



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

NUMERICAL SIMULATION OF GRANULAR MATERIALS: BRAZIL NUT EFFECT AND SEDIMENT TRANSPORT

GUSTAVO HENRIQUE BORGES MARTINS

Advisor: Allbens Atman Picardi Faria
CEFET-MG

Co-Advisor: Philippe Claudin
ESPCI

BELO HORIZONTE
2021 APRIL

GUSTAVO HENRIQUE BORGES MARTINS

**NUMERICAL SIMULATION OF GRANULAR
MATERIALS: BRAZIL NUT EFFECT AND SEDIMENT
TRANSPORT**

Thesis presented to the Graduate Program in Mathematical and Computational Modeling at Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, as partial requirement to obtain the degree of Doctor of Philosophy in Mathematical and Computer Modeling.

Research field: Mathematical and Computational Modeling

Research line: Applied Mathematical Methods

Advisor: Allbens Atman Picardi Faria
CEFET-MG

Co-Advisor: Philippe Claudin
ESPCI

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
BELO HORIZONTE
2021 APRIL

This sheet should be replaced by the scanned copy of the approval sheet provided.

I dedicate this thesis to all teachers that went in my life, 'cause without them, for sure, I wouldn't know that my profession is to be an eternal questioner...

Dedico este texto a todos os meus professores, pois sem eles, com certeza, não saberia que a minha profissão é ser um eterno estudante...

Je dédie cette thèse à tous les enseignants et professeurs qui sont allés dans ma vie, car sans eux, pour sûr, je ne saurais pas que ma profession est d'être un éternel questionneur ... Merci à vous !

Acknowledgements

First of all, I am greatfull to the creator of the universe, that gaves us intelligence and mysteries, which through science and philosophy will be unveiled.

To my family, I am thankful that they always given me all the encouragement and support necessary to carry out all my human and academic training. To my beloved wife, that supported me in all ways to keep searching and understanding what are the mysteries of nature. To my father, I thank who always encouraged me to study scientific. To my mother, I thank, taste and fulfillment for teaching. To my brother I thank all the practice of patience and perseverance, in addition to keeping me in the realization of good practices and the usefulness of our work.

To my friend and adviser Allbens Atman, I thank the time and the efforts to teach me the path of the research and to all lessons inside and outside class, that I take with me.

To my friend and co-adviser Philippe Claudin, I thank for accepting me as his student, besides all disponibility and pacience that leads to this research.

I thank to the support given from the Graduate Program in Mathematical and Computing Modelling - PPGMMC at *Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais* - CEFET-MG, and from the laboratory *Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes* - PMMH at *École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la ville de Paris* - ESPCI.

I am also thankful to all my teachers and professors, once without them, I would certainly not be here.

To my friends, I thank their comprehension, whom give me support in this project.

And specially, I am greatful to every brazilian citizen, that allow me to do this research in this public institution payed with taxes. I am also greatful to the finacial support given by *Conselho Nacional de Pesquisa* - CNPq grant 88881.187077/2018-01, *Coordenação de aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior* - CAPES, *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais* - FAPEMIG, PPGMMC, CEFET-MG, PMMH, *Centre National de la Recherche Scientifique* - CNRS, and *Fundação CEFETMINAS*.

Agradeço primeiramente ao grande criador de todo o universo, que nos deu inteligência e os mistérios, que pelas ciências e filosofia os serão desvendados.

À minha família, que sempre deu todo o incentivo e suporte necessários para realizar toda a minha formação humana e acadêmica. À minha grande companheira que sempre me deu apoio e incentivo, direto e indireto, a sempre continuar desvendando os mistérios naturais. Ao meu pai que sempre me incentivou o estudo científico. A minha mãe o gosto e a realização pela docência. Ao meu irmão toda a prática de paciência e perseverança, além de me manter na realização das boas práticas e da utilidade de nossos trabalhos.

Ao meu amigo e orientador Allbens Atman, por todo o tempo e esforço em ensinar os caminhos de como fazer pesquisa e por todas as lições dentro e fora da sala de aula que levo comigo.

Ao meu amigo e co-orientador Philippe Claudin, por ter me aceitado como seu aluno, além de toda a disponibilidade e paciência para que pudessemos chegar neste estágio da pesquisa.

Ao Centro Federal de Educação Tecnológico de Minas Gerais - CEFET-MG, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - PPGMMC e ao laboratório de *Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes* - PMMH da *École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la ville de Paris* - ESPCI que disponibilizaram seus recursos, pessoal e apoio nesta pesquisa.

À todos os meus professores, que certamente contribuíram para a minha chegada até este ponto.

Aos meus amigos e colegas que sempre compreenderam as ausências, e que me deram a ajuda e o suporte para continuar trabalhando neste projeto, sejam como ouvidos para os desabafos, sejam para renovar as ideias da pesquisa.

À cada cidadão brasileiro, que me permitiu pesquisar em uma escola paga com os impostos do povo, através de suas agências de fomento à educação e à pesquisa. Ao Conselho Nacional de Pesquisa - CNPq, especialmente na chamada de número 88881.187077/2018-01, à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES, à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais - FAPEMIG, ao CEFET-MG, ao PMMH e à ESPCI, ao *Centre National de la Recherche Scientifique* - CNRS e à Fundação CEFETMINAS pelo suporte financeiro neste projeto de pesquisa, que teve início desde minha primeira iniciação científica em 2008.

Agradeço primeiramente ao grande criador de toda a vida, que nos deu inteligência e os mistérios, que pelas ciências e filosofia serão desvendados.

À minha família, que sempre deu todo o incentivo e suporte necessários para realizar toda a minha formação humana e acadêmica. À minha grande companheira que sempre me deu apoio e incentivo, direto e indireto, a sempre continuar desvendando os mistérios naturais. Ao meu pai que sempre me incentivou o estudo científico. A minha mãe o gosto e a realização pela docência. Ao meu irmão toda a prática de paciência e perseverança, além de me manter na realização das boas práticas e da utilidade de nossos trabalhos.

Ao meu amigo e orientador Allbens Atman, por todo o tempo e esforço em ensinar os caminhos de como fazer pesquisa e por todas as lições dentro e fora da sala de aula que levo comigo.

Ao meu amigo e co-orientador Philippe Claudin, por ter me aceitado como seu aluno, além de toda a disponibilidade e paciência para que pudessemos chegar neste estágio da pesquisa.

Ao *Centro Federal de Educação Tecnológico de Minas Gerais* - CEFET-MG, ao *Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional* - PPGMMC e ao laboratório de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes - PMMH da École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la ville de Paris - ESPCI que disponibilizaram seus recursos, pessoal e apoio nesta pesquisa.

À todos os meus professores, que certamente contribuíram para a minha chegada até este ponto.

Aos meus amigos e colegas que sempre compreenderam as ausências, e que me deram a ajuda e o suporte para continuar trabalhando neste projeto, sejam como ouvidos para os desabafos, sejam para renovar as ideias da pesquisa.

À cada cidadão brasileiro, que me permitiu pesquisar em uma escola paga com os impostos do povo, através de suas agências de fomento à educação e à pesquisa. Ao *Conselho Nacional de Pesquisa* - CNPq, especialmente na chamada de número 88881.187077/2018-01, à *Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior* - CAPES, à *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais* - FAPEMIG, ao - CEFET-MG, ao PMMH e à ESPCI, ao Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS e à *Fundação CEFETMINAS* pelo suporte financeiro neste projeto de pesquisa, que teve início desde minha primeira iniciação científica em 2008.

“All truths are easy to understand once they are discovered; the point is discover them.”

“Todas as verdades são fáceis de perceber depois de terem sido descobertas; o problema é descobri-las.”

“Il est facile comprendre toutes les vérités une fois qu’elles sont découvertes ; le point est de les découvrir.”

