

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
FACULDADE DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE  
RECURSOS DA AMAZÔNIA

TEÔNIS SILVA DE PAIVA

ANÁLISE DE SISTEMAS GRANULARES SUBMETIDOS A  
OSCILAÇÕES HARMÔNICAS

MANAUS

2014

TEÔNIS SILVA DE PAIVA

**ANÁLISE DE SISTEMAS GRANULARES SUBMETIDOS A  
OSCILAÇÕES HARMÔNICAS**

Dissertação apresentada como requisito  
parcial para obtenção do título de Mestre  
em Engenharia de Recursos da Amazônia.

HIDEMBERGUE ORDOZGOITH DA FROTA  
(ORIENTADOR)

MANAUS  
2014

# Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus, pela sabedoria, força, misericórdia e vida que me concedeu para que eu pudesse chegar até aqui.

Aos meus pais, Sebastião e Vânia, pelo amor, apoio e paciência que tiveram comigo durante toda a minha jornada acadêmica e em toda a minha vida.

Ao professor Hidembergue por toda a paciência e dedicação em me ensinar e orientar na realização deste trabalho, sem este apoio não conseguiria ter chegado aqui.

À professora Consuelo da Frota, por toda a dedicação e ajuda que me deu desde o primeiro dia que entrei neste programa de pós-graduação.

Aos meu amigos e companheiros dessa jornada, Marcos Raiker e Patrícia Valença que tanto me ajudaram e me ensinaram a realizar ensaios nos laboratórios de Geotecnia.

*“A maravilhosa disposição e harmonia do Universo só pode ter tido origem segundo o plano de um Ser que tudo sabe e tudo pode. Isto fica sendo minha última e mais elavada descoberta”.*

*Isaac Newton*

# Resumo

Neste trabalho utilizou-se a técnica de Dinâmica Molecular para analisar o fenômeno que ocorre nos materiais granulares conhecido como “efeito castanha do Brasil”, que se constitui no movimento vertical ascendente de uma partícula embebida em um meio granular, cujo diâmetro é maior que o diâmetro máximo das partículas desse meio, que encontra-se submetido a um movimento harmônico simples vertical. Verificou-se que, devido a esse movimento, as partículas do meio granular apresentam um fluxo convectivo que, dependendo da inclinação da parede do recipiente, pode ser ascendente pela região central do recipiente e descendente pela região lateral, ou vice-versa. No caso do recipiente em forma de cilindro reto, esse fluxo causa a subida da “castanha do Brasil” pela região central do cilindro, até alcançar o topo do meio granular, descendo em seguida pelas suas laterais e entrando em um movimento cíclico em torno de um dos vórtices criados em regiões do cilindro diametralmente opostas. Experiências reais realizadas em laboratório confirmam qualitativamente os resultados da simulação computacional.

# Abstract

In this work the molecular dynamics technique is used to analyze the phenomenon that occurs in granular materials known as “Brazil nut effect”, which constitutes of the upward vertical motion of a particle embed in a granular media, whose diameter is larger than the maximum diameter of the particles of this media, which is under a vertical simple harmonic motion. It has been found that, due this movement, the particles of the granular media present a convective flow that, depending on the inclination of the container wall, may be up through the central region of the container and down through the lateral region, or *vice versa*. In the case of vessel-shaped right cylinder, this flow causes the rise of “Brazil nut” through the central region of the cylinder, until reach the top of the granular media, then down by its side and going into a cyclic movement around one of the vortices created in regions diametrically opposite of the cylinder. Real experiments carried out in laboratory have confirmed qualitatively the results of the computer simulation.

# Lista de Figuras

2.1	Uma pilha inclinada de sementes de mostarda . . . . .	13
2.2	Experimento de Reynolds . . . . .	14
2.3	Sistemas de discos de mesmo tamanho e diferentes densidades . . . . .	15
2.4	Pacotes granulares distintintos . . . . .	16
2.5	Segregação de partículas . . . . .	17
2.6	Embalagem de cereais contendo nozes de diversos tamanhos . . . . .	18
2.7	Configurações de um sistema contendo uma partícula grande e uma pequena	18
2.8	Partícula grande apoiada sobre um arco formado por partículas pequenas .	19
2.9	Evolução de um sistema de partículas em um recipiente sujeito a vibrações	20
2.10	Recipiente em forma de secção cônica . . . . .	20
2.11	Segregação Radial . . . . .	22
2.12	Segregação Axial . . . . .	22
3.1	Caixa de simulação . . . . .	27
3.2	Cela primitiva . . . . .	28
3.3	Substituição de um átomo por sua imagem . . . . .	28
3.4	Simulação de um escoamento em um funil . . . . .	29
3.5	Estrutura Cristalina cúbica do NaCl . . . . .	30
3.6	Interação de uma partícula com todas as demais . . . . .	30
3.7	Espaço da amostra dividido em celas . . . . .	31
3.8	Contato entre duas partículas . . . . .	35
3.9	Esquema da colisão de partículas . . . . .	38
3.10	Representação do Modelo de Cundall e Strack . . . . .	40
3.11	Esboço do Algoritmo de Dinâmica Molecular . . . . .	43
4.1	Aparato experimental. Utilizado para demonstração do BNE . . . . .	46

4.2	Modelo simulado . . . . .	48
4.3	Distribuição Granulométrica . . . . .	49
4.4	Preenchimento do recipiente . . . . .	50
4.5	Metódo para o cálculo do fluxo . . . . .	51
5.1	Sequência de imagens do experimento em execução . . . . .	53
5.2	Sequência de imagens da simulação . . . . .	58
5.3	Trajatória da partícula maior . . . . .	59
5.4	Comparação do movimento vertical da partícula grande 1 . . . . .	59
5.5	Comparação do movimento vertical da partícula grande 2 . . . . .	60
5.6	Fluxos de convecção para diferentes inclinações das paredes do cilindro . . . . .	61
5.7	Sequência de imagens da simulação com paredes inclinadas a $82,5^\circ$ . . . . .	62



# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>Materiais Granulares</b>	<b>12</b>
2.1	Características . . . . .	13
2.2	Pacotes Granulares . . . . .	16
2.3	Segregação . . . . .	16
2.3.1	Efeito Castanha do Brasil . . . . .	18
2.3.2	Mecanismos . . . . .	19
2.3.3	Segregação por cisalhamento de camadas . . . . .	20
2.3.4	Especificação deste trabalho . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Dinâmica Molecular</b>	<b>23</b>
3.1	A importância das Simulações Computacionais . . . . .	23
3.2	Noção de Dinâmica Molecular . . . . .	24
3.3	Breve Histórico da DM . . . . .	25
3.4	Condições de Contorno . . . . .	26
3.4.1	Condições Periódicas de Contorno . . . . .	27
3.4.2	Interações com Paredes . . . . .	28
3.5	Condições Iniciais . . . . .	29
3.6	Celas e Listas . . . . .	30
3.7	Interações entre partículas - Via Potencial de Interação . . . . .	31
3.7.1	Força em função do Potencial . . . . .	32
3.8	Interações por Contato . . . . .	34
3.8.1	Componente Normal . . . . .	35
3.8.2	Componente Tangencial . . . . .	38

3.9	Modelo de Força utilizado . . . . .	41
3.10	Equações de Movimento . . . . .	41
3.10.1	Algoritmo de Verlet . . . . .	41
3.10.2	Algoritmo de Leap-Frog . . . . .	42
3.11	Esboço de um Programa de DM . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Metodologia</b>	<b>45</b>
4.1	Experiência Real . . . . .	45
4.2	Simulação por Dinâmica Molecular . . . . .	46
4.2.1	Distribuição Granulométrica . . . . .	47
4.2.2	Condições iniciais . . . . .	48
4.2.3	Fluxo de convecção . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Resultados e Análise</b>	<b>52</b>
5.1	Resultados da Experiência Real . . . . .	52
5.2	Resultados das Simulações . . . . .	53
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>63</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>65</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Materiais granulares, como areia, feijão ou arroz, que estão muito presentes na vida cotidiana, são definidos como sendo grandes coleções de partículas macroscópicas que interagem entre si, na maioria dos casos, por meio de forças de contato dissipativas e que se comportam de maneira bastante diferente dos sólidos, líquidos e gases, podendo, então, ser considerados como um outro estado da matéria, devido às suas propriedades e comportamento tão particulares.

Raramente notados, eles têm um papel protagonista em indústrias, como a da mineração, da construção civil, da agricultura, farmacêutica e de alimentos. Praticamente tudo o que é ingerido teve sua origem em um conjunto de grãos ou pós. Eles claramente também são importantes para os processos geológicos, onde deslizamentos de terra, erosão, e, em uma escala relacionada, mas muito maior, as placas tectônicas determinam grande parte da morfologia da Terra.

O estudo de materiais granulares não é recente. Há uma vasta literatura na engenharia voltada para o estudo de tais materiais. Coulomb (1773), propôs as idéias de fricção estática; Faraday (1831) descobriu a instabilidade convectiva em pós em recipientes vibrantes e Reynolds (1885) introduziu a noção de dilatância, a qual implica que materiais granulares compactados devem necessariamente se expandir para que qualquer cisalhamento possa ocorrer.

Apesar dos materiais granulares serem um objeto de estudo antigo, o interesse pela ciência granular, a tecnologia para manipular e controlar materiais granulares, é ainda pouco desenvolvida. Parcialmente devido a estas carências teóricas, algumas estimativas

sugerem que 40% da capacidade industrial é gasta somente para transportar os grãos de uma parte para outra da fábrica (JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996).

Nos últimos anos vem sendo observado um crescente interesse na área, tendo o advento dos computadores contribuído significativamente neste sentido. Devido não existir uma teoria única para os diferentes sistemas granulares, vem sendo adotado o estudo de determinados sistemas e fenômenos através de simulações computacionais. Isso porque modelos computacionais podem ser construídos a partir de propriedades elementares do material em estudo e de propriedades sobre suas interações. Esses modelos muitas vezes são capazes de prever o comportamento do sistema granular real em uma variedade de situações. Além disso, sendo a realização de experimentos uma opção frequentemente dispendiosa, simulações podem substituí-la parcialmente e ainda apresentar vantagens como a possibilidade de manipular parâmetros, testar modelos e armazenar informações em todos os instantes de tempo. Dentre os métodos numéricos utilizados, o uso de simulações de Dinâmica Molecular em sistemas granulares vem ganhando muitos adeptos nos últimos anos. A principal idéia do método é simular a dinâmica do sistema através da integração numérica das equações do movimento de Newton para cada partícula.

Neste trabalho simula-se, por meio da Dinâmica Molecular, um sistema bi-dimensional de partículas granulares contidas numa caixa retangular submetidas a oscilações harmônicas verticais, com o objetivo de analisar a ocorrência de fluxos granulares bem como seus parâmetros.

O trabalho está dividido em seis capítulos, sendo o primeiro esta introdução. No segundo capítulo é abordado com mais detalhes as características dos materiais granulares e seus fenômenos. O terceiro é uma breve descrição da Dinâmica Molecular. No quarto é descrito a metodologia utilizada para análise. O quinto são os resultados obtidos e por fim é apresentado as conclusões no capítulo seis.

## Capítulo 2

# Materiais Granulares

Materiais granulares são grandes conglomerados de partículas macroscópicas das mais variadas formas e tamanhos, que vão da ordem de  $1\mu\text{m}$  a  $1\text{ km}$  de diâmetro. São encontrados na cozinha (sal, açúcar, feijão, arroz entre outros), na geofísica, como cascalhos, e até mesmo na astrofísica, como asteróides. As aplicações industriais são inúmeras: pílulas e granulados na indústria farmacêutica, cimento, areia e brita na engenharia civil, catalisadores e pós na indústria química e em muitas outras (HERRMANN, 2002).

Devido a tantas aplicações industriais e cotidianas, como mencionado acima, são inúmeros os estudos sobre estes materiais (CODY et al., 1996; GUTT; HAFF, 1991; MOBIUS et al., 2001; SNOEIJER et al., 2004; PITMAN et al., 2003; KRUELLE, 2009; LÓPEZ; VERCÍK; COSTA, 2008; SONG et al., 2013; IVERSON; LOGAN; DENLINGER, 2004; ZHU et al., 2011; GIRARDEAU-MONTAUT; GIRARDEAU-MONTAUT, 2003; SAMADANI; PRADHAN; KUDROLLI, 1999). Os estudos são teóricos, experimentais e também simulacionais. As teorias sobre os resultados têm divergido muito entre os pesquisadores, deixando assim a interpretação do comportamento dos materiais granulares ainda em aberto.

Um estudo completo sobre os meios granulares não faz parte do objetivo deste trabalho. Assim, neste capítulo apresenta-se as características principais, particularidades e o fenômeno da segregação que é investigado nesta dissertação. As interações entre grãos são abordadas no próximo capítulo.

## 2.1 Características

Os materiais granulares comportam-se de maneira bastante diferente de outros materiais. Frequentemente é complicado manipulá-los, pois se revelam com diferentes comportamentos sobre diferentes circunstâncias: quando excitado, o material granular se assemelha a um líquido. Fluxos através de tubos, ondas de superfície, fluxo da areia em uma ampulheta, são exemplos do comportamento líquido dos grãos. Em outras circunstâncias se comporta mais como um sólido: um monte de areia não se dissolve por si só, mas pode ser deformado plasticamente. Quando fortemente agitados, assemelham-se a gases, como por exemplo, uma nuvem de pó (POSCHTEL; SCHWAGER, 2005)

Estágios intermediários também são interessantes. Por exemplo: uma pilha de grãos em repouso, com uma inclinação menor que o ângulo de repouso (Figura 2.1(a)), comporta-se como um sólido. Se a pilha for inclinada alguns graus acima do ângulo de repouso, os grãos começam a fluir, como pode ser visto na Figura 2.1(b). Contudo, este fluxo não é característico de um fluido comum, pois somente as camadas superficiais entram em movimento, permanecendo em repouso as camadas mais internas.

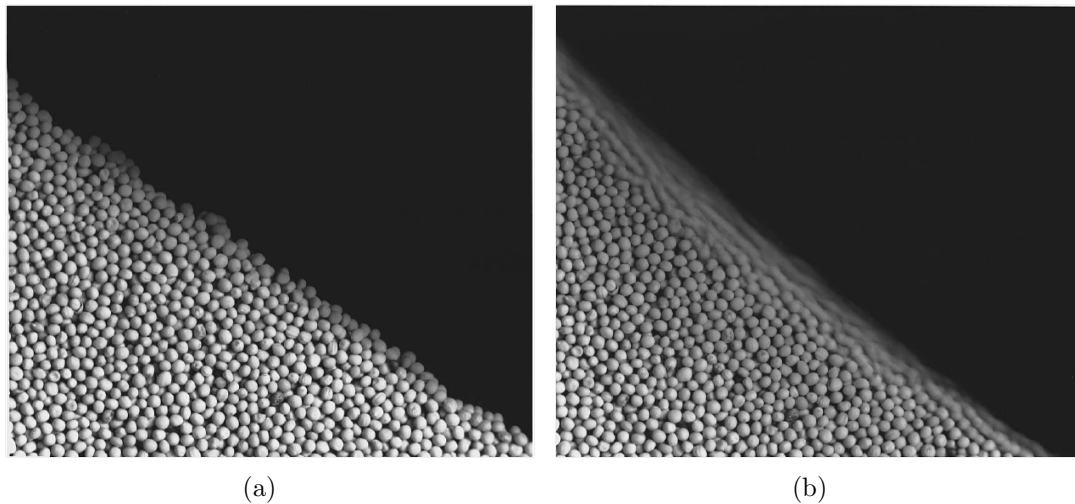


Figura 2.1: Uma pilha inclinada de sementes de mostarda. Em (a) a pilha se encontra em repouso, inclinada a um ângulo menor do que o ângulo de repouso. Em (b) a mesma pilha após um ligeiro aumento na inclinação para criar uma avalanche. Nota-se que o fluxo ocorre apenas ao longo da superfície e que as sementes mais profundas dentro da pilha não entram em movimento. Fonte: Jaeger, Nagel e Behringer (1996)

O mais importante parâmetro que caracteriza estas mudanças do comportamento de um sistema granular é a densidade (HERRMANN, 2002). Um dos pioneiros da pesquisa

de meios granulares foi Osborne Reynolds. No seu último artigo (REYNOLDS, 1885) em 1885 ele tentou descrever, quase tudo sobre a física dos materiais granulares. Ele introduziu o conceito de dilatância, o qual implica que materiais granulares compactados devem necessariamente se expandir para que qualquer cisalhamento possa ocorrer. Reynolds propôs um experimento constituído de uma bolsa de borracha preenchida com areia e água. Um tubo de vidro indica o nível de água, quando a bolsa é comprimida o nível de água desce em vez de subir, como ingenuamente se esperava (Figura 2.2). A razão física para que isso aconteça é que os grãos estão tão densamente compactados antes da compressão (densidade acima da densidade de Reynolds  $\rho_R$ ) que, afim de se moverem uns em relação aos outros é necessário primeiramente separar os grãos numa determinada distância. Assim a água vai preenchendo os espaços vazios gerados entre os grãos, fazendo então o nível de água baixar.



