Para fluidos moleculares, o movimento térmico é muito mais rápido que a velocidade de fluxo \vec{v} do fluido, de forma que a aproximação adiabática, separando-se graus de liberdade rápidos e lentos, pode ser feita. Para meios granulares, \vec{u} e \vec{v} são da mesma ordem de grandeza porque o movimento “térmico” é causado pela velocidade do fluxo e vai a zero, devido à dissipação,

quando o fluxo para. No caso de gases granulares, esse “resfriamento” pode levar ao surgimento de aglomerados granulares, cuja dinâmica foi estudada recentemente (15, 16). A origem física desses aglomerados é fácil de ser entendida: imagine que dentro de um estado perfeitamente homogêneo tenha em algum lugar específico uma pequena perturbação (i.e., uma densidade ligeiramente mais alta). Conseqüentemente, neste lugar irão ocorrer mais colisões e, logo, mais dissipação. Localmente, a temperatura e a pressão irão decair. Devido ao gradiente de pressão resultante, mais partículas fluirão para esta região, aumentando ainda mais a sua densidade. Uma vez que regiões densas se tornam cada vez mais densas, isto leva ao surgimento de aglomerados. Isto ocorre com frequência em sistemas de poeira interplanetária (17).

Desta forma, é fácil perceber que, para atingir um estado de equilíbrio com temperatura granular diferente de zero, o sistema precisa ter energia sendo injetada nele constantemente.

1.5

Padrões formados por camadas vibrantes

Camadas quase bidimensionais (isto é, com o menor número possível de monocamadas granulares - onde o caso ideal é, naturalmente, um), quando submetidas a algum tipo de vibração vertical, exibem um regime surpreendentemente bimodal caracterizado por um aglomerado denso de grãos quase imóveis envoltos por um gás de partículas agitadas (18).

Essa transição para aglomeração ocorre quando a magnitude de vibração é reduzida (o sistema é “resfriado”), como citado acima.

Já multicamadas de materiais granulares, quando submetidas a vibrações verticais, exibem uma formação espetacular de padrões de vibração. Em um experimento típico, camadas de 10 a 30 diâmetros granulares de espessura são energizadas por meio de vibrações verticais precisas. Dependendo das condições experimentais, uma miríade de padrões pode ser observada, de linhas e quadrados a hexágonos e octógonos (ver Figura 1.7).

Apesar dos primeiros padrões em camadas granulares terem sido observados há mais de dois séculos por Chladni (em 1787) e depois por Faraday (em 1831) (19), apenas recentemente interesse nessa área começou a surgir (20), culminando com a descoberta do “oscillon” (21), um elemento oscilante extremamente localizado (ver Figura 1.8).

Outro fenômeno interessante decorrente de materiais granulares sob vibração é a segregação. Acima já foi falado um pouco sobre o efeito castanhadopará, que é exatamente um mecanismo de segregação por meio de vibração. De modo geral, em misturas de espécies, padrões de vibração geram segregação

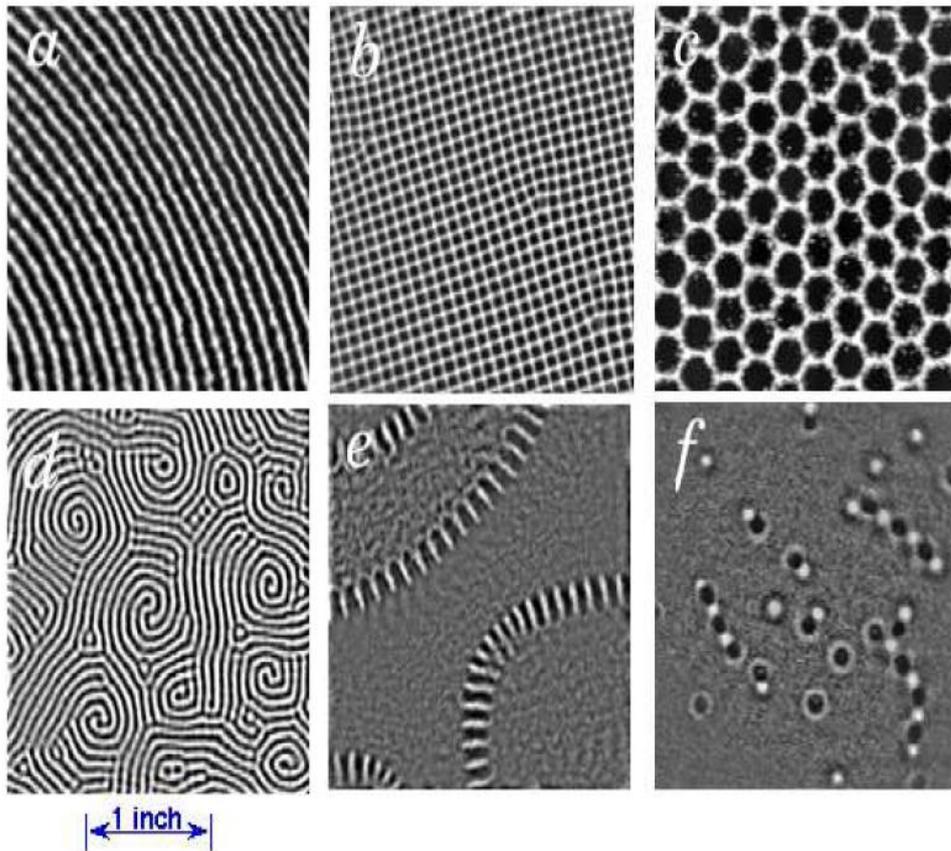


Figura 1.7: Padrões representativos em camadas granulares sob vibração vertical para vários frequências e amplitudes de vibração diferentes: (a) linhas, (b) quadrados, (c) hexágonos, (d) espirais, (e) interfaces e (f) “oscillons” (21).

granular na direção perpendicular às vibrações, como pode ser observado na Figura 1.9.

Uma explicação mais detalhada sobre a segregação granular e os modelos que procuram descrever esse fenômeno pode ser encontrada no Capítulo 3, abaixo.

1.6 Acondicionamentos Granulares

Um sistema granular em repouso sob a ação da gravidade forma um acondicionamento granular. A física desses tipos de sistemas está descrita de forma bastante detalhada em um livro recente de Aste e Weaire (24). Exemplos são o interior de uma pilha de grãos ou a própria praia. Acondicionamentos estáveis podem existir a diferentes densidades, como pode ser visto na Figura 1.10.

Uma forma de caracterizar esse acondicionamento é através da porosidade Φ , i.e., a fração do volume de espaço não-ocupado; daí, $\Psi \equiv 1 - \Phi$ é

a fração do volume ocupado. Com esferas de mesmo tamanho, a densidade máxima a ser conseguida é $\Psi_{fcc} = 0.74$. Mas, em uma mistura aleatória das esferas, o máximo que pode ser conseguido em termos de compactação (e.g., por vibrações sofisticadas do sistema) é $\Psi_{rdp} = 0.64$ - o chamado acondicionamento denso aleatório (“random dense packing” - *rdp*) (26). No entanto, o conceito de *rdp* ainda não é muito bem definido.

Um sistema granular pode estar em um grande número de diferentes estados microscópicos a densidades macroscópicas fixas, e diversas propriedades não-usuais estão ligadas ao seu acondicionamento não-trivial (27, 28). Como mostrado por Edwards (29, 30), o papel que o conceito de energia livre desempenha em sistemas termais padrões (como modelos de Ising), em meios granulares parece ser desempenhado pelo “volume efetivo”, derivado de uma função complexa de posições e orientações granulares. Dessa forma, a mecânica estatística fornece conceitos teóricos no contexto de sistemas não-termais.

1.7

Arcos de Grãos

Em qualquer acondicionamento granular, em particular aqueles mais densos, arcos de força forçosamente aparecem no sistema. Uma vez que grãos são objetos tridimensionais, com formatos particulares, quando um acondicionamento de grãos se forma, muitas vezes um grão apóia-se em outros três ou dois, em direções diferentes. Da mesma forma, outros grãos apóiam-se nele, criando uma seqüência de contatos através dos quais a força de contato de cada grão é transmitida ao grão seguinte na direção que o grão (ou grãos) em contato estiverem, como pode ser observado na representação simples da Figura 1.11. Com isso, a transmissão de forças do topo à base da pilha ocorre de uma forma desigual (pois cada grão pode exercer mais força sobre um dos grãos nos quais se apóia do que sobre os outros) e evidentemente não-linear, uma vez que, como fica evidente na Figura 1.10, a probabilidade de um grão ficar exatamente em cima de outro é ínfima.

Um fenômeno bem conhecido decorrente dessa formação de arcos em acondicionamentos granulares é o efeito Janssen (31), que ocorre quando um contêiner é preenchido com uma pilha alta de grãos, com uma altura H maior que o diâmetro D de sua base. Durante muitos anos procurou-se entender porque silos grandes repletos de grãos ruíam nas laterais, enquanto sua base mantinha-se intacta.

Janssen observou (31) que, ao se depositar uma pilha granular em um contêiner (no caso, cilíndrico - um silo, por exemplo), após uma certa altura específica da pilha ($H > D$), a pressão exercida pela mesma na base do silo

torna-se praticamente independente da quantidade de grãos (o que é bastante não-intuitivo). A explicação para isso é bastante interessante: as forças de contato entre os grãos se propagam de forma totalmente não linear, sendo transmitidas não apenas verticalmente, mas também lateralmente (novamente, o motivo torna-se evidente pela Figura 1.11). Com isso, cadeias de forças mais intensas formam arcos de sustentação, onde cadeias menos intensas podem “apoiar-se”.

Assim sendo, após essa altura $H > D$, o que acontece é que os grãos que vão sendo depositados subseqüentemente têm sua força peso (que corresponde à soma das forças de contato com os grãos abaixo deles) distribuída por intermédio desses arcos para as laterais. Por isso a pressão na base mantém-se constante: os demais grãos que são depositados exercem pressão praticamente apenas nas laterais do silo, tornando a pressão na base independente da altura da pilha e da quantidade de grãos na mesma.

Uma simulação desenvolvida em um contexto industrial é exibida na Figura 1.12 como exemplo, enquanto uma experiência de laboratório ilustrando o efeito Janssen pode ser vista na Figura 1.13, disposta abaixo, sendo montada com uma balança e com um cilindro sem base suspenso, o qual é mantido quase em contato com a balança, de forma que apenas a pressão exercida pela pilha granular (e não pelas paredes) seja medida.

É esse fenômeno que torna possível o funcionamento da ampulheta como um medidor de passagem de tempo preciso. O fluxo de areia através da parte mais estreita da ampulheta é constante justamente devido a essa propriedade dos grãos de formarem arcos que transmitam as forças de forma não-linear. A areia, na região imediatamente acima da parte mais estreita, forma arcos de sustentação para o resto da pilha que está acima, arcos esses que se quebram e ressurgem a cada instante, sempre sustentando temporariamente a pilha acima, mas permitindo um escoamento para a parte inferior da ampulheta. Com isso, sempre uma quantidade pequena de grãos, que não sofre a pressão do restante da pilha, escoam da parte superior para a inferior da ampulheta, em um ritmo constante. Isto seria impossível de se conseguir com um líquido, por exemplo, pois, como esses arcos de sustentação não são formados, a parte a ser escoada para a metade inferior da ampulheta sempre estaria submetida à pressão de um líquido newtoniano, definida pela Lei de Stevin: $p_v(h) = \rho gh$, onde p_v é a pressão vertical, ρ é a densidade do fluido, g é a aceleração da gravidade e h é a altura da coluna de fluidos acima do ponto medido (33). Como a pressão depende da coluna acima do ponto medido, à medida que o líquido fosse escoando pelo meio da ampulheta, a pressão neste ponto variaria, mudando a taxa de escoamento e tornando a medida de tempo imprecisa.

Outra consequência que vem sendo observada recentemente é a influência e a importância dos arcos em situações dinâmicas (em vez de condicionamentos estáticos) (34). Nesse novo contexto, arcos seriam os responsáveis não apenas pela transmissão das forças em um sistema, mas também estariam entre os principais responsáveis pelo transporte granular, como ilustrado pictoricamente na Figura 1.14. Pode-se pensar o movimento de grãos no interior de um meio granular como resultado da formação e rompimentos dos arcos. Vários fenômenos poderiam ser explicados desta forma, como por exemplo a formação de bandas de cisalhamento e difusão correlacionada.

1.8

Difusão Granular

Como toda partícula com energia térmica considerável, grãos possuem movimento difusivo em meios com temperatura granular diferente de zero (ver acima). A difusão granular é um fenômeno importante para qualquer tentativa de se descrever sistemas granulares dinâmicos, onde ela está sempre presente. Recentemente, foi observado inclusive que a difusão granular pode ser responsável também por segregação granular entre dois ou mais tipos diferentes de grãos (35).

A difusão granular, no entanto, não obedece aos padrões característicos de difusão por movimento browniano de partículas independentes. Ao contrário, para pequenas distâncias, um comportamento conjunto entre as partículas foi observado. Análises teóricas (36), estudos numéricos (37) e experimentos (38, 39) comprovam a existência de uma correlação no movimento difusivo de partículas próximas, levando a crer que haja um comprimento de correlação típico do sistema responsável por esse comportamento (40, 41, 42), possivelmente causado pela estabilidade mecânica das cunhas (“*wedges*”) formadas pelos arcos de grãos.

1.9

Este Trabalho

O objetivo deste trabalho é promover o avanço do conhecimento e do entendimento dos mecanismos de fluxo e transporte de grãos em sistemas granulares dinâmicos densos, através tanto da criação de modelos físicos quanto do desenvolvimento de modelos matemáticos. Diversos trabalhos recentes buscam, de uma forma ou de outra, uma resposta para a seguinte pergunta (43, 44, 45): “Será possível fazer uma descrição unificada e contínua de grãos em movimento?”.

Nossa ambição com este trabalho é poder oferecer contribuições no sentido de avançar o conhecimento em direção a uma resposta afirmativa para a pergunta acima, utilizando do conceito defendido acima da relevância dos arcos para o comportamento, e conseqüente descrição, de um sistema granular dinâmico, em especial os sistemas densos, que sofrem maior formação e influência dos arcos de grãos formados, como pode ser visto nas Figuras 1.10 e 1.12.

Para tanto, atacamos dois problemas fundamentais e interligados em sistemas granulares dinâmicos:

- A influência dos arcos de grãos em regimes granulares densos, e as suas conseqüências para o transporte granular e o comportamento do sistema como um todo - ver Capítulo 2.
- A descrição dos grãos difundindo-se de forma correlacionada em um meio granular, através de uma função de correlação que pode ser relacionada com a formação de arcos no interior do sistema - ver Capítulo 3.



Figura 1.8: “Oscillon” obtido em uma plataforma vibrando verticalmente por Umbanhowar *et al.* (21).

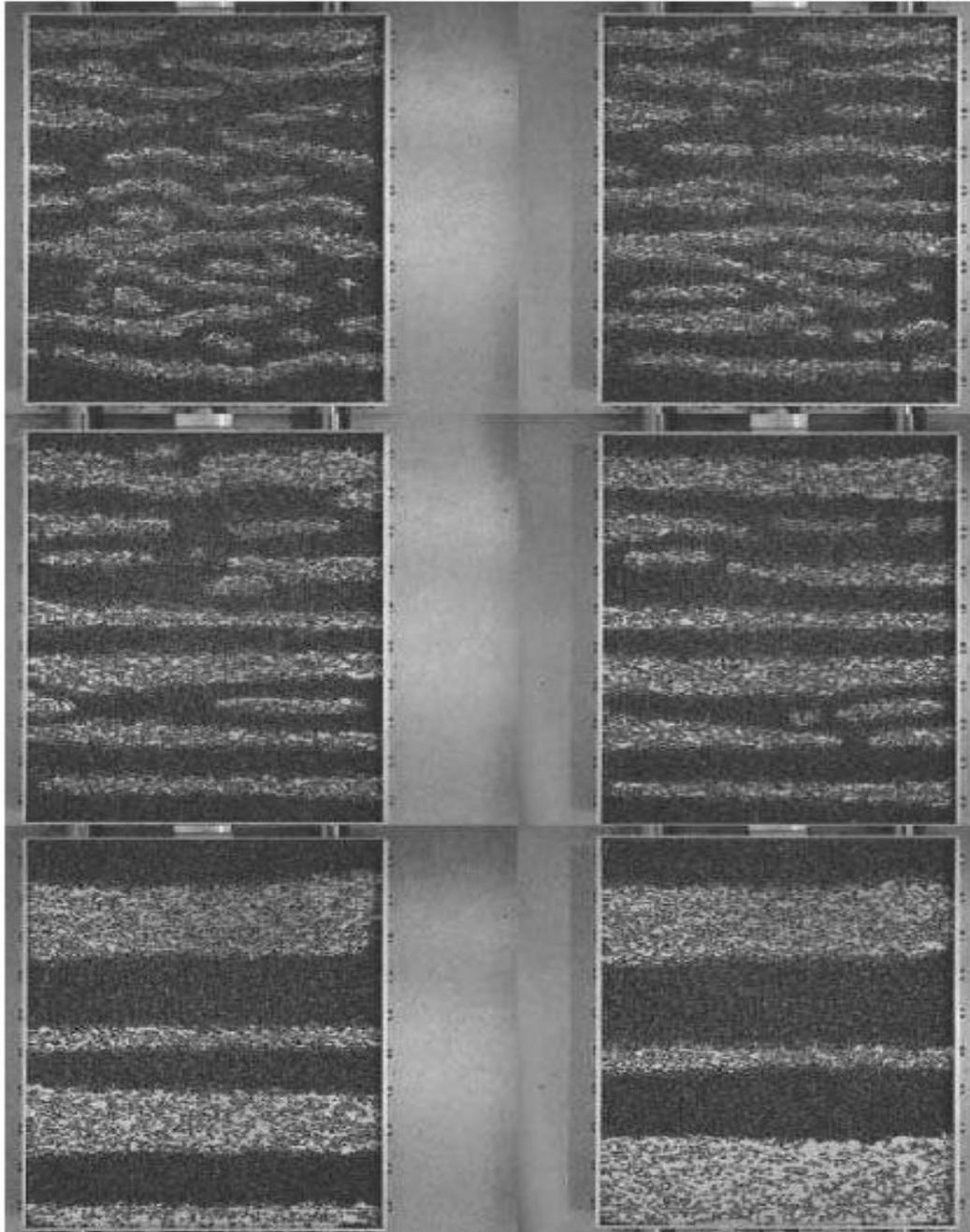


Figura 1.9: Seqüência de fotos de uma camada de mistura de bolinhas de cobre e sementes de papoula em uma cavidade sob vibrações horizontais (frequência de 12,5 Hz e amplitude de 2mm), nos instantes $t = 5, 10, 15, 30, 60$ e 360 minutos, em ordem da esquerda para direita, de cima para baixo (22, 23).

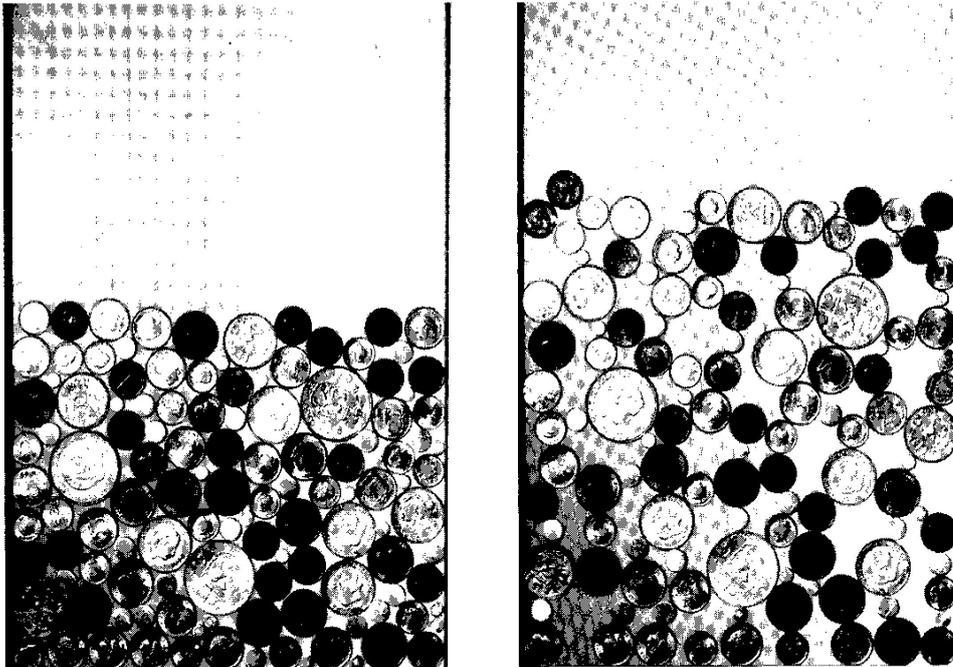


Figura 1.10: O mesmo conjunto de moedas confinado entre duas paredes de vidro paralelas sob diferentes Ψ 's (25).

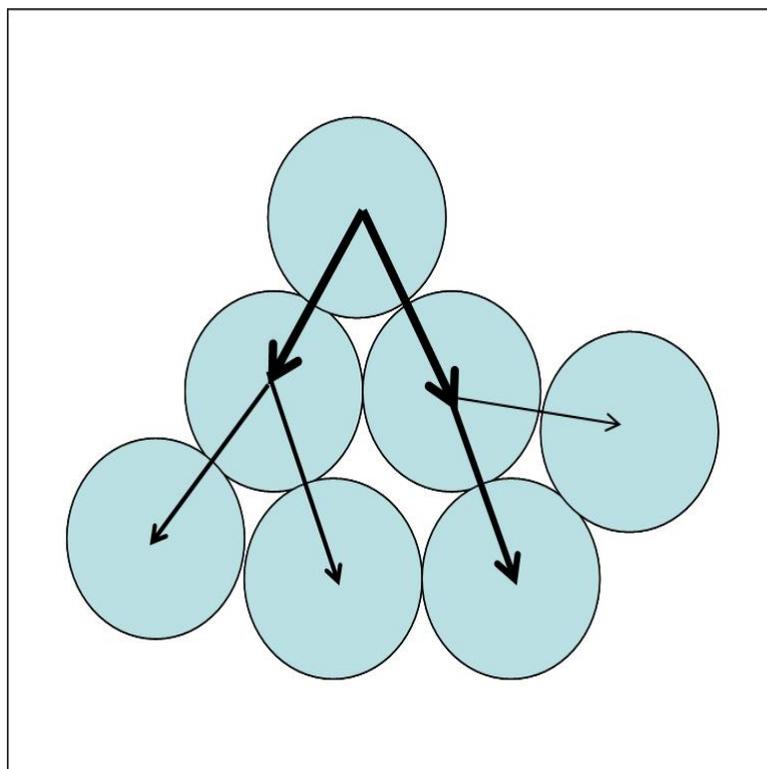


Figura 1.11: Representação ilustrativa da transmissão desigual e, principalmente, não-linear de forças em uma pequena pilha de grãos, devido à formação de arcos.

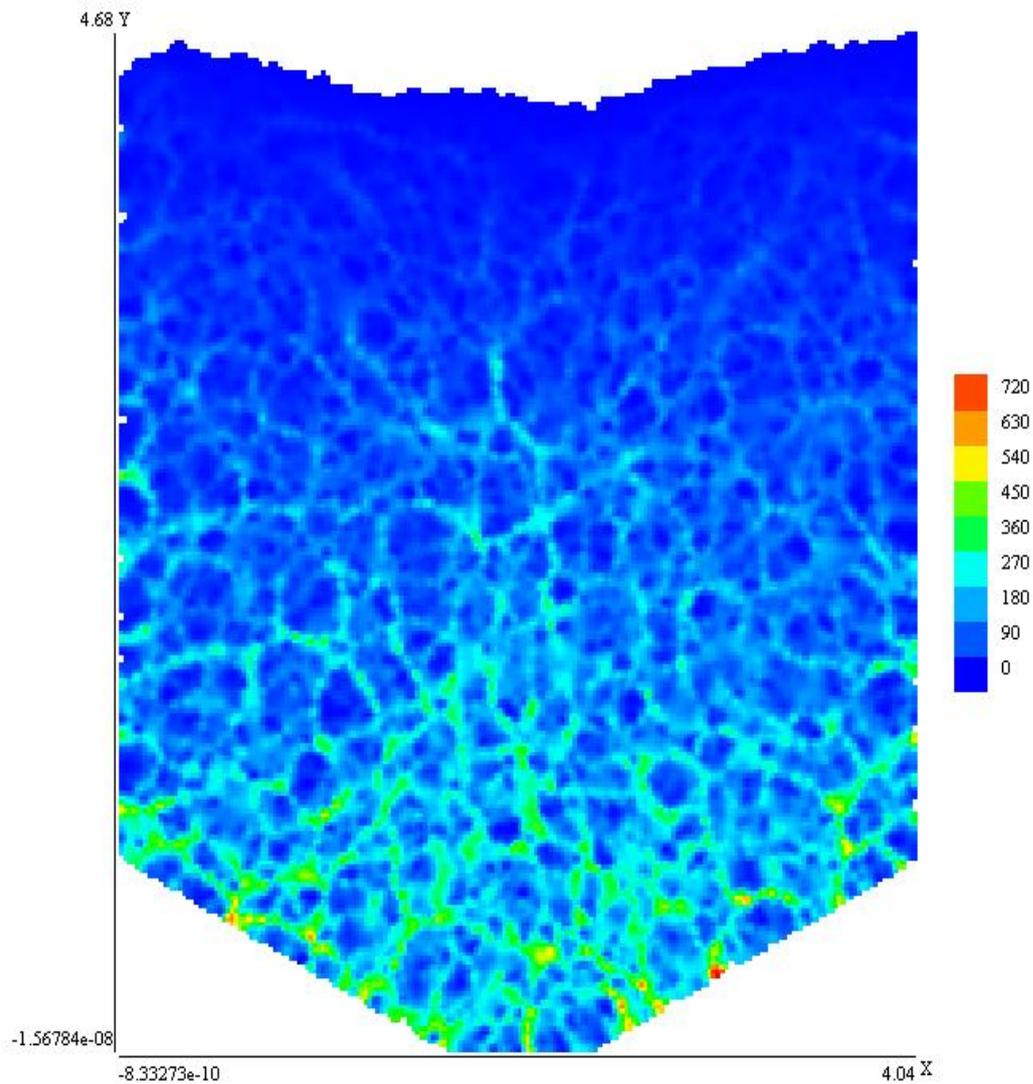


Figura 1.12: Esquema de forças em um silo repleto de grãos. Pode ser observado na figura que as forças originadas acima de uma certa altura tendem a ser aplicadas nas paredes do silo, em vez de em sua base (32).