(Galileu Galilei)

Abstract

The simulation of granular materials is studied widely in many research centers around the world, and used in industries and engineering companies. For the understanding and quantification of granular materials a Discrete Element Method (DEM) simulates the behavior of granular materials. Many of the challenges to understanding the behavior of granular materials begin in the dry grain segregation phenomenon. Classically, we have the Brazil-Nut Effect (BNE) - which consists of confined granular material containing grains of different sizes and, when agitated, segregation occurs, with the larger grains rising from the mixture. For many years, it was believed that this segregation occurred due to the presence of walls that confine the material. In this thesis we show that in systems with periodic boundary conditions, BNE can also occur. We also studied sediment transport that occurs in the interaction between granules and fluids. To simulate the behavior of granular materials immersed in a fluid, we use a Computational Fluid Dynamics (CFD) technique. The solid sediments move in the velocity field transported by the fluid. Three dimensionless parameters are required to describe the transport behavior: the Reynolds number, which relates the inertial forces to the viscous forces, and consequently the fluid turbulence effects; the number of Shields, which is related to the drag forces and the inertial forces of the fluid; and finally, the density ratio between the solid and the fluid. It is possible to reproduce the different modes of transport only by changing such dimensionless parameters. In this thesis, we will try to calculate the saturation time for the modes of transport.

Keywords: Granular materials. Computer simulations. Discrete Element Method (DEM). Computational Fluid Dynamics (CFD). Brazil-Nut Effect. Sediment transport.

Resumo

A simulação de materiais granulares é estudada nas academias de todo o mundo, também utilizada em indústrias e empresas de engenharia. Para o entendimento e quantificação dos materiais granulares um Método de Elementos Discretos, ou *Discrete Element Method (DEM)*, simula o comportamento de materiais granulares. Muitos dos desafios de se compreender o comportamento de materiais granulares têm início no fenômeno de segregação de grãos secos. Classicamente, temos o efeito castanha do Pará - *Brazil Nut Effect (BNE)* - que consiste em um material granular confinado contendo grãos de diferentes volumes e que, quando agitados, ocorre segregação, sendo que os grãos maiores separam-se dos grãos menores. Por muitos anos, acreditou-se que esta segregação ocorria devido a presença de paredes que confinam o material. Nesta tese mostramos que em sistemas com condição periódica de contorno também pode ocorrer o *BNE*. Estudamos também o transporte de sedimentos que ocorre na interação entre granulares e fluidos. Para simular o comportamento de materiais granulares imersos em um fluido, utilizamos uma técnica de Fluidodinâmica Computacional, ou *Computational Fluid Dynamics (CFD)*. Os sedimentos sólidos se movem em um campo de velocidades transportados pelo fluido. Três parâmetros adimensionais são necessários para descrever o comportamento do transporte: o número de Reynolds, que relaciona as forças iniciais com as forças viscosas, e consequentemente os efeitos de turbulência do fluido; o número de Shields, que está relacionado com as forças de arraste e as forças iniciais do fluido; e finalmente, a razão de densidade entre o sólido e o fluido. É possível reproduzir os diferentes modos de transporte apenas mudando tais parâmetros adimensionais. Nesta tese, tentaremos calcular o tempo de saturação para os modos de transporte.

Palavras Chaves: Materiais granulares. Simulação computacional. Método de Elemento Discreto (DEM). Fluidodinâmica Computacional (CFD). Efeito castanha do Pará (BNE). Transporte de sedimentos.

Résumé

Des simulations de matériaux granulaires ont été étudiées dans les centres de recherche du monde entier, également utilisées dans l'industrie et la société d'ingénierie. Pour comprendre et qualifier les matériaux granulaires, une Méthode des Éléments Discrètes, ou *Discrete Element Method (DEM)*, simule le comportement des matériaux granulaires. De nombreux défis pour comprendre le comportement des matériaux granulaires commencent par le phénomène de ségrégation des grains secs. Classiquement, il y a l'effet noix du Brésil - *Brazil Nut Effect* - qui consiste en des matériaux granulaires confinés contenant des grains de différents volumes et qui, lorsqu'ils sont agités, se produisent une ségrégation, les plus gros grains se séparant des plus petits grains. Pendant de nombreuses années, on a cru que cette ségrégation était due à la présence de murs qui confinent le matériau. Dans cette thèse, nous montrons que dans les systèmes à conditions aux limites périodiques, le BNE peut également se produire. Nous avons également étudié le transport des sédiments qui se produit dans l'interaction entre les granules et les fluides. Pour simuler le comportement des matériaux granulaires immergés dans un fluide, nous utilisons une technique de Dynamique des Fluides Computationnelle, ou *Computational Fluid Dynamics (CFD)*. Les sédiments solides se déplacent dans un champ de vitesses portées par le fluide. Trois paramètres adimensionnels sont nécessaires pour décrire le comportement de transport : le nombre de Reynolds, qui est lié aux forces d'inertie aux forces visqueuses, et par conséquent aux effets de la turbulence des fluides ; le nombre de Shields, qui est lié aux forces de traînée et aux forces d'inertie du fluide ; et enfin, le rapport de densité entre le solide et le fluide. Il est possible de reproduire les différents modes de transport simplement en modifiant ces paramètres adimensionnels. Dans cette thèse, nous tenterons de calculer le temps de saturation des modes de transport.

Mots clés: Matériaux granulaires. Simulation par ordinateur. Méthode des éléments discrets (DEM). Dynamique des fluides computationnelle (CFD). Effet de Noix du Brésil (BNE). Transport de sédiments.

List of Figures

List of Tables

List of Frames

List of Algorithms

List of Abbreviations and Acronyms

BNE	Brazil-Nut Effect
CFD	Computational Fluid Dynamics
DEM	Discrete Element Method

List of Symbols

\mathcal{G} Galileos number

Sumário

1 Introdução

Materiais granulares estão presentes em vários contextos da natureza e das atividades humanas [??????????]. Atividades econômicas, como produção agrícola, mineração e tecnologia de construção, são essencialmente ligadas ao uso de materiais granulares [??]. Por muitos anos, os estudos em materiais granulares estiveram presentes principalmente nas engenharias [????], com o intuito de otimizar os processos de produção, armazenagem, escoamento e aplicações estruturais destes materiais. Hoje, algumas áreas da física, como a mecânica estatística [??], estudam intensamente a caracterização do comportamento destes materiais, e suas aplicações, pela riqueza dos fenômenos observados. Sua ubiquidade reflete a importância dos estudos acerca de seu conhecimento, para que a haja a manipulação destes elementos nas mais diversas situações.

Materiais granulares podem ser caracterizados como o aglomerado de corpos maiores que algumas centenas de micrometros até o tamanho de asteroides [????]. Além do tamanho, outra característica dos corpos é se apresentarem no estado sólido. Suas interações resultam em dissipação de energia, seja por atrito, seja pela inelasticidade da interação. Não estão sujeitos à variações no movimento causadas por flutuações térmicas, e portanto, não exibem movimentos Brownianos. Mais caracterizações dos materiais granulares podem ser encontradas no capítulo ?? deste projeto de tese.

A proposta de estudos deste trabalho baseia-se na realização de simulações computacionais de materiais granulares, utilizando um Método de Elemento Discreto, ou *Discrete Element Method (DEM)*, baseado no método de Dinâmica Molecular, ou *Molecular Dynamics (MD)* [??]. A simulação utiliza a definição de que os grãos são representados por discos, que sofrem gravidade, e que possuem potencial de repulsão quando estão em contato. No contato também levamos em conta o atrito entre as partículas. Definidas as propriedades dos materiais, como dureza, atrito, massa, posição e raio, dispomos das equações de movimento de Newton e das equações da cinemática para realizar a simulação. Detalhamos tal equacionamento e peculiaridades da simulação no capítulo ?? . Em relação ao fluido, a descrição detalhada do equacionamento, considerações do fluido no problema de transporte e da Fluidodinâmica Computacional, ou *Computational Fluid Dynamics (CFD)*, pode ser encontrada também no capítulo ??.

Dos fenômenos apresentados pelos materiais granulares, estudaremos nesse projeto de tese, o efeito castanha do Pará, ou *Brazil Nut Effect (BNE)*, relacionado à segregação de grãos confinados quando são submetidos à vibração e em presença de um campo gravitacional. Grãos maiores segregam-se no topo, enquanto grãos menores afundam. O capítulo ?? fornece mais detalhes a respeito do *BNE*, tanto no ponto de vista fenomenológico,

quanto ao experimento proposto.