Figura 2.2: Experimento de Reynolds que exemplifica o fenômeno da dilatância nos materiais granulares. Uma bolsa plástica contendo areia e água com um tubo medindo o nível de água. Quando a bolsa é pressionada o nível de água diminui. Fonte: Duran (2000)

A densidade de fato controla o comportamento mecânico do material granular. A Figura 2.3 mostra configurações de um sistema contendo vários discos de mesmo tamanho e diferentes densidades, simulado computacionalmente. Da esquerda para a direita, pode ser observado o aparecimento de estruturas ordenadas com o aumento da densidade. A figura do meio mostra o caso em que a densidade tem exatamente o valor de  $\rho_R$ , este é o maior valor da densidade em que não ocorre a dilatância quando o material estiver sob compressão. A figura da direita corresponde à situação em que ocorre a dilatância, Neste

regime, muitos efeitos interessantes ocorrem devido à inelasticidade das colisões.

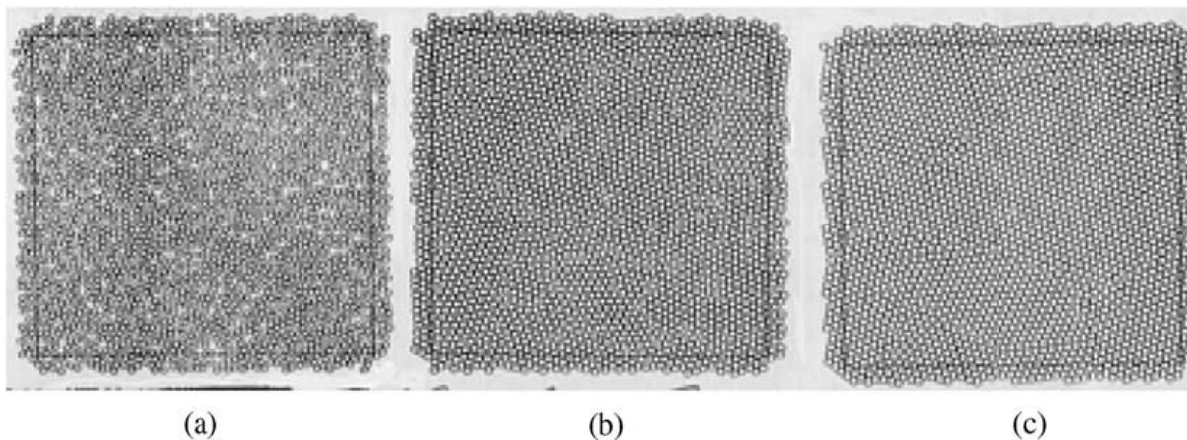


Figura 2.3: Sistemas de discos de mesmo tamanho e diferentes densidades. Em(a)  $\rho < \rho_R$ , (b)  $\rho = \rho_R$  e (c)  $\rho > \rho_R$  Fonte: Herrmann (2002)

Há dois aspectos particularmente importantes que contribuem para as propriedades únicas dos materiais granulares: a temperatura não desempenha um papel fundamental e as interações entre os grãos são do tipo dissipativas, devido ao atrito estático e as colisões serem inelásticas. A escala de energia  $k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura, é irrelevante aqui. A energia potencial gravitacional,  $mgd$ , é a escala de energia relevante, onde  $m$  é a massa,  $g$  a aceleração gravitacional e  $d$  é o diâmetro do grão. Para a areia, por exemplo, a energia potencial gravitacional é pelo menos  $10^{12}$  vezes  $k_B T$  em temperatura ambiente, (JAEGER; NAGEL; BEHRINGER, 1996).

O modo como as tensões se distribuem nos meios granulares é bem distinto daquilo que é observado nos sólidos e líquidos. O engenheiro alemão H.A. Janssem, em 1895, mostrou em seu experimento como a pressão varia com a profundidade em silos contendo grãos (SPERL, 2006). Ele observou que a partir de uma determinada altura de grãos a pressão no fundo do silo permanecia praticamente constante, isso se deve ao fato das forças de contato entre os grãos serem transmitidas não somente na vertical mas também na horizontal. Assim, a partir de uma determinada altura, a pressão adicional é exercida contra as paredes do silos por isso, é tão comum o rompimento de silos nas laterais. Materiais lisos, como por exemplo o milho, tendem a exercer maior pressão no fundo devido o menor atrito com as laterais (MAGALHÃES, 2008).



## 2.2 Pacotes Granulares

Um sistema granular em repouso sob ação da gravidade forma um pacote granular. Exemplos são uma pilha de areia ou a própria praia. Pacotes estáveis podem existir em diversas densidades, como se vê na Figura 2.4. Uma forma de fazer esta caracterização é através da porosidade  $\Phi$ , isto é, a fração de volume não ocupado e portanto,  $\Psi = 1 - \Phi$  a fração de volume ocupado.

Um sistema granular pode estar em um grande número de diferentes estados microscópicos a densidades macroscópicas fixas, e diversas propriedades não-convencionais estão ligadas ao seu acondicionamento não-trivial. O papel que o conceito de energia livre desempenha em sistemas térmicos 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-térmicos (CAGLIOTI et al., 1997).

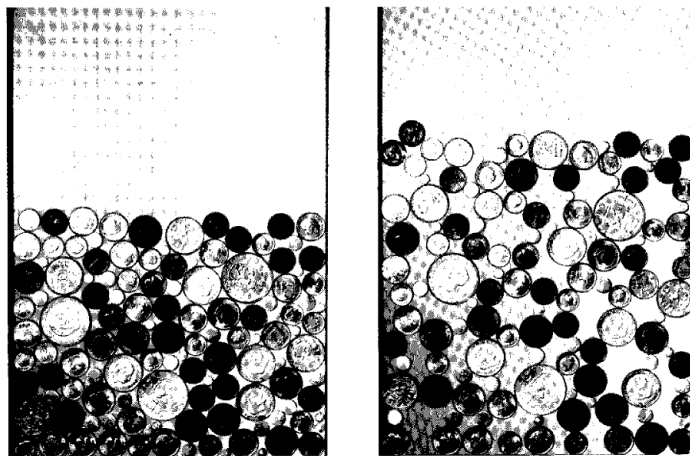


Figura 2.4: Pacotes granulares distintivos formados a partir do mesmo conjunto granulométrico com diferentes porosidades. Fonte: (HERRMANN, 2002)

## 2.3 Segregação

A mistura de materiais granulares é amplamente utilizada em diversos segmentos da indústria. Líquidos, em geral, possuem uma pré-disposição para se misturarem, enquanto os materiais granulares não apresentam esta disponibilidade. Para se obter misturas

homogêneas de diferentes grãos é necessário executar vibração ou rotação do recipiente onde eles estão depositados, ou seja, inserir energia dentro do sistema. Entretanto, esse procedimento muitas vezes não é alcançado. Frequentemente se observa separação parcial ou completa, o que pode comprometer a qualidade final de um produto ou dificultar as etapas no processo de produção.

Diferentes grãos colocados aleatoriamente dentro de um recipiente sujeito a vibrações verticais tendem a se separar por tamanho: os maiores grãos ficam majoritariamente na parte superior do recipiente, Figura 2.5. A este fenômeno denomina-se segregação (TRAORE; LAURENTIE, 2009). Em uma mistura de materiais particulados distintos, ou seja, com diferentes propriedades mecânicas tais como tamanho, forma, rugosidade ou densidade, os grãos tendem a se separar quando submetidos à agitação externa.

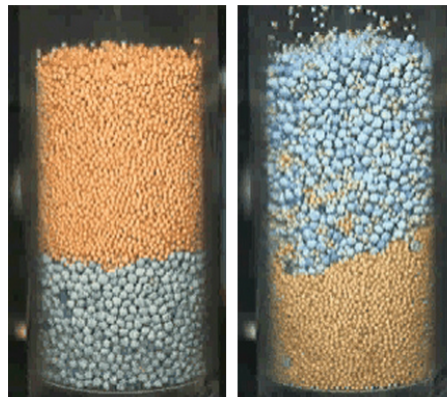


Figura 2.5: Segregação de partículas. As partículas maiores inicialmente se encontram no fundo do recipiente e após a agitação vertical deslocam-se mais para o topo. Fonte: Vandu, Ellenberger e Krishna (2005)

A segregação é muito observada na indústria, que frequentemente manipula materiais granulares através de misturas, transporte e armazenamento. Estratégias são usadas para minimizar este efeito, mas sem um completo entendimento do fenômeno. Em misturas de partículas de diferentes tamanhos, utilizadas na fabricação de medicamentos, como comprimidos, cápsulas ou pílulas, a segregação é um fenômeno indesejado, pois é importante obter misturas mais homogêneas possível. Por outro lado, um exemplo de processo que se beneficia deste efeito é o peneiramento. Para peneirar uma mistura de diferentes grãos deve-se aplicar uma vibração e esta ação faz com que os menores movam-se para a parte inferior onde se encontram os orifícios da peneira. Assim, as partículas pequenas atravessam essas aberturas até que restem apenas as partículas maiores que não ultrapassam os orifícios (SOTERRONI, 2007).

### 2.3.1 Efeito Castanha do Brasil

O fenômeno da segregação ficou muito conhecido pelo nome de Efeito Castanha do Brasil ou Brazil Nut Effect (BNE) (RINO, 2001), devido a caixas de cereais vendidos comercialmente contendo vários tipos de nozes brasileiras, aveia e farelo, Figura 2.6. Em consequência da agitação dessas caixas no seu transporte e manuseio, as castanhas de maiores tamanhos são mais facilmente encontradas na superfície.



Figura 2.6: Embalagem de cereais contendo nozes de diversos tamanhos. Nota-se que as castanhas se encontram na superfície. Fonte: Zalben (2011)

O BNE é um fenômeno de comportamento contrário ao lógico. Numa situação de equilíbrio, se uma partícula grande é colocada num recipiente preenchido com pequenas partículas de igual ou menor densidade, a maior partícula se encontrara no fundo do recipiente para minimizar a energia potencial (ROSATO et al., 1987), Figura 2.7.

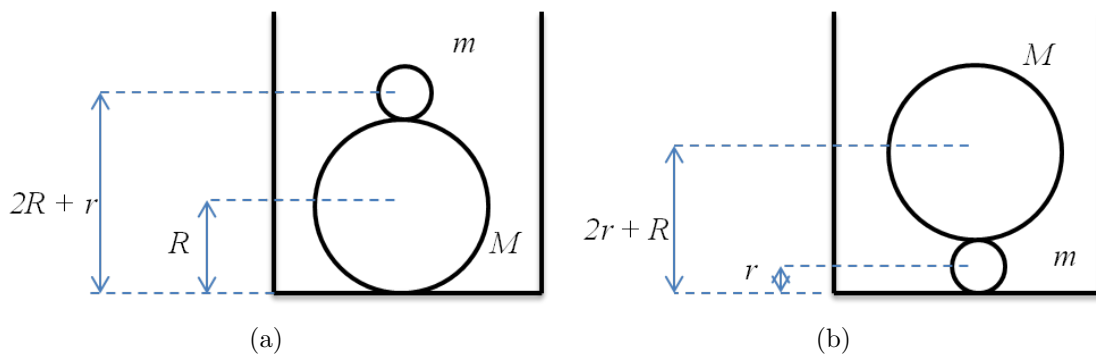


Figura 2.7: Configurações de um sistema contendo uma partícula grande de massa  $M$ , raio  $R$  e densidade  $D$  e uma partícula menor de massa  $m < M$ , raio  $r < R$  e densidade  $d \leq D$ . A configuração em (a) requer menos energia potencial que a configuração (b). Este pensamento pode ser atribuído a um conjunto contendo várias partículas pequenas e grandes com essas características.

### 2.3.2 Mecanismos

Muitos estudos experimentais e computacionais têm sido realizados, afim de se elucidar os mecanismos que levam a ocorrência da segregação. Os parâmetros do fenômeno ainda não estão totalmente definidos, porém estes estudos já nos mostram diferentes mecanismos que explicam a segregação.

Entre os mecanismos destacam-se a inércia, percolação, convecção e efeitos de arcos. No mecanismo de inércia compara-se a ascensão da partícula grande, devido sua alta energia cinética, com uma subida balística penetrando assim, por inércia no leito de partículas menores (MOLINARI; CHAY; SUÁREZ, 2003). O mecanismo da percolação sugere que as partículas menores se infiltram nos pequenos espaços vazios que são criados em baixo da partícula grande quando o recipiente é submetido a vibrações. Dessa forma, a partícula grande se apoia nas menores e tende ao topo (ROSATO et al., 1987). Esta forma pode contar com a ajuda de repetidos efeitos de arcos, onde as partículas grandes são apoiadas por arcos de pequenas partículas (DURAN; RAJCHENBACH; CLEMENT, 1993), isto pode ser observado através da Figura 2.8 .

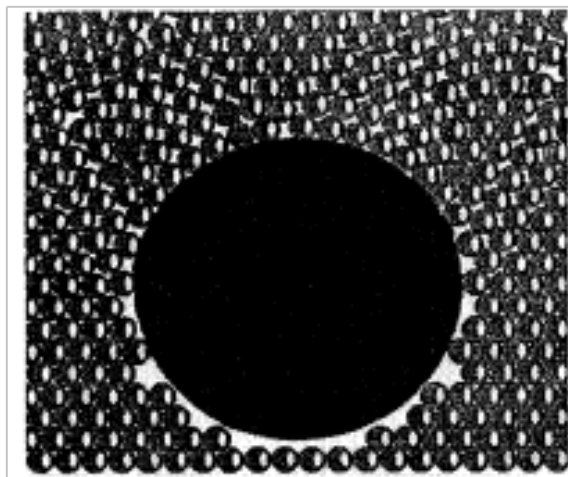


Figura 2.8: Partícula grande apoiada sobre um arco formado por partículas pequenas. Observe-se que a partícula grande não toca o fundo do meio granular. Fonte: Duran, Rajchenbach e Clement (1993)

A convecção é o mecanismo no qual, os grãos seguem um fluxo ascendente pelo meio do recipiente e descendente nas paredes laterais, formando assim dois vórtices, ou células de convecção (GALLAS; HERRMANN; SOKOFOWSKI, 1992). A Figura 2.9 ilustra este mecanismo, pode-se notar que as partículas azuis, inicialmente no topo descem pelas

laterais enquanto as amarelas sobem pelo meio, estágio intermediário, no último estágio é visto claramente a formação das células de convecção.

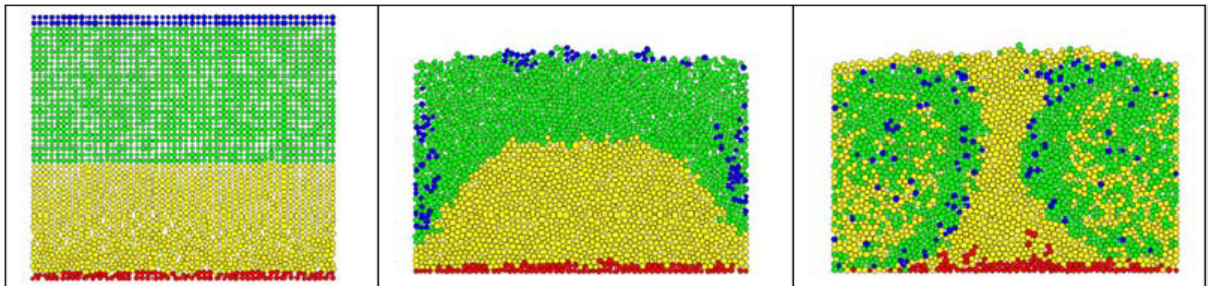


Figura 2.9: Evolução de um sistema de partículas em um recipiente sujeito a vibrações verticais. Vê-se claramente a formação dos vórtices. Fonte: Traore e Laurentie (2009)

Taguchi (1992) sugere que a convecção se origina por indução elástica devido a tensões horizontais que as paredes da caixa, ou recipiente, exercem sobre as partículas, originando assim fluxos horizontais de partículas que, quando atingem o centro do recipiente tendem a subir, devido o fundo da caixa não permitir a descida. Taguchi enfatiza que a condição para que esta indução elástica aconteça é que a aceleração da gravidade seja maior que a aceleração do recipiente, deixando assim livre o movimento vertical das partículas.

Estudos relatam que a formação das células de convecção depende do atrito das partículas com a parede do recipiente e que o sentido do fluxo pode ser invertido com a inclinação das paredes laterais, Figura 2.10.

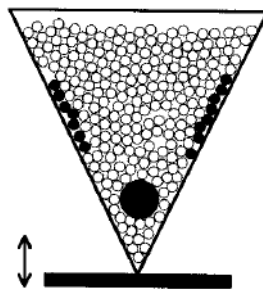


Figura 2.10: Recipiente em forma de secção cônica. Fluxo invertido as partículas sobem pelas laterais e descem pelo meio. Fonte: Knight, Jaeger e Nagel (1993)

### 2.3.3 Segregação por cisalhamento de camadas

A segregação por cisalhamento é um outro tipo de segregação frequentemente observada em cilindros, preenchidos com partículas com diferentes tamanhos ou densidades,

rotacionado em torno do seu eixo. Rotação de barris e fornos são aplicadas na indústria para realizar uma série de aplicações, tais como calcinação de calcário, cliquerização de materiais cimentícios, incineração de resíduos e calcinação de coque de petróleo (CHAKRABORTY; NOTT; PRAKASH, 2000). Dependendo da orientação do eixo do cilindro, temos dois tipos de segregação que podem ser observadas: a segregação radial e a segregação axial.

### **Segregação Radial**

Na segregação radial as partículas menores ou as mais densas tendem a migrar para o centro do cilindro quando este é rotacionado em torno de seu eixo (Figura 2.11). Para baixas velocidades de rotação do cilindro a percolação domina, e as pequenas partículas seguem num fluxo pelas camadas inferiores em direção ao centro, formando assim um núcleo de pequenas partículas. Contudo, para altas velocidades de rotação a segregação padrão é revertida, com as pequenas partículas se encontrando pelas periferias do cilindro ao invés do centro (OTTINO; KHAKHA, 2000).