Figura 1.13: Experiência demonstrando o Efeito Janssen: em ordem cronológica, de cima para baixo, pode-se ver na coluna da esquerda o recipiente (que não encosta na balança) sendo preenchido por areia, enquanto a balança continua marcando o mesmo valor, pois o peso dos grãos é transmitido por meio de arcos de força para as laterais do recipiente. Na coluna da direita, após o recipiente ser retirado, permitindo que toda a areia se espalhe na balança, pode-se ver o medidor marcando o peso real da pilha de grãos.

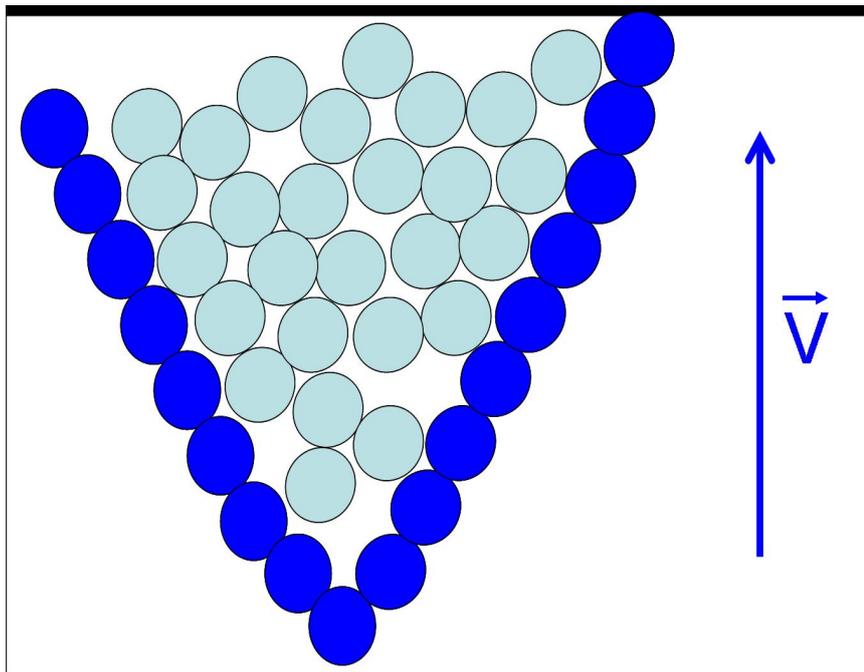


Figura 1.14: Ilustração de como os grãos seriam transportados em um meio granular denso: cunhas de arcos, movendo-se com velocidade v , arrastariam o material granular enquanto as forças transmitidas fossem fortes o suficiente para mover os grãos e manter o arco intacto.

2

Arcos em Meios Granulares Densos

2.1

Introdução: Estresses

Sistemas Granulares são sistemas muito interessantes devido tanto à grande quantidade de fenômenos físicos de não-equilíbrio incomuns quanto à grande quantidade de aplicações práticas possíveis que eles apresentam (10, 6). Muito progresso foi conseguido durante as últimas duas décadas no que diz respeito ao estado da arte da pesquisa em dinâmica granular (6). No entanto, há ainda muito a se fazer.

Recentemente, um novo modelo para o papel dos estresses internos elásticos e dissipativos foi proposto por Jiang e Liu (46, 47, 48). Um aspecto interessante deste modelo é o papel desempenhado pelo estresse elástico interno, que, quando em estado de equilíbrio, é o principal responsável pela estabilidade estrutural do sistema, enquanto, à temperatura granular não-nula ($T_g > 0$: não-equilíbrio), os componentes transientes plásticos (com tempo característico $1/T_g$) do estresse também estão presentes, sendo diretamente responsáveis pelos mecanismos de dissipação de energia interna dos sistemas granulares. A estabilidade das estruturas formadas pela malha de estresses elásticos, durante a fase de não-equilíbrio do movimento, e o papel dos estresses plásticos são algumas das questões que serão abordadas neste capítulo.

2.2

O Efeito do Estresse

Uma das características mais importantes apresentadas por Sistemas Granulares é a forma altamente incomum que os estresses se distribuem espacialmente. Os estresses se propagam principalmente através de uma malha topológica unidimensional de contatos de alto estresse, isto é, os arcos. De fato, pode-se classificar os grãos de forma grosseira como pertencendo ou à malha carregando a maior parte dos estresses (arcos) ou à massa de grãos relativamente soltos (fase “mole”) (6).

O papel desempenhado pelos arcos é crucial para a compreensão de alguns comportamentos granulares não-usuais, como o efeito Janssen em um

silo (31). Neste caso específico, os grãos localizados nos terminais dos arcos pressionam (com muita força) a parede do silo, e o atrito estático nos pontos de contato (entre os grãos dos arcos) é alto o suficiente para suportar o peso dos grãos acima deles. Logo, a pressão interna na base do silo se torna razoavelmente independente da altura da pilha granular, se esta for maior que um limiar.

O efeito descrito acima só se manifesta em sistemas granulares densos, onde contatos são praticamente permanentes e muito poucos grãos movem-se livremente, em contraste com o que ocorre na fase fluidizada. Neste caso, uma temperatura granular dinâmica pode ser atribuída aos grãos, e eles transmitem estresse da mesma forma que um fluido, por transfusão de momento durante colisões, com estresses tipicamente ordens de grandeza menores que aqueles da pilha granular em repouso. Uma vez que estamos interessados apenas nos efeitos de estresse na fase sólida, nós assumimos, conseqüentemente que o sistema seja suficientemente denso, de forma que não haja fase fluidizada presente.

Para efeito de clareza, vamos supor um arranjo experimental simples, consistindo em dois cilindros concêntricos (que, ao serem “esticados”, podem ser aproximados como duas placas verticais longas), entre os quais preenchemos com um meio granular denso, tal como areia ou sal (veja Figura 2.1, abaixo). Fazendo as placas se mover em direções opostas, momento linear é fornecido nas extremidades, a fim de vencer as forças internas de atrito a manter o sistema em movimento. Dois mecanismos possíveis para o transporte de momento surgem: via colisões e forças de atrito por contato (na fase “mole”), e via contato normal direto (propagado através dos arcos).

Conseqüências interessantes surgem, como o aparecimento de regiões estreitas (alguns diâmetros granulares de extensão) conhecidas como bandas de cisalhamento (“shear bands”), separando massas de grãos se movendo em sentidos diferentes em relação uma à outra (49, 50, 51, 52) - ver exemplo na Figura 2.2. Bandas de cisalhamento são importantes em várias áreas da física, e quando relacionadas a materiais granulares têm diversas aplicações, como o estudo de erosão e mecânica dos solos, como pode ser visto na Figura 2.3.

Nós supomos que, na fase densa “mole”, os grãos estão em contato uns com os outros a maior parte do tempo, mas a magnitude típica de seus estresses é pequena, da ordem de grandeza do seu peso típico. Eles podem rolar, exercendo forças radiais e tangenciais, e colidir entre si, da mesma forma que aconteceria com as moléculas de um fluido denso (dissipativo). Em relação ao cisalhamento, as forças **individuais** de atrito tangencial produzidas pelos contatos durante a fase “mole” são fracas, devido aos valores pequenos dos

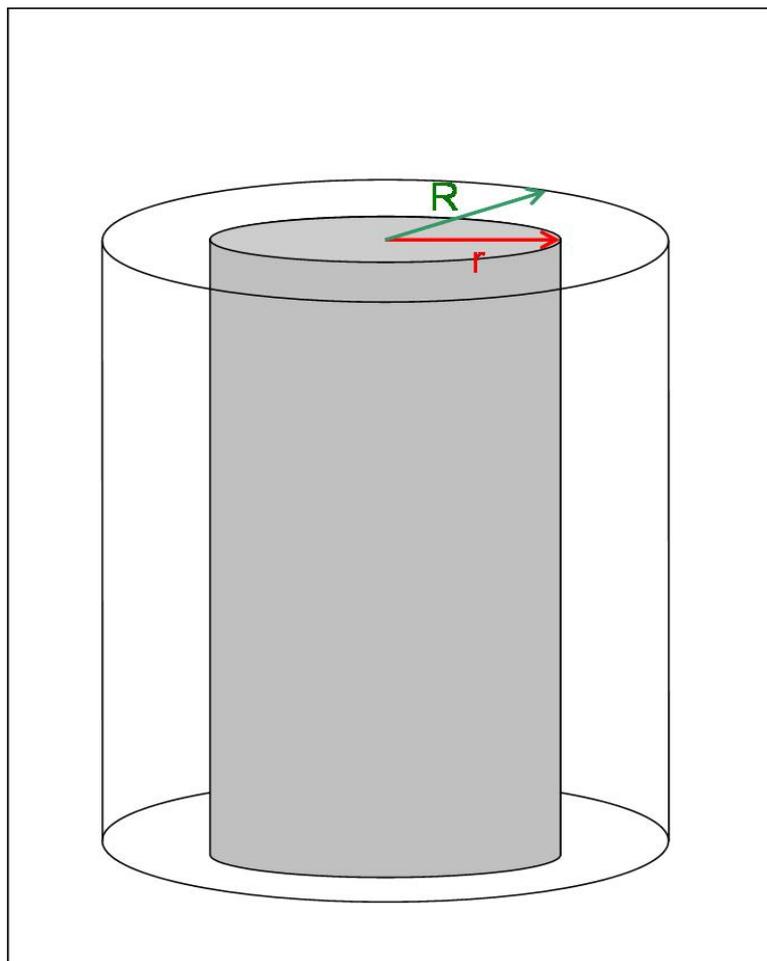


Figura 2.1: Uma ilustração do nosso arranjo experimental modelado. Dois cilindros concêntricos, de raios diferentes, entre os quais preenchemos de grãos, giram com velocidades fixas em sentidos opostos, induzindo o aparecimento de um cisalhamento no material granular em seu interior.

estresses normais, levando a uma aderência fraca. Logo, eles não conseguem formar bandas de cisalhamento, já que a variação suave dos stresses no interior da fase “mole” faz as velocidades das camadas adjacentes de material variar de forma lenta de uma camada para a próxima. Uma fase granular puramente “mole” se comportaria praticamente como um fluido viscoso denso submetido a um estresse de cisalhamento - sem a formação das bandas. Por outro lado, uma malha formada pelos arcos se comporta de forma completamente diferente, caracterizando-se por forças de contato normais muito fortes, ordens de grandeza maiores que o peso de um grão típico, formando um sub-arranjo do sistema topologicamente unidimensional, ramificado aleatoriamente. Em contraste com a fase “mole”, os arcos podem ser responsáveis por variações repentinas dos stresses em curtas escalas de distância. Eles são, portanto, candidatos a desempenhar um papel importante no desenvolvimento de bandas

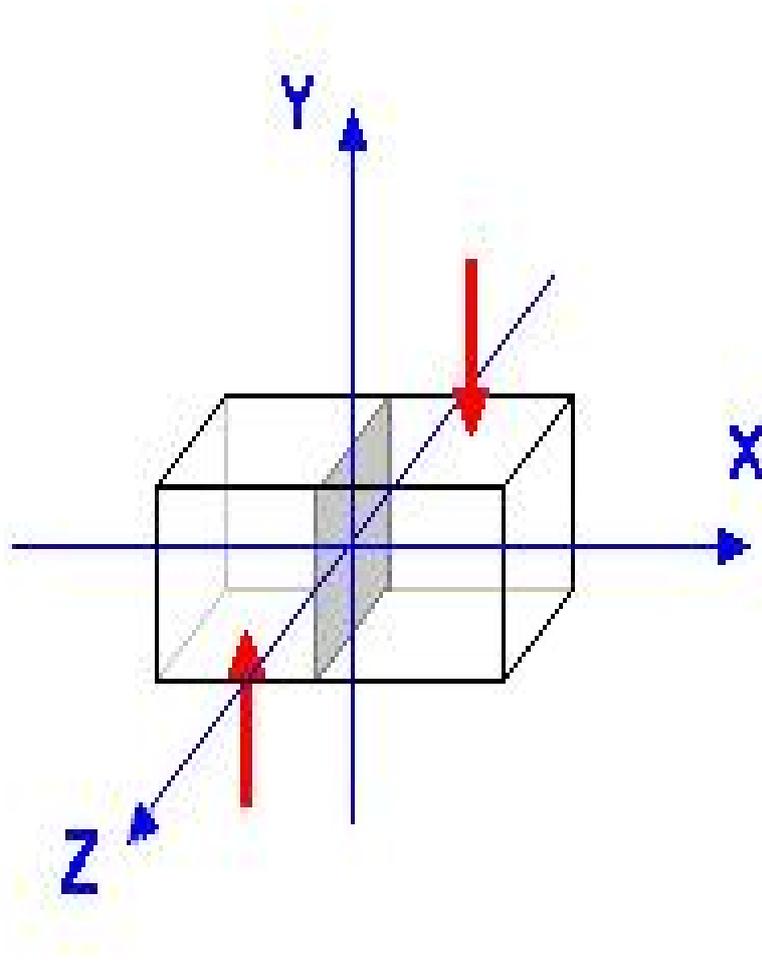


Figura 2.2: Esquema ilustrativo da banda de cisalhamento. Regiões com velocidades opostas, gerando uma região de velocidade zero no meio (hachurada na figura).

de cisalhamento.

Para entender o transporte de grãos em um sistema denso sob cisalhamento, foi pensado um modelo de rede quadriculada que leva em conta fenomenologicamente a estrutura não-usual dos estresses nesses sistemas. É crucial modelar a relação entre a intensidade e a direção dos estresses locais e a quantidade de matéria transportada. É importante observar que arcos com intensidade de estresse menor se ramificam de forma mais irregular que aqueles com intensidade de estresse mais alta, e que um modelo eficiente de rede para o transporte granular deve levar em consideração a direção e a intensidade dos arcos na taxa de transporte de massa.

O modelo é implementado em uma rede de células quadradas, onde cada célula (i, j) representa uma região, com densidade escalar local dada pelo parâmetro $\psi_{i,j}$. Nós não expressamos explicitamente as forças agindo nas fases “moles” (como, por exemplo, de contato grão-grão ou o próprio peso), mas, em



Figura 2.3: Foto da estrada A6187, na Inglaterra, próximo a Castleton. Cisalhamento do solo tornou-a destruída e impossível de se trafegar.

vez disso, o efeito delas é levado em consideração implicitamente nas equações de transporte para os $\psi_{i,j}$. As propriedades de transporte de massa tem uma dependência altamente não-linear com a intensidade do estresse de cada célula da rede. Isso ocorre devido à ramificação dos arcos mais fortes em menores que ativamente empurram os grãos da fase “mole”. Um modelo simples mostrando algum grau de auto-similaridade (sem, no entanto, implicar necessariamente em fractalidade) a uma escala mínima (maior que o tamanho de um grão típico) é desenvolvido abaixo.

No nosso modelo, os arcos são dispostos ao longo das bordas das células e suas magnitudes são uma função estocástica do tempo. O modelo leva em consideração interações friccionais estáticas e dinâmicas, bem como efeitos de volume excluído entre uma célula repleta e suas vizinhas. Aplicando estresse externo de cisalhamento (através de condições de contorno em movimento) por tempos longos, observa-se o aparecimento de um estado estacionário que reproduz bem o que ocorre em experimentos, em especial o surgimento de

bandas de cisalhamento estreitas na borda de regiões granulares que se movem em sentidos opostos.

Bandas de cisalhamento se originam como a interface menos dissipativa entre regiões se movendo em sentidos opostos (51). O mecanismo “microscópico” principal para dissipação é basicamente devido tanto a colisões entre grãos na interface quanto ao atrito de deslizamento que ocorre naturalmente nela. Diversos fenômenos dissipativos, como a aglomeração granular (53) ou a formação de bandas de cisalhamento, surgem como artefatos de minimização da dissipação (54, 55), reduzindo assim a dissipação de energia total desses sistemas.

Além disso, bandas de cisalhamento são regiões estreitas que não podem ser estáveis em sistemas viscosos “moles”; eles podem, entretanto, ser associados com a descontinuidade espacial interna dos estresses em sistemas granulares, muito provavelmente devido à presença de arcos (de forças) no sistema. O próximo passo é propor um modelo efetivo para a variação temporal das forças dos arcos.

2.3

Dinâmica Estocástica para Arcos

O papel dos arcos no transporte granular é modelado para uma situação dinâmica específica: sistemas granulares densos sob cisalhamento externo. É fato que sistemas granulares dissipativos conseguem manter o seu estado de movimento apenas enquanto uma fonte externa fornece energia ao mesmo. Para sistemas cisalhados, essa energia vem do trabalho realizado pelas forças de atrito nas extremidades. A forma com que essas forças de superfície iniciam e mantêm o movimento no interior do sistema tem conexão direta com a ação dos arcos.

No modelo apresentado, o sistema é representado por uma rede retangular, constituída de células e suas bordas. Cada célula corresponde a um volume de grãos e é assinalada por um parâmetro local $\psi(\mathbf{r}) = \psi_{i,j}$ (com i, j inteiros) associado com a distribuição local de grãos, os quais não são representados individualmente, mas apenas pela massa granular da célula, por meio do parâmetro $\psi_{i,j}$.

Nós supomos que os grãos no interior de uma célula qualquer interajam de forma fraca uns com os outros, característica de uma fase “mole” típica. As bordas das células são usadas para representar os arcos, que interajam tanto com os grãos do seu interior quanto com a vizinhança imediata da mesma. Esses arcos, representados por forças nas direções das bordas ($F_{i,j}^{x,y,\pm}$, onde os índices inferiores, i e j , representam as coordenadas da célula na rede,

enquanto os índices superiores, a saber $x+$, $x-$, $y+$ e $y-$, se referem à borda da célula em questão - com $x+$ sendo a borda horizontal superior, $x-$ a borda horizontal inferior, $y+$ a borda vertical da direita e $y-$ a borda vertical da esquerda; ver Figura 2.4), evoluem no tempo por regras fenomenológicas, e a eles são dados uma orientação associada com a direção do movimento da massa local. A orientação dos arcos vem do aparente conflito de tentar descrever uma quantidade estritamente local (o estresse) por meio de uma variável associada com um alcance finito em comprimento. De fato, a mobilidade granular irá depender dos gradientes do estresse - daí a necessidade dos arcos das bordas serem orientados.

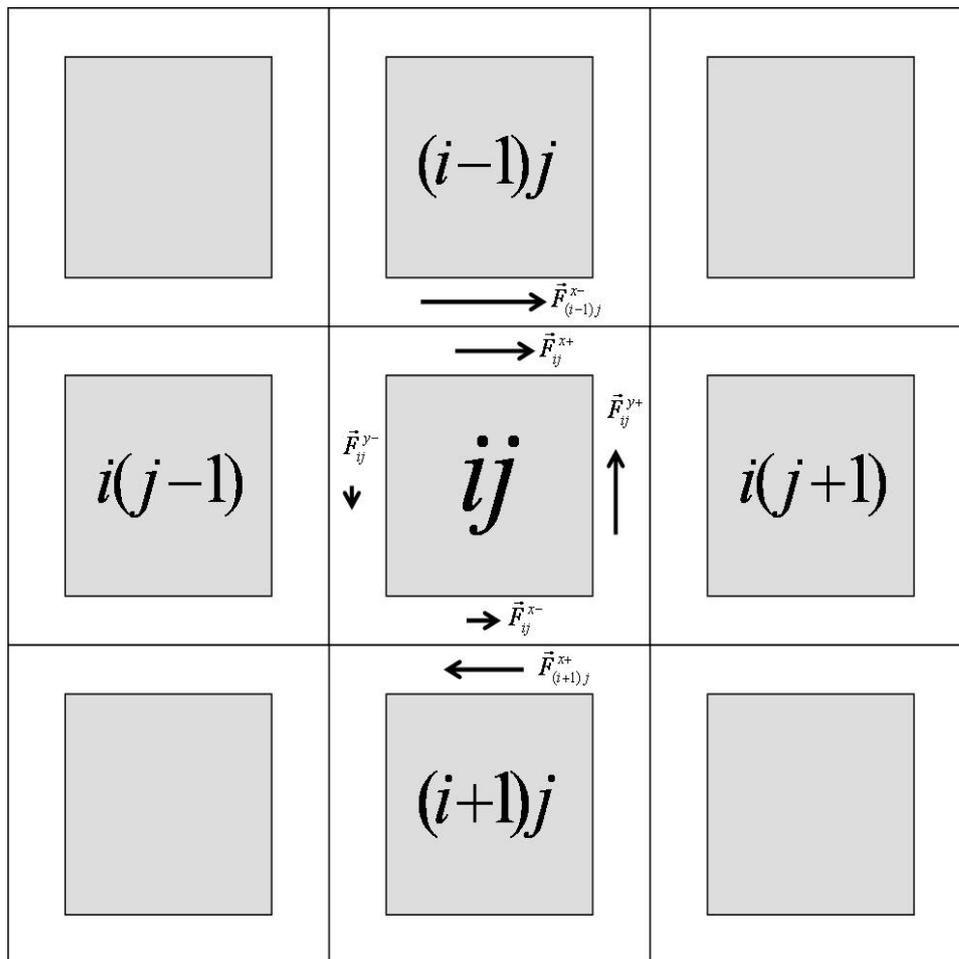


Figura 2.4: Ilustração do modelo computacional 2D. O espaço entre as células é apenas um recurso gráfico para facilitar a visualização das forças ao longo das bordas - ele não existe na simulação.

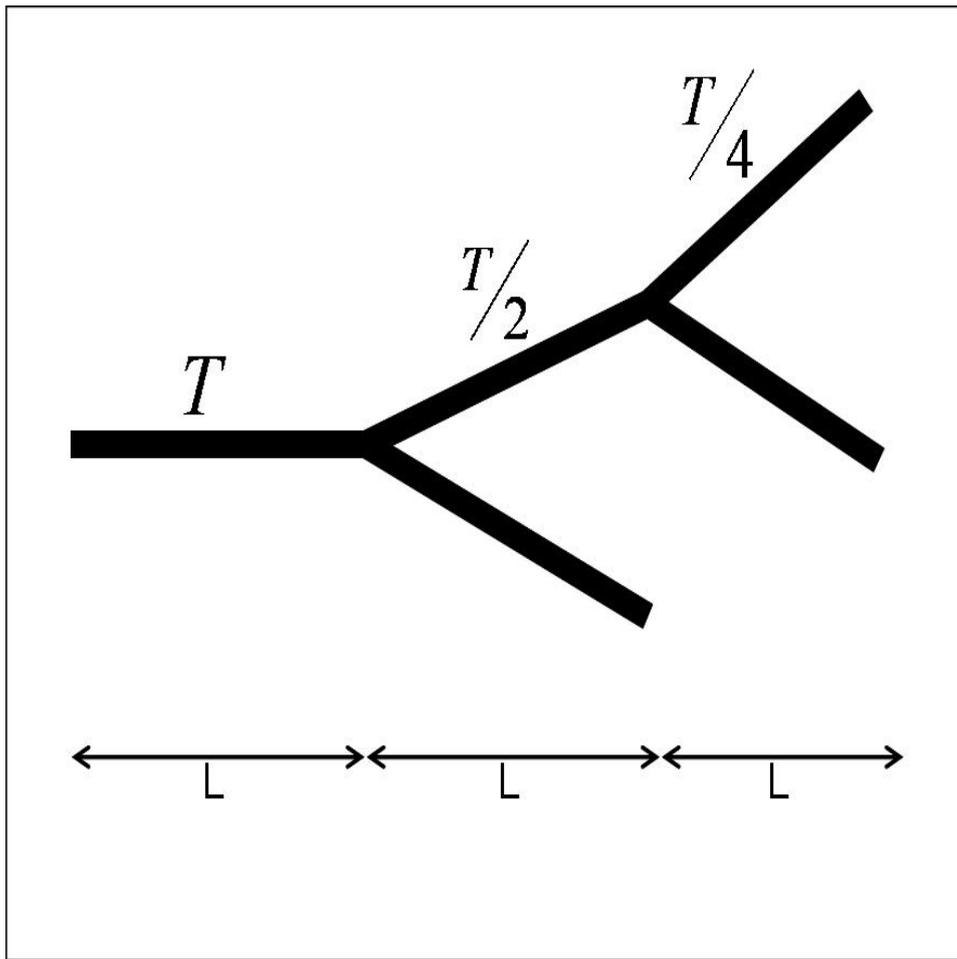


Figura 2.5: Um diagrama simples da ramificação dos arcos e suas forças (T) a intervalos regulares (L).

2.4

Arcos Ramificados

É necessário um modelo simples para explicar qualitativamente como os arcos das bordas contribuem para o transporte granular. Em duas dimensões, a massa transportada por causa de um arco de intensidade típica T (em unidades de força) depende do número de vezes que ele se ramifica. Vamos supor que um comprimento de ramificação típico L , onde o arco então se bifurca em dois novos arcos de força aproximadamente $T/2$ (ver Figura 2.5). A ramificação prossegue até a força do arco alcançar o valor típico da fase “mole” para a força intergranular, f_0 .

Supõe-se que o número de grãos transportados seja proporcional à área A coberta pelas ramificações. Definido N como o número de ramificações

necessárias para levar o estresse de T a f_0 :

$$f_0 = \frac{T}{2^N} \Rightarrow N = \frac{\ln \frac{T}{f_0}}{\ln 2}.$$

Logo, a área A acima é proporcional a $N^2 L^2$, e pode-se escrever

$$\frac{\Delta\psi}{\Delta t} \propto \pm \ln \frac{|T|}{f_0} \approx \pm \ln \left(1 + \frac{|T|}{f_0} \right), \quad (2-1)$$

uma vez que, em geral, $|T| \gg f_0$. A última modificação na Equação (2-1) é feita apenas para melhorar a convergência numérica.

A Equação (2-1), acima, não deve ser vista como um modelo exato para o transporte no interior de um sistema granular denso, mas apenas como um indicador fenomenológico aproximativo para a equação de transporte correta. Por exemplo, a saturação não-linear da transferência de massa com a intensidade de força é um ingrediente muito importante para o surgimento de bandas de cisalhamento e provavelmente estará presente em modelos mais sofisticados no futuro.