Estudaremos também o fenômeno do transporte de sedimentos imersos em fluidos. Com as equações que regem os fluidos, a equação de Navier-Stokes [????] é utilizada neste trabalho para modelar o fluido que escoa e carrega consigo parte do material granular. Existem alguns modos de transportes que são caracterizados pela maneira em que os grãos são transportados pelo fluido e estão descritos no capítulo ??.

1.1 Justificativa

No contexto da engenharia, necessita-se compreender como os processos são elaborados, de forma a ajustá-los para otimizar os custos de produção, transporte e armazenamento de materiais vitais as atividades humanas, como alimentos e minérios. Neste sentido, o entendimento do comportamento dos materiais, quando submetidos à certas condições, permite manipulá-los da forma de maior interesse, seja por uma necessidade de conservação do material, seja pelo transporte mais rápido ou pela eficiência de outro parâmetro na qual pretende-se gastar menos recursos ou ter o maior retorno financeiro, energético ou social.

Na segregação de grãos, problemas relacionados à entupimentos podem ocorrer dependendo da geometria dos materiais [??]. Quando estes materiais são submetidos à vibração, ou quando escoam, naturalmente separam-se os maiores dos menores, facilitando assim a filtração, porém dificultando a mistura. Estes conjuntos de aglomerados podem trazer consequências aos processos industriais, como desgaste de silos relacionados à resistência dos materiais, corrosão do silo ou do granular, apodrecimento ou envelhecimento de alimentos estocados etc. [??].

Assim, compreender como os materiais interagem e como são transportados, seja de forma forçada em uma esteira, seja naturalmente pelas correntezas de um rio, dá a possibilidade de controlar seus possíveis efeitos, ou prever sua consequência, como por exemplo a quantidade de resíduos remanescentes nos rios devido ao rompimento das barragens de Fundão em Mariana-MG em novembro de 2015 [??] e a barragem de Barcarena-PA em fevereiro de 2018 [??].

1.2 Motivação

Por percebermos que ainda falta compreensão nos fenômenos envolvendo granulares, propomos estudar técnicas que possam predizer o comportamento do aglomerado, ou caracterizar alguma propriedade emergente do sistema que ainda não tenha sido relatada ou documentada, bem como utilizar resultados já conhecidos dos materiais e procurar aplicá-los em outras áreas que a medição faz-se dificultada.

Especificamente, trataremos de um assunto que ainda não havia sido reproduzido na literatura: o *BNE* em duas dimensões com condição periódica de contorno.

Tentaremos também realizar a medida de escala de tempo de saturação *Tempo de saturação em transporte de sedimentos indica o tempo característico que o material leva para entrar em regime permanente, saindo de uma configuração e chegando na configuração final.* do material quando transportado por um fluido.

1.3 Organização do trabalho

Este trabalho divide-se em um capítulo de revisão bibliográfica sobre materiais granulares, descrito no capítulo ??, com fenomenologia do estudo sobre o estudo de materiais granulares. As descrições do capítulo ?? dizem respeito ao equacionamento e da modelagem do sistema, subdividido em duas partes principais: a primeira diz respeito das forças de interação dos grãos e como são implementadas as equações regentes neste sistema, enquanto a segunda parte trata do fluido e como implementá-lo. O capítulo ?? refere-se em especial ao fenômeno conhecido como *BNE*. o capítulo ?? traz as descrições do transporte de materiais por fluidos, com as caracterizações de cada modo de transporte. O capítulo ?? apresenta as conclusões parciais deste projeto de tese.

2 Materiais Granulares

Materiais granulares são conjunto de corpos sólidos, que individualmente podem ser compostos de um mesmo material ou de diferentes materiais, de geometria das mais variadas, podendo ter várias densidades, coeficiente de atrito, dureza, e várias outras propriedades físicas que os materiais possuem, mas todos são maiores que $100\mu m$, e portanto visíveis a olho nu [??]. Interagem entre si quando estão em contato uns com os outros, perdendo energia, tanto na forma de dissipação inelástica, quanto no atrito entre os grãos. Os corpos sólidos que constituem os materiais granulares são grandes o suficiente para não apresentarem influência cinemática em função da temperatura termodinâmica. Assim sendo, movimentos Brownianos são ausentes nesse tipo de sistema.

Segundo a *Web of Science*, o número de produções publicadas com a palavra chave "*Granular Materials*", até 03/04/2018, é de 8.618 e segue a distribuição apresentada na figura ?? ao longo dos anos. O estudo de materiais granulares também segue uma tendência crescente ao longo dos anos.

Como exemplos de materiais granulares temos areia, pedras, solos, fármacos, minérios, alimentos em grão como arroz, milho e soja, e até mesmo o cinturão de asteroides

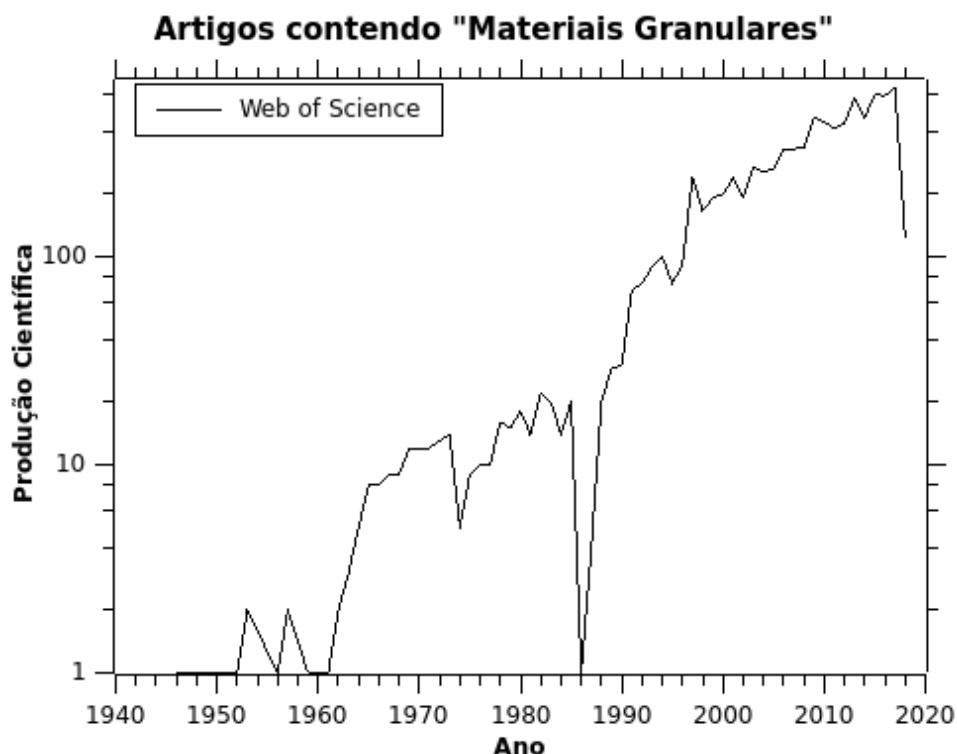


Figura 1 – Produção científica acerca de materiais granulares com as palavras chave "*Granular Materials*" ao longo dos anos.

e os anéis de Saturno. Só a areia, compõe 10% dos materiais da superfície do planeta Terra. Além disso, estima-se que o segundo material mais utilizado nas indústrias são materiais granulares, utilizando aproximadamente 10% de toda a energia do planeta, sendo que o material mais utilizado é a própria água [??].

Pela ausência de movimentos Brownianos, bem como pela dissipação de energia, sistemas granulares não sofrem relaxação espontânea de suas configurações estáveis na ausência de perturbações externas, principalmente na forma de vibrações, e portanto não apresentam ergodicidade¹.

Materiais granulares apresentam também particularidades quanto às suas fases. Apresentam-se individualmente em corpos sólidos, e quando o conglomerado está próximo do repouso, constituem a fase sólida do sistema. Porém, se o sistema é agitado, ou configurado além de um limiar crítico do ângulo de repouso, pode apresentar-se nas fases de granular líquido² ou granular gasoso. Tal classificação ainda está em aberto na literatura, apesar de existirem proposições para o que seria a temperatura granular do sistema [??].