### **Segregação Axial**

Quando o recipiente cilíndrico é colocado na horizontal e rotacionado, contendo partículas sólidas dissimilares, diferentes no tamanho ou na densidade, mostra-se alternadas faixas axiais, Figura 2.12. No caso de partículas de diferentes tamanhos, acredita-se que este fenômeno ocorre devido a diferença no ângulo de repouso dos dois materiais, o que pode produzir uma pequena diferença no fluxo axial dos dois tipos de partículas (OTTINO; KHAKHA, 2000).

A segregação axial ocorre para uma escala de tempo bem maior que a segregação radial, a qual ocorre em poucas rotações do recipiente enquanto as formações de faixas axiais ocorre geralmente para centenas até milhares de rotações (CHAKRABORTY; NOTT; PRAKASH, 2000).

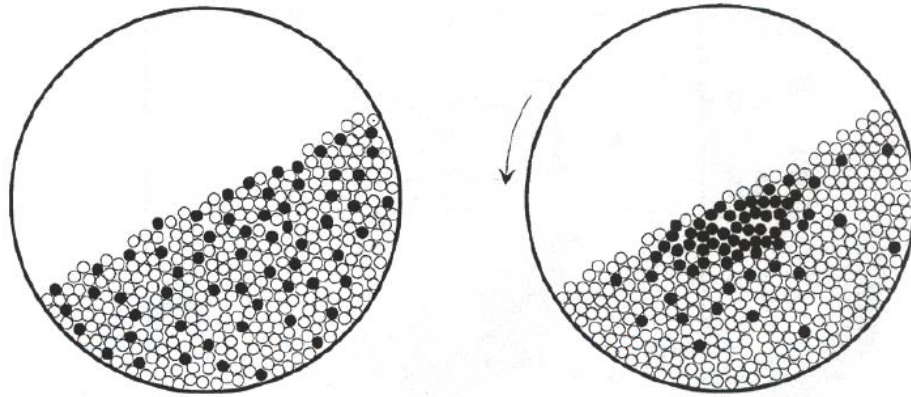


Figura 2.11: Segregação Radial. Cilindro contendo partículas. Após ser rotacionado as partículas menores ou mais densas migram para o centro do cilindro. Fonte: Duran (2000)

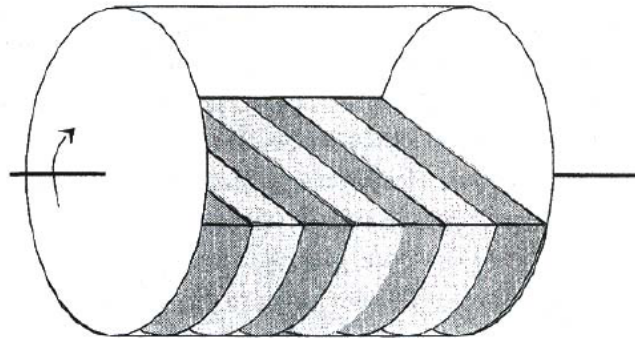


Figura 2.12: Segregação Axial. Cilindro contendo partículas dissimilares. Após varias rotações as partículas separam-se em alternadas faixas axiais. Fontes: Duran (2000)

### 2.3.4 Especificação deste trabalho

Neste trabalho simulamos numericamente, em duas dimensões, a dinâmica do “efeito castanha do Brasil” afim de investigarmos o fenômeno da segregação de uma única partícula em meio a várias partículas menores. Procuramos dar ênfase ao mecanismo de convecção. As simulações são detalhadas nos capítulos que se seguem.

# Capítulo 3

## Dinâmica Molecular

Este capítulo tem por objetivo descrever, de forma geral, a técnica de simulação computacional da dinâmica molecular, apontando sempre para a especificação do trabalho. Serão abordados, a importância da simulação computacional, um pouco da história da dinâmica molecular bem como sua técnica.

### 3.1 A importância das Simulações Computacionais

A simulação computacional realiza hoje um importante papel na ciência. No passado, físicos foram distinguidos por realizarem uma ligação do experimento com a teoria. No experimento um sistema é submetido a medidas e os resultados são expressos de forma numérica. A teoria é caracterizada pela utilização de um modelo do sistema, que é construído por um conjunto de equações matemáticas. A comprovação de modelos teóricos se dá muitas vezes, sob algumas condições que simplificam o sistema em estudo. Isso pode levar à situação de não se ter um entendimento completo sobre o problema investigado.

Com o advento dos computadores de alta velocidade surgiu uma adequada ferramenta para comparar o experimento real com a teoria: a simulação computacional. Na simulação computacional o sistema a ser estudado ainda é descrito por um modelo teórico, porém os cálculos são realizados por uma máquina que segue, passo a passo, uma “receita” (o algoritmo, implantado em uma adequada linguagem de programação).

Por um lado, a simulação computacional deu “vida” a muitos modelos, que no passado



tinham a dificuldade de serem testados, devido a uma série de complexidades, tais como um custoso equipamento experimental ou falta de tecnologia. Por outro lado, a simulação muitas vezes está muito próxima das condições experimentais, podendo seus resultados serem comparados diretamente com os resultados experimentais.

Mas afinal a simulação computacional é um experimento ou uma teoria? A simulação algumas vezes é vista como experimento e em outras como teoria. Se levarmos em conta que na simulação ainda nos baseamos em modelos, não como o caso real, iremos classificar a simulação como um método teórico. Mas se observarmos o procedimento de se verificar um determinado modelo através da simulação computacional isso lembra muito um experimento. Ambas as representações são legítimas em formas distintas de se observar, e é isto que torna a ciência da simulação um ramo próprio das ciências exatas.

## 3.2 Noção de Dinâmica Molecular

A Dinâmica Molecular (DM) é uma técnica de simulação computacional que pode ser aplicada para resolver equações de movimento de moléculas, átomos ou grãos, considerados como partículas esféricas que interagem entre si dentro de um certo ambiente.

A técnica de DM é similar a um experimento real sob diversos aspectos. Ao realizar-se um experimento prepara-se a amostra que se deseja estudar, conecta-se um instrumento de medida e medem-se as propriedades durante certo intervalo de tempo. Se este experimento estiver sujeito a interferências externas, quanto maior for o tempo de amostragem, mais precisas serão as medidas. Na simulação DM segue-se a mesma abordagem: primeiro prepara-se uma amostra, seleciona-se um determinado modelo constituído por um número de partículas e resolve-se as equações de Newton para este sistema até que as propriedades de interesse não mais variem com o tempo. Após o processo de equilíbrio, realizamos as medidas propriamente ditas.

Através da DM podemos estudar numericamente as propriedades dinâmicas e estáticas de um sistema com grande número de partículas. A dinâmica molecular segue as leis da Mecânica Clássica e o cálculo das forças de interações entre as partículas está entre os principais passos da simulação. A dinâmica de um material granular é governada pelas equações de movimento de Newton para as coordenadas do centro de massa e ângulo de



realizar. Nesta seção serão mostrados os trabalhos que entraram no marco da dinâmica nos anos 50 e 60.

- O primeiro artigo reportando uma simulação por dinâmica molecular foi escrita por Alder e Wainwright em 1957 (ALDER; WAINWRIGHT, 1957). O objetivo do trabalho foi investigar o diagrama de fases de um sistema de esferas rígidas no regime de sólido e líquido. Este sistema é caracterizado por interações instantâneas nas colisões, onde a região de colisão entre duas partículas se resume em um ponto. Foram apresentados resultados para simulações com 32 e 108 partículas, que foram calculados através de um UNIVAC e um IBM 704. Com 32 partículas foi registrado cerca de 300 colisões em uma hora no UNIVAC e para 108 partículas foram cerca de 1000 colisões em uma hora.
- Em 1960 J.B. Gibson e cooperadores (GIBSON et al., 1960) escreveram um artigo sobre danos causados pela radiação. Neste trabalho é representado um sistema de cobre, onde os defeitos na rede cristalina são analisados pelos espaços intersticiais e vacâncias. Este provavelmente foi de uma dinâmica molecular contendo um potencial contínuo. Foram utilizadas 500 partículas onde os cálculos foram executados através de um IBM 704.
- A. Rahman em 1964 (RAHMAN, 1964) utilizou um sistema contendo 864 partículas interagindo através do potencial de Lennard-Jones e um computador CDC 3600 para simular por dinâmica molecular um líquido de argônio. Rahman se tornou um pioneiro na DM, os códigos realizados por ele ainda é utilizado por muitos programas de dinâmica molecular em operação em todo o mundo.
- Verlet (1967) utilizou como seu ponto de partida o trabalho de Rahman para mostrar como é possível integrar as equações de movimento de cerca de mil partículas de forma relativamente fácil. Para isso ele utilizou o que ficou tão famoso como “Algoritmo de Verlet”.

### 3.4 Condições de Contorno

Chama-se condições de contorno os limites, fronteiras, do espaço, onde as partículas movem-se e interagem entre si. As principais condições de contorno são as condições periódicas de contorno e interação com paredes.

### 3.4.1 Condições Periódicas de Contorno

Consideramos uma amostra contendo  $N$  partículas, contidas dentro de uma caixa cúbica, chamada de caixa de simulação, nela as partículas estão em movimento e interagem entre si, Figura 3.1.

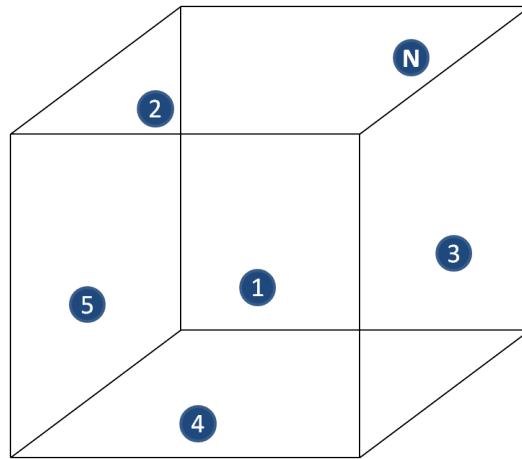


Figura 3.1: Caixa de simulação contendo as  $N$  partículas.

Devido esta constante agitação, em algum momento da simulação estas partículas podem ser encontradas fora da caixa de simulação, isto deixaria a partícula praticamente livre da interação com as demais, o que ocasionaria seu espaço tender ao infinito. Para que este problema não ocorra utiliza-se as Condições Periódicas de Contorno (CPC). Esta consiste em considerar a caixa de simulação como uma “cela” primitiva de uma rede periódica e infinita. É como se a caixa de simulação estivesse cercado de espelhos que produziriam infinitas imagens das partículas, Figura 3.2.

Quando uma partícula da “cela” principal se movimentar todas as suas imagens se movimentam com a mesma velocidade. Assim, se uma partícula deixa a caixa de simulação, uma de suas imagens irá substituí-la no lado oposto da caixa, Figura 3.3.

Se o comprimento da caixa de simulação, ao longo do eixo  $y$ , vai de 0 a  $Ly$  e a partícula se encontra numa coordenada  $Ly + \Delta y$ , ela será recolocada numa posição  $\Delta y$ .

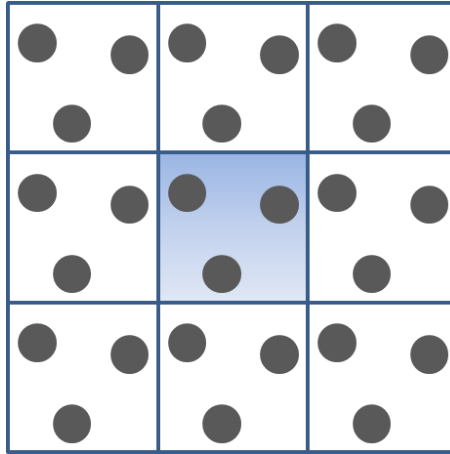


Figura 3.2: Cella primitiva (caixa sombreada) e suas imagens, vistas em duas dimensões.

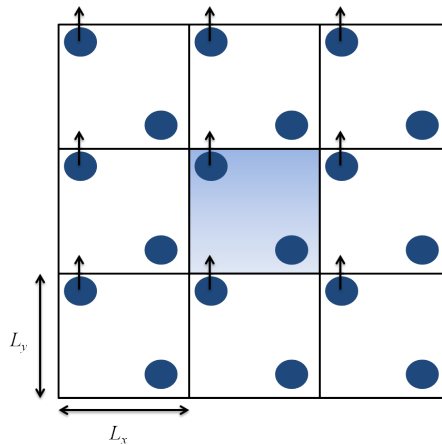


Figura 3.3: Substituição de um átomo por sua imagem devido às CPC.

Assim garantimos que as coordenadas das partículas estejam dentro da caixa central, ou seja

$$0 \leq x \leq L_x; 0 \leq y \leq L_y; 0 \leq z \leq L_z.$$

### 3.4.2 Interações com Paredes

Quando se trata de materiais granulares, estes geralmente estão confinados em algum recipiente. Logo, considerar a interação da partícula com a parede se torna de fundamental importância para uma boa representação de um modelo real, tal como o movimento convectivo de um material granular contido em um recipiente sob vibrações verticais ou horizontais, fluxo e entupimento de funis, ondas de densidades em tubos e movimento de

materiais granulares em seu transporte.

Para que o modelo seja bem realístico é de fundamental importância considerar a rugosidade da parede. Poschel e Schwager (2005) comentam que é uma infelicidade a interação mecânica de um corpo deformável com uma áspera parede ainda, ser pouco entendida. Uma eficiente forma de descrever esta interação é considerar as paredes do recipiente, formado por partículas fixas entre si, assim pode-se aplicar a lei da força entre partículas também com a parede, Figura 3.4.

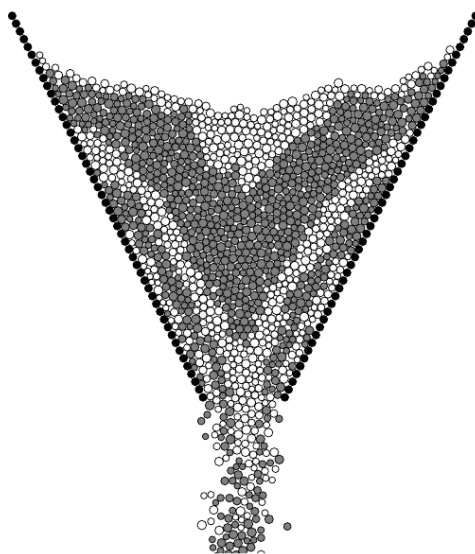


Figura 3.4: Simulação de um escoamento em um funil. As partículas imóveis que formam o funil estão em preto. Fonte: Poschel e Schwager (2005)

### 3.5 Condições Iniciais

As condições iniciais são definidas como sendo os valores das coordenadas  $\vec{r}_i(t = 0)$ , as velocidades  $\vec{v}_i(t = 0)$ , os ângulos de Euler  $\vec{\varphi}_i(t = 0)$  e as velocidades angulares  $\vec{\omega}_i(t = 0)$ . Esses valores são necessários para a integração das equações de Newton, equações 3.1. Quando as partículas se tratam de átomos, simulando por exemplo a transição de fase um material inicialmente no estado sólido. Estas tem suas coordenadas organizadas de acordo com uma rede cristalina, figura 4.1 e para suas velocidades iniciais pode-se considerá-las nulas ou realizar uma distribuição de maxwell-boltzmann em função de uma temperatura inicial (ALLEN; TILDESLEY, 1987). No caso dos materiais granulares, as partículas são

colocadas em suas condições de contorno, uma a uma, camada por camada, ou todas de uma vez. É necessário um tempo de relaxação para que as partículas possam se acomodar.

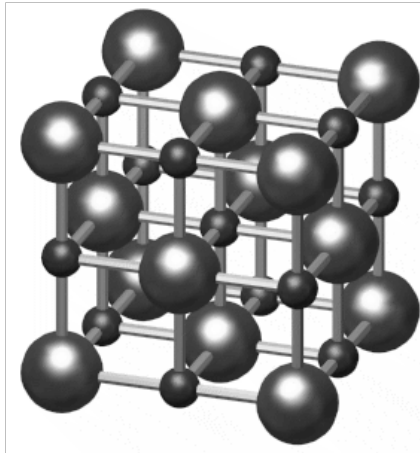


Figura 3.5: Estrutura Cristalina cúbica do NaCl. As esferas maiores representam o Cloro (Cl) e as menores o Sódio (Na). Fonte: Boschetti (2008)

### 3.6 Celas e Listas

A princípio, na simulação computacional uma partícula deve interagir com todas as demais partículas da caixa de simulação ou do recipiente onde estão contidas, Figura 3.6. Porém, fazer todo este cálculo requer um grande esforço computacional, o que tornaria a simulação muito longa ou praticamente impossível de se realizar.

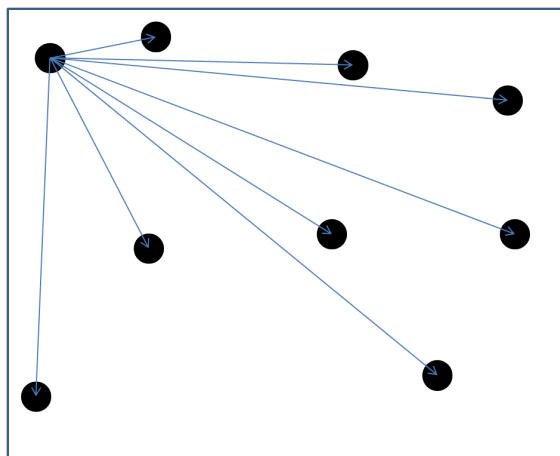


Figura 3.6: Interação de uma partícula com todas as demais da caixa.