2.5

Modelo Computacional 2D

2.5.1

Descrição do Arranjo Experimental 2D

Para simular o arranjo descrito anteriormente (um cilindro externo longo com um cilindro interno concêntrico de raio menor e igualmente longo, repleto de material granular entre os dois), foi feito um modelo bidimensional consistindo de duas paredes paralelas horizontais, em lugar das paredes do cilindro, com a rede de células quadradas entre ambas, onde se encontram os grãos. O experimento é bem descrito por esse modelo bidimensional, devido a suas simetrias - impondo condições periódicas nas laterais verticais, simulamos, de forma aproximada, anéis “esticados” (56).

Em experimentos realizados com sistemas análogos (49), ao se ligar o movimento nas paredes, estresses são induzidos no meio granular por meio de forças de cisalhamento, e uma clara separação entre as massas se movendo em sentidos opostos pode ser observada, demonstrando o surgimento de uma banda de cisalhamento entre elas. Essa banda é comparativamente fina: sua espessura é da ordem de alguns diâmetros granulares.

É importante compreender as causas físicas dos fenômenos descritos acima, tais como a formação de bandas de cisalhamento e outras transições. Muita informação pode ser obtida sobre um sistema ao se modelá-lo utilizando

os ingredientes físicos mais importantes contidos no mesmo. Essa é a idéia por trás do modelo proposto. Essas idéias foram aplicadas para simular um sistema granular denso sob a ação de um cisalhamento externo, descrito acima.

O modelo é composto de dois cilindros concêntricos, cada um girando em uma direção diferente, com material granular entre eles. Isto é simulado por um meio dividido como uma rede de células quadradas, que podem conter até N grãos cada. Esta rede tem condições de contorno periódicas em seus limites horizontais, representando uma seção do sistema (ou dois “anéis abertos”), e condições de velocidade constante em seus limites inferior e superior, representando as duas paredes dos cilindros. Em cada borda, de cada célula, uma força aparece devido à formação e transporte de arcos. Essas forças são as responsáveis pelo movimento correlacionado dos grãos entre as células e, conseqüentemente, no interior das mesmas.

No início da simulação, apenas as células nos extremos inferior ou superior da rede possuem qualquer tipo de velocidade ou forças aplicadas. A rede, como um todo, tem em $t = 0$ uma distribuição isotrópica de grãos. As células das linhas das extremidades superior e inferior têm velocidades fixas: zero na direção y , e v (constante) na direção x (mas com sinais diferentes para as linhas superiores e inferiores). Isso simula uma camada colada de grãos nas paredes, onde os grãos e a parede movem-se com mesma velocidade (artifício utilizado corriqueiramente em experimentos para evitar fenômenos decorrentes de contatos - e atritos - com a parede do sistema (43)). Esse movimento de grãos, assim como o seu padrão difusivo aleatório, forma arcos, que promovem o surgimento de forças e o transporte de material granular.

Essa interação entre os grãos é simulada pela aplicação de uma força na borda entre as duas células - mais especificamente, na borda de cada célula individual, em ambas as direções, como pode ser visto na Figura 2.4, acima - a qual sofre a influência tanto das forças em sua vizinhança quando da densidade de grãos nas células vizinhas. A cada passo de tempo τ , as forças são recalculadas de acordo com as equações desenvolvidas e descritas abaixo. Isso simula arcos surgindo ao longo das linhas da rede, entre as células, que são os responsáveis pelo transporte de grãos e, conseqüentemente, pelo aparecimento das bandas de cisalhamento.

2.5.2

Modelo Simplificado

Como um primeiro passo, nós testamos nossa hipótese de redes de células quadradas e ramificação de arcos por meio de um modelo bastante simplificado. Para tanto, foi levado em consideração apenas a ação das forças vizinhas, de

forma direta. Por isso, nas equações ((2-2)-(2-6)), abaixo, tudo o que foi feito foi fazer uma média aritmética simples sobre todas as forças, na mesma direção, que tenham conexão direta com a força a ser calculada, supondo que reproduza, de forma grosseira, o comportamento de arcos reais no material (56).

Por exemplo, para $F_{i,j}^{x+}$, as contribuições relevantes vêm: das forças imediatamente antes e depois do sítio (i, j) , ao longo da mesma linha reta, respectivamente $F_{i,j-1}^{x+}$ e $F_{i,j+1}^{x+}$, associadas com a transmissão direta da força ao longo do arco; da força paralela aplicada na mesma célula, mas na parede oposta ($F_{i,j}^{x-}$), uma vez que ela pode facilitar (se ambas estiverem agindo no mesmo sentido) ou impedir (se ambas estiverem agindo em sentidos opostos) o transporte de grãos pela transmissão do seu efeito através da fase “mole” da célula em questão; da força paralela da célula adjacente ($F_{i-1,j}^{x-}$), cujo arco correspondente interage com o arco a ser calculado por atrito cinético; e da própria força calculada ($F_{i,j}^{x+}$).

Assim, nosso “modelo de teste” pode ser descrito por esse simples conjunto de equações (56):

$$F_{i,j}^{x+}(t + \tau) = \frac{F_{i,j+1}^{x+}(t) + F_{i,j-1}^{x+}(t) + F_{i,j}^{x-}(t) + F_{i-1,j}^{x-}(t) + F_{i,j}^{x+}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{x+}(t), \quad (2-2)$$

$$F_{i,j}^{x-}(t + \tau) = \frac{F_{i,j+1}^{x-}(t) + F_{i,j-1}^{x-}(t) + F_{i,j}^{x+}(t) + F_{i+1,j}^{x+}(t) + F_{i,j}^{x-}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{x-}(t), \quad (2-3)$$

$$F_{i,j}^{y+}(t + \tau) = \frac{F_{i+1,j}^{y+}(t) + F_{i-1,j}^{y+}(t) + F_{i,j}^{y-}(t) + F_{i,j+1}^{y-}(t) + F_{i,j}^{y+}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{y+}(t), \quad (2-4)$$

$$F_{i,j}^{y-}(t + \tau) = \frac{F_{i+1,j}^{y-}(t) + F_{i-1,j}^{y-}(t) + F_{i,j}^{y+}(t) + F_{i,j-1}^{y+}(t) + F_{i,j}^{y-}(t)}{5} + \eta_{i,j}^{y-}(t), \quad (2-5)$$

$$\Delta\psi_{ij} = K \ln(k_f |F_{R_{i,j}}| + 1) + \eta_{i,j}^{\psi}(t), \quad (2-6)$$

onde K define a escala de tempo ($K = 0.1$), k_f é a escala de força ($k_f = 20$), os η 's são números gerados aleatoriamente (por meio de uma distribuição normal, com média $\mu = 0$ e variância σ^2), ψ é a função densidade de grãos das células e $F_{R_{i,j}}$ é a resultante das forças dos arcos aplicadas nas bordas da célula (i, j) e calculadas separadamente para cada direção. A variação de $\psi_{i,j}$ é dada pelo modelo da seção 2.4, e descrita pela Equação (2-6), a qual por sua vez está de acordo com o disposto pela Equação (2-1).

2.5.3

Modelo Completo

Para levar em consideração os efeitos do atrito estático nas bordas, o feedback da força da massa de grãos na fase “mole”, o possível atrito cinético entre os arcos de células adjacente, etc., um modelo mais detalhado foi elaborado. Esse modelo incorpora também o mecanismo de realimentação entre a massa e a intensidade do arco.

Vários parâmetros novos são introduzidos aqui: os parâmetros α e β dão conta das anisotropias internas (em um caso genérico, é definido $\alpha = \beta = 1$) para o termo de média aritmética das equações abaixo, relacionado ou com a estrutura de transmissão de estresses ao longo do arco em si ou com o quando a massa granular no interior da célula transmite a influência do arco paralelo na borda oposta da célula; c_1 é um pequeno termo de acoplamento que leva em conta o atrito cinético entre células vizinhas - a função de Heaviside indica o sentido da contribuição da força de atrito cinético, devido ao deslizamento relativo entre os arcos de bordas de células adjacentes; c_2 controla a interação compressiva entre as fases “moles” de células vizinhas e a sua influência no reforçamento-enfraquecimento da intensidade de estresse do arco. Isso é feito de fato pelo termo de “penalidade” na energia (controlado pelo c_2) que é associado com as funções exponenciais (uma constante arbitrária no argumento da exponencial não é mostrado) da diferença de densidades de massa entre células vizinhas. É dispendioso tentar excessivamente encher (ou esvaziar) células, a custo das suas células vizinhas. O pequeno ϵ previne divergências numéricas

espúrias. Abaixo, será descrito com maiores detalhes o comportamento dos termos mencionados neste parágrafo.

Como no caso real, os segmentos de arcos imediatamente antes e depois de um segmento qualquer interagem com a força a ser calculada por meio de contato direto (os primeiros dois termos das Equações (2-2)-(2-5)). Aqui, pelo menos, é mantido o mesmo método do modelo simplificado: uma simples média sobre ambos. O outro termo das equações anteriores, correspondente à força na parede oposta da mesma célula, também dá uma contribuição direta, mas de uma natureza diferente. Isso acontece porque os outros dois termos representam segmentos de arcos conectados por contato direto, enquanto este reflete a influência de forças na parede oposta da mesma célula no transporte do material granular de seu interior. Para levar essa diferença em consideração, esses tipos diferentes de contribuição são ponderados pelas constantes α e β - onde α depende apenas das propriedades físicas dos grãos, enquanto β depende não apenas dessas propriedades, mas também da densidade do meio: se o meio for mais denso, a influência desta força será maior, e vice-versa. Para simplificar o modelo computacional, no entanto, aqui o parâmetro β depende apenas das condições iniciais do sistema, em vez de depender de um cálculo passo-a-passo baseado na densidade de cada célula individual a cada passo de tempo. É, naturalmente, uma grande simplificação, mas necessária para manter o tempo de simulação computacional dentro de um limite razoável.

O atrito entre células (isto é, arcos) vizinhas é levado em conta agora por meio de uma função degrau de Heaviside. O atrito aqui é considerado uma função do coeficiente de atrito cinético efetivo (representado pelo parâmetro c_1), e a função degrau de Heaviside define se o atrito está trabalhando a favor ou contra o movimento granular da célula. O sinal é dado pelo valor da função Heaviside da diferença entre as forças e subtraindo $1/2$ (por exemplo, $[\theta (F_{i-1,j}^{x-}(t) - F_{i,j}^{x+}(t)) - \frac{1}{2}]$ resultará em $-1/2$ se as forças têm sinais opostos e $+1/2$ em caso contrário). Assim, tem-se meios de levar em consideração a contribuição direta causada pelo atrito, com o atrito cinético entre as bordas aumentando ou reduzindo as forças propagadas pelos arcos.

Outro problema abordado neste modelo é a descrição das propriedades físicas do meio sem olhar para o que está ocorrendo na fase “mole” do interior da célula. Para melhorar o modelo, foi incluído neste ponto um termo dependente das densidades das células, que acarreta duas coisas: primeiro, fornece uma contribuição, à força, relativa às quantidades de grãos dentro da célula, e, segundo, leva em consideração que cada célula tem um limite físico de um certo número N de grãos em seu interior. Se a célula tiver atingido a sua capacidade máxima, então ela não pode receber mais grãos. Se houver

mais grãos em células adjacentes que deveriam se mover para a célula em questão, então eles ficarão presos em seu lugar original - criando aglomerados completamente empacotados. Uma vez que não é tentado aqui descrever o comportamento da fase “mole”, é difícil saber de antemão quão relevante será este termo para as simulações - desta forma, o parâmetro constante c_2 deverá ser ajustado, aumentando ou diminuindo a relevância das densidades para o comportamento geral dos arcos.

As condições iniciais são as mesmas do modelo simplificado.

As equações para as forças aplicadas nos grãos de cada célula são (56):

$$\begin{aligned}
F_{i,j}^{x+}(t + \tau) = & \\
& \frac{\alpha \left[\frac{F_{i,j+1}^{x+}(t) + F_{i,j-1}^{x+}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{x-}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i-1,j}^{x-}(t) - F_{i,j}^{x+}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
& + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
& + \eta_{i,j}^{x+}(t),
\end{aligned} \tag{2-7}$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j}^{x-}(t + \tau) = & \\
& \frac{\alpha \left[\frac{F_{i,j+1}^{x-}(t) + F_{i,j-1}^{x-}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{x+}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i+1,j}^{x+}(t) - F_{i,j}^{x-}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
& + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j-1} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
& + \eta_{i,j}^{x-}(t),
\end{aligned} \tag{2-8}$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j}^{y+}(t + \tau) = & \\
& \frac{\alpha \left[\frac{F_{i-1,j}^{y+}(t) + F_{i+1,j}^{y+}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{y-}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i,j+1}^{y-}(t) - F_{i,j}^{y+}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
& + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
& + \eta_{i,j}^{y+}(t),
\end{aligned} \tag{2-9}$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j}^{y-}(t + \tau) = & \\
& \frac{\alpha \left[\frac{F_{i-1,j}^{y-}(t) + F_{i+1,j}^{y-}(t)}{2} \right] + \beta F_{i,j}^{y+}(t)}{\alpha + \beta} + c_1 \left[\theta (F_{i,j-1}^{y+}(t) - F_{i,j}^{y-}(t)) - \frac{1}{2} \right] + \\
& + c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}|)} + \left[\frac{(\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j})}{|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j}|)} \right\} \\
& + \eta_{i,j}^{y-}(t),
\end{aligned} \tag{2-10}$$

$$\Delta\psi_{ij} = K \ln(k_f |F_{R_{i,j}}| + 1) + \eta_{i,j}^{\psi}(t), \tag{2-11}$$

onde os valores das constantes da Equação (2-11) acima são os mesmos da Equação (2-6).

No caso especial onde uma das forças de cisalhamento das paredes era inicialmente nula, o atrito estático dos grãos “colados” nela deve ser levado em consideração, pelo menos nos passos iniciais da simulação. Para tanto, é necessário olhar apenas para os termos de atrito das equações acima para as bordas das células em contato com a parede. Então basta forçá-los para ser exatamente igual à força da borda oposta até que esta força atinja um limiar F_0 (tomando como exemplo a célula (i, j) em contato com a parede inferior parada, então $F_{i,j}^{x-} = F_{i,j}^{x+}$ para $F_{i,j}^{x+} < F_0$). Após isso, as equações normais para as forças podem ser seguidas. Isto força uma condição de transporte lateral nulo de grãos entre as células, simulando o efeito do atrito estático.

2.5.4

Resultados 2D

Os resultados obtidos pelas nossas simulações computacionais concordam com os resultados experimentais encontrados na literatura. Em ambos os modelos (tanto no simplificado quanto no mais completo), a modelagem foi feita através de uma seqüência de grãos entre as duas paredes, simulando esta condição por meio de um sistema retangular com condições periódicas nas paredes laterais. O perfil de densidades no início é isotrópico, com cada célula preenchida com metade de sua capacidade máxima. As paredes superior e inferior são submetidas a forças em sentidos opostos, criando, conseqüentemente, um cisalhamento. As células entre as paredes começam sem quaisquer forças ou taxas de transporte. À medida em que o tempo vai passando, o sistema evolui naturalmente - os grãos começam a ser transportados gradativamente entre as células da rede, devido tanto ao movimento aleatório quanto às forças

aplicadas ao longo das bordas das células, criando os arcos e a propagação do estresse - e, em consequência, a transmissão de força que eles causam. Após o equilíbrio ser atingido, os campos de velocidade e densidade são inspecionados e o comportamento do meio é analisado. Imagens da simulação computacional podem ser vistas na Figura 2.6.

Mesmo o nosso modelo simplificado, para os testes iniciais, com uma equação sem refinamentos para as forças, mostra que a modelagem do meio como um grupo de células quadradas, com arcos se formando nas bordas entre elas, já é boa o suficiente para reproduzir um sistema real, como pode ser visto na Figura 2.7. Estão apresentados lá os resultados para três configurações diferentes de cisalhamento externo: $F_1 = F_2$, $F_1 > F_2$ e $F_2 = 0$, onde F_1 e F_2 são os módulos das forças aplicadas respectivamente em cada parede (não-periódica) do sistema - note que F_1 e F_2 (quando diferentes de zero) possuem sempre sinais opostos entre si. É interessante notar que a banda de cisalhamento observado no perfil de velocidades é muito sensível às forças aplicadas nas paredes, exatamente como deveria ser. No caso extremo no qual uma das paredes é estática, a banda de cisalhamento é formada diretamente na parede, o que não condiz com a realidade. Mas, ao menos, o perfil de densidade do meio mostra que o mesmo permanece basicamente isotrópico. À medida que o sistema evolui durante a simulação, pode ser observado que às vezes pequenas regiões de alta densidade (regiões onde a densidade das células granulares atingem níveis acima de sessenta por cento de sua capacidade) são formados, mas são rapidamente dissolvidos - mesmo na vizinhança da banda de cisalhamento. Portanto, pode ser concluído que seu papel para o sistema como um todo nada mais é que mera flutuação.

Deve ser observado também que o modelo simplificado (desprovido de atrito e contribuições dos efeitos de massa interna das células para os arcos) não é tão bom para reproduzir o que acontece de fato em experimentos reais como o modelo completo, uma vez que já na Figura 2.7 pode ser visto que no caso de velocidade zero na parede externa ($F_2 = 0$) a banda de cisalhamento está localizada na parede. O modelo completo, pelo contrário, é muito mais consistente - nota-se, na Figura 2.8, uma grande massa de grãos em repouso próximo à parede estacionária, como esperado.

Quando os refinamentos propostos no modelo completo são incluídos, a formação da banda de cisalhamento se torna muito mais pronunciada e realista. Como pode ser visto nas Figuras 2.8 e 2.9, os gráficos mostram uma clara formação de banda de cisalhamento, que varia de acordo com as forças assinaladas para as paredes externas, reproduzindo o que pode ser observado experimentalmente. Não apenas isso, mas com a adição dos termos de atrito

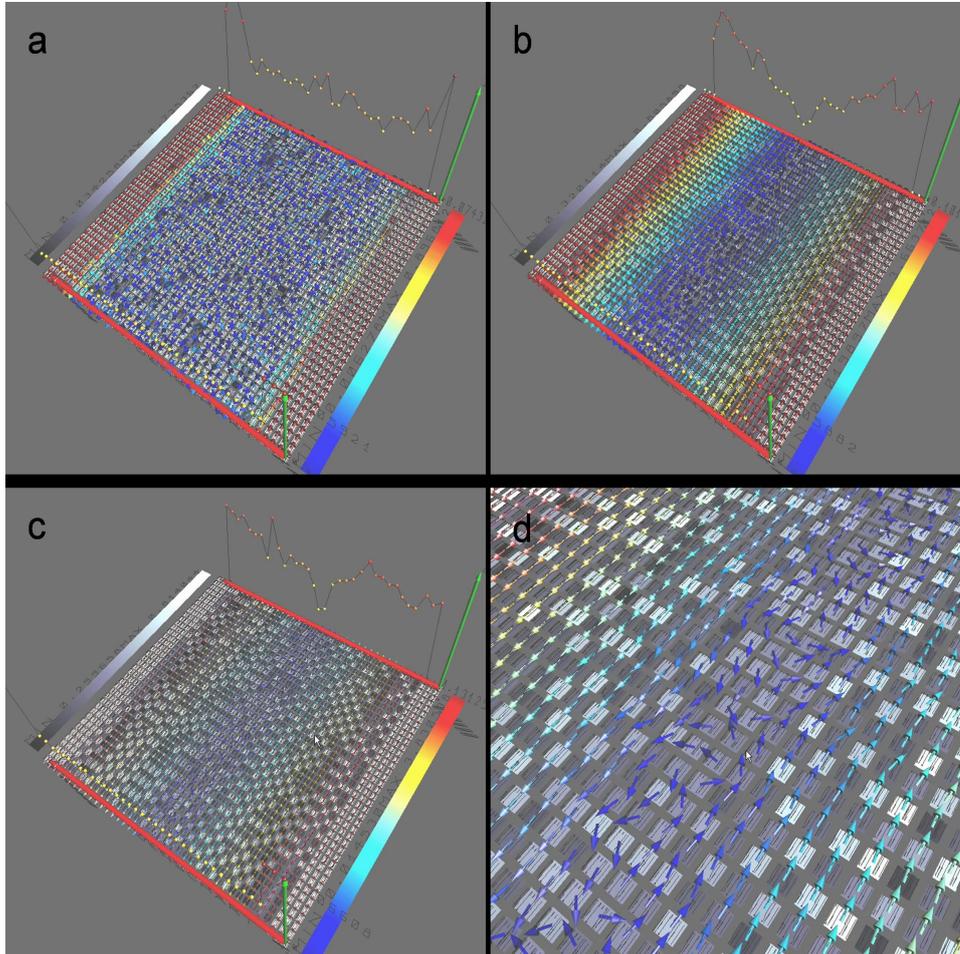


Figura 2.6: Imagens da simulação computacional. **a**, **b** e **c** mostram três estágios diferentes da simulação, respectivamente: nos estágios iniciais, onde as velocidades (representadas por flechas) estão todas distribuídas aleatoriamente ao longo do meio, à exceção das paredes (flechas vermelhas); em um estágio intermediário, onde podem ser vistas várias fileiras de células com velocidades orientadas da mesma forma; e no estado de equilíbrio, com quase metade dos grãos se movendo para um lado, e metade para o outro, com a banda de cisalhamento formada no centro. **d** mostra um zoom desta área central, onde a velocidade é distribuída aleatoriamente e o seu módulo é praticamente zero, resultando em uma banda de cisalhamento (56).

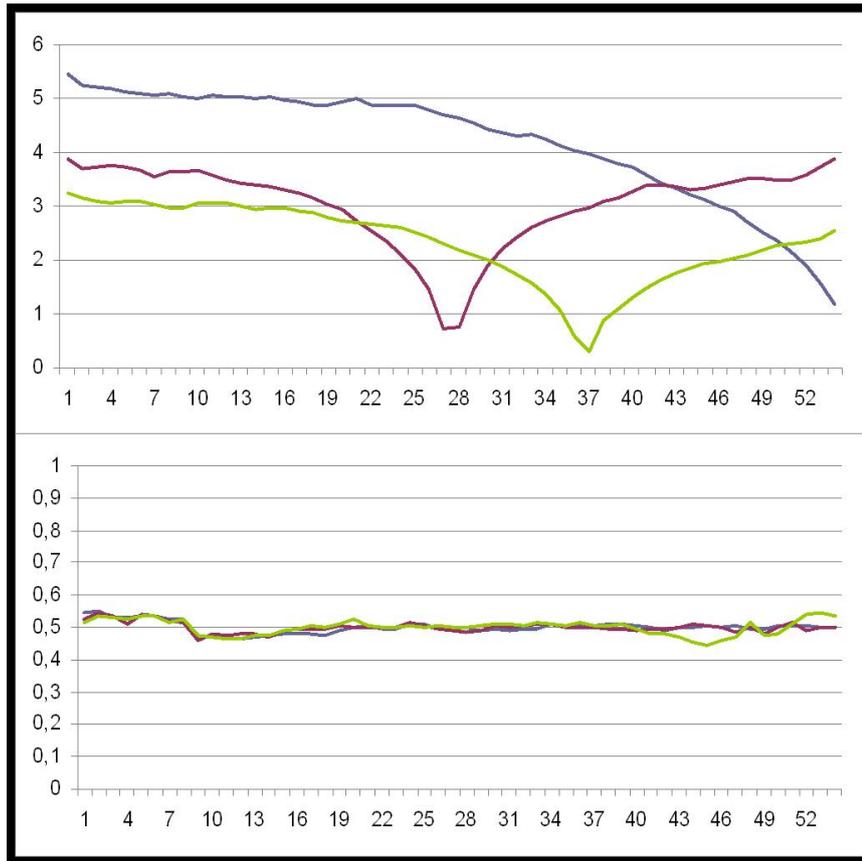


Figura 2.7: Gráficos dos perfis de velocidade (em módulo) e densidade para três configurações diferentes do modelo computacional simplificado: $F_1 = F_2$ (vermelho), $F_1 > F_2$ (verde) e $F_2 = 0$ (azul). É fácil ver a formação análoga a uma banda de cisalhamento no primeiro gráfico (de velocidade), enquanto o segundo mostra que a densidade dos grãos no interior das células se mantém razoavelmente constante em todo o sistema (56).

cinético e de contribuição das densidades, as simulações correm de forma muito mais suave e gradual do que no modelo simplificado, evitando qualquer tipo de aglomerações (o estado de equilíbrio foi atingido mais rapidamente com a seguinte configuração de parâmetros: $\alpha = \beta = 1$, $c_1 = 0.03$ e $c_2 = 0.1$).

Convém frisar também que a formação observada, em todos os casos, é muito mais condizente com bandas de cisalhamento reais do que no modelo simplificado, sendo mais suave e englobando distâncias de algumas poucas células de separação, em vez de praticamente apenas uma, como no caso anterior. Isto é particularmente verdade para o caso $F_2 = 0$, onde a banda de cisalhamento se forma próximo à parede, mas não colado à mesma, como o modelo anterior parecia implicar.

E também é importante notar que, apesar de variações nos parâmetros do modelo influenciar as características de evolução do sistema e do seu estado de equilíbrio (incluindo a banda de cisalhamento), o comportamento

do sistema, suas propriedades cinemáticas e a física por trás da simulação (em particular a própria formação da banda de cisalhamento), se mantêm incólumes - mostrando que os parâmetros são relevantes mas não interferem com a descrição física proposta para o sistema.

2.6

Modelo Computacional Tridimensional

2.6.1

Descrição do Arranjo Experimental 3D

Para melhor testar as aplicações e realismo do modelo, o próximo passo foi passar para uma generalização tridimensional, tentando simular as condições propostas e desenvolvidas por Fenistein *et al.* (49, 50) em experiências realizadas em laboratório.

Uma forma padrão de estudar os efeitos do cisalhamento em um sistema granular é usar um arranjo Couette modificado (49, 50, 51), composto de um cilindro externo fixo (de raio R), cuja base possui um anel externo fixo, preso às paredes, e um disco interno girante (de raio r , com $0 < r < R$) - ver Figura 2.10. A superfície superior é livre, sem qualquer estresse aplicado a ela.