Uma diferenciação entre sistemas granulares pode ser resultado direto das forças de interações entre os grãos. São chamados de granulares secos os sistemas que possuem apenas interações repulsivas, enquanto os granulares molhados apresentam forças de van der Waals nas interações grão a grão. Nesta tese, consideraremos apenas as interações repulsivas de contato, apesar de que em alguns casos, existe fluido envolvendo o material. Consideramos que todo o material que está envolvido pelo mesmo fluido não sofre forças de atração entre os mesmos grãos, e portanto, não está inclusa força de van der Waals na interação entre os grãos.

Ainda neste capítulo, concentraremos em apenas alguns fenômenos de materiais granulares que não são o objetivo direto desta tese, mas que contextualizam o leitor acerca de fenômenos importantes observados em materiais granulares. Em especial, o capítulo ?? retrata do efeito castanha do Pará (*BNE*) com os detalhes fenomenológicos e suas caracterizações, enquanto o capítulo ?? descreve os modos do transporte de sedimentos.

2.1 Fenomenologia de Materiais Granulares

Talvez a primeira ideia sobre materiais granulares remeta ao empilhamento de areira. Nesse caso, tem-se uma pilha estática de areia³, amontoada sobre uma superfície. Note que em uma pilha como essa, os grãos sempre atingem uma determinada altura, e quando coloca-se mais material sobre a pilha, em algum momento, as camadas superiores da

¹ Um sistema ergódico tem característica de transitar entre seus microestados de energia espontaneamente, em intervalos de tempos, implicando que seus estados são todos equiprováveis quando analisados em um longuíssimo tempo [??????].

² Granulares líquidos podem possuir uma camada limite que flui sobre a camada sólida do sistema.

³ A pilha estática está no estado sólido da fase granular [??].

pilha escorrem até a base. Sempre que a pilha ultrapassar o ângulo crítico de repouso [??], ocorrerá uma avalanche, restaurando o sistema a um outro ângulo característico. Esta propriedade é a de auto-organização⁴ da pilha de areia pelo ângulo crítico de repouso. Uma boa aproximação do ângulo de repouso é dada pela equação ??:

$$\tan(\theta) = \mu_s, \quad (1)$$

onde θ é o ângulo crítico de repouso, e μ_s é o coeficiente de atrito do material.

Um pouco mais curioso ainda sobre as pilhas de grãos é que o histórico de preparação do sistema reflete-se no ângulo de repouso [??]. Este histórico de preparação permite o sistema configurar-se diferentemente, e portanto, o ângulo de repouso assume valores diferentes utilizando o mesmo material. Existe então um ângulo de repouso mínimo θ_r , e um ângulo máximo θ_m , em que o empilhamento pode configurar-se: $\theta_r < \theta < \theta_m$ [??]. Ter uma faixa de ângulos estáveis entre o ângulo mínimo de repouso e o ângulo máximo recebe o nome de biestabilidade do ângulo de repouso.

Uma evidência de que o histórico de preparação altera a configuração do material é descrita nos artigos "*Sensitivity of Stress Response Function to Packing Preparation*" e "*Memories in sand: Experimental tests of construction history on stress distributions under sandpiles*"[?????]. A base circular apresentada na figura ?? foi feita com duas formas de deposição diferentes. No experimento, a pressão medida na base varia de acordo com a deposição, sendo que a deposição feita a partir do funil possui um pico de máximo de pressão em torno de 0,25 e 0,5 do raio da mesa, enquanto na deposição feita a partir da peneira apresenta pressão como espécie de platô entre o centro da mesa e 0,25 do raio, com o máximo próximo do centro.

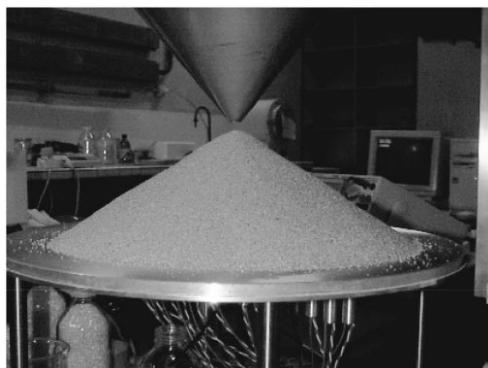
Um estudo feito por Atman *et al.* [??] mostra que diferentes geometrias de materiais granulares resultam em diferentes funções respostas⁵. Como exemplo, a figura ?? mostra duas funções respostas para sistemas com geometria circular e pentagonal.

Já que citamos as diferentes funções respostas nos empilhamentos de grãos, não podemos deixar de citar as cadeias de forças⁶. A importância experimental da visualização das cadeias de forças se dá no entendimento da distribuição das forças internas que sustentam o material. Como exemplo, a figura ?? indica a cadeia de forças associada à função resposta de uma força puntual aplicada sobre o topo do material granular.

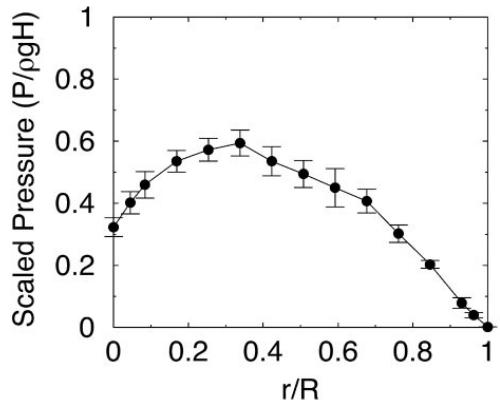
⁴ Um sistema que não possui controlador central, regido por vários agentes que interagem entre si, com regras conhecidas na interação dos agentes e exibem propriedade não prevista pelas interações entre os agentes caracterizam um Sistema Complexo. Uma propriedade característica de Sistemas Complexos e de materiais granulares é a auto-organização. Alguns autores [?????????] classificam materiais granulares dentro da área de estudo de Sistemas Complexos.

⁵ Função resposta é a diferença entre duas configurações, uma antes de aplicar-se a carga de teste e após a aplicação da carga, mostrando-se a distribuição de forças sobre o material, ou a compressão do sistema [??].

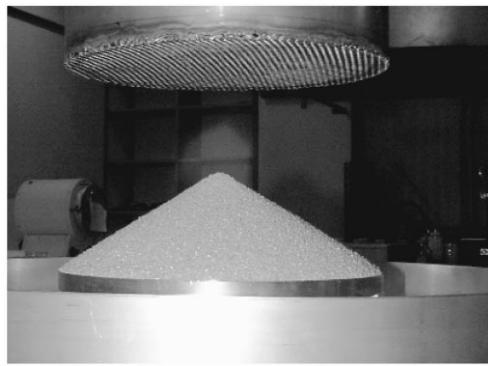
⁶ Cadeias de forças consistem na rede de contatos entre os grãos que possuem força acima da força média do sistema. Em geral, mede-se as cadeias de forças são medidas a partir da função resposta [??].



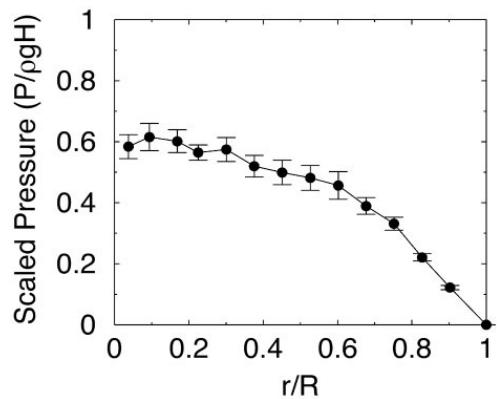
(a) Empilhamento a partir do funil.



(b) Pressão na montagem a partir do funil.