Quando se trabalha com potenciais de interação, uma partícula terá sempre alcance máximo para interagir com outra de forma que se tenha um valor significativo para a

força. No caso de interações por contato as partículas terão mais chance de interagir com as partículas mais próximas do que com as mais distantes. Assim, não se faz necessário considerar todas as possíveis interações. Portanto numa simulação de DM, faz-se a utilização de “celas” e “listas”, onde o espaço da amostra é subdividido em celas quadradas, caso bidimensional, de tamanho  $l$ , Figura 3.7, onde este tamanho é suficiente para se calcular as consideráveis forças. Cada cela tem uma lista de números correspondentes as partículas que estão contidas. A interação será calculada entre as partículas da mesma cela e as partículas das celas vizinhas, cada cela tem 8 vizinhas. Tomando como exemplo a cela 6 da Figura 3.7, temos que as partículas 1, 2 e 3 desta cela podem interagir entre si e com as partículas das celas vizinha 1, 2, 3, 5, 7, 9, 10 e 11. Se forem consideradas as condições periódicas de contorno as celas que se encontram no fim da amostra como por exemplo a cela 8, além de interatuar com as celas 3, 4, 7, 11 e 12, vizinhas adjacentes deverá também atuar com as celas 1, 5 e 9, vizinhas virtuais.

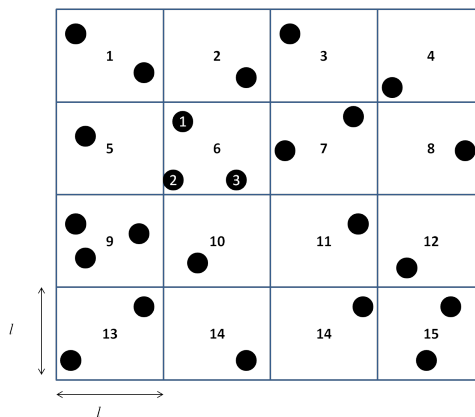


Figura 3.7: Espaço da amostra dividido em celas.

### 3.7 Interações entre partículas - Via Potencial de Interação

Depois que todas as condições iniciais forem definidas, o cálculo da força de interação entre as partículas, a cada passo de tempo, é de fundamental importância para que a simulação faça uma boa representação de um determinado modelo. Somente quando for conhecida a força total sobre uma determinada partícula num instante de tempo  $t$  é que



poderemos saber onde ela se encontrará e com que velocidade estará num instante  $t + \Delta t$ . Assim nota-se a importância de descrever estas forças.

Para partículas que interagem a certas distâncias, partículas carregadas eletricamente, é conveniente descrever a força através de um potencial de interação.

### 3.7.1 Força em função do Potencial

Se a cada configuração de um sistema de objetos, exercerem uma força uns sobre os outros então, associado a esta configuração está uma energia potencial  $V$  (HALLIDAY; RESNICK, 2009). Um exemplo prático pode facilitar o entendimento. Quando uma pessoa pula de *bungee-jump* de uma ponte, o sistema é formado pela Terra e a pessoa, existindo uma força de atração entre estes objetos, que é a força gravitacional. Assim, pode-se descrever o movimento do saltador e o aumento de sua energia cinética definindo uma energia potencial gravitacional  $V$ , que trata-se de uma energia associada ao estado de separação entre dois objetos que se atraem mutuamente através da força gravitacional.

Na DM, dependendo do modelo em estudo, as partículas podem se atrair ou se repelirem mutuamente. Isto implica que para cada configuração haverá uma energia potencial  $V$  associada. Objetivo é então a partir da energia potencial da configuração descrever a força da interação. Mas como relacionar força com energia? Para tanto é necessário recorrer ao trabalho  $W$  que a força exerce para deslocar uma partícula. Tomemos como exemplo uma bola atirada para cima. Durante sua subida a bola, tem uma variação positiva de sua energia potencial,  $\Delta V$ , enquanto a força gravitacional realiza sobre a mesma um trabalho negativo. Porém na descida os sinais se invertem, a variação de energia é negativa enquanto o trabalho da força gravitacional é positivo. Assim temos,

$$\Delta V = -W. \tag{3.5}$$

No caso do movimento unidimensional, o trabalho  $W$  realizado por uma força  $F(x)$  que age sobre uma partícula quando a mesma percorre uma distância  $\Delta x$  é  $F(x)\Delta x$ . Logo pode-se reescrever a Eq. 3.5 na forma

$$\Delta V = -F(x)\Delta x. \quad (3.6)$$

Isolando  $F(x)$  e tomando o limite em que  $\Delta x$  tende a zero, temos

$$F(x) = -\frac{dV}{dx}, \quad (3.7)$$

a restrição para esta força é que esta seja conservativa, ou seja, que o trabalho para deslocar a partícula entre dois pontos não dependa da trajetória. A equação acima pode ser generalizada a três dimensões e escrita na seguinte forma vetorial, (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2002)

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}), \quad (3.8)$$

onde  $\vec{r}$  é a coordenada da partícula. A energia potencial  $V$  é comumente chamado na DM, simplesmente de potencial de interação.

Um dos potenciais de interação mais utilizados na DM é o potencial de Lennard-Jones, cuja a aplicação mais conhecida é a que envolve o tratamento de moléculas diatômicas como oxigênio e hidrogênio (CHIQUITO; ALMEIDA, 1999). Este potencial leva em consideração uma forte repulsão a curtas distâncias devido ao princípio de exclusão de Pauli e uma atração a longa distâncias devido a presença de dipolos elétricos, esta interação é conhecida como força de Van der Waals (KITTEL, 1978). O potencial é escrito para dois átomos  $i$  e  $j$  como:

$$V(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (3.9)$$

sendo  $r_{ij}$  a distância entre os átomos,  $\varepsilon$  define a intensidade da interação e  $\sigma$  é a escala de comprimento da partícula (diâmetro).

Usando as eqs 3.8 e 3.9, tem-se a força que o átomo  $i$  exerce sobre o átomo  $j$  devido

a interação de Lennard-Jones,

$$\vec{F}_{ij} = \left( \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \right) \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] \vec{r}_{ij}. \quad (3.10)$$

Entre os grãos também podem aparecer interações eletrostáticas. Próximo do contato das partículas encontra-se forças de Van de Walls, qual se torna importante quando o diâmetro do grão é menor que cerca de  $80 \mu\text{m}$  (HERRMANN, 2002). Salvo este caso, a DM de grãos é muito bem representada apenas com interações por contato, técnica que é descrita na seção a seguir.

### 3.8 Interações por Contato

Neste trabalho os grãos são considerados partículas esféricas embebidas em um espaço bidimensional. Suas interações se dão somente através do contato mecânico. Duas partículas estão em contato mecânico se

$$\xi_{ij} \equiv R_i + R_j - |\vec{r}_i - \vec{r}_j| > 0 \quad , \quad (3.11)$$

isso é, se a soma de seus raios for maior do que a distância entre seus centros, como mostrado na figura 3.8. Aqui chamamos a quantia  $\xi_{ij}$  de compressão mútua entre as partículas, (POSCHEL; SCHWAGER, 2005).

A força de contato entre as partículas é descrita como:

$$\vec{F}_{ij} = \begin{cases} \vec{F}_{ij}^n + \vec{F}_{ij}^t & \xi_{ij} > 0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.12)$$

Para sistemas bidimensionais as componentes normal e tangencial podem ser escritas na forma

$$\vec{F}_{ij}^n = F_{ij}^n \hat{n}_{ij}, \quad \vec{F}_{ij}^t = F_{ij}^t \hat{t}_{ij}, \quad (3.13)$$

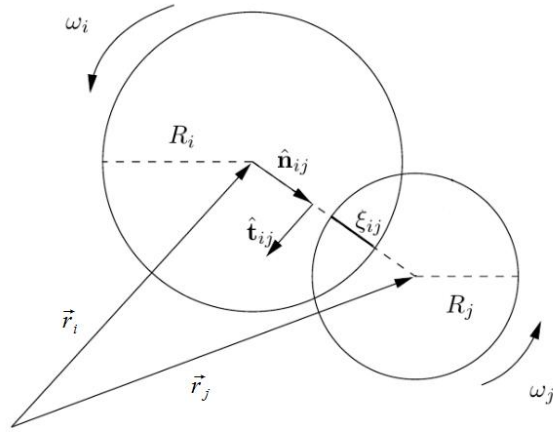


Figura 3.8: Contato entre duas partículas. Fonte: Soterroni (2007)

com os vetores unitários  $\hat{n}_{ij}$  e  $\hat{t}_{ij}$  sendo dados por

$$\hat{n}_{ij} = \frac{\vec{r}_j - \vec{r}_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \quad (3.14)$$

$$\hat{t}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{n}_{ij}. \quad (3.15)$$

Nas duas próximas subseções será descrito modelos aproximativos para as componentes normal e tangencial.

### 3.8.1 Componente Normal

A componente normal da força é responsável pelo movimento de translação das partículas. Esta componente é definida por duas propriedades, uma elástica e uma dissipativa, toma-se como exemplo uma bola atirada contra a parede esta, retorna devido a sua elasticidade mas sua velocidade após a colisão é sempre menor que a velocidade original devido a sua propriedade dissipativa.

A seguir serão apresentados os modelos que descrevem a força normal em função das características elástica e dissipativa.

## Modelo Linear Amortecido

Nesse modelo sua parcela elástica varia linearmente com a deformação, conforme a Lei de Hooke, e sua dissipação linearmente com a taxa de deformação. O modelo é descrito conforme a equação abaixo

$$F^n = Y\xi + \gamma^n \frac{d\xi}{dt}, \quad (3.16)$$

com  $Y$  e  $\xi$  sendo as constantes elástica e dissipativa, respectivamente.

Este modelo é muito utilizado em várias simulações de dinâmica molecular. Porém abre margem para discussão no coeficiente de restituição, que é definido como

$$\epsilon \equiv \frac{g'}{g} \quad (3.17)$$

onde  $g$  e  $g'$  são as velocidades relativas normal antes e após a colisão, respectivamente. Integrando a equação de Newton para a força dada pela equação 3.16, obtém-se um coeficiente de restituição dado por

$$\epsilon = \exp \left( -\frac{\pi\gamma^n}{2m_{eff}} \left/ \sqrt{\frac{Y}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma^n}{2m_{eff}}\right)^2} \right. \right), \quad (3.18)$$

com  $m_{eff}$  representando a massa efetiva das partículas dada por:

$$m_{eff} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} . \quad (3.19)$$

A discussão sobre este modelo esta no fato, de que a equação 3.18 não depende da velocidade de impacto o que contraria alguns estudos experimentais, como cita Brilliantov et al. (1996), em que o coeficiente de restituição se mostrou dependente da velocidade de impacto.

## Modelo de Esferas Viscoelásticas

Um dos modelos mais utilizados na literatura é o modelo generalizado de Heinrich Hertz, descrito abaixo:

$$F_{ij}^n = \frac{2Y\sqrt{R_{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left( \xi^{3/2} + A\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right) \quad , \quad (3.20)$$

onde a parte elástica é caracterizada pelo módulo de Young  $Y$ , que descreve a resistência do material contra a compressão, e pelo coeficiente de Poisson  $\nu$ , que quantifica a deformação na direção perpendicular a compressão (BRILLIANTOV; POSCHEL, 2004). Para a descrição da parte dissipativa é necessário  $Y$ ,  $\nu$  e  $A$  que é uma função da viscosidade do material.  $R^{eff}$  é o raio efetivo das partículas dado por:

$$R^{eff} = \frac{R_i R_j}{R_i + R_j} \quad . \quad (3.21)$$

Segundo Poschel e Schwager (2005) a equação 3.20 representa melhor os resultados experimentais do que a equação 3.16.

## Modelo de Walton e Braun

Neste modelo o cálculo da força leva em conta se as partículas estão se comprimindo ( $\frac{d\xi}{dt} > 0$ ) ou descomprimindo ( $\frac{d\xi}{dt} < 0$ ). O modelo é descrito como:

$$F^n = \begin{cases} Y_l \xi & \text{se } d\xi/dt \geq 0 \\ Y_u (\xi - \xi_0) & \text{se } d\xi/dt < 0. \end{cases} \quad (3.22)$$

Aqui  $Y_l$  e  $Y_u$  são as constantes da força de restauração quando as partículas estão se aproximando e se afastando, respectivamente.

## Ajuste da Força Normal

Todos os modelos abordados levam em consideração a velocidade relativa das partículas,

$g = \dot{\xi}$ . Quando as partículas estão se aproximando uma das outras temos,  $\dot{\xi} > 0$  e quando estão se afastando, tem-se  $\dot{\xi} < 0$ , ver figura 3.9. Assim durante algum momento da simulação quando as partículas estiverem se descomprimindo, poderá surgir uma força negativa, o que significa uma atração entre as partículas.

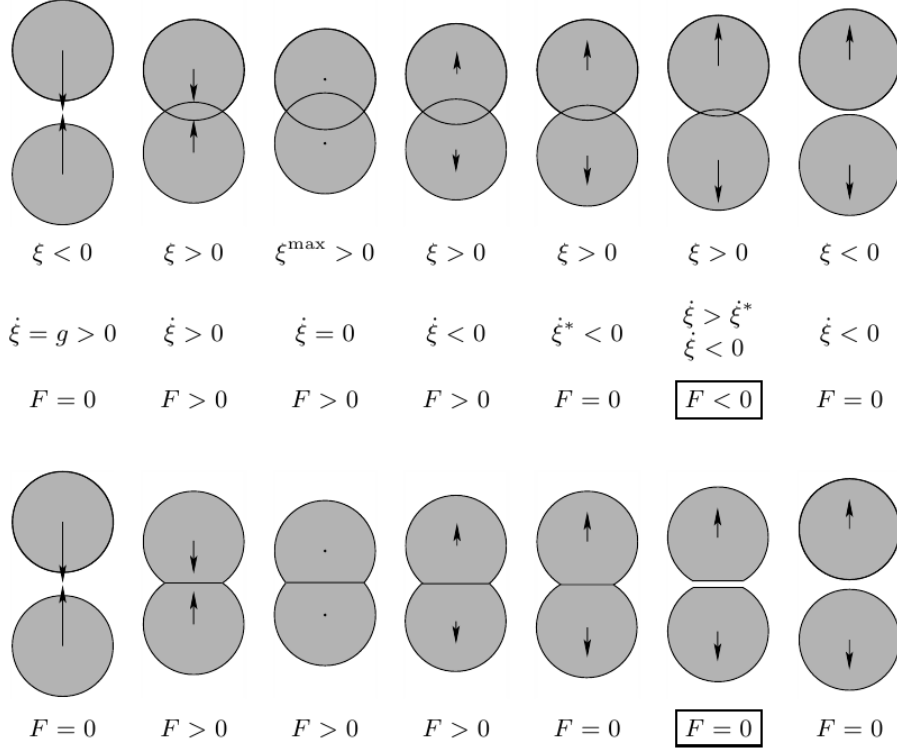


Figura 3.9: Esquema da colisão de partículas. Devido a velocidade relativa das partículas uma força atrativa poderá surgir (notação em caixa) em certo momento da simulação. Soluciona-se este problema atribuindo o valor nulo para a força neste instante. Fonte: Poschel e Schwager (2005)

Quando as partículas colidem a força que atua é uma força de repulsão, que tende a separa-lás, assim esta força atrativa não possui significado físico algum. Logo faz-se necessário a utilização da seguinte correção:

$$F_{ij}^n = \{0, F^n\} \quad . \quad (3.23)$$

### 3.8.2 Componente Tangencial

Devido materiais granulares não serem esferas perfeitas mas, sim apresentarem superfícies com texturas complexas. Em colisões oblíquas apresentam além da componente

normal  $F^n$  apresentam também a componente tangencial  $F^t$ . A força tangencial  $F_{ij}^t$  gera um torque,  $\vec{M}_{ij}$ , entre as partículas dado por  $\vec{M}_{ij} = R_i \hat{n}_{ij} \times \vec{F}_{ij}^t \hat{t}_{ij}$ , produzindo a aceleração angular  $\ddot{\theta} = \vec{M}_{ij}/J$  que, determina o movimento rotacional das partículas. Esta força depende das propriedades de superfície dos materiais e é de fundamental importância para que uma simulação represente bem um real sistema granular.

A seguir serão apresentados alguns modelos utilizados para descrever a força tangencial.

### Modelo de Haff e Werner

Neste modelo a lei da força é dada por:

$$F_{ij}^t = -\text{sign}(v_{rel}^t) \cdot \min(\gamma^t |\vec{v}_{rel}^t|, \mu F_{ij}^n), \quad (3.24)$$

sendo  $\gamma^t$  a constante de amortecimento tangencial,  $\mu$  o coeficiente de atrito entre as partículas e  $\vec{v}_{rel}^t$ , a velocidade tangencial relativa da partícula  $j$  em relação à partícula  $i$ , que é definida como

$$v_{rel}^t = (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \cdot \hat{t}_{ij} + R_i \omega_i + R_j \omega_j \quad . \quad (3.25)$$

A equação 3.24 nos diz que a força terá sentido inverso da velocidade e que o valor máximo para a força será  $F^t = \mu F^n$ . Como esta força é dependente da velocidade tangencial o modelo não é apropriado para sistema de pilhas de grãos, onde as partículas tem uma velocidade relativa muito baixa. Outra dificuldade é o parâmetro  $\gamma^t$  que é determinado pela textura da superfície do grão e não pela característica do tipo de material. Em geral, esse coeficiente é ajustado à posteriori, comparando os resultados da simulação com experimentos.