O sistema montado por Fenistein *et al.* consistia em um cilindro transparente de altura h repleto de grãos, o qual também está ilustrado na Figura 2.10, abaixo. Variando a altura do cilindro, eles observaram, ao fazer com que o disco interno da base girasse e deixando o sistema atingir o equilíbrio, padrões de banda de cisalhamento circulares no topo do cilindro dependentes com a altura. Na verdade, a região interna era menor quanto maior fosse a altura h . Após uma certa altura h_c crítica, nenhuma banda de cisalhamento pode ser observado no topo do cilindro. Török e colaboradores desenvolveram um modelo teórico para tentar explicar o que ocorre no interior do cilindro e como os bandas de cisalhamento se desenvolvem ao longo do mesmo (51, 52), cujos resultados podem ser vistos na Figura 2.11.

No nosso caso, foi utilizado um cilindro de altura $h > h_c$, mas com altura da pilha granular H variável. Uma transição interessante dependente dessa altura H ocorre (na verdade, dependente de H/R). Para um preenchimento raso ($H < R$), o banda de cisalhamento chega à superfície da pilha e a rotação interna pode ser observada externamente como um disco girante no topo do sistema. O raio do disco superior observado é menor que o disco inferior (ou seja, menor que r) e segue com bastante precisão algumas predições teóricas baseadas no princípio de mínima dissipação (51, 52, 54, 55). Entretanto, para alturas de preenchimento maiores ($H > R$), a banda de

cisalhamento colapsa sobre si mesmo, resultando em um formato de domo - fenômeno também previsto pelos modelos teóricos citados. Mais especificamente, o método apresentado por Török *et al.* (51) supõe que a pressão interna varie linearmente com a profundidade, o que só é verdade para preenchimentos rasos e longe das paredes laterais, isto é, $R \gg r$. Na verdade, a altura do domo é prevista tender a zero quando $H \rightarrow \infty$ por esse modelo. Para sistemas com cilindros dimensionados realisticamente, a pressão média tende a alcançar um plateau (devido ao efeito Janssen (31), descrito anteriormente), e assim deveria acontecer com a altura do domo.

Este modelo tem a intenção de dar bons resultados a alturas maiores (com $H > R$), uma vez que aqui a pressão vertical será tratada apenas de forma indireta, de forma análoga ao caso onde o valor da pressão já tenha atingido um plateau.

2.6.2

O Modelo 3D

O modelo de rede de arcos será agora transposto para uma ambientação tridimensional. Assim, nosso meio de rede de células quadradas passa a ser agora uma rede de células cúbicas, com arcos (e, conseqüentemente, estresses e forças) se propagando ao longo das bordas dos cubos. Para identificar cada segmento de arco, foi designado a cada borda de cada cubo um código, que pode ser visto na Figura 2.12. Em nossas equações, cada força é identificada por três índices superiores (correspondentes à direção da força - x , y ou z - e a um código de duas letras referente à borda específica) e três índices inferiores (o endereço da célula em nossa rede).

A equação de força, agora, passa a ser:

$$\begin{aligned}
 F_{i,j,k}^{x(uf)}(t + \tau) &= \\
 &= \frac{1}{\alpha + \beta + \gamma + \lambda} \left[\alpha \left(\frac{F_{i,j-1,k}^{x(uf)}(t) + F_{i,j+1,k}^{x(uf)}(t)}{2} \right) + \right. \\
 &+ \beta \left(\frac{F_{i,j-2,k}^{x(uf)}(t) + F_{i,j+2,k}^{x(uf)}(t)}{2} \right) + \gamma \left(\frac{F_{i,j,k}^{x(df)}(t) + F_{i,j,k}^{x(ub)}(t)}{2} \right) + \lambda F_{i,j,k}^{x(db)}(t) \left. \right] + \\
 &+ c_2 \left\{ \left[\frac{(\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k})}{|\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}|)} + \right. \\
 &+ \left. \left[\frac{(\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k})}{|\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}| + \epsilon} \right] e^{(|\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j,k}|)} \right\} + \\
 &+ \eta_{i,j,k}^{x(uf)}(t).
 \end{aligned}
 \tag{2-12}$$

Vamos analisar cada termo da equação (2-12) separadamente.

As primeiras duas linhas são compostas de quatro termos, cada um com sua própria constante. O termo com o parâmetro α é relacionado com as forças das células imediatamente antes e depois da célula em questão (para simplificar, doravante a força a ser calcular será referida como força “primária” e sua célula, célula “primária”), na mesma direção (no caso da força observada na equação (2-12), x). O termo β funciona exatamente como o termo α , mas diz respeito aos segundos vizinhos, ou seja, as células imediatamente antes e depois das referentes ao termo anterior. O termo γ dá conta da influência das forças vizinhas na célula primária (como sempre, na mesma direção da força primária), as duas forças ao longo das bordas opostas das faces na qual a força primária se encontra. Por último, o termo λ refere-se à força diagonalmente oposta à força primária. Uma vez que a influência tanto do termo β quanto do λ são bem menores que a dos outros dois, as relações $\beta \ll \alpha$ e $\lambda \ll \gamma$ são impostas.

As terceira e quarta linhas da equação (2-12) são as contribuições das funções densidades, e ela funciona exatamente da mesma forma que suas correspondentes nas equações (2-7)-(2-10).

O último termo é apenas o termo aleatório estocástico, o qual inclui a difusão granular no modelo.

Convém frisar que, no modelo tridimensional, não há contribuição do atrito entre os arcos. A explicação não é complicada: em nosso modelo 2D, um arco (um objeto unidimensional) tem uma codimensão de 1. Portanto, como o meio possui duas dimensões e a soma de seus vínculos (dois arcos) é 2, interseções de arcos podem ser encontradas em espaços de dimensão zero (um ponto). Já no modelo 3D, arcos possuem codimensão de 2. Logo, a soma de seus vínculos é igual a 4 - e com isso a interseção possui uma dimensão -1 , o que significa que ela tem probabilidade zero de acontecer.

2.6.3 Resultados 3D

Os resultados encontrados para o sistema modelado tridimensionalmente para tentar reproduzir os resultados experimentais de Fenistein *et al.* e comparar com os modelos teóricos de Török *et al.* foram de um sucesso quase absoluto.

Em primeiro lugar, convém ressaltar que o sistema permanece isotrópico ao longo da simulação, com a densidade média das células mantendo-se constante durante a mesma.

Os resultados do modelo podem ser visto nas Figuras 2.13 e 2.14.

Observa-se de imediato que as previsões do modelo teórico de Török *et al.* (51) são reproduzidas fielmente, a saber: a formação do domo (quando a banda de cisalhamento colapsa) para $H > R$, e a banda de cisalhamento circular no topo para $H < R$ (observado por Fenistein *et al.* (49, 50) em laboratório). Convém voltar à Figura 2.11 para melhor observação da correspondência entre as formas obtidas para a banda de cisalhamento e o modelo. O mais interessante é que, no decorrer da simulação, é possível perceber claramente a evolução da formação da banda de cisalhamento, como um círculo de raio cada vez menor (à medida que a altura do topo da banda de cisalhamento aumenta), até que: se $H < R$, a banda de cisalhamento atinge a última camada de grãos e se estabiliza; ou se $H > R$, a banda de cisalhamento não se sustenta e colapsa, chegando ao equilíbrio quando o domo é formado.

No entanto, podem ser observados (ver Figura 2.13) vórtices no plano horizontal de forças ao longo da banda de cisalhamento. A explicação mais provável para este fenômeno aparentemente irreal que surge nas simulações é o formato cúbico das células. Está em desenvolvimento no momento uma nova rede que, em vez de cubos, consistirá de células cujas laterais sejam arcos de círculo, para utilizarmos coordenadas cilíndricas (o que nos parece mais natural para o sistema descrito de qualquer forma), e desta forma evitarmos vórtices espúrios.

Outro resultado interessante obtido foi para quando a simulação foi realizada com a condição $r > R/2$, não estudada anteriormente, e está disposto na Figura 2.15, abaixo. Com valores mais altos de r , um comportamento estranho aparece. A formação próxima à base do cilindro é consistente com a literatura, mas na parte próxima ao topo da banda de cisalhamento a simulação diverge fortemente, devido ao fato que estamos simulando um cilindro sem atrito nas paredes laterais. O resultado, no entanto, é compatível e coerente com o princípio da dissipação mínima (51, 52, 54, 55), uma vez que, com as paredes sem atrito, a menor dissipação de energia se dá com a banda de cisalhamento curvando-se dessa forma aparentemente espúria para as paredes, em vez de colapsar na forma observada nos casos anteriores e prevista teoricamente. Isto implica na necessidade de se incluir o atrito estático com as paredes, como foi feito no modelo 2D. De qualquer forma, é curioso notar que uma vez que o raio do disco interno é, neste caso, maior que a metade do raio do cilindro, a formação no centro torna-se uma influência mais forte no sistema que a parte externa. Logo, pode-se esperar que, ao invés da banda de cisalhamento colapsar para o centro do cilindro, formando o domo, ele colapse para fora, em direção às paredes laterais, seguindo o princípio de dissipação mínima citado acima. Convém frisar que o modelo desenvolvido por Török *et al.* não leva

este caso em consideração, pois é baseado em um modelo hidrodinâmico, onde $r \ll R$ e o efeito Janssen é considerado desprezível.

2.7

Sumário

Em suma, o modelo proposto baseado na propagação das forças e transporte de massa em decorrência à presença de arcos ao longo do sistema parece dar resultados bastante satisfatórios ao tentar descrever o comportamento coletivo de sistemas de materiais granulares densos. Nosso modelo de rede de células quadradas bidimensional, apesar de uma grande aproximação de sistemas reais, com arcos sendo formados de forma não-ordenada, fornece resultados bastante razoáveis, descrevendo com precisão surpreendente o comportamento qualitativo de sistemas granulares densos sob a ação de forças de cisalhamento - em particular, a formação de bandas de cisalhamento (56).

Da mesma forma, o modelo tridimensional, ainda que uma simplificação, consegue reproduzir não apenas os resultados experimentais encontrados na literatura, mas também é corroborado por modelos teóricos encontrados para descrever os experimentos.

O comportamento quantitativo não é possível de ser simulado com um modelo tão genérico, uma vez que isso é altamente dependente de propriedades granulares específicas (e.g. tamanho, coeficiente de atrito, etc.). Mas, no modelo bidimensional “completo” e no nosso modelo tridimensional, através de uma simples variação dos parâmetros das equações, essas condições granulares podem ser facilmente reproduzidas de forma coletiva. O que é importante ter em mente, portanto, é que este simples modelo mostra que arcos têm um papel muito mais importante no comportamento de sistemas granulares densos não-estacionários do que acreditava-se anteriormente, já que os fenômenos físicos foram tão bem reproduzidos aqui.

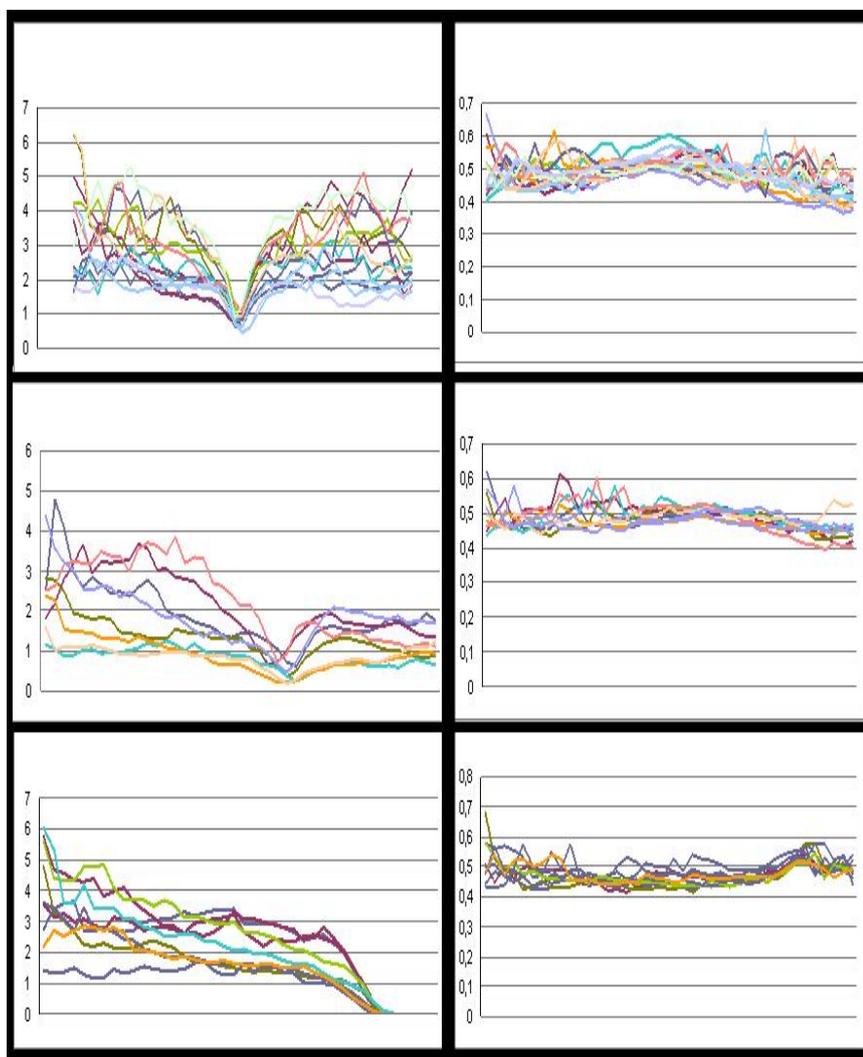


Figura 2.8: Gráficos dos perfis de magnitude da velocidade (primeira coluna) e densidade (segunda coluna) para três diferentes configurações do modelo computacional completo, de cima para baixo, respectivamente: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. As linhas coloridas diferentes representam configurações diferentes dos parâmetros da simulação (56).

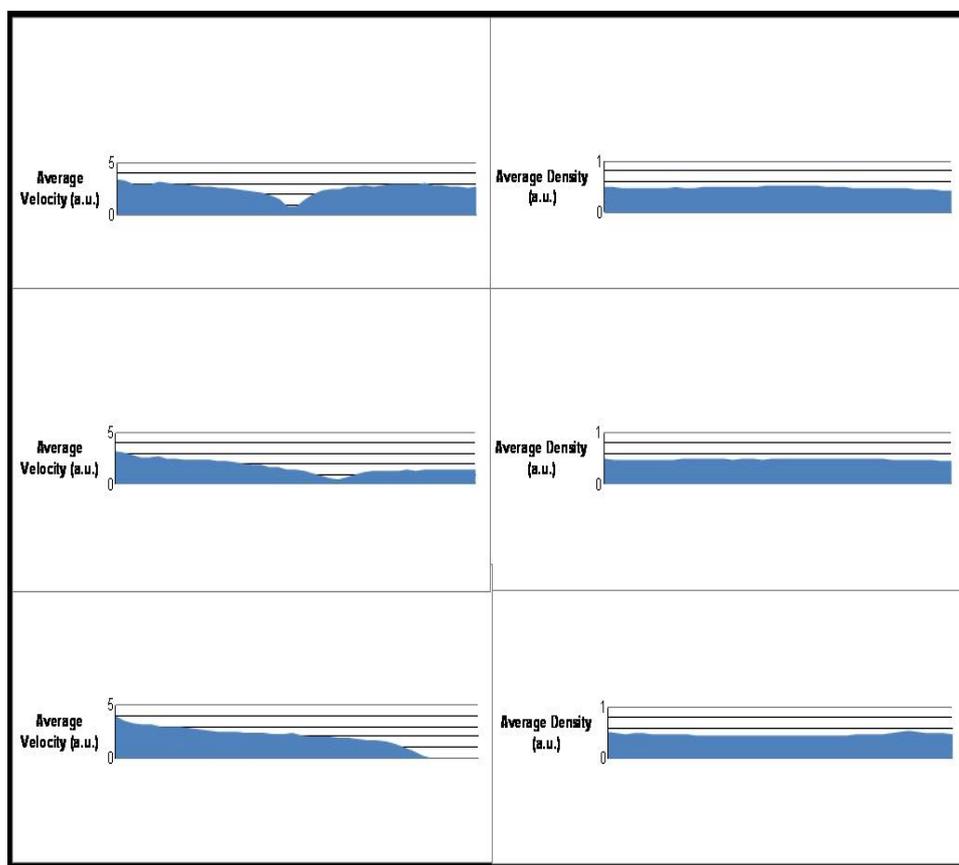


Figura 2.9: Gráficos dos perfis de velocidade (em módulo) média e densidade média (primeira e segunda colunas, respectivamente) para três diferentes configurações do nosso modelo computacional completo, respectivamente de cima para baixo: $F_1 = F_2$, $F_1 = 2F_2$ e $F_2 = 0$. Os perfis acima representam médias feitas sobre todas as configurações de parâmetros testadas. É fácil perceber a formação da banda de cisalhamento - em todos os três casos - na primeira coluna, enquanto a segunda mostra que não há formação de aglomerado e que a densidade das células se mantém constante através do meio (56).

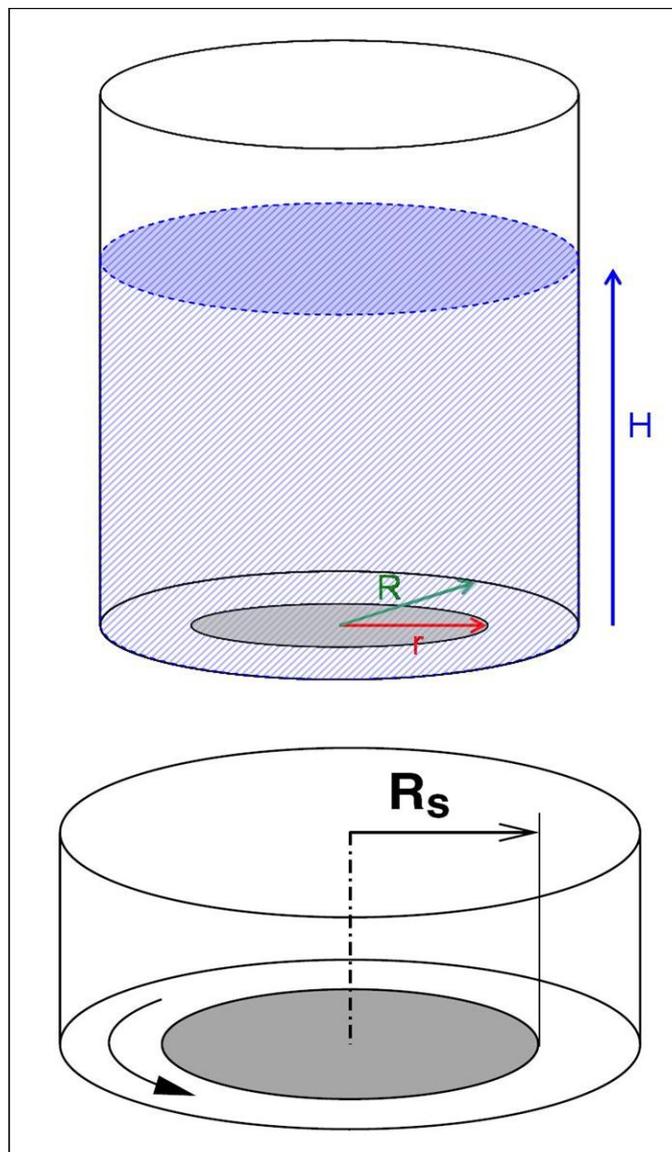


Figura 2.10: Acima, representação do experimento a ser simulado, em 3 dimensões. Abaixo, ilustração do experimento conduzido por Fenistein *et al.* (49, 50). É bastante similar ao experimento modelado, como pode ser visto acima, mas com alturas menores do cilindro e com grãos o preenchendo completamente. R_S representa aqui o raio do disco girante da base.

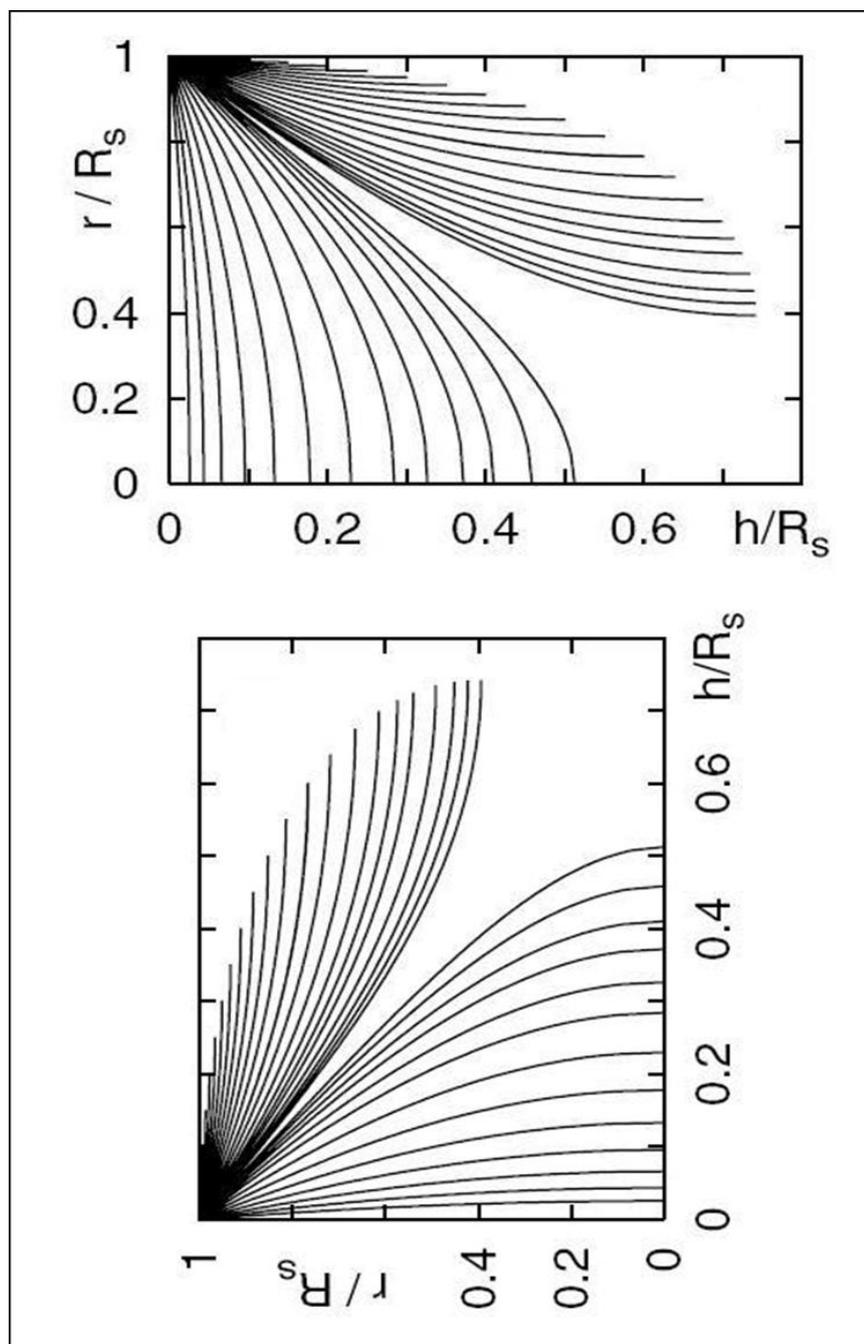


Figura 2.11: Gráficos obtidos por Török *et al.* (51, 52) para modelar os experimentos realizados por Fenistein *et al.* (49, 50). Nele está disposta a variação do raio da banda de cisalhamento com a sua altura. Abaixo, olhando o gráfico original de lado (tomando r/R_s como base), pode-se ver o formato do perfil da banda de cisalhamento sendo delineado pelas linhas do mesmo.

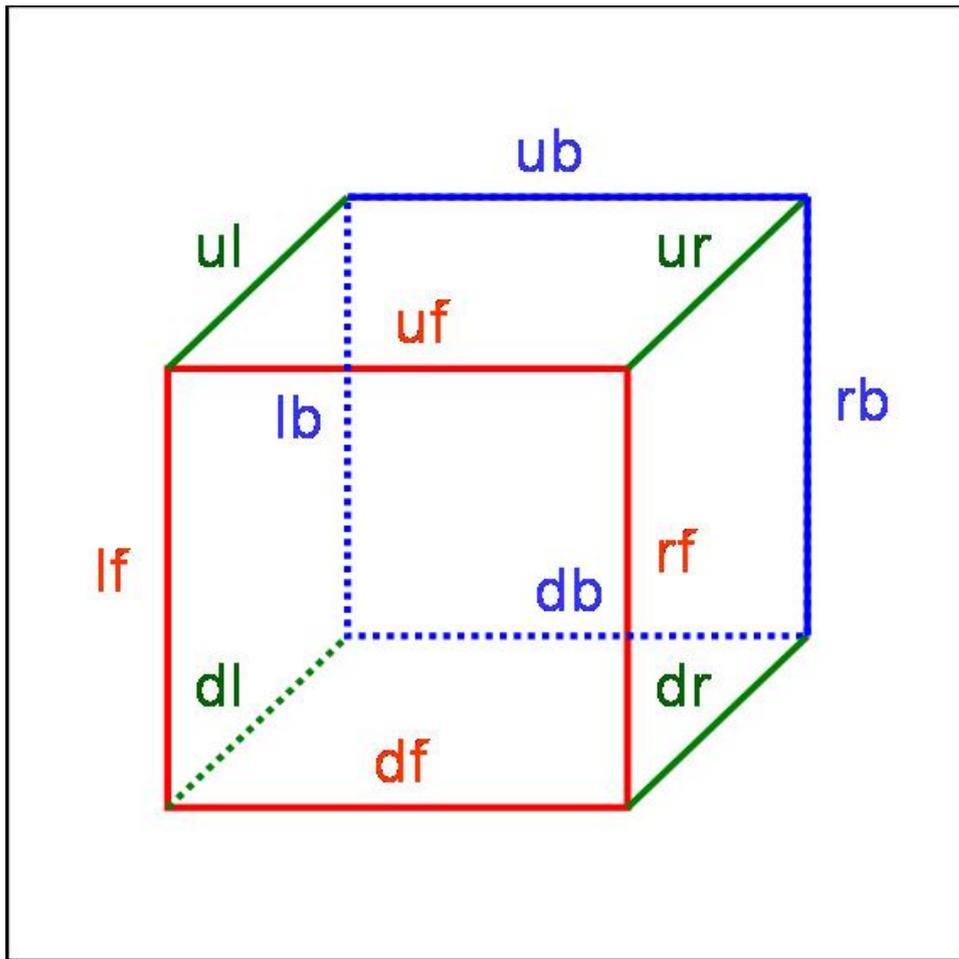


Figura 2.12: Célula 3D cúbica. Cada borda é identificada por um código de duas letras.