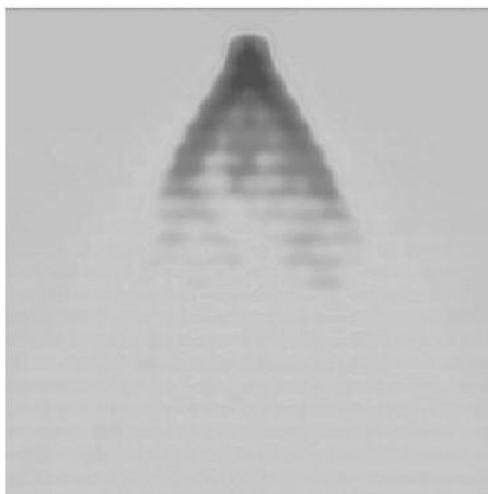
(c) Empilhamento a partir da peneira.



(d) Pressão na montagem a partir da peneira.

Figura 2 – A preparação das pilhas de areia reflete nas pressões medidas na base da pilha.

Nas figuras ?? e ?? a deposição a partir do funil cria um perfil de pressões que tem o pico fora do centro da pilha, enquanto nas figuras ?? e ?? a deposição a partir da peneira cria um perfil de pressões que tem um platô e depois decai. Figuras retiradas de [??].



(a) Grãos circulares.



(b) Grãos pentagonais.

Figura 3 – A aplicação de uma força em diferentes sistemas granulares resulta em diferentes respostas. A diferença entre estes sistemas é que a figura ?? possui grãos de geometria circular e possui maior ordem, enquanto a figura ?? possui geometria pentagonal e maior desordem. Figuras retiradas de [??].

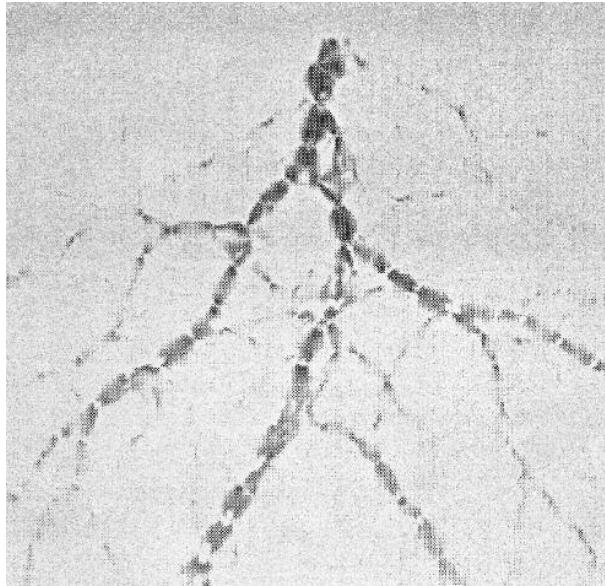


Figura 4 – A aplicação de uma força puntual no topo do material resulta na cadeia de forças, que pode ser vista através da função resposta do sistema. Neste caso, o sistema é preparado com grãos fotoelásticos em uma distribuição bidimensional. Quanto mais escuras, maiores são as tensões no material. Figura retirada de [??].

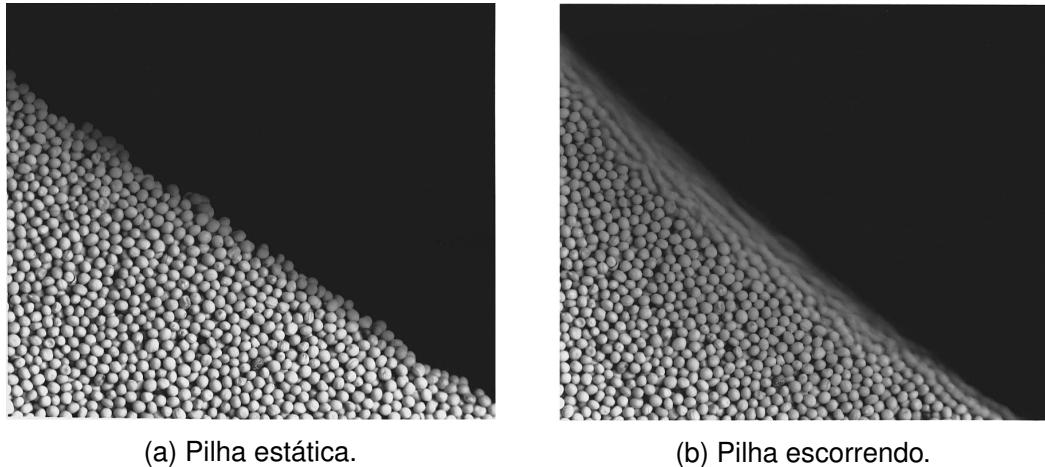
As cadeias de forças são importantes para entender o fenômeno que está presente nos arcos de sustentação que utilizamos. Arcos são estruturas coletivas que possuem sustentação mútua, e, consequentemente, uma cadeia de forças ligando toda a estrutura, sendo capaz de sustentar o peso próprio e de todos os grãos acima, impedindo que os mesmos escoem. Na formação de arcos podem ocorrer efeitos de segregação, como verificado por Magalhães, C. e Magalhães, F. [????].

As medidas em materiais granulares geralmente tentam caracterizar o material em duas escalas diferentes que se relacionam: microescala, que diz respeito das medidas na escala dos grãos, como atrito; e macroescala, que diz respeito das medidas na escala do sistema, como pressão e tensão de cisalhamento.

Uma curiosidade sobre os materiais granulares é que quando estão submetidos a uma pressão e seu coeficiente de compactação⁷ está próximo do engarrafamento [??], uma dilatação tende a ocorrer, expandindo-se pelas bordas das fronteiras que confinam o material ou pelas outras direções de liberdade que o confinamento apresenta. Muitas vezes, ao aplicar-se uma pressão no material confinado, o coeficiente de compactação final pode ser menor que o inicial, indicando uma expansão volumétrica do sistema [??].

Aproveitando o exemplo do empilhamento, observa-se que na formação da pilha, após os grãos atingem o ângulo crítico, ocasiona-se uma avalanche do material. Na avalanche, a camada superior entra em movimento, enquanto as camadas abaixo continuam

⁷ O coeficiente de compactação é dado pela razão da soma dos volumes individuais dos grãos pelo volume de ocupação no espaço.



(a) Pilha estática.

(b) Pilha escorrendo.

Figura 5 – Com o aumento do ângulo da pilha, nota-se que a camada superior desliza sobre a camada inferior (da figura ?? para a figura ??). Figuras retiradas de [??].

estáticas. Na movimentação da camada superior, o material granular se apresenta no estado líquido, enquanto a camada estática abaixo encontra-se no estado sólido [??]. A figura ?? exemplifica a transição de fase sólido líquido entre as camadas.

Escoamentos podem ocorrer então por tensões aplicadas no material, seja em uma inclinação da base, seja pela vibração do material. Como a mudança de configurações do material está relacionada a taxa de cisalhamento do material, mas a tensão de cisalhamento não é necessariamente proporcional a taxa de cisalhamento, este escoamento pode ser classificado como fluido não newtoniano.

No próximo capítulo descreveremos as equações e os procedimentos para realizar as simulações dos materiais granulares, desde o modelo de contatos até a inserção do fluido no sistema.

3 Técnica de Simulação

Uma forma muito utilizada para estudar sistemas granulares é a realização de simulações numéricas, que têm um papel importante na complementação das informações experimentais, o que aumenta ainda mais a compreensão dos fenômenos da física granular. Uma justificativa é o controle preciso dos parâmetros de entrada das simulações e do nível de complexidade acerca do objeto de estudo. Outra vantagem é a facilidade da medição próxima da escala dos grãos, como as cadeias de forças, até a escala do sistema, como o cisalhamento do material, evidenciando eventuais propriedades emergentes e suas causas.

A técnica de simulação de materiais granulares que utilizamos neste trabalho é um *DEM* conhecido na literatura como Dinâmica Molecular, ou *Molecular Dynamics (MD)*. O método consiste em solucionar numericamente as equações de movimento quando aplicadas forças dinâmicas sobre os elementos a serem simulados. Uma vantagem deste método é que qualquer força que utilize parâmetros dentro da simulação e que possa ser descrita na interação com os elementos é aceita neste método.