### Modelo de Cundall e Strack

Este modelo compromete relativo pequeno esforço computacional porém, tem boa concordância com resultados experimentais para sistemas com comportamento estático. O atrito estático é descrito por uma mola atuando tangencialmente ao plano de contato



das partículas.

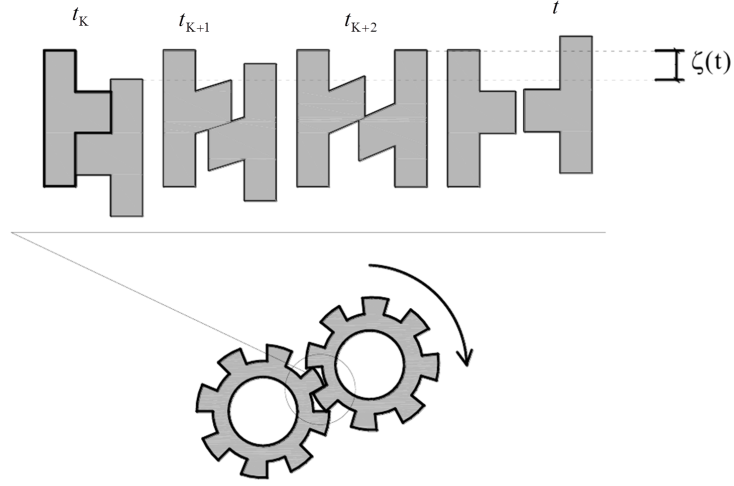


Figura 3.10: Representação do Modelo de Cundall e Strack. Partículas interagem como se fossem engrenagens com dentes flexíveis.  $t_K$  mede o tempo quando as partículas começam a se tocar e  $t$  é o instante da separação das partículas. Fonte: FERREIRA (2013) modificado.

O modelo funciona como se as partículas fossem rodas de engrenagens com dentes flexíveis, ver figura 3.10. A mola começa atuar num instante  $t_K$  quando as partículas começam a se tocar e termina num instante  $t$  quando as partículas estão separadas uma da outra. A elongação é dada por:

$$\zeta(t) = \int_{t_k}^t v_{rel}^t(t') dt' \quad (3.26)$$

e determina a lei da força tangencial como

$$F_{ij}^t = -sign(v_{rel}^t) \cdot \min(|\kappa^t \zeta|, \mu F_{ij}^n). \quad (3.27)$$

Nota-se que o termo  $\gamma^t |\vec{v}_{rel}^t|$  da equação 3.24 foi trocado pela constante  $\kappa^t$  (determinada por comparação de simulação com resultados experimentais) multiplicada pela elongação  $\zeta$ .

## 3.9 Modelo de Força utilizado

Neste trabalho, foram consideradas apenas as interações devidas ao contato mecânico dos grãos, pois interações eletrostáticas podem ser desconsideradas para os tamanhos utilizados para os grãos, tabela 5.1. Para a componente normal da força entre essas partículas foi utilizado o Modelo de esferas, equação 3.20. Já a componente tangencial da interação foi dada pelo Modelo de Haff e Werner, equação 3.24

## 3.10 Equações de Movimento

A integração das equações de movimento é realizada utilizando o método de diferenças finitas (SCHERER, 2005), onde a variável integrada, no caso o tempo é dividido em diversos intervalos iguais a  $\Delta t$ . O método também utiliza a expansão de Taylor da posição e de suas derivadas temporais em torno de um instante inicial  $t$ ,

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \dot{\vec{r}}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \ddot{\vec{r}}(t) + \frac{1}{6} \Delta t^3 \dddot{\vec{r}} + \dots, \quad (3.28)$$

$$\dot{\vec{r}}(t + \Delta t) = \dot{\vec{r}}(t) + \Delta t \ddot{\vec{r}}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \dddot{\vec{r}} + \dots, \quad (3.29)$$

$$\ddot{\vec{r}}(t + \Delta t) = \ddot{\vec{r}}(t) + \Delta t \dddot{\vec{r}}(t) + \dots, \quad (3.30)$$

Os algoritmos usados para integração das equações de movimento utilizam as equações 3.28, 3.29 e 3.30. A seguir descreveremos dois dos algoritmos mais utilizados, que são o de Verlet e o de Leap-Frog que foi o utilizado neste trabalho.

### 3.10.1 Algoritmo de Verlet

Neste algoritmo a posição  $\vec{r}(t + \Delta t)$  é dada em função da posição  $\vec{r}(t - \Delta t)$ , utilizando a expansão de Taylor em torno de  $\vec{r}(t - \Delta t)$ ,

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \Delta t \dot{\vec{r}}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \ddot{\vec{r}}(t) - \frac{1}{6} \Delta t^3 \dddot{\vec{r}} + \dots \quad (3.31)$$

Somando as equações 3.28 e 3.31 e desprezando termos de quarta ordem, obtemos a posição da partícula num instante  $t + \Delta t$  dada por:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \vec{a}(t), \quad (3.32)$$

onde,  $\vec{a}(t) = \ddot{\vec{r}}(t)$ . Subtraindo a equação 3.31 da equação 3.28, eliminado os termos de terceira ordem e lembrando que  $\vec{v}(t) = \dot{\vec{r}}(t)$  encontra-se a expressão para a velocidade no instante  $t$  como sendo:

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2}. \quad (3.33)$$

Segundo Araujo (2006) há dois inconvenientes com o algoritmo. O primeiro é que apesar da equação 3.32 desprezar os termos de quarta ordem, o que já lhe dá uma boa precisão para o cálculo da posição, a equação para a velocidade 3.33 é truncada em termos de segunda ordem o que não é muito preciso. O outro inconveniente está no fato que a velocidade  $\vec{v}(t)$  só pode ser calculada depois de se ter  $\vec{r}(t + \Delta t)$ , o que dificulta a extração de dados como por exemplo, a energia cinética.

### 3.10.2 Algoritmo de Leap-Frog

Este algoritmo consiste em atualizar as velocidades em tempos intermediários àqueles que são atualizadas as posições, ou seja,

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t + \frac{1}{2} \Delta t), \quad (3.34)$$

$$\vec{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \vec{v}(t - \frac{1}{2}\Delta t) + \Delta t \vec{a}(t). \quad (3.35)$$

As velocidades são primeiramente calculadas a partir da aceleração no tempo  $t$  e das velocidades do tempo intermediário anterior. A posição “pula” para ser calculada no instante  $t + \Delta t$  a partir de  $\vec{r}(t)$  e da velocidade em  $t + 1/2\Delta t$ .

### 3.11 Esboço de um Programa de DM

A simulação por Dinâmica Molecular é realizada de acordo com o seguinte algoritmo da figura 3.11

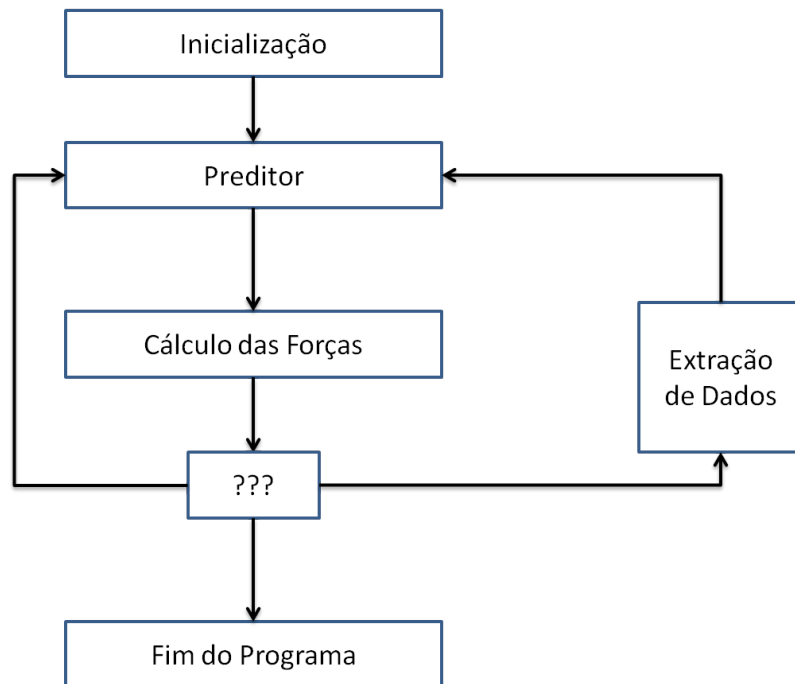


Figura 3.11: Esboço do Algoritmo de Dinâmica Molecular.

1. **Inicilização:** As coordenadas das partículas ( $\vec{r}_i, \varphi_i$ ) e suas derivadas temporais são lidas no arquivo de inicialização. O arquivo de inicialização especifica ainda o tipo de cada partícula, isto é., se trata-se de uma partícula do material granular ou de partículas da parede (contorno).
2. **Preditor:** Computação das coordenadas e derivadas temporais das partículas ao tempo como uma expansão de Taylor dos valores ao presente tempo  $t + \Delta t$ .

### 3. Cálculo das Forças:

a) Seleção da interação por pares. Esta etapa afeta a eficiência global da simulação significativamente.

b) Cálculo das forças de interação por pares entre as partículas e entre as partículas da parede, com base nas coordenadas e velocidades previstas.

4. **Extração de Dados:** Os dados desejados são gravados ou em intervalos de tempo predefinidos ou após a ocorrência de certos eventos. Existem dois procedimentos fundamentalmente diferentes: ou os valores desejados são calculados pelo programa de Dinâmica Molecular propriamente dito, ou as coordenadas e velocidades (e possivelmente mais valores) de todas as partículas são gravadas em um arquivo em certo intervalo de tempo e os dados serão processados posteriormente.

5. **Fim do Programa:** O programa termina a um tempo predefinido  $t^{fim}$  ou após a ocorrência de certo evento. Caso contrário, a simulação é continuado ao passo 2 e assim por diante.

# Capítulo 4

## Metodologia

No presente capítulo descreve-se os procedimentos para demonstração do “efeito castanha do Brasil” tanto para a experiência real, desenvolvida em laboratório, como a experiência realizada por meio de simulação computacional. Os resultados para ambas experiências serão mostrados no capítulo seguinte.

### 4.1 Experiência Real

Nesta seção apresentamos os procedimentos para realização de uma experiência real em laboratório com o intuito de demonstrar o “efeito castanha do Brasil”. Para consecução dessa experiência utilizou-se um aparato constituído por uma câmara coletora Fangkmer, apresentada na Figura 4.1, e um reostato para permitir o controle da frequência do movimento harmônico que será imposto à câmara. Essa câmara é normalmente utilizada nos laboratórios de ensino de Física para demonstrar a lei de Maxwell- Boltzmann para a distribuição das velocidades no estudo da teoria cinética dos gases. A câmara, como paredes de vidro formando um paralelepípedo, com altura de 180 mm, largura de 60 mm e espessura de 180 mm, está acoplada a um motor de 12 VDC /20 W e 50 Hz, que tem a finalidade de fazer vibrar a base da câmara em um movimento harmônico vertical, com frequência controlada pelo reostato.

Para a realização do experimento “efeito castanha do Brasil” a câmara é preenchida até aproximadamente um terço de sua altura com esferinhas de vidro, de diâmetro de

aproximadamente 2 mm, inicialmente em repouso sobre uma partícula com diâmetro da ordem de 100 mm, representando a “castanha do Brasil”, pintada na cor vermelha para facilitar a sua visualização, em contraste com o corpo do material granular constituído pelas esferinhas de vidro. O experimento inicia-se ligando-se o motor que faz o fundo da câmara vibrar com uma frequência controlada. A partir daí observa-se o comportamento do movimento da partícula vermelha inserida no meio granular formado pelas esferinhas de vidro.

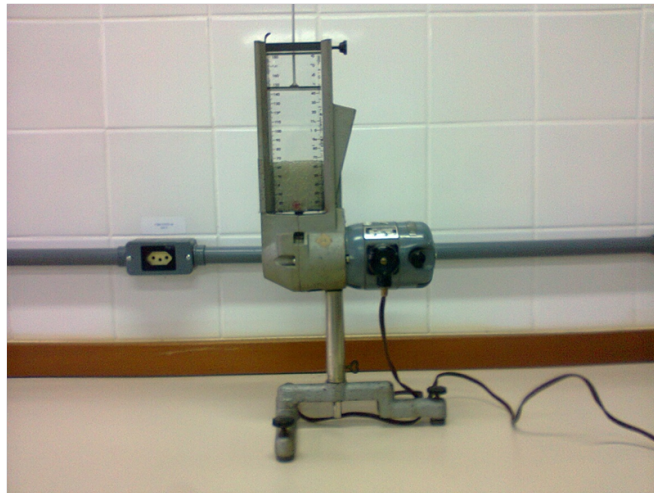


Figura 4.1: Aparato experimental utilizado para demonstração do BNE.

## 4.2 Simulação por Dinâmica Molecular

No processo de simulação do efeito “castanha do Brasil” pelo método da Dinâmica Molecular, descrito no Capítulo 3, a câmara onde são acondicionadas as partículas é representada por um cilindro bidimensional, como mostrado na Figura 4.2(a), cuja base e paredes são constituídas por esferas de diâmetros iguais. Utiliza-se esferas para que se possa simular as forças de interação entre as partículas do material granular e a base e as paredes do recipiente com o mesmo tipo de forças usados para simular a interação partícula-partícula no meio granular. Para constituir a amostra de material granular utiliza-se um grupo de partículas com distribuição granulométrica predefinida, conforme descrito na subseção 4.2.1. Esse grupo de partículas é suspenso até a uma determinada altura, com cada partícula ocupando o vértice de uma rede retangular (em cor vermelha), cujo parâmetro de rede é igual ao diâmetro máximo das partículas do meio granular,

ficando em repouso sobre a base do cilindro uma partícula grande, representando a “castanha do Brasil” (em cor verde), como mostrado na Figura 4.2(b). Deixa-se as partículas do meio granular caírem sob efeito da gravidade até atingirem o estado de repouso, ficando o sistema pronto para iniciar o processo de demonstração em experiência real do “efeito castanha do Brasil”, mostrado na Figura 4.2(c). Para isso acopla-se à base do cilindro uma mola com eixo na direção vertical, que imprimirá ao cilindro um movimento harmônico simples, com frequência e amplitude controladas, conforme mostra a Figura 4.2(d) (cor amarela). Nas seções seguintes apresenta-se as principais características da simulação computacional por meio do método da Dinâmica Molecular.

### 4.2.1 Distribuição Granulométrica

Na natureza as partículas que constituem os materiais granulares, como por exemplo a areia, possuem diâmetros diferentes, obedecendo uma certa curva de distribuição granulométrica. Nesse sentido, no presente trabalho a simulação do meio granular é obtido definindo uma determinada granulometria, utilizando-se a distribuição Beta Voivret et al. (2007) conforme as equações a seguir.

$$\beta = \frac{1}{B(a, b)} \int_0^x t^{a-1}(1-t)^{b-1} dt \quad , \quad (4.1)$$

onde  $a > 0$  e  $b > 0$  são parâmetros da distribuição e

$$B(a, b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \quad , \quad (4.2)$$

onde  $\Gamma$  é a função Gamma (PRESS et al., 2007). A distribuição  $\beta$  é definida e normalizada dentro do intervalo,  $[0, 1]$ , de modo que  $\beta(0) = 0$  e  $\beta(1) = 1$ .

A distribuição de tamanhos dos grãos é controlada através dos valores de  $a$  e de  $b$ . Na figura 4.3 pode ser visualizada como fica a distribuição para diferentes combinações dos valores de  $a$  e  $b$ . Optou-se por realizar simulações com a combinação  $a = 1$  e  $b = 1$  que corresponde a uma distribuição uniforme.



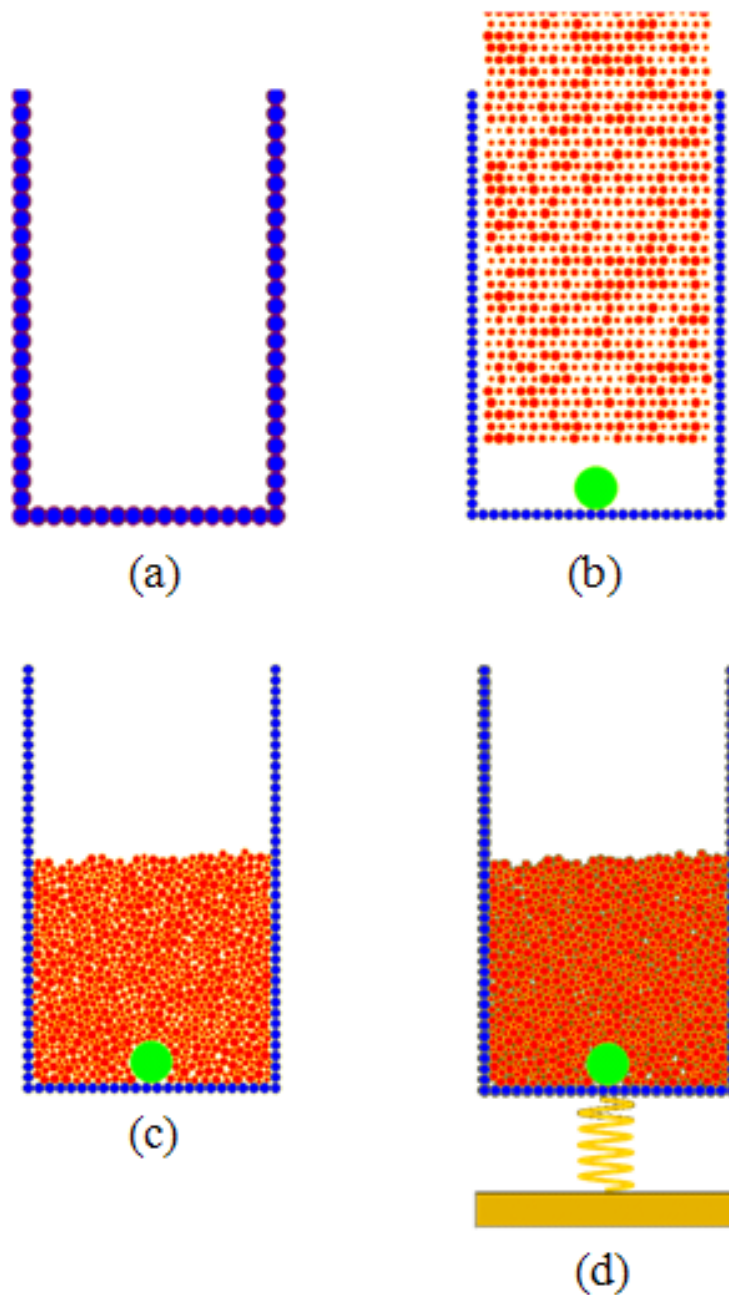


Figura 4.2: Sequência de preparação do cilindro (cor azul), do material granular (cor vermelha), da “castanha do Brasil” (cor verde) e do motor representado por uma mola acoplada à base do cilindro (cor amarela).