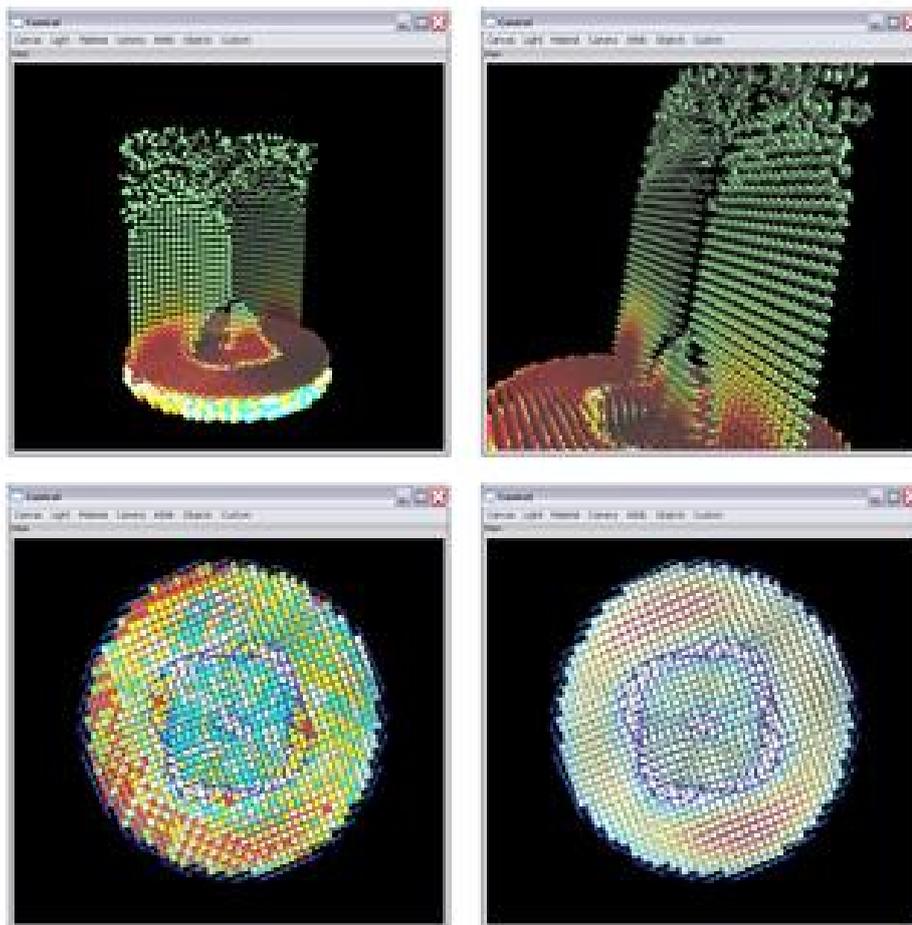


Figura 2.13: Imagens da simulação com o sistema em equilíbrio. Nota-se claramente o domo colapsado nas imagens de cima (onde as setas representam a velocidade dos grãos), conforme modelo de Török (51). As imagens inferiores mostram o diagrama de forças horizontais com dois cortes em alturas diferentes, onde percebe-se a formação de vórtices.

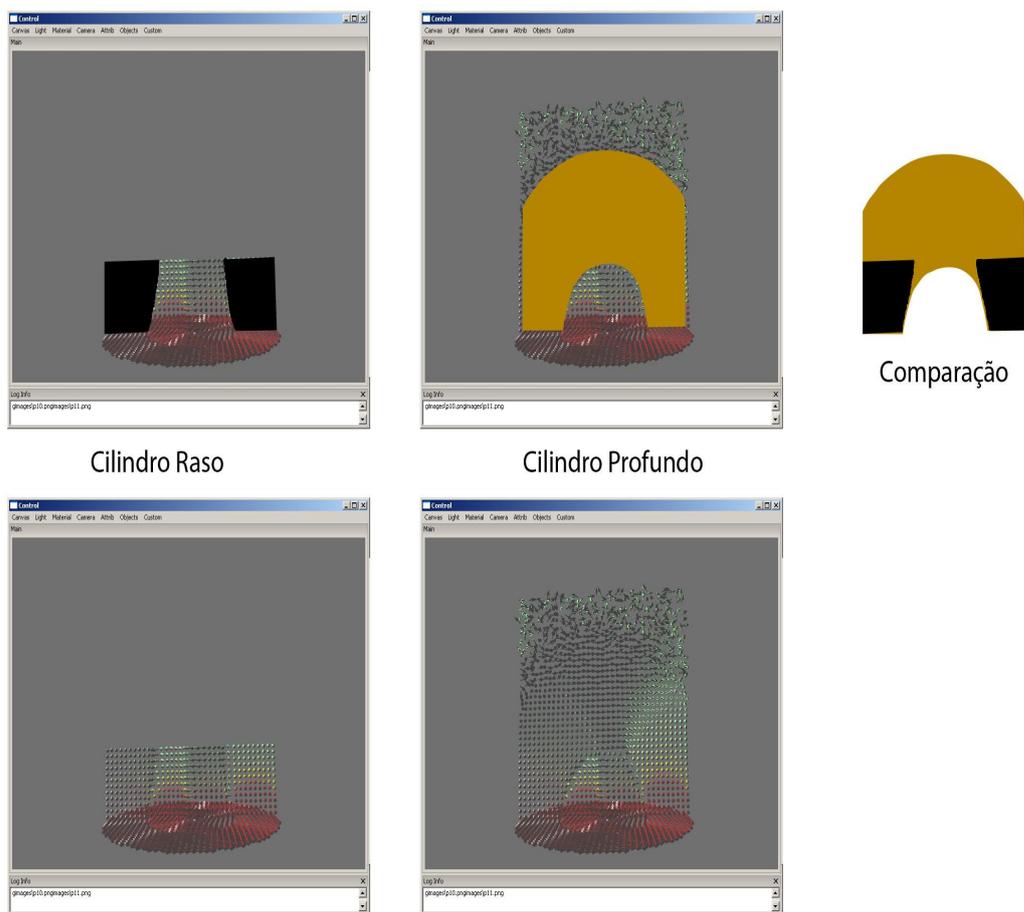


Figura 2.14: Resultados observados para preenchimentos H rasos (com $H < R$) e profundos (com $H > R$). Os resultados obtidos por Fenistein (49) são reproduzidos para o cilindro raso, bem com as previsões teóricas de Török (51) para os dois casos. Nota-se claramente na comparação entre as áreas coloridas a diferença do formato da banda de cisalhamento de um caso para outro.

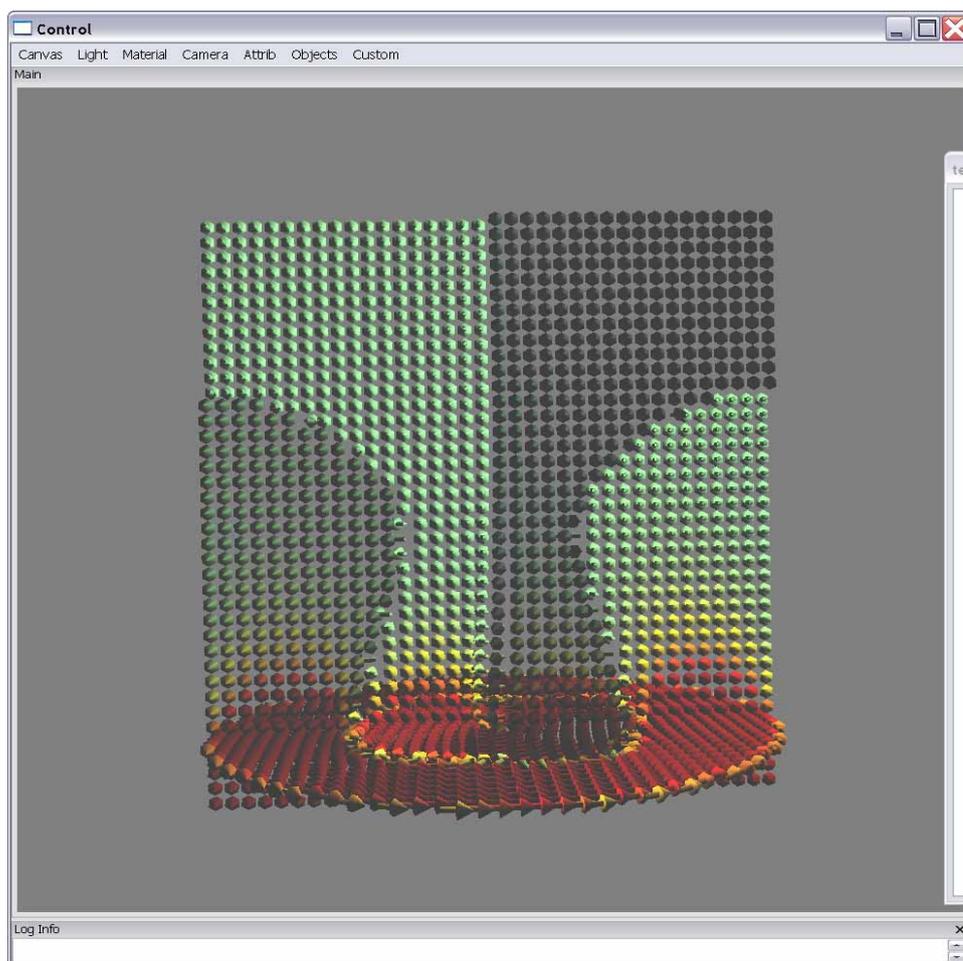


Figura 2.15: Imagem do sistema em equilíbrio para o caso $r > R/2$, onde em vez de colapsar para o centro do cilindro, o colapso da banda de cisalhamento ocorre em direção às paredes, onde os coeficientes de atrito cinético e estático são nulos, o que é coerente com a mínima dissipação (51, 52).

3

Difusão Correlacionada

3.1

Introdução: Difusão

3.1.1

Processos Difusivos

Na primeira metade do século XIX, Thomas Graham foi o primeiro cientista a trabalhar com processos difusivos (em gases), apesar de ter ficado conhecido historicamente por ter inventado a primeira forma de diálise (57). Mas baseado em seus experimentos, Adolf Fick fez medições de concentrações e fluxos de sal difundindo entre dois reservatórios através de tubos com água.

Fick, um professor de anatomia de Zürich, baseado nessas observações, conseguiu o que a Graham foi impossível: encontrar uma lei geral que governasse todo e qualquer processo difusivo (58). Fick foi capaz de perceber a analogia profunda entre difusão e a condução de calor e/ou eletricidade. Em outras palavras, ele teve a intuição que a difusão poderia ser descrita de acordo com o mesmo formalismo matemático que a Lei de Fourier para a condução de calor (33) ou a Lei de Ohm para eletricidade (59). Dessa forma, Fick apontou que o fluxo de matéria é proporcional ao gradiente de sua concentração (denotado por y) com um fator de proporcionalidade k , o qual ele chamou de “uma constante dependente da natureza das substâncias”. Seguindo o *approach* de Fourier, se utilizando da conservação da matéria, Fick chegou à equação básica (na notação original de Fick, com o sinal de menos antes do coeficiente k):

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -k \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}. \quad (3-1)$$

Fick teve muitas dificuldades para verificar a validade de sua equação. A segunda derivada da concentração pela distância não é uma quantidade facilmente mensurável (pelo menos, com a precisão necessária). Ele conseguiu, no entanto, rodar uma série de experimentos em um regime estacionário - nessas condições ele poderia checar suas equações, uma vez que aqui a solução matemática passa a ser linear. Um fator interessante do artigo original de Fick é que ele observa que “conforme seria esperado dos experimentos de Graham,

o valor de k aumenta com o aumento de temperatura. (...) Provavelmente essa dependência com a temperatura não é simples”.

Nesta época, as medidas de difusão (tanto de Graham quanto de Fick) eram confinadas a meios fluidos, pois tais medidas podem ser feitas à temperatura ambiente facilmente. Difusão em sólidos não era um processo considerado possível, apesar de Boyle ter sintetizado latão por difusão interna de zinco em cobre (60).

A outra forma de se aproximar processos difusivos é, ao invés do *approach* fenomenológico das leis de Fick, partir de ponto de vista físico e atômico, considerando os processos de random walk das partículas ao se difundir.

O processo de Random Walk (passos aleatórios) de partículas em suspensão em um fluido foi descoberto em grãos de pólen pelo botanista escocês Robert Brown. Os experimentos de Brown, com substâncias orgânicas (vivas ou não) e inorgânicas, revelou que tal movimento era uma propriedade geral da matéria neste estado (61), e por isso foi cunhado o termo Movimento Browniano para descrevê-lo.

A descrição matemática do movimento browniano só foi derivada quase um século depois (em 1905) por Albert Einstein (60, 63). Ele foi o primeiro a compreender, indo de encontro a diversos cientistas da época, que a quantidade básica não era a velocidade média das partículas, mas o seu deslocamento médio quadrado $\langle R^2(t) \rangle$. As trajetórias são tais que a velocidade das partículas são insignificantes. O deslocamento médio $\langle R(t) \rangle$ de um número grande de partículas é nulo (no caso de um random walk sem “drift”); por isso a média quadrática é a quantidade significativa. Einstein então conseguiu derivar a relação fundamental entre uma quantidade macroscópica (o coeficiente de difusão) e uma microscópica (o deslocamento médio quadrático):

$$\langle R^2 \rangle = 6Dt.$$

Apesar da teoria do movimento browniano ser uma das pedras fundamentais da física moderna por mais de um século (64), um diverso número de questões fundamentais ainda é levantado acerca dele (65). Suas aplicações são encontradas em vários campos de estudo diferentes, especialmente na área da biofísica, onde o avanço tecnológico permite atualmente a detecção de nanopartículas individuais em sistemas orgânicos vivos (66).

Einstein começa sua derivação matemática considerando uma partícula em um meio “flutuante” (uma partícula em suspensão em um fluido) na posição \bar{x} e bombardeada por partículas cujas energias seguem a distribuição $e^{-E/k_B T}$. Durante um tempo Δt há uma probabilidade ϕ de que a partícula

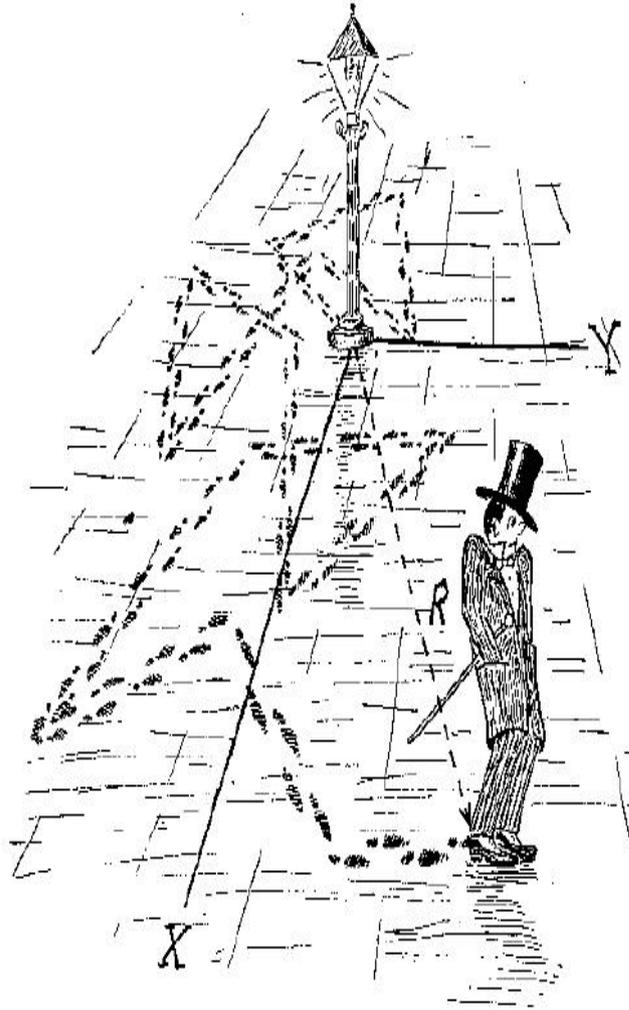


Figura 3.1: Descrição satírica do movimento browniano como o andar de um cavalheiro bêbado (62).

seja movida para uma nova posição $\bar{x} + \bar{\epsilon}$. Em uma difusão isotrópica, a taxa de bombardeamento da partícula em questão não depende da direção, e conseqüentemente, em média, a posição dela não varia muito.

Isso define uma distribuição de salto $\psi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t)$, que pode ser interpretada como a probabilidade de que, durante o intervalo de tempo Δt , a partícula seja levada de \bar{x} para $\bar{x} + \bar{\epsilon}$. Temos de impor a condição óbvia de que, independentemente da posição ou do intervalo de tempo, a partícula tem que ir para algum lugar (considerando $\bar{\epsilon} = 0$ como “algum lugar”); matematicamente, isso quer dizer:

$$\int_M \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} = 1, \quad (3-2)$$

onde M é o conjunto de todos os saltos possíveis. Agora construímos uma “equação mestra”, que dita como a probabilidade flui de um estado para outro

do sistema. A densidade de probabilidades \bar{x} em um instante de tempo $t + \Delta t$ pode ser escrita como a soma de todas as densidades de probabilidade que fluem de uma posição arbitrária para esta em um intervalo Δt . Considerando $c(\bar{x}, t)$ a concentração de matéria no ponto \bar{x} no instante de tempo t , essa é conhecida como a Equação Mestra de Einstein:

$$c(\bar{x}, t + \Delta t) = \int_M c(\bar{x} - \bar{\epsilon}, t) \phi(\bar{x} - \bar{\epsilon}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon}. \quad (3-3)$$

O sucesso dessa construção teórica depende que consideremos a densidade de probabilidades sendo definida por uma média de diversas partículas idênticas e quantizadas (ao invés de um fluxo de campo completamente contínuo). Por isso que é dito que a análise einsteiniana da difusão ajudou a solidificar a idéia de átomos e moléculas como objetos físicos reais, ou como o germe da noção da existência dos fônons (partículas que carregam calor) (67).

Expandindo o lado esquerdo da Equação (3-3) em uma série de Taylor (para pequenos intervalos de tempo), temos

$$c(\bar{x}, t + \Delta t) = c(\bar{x}, t) + \frac{\partial}{\partial t} c(\bar{x}, t) \Delta t + \vartheta(\Delta t^2). \quad (3-4)$$

Para prosseguir, precisamos fazer uma suposição: que, durante o intervalo de tempo arbitrariamente pequeno acima, a distância nominal percorrida pelas partículas seja pequena o suficiente para que possamos expandir em torno de $\bar{x} = \bar{x} + \bar{\epsilon}$. Isso é coerente, uma vez que infere que as partículas não podem simplesmente se “teleportar” de um ponto distante a outro em um intervalo de tempo arbitrário. Expandindo, em Taylor, o lado direito da Equação (3-3), temos, termo a termo:

$$\int_M [c(\bar{x} - \bar{\epsilon}, t) \phi(\bar{x} - \bar{\epsilon}, \bar{\epsilon}, \Delta t)] |_{\bar{x}=\bar{x}+\bar{\epsilon}} d\bar{\epsilon} = \int_M c(\bar{x}, t) \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} = c(\bar{x}, t). \quad (3-5)$$

$$\begin{aligned} \int_M (-\bar{\epsilon} \cdot \nabla) [c(\bar{x} - \bar{\epsilon}, t) \phi(\bar{x} - \bar{\epsilon}, \bar{\epsilon}, \Delta t)] |_{\bar{x}=\bar{x}+\bar{\epsilon}} d\bar{\epsilon} = \\ = -\nabla \cdot \left[c(\bar{x}, t) \int_M \bar{\epsilon} \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} \right]. \end{aligned} \quad (3-6)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_M (\bar{\epsilon} \cdot \nabla)^2 [c(\bar{x} - \bar{\epsilon}, t) \phi(\bar{x} - \bar{\epsilon}, \bar{\epsilon}, \Delta t)] |_{\bar{x}=\bar{x}+\bar{\epsilon}} d\bar{\epsilon} = \\ = \nabla \cdot \left[\nabla [c(\bar{x}, t)] \frac{1}{2} \int_M |\bar{\epsilon}|^2 \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} \right]. \end{aligned} \quad (3-7)$$

As Equações ((3-5), (3-6), (3-7)) correspondem, respectivamente, aos primeiro, segundo e terceiro termos da série de Taylor do lado direito da Equação (3-3). Para estudar a difusão como um processo contínuo, nós deixamos $\Delta t \rightarrow 0$. Juntando as Equações ((3-3) - (3-7)), desprezando os termos $\vartheta(\Delta t^2)$, chegamos a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(\bar{x}, t) = -\nabla \cdot \left[c(\bar{x}, t) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_M \bar{\epsilon} \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} \right] + \\ + \nabla \cdot \left[\nabla [c(\bar{x}, t)] \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \int_M |\bar{\epsilon}|^2 \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} \right]. \end{aligned} \quad (3-8)$$

Olhando para o primeiro termo do lado direito da equação acima, é fácil visualizar que o primeiro momento é a distância média percorrida pela partícula durante o intervalo de tempo Δt , ou seja:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_M \bar{\epsilon} \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} = \bar{v}(\bar{x}), \quad (3-9)$$

definindo uma velocidade média \bar{v} das partículas. Lembrando que neste ambiente com um número de Reynolds baixo a relação $\bar{v} = \sigma \bar{F}$ é válida, e que forças (conservativas) podem ser escritas sempre como o gradiente de um potencial $-V(\bar{x})$, então pode-se escrever $\bar{v} = -\sigma \nabla V$. Da mecânica estatística, é possível derivar que $\sigma = D/k_B T$ (67).

O segundo momento mede a variância do movimento de uma partícula e é a definição microscópica do coeficiente de difusão:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \int_M |\bar{\epsilon}|^2 \phi(\bar{x}, \bar{\epsilon}, \Delta t) d\bar{\epsilon} = D. \quad (3-10)$$

Aplicando as Equações (3-9) e (3-10) na Equação (3-8), chegamos a uma versão mais geral da equação de difusão, comumente chamada de Equação de Fokker-Planck (68):

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\bar{x}, t) = \nabla \cdot D \left[\frac{c(\bar{x}, t)}{k_B T} \nabla V + \nabla c(\bar{x}, t) \right], \quad (3-11)$$

definindo um tipo mais geral de fluxo de partículas:

$$\bar{J} = -D \left[\frac{c(\bar{x}, t)}{k_B T} \nabla V + \nabla c(\bar{x}, t) \right]. \quad (3-12)$$

Se o coeficiente de difusão é invariante no espaço, então

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\bar{x}, t) = D \nabla \cdot \left[\frac{c(\bar{x}, t)}{k_B T} \nabla V + \nabla c(\bar{x}, t) \right], \quad (3-13)$$

e se nenhum potencial externo é aplicado, então chegamos à equação de difusão canônica

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\bar{x}, t) = D \nabla^2 c(\bar{x}, t), \quad (3-14)$$

cuja transformada de Fourier pode ser expressada, através das transformações habituais

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqx} \tilde{c}(q, t)$$

$$\tilde{c}(q, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-iqx} c(x, t),$$

como:

$$\partial_t \tilde{c}(q, t) = -q^2 D \tilde{c}(q, t), \quad (3-15)$$

cuja solução óbvia é

$$\tilde{c}(q, t) = e^{-q^2 D t} \tilde{c}_0(q),$$

que substituindo na transformada de Fourier acima nos dá:

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqx - q^2 D t} \tilde{c}_0(q).$$

Usando agora, como exemplo (que nos será útil mais tarde), a solução $c_0(x) = \delta(x)$ (o que implica em $\tilde{c}_0(q) = 1$), e através de uma simples mudança de variáveis, podemos reescrever a equação acima como (68):

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-Dt \left[q - \frac{ix}{2Dt} \right]^2 - \frac{x^2}{4Dt}},$$

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2} e^{-\frac{x^2}{4Dt}},$$

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (3-16)$$

Esta solução possui um pico central centrado em $q = 0$, que é invariante com o tempo. Se, em vez da delta de Dirac pura e simples, utilizarmos uma delta normalizada pelo número total de partículas ($c_0(x) = N\delta(x)$), a única

diferença na distribuição final é que ela será normalizada por N - ou seja, a solução, a menos de um fator de normalização, não depende do número total de partículas.

3.1.2

Difusão e Segregação Granular

Como visto no Capítulo 1, acima, grãos são passíveis de se difundirem em meios com temperatura granular acima de zero, a qual é definida pela relação

$$T_g = \frac{1}{2} \rho u^2,$$

apresentada na seção 1.4. Para tentar-se descrever sistemas granulares dinâmicos, onde a difusão granular está sempre presente, uma melhor compreensão sobre o funcionamento deste fenômeno é necessária.

Ainda que fluxos granulares densos sejam encontrados em todo lugar, seja na natureza ou na tecnologia (69), descrições completas e bem fundamentadas, por meio de equações constitutivas, do comportamento destes fluxos ainda são assunto para debates (70, 71, 72). Acredita-se, porém, que a difusão granular desempenha um papel importante nos mecanismos de segregação granular.

Um dos aspectos mais fascinantes de materiais granulares heterogêneos (i.e., consistindo de componentes distintos) é a sua tendência à segregação quando submetidos à agitação externa - ao invés de se misturar, como poderia se esperar baseando-se em considerações puramente entrópicas. Essa propriedade é encontrada largamente na natureza e tem implicações tecnológicas importantes (19).

Na verdade, algumas características de segregação de partículas grandes e pequenas pode ser compreendido com uma analogia simples com os fundamentos de termodinâmica de equilíbrio: uma vez que o volume excluído para partículas pequenas ao redor de maiores se torna menor quando grãos grandes se juntam, o estado segregado possui entropia mais alta.