A técnica descrita no livro *Computer Simulation of Liquids* [??] utiliza-se dos formalismos da mecânica analítica através dos potenciais de interação entre os agentes, sejam potenciais lagrangianos, sejam potenciais hamiltonianos, para estabelecer a força que atua sobre cada agente. A desvantagem deste tipo de descrição é que forças dissipativas podem não aparecer, uma vez que a descrição das forças está relacionada diretamente com potenciais. Formalmente, o sistema deve obedecer ao conjunto de equações ?? descritas pela função lagrangiana do sistema:

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}, \quad (2a)$$

$$\sum_k \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} \right) \right] = 0, \quad (2b)$$

$$\vec{F}_i = \nabla \mathcal{L} = -\nabla \mathcal{V}, \quad (2c)$$

sendo que a notação descrita pelo conjunto de equações ??, \mathcal{L} representa a função lagrangiana que rege a dinâmica do sistema, \mathcal{T} a energia cinética, \mathcal{V} a energia potencial, k o número de coordenadas generalizadas do sistema, q_k as coordenadas generalizadas, \dot{q}_k as velocidades generalizadas, \vec{F}_i a força exercida na partícula i originada pelo gradiente do potencial \mathcal{V} .

Já outras referências [?????????????????????] utilizam o modelo diretamente das forças que agem sobre cada elemento.

3.1 Equações de movimento

Para a realização da simulação, o conjunto de equações ?? deve ser satisfeito, o que leva em consideração as leis de Newton. Assim, tem-se a informação dos estados dos agentes em função do tempo.

$$Translacional \left\{ \begin{array}{l} \vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + \int_0^t \vec{v}_i(t) dt, \\ \vec{v}_i(t) = \vec{v}_i(0) + \int_0^t \vec{a}_i(t) dt, \end{array} \right. \quad (3a)$$

$$Rotacional \left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_i(t) = \sum_j \frac{\vec{F}_{i,j}(t)}{m_i}, \\ \theta_i^k(t) = \theta_i^k(0) + \int_0^t \vec{\omega}_i^k(t) dt, \\ \vec{\omega}_i^k(t) = \vec{\omega}_i^k(0) + \int_0^t \vec{\alpha}_i^k(t) dt, \end{array} \right. \quad (3b)$$

$$Rotacional \left\{ \begin{array}{l} \vec{\alpha}_i^k(t) = I_i^{k-1} \sum_j \vec{\tau}_{i,j}^k(t), \end{array} \right. \quad (3c)$$

$$Rotacional \left\{ \begin{array}{l} \theta_i^k(t) = \theta_i^k(0) + \int_0^t \vec{\omega}_i^k(t) dt, \\ \vec{\omega}_i^k(t) = \vec{\omega}_i^k(0) + \int_0^t \vec{\alpha}_i^k(t) dt, \end{array} \right. \quad (3d)$$

$$Rotacional \left\{ \begin{array}{l} \vec{\alpha}_i^k(t) = I_i^{k-1} \sum_j \vec{\tau}_{i,j}^k(t), \end{array} \right. \quad (3e)$$

$$Rotacional \left\{ \begin{array}{l} \theta_i^k(t) = \theta_i^k(0) + \int_0^t \vec{\omega}_i^k(t) dt, \\ \vec{\omega}_i^k(t) = \vec{\omega}_i^k(0) + \int_0^t \vec{\alpha}_i^k(t) dt, \end{array} \right. \quad (3f)$$

em que i é a i -ésima partícula do sistema, $\vec{r}_i(t)$ é o vetor de posição do centro de massa do corpo i no instante de tempo t , $\vec{v}_i(t)$ ou $\dot{\vec{r}}_i(t)$ é o vetor de velocidade do centro de massa do corpo, $\vec{a}_i(t)$ ou $\vec{v}_i(t)$ ou $\ddot{\vec{r}}_i(t)$ é o vetor de acelerações do centro de massa do corpo, $\vec{F}_{i,j}(t)$ é a componente da força que o centro de massa do corpo sofre por interagir com outro corpo ou campo j , m_i é a massa do corpo, $\theta_i^k(t)$ é a base das coordenadas de rotação do corpo expressas na base k do sistema, $\vec{\omega}_i^k(t)$ é o pseudovetor de velocidades angulares do corpo expressas na base k do sistema, $\vec{\alpha}_i^k(t)$ é o pseudovetor de acelerações angulares do corpo, I_i^{k-1} é o inverso do tensor de inércia do corpo e $\vec{\tau}_{i,j}^k(t)$ é o vetor de torques que o corpo sofre por interagir com outro corpo ou campo. Lembrando que a relação entre o torque e a força que o causa pode ser descrita pela equação ??:

$$\vec{\tau}_{i,j}(t) = \vec{\chi}_{i,j}(t) \times \vec{F}_{i,j}(t), \quad (4)$$

sendo que o vetor $\vec{\tau}_{i,j}(t)$ é o produto vetorial entre o vetor $\vec{\chi}_{i,j}(t)$, que liga o centro de massa da partícula i ao ponto de aplicação da força, e o vetor $\vec{F}_{i,j}(t)$, o vetor da força causada por interagir com outro corpo ou campo j . As equações ?? e ?? expressam a segunda lei de Newton.

A formulação descrita pelo conjunto de equações ?? abrange espaços em 1D, 2D e 3D, porém esta tese foca apenas na formulação de sistemas em 2D.

3.1.1 Modelo de forças

As forças presentes nos sistemas modelados nesta tese incluem as forças de contato entre os agentes, que pertencem ao modelo reológico dos grãos, as forças de interação

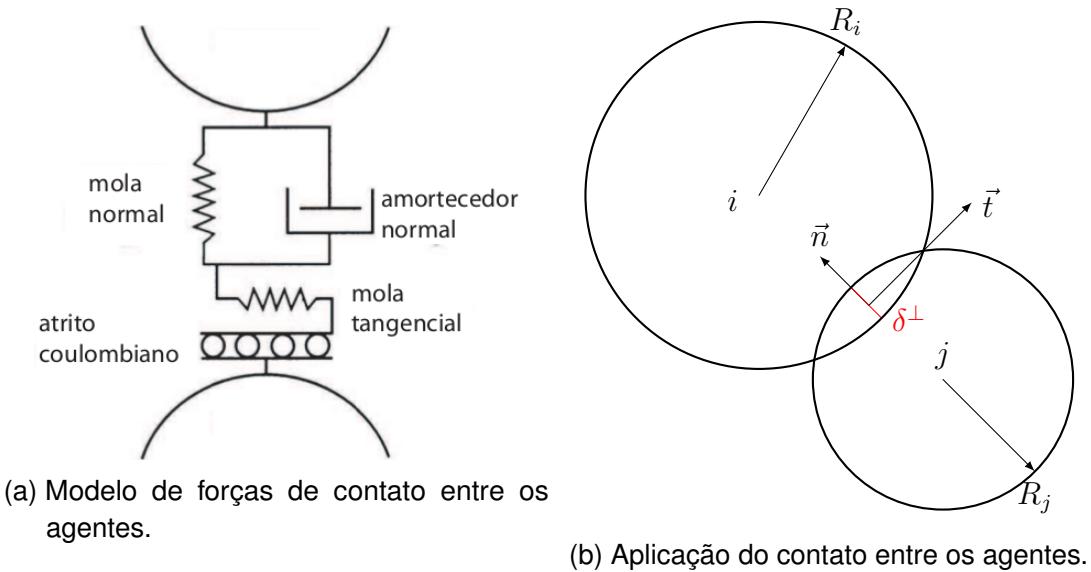


Figura 6 – Modelo de forças e a aplicação do contato entre os agentes. Figuras retiradas de [??].

entre grão e fluido e a força gravitacional.