## 4.2.2 Condições iniciais

No início da modelagem as partículas laranjas, organizadas em filas e colunas, são abandonadas todas de uma vez a partir de uma certa altura que pode ser controlada. Enquanto as partículas laranjas vão caindo, a verde está fixa no centro da base do cilindro. Esta permanece nesta posição por um tempo necessário para que as partículas do material

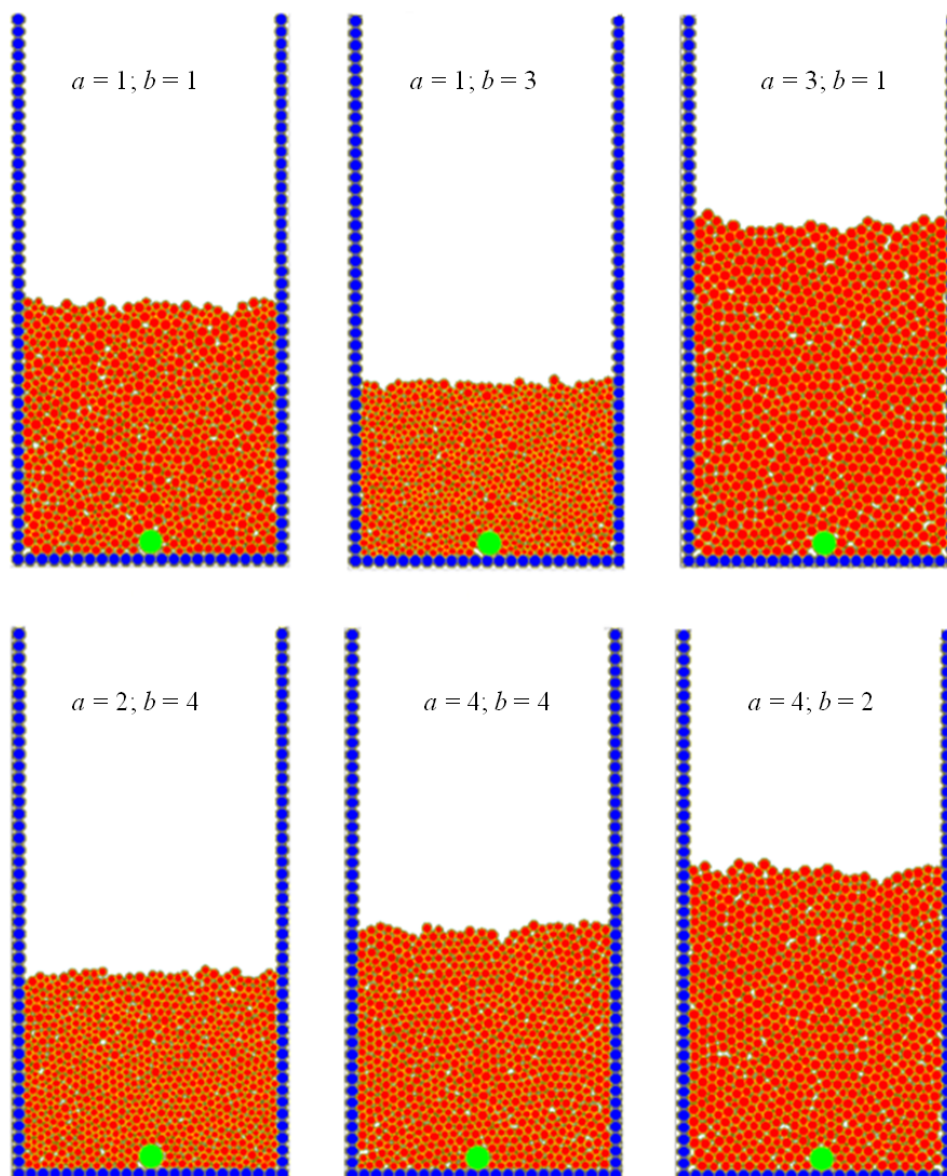


Figura 4.3: Distribuição Granulométrica. Diferentes distribuições de tamanhos do material granular para, diferentes combinações de  $a$  e  $b$ . Vale ressaltar que a quantidade de partículas é a mesma em cada caso.

granular possam se acomodar no recipiente (um tempo de 0,5 s foi suficiente para isso).

Tudo isso pode ser melhor compreendido através da figura 4.4. Depois de passado o tempo de acomodação para as partículas o recipiente entra em oscilação vertical e a partícula verde pode se mover, interagindo com as demais, podendo ser observado a segregação, onde o resultado será apresentado no próximo capítulo.

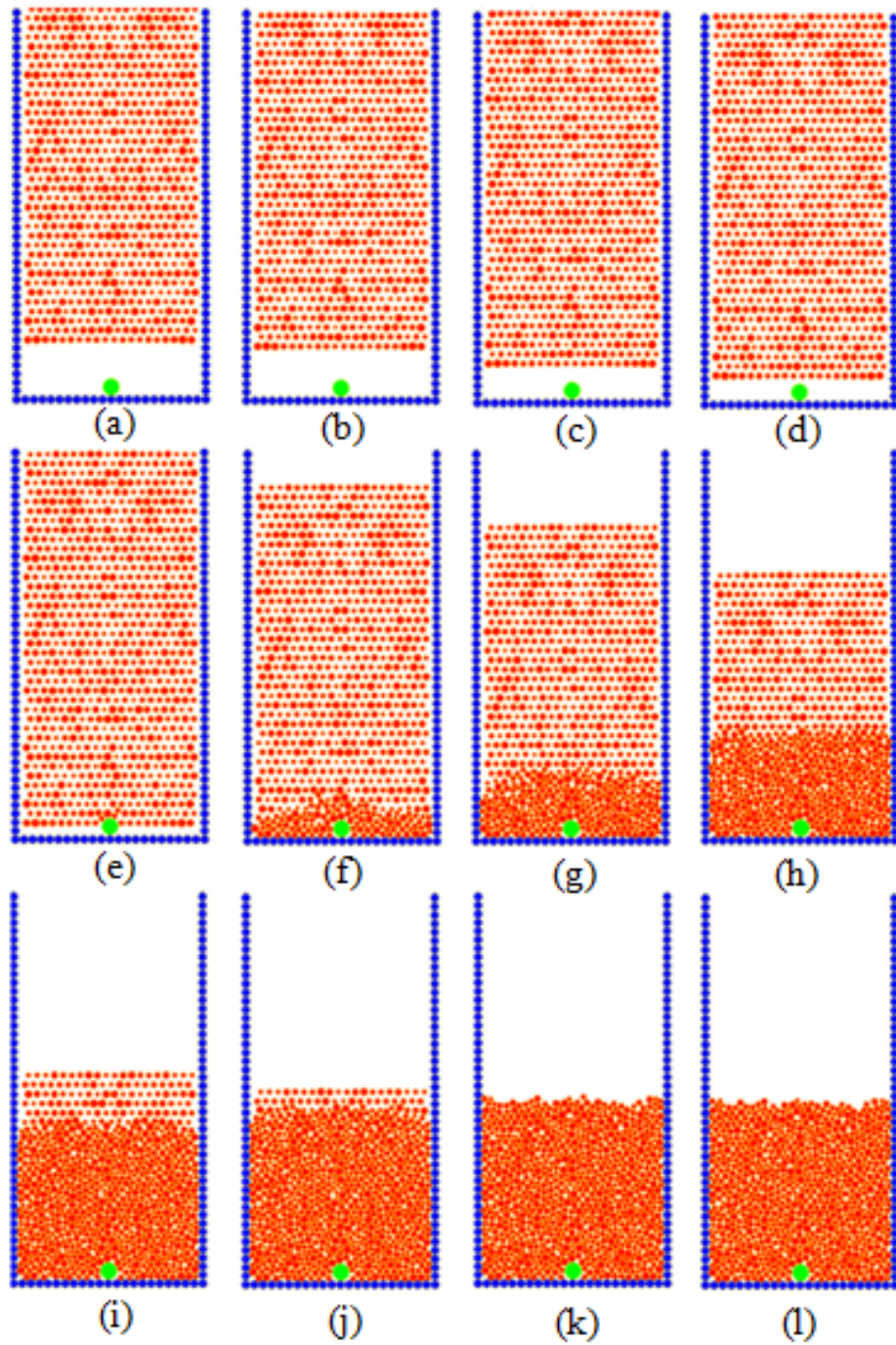


Figura 4.4: Preenchimento do recipiente. As partículas laranjas abandonadas de uma certa altura, enquanto a partícula verde fica fixa no centro da base do cilindro. Sequências de imagens, mostram a evolução deste preenchimento para os instantes: (a)  $t = 0,02$  s; (b)  $t = 0,05$  s; (c)  $t = 0,09$  s; (d)  $t = 0,11$  s; (e)  $t = 0,13$  s; (f)  $t = 0,17$  s; (g)  $t = 0,21$  s; (h)  $t = 0,25$  s; (i)  $t = 0,29$  s; (j)  $t = 0,30$  s; (k)  $t = 0,41$  s; (l)  $t = 0,50$  s.

### 4.2.3 Fluxo de convecção

Para analisar o fluxo de convecção, dividiu-se o recipiente em quadrículas de mesmo

tamanho, semelhante a técnica de “Celas e Listas” vista na seção 3.6. Em cada cela é verificado os vetores velocidades,  $\vec{v}$ , de todas as partículas que a adentraram num estabelecido intervalo de tempo. Logo é calculado o vetor velocidade resultante neste intervalo. Cada quadricula será representada por seu vetor resultante, colocado em seu centro. A figura 4.5 exemplifica esta técnica para uma cela.

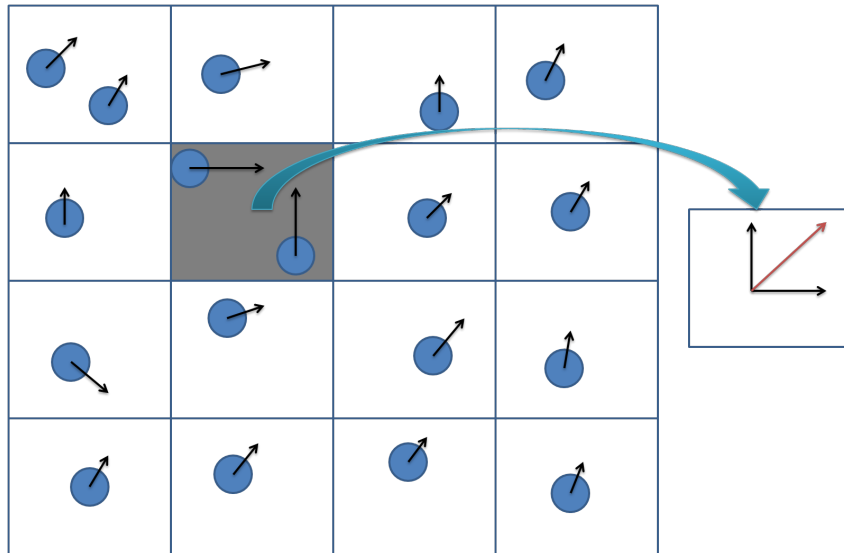


Figura 4.5: Método para o cálculo do fluxo. Quadricula destacada é representada por um vetor resultante das velocidades das partículas que entraram na mesma.

# Capítulo 5

## Resultados e Análise

Neste capítulo são apresentadas imagens do experimento laboratorial e das simulações, onde se observar a segregação da partícula maior. É analisado a trajetória e a influência da mudança do raio e da densidade dessa partícula. Também se analisa o fluxo de convecção e sua inversão, a partir da inclinação das paredes do recipiente cilíndrico.

### 5.1 Resultados da Experiência Real

Apresenta-se na Figura 5.2 uma sequência de instantâneos da experiência realizada em laboratório para o “efeito castanha do Brasil”. Nesse experimento adiciona-se partículas esféricas de polietileno (cor branca) sobre uma partícula de diâmetro maior (cor verde) que está inicialmente em repouso sobre a base de uma câmara coletora Fangkmmmer, como mostrado na Figura 4-1 do capítulo anterior. A base dessa câmara está acoplada a um motor elétrico que transmite à mesma um movimento vibratório vertical, cuja frequência é controlada por um reostato. Neste trabalho observamos apenas a resposta visual representada pela partícula verde quando a base da câmara passa a vibrar verticalmente, como descrito a seguir.

Após o início do movimento vibratório, a partícula verde é submetida a um movimento ascendente em meio às partículas menores, representado na Figura 5.2 pelos instantâneos  $t_1$  a  $t_3$ . Quando a partícula verde alcança o topo do material granular (instantâneo  $t_4$ ), desloca-se para a esquerda do recipiente e passa a ter um movimento descendente pela

lateral da câmara (instantâneo  $t_5$ ). No instantâneo  $t_6$ , nota-se que a partícula começa a entrar em ascendência novamente, percorrendo assim um ciclo completo: sobe pelo meio do material e desce pela lateral. Assim, a partícula verde apresenta um movimento cíclico em torno de um ponto no quadrante superior-esquerdo do recipiente. Dependendo da posição inicial da partícula verde, observa-se também o mesmo comportamento cíclico em torno de um ponto simétrico àquele, no quadrante superior-direito do recipiente (não mostrado na 5.2). De fato, a partícula verde fica condicionada a girar indefinidamente em torno de dois ponto simétricos em relação ao eixo vertical do recipiente.

Na próxima seção serão apresentados os resultados de uma simulação da experiência acima citada por meio do método da Dinâmica Molecular, oportunidade em que analisaremos a razões do mencionado comportamento.

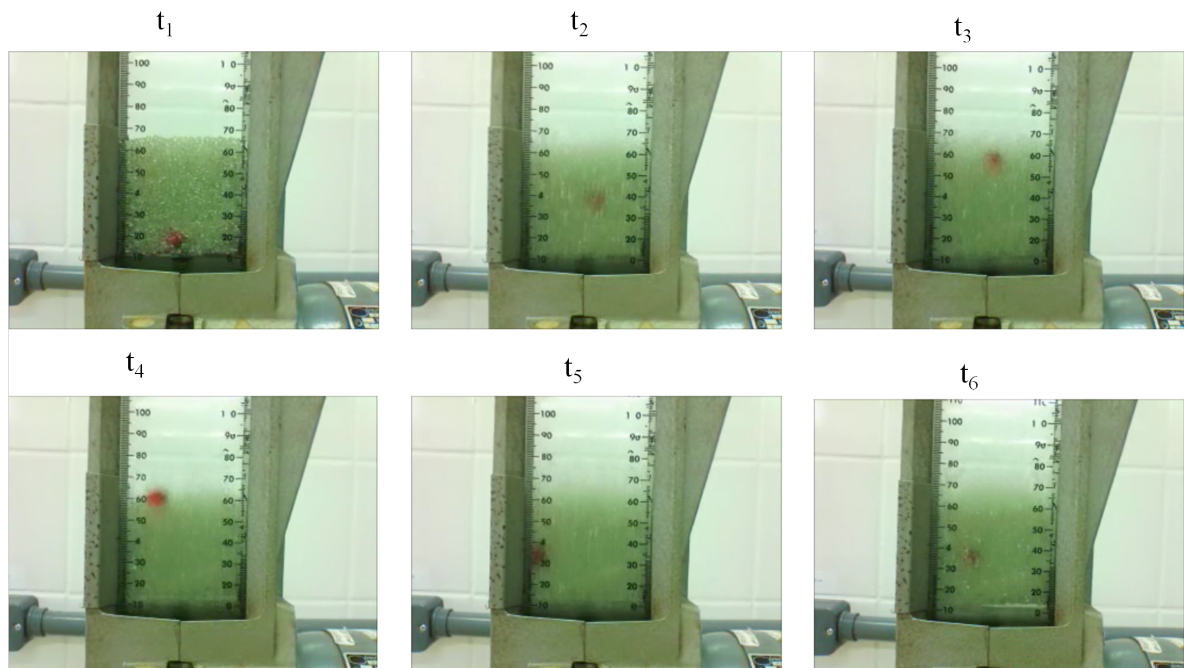


Figura 5.1: Sequência de imagens do experimento em execução. Observa-se tanto o BNE quanto o RBNE.