No entanto, sistemas granulares forçados são altamente dissipativos, e esse argumento simples de equilíbrio só pode ser aplicado qualitativamente. Ainda mais porque, não apenas tamanho, mas qualquer variação de propriedades mecânicas das partículas (como formato, densidade, rugosidade, etc.) pode levar à sua segregação. Para fluxos diluídos rápidos bi-dispersos, a segregação ainda pode ser descrita pela teoria cinética de gases dissipativos - Jenkins e Yoon (73) se utilizaram da teoria cinética para derivar um critério de segregação simples baseado na diferença das pressões parciais de cada tipo de partícula, baseado na diferença de tamanho e/ou massa.

Segregação granular vem sendo observada na maioria dos fluxos de misturas granulares, incluindo convexão granular (74), fluxos vibrantes (75, 76, 77), fluxos em cilindros girantes (78, 79), e até mesmo em gases granulares binários resfriando-se de forma livre (80) - um exemplo de segregação granular encontra-se na Figura 3.2. Já a segregação entre partículas pequenas e grandes devido à vibração é chamada de “Efeito Castanha-do-Pará” (7).

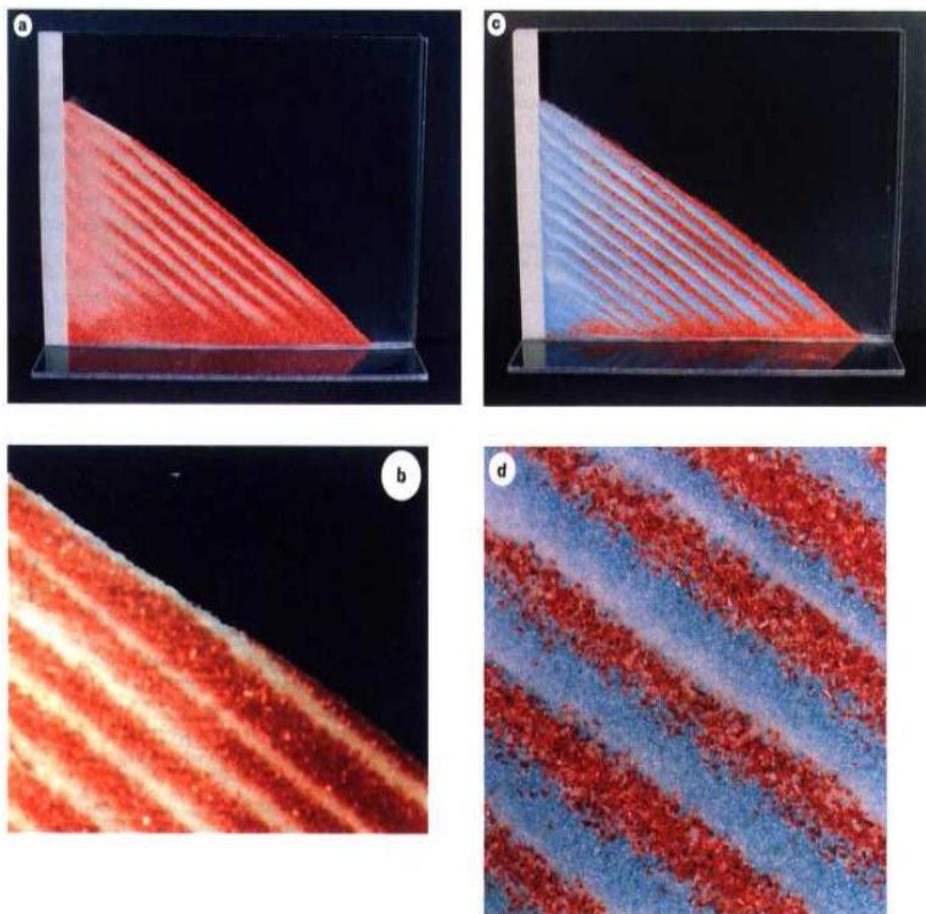


Figura 3.2: Segregação granular em um fluxo inclinado gerado pela gravidade (75), em instantes diferentes de tempo (consecutivos de *a* a *d*).

Apesar de modelos contínuos recentes (81) terem mostrado uma boa concordância qualitativa com os dados experimentais (ver Figuras 3.3 e 3.4, por exemplo), observações recentes em laboratório mostram que a compreensão teórica dos mecanismos de segregação está longe de ser completa (82, 83).

Um desses experimentos, desenvolvido por Khan e Morris (84), sugere que, em vez de difusão simples, uma subdifusão de partículas acontece, levando diretamente a alguns padrões de segregação observados ao longo dos anos. A equação padrão de difusão,

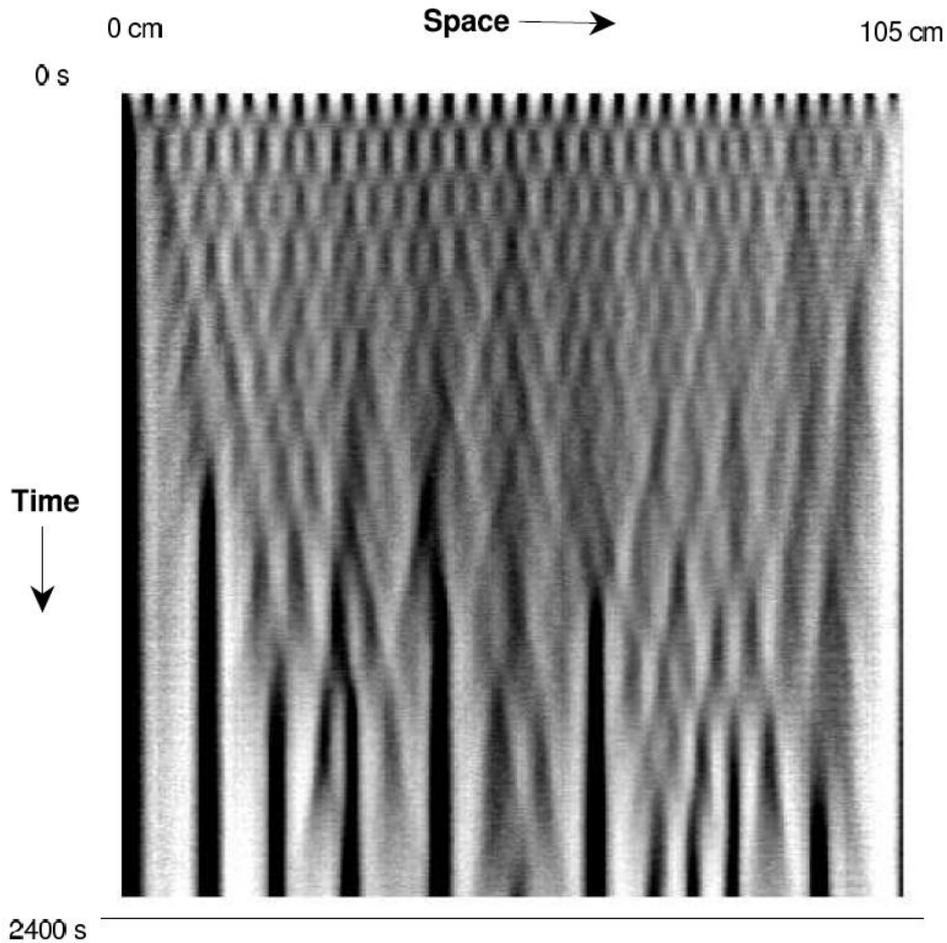


Figura 3.3: Diagrama espaço-tempo de segregação granular em um longo cilindro girante, demonstrando segregação oscilatória por tamanho. No experimento acima, 2400s equivalem a 1850 revoluções. As bandas negras correspondem a areia preta ($45-250\mu m$) e as brancas a sal de cozinha ($300-850\mu m$) (78).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi,$$

mostra uma discordância gritante com os resultados experimentais. Por isso, um estudo maior da equação de difusão para sistemas granulares pode levar, entre outras coisas, a um entendimento maior dos processos de segregação, tão importantes na indústria.

3.1.3 Difusão Granular Correlacionada

Já é conhecido que a difusão granular não obedece exatamente às equações de difusão de partículas independentes por movimento browniano, como descrito acima. Um comportamento conjunto entre as partículas, a

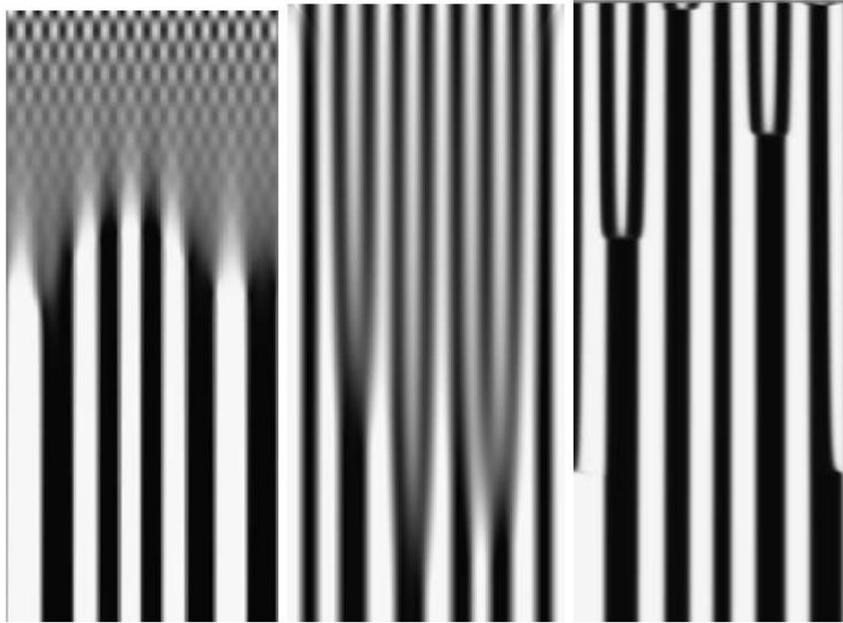


Figura 3.4: Diagramas espaço-tempo demonstrando oscilações de bandas iniciais e o engrossamento das mesmas com o tempo (81), modelando o experimento de Choo (78).

distâncias curtas, foi observado. Diversos trabalhos (36, 37, 38, 39, 85) comprovam a existência de uma correlação no movimento difusivo de partículas próximas, postulando a existência de um comprimento de correlação típico do sistema, que seria o responsável por esse comportamento (40, 41, 42).

Uma das grandes dificuldades ao se lidar com sistemas granulares dinâmicos é a coexistência dos estados sólido, líquido e gasoso (12). Para os dois regimes extremos, equações constitutivas foram propostas baseadas em teoria cinética, para o caso de fluxos rápidos e colisionais, e em mecânica dos solos, para o caso de fluxos lentos e plásticos (43). O regime intermediário denso, onde o material granular flui como um líquido, não possui ainda uma teoria unificada.

Fluxos granulares densos e acelerados pela gravidade em um plano inclinado têm atualmente o status de “sistema modelo”, devido a sua relevância em diversas aplicações geológicas e industriais (43, 37, 86). Uma vez que a superfície da inclinação seja suficientemente áspera e que a altura do fluxo seja pequena comparada com sua largura e comprimento (para que efeitos transientes e de borda possam ser desprezados), o comportamento do fluxo é controlado pelo ângulo de inclinação θ e pela espessura h da camada granular.

Os grãos se estabilizam sem fluxo para, dado um ângulo de inclinação θ , espessuras $h < h_{stop}(\theta)$, onde $h_{stop}(\theta)$ é comumente chamada de “função

de deposição”, pois é aproximadamente igual à espessura do depósito remanescente no plano inclinado quando o fluxo para (seja pela diminuição de θ quanto de h). Estudos recentes confirmam que, para grãos esféricos, a velocidade u do fluxo (em seu estado constante, tirada a média com a profundidade) pode ser relacionada à função de deposição através da relação abaixo, proposta originalmente por Pouliquen (36, 44):

$$\frac{u}{\sqrt{gh}} = \beta \frac{h}{h_{stop}(\theta)}, \quad (3-17)$$

onde g é a aceleração da gravidade e $\beta \approx 0.13$. Esta relação sugere que um único comprimento de escala controla tanto a função de deposição quanto a reologia do sistema.

Uma explicação possível para esse comprimento de escala vir das correlações no movimento granular foi proposta por Ertas e Halsey em 2005 (42), vinculando um comprimento de correlação no fluxo à “escala de comprimento de viscosidade” l_ν , definida reologicamente pela lei de escala de Bagnold:

$$\sigma_{xz} = \rho l_\nu^2 \dot{\gamma}^2, \quad (3-18)$$

para um sistema granular com densidade ρ , fluindo sob um estresse de cisalhamento σ_{xz} a uma taxa de cisalhamento $\dot{\gamma}$.

Recentemente, foi sugerido, após uma extensa comparação de resultados numéricos e experimentais de fluxos em geometrias diferentes, que para um sistema granular composto por partículas de diâmetro d e densidade granular ρ_g fluindo enquanto sujeitas a uma pressão P , a reologia é controlada pela variável local de escala (87, 88):

$$I = \frac{\dot{\gamma}d}{\sqrt{P/\rho_g}}, \quad (3-19)$$

que é, na verdade, uma generalização da Relação (3-17).

O próprio Pouliquen (39) reportou recentemente medidas experimentais de funções de correlação de velocidades em dois pontos na superfície do fluxo, obtendo resultados que corroboram uma possível conexão entre o comprimento de correlação observado e a função de deposição.

Simulações e análises ainda mais recentes, como a mostrada na Figura 3.5, não apenas corroboram os resultados apresentados por Pouliquen, mas a expandem, concluindo com as seguintes observações (44):

- Todas as funções de correlação de velocidade a dois pontos exibem decaimento exponencial com a distância relativa;
- Os comprimentos de correlação $\lambda_{\alpha\beta}$ são independentes tanto da posição da camada medida quanto da espessura do fluxo;

- Comprimentos de correlação no *bulk* são determinados exclusivamente por θ , sendo inversamente proporcionais;
- Comprimentos de correlação são tipicamente pequenos (da ordem de d), e aumentam logaritmicamente com $h_{stop}(\theta)$ (contrário à expectativa teórica de uma relação proporcional);
- Para pilhas muito altas e ângulos próximos a Θ_R , os fluxos excitam um “modo de respiração” com movimento coerente normal à camada da superfície (resultado observado anteriormente (37)).

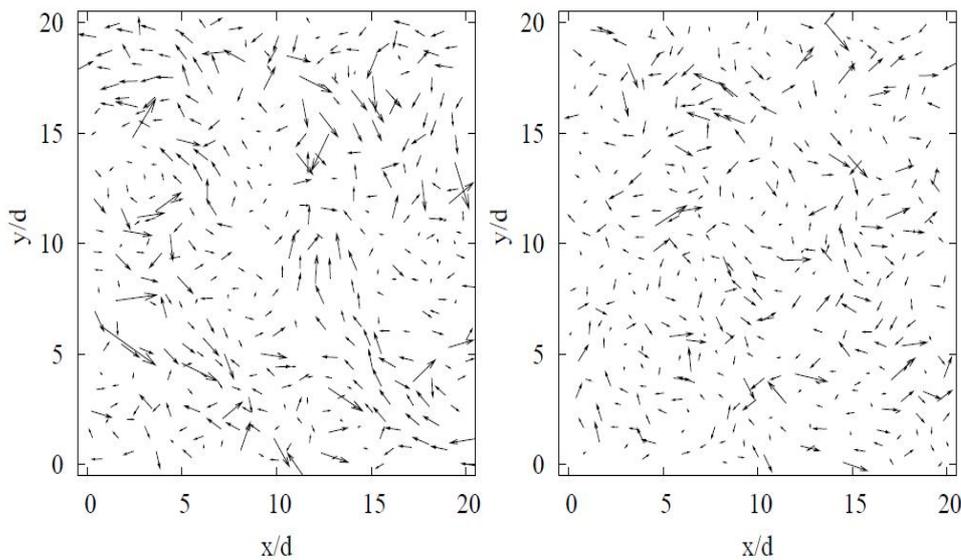


Figura 3.5: Exemplos de campos de velocidades obtidos por Baran *et al.* (44) no plano xy para as camadas de superfície a ângulos de 21 e 23 graus (figura da esquerda e direita, respectivamente), com $h/d = 20$ e $\delta t/\tau_0 = 1$ (onde δt é o *time-step* e τ_0 é o tempo característico $\tau_0 = \sqrt{d/g}$). O movimento correlacionado é claramente observado, em especial a $\theta = 21$.

Baseados nesses estudos, vamos tentar encontrar uma equação de difusão que leve em consideração uma função de correlação que descreva esse comportamento dos materiais granulares ao se difundir.

3.2

A Equação de Difusão Correlacionada

3.2.1

Identidade Fundamental

O problema consiste em obter uma equação de difusão para um processo difusivo envolvendo movimento granular correlacionado para uma espécie de partículas se movendo em uma linha (i.e., unidimensional) (89).

Para tanto, vamos olhar em primeiro lugar para o comportamento passo a passo no tempo (*time-step* τ) da função densidade $\rho(x, t)$, começando com a identidade:

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \delta(x - x') \rho(x', t + \tau). \quad (3-20)$$

Usando a definição da função- δ , nós podemos escrever a Equação (3-20) como:

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-x')} \rho(x', t + \tau), \quad (3-21)$$

chegando ao ponto onde a correlação é inserida por meio de uma mudança de variáveis de integração: $x' = u + f_\tau(u, t)$ e $dx' = du(1 + f'_\tau(u, t))$, através da função delta. Após isso, podemos considerar as variáveis x e x' como independentes. Neste cenário, $f_\tau(u, t)$ é a função de salto correlacionadora.

Para nossa função manter uma normalização constante e, conseqüentemente, ser uma transformação válida, é necessário que a relação seguinte seja obedecida:

$$\rho(u, t) du = \rho(x', t) dx',$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \rho(u, t) [(u + du) - u] &= \\ &= \rho(u + f_\tau(u, t), t + \tau) [u + du + f_\tau(u + du, t) - (u + f_\tau(u, t))]. \end{aligned} \quad (3-22)$$

Dessa forma,

$$\begin{aligned} \rho(u, t) du &= \rho(u + f_\tau(u, t), t + \tau) [du + f_\tau(u, t) + f'_\tau(u, t) du - f_\tau(u, t)], \\ \Rightarrow \rho(u, t) du &= \rho(u + f_\tau(u, t), t + \tau) [1 + f'_\tau(u, t)] du, \end{aligned}$$

e, por conseguinte,

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} du [1 + f'_\tau(u, t)] \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u-f_\tau(u,t))} \rho(u + f_\tau(u, t), t + \tau) \quad (3-23)$$

pode ser escrita como:

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \rho(u, t) e^{ik_1(x-u)} e^{-ik_1 f_\tau(u,t)}. \quad (3-24)$$

Agora temos que parar e olhar com cuidado para a função de correlação $f_\tau(u, t)$.

3.2.2

O Operador de Difusão Correlacionada

Nossa escolha (89) para a função de correlação foi uma expansão de Fourier, com $f_q(t)$ sendo os coeficientes da distribuição. Sua dependência com τ pode ser expressada pela relação:

$$f_\tau(u, t) = af(u, t),$$

onde a é relacionado ao coeficiente de difusão D via $a = \sqrt{D\tau}$. Logo, nosso $f_\tau(u, t)$ pode ser escrito como

$$f_q(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} du f(u, t)e^{-iqu}, \quad (3-25)$$

$$f(u, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} f_q(t)e^{iqu}, \quad (3-26)$$

$$\Rightarrow f_\tau(u, t) = \sqrt{D\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} f_q(t)e^{iqu}. \quad (3-27)$$

Substituindo $f_\tau(u, t)$ agora na Equação (3-24):

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \rho(u, t)e^{ik_1(x-u)} e^{-ik_1\sqrt{D\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} f_q(t)e^{iqu}}. \quad (3-28)$$

O último termo na Equação (3-28) pode ser reescrito como a expansão em série da exponencial:

$$\begin{aligned} \rho(x, t + \tau) &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \rho(u, t)e^{ik_1(x-u)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-ik_1\sqrt{D\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} f_q(t)e^{iqu} \right)^n. \end{aligned} \quad (3-29)$$

Neste ponto, é conveniente definir $\rho(u, t) = \prod_{m=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} du_m M_\tau(u_{m+1} - u_m, m\tau)\rho(u_0, 0)$, com $M_\tau(u_{m+1} - u_m, m\tau)$ sendo o propagador no tempo, definido pela Equação (3-29) e $t/N = \tau$. É fácil ver então que a Equação (3-29) pode ser escrita como:

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} du_N M_\tau(x - u_N, t)\rho(u_N, t),$$

onde

$$\rho(u_N, t) = \prod_{m=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} du_m M_\tau(u_{m+1} - u_m, m\tau) \rho(u_0, 0).$$

Usando a expansão:

$$\frac{\rho(x, t + \tau) - \rho(x, t)}{\tau} = \dot{\rho}(x, t) + \frac{\tau}{2} \ddot{\rho}(x, t) + \frac{\tau^2}{3!} \dot{\ddot{\rho}}(x, t) + \vartheta(\tau^3),$$

podemos escrever a Equação (3-29) da seguinte forma:

$$\dot{\rho}(x, t) + \vartheta(\sqrt{\tau}) = \int_{-\infty}^{+\infty} du_N \frac{1}{\tau} [M_\tau(x - u_N, t) - \delta(u - u_N)] \rho(u, t), \quad (3-30)$$

onde

$$\begin{aligned} M_\tau(x - u_N, t) = & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u)} \left[1 + \left(-ik_1 \sqrt{D\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} f_q(t) e^{iqu} \right) + \right. \\ & \left. + \left(-k_1^2 D\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq'}{2\pi} f_q(t) f_{q'}(t) e^{i(q+q')u} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3-31)$$

Definindo o operador \bar{M}_τ como sendo:

$$\bar{M}_\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} du_N \frac{1}{\tau} (M_\tau(x - u_N, t) - \delta(u - u_N)),$$

$$\begin{aligned} \bar{M}_\tau = & \int_{-\infty}^{+\infty} du_N \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u)} \left[\left(-ik_1 \sqrt{D\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} f_q(t) e^{iqu} \right) + \right. \\ & \left. + \left(-k_1^2 D\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq'}{2\pi} f_q(t) f_{q'}(t) e^{i(q+q')u} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3-32)$$

A Equação (3-30) se torna, após breve manipulação:

$$\rho(x, t) = e^{\int_0^t dt' (\bar{M}_\tau)} \rho(u, 0) + \vartheta(\sqrt{\tau}), \quad (3-33)$$

A expansão seguinte é então óbvia:

$$\rho(x, t) = \left[1 + \int_0^t dt' \bar{M}_\tau + \frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \bar{M}_\tau \bar{M}_\tau' + \dots \right] \rho(u, 0) + \vartheta(\sqrt{\tau}). \quad (3-34)$$

É importante notar que, até o momento, estamos analisando intervalos de tempo discretos e funções densidades válidas em todo o espaço, o que não é útil

ao se tentar analisar o comportamento coletivo do sistema granular como um todo. O que estamos realmente interessados é na média da função densidade e tempos contínuos. Por isso, neste ponto, vamos tirar a média sobre os $f_q(t)$'s e tomar o limite $\lim_{\tau \rightarrow 0}$. A fim de tomar a média sobre os $f_q(t)$'s, vamos ter que discutir um pouco mais sobre as funções de correlação.

3.2.3

A Função de Correlação

Uma vez que o comprimento de correlação tem de ser finito (ver seção 3.2, acima), vamos supor nossa função de correlação como tendo probabilidades gaussianas dentro deste comprimento de correlação, e zero fora dele.

Com isso, estamos supondo que a correlação seja realmente relevante em localizações próximas ao grão analisado, e pequenas a distâncias um pouco maiores, e quase inexistentes para $r \gg L$.

Por estarmos trabalhando com um modelo simplificado, estamos supondo também que o nosso $P[f_K]$ é descorrelacionado no tempo - isto é, sem memória. Isso pode ser modificado em um trabalho futuro com a inclusão de uma correlação temporal, como, por exemplo, com uma função de decaimento do tipo $\langle f_q(t)f_q(t') \rangle \propto e^{-\mu t}$. Por enquanto, vamos analisar o caso correlacionado apenas espacialmente.

Para tanto, nossa $P[f_K]$ tem de ser da forma:

$$P[f_q] \propto e^{-\frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \frac{f_q^2}{2\sigma^2}}, |q| \leq \frac{1}{L}. \quad (3-35)$$

$$P(f_q) = 0, \quad (3-36)$$

caso contrário.

Conseqüentemente, é fácil ver que para tirar as médias e tomar o limite $\lim_{\tau \rightarrow 0}$, é necessário seguir certas regras, como:

- termos com $\langle f_q^n \rangle$, quando n é um número ímpar, são nulos;
- termos com produtos de f_q com índices diferentes também são nulos;
- uma vez que estamos tomando o limite $\lim_{\tau \rightarrow 0}$, termos com dependência linear (ou maior) em τ serão descartados.

Definindo $\psi(x, t) \equiv \langle \rho(x, t) \rangle$ e $\psi_0(u) \equiv \psi(u, 0)$, finalmente chegamos a (lembrando que os $\bar{M}_\tau(t)$'s são independentes):

$$\psi(x, t) = \left[1 + \int_0^t dt' \langle \bar{M}_\tau \rangle + \frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle \bar{M}_\tau \rangle \langle \bar{M}'_\tau \rangle + \dots \right] \psi_0(u). \quad (3-37)$$

Nós estamos supondo que σ_q seja independente do tempo, implicando em:

$$\psi(x, t) = \left[1 + t \langle \bar{M}_\tau \rangle + \frac{t^2}{2} \langle \bar{M}_\tau \rangle \langle \bar{M}'_\tau \rangle + \dots \right] \psi_0(u). \quad (3-38)$$

Vamos primeiramente olhar o termo com dependência linear em t .

3.2.4 Equação de Difusão Correlacionada

Quando analisando o termo com dependência linear em t , é válido notar que, uma vez que estamos primeiro tirando a média, o termo com $n = 1$, que resultaria em uma divergência em nossas equações (já que, para $n = 1$, $\rho(x, t) \propto \sqrt{\tau}/\tau$, que diverge quando tomando o limite $\lim_{\tau \rightarrow 0}$), é descartado imediatamente.

Os únicos termos remanescentes são aqueles com valores pares de n , e conseqüentemente com $\rho(x, t) \propto \tau^{n'-2}$, onde n' são os valores pares de n . Mas, depois de tomar o limite $\lim_{\tau \rightarrow 0}$, todos os termos, com a exceção do termo com $\rho(x, t) \propto \tau^0$, tende a zero, simplificando os cálculos consideravelmente.