3.1.1.1 Modelo reológico

O modelo reológico dos agentes utilizado na simulação de *MD* para materiais granulares foi proposto por Kelvin-Voigt [??], com geometria circular pelos agentes. A reologia de Kelvin-Voigt modela a força de contato por uma mola e um amortecedor em paralelo na direção normal do contato, como exemplificado na figura ?? . A parcela da mola representa a contribuição elástica do material, relacionado com o módulo de Young, enquanto o amortecedor tem a função de atenuar a energia na colisão inelástica entre os grãos. Adicionalmente, um elemento parecido com uma mola é inserido na direção tangencial. Um modelo proposto em [??] adiciona um elemento parecido com um amortecedor em paralelo à mola tangencial, modelando a resistência ao rolamento. Por causa da geometria circular, toda a variação de momento angular é causada pela força tangencial.

Uma peculiaridade da *MD* é a permissão de interpenetração entre os grãos, e portanto, neste modelo não há deformação no contato entre dois corpos. A interpenetração máxima é controlada pelo parâmetro de dureza do material e impõe penetração de 0.5% dos raios.

Para encontrar o valor da interpenetração δ , na geometria circular, a equação ??:

$$\delta_{i,j}^{\perp} = (R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \mathcal{H}(R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i|), \quad (5)$$

em que $\delta_{i,j}^{\perp}$ é o valor da interpenetração entre os grãos i e j , R_i é o raio do corpo i , R_j do corpo j , \vec{r}_i é o vetor de posição do corpo i , \vec{r}_j é o vetor de posição do corpo j e \mathcal{H} é a função de degrau de Heaviside. Então, quando a distância entre os corpos for maior que a

soma dos raios, os corpos não estarão em contato e a função degrau de Heaviside indica que a interpenetração entre os grãos é nula.

Com o contato entre os grãos, a consequência direta da interpenetração é o surgimento de uma força elástica repulsiva ao contato, e dependente da função de interpenetração δ^\perp . A expressão da força pode ser calculada pela equação ??:

$$\vec{F}_{i,j}^{el} = -k_n (\delta_{i,j}^\perp)^{\frac{D}{2}} \hat{n}_{i,j}, \quad (6)$$

em que $\vec{F}_{i,j}^{el}$ é a força elástica que o corpo i sente ao entrar em contato com o corpo j , k_n é a constante relacionada a elasticidade do material na direção do contato, $\delta_{i,j}^\perp$ é a interpenetração entre os corpos i e j , D é a dimensão do sistema (no caso, $D = 2$) e $\hat{n}_{i,j}$ é a direção normal do contato [??????]. Pode-se escrever um potencial para esta força elástica como: $\mathcal{V} = \frac{1}{2} k_n \delta_{i,j}^{\perp 2}$.

Associado à força elástica, também está presente a força de amortecimento. Por se tratar de uma força dissipativa, não se pode associar um potencial à força de amortecimento. A maior parcela da perda de energia dos materiais granulares está na colisão, e esta é a responsável. A equação ?? descreve seu comportamento:

$$\vec{F}_{i,j}^{am} = -\gamma (\vec{v}_{i,j} \cdot \hat{n}_{i,j}) \hat{n}_{i,j}, \quad (7)$$

em que $\vec{F}_{i,j}^{am}$ é a força de amortecimento que o corpo i sente ao entrar em contato com o corpo j , γ é a constante de amortecimento relacionada a inelasticidade da colisão, $\vec{v}_{i,j}$ é a velocidade relativa entre os centros de massa dos corpos i e j e $\hat{n}_{i,j}$ é a direção normal do contato [??????].

A constante de amortecimento está diretamente ligada ao coeficiente de restituição e pode ser utilizada equivalentemente através da transformação mostrada em [??]. Alguns autores utilizam o coeficiente de restituição nas simulações, como [??????]. Aqui, utilizaremos a constante de amortecimento.

A força de atrito também está presente no modelo de simulação. Como as superfícies estão em contato, existirá uma força de atrito entre elas, se houver tendência de movimento uma em relação à outra. Em especial, devido à geometria circular, as forças de atrito agirão apenas na direção tangencial. A velocidade de deslocamento entre os pontos de contato dos corpos é dada pela equação ?? a seguir:

$$\delta_{i,j}^{\parallel} = \vec{v}_{ij} \cdot \hat{t}_{ij} - R_i \omega_i - R_j \omega_j, \quad (8)$$

em que $\delta_{i,j}^{\parallel}$ é a velocidade relativa entre os pontos de contato dos corpos i e j , \vec{v}_{ij} é a velocidade relativa entre os centros de massa dos corpos i e j , \hat{t}_{ij} é o vetor tangencial às superfícies de contato dos corpos i e j , R_i é o raio do corpo i , R_j é o raio do corpo j , ω_i é a velocidade de rotação do corpo i e ω_j é a velocidade de rotação do corpo j .

Para a força tangencial, é necessário saber o deslocamento relativo dos pontos de contato, como dada pela equação ??, aplicados no sistema de equações ??, que modela a força de atrito com saturação, e é dada por:

$$\vec{F}_{i,j}^{at} = \begin{cases} - \int_{t_0}^{t_f} k_t \delta_{i,j}^{\parallel} \hat{t}_{ij} dt, & \text{se } k_t |\delta_{i,j}^{\parallel}| \leq \mu |F_{i,j}^n| \quad (\text{Atrito Estático}) \\ - \int_{t_0}^{t_f} \frac{\delta_{i,j}^{\parallel}}{|\delta_{i,j}^{\parallel}|} \mu |F_{i,j}^n| \hat{t}_{ij} dt, & \text{se } k_t |\delta_{i,j}^{\parallel}| > \mu |F_{i,j}^n| \quad (\text{Atrito Cinético}) \end{cases}, \quad (9)$$

em que $\vec{F}_{i,j}^{at}$ é a força de atrito entre os corpos i e j , k_t é a constante elástica do material na direção tangencial, $\delta_{i,j}^{\parallel}$ é a velocidade relativa entre os pontos de contato dos corpos i e j , \hat{t}_{ij} é o vetor tangencial às superfícies de contato dos corpos i e j , μ é o coeficiente de atrito entre as superfícies dos corpos i e j e $\vec{F}_{i,j}^n = \vec{F}_{i,j}^{el} + \vec{F}_{i,j}^{am}$ é a força normal às superfícies dos corpos i e j .

3.1.1.2 A força externa: Gravidade

Para este modelo, a influência gravitacional é aproximada por uma constante, já que a simulação não leva em conta que a influência da massa dos corpos é muito pequena, se comparada com a massa do planeta em que está situada a simulação, bem como a variação de altura do sistema simulado é muito pequeno e está próximo à superfície do planeta, quando comparada com o raio do planeta. Por conveniência, normalizamos a gravidade como valor unitário.

3.1.1.3 As forças do fluido

A força que o fluido exerce sobre os corpos pode ser entendida como contribuição de diferentes modelos e casos. Uma formulação mais detalhada sobre cada parcela de forças que o fluido exerce sobre cada corpo é descrita pela equação ??:

$$\vec{F}_i^{Fluid} = \vec{F}_i^{Arch} + \vec{F}_i^{Drag} + \vec{F}_i^{Magnus} + \vec{F}_i^{Lift} + \vec{F}_i^{AddedMass} + \vec{F}_i^{Basset}, \quad (10)$$

em que \vec{F}_i^{Fluid} é a contribuição total das forças que o fluido exerce sobre o corpo i , \vec{F}_i^{Arch} é a força de Arquimedes sobre o corpo i , \vec{F}_i^{Drag} é a força de arrasto sobre o corpo i , \vec{F}_i^{Magnus} é a força de Magnus sobre o corpo i , \vec{F}_i^{Lift} é a força de sustentação sobre o corpo i , $\vec{F}_i^{AddedMass}$ é a força de adição de massa sobre o corpo i e \vec{F}_i^{Basset} é a força histórica de Basset sobre o corpo i . Como simplificação do modelo, utilizaremos apenas as forças de Arquimedes e as forças de arraste do fluido [??????].