## 5.2 Resultados das Simulações

Nesta seção apresenta-se os resultados de uma simulação da experiência laboratorial descrita na seção anterior. Nos resultados apresentados a seguir utilizou-se um conjunto de 924 partículas pequenas, com uma faixa granulométrica uniforme com raios variando

Parâmetros	Part. Pequenas	Part. Grande
Número (N)	924	1
Raio mínimo	$r_{min} = 4mm$	$R_{min} = 8mm$
Raio máximo	$r_{max} = 8mm$	$R_{max} = 16mm$
densidade	$2800kg/m^3$	variável
frequência(caixa)	25 Hz	
Amplitude (caixa)	$1,5 \cdot r_{max}$	

Tabela 5.1: Parâmetros utilizados

de  $r_{min}$  à  $r_{max}$ . Os parâmetros utilizados na simulação estão apresentados na tabela 5.1.

Inicialmente simula-se a preparação da amostra a ser estudada como segue. Coloca-se a partícula que representa a “castanha do Brasil” (partícula com diâmetro grande) no centro da base do recipiente e sobre ela deixa-se cair as partículas pequenas, cuja distribuição de diâmetro é previamente estabelecida. Para isso, suspende-se as partículas menores a uma determinada altura e, no tempo  $t = 0$ , deixa-se as mesmas caírem por ação da gravidade. À medida em que elas vão caindo e colidindo com a base e a parede do cilindro, ou entre elas, as partículas interagem entre si e com as partículas que formam o recipiente por meio das forças de contato de H. Hertz e buscam se acomodar na configuração de menor energia. Deixa-se o processo evoluir por 5s, tempo suficiente para que todas as partículas estejam praticamente em repouso.

Após estabelecidas as condições iniciais (Figura 4.4), imprime-se ao recipiente um movimento harmônico simples na direção vertical, com frequência definida, a partir do instante  $t = 0,5s$ . A Figura 5.2 mostra alguns instantâneos do movimento oscilatório do recipiente contendo as partículas. Nessa sequência temporal de  $t = 0,5s$  a  $t = 12,5s$  a partícula grande(cor verde) apresenta um movimento ascendente até chegar ao topo do corpo das partículas menores, descendo em seguida pela lateral do recipiente, continuando o seu movimento seguindo uma trajetória orbital em torno de um ponto situado no quadrante direito superior. Esse movimento orbital permanece enquanto o recipiente estiver sujeito ao movimento harmônico vertical.

Para melhor visualizar esse comportamento cíclico do movimento da partícula grande, apresenta-se a seguir algumas figuras representando a sua trajetória e a sua evolução temporal. A Figura 5.3(a) mostra a trajetória dessa partícula, representada pelas suas coordenadas, tomando-se o eixo  $X$  das abcissas ao longo do diâmetro da base do recipiente e o eixo  $Y$  das ordenadas a vertical ao longo da parede esquerda do recipiente. Observa-

se que a altura da partícula ( $Y$ ), em unidades de  $r_{max}$  cresce com a distância ( $X$ ), em unidades de  $r_{max}$ , até alcançar o topo, descendo em seguida e entrando em um movimento cíclico em torno de um ponto à direita superior do recipiente. Pode-se dizer que enquanto o recipiente está sujeito ao movimento harmônico vertical, a partícula grande fica presa a um atrator localizado naquela região. Para corroborar com essa análise, apresenta-se na Figura 5.3(b) a evolução da ordenada  $Y$  da partícula grande em função do tempo  $t$ , onde se observa um movimento oscilatório na direção vertical à medida que o tempo evolui. O comportamento mencionado na presente simulação está em concordância qualitativa com aquele visto na experiência laboratorial, apresentado na seção anterior.

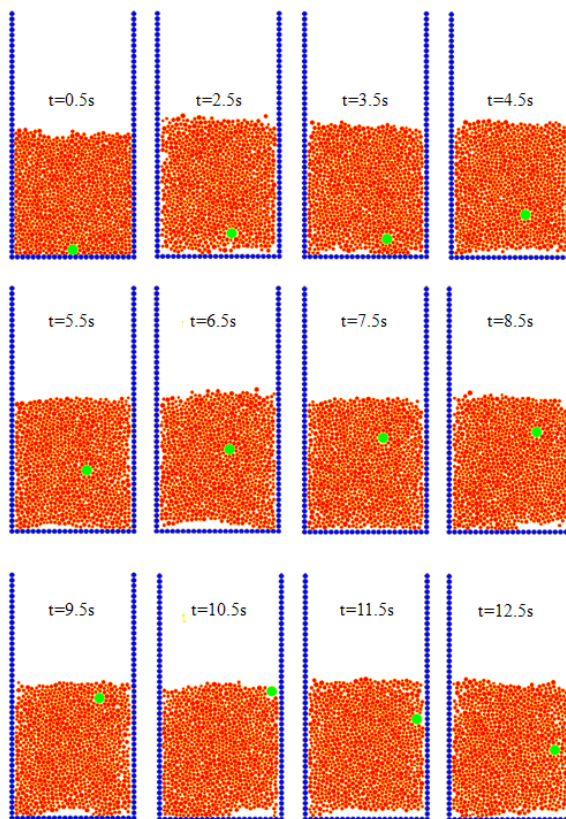


Figura 5.2: Sequência de imagens da simulação.

Para melhor explorar a potencialidade do software em linguagem Fortran desenvolvido para a presente simulação, foram realizadas aplicações com diferentes densidades ( $D$ ) e raios ( $R$ ) da partícula grande, com o que se pode analisar a influência desses parâmetros no movimento vertical dessa partícula. Na Figura 5.4 apresenta-se a altura da partícula grande ( $Y$ ) em unidade de  $r_{max}$  em função do tempo, considerando-se  $R = 2r_{max}$  da maior partícula da distribuição e diferentes densidades da partícula grande  $D$  em função da densidade  $d$  da partícula do granulado. Na citada figura mostra-se os resultados obtidos



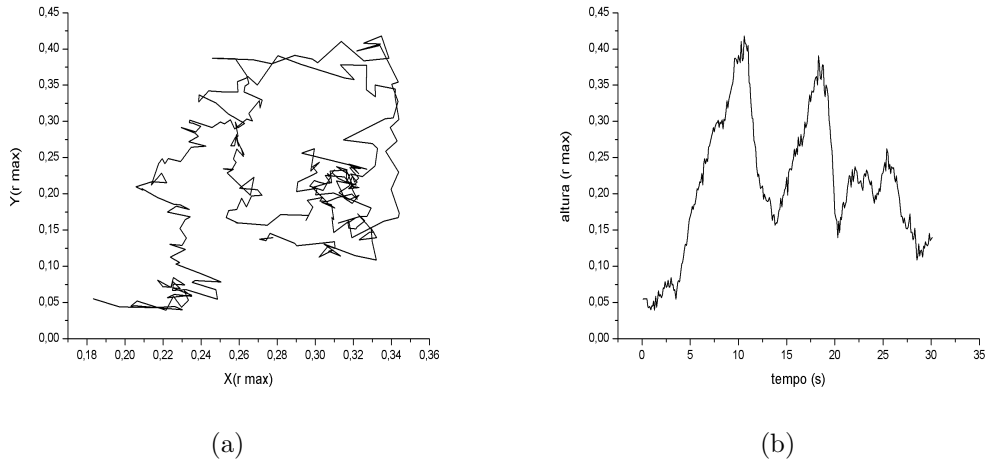


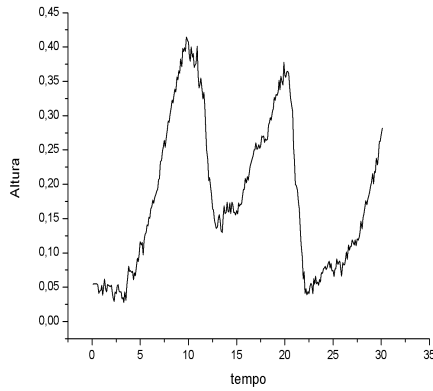
Figura 5.3: Trajetória da partícula maior. Em (a) mostra-se o seu caminho percorrido e em (b) a variação de sua altura ao longo do tempo.

para quatro razões de densidades:  $D = 0,5d$ ,  $D = 1,0d$ ,  $D = 1,5d$  e  $D = 2,0d$ . Em (a) a partícula é mais leve, por isso ela tem facilidade de realizar o movimento de subida e descida, repetidamente no cilindro. A partir daí as partículas são cada vez mais pesadas, depois que atingem o topo do material granular, oscilam num movimento de subida e descida de amplitudes cada vez menores.

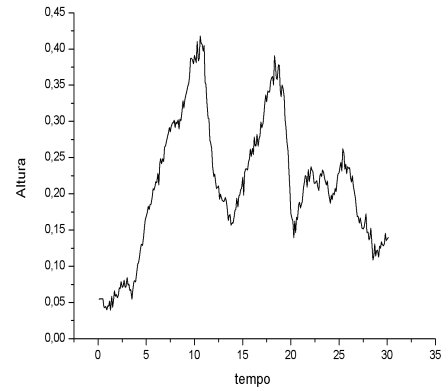
Na figura 5.5 apresenta-se a variação de  $Y$  da partícula grande em função do tempo  $t$ , fixando-se densidade da partícula grande em  $D = 2,0d$  e dois valores para o seu raio:  $R = 1,0r_{max}$ , figura 5.5 (a),  $R = 2,0r_{max}$  5.5 (b). O aumento do raio apresentou o mesmo efeito que o aumento da densidade.

Visando melhor compreender fisicamente o comportamento do “efeito castanha do Brasil” analisou-se o campo vetorial da velocidade das partículas que formam o material granular, determinado conforme descrito na seção 4.2.3 do capítulo anterior. Apresenta-se na Figura 5.6 o campo vetorial da velocidade das partículas considerando o caso do cilindro reto, isto é, com sua parede formando um ângulo de  $90^\circ$  com a sua base, e os casos em que a parede do cilindro forma com a sua base um ângulo menor que  $90^\circ$ . Na citada figura mostra-se os resultados para os ângulos de inclinação de  $90^\circ$ ,  $85^\circ$ ,  $82,5^\circ$  e  $80^\circ$ .

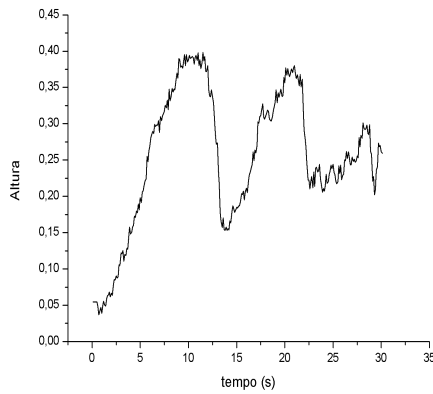
Observa-se que para o ângulo de inclinação de  $90^\circ$  existe um fluxo ascendente na região central do cilindro e um fluxo descendente na região próxima à sua parede. Da competição desses dois fluxos em sentidos opostos nascem dois vórtices distribuídos simetricamente em relação ao eixo seu longitudinal. Assim, à medida em que o cilindro é submetido a



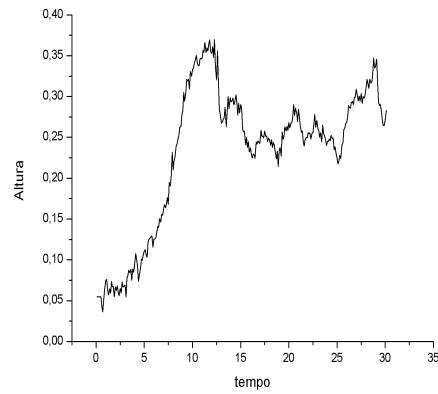
(a)  $D = 0,5d$



(b)  $D = 1,0d$



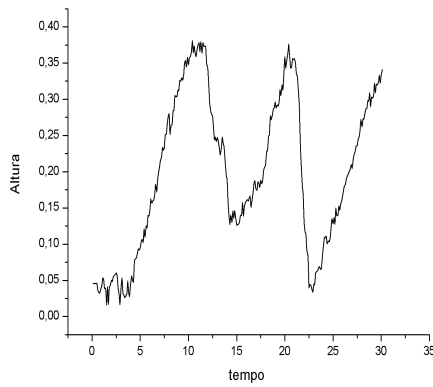
(c)  $D = 1,5d$



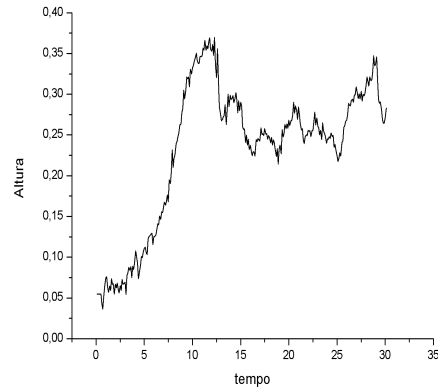
(d)  $D = 2,0d$

Figura 5.4: Comparação do movimento vertical da partícula grande. Manteve-se o raio em  $R = 2r_{max}$  e variou-se a densidade conforme as razões em cada figura, observa-se a limitação, picos menores, para a locomoção de partículas mais densas.

um movimento harmônico na direção vertical, as partículas do material granular sobem pela sua região central e descem pelas suas laterais. Dessa forma pode-se entender que o movimento ascendente da partícula grande no “efeito castanha do Brasil” seja produzido pelo fluxo convectivo ascendente das partículas do material granular na região central do cilindro. Esse processo é semelhante ao processo muito conhecido que ocorre com as aves de rapina, como as águias, os gaviões, os falcões e os urubus, que aproveitam o movimento ascendente da corrente de ar quente na atmosfera terrestre para alcançarem alturas cada vez maiores, sem fazerem muito esforço com suas asas, planando em movimento circular, uma vez que o ar se desloca para cima em um movimento espiral. Da mesma corrente de convecção de ar quente aproveitam-se os aficionados por asas delta para planarem e alcançarem maiores alturas. As partículas do material granular ao descerem pela região



(a)  $R = 1,0r_{max}$



(b)  $R = 2,0r_{max}$

Figura 5.5: Comparação do movimento vertical da partícula grande. As partículas tem a densidade fixa em  $D = 2,0d$ .

próxima à parede do cilindro empurram a partícula grande para baixo e a fazem entrar no campo de ação de um dos vórtices citados, fazendo-a ficar cativa, permanecendo em um movimento cíclico em torno desses vórtices enquanto durar o movimento harmônico vertical.

Para o cilindro cuja parede forma um ângulo de  $90^\circ$ , pode-se entender a razão pela qual as partículas do material granular sobem pela região central e descem pela região próxima à parede do cilindro, como segue. O movimento das partículas está condicionado pela base do cilindro e pela parede. Ao caírem as partículas são pressionadas pela parede do cilindro a se manterem em seu interior. Portando, existe uma força centrípeta agindo sobre as partículas em contato com a parede do cilindro, empurrando-as para o seu centro. Ao atingirem a base do cilindro, como essas partículas não podem continuar descendo, são impelidas para a sua região central pelas forças laterais produzidas pela parede. Aí ocorrem choques entre partículas procedentes de direções diametralmente opostas, ao mesmo tempo em que sofrem pressões da base do cilindro, o que resulta em um movimento ascendente de partículas na região central.