Tomando a média do ruído, nós temos:

$$\begin{aligned} \langle \bar{M}_\tau(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u)} (-k_1^2 D) \times \\ &\times \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq'}{2\pi} \langle f_q(t) f_{q'}(t) \rangle e^{i(q+q')u}. \end{aligned} \quad (3-39)$$

Aplicando as regras expostas acima e as Condições (3-35) e (3-36) na Equação (3-39), chegamos à seguinte forma para o operador de difusão:

$$\begin{aligned} \langle \bar{M}_\tau(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u)} (-k_1^2 D) \times \\ &\times \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq'}{2\pi} \langle f_q^2(t) \rangle \delta(q - q') e^{i(q+q')u}, \end{aligned} \quad (3-40)$$

$$\langle \bar{M}_\tau(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u)} (-k_1^2 D) \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \sigma_q^2 e^{i2qu}. \quad (3-41)$$

Agora podemos reescrever a Equação (3-38) nos utilizando da Equação (3-41), acima, da seguinte forma:

$$\dot{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} e^{ik_1(x-u)} (-k_1^2 D) \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \sigma_q^2 e^{i2qu} \psi(u, t), \quad (3-42)$$

Agora nós iremos repetir os mesmos passos tomados nas Equações (3-20) e (3-21), usando as identidades da função delta, e usando a transformada de Fourier $\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} du' \psi(u', t) e^{-iku'}$, chegando a:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx \dot{\psi}(x, t) e^{-iKx} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dk_1 \delta(k_1 - K) (-k_1^2 D) \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \sigma_q^2 e^{i(2q-k_1)u} \psi(u, t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du (-K^2 D) \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \sigma_q^2 e^{i(2q-K)u} \psi(u, t) \\ &= -K^2 D \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} \frac{dq}{2\pi} \sigma_q^2 \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} du' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} e^{i(2q-K)u} e^{ik_2(u-u')} \psi(u', t) \\ &= -K^2 D \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \sigma_q^2 \delta(k_2 - K + 2q) \tilde{\psi}(k_2, t) \end{aligned} \quad (3-43)$$

$$\Rightarrow \dot{\tilde{\psi}}(K, t) = -K^2 D \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \sigma_q^2 \delta(k_2 - K + 2q) \tilde{\psi}(k_2, t),$$

resultando finalmente na Equação de Difusão Espacialmente Correlacionada (EDEC) (89):

$$\dot{\tilde{\psi}}(K, t) = -K^2 D \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \sigma_q^2 \tilde{\psi}(K - 2q, t). \quad (3-44)$$

A Equação (3-44) difere do caso difusivo usual por acoplar diferentes modos, devido à correlação espacial. Essa mistura vai depender fortemente da forma de σ_q^2 .

Um caso limite interessante surge quando fazemos o limite $L \rightarrow \infty$: o movimento no plano é completamente correlacionado. Por exemplo, fazendo $f = \pm a$ e deixando o sistema evoluir no tempo, qualquer distribuição inicial se difundirá como o caso usual não-correlacionado. Isso pode ser visto da Equação (3-44), com $1/L \rightarrow 0$ e $\sigma_q \rightarrow \delta(q)$:

$$\Rightarrow \dot{\tilde{\psi}}(K, t) \propto -K^2 \tilde{\psi}(K, t),$$

que é o operador para difusão gaussiana.

É notável também que a contribuição da correlação (expressa acima como referente à variável q), surge como um efeito de ordem superior, quando expandimos (dado que $L \rightarrow \infty$)

$$\tilde{\psi}(K - 2q, t) \cong \tilde{\psi}(K, t) - 2q \frac{\partial \tilde{\psi}(K, t)}{\partial K},$$

resultando em

$$\dot{\tilde{\psi}}(K, t) = -K^2 D \left[\int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \sigma_q^2 - \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \sigma_q^2 2q \frac{\partial}{\partial K} \right] \tilde{\psi}(K, t). \quad (3-45)$$

3.2.5 Modelo Teste

É fácil de ver que, na EDEC acima, se nosso $\sigma_q^2 \rightarrow \delta(q)$ então pode-se fazer uma expansão em torno de $q = 0$ - e a equação de difusão correlacionada também se torna uma equação de difusão comum:

$$\dot{\tilde{\psi}}(K, t) = -K^2 D \tilde{\psi}(K, t),$$

descrevendo o processo difusivo usual.

Portanto, para analisar a equação de difusão obtida acima (89), e compará-la com as simulações a serem realizadas, vamos nos utilizar de um modelo cuja condição inicial seja:

$$\psi(x, t = 0) = \psi_0 + \psi_1 \cos(k_0 x), \quad (3-46)$$

cuja forma possui, no espaço de Fourier, três picos distintos e bem-definidos em $q = (0, \pm k)$, como pode ser visto na Figura 3.6. As pequenas diferenças entre o modelo exato e a figura se devem às limitações técnicas da implementação da Equação (3-46). A sua transformada de Fourier pode ser descrita como um $\tilde{\psi}_{eff}(q, t)$ dado por, a menos de uma constante:

$$\tilde{\psi}_{eff}(q, t) = \psi_0 \delta(q) + \psi_1(t) [\delta(q + k_0) + \delta(q - k_0)], \quad (3-47)$$

a ser usada dentro da integral da Equação (3-44), pois convém frisar que, com este modelo simplista, estamos intencionalmente desprezando as ações dos demais modos presentes na nossa equação de difusão correlacionada.

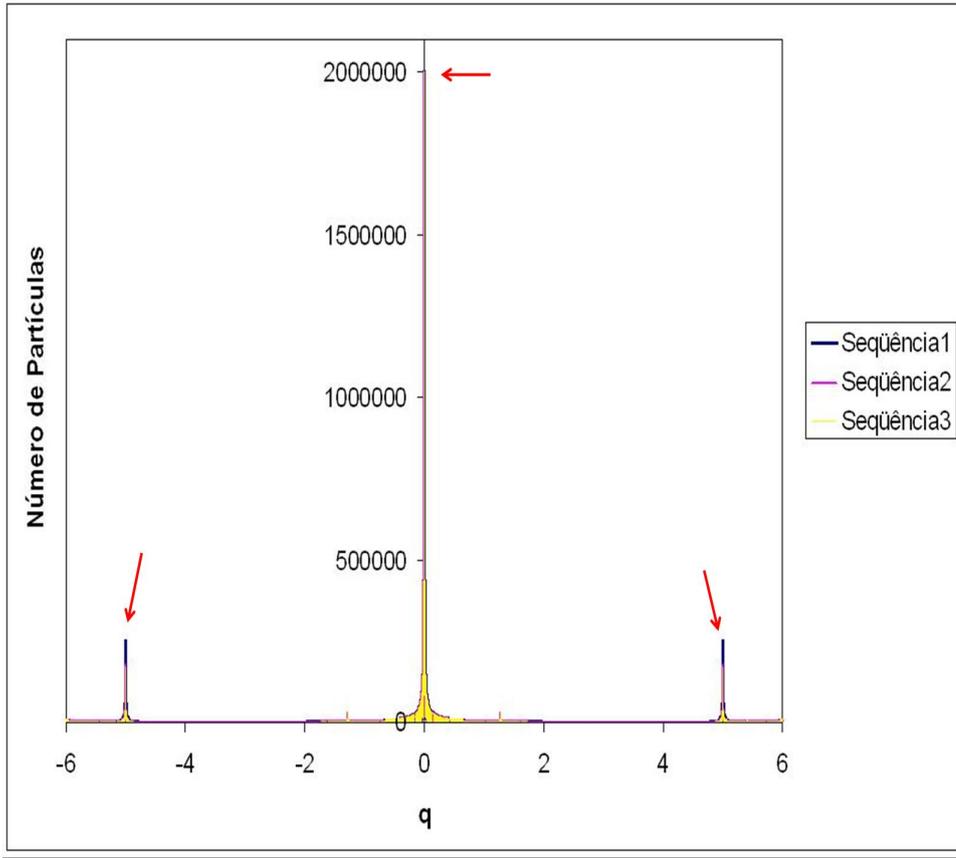


Figura 3.6: Gráfico da transformada de Fourier da distribuição escolhida para o modelo-teste, com os três picos indicados pelas setas. Nota-se também a evolução com o tempo, mostrando que o pico central permanece constante enquanto os laterais diminuem, em processo difusivo.

Como a Equação (3-44) nos dá $\tilde{\psi}(0, 0) \equiv \text{constante}$, e, para $t \approx 0$,

$$\tilde{\psi}(k_0, t) \propto \dot{\psi}_1(t),$$

então podemos escrever, renormalizando a constante D para D' :

$$\dot{\psi}_1(t) = -k_0^2 D' \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \sigma_q^2 (\psi_0 \delta(k_0 - 2q) + \psi_1(t) [\delta(2k_0 - 2q) + \delta(2q)]), \quad (3-48)$$

$$\dot{\psi}_1(t) = -\frac{k_0^2 D'}{2} \int_{-\frac{1}{L}}^{+\frac{1}{L}} dq \sigma_q^2 \left(\psi_0 \delta\left(\frac{k_0}{2} - q\right) + \psi_1(t) [\delta(k_0 - q) + \delta(q)] \right). \quad (3-49)$$

Desprezando o termo $\psi_1(t) \sigma_{k_0}^2$ como sendo muito pequeno, resolvemos a Equação (3-49):

$$\dot{\psi}_1(t) = -\frac{k_0^2 D'}{2} \left[\psi_0 \sigma_{\frac{k_0}{2}}^2 + \psi_1 \sigma_0^2 \right], \quad (3-50)$$

$$\dot{\psi}_1(t) = -\frac{k_0^2 D' \sigma_0^2}{2} \left[\psi_0 \frac{\sigma_{\frac{k_0}{2}}^2}{\sigma_0^2} + \psi_1 \right]. \quad (3-51)$$

Chamando $A \equiv \frac{k_0^2 D' \sigma_0^2}{2}$ e $r \equiv \frac{\sigma_{\frac{k_0}{2}}^2}{\sigma_0^2}$, podemos escrever a solução da equação acima como sendo

$$\psi_1(t) = \alpha e^{-At} + \beta \psi_0. \quad (3-52)$$

É fácil ver, comparando a Equação (3-51) com a solução acima, que $\beta = -r$ e, ao fazer $t = 0$,

$$\psi_{10} \equiv \psi_1(0) = \alpha - r\psi_0,$$

$$\alpha = \psi_{10} - r\psi_0.$$

Podemos então escrever a Equação (3-52) da seguinte forma:

$$\psi_1(t) = (r\psi_0 + \psi_{10}) e^{-At} - r\psi_0,$$

na qual podemos fazer, para valores pequenos de t , a expansão

$$\psi_1(t) = (r\psi_0 + \psi_{10}) (1 - At) - r\psi_0,$$

$$\psi_1(t) = \psi_{10} - At (r\psi_0 + \psi_{10}).$$

Definindo $Z(t) \equiv \frac{\psi_1(t)}{\psi_{10}}$, chegamos finalmente em:

$$Z(t) = 1 - At \left[r \frac{\psi_0}{\psi_{10}} + 1 \right], \quad (3-53)$$

o que mostra que a componente em k_0 ($\psi_1(t)$) decai de forma aproximadamente linear no princípio da evolução temporal. Outro ponto interessante da relação acima é que a forma de $Z(t)$ depende explicitamente de ψ_0 , ao contrário da equação de difusão usual, quando a solução é um operador diagonal no espaço de Fourier, como pode ser visto na Equação (3-16). Por isso a importância de analisarmos o $Z(t)$: como ψ_0 equivale ao número de partículas N , no caso da difusão usual no máximo o ψ_0 funcionaria como fator de escala, que é simplificado na normalização, enquanto no caso da Equação (3-53) a dependência de $Z(t)$ com ψ_0 é explícita, influenciando no comportamento do mesmo.

3.3 Simulações

Para verificar a validade da forma para a equação de difusão correlacionada obtida acima na EDEC (3-44), temos de recorrer a simulações computacionais para observar o comportamento difusivo de grãos, com a inclusão de uma correlação em seu movimento.

Para tanto, por meio de um simples programa em linguagem FORTRAN, simulamos um sistema discretizado com 2000 posições (2000 “caixas”, por assim dizer), onde 2000000 partículas são distribuídos inicialmente de forma senoidal (com uma pequena componente aleatória, para não viciar o sistema) ao longo das mesmas, de forma a reproduzir a condição inicial do nosso modelo teste, descrito acima. A partir do instante inicial, o sistema evolui no tempo de forma difusiva, mediante uma correlação do tipo lorentziana descrita por:

$$f_q(a_i) = \frac{2(1 - 2\eta)}{1 + \left(\frac{2\pi a_i}{10L}\right)^2}, \quad (3-54)$$

onde a_i é a ordem do termo da série de Fourier, η é a componente aleatória e L é o comprimento de correlação.

Para observar o comportamento desenvolvido com nossa EDEC aplicada ao modelo teste, calculamos também a transformada de Fourier da difusão simulada a cada número N arbitrário de passos - não foi feito isso para cada passo de tempo por (falta de) eficiência computacional. Assim, é possível analisar o comportamento qualitativo da Equação (3-49), comparando-a com o resultado da simulação.

Mas, primeiramente, seria interessante checar se a simulação programada com a correlação expressa pela Relação (3-54) é, de fato, um processo difusivo, e se a correlação de fato influi no comportamento geral do sistema. Para testar isso, montamos um sistema de apenas 800 posições (*bins*), 1000000 de grãos e com distribuição inicial delta de Dirac, a fim de verificar o comportamento dessa distribuição ao longo do tempo. Em processos difusivos usuais, à medida que os grãos vão se difundindo, a variância do sistema tende a aumentar, enquanto a sua média permanece zero.

Ao rodar a simulação, no entanto, o primeiro comportamento observado é a forma geral da distribuição granular não se mantendo centrada em zero, mas “caminhando” - como não estamos privilegiando nenhuma direção (excluindo também a possibilidade de difusão com “drift”), o centro da distribuição não se afasta muito da origem, mas é visível que não se comporta como em uma difusão usual, como pode ser visto na Figura 3.7, mas como uma difusão correlacionada. Podemos também concluir que o processo não é um processo difusivo usual observando o gráfico disposto na Figura 3.8, onde a variação da

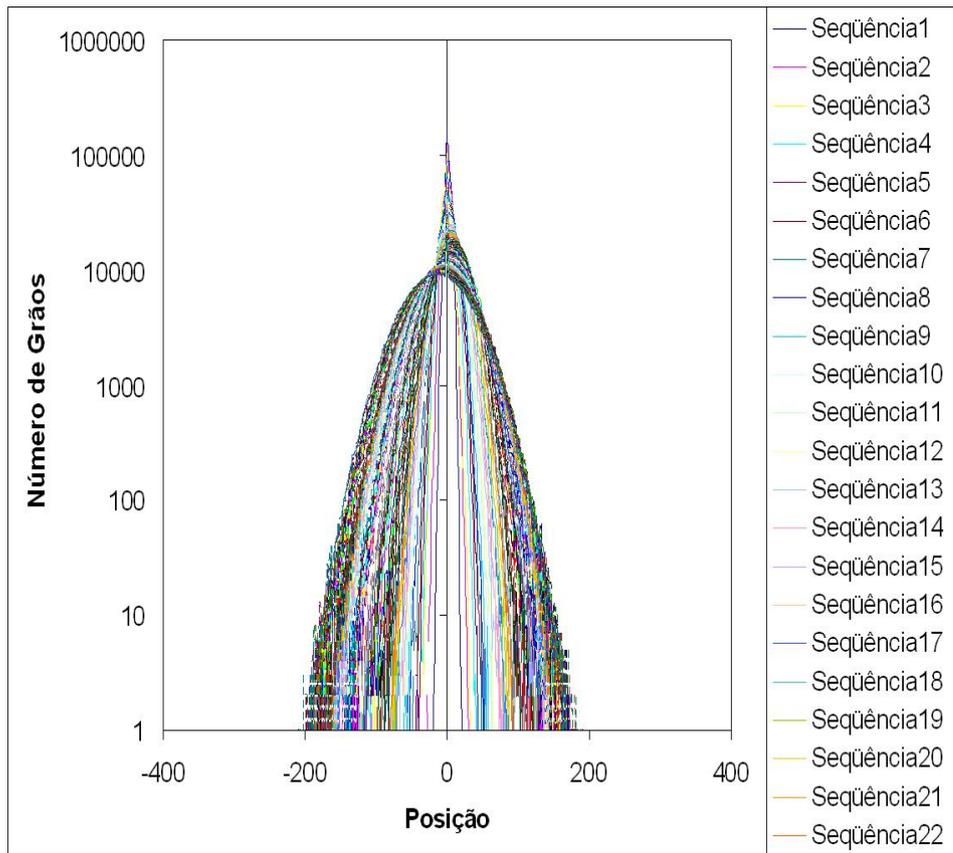


Figura 3.7: Gráfico da distribuição granular, a partir de uma distribuição inicial delta, para passos sucessivos de tempo, representado pela numeração da seqüência, à direita. É evidente que o centro da distribuição não permanece em zero, mas varia com o tempo, demonstrando uma influência clara da correlação, enquanto o pico da distribuição vai diminuindo e alargando, indicando um processo difusivo.

média da distribuição com o tempo é mostrada. No entanto, ao se olhar para o gráfico da variação de sua variância com o tempo, disposto na Figura 3.9, pode-se concluir que o processo é, de fato, difusivo, uma vez que a variância aumenta linearmente com o tempo - como era de se esperar.

Satisfeitos que estamos observando, na simulação, um processo difusivo sob influência da correlação, voltamos então para o modelo da seção anterior, a fim de comparar seus resultados com nosso modelo teste da equação de difusão correlacionada.

Para tanto, olharemos agora o comportamento dos picos dispostos em $q = \pm k$. O pico localizado em $q = 0$, de acordo com o previsto pela Equação (3-44), não varia, mantendo-se constante.

Analisando o gráfico da Figura 3.10, pode-se ver que, confirmando o esperado pelo modelo teste acima, há um decaimento linear (com um ajuste razoavelmente preciso) com o tempo. Diminuindo-se o passo de tempo na

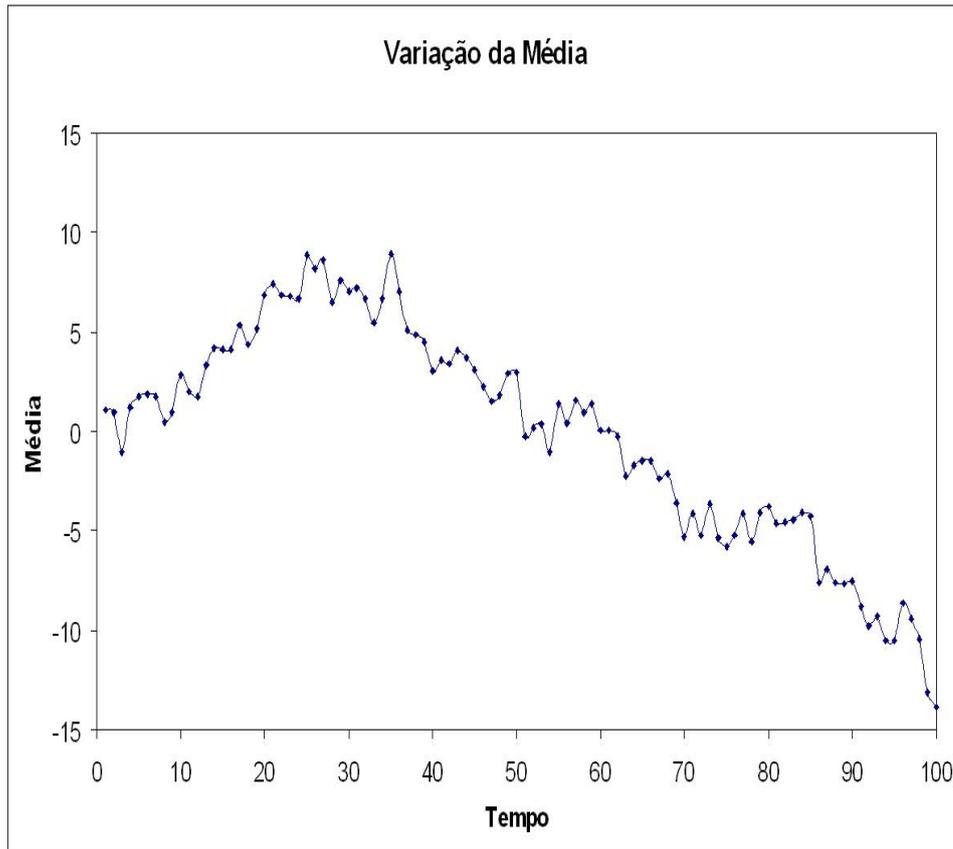


Figura 3.8: Gráfico da evolução temporal da média, a partir de uma distribuição inicial delta - o deslocamento em relação ao zero demonstra que este não é um processo difusivo usual.

simulação e tomando pontos para a transformada de Fourier mais espaçados no tempo - o ajuste linear fica mais preciso (conforme disposto na Figura 3.11), evidenciando o comportamento esperado pelo modelo teste: o decaimento linear. Dessa forma, pode-se depreender que o comportamento em $q = \pm k$ oscila em torno desta reta de decaimento, e que essas variações tornam-se cada vez mais desprezíveis à medida em que o tempo passa. Uma observação: convém explicitar que a diferença na escala dos gráficos é oriunda de uma variação na escala do D , simulado diferentemente para testar essa dependência.

Outro resultado interessante e que reforça a validade da Equação (3-44) foi obtido variando-se o valor da razão $\frac{\psi_0}{\psi_{10}}$. Na equação de difusão usual, a forma da difusão das partículas fora do pico central não pode ser alterada pelo valor da razão acima, como explicitado pela solução delta de Dirac da Equação de Difusão usual (resolvida e obtida na seção 3.1.1. deste capítulo, na Equação (3-16), acima). No entanto, não é isso que é observado neste caso - como pode ser visto na Figura 3.12, o ângulo de inclinação do ajuste linear para ambos os casos é bem diferente, mostrando que o processo difusivo nos picos

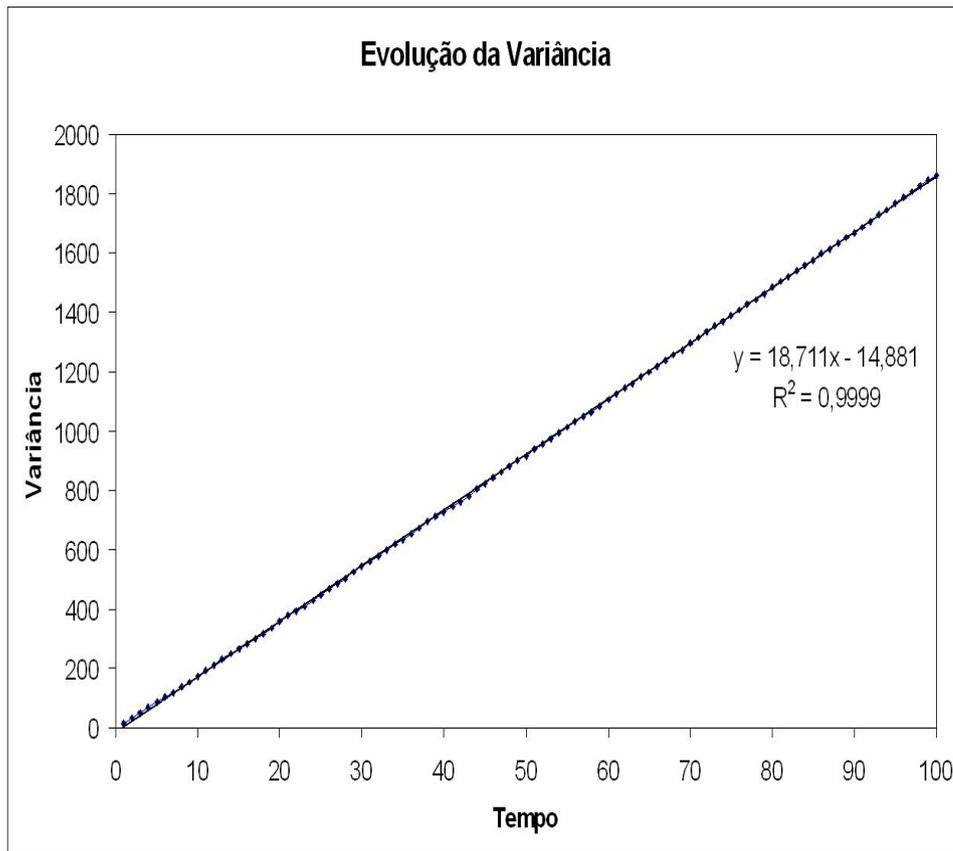


Figura 3.9: Gráfico da evolução temporal da variância, a partir de uma distribuição inicial delta, incluindo um ajuste linear - o crescimento linear com o tempo é típico de um processo difusivo, verificando a validade da simulação.

adjacentes é afetado pelo pico central, como esperado pela dependência de $Z(t)$ com a razão $\frac{\psi_0}{\psi_{10}}$, que entra na Equação (3-53) como o coeficiente angular da parte linear da função - comprovando, desta forma, o efeito da correlação na difusão. É interessante notar também que, no caso da Figura 3.12, as simulações foram feitas para $\frac{\psi_0^B}{\psi_{10}^B} = 2\frac{\psi_0^A}{\psi_{10}^A}$, e pelos ajustes obtidos, pode-se perceber que o coeficiente angular do ajuste para B é o dobro do correspondente para o A, reforçando o comportamento esperado para o $Z(t)$.

3.4 Discussão

Podemos concluir que o modelo para a difusão correlacionada gera uma equação de difusão que se comporta diferentemente da equação para difusão usual, mas que ainda assim descreve um processo difusivo sob efeito de uma correlação espacial, o que era o intuito original. É interessante destacar que, apesar de nosso enfoque e motivação terem sido, desde o começo, em materiais granulares, a EDEC obtida é genérica, servindo para descrever quaisquer tipos

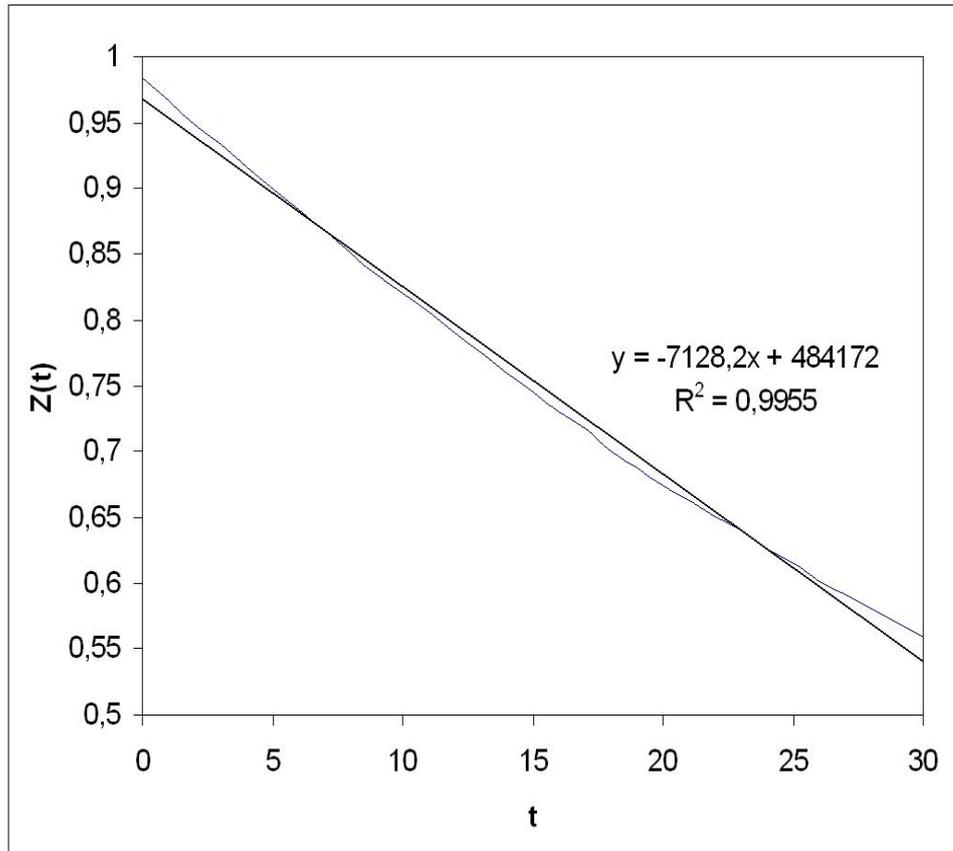


Figura 3.10: Gráfico da variação do módulo da transformada de Fourier em $q = \pm k$ com o tempo, que apresenta um decaimento linear. Está disposto também ajuste linear razoável para o decaimento linear ($R^2 = 0,9955$).

de partículas (não-carregadas).

O modelo está agora pronto para ser aplicado diretamente em materiais granulares, em especial para se testar a hipótese de segregação granular devido a processos difusivos correlacionados. Isso será feito em um futuro trabalho, provavelmente com a necessidade de se introduzir no sistema um segundo comprimento de correlação, o que geraria um comprimento de correlação efetivo da forma

$$L_{eff} = xL_1 + (1 - x)L_2,$$

relacionando as duas espécies diferentes de grãos pelas suas frações de ocupação x e $(1 - x)$. É de se esperar que as equações obtidas acima sejam divididas em dois termos, gerando uma EDEC com dois termos difusivos, um para cada espécie. Apenas com o resultado obtido para a evolução das médias nas simulações (ver Figura 3.8, acima), já é de se esperar que haverá um direcionamento no sentido de segregar as duas espécies de grãos.

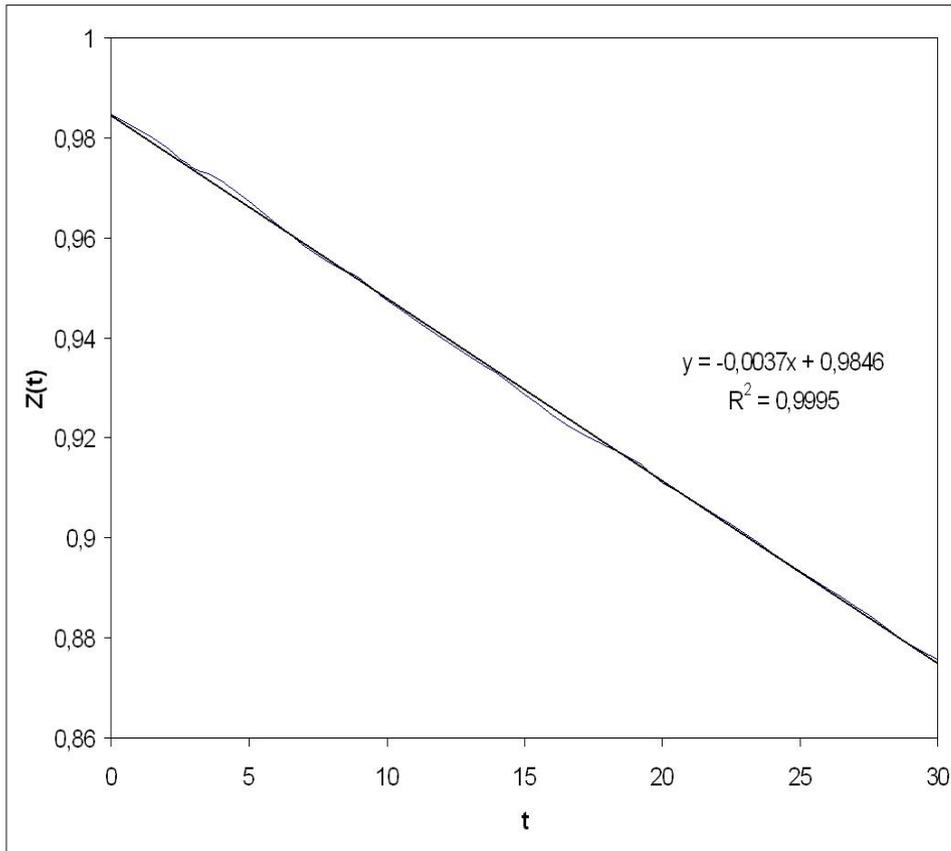


Figura 3.11: Gráfico da variação do módulo da transformada de Fourier em $q = \pm k$ com o tempo, mas com um passo de tempo maior que na Figura 3.10. O ajuste linear neste caso mostra maior precisão ($R^2 = 0,9995$), mostrando que as oscilações em torno da reta de ajuste tornam-se desprezíveis com a passagem do tempo.

Mas o importante de se ressaltar é que a EDEC (3-44) obtida consegue descrever um processo difusivo sob efeito de uma correlação espacial, através de uma função de correlação no espaço de Fourier (até onde sabemos, inédito na literatura), ao invés de um comprimento fixo, como havia sido sugerido anteriormente (42). A vantagem aqui é que é mais facilmente aplicável a espécies diferentes (misturadas ou não - bastando variar os parâmetros L e σ_q), e que obtemos uma mistura de modos, o que parece retratar melhor sistemas físicos.

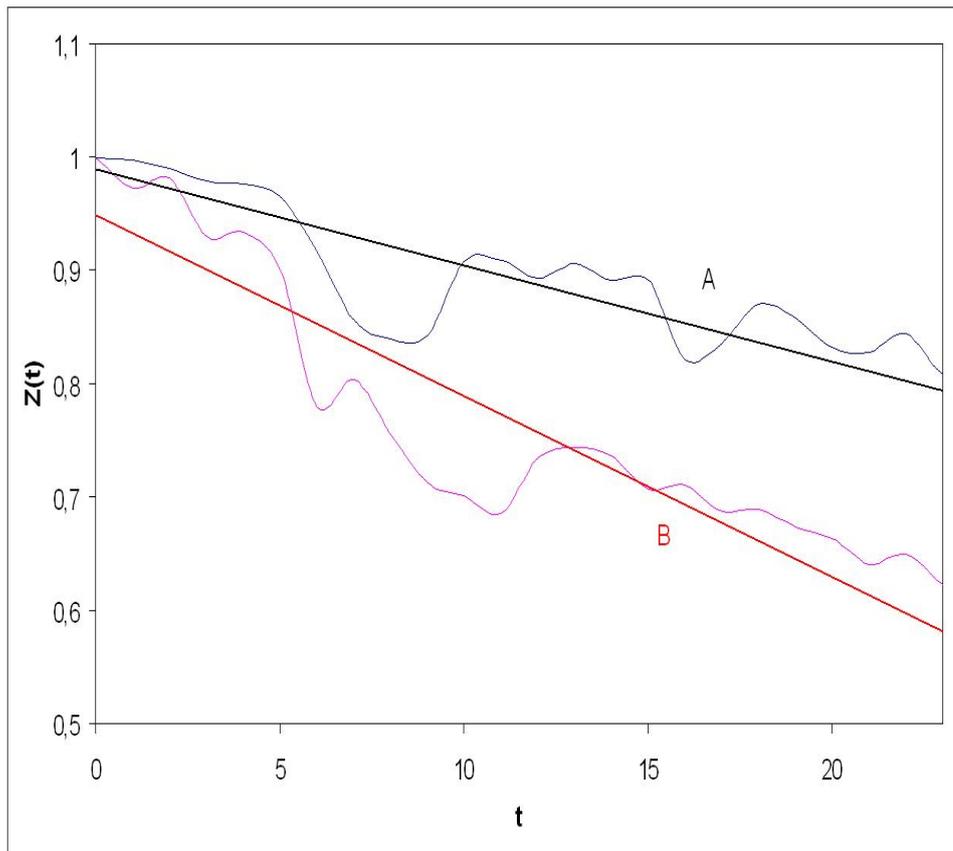


Figura 3.12: Gráfico da variação do módulo da transformada de Fourier em $q = \pm k$ com o tempo, para dois valores diferentes da razão $\frac{\psi_0}{\psi_{10}}$, com $\psi_0^B = \psi_0^A$ e $\psi_{10}^B = \frac{1}{2}\psi_{10}^A$. Pelos ajustes para A ($y = -0,008x + 0,988$) e para B ($y = -0,016x + 0,948$), nota-se claramente que o ajuste linear denota processos difusivos correlacionados, ao contrário do esperado para uma difusão usual, onde não deveria haver variação.

4

Conclusão

Como dito no Capítulo 1, nosso objetivo com este trabalho era contribuir para o avanço do conhecimento em direção a responder à pergunta “Será possível fazer uma descrição unificada e contínua de grãos em movimento?”, através de modelos que explicitassem a importância dos arcos na dinâmica de sistemas granulares densos.

Esse objetivo, em especial com os resultados dispostos no Capítulo 2, acreditamos ter sido atingido. Da mesma forma, a causa física por trás dos mecanismos de difusão correlacionada expostos no Capítulo 3 também pode estar relacionada com o comportamento dos arcos, em especial no caso denso, onde o contato entre os grãos e a conseqüente formação e ruptura constante de arcos desempenham conhecidamente um papel muito importante (demonstrado, convém reforçar, no Capítulo 2).

Resumindo os pontos alcançados com esta tese, podemos enumerar:

1. Reprodução, através de um modelo simples de malha, qualitativa da influência dos arcos em sistemas granulares densos;
2. Surgimento, em modelos computacionais, de bandas de cisalhamento como conseqüência da influência única dos arcos (56);
3. Reprodução, em modelos tridimensionais, dos resultados obtidos experimentalmente por Fenistein *et al.* (49, 50);
4. Obtenção de resultados que corroboram as previsões teóricas desenvolvidas por Török *et al.* (51, 52);
5. Expansão dos resultados encontrados na literatura para sistemas com parâmetros diferentes daqueles realizados experimentalmente;
6. Desenvolvimento de um modelo teórico para descrever o fenômeno da difusão granular correlacionada (para o qual não há dados experimentais quantitativos existentes) (89);

7. Obtenção de uma equação de difusão não-usual, que leva em conta uma correlação espacial entre as partículas - a EDEC (Equação de Difusão Espacialmente Correlacionada);
8. Realização de simulações computacionais, nas quais o comportamento qualitativo das partículas segue o previsto pela equação de difusão correlacionada obtida anteriormente.

Ao longo do trabalho, porém, alguns pontos a serem melhorados ficam evidentes, como por exemplo:

- Apesar do modelo tridimensional do Capítulo 2 ter apresentado resultados excelentes, para que sua simulação produza resultados físicos menos influenciados pela rede subjacente, é necessário mudar a forma como a malha de arcos está modelada, uma vez que todo o sistema é cilíndrico e está sendo modelado por uma rede de células cúbicas;
- Para descrever sistemas físicos, a equação de difusão correlacionada precisa ser generalizada para três dimensões;
- O modelo teste utilizado para testar a equação de difusão correlacionada é um pouco simplista, considerando apenas três modos do sistema e desprezando a ação dos outros.

No entanto, o cerne das idéias principais e os modelos desenvolvidos já estão prontos. Isto posto, pode-se pensar agora em vários caminhos a serem trilhados para dar continuidade ao projeto que acaba de ser concluído, a saber:

- Adaptar o modelo tridimensional para a malha de arcos, passando o sistema de coordenadas cartesianas para cilíndricas. Esperamos com isso tratar o sistema de uma forma mais “natural”, possibilitando tratar as paredes e o disco girante do mesmo de forma mais realista, incluindo o atrito nas paredes laterais e eliminando os vórtices observados;
- Incluir um segundo comprimento de correlação no modelo da difusão correlacionada. Acreditamos não haver muita dificuldade nisso, e isso tornará possível verificar o quanto a difusão correlacionada influi na segregação granular;
- Incluir a correlação temporal no modelo, gerando uma Equação de Difusão Correlacionada completa, tanto espacial quanto temporalmente, provavelmente por meio de uma função de decaimento exponencial;
- Generalizar a equação de difusão correlacionada obtida para três dimensões, a fim de melhor descrever sistemas físicos;

- Evoluir do modelo teste utilizado para as simulações da equação de difusão correlacionada para modelos mais elaborados - inclusive resolvendo a equação de difusão numericamente, sem a simplificação por meio de modelos.

Pode-se perceber que há ainda bastante caminhos a seguir para um aprimoramento e continuidade do trabalho feito com os modelos desenvolvidos nesta tese, o que significa que este trabalho ainda pode render muitos frutos.

O mais interessante dos pontos dispostos acima é, provavelmente, a inclusão do segundo comprimento de correlação, pois se o fenômeno de segregação granular for observado no âmbito da difusão correlacionada, isso descreverá uma grande gama de sistemas no qual os mecanismos tanto de difusão quanto de segregação não são ainda conhecidos. Os outros pontos dispostos acima também são, naturalmente, de extremo interesse, e podem produzir resultados interessantes - em especial a transformação do modelo da malha de arcos para coordenadas cilíndricas, uma vez que o modelo em coordenadas cartesianas já nos permite entender melhor o papel dos arcos na dinâmica de um sistema granular denso.

Referências Bibliográficas

- [1] P. Richard, *Nature Materials* **4** (2005) 121. 1.1
- [2] H.J. Herrmann *Physica A* **313** (2002) 188. (document), 1.1, 1.1
- [3] X.-Z. Kong, M.-B. Hu, Q.-S. Wu e Y.-H. Wu, *Phys. Lett. A* **341** (2005) 278. 1.1
- [4] O. Reynolds, *Phil. Mag.* **20** (1885) 469. 1.2
- [5] M. Otto, J.-P. Bouchaud, P. Claudin, e J.E.S. Socolar, *Phys. Rev. E* **67**, 031302 (2003). 1.2
- [6] J. Duran, *Sands, Powders and Grains - An Introduction to the Physics of Granular Materials*, (Springer, 1999). (document), 1.2, 1.3, 2.1, 2.2
- [7] A.D. Rosato, K.J. Strandburg, F. Prinz e R.H. Swendsen, *Physical Review Letters* **58**, 1038 (1987). 1.2, 3.1.2
- [8] B.D. Lubachevsky, *J. Comp. Phys.* **94** (1991) 255. 1.2
- [9] B.D. Lubachevsky, *Int. J. Comp. Simulation* **2** (1992) 373. (document), 1.2, 1.5
- [10] R.A. Bagnold, *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes* (London: Methuen, 1941). 1.3, 1.4, 2.1
- [11] J.J. Alonso, J.-P. Hovi e H.J. Hermann, *Phys. Rev. E* **58** (1998) 672. (document), 1.3, 1.6
- [12] H.M. Jaeger, S.R. Nagel e R.P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68** (1996) 1259. 1.3, 3.1.3
- [13] J.T. Jenkins e S.B. Savage, *J. Fluid Mech.* **130** (1983) 187. 1.4
- [14] H.J. Hermann, *J. Phys. II France* **3** (1993) 427. 1.4
- [15] S. McNamara e W.R. Young, *Phys. Rev. E* **53** (1996) 5089. 1.4
- [16] I. Goldhirsch e G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1999) 1619. 1.4

- [17] S.A. Balbus, *ASP Conference Series* **80** (1995) 328. 1.4
- [18] J.S. Olafsen e J.S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1999) 4369. 1.5
- [19] I.S. Aranson e L.S. Tsimring, *Rev. Mod. Phys.* **78** (2006) 641. 1.5, 3.1.2
- [20] S. Douady, S. Fauve e C. Laroche, *Europhys. Lett.* **8** (1989) 621. 1.5
- [21] P.B. Umbanhowar, F. Melo e H.L. Swinney, *Nature (london)* **382** (1996) 793. (document), 1.5, 1.7, 1.8
- [22] T. Mullin, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 4741. (document), 1.9
- [23] T. Mullin, *Science* **295** (2002) 1851. (document), 1.9
- [24] T. Aste e D. Weaire, *The Pursuit Of Perfect Packing* (Taylor and Francis) 2000. 1.6
- [25] K. Rietma, *The Dynamics Of Fine Powders* (Amsterdam: Elsevier Applied Science) 1991. (document), 1.10
- [26] J.D. Bernal e J. Mason, *Nature* **385** (1960) 910. 1.6
- [27] H.M. Jaeger e S.R. Nagel, *Science* **255** (1992) 1523. 1.6
- [28] H.M. Jaeger, S.R. Nagel e R.P. Behringer *Phys. Today* **49** (1996) 32. 1.6
- [29] S.F. Edwards, *J. Stat. Phys* **62** (1991) 889. 1.6
- [30] A. Mehta e S.F. Edwards, *Physica A* **157** (1989) 1091. 1.6
- [31] H.A. Janssen, *Z. Vereins Deutsch Ing.* **39**, 1045 (1895). 1.7, 2.2, 2.6.1
- [32] E.F. del Peloso, A. Wiermann e W.A.M. Morgado, Trabalho desenvolvido para empresa SIMMETRY (2007). (document), 1.12
- [33] R. Resnick e D. Halliday, *Física 2* (John Wiley et Sons, 1981). 1.7, 3.1.1
- [34] F. Radjai, *cond-mat.soft/0801.4722v1* (2008). 1.7
- [35] H.C. Marques Fernandes, J.J. Arenzon, Y. Levin e M. Sellitto, *Physica A* **327** (2003) 94. 1.8
- [36] O. Pouliquen *Phys. Fluids* **11** (1999) 542. 1.8, 3.1.3
- [37] L.E. Silbert, D. Ertas, G.S. Grest, T.C. Halsey, D. Levine e S.J. Plimpton, *Phys. Rev. E* **64** (2001) 051302-1. 1.8, 3.1.3, 3.1.3

- [38] D. Bonamy, F. Daviaud, L. Laurent, M. Bonetti e J.P. Bouchaud, *Physical Review Letters* **89** (2002) 034301. 1.8, 3.1.3
- [39] O. Pouliquen, *Physical Review Letters* **93** (2004) 248001. 1.8, 3.1.3, 3.1.3
- [40] D. Ertaş e T.C. Halsey, *Europhys. Letters* **60** (2002) 931. 1.8, 3.1.3
- [41] M.Y. Louge, *Phys. Rev. E* **67** (2003) 061303. 1.8, 3.1.3
- [42] T.C. Halsey e D. Ertaş, cond-mat/0506170 (2005). 1.8, 3.1.3, 3.1.3, 3.4
- [43] P. Jop, Y. Forterre e O. Pouliquen, *Nature* **441**, 727 (2006). 1.9, 2.5.1, 3.1.3
- [44] O. Baran, D. Ertaş, T.C. Halsey, G.S. Grest e J.B. Lechman, cond-mat/0608641 (2006). (document), 1.9, 3.1.3, 3.1.3, 3.5
- [45] R. Brewster, G.S. Grest, J.W. Landry e A.J. Levine, cond-mat/0509122 (2005). 1.9
- [46] Y. Jiang and M. Liu, *Physical Review Letters* **91**, 144301 (2003). 2.1
- [47] Y. Jiang and M. Liu, *Physical Review Letters* **91**, 105501 (2007). 2.1
- [48] Y. Jiang and M. Liu, cond-mat: 0807.1883v1 (2008). 2.1
- [49] D. Fenistein e M. van Heck, *Nature (london)* **425**, 256 (2003). (document), 2.2, 2.5.1, 2.6.1, 2.6.3, 2.10, 2.11, 2.14, 3
- [50] D. Fenistein, J.W. van de Meent e M. van Heck, *Physical Review Letters* **92**, 094301 (2004). (document), 2.2, 2.6.1, 2.6.3, 2.10, 2.11, 3
- [51] T. Unger, J. Török, J. Kertész e D.E. Wolf, *Physical Review Letters* **92**, 214301 (2004). (document), 2.2, 2.2, 2.6.1, 2.6.1, 2.6.1, 2.6.3, 2.6.3, 2.11, 2.13, 2.14, 2.15, 4
- [52] J. Török, T. Unger, J. Kertész e D.E. Wolf, *Phys. Rev. E* **75**, 011305 (2007). (document), 2.2, 2.6.1, 2.6.1, 2.6.3, 2.11, 2.15, 4
- [53] X. Nie, E. Ben-Naim, e S. Chen, *Physical Review Letters* **89**, 204301 (2002). 2.2
- [54] L. Onsager, *Physical Review* **35**, 405 (1931). 2.2, 2.6.1, 2.6.3
- [55] L. Onsager, *Physical Review* **38**, 2265 (1931). 2.2, 2.6.1, 2.6.3
- [56] A.L. Bordignon, L. Sigaud, G. Tavares, H. Lopes, T. Lewiner e W.A.M. Morgado, *Physica A* **388**, 2099 (2009). (document), 2.5.1, 2.5.2, 2.5.3, 2.6, 2.7, 2.7, 2.8, 2.9, 2

- [57] A.W. Williamson, *Nature* **1**, 20 (1869). 3.1.1
- [58] A. Fick, *Phil. Mag. S.4* **10**, 30 (1855). 3.1.1
- [59] D. Halliday, R. Resnick e J. Walker, Fundamentos da Física 3 - 4a. Edição (John Wiley et Sons, 1993). 3.1.1
- [60] J. Philibert, *Diffusion Fundamentals* **2**, 1 (2005). 3.1.1, 3.1.1
- [61] R. Brown, *Phil. Mag.* **4**, 161 (1828). 3.1.1
- [62] G. Gamow, One, Two, Three...Infinity (Dover Publications, 1988). (document), 3.1
- [63] A. Einstein (edited by R. Fürth), Investigations on the Theory of the Brownian Movement (Dover Publications, 1956). 3.1.1
- [64] S. Chandrasekhar *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943). 3.1.1
- [65] P. Hänggi e F. Marchesoni *Chaos* **15**, 026101 (2005). 3.1.1
- [66] T. Bickel, *Physica A* **377**, 24 (2007). 3.1.1
- [67] T.S. Ursell, The Diffusion Equation - A Multi-Dimensional Tutorial (C.I.T., 2007). 3.1.1, 3.1.1
- [68] N.C. van Kampen, Stochastic Processes In Physics And Chemistry (North Holland, Amsterdam, 1992). 3.1.1, 3.1.1
- [69] J. Gollub, *Physics Today* **56**, 10 (2002). 3.1.2
- [70] I.S. Aranson e L.S. Tsimring, *Phys. Rev. E* **64**, 020301 (2001). 3.1.2
- [71] L. Bocquet, W. Losert, D. Schalk, T.C. Lubensky e J.P. Gollub, *Phys. Rev. E* **65**, 011307 (2002). 3.1.2
- [72] A. Lemaître, *Physical Review Letters* **89**, 064303 (2002). 3.1.2
- [73] J.T. Jenkins e D.K. Yoon, *Physica Review Letters* **88**, 194301 (1985). 3.1.2
- [74] J.B. Knight, H.M. Jaeger e S.R. Nagel, *Physical Review Letters* **70**, 3728 (1993). 3.1.2
- [75] A.H. Makse, S. Havlin, P.R. King e H.E. Stanley, *Nature* **386**, 379 (1997). (document), 3.1.2, 3.2
- [76] A. Samadani, A. Pradhan e A. Kudrolli, *Phys. Rev. E* **62**, 1059 (1999). 3.1.2

- [77] A. Samadani e A. Kudrolli, *Phys. Rev. E* **64**, 051301 (2001). 3.1.2
- [78] K. Choo, T.C.A. Molteno e S.W. Morris, *Phys. Rev. E* **79**, 2975 (1997). (document), 3.1.2, 3.3, 3.4
- [79] O. Zik, D. Levine, S.G. Lipson, S. Shtrichman e J. Stavans, *Physical Review Letters* **73**, 644 (1994). 3.1.2
- [80] C. Catuto e U.M.B. Marconi, *Physical Review Letters* **92**, 174502 (2004). 3.1.2
- [81] I. Aranson e L. Tsimring, *Physical Review Letters* **82**, 4643 (1999). (document), 3.1.2, 3.4
- [82] J.M. Ottino e D.V. Khakhar, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **32**, 55 (2000). 3.1.2
- [83] Z. Khan, W.A. Toraruk e S.W. Morris, *Europhys. Lett.* **66**, 212 (2004). 3.1.2
- [84] Z. Khan e S.W. Morris, *Physical Review Letters* **94**, 048002 (2005). 3.1.2
- [85] L.E. Silbert, *Physical Review Letters* **94**, 098002 (2005). 3.1.3
- [86] P.-A. Lemieux e D.J. Durian, *Physical Review Letters* **85**, 4273 (2000). 3.1.3
- [87] G.D.R. Midi, *Euro. Phys. Journal E* **14**, 341 (2004). 3.1.3
- [88] F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux e F. Chevoir, *Phys. Rev. E* **72**, 021309 (2005). 3.1.3
- [89] L. Sigaud e W.A.M. Morgado, em preparação. 3.2.1, 3.2.2, 3.2.4, 3.2.5, 6

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)