Um processo de convecção oposto ao mostrado anteriormente ocorre quando a parede do cilindro está inclinada  $80^\circ$  em relação à sua base. Observa-se nesse caso que durante o movimento vibracional do cilindro as partículas do material granular apresentam um fluxo convectivo descendente na região central do cilindro e um fluxo ascendente na região próxima à sua parede, seguindo paralelamente a sua direção. Observa-se ainda a formação dos dois vórtices em lados opostos ao eixo vertical do cilindro. A razão das partículas

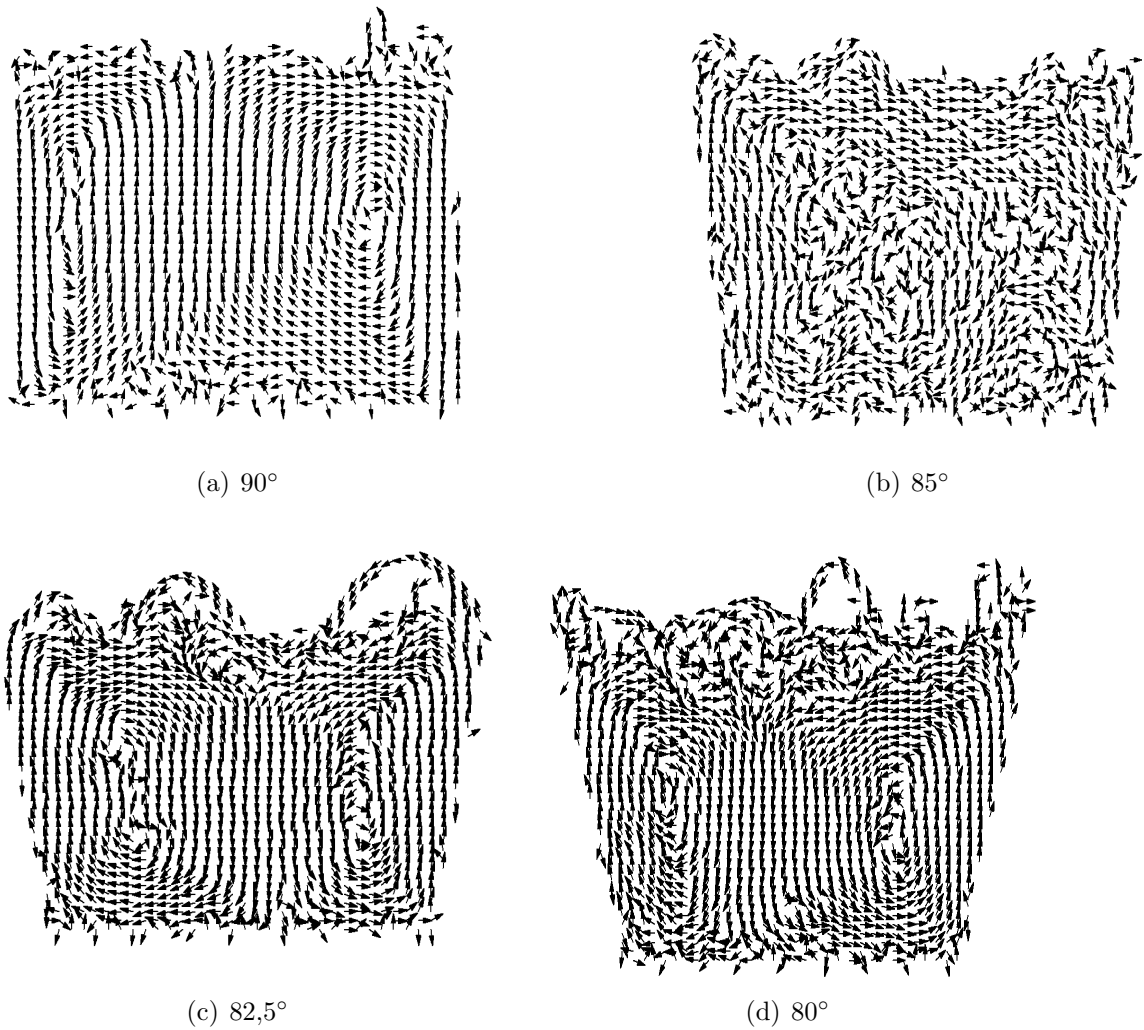


Figura 5.6: Fluxos de convecção para diferentes inclinações das paredes do cilindro.

subirem pelas laterais do cilindro e descerem pelo seu centro está na diminuição das forças centrípetas sobre as partículas do material granular devido à inclinação da parede do cilindro. Observa-se ainda que existe um ângulo crítico a partir do qual existe uma transição no sentido do fluxo convectivo que, para um sistema com os parâmetros dados pela Tabela 5.1 é aproximadamente  $85^\circ$ .

Na Figura 5.7 apresenta-se uma sequência de instantâneos mostrando o “efeito castanha do Brasil” em um cilindro com parede inclinada de  $82,5^\circ$  em relação à sua base. Observa-se nesses instantâneos a partícula grande (cor verde) subindo pelas laterais do cilindro, ao contrário do que ocorria com o cilindro reto.

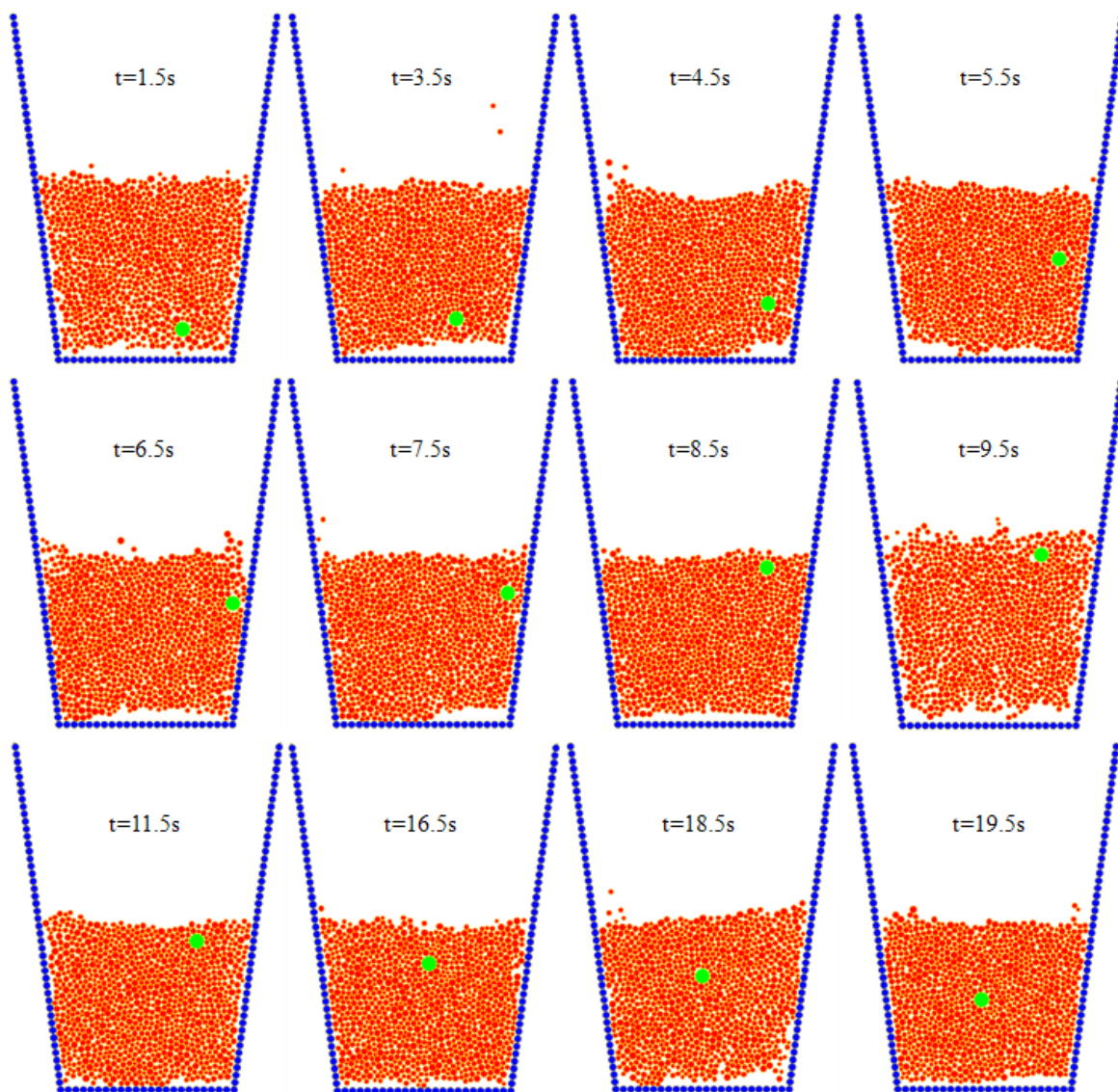


Figura 5.7: Sequência de imagens da simulação com paredes inclinadas a  $82,5^\circ$ .

# Capítulo 6

## Conclusões

O presente trabalho abordou o aspecto da dinâmica dos materiais granulares submetidos a uma oscilação forçada, tanto por meio de uma experiência real como via a simulação por Dinâmica Molecular, onde verificou-se uma boa concordância entre as duas abordagens. As oscilações forçadas estão presentes em vários aspectos do cotidiano do ser humano, como por exemplo no transporte de grãos por qualquer via, em particular por estradas, onde sofre os efeitos das imperfeições dos pavimentos rodoviários. Essas imperfeições produzem nos grãos um movimento vertical semelhante aos estudados no presente trabalho. Daí a sua importância para prever situações inadequadas de transporte que possam levar à alteração da distribuição dos grãos nos contêineres transportados, o que pode alterar a qualidade do produto, como é o caso das rações para animais.

A ferramenta computacional utilizada foi a dinâmica molecular, muito bem utilizada para simulações com partículas atômicas, porém ainda pouco utilizada no estudo de materiais granulares. A utilização da interação das partículas com a parede do recipiente foram necessárias para que a simulação representasse bem o caso real. A utilização dos modelos viscoelástico e de Haff e Werner também foram extremamente satisfatórios. O uso do programa Microsoft Visual Studio para compilar o código fonte escrito em linguagem Fortran, foi de extrema utilidade para a que se pudesse visualizar a simulação. Sem este programa seria necessário a utilização de outros programas conhecidos como “visualizadores”, o que nos acarretaria um incômodo e um gasto computacional maior.

Os resultados obtidos consistiram na simulação do “efeito castanha do Brasil” de uma partícula grande, no fundo de um recipiente contendo 924 partículas granulares,

e um experimento real em laboratório, com intuito de comparar o fenômeno real com a simulação. Esta comparação nos mostra o potencial da simulação por Dinâmica Molecular, pois esta reproduziu qualitativamente muito bem o caso real.

O método utilizado para a representação do fluxo foi muito satisfatório, pois condiz com o experimento e com outras simulações conhecidas na literatura. Pode-se observar a inversão do fluxo numa inclinação de  $82,5^\circ$  das paredes do recipiente com a horizontal. Este valor pode mudar para diferentes amplitudes e frequências de vibração.

Trabalhos futuros são necessários para a melhor compreensão deste fenômeno. Sugere-se a análise de vibrações horizontais, a influência da gravidade, a utilização de recipientes com um formato afunilado ao fundo. Uma das principais dificuldades da realização deste trabalho foi o tempo de computação, algumas simulações levaram um tempo de mais de 61 horas para se obter uma longa trajetória da partícula e um organizado fluxo vetorial. Assim faz-se necessário a utilização de computadores mais potentes para a realização de estudos similares.

# Referências Bibliográficas

- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard sphere system. *The Journal of Chemical Physics*, v. 27, p. 1208–1209, 1957.
- ALLEN, M.; TILDESLEY, D. *Computer Simulation of Liquids*. 1. ed. New York: Oxford University Press, 1987. 170 p.
- ARAÚJO, A. S. de. *Estudo do processo de complexação de calixarenos com íons metálicos e espécies neutras por simulações de Dinâmica Molecular*. Tese (Doutorado em Física) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.
- BOSCHETTI, C. *Materiais - Os tijolos do Universo*. 2008. Disponível em: <http://www.las.inpe.br/~cesar/Infrared/materiais.htm>. Acesso em: 3 fev. 2014.
- BRILLIANTOV, N. V.; POSCHEL, T. *Kinetic Theory of Granular Gases*. 1. ed. Berlin: Oxford University Press, 2004.
- BRILLIANTOV, N. V. et al. Model for collisions in granular gases. *physical review e*, v. 53, p. 5382–5392, 1996.
- CAGLIOTI, E. et al. A “tetris-like” model for the compaction of dry granular media. *Physical Review Letters*, v. 79, p. 1575–1578, 1997.
- CHAKRABORTY, S.; NOTT, P. R.; PRAKASH, J. R. Analysis of radial segregation of granular mixtures in a rotating drum. *The European Physical Journal E*, v. 1, p. 265–273, 2000.
- CHIQUITO, A. J. .; ALMEIDA, N. G. . de. O potencial de lennard-jones: Aplicação à moléculas diatômicas. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 21, p. 242–249, 1999.
- CODY, G. et al. Particle granular temperature in gas fluidized beds. *Powder Technology*, v. 87, p. 211–232, 1996.
- COULOMB, C. A. Essai sur une application des regles de maximis et minimis a quelques problemes de statique, relatifs a l’architecture. *Memoir de mathematique et de Physique*, v. 7, p. 343–382, 1773.
- DURAN, J. *Sands, powders and grains: an introduction to the physics of granular materials*. 1. ed. New York: Springer, 2000.
- DURAN, J.; RAJCHENBACH, J.; CLEMENT, E. Arching effect model for particle size segregation. *Physical Review Letters*, v. 70, p. 2431–2434, 1993.



- FARADAY, M. On a peculiar class of acoustical figures; and on certain forms assumed by groups of particles upon vibrating elastic surfaces. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, v. 121, p. 299–340, 1831.
- FERREIRA, M. R. P. *Aplicação da Dinâmica Molecular em Novos Materiais para Pavimentação*. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos da Amazônia) — Faculdade de Tecnologia, Universidade Federal do Amazonas, Manaus, 2013.
- GALLAS, J. A. C.; HERRMANN, H. J.; SOKOFOWSKI, S. Convection cells in vibrating granular media. *Physica Review Letters*, v. 69, p. 1371–1374, 1992.
- GIBSON, J. B. et al. Dynamics of radiation damage. *Physical Review*, v. 120, p. 1229–1253, 1960.
- GIRARDEAU-MONTAUT, J.-P.; GIRARDEAU-MONTAU, C. Granular matter optics: basic principles, properties and applications of one-dimensional systems. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, v. 5, p. 31–42, 2003.
- GOLDSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. *Classical Mechanics*. 3. ed. [S.l.]: Addison Wesley, 2002. 4 p.
- GUTT, G. M.; HAFF, P. Boundary conditions on continuum theories of granular flow. *Int. J. Multiphase Flow*, v. 17, p. 621–634, 1991.
- HALLIDAY, D.; RESNICK, R. *Fundamentos de Física*. [S.l.]: LTC, 2009.
- HERRMANN, H. Granular matter. *Physica A*, v. 313, p. 188–210, 2002.
- IVERSON, R. M.; LOGAN, M.; DENLINGER, R. P. Granular avalanches across irregular three-dimensional terrain: 2. experimental tests. *Journal of Geophysical rese*, v. 109, p. F01015, 2004.
- JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, v. 68, p. 1259–1273, 1996.
- KITTEL, C. *Introdução a Física do Estado Sólido*. 5. ed. [S.l.]: Guanabara Dois, 1978. 77-79 p.
- KNIGHT, J. B.; JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. Vibration-induced size separation in granular media: The convection connection. *Physical Review Letters*, v. 70, p. 3728–3731, 1993.
- KRUELLE, C. A. Physics of granular matter: Pattern formation and applications. *Rev. Adv. Mater. Sci.*, v. 20, p. 113–124, 2009.
- LÓPEZ, J.; VERCÍK, A.; COSTA, E. Meios granulares e experimentos simples para a sala de aula. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 30, p. 1308, 2008.
- MAGALHÃES, C. F. M. *Simulação de materiais granulares*. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2008.
- MOBIUS, M. E. et al. Size separation of granular particles. *Nature*, v. 414, p. 270, 2001.

- MOLINARI, Y. N.; CHAY, G. C.; SUÁREZ, J. C. R. Inertia in the brazil nut problem. *PHYSICAL REVIEW E*, v. 68, p. 041301, 2003.
- OTTINO, J. M.; KHAKHA, D. V. Mixing and segregation of granular materials. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 32, p. 55–91, 2000.
- PITMAN, E. B. et al. Computing granular avalanches and landslides. *Physics of Fluids*, v. 15, p. 3638–3646, 2003.
- POSCHEL, T.; SCHWAGER, T. *Computacional granular dynamics*. 1. ed. [S.l.]: Springer, 2005.
- PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes The art of Scientific Computing*. 3. ed. New York: Cambridge, 2007. 256 p.
- RAHMAN, A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Physical Review*, v. 136, p. 405–411, 1964.
- REYNOLDS, O. On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. with experimental illustrations. *Philosophical Magazine*, v. 20, p. 469–481, 1885.
- RINO, J. P. Materiais granulares. *Física na Escola*, v. 2, p. 5–6, 2001.
- ROSATO, A. et al. Why the brazil nuts are on top: Size segregation of particulate matter by shaking. *Physical Review Letters*, v. 58, p. 1038–1040, 1987.
- SAMADANI, A.; PRADHAN, A.; KUDROLLI, A. Size segregation of granular matter in silo discharges. *Physical Review E*, v. 60, p. 7203–7209, 1999.
- SCHERER, C. *Métodos Computacionais da Física*. 1. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2005.
- SNOEIJER, J. H. et al. Ensemble theory for force networks in hyperstatic granular matter. *Physical Review E*, v. 70, p. 1–16, 2004.
- SONG, S. et al. Application of granular solid hydrodynamics to a well-graded unbound granular material undergoing triaxial tests. *Front. Struct. Civ. Eng.*, v. 7, p. 83–88, 2013.
- SOTERRONI, A. C. *Simulação e Análise da Dinâmica de Fluidos Granulares*. Dissertação (Mestrado em Computação Aplicada) — Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2007.
- SPERL, M. Experiments on corn pressure in silo cells - translation and comment of janssen's paper from 1895. *Granular Matter*, v. 8, p. 59–65, 2006.
- TAGUCHI, Y. M. New origin of a convective motion: Elastically induced convection in granular materials. *Physical Review Letters*, v. 69, p. 1367–1370, 1992.
- TRAORE, P.; LAURENTIE, J. C. Numerical simulation of size segregation in a vertically vibrated bed. In: NATIONAL CONGRESS ON THEORETICAL AND APPLIED MECHANICS. *Anais...* Borovets, 2009.
- VANDU, C.; ELLENBERGER, J.; KRISHNA, R. *Vibration-Induced Granular Segregation*. 2005. Disponível em: <<http://www.science.uva.nl/research/cr/GranularSegregation>>. Acesso em: 27 mar. 2013.

VERLET, L. Computer “experiments” on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Physical Review*, v. 159, p. 98–103, 1967.

VOIVRET, C. et al. Space-filling properties of polydisperse granular media. *Physical Review E*, v. 76, p. 021301, 2007.

ZALBEN, L. *The Brazil Nut Effect: Why They Always Sit on Top of Smaller Nuts, Explained*. 2011. Disponível em: <http://www.seriousseats.com/2011/08/the-brazil-nut-effect.htm>. Acesso em: 27 mar. 2013.

ZHU, H. et al. Linking discrete particle simulation to continuum process modelling for granular matter: Theory and application. *Particuology*, v. 9, p. 342–357, 2011.