A força de Arquimedes pode ser escrita como na equação ??, enquanto a força de arraste pode ser escrita como na equação ??:

$$\vec{F}_i^{Arch} = \frac{\pi}{6} d_i^3 \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma}, \quad (11)$$

em que \vec{F}_i^{Arch} é a força de Arquimedes no corpo i , d_i é o diâmetro do corpo i e $\vec{\nabla} \cdot \bar{\sigma}$ é o divergente do tensor de tensão do fluido $\bar{\sigma}$, e:

$$\vec{F}_i^{Drag} = \frac{\pi}{8} \rho_f d_i^2 C_d(\mathcal{R}_u) |\vec{u}_f - \vec{v}_i| (\vec{u}_f - \vec{v}_i), \quad (12)$$

em que \vec{F}_i^{Drag} é a força de arraste no corpo i , ρ_f é a densidade do fluido, d_i é o diâmetro do corpo i , $C_d(\mathcal{R}_u)$ é o coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds do corpo, descrito pela equação ??, \vec{u}_f é a velocidade do fluido, \vec{v}_i é a velocidade do corpo [??].

$$C_d(\mathcal{R}_u) = \left(\sqrt{C_d^\infty} + \sqrt{\frac{\mathcal{R}_u^c}{\mathcal{R}_u}} \right)^2 \quad (13)$$

em que $C_d(\mathcal{R}_u)$ é o coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds do corpo, $C_d^\infty \simeq 0.5$ é o coeficiente de arrasto do grão no limite turbulento ($\mathcal{R}_u \rightarrow \infty$), $\mathcal{R}_u^c \simeq 24$ é o número de Reynolds de transição do corpo na qual o coeficiente de arrasto torna-se quase constante e a equação ?? que relaciona o número de Reynolds do corpo com os parâmetros do sistema:

$$\mathcal{R}_u = \frac{d_i}{\nu} |\vec{u}_f - \vec{v}_i| \quad (14)$$

em que d_i é o diâmetro do corpo i , ν é a viscosidade dinâmica do sistema, \vec{u}_f é a velocidade do fluido e \vec{v}_i é a velocidade do corpo i [??].

3.1.2 O modelo do fluido

Para o fluido, a equação geral que rege o sistema é a equação de Navier-Stokes, que é a aplicação da segunda lei de Newton para a massa específica em meios contínuos e a aplicação das leis de conservação de massa e de momento [????]. Para a equação da conservação de massa, temos a equação ??:

$$\frac{\partial \rho^f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho^f \vec{u}^f) = 0, \quad (15)$$

em que ρ^f é a densidade do fluido, e \vec{u}^f é a velocidade do fluido.

A equação ?? descreve a conservação do momento como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^f \vec{u}^f) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^f \vec{u}^f \otimes \vec{u}^f) = \bar{\sigma} + p_{ext}, \quad (16)$$

em que ρ^f é a densidade do fluido, \vec{u}^f é a velocidade do fluido, $\bar{\sigma}$ é o tensor tensão do fluido e p_{ext} é a pressão causada por agentes externos, como a gravidade e as forças dos corpos que interagem com o fluido.

Na formulação da conservação do momento, existe internamente a conservação da massa, e se escrevermos os termos da equação efetuando-se os produtos internos e as derivadas, teremos a equação ??, que é a equação de Navier-Stokes:

$$\rho^f \frac{\partial \vec{u}^f}{\partial t} + \rho^f (\vec{u}^f \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}^f = \vec{\nabla} \cdot \bar{\sigma} + p_{ext}, \quad (17)$$

em que ρ^f é a densidade do fluido, \vec{u}^f é a velocidade do fluido, $\bar{\sigma}$ é o tensor tensão do fluido e p_{ext} é a pressão causada por agentes externos e que o tensor tensão do fluido pode ser escrito em função das pressões internas e do cisalhamento do fluido, como na equação ??:

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

em que $\bar{\sigma}$ é o tensor de tensão do fluido, σ são as componentes de tensão e a pressão do fluido é $p = -\frac{1}{2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$, e τ são as componentes do cisalhamento do fluido, sendo que $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, indicando que são simétricas.

Uma importante medida é a taxa de deformação do fluido, dada pela equação ??:

$$\dot{\gamma}_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right), \quad (19)$$

em que $\dot{\gamma}_{xy}$ e $\dot{\gamma}_{yx}$ são as componentes do tensor da taxa de deformação, u_x é a velocidade do fluido na direção de escoamento e u_y é a velocidade do fluido na direção da gravidade. As componentes $\dot{\gamma}_{xy}$ e $\dot{\gamma}_{yx}$ são simétricas, sendo também equivalentes às componentes cruzadas do divergente do campo de velocidades.

O cisalhamento do fluido controla algumas características do fluido, como por exemplo o regime de escoamento. A equação que rege o cisalhamento é a equação ??:

$$\tau = \rho^f (\nu + \nu_t) \dot{\gamma}, \quad (20)$$

em que τ é cisalhamento do fluido, ρ^f é a densidade do fluido, ν é a viscosidade intrínseca do fluido, ν_t é a viscosidade que insere turbulência no fluido e $\dot{\gamma}$ é o tensor da taxa de deformação do fluido e é descrito pela equação ???. Para que o escoamento seja laminar em um fluido newtoniano, o termo de viscosidade turbulenta deve ser nulo.

As considerações feitas sobre o fluido são que o fluido é incompressível, que o fluido não circula na direção da gravidade (direção x de escoamento), que possui condição periódica de contorno na direção de escoamento, ou seja, o que acontece de um lado do sistema é o mesmo que acontece no outro e o volume ocupado pelo fluido é o todo o volume não ocupado pelos corpos. As implicações destas condições simplificam as equações ??, ?? e ???. No caso da conservação da massa a implicação da incompressibilidade do fluido é a conservação do volume ao longo de todo o tempo e todo o espaço. Já a condição periódica de contorno na direção do escoamento, em relação à Navier-Stokes, equação ??, implica que a tensão na direção de escoamento seja nula, ou seja, $\sigma_{xx} = 0$ quando não houverem corpos. Para o fluido não circular na direção da gravidade, toda a camada de escoamento é tomada por uma média na direção do escoamento (direção x). Portanto, a simplificação do tensor de tensões do fluido resume-se na equação ??:

$$\vec{\nabla} \cdot \bar{\sigma} = \frac{\partial \tau}{\partial y} \hat{x} - \frac{\partial p}{\partial y} \hat{y} \quad (21)$$

em que $\bar{\sigma}$ é o tensor de tensão do fluido, τ é a componente do cisalhamento do fluido, p é componente da pressão do fluido, \hat{x} é a direção de escoamento do fluido e \hat{y} é a direção da gravidade.

Aplicando as considerações feitas sobre o fluido na equação de Navier-Stokes, equação ??, tem-se o sistema de equações em relações às direções de escoamento do fluido (x) e da gravidade (y) iguais a:

$$\left\{ \begin{array}{l} (1 - \phi)\rho^f \frac{\partial u_x^f}{\partial t} = (1 - \phi) \frac{\partial \tau}{\partial y} - p_x^{body} \\ 0 = -(1 - \phi) \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} - p_y^{body} + (1 - \phi)\rho^f g \end{array} \right. \begin{array}{l} : \hat{x}, \\ : \hat{y}, \end{array} \quad (22a)$$

em que ρ^f é a densidade do fluido, u_x^f é a componente da velocidade na direção do escoamento, ϕ é o coeficiente de compactação dos corpos, τ é a componente do cisalhamento do fluido, σ_{yy} é a componente da tensão no fluido, p_x^{body} é a pressão que os corpos fazem sobre a direção de escoamento x , p_y^{body} é a pressão que os corpos fazem sobre a direção gravitacional y e g é o valor da gravidade.

Para a taxa de deformação do fluido, a aplicação das considerações do fluido resulta na equação ??:

$$\dot{\gamma}_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y}, \quad (23)$$

em que $\dot{\gamma}_{xy}$ é a componente do tensor da taxa de deformação, u_x é a velocidade do fluido na direção de escoamento e y é a direção da gravidade.

Existem vários modelos de turbulência para serem abordados em um fluido. Neste trabalho escolhemos o modelo de turbulência de Prandtl e o termo viscosidade turbulenta apresenta-se como na equação ??:

$$\nu_t = l^2 |\dot{\gamma}|, \text{ ou seja,} \\ \nu_t = l^2 \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right|, \quad (24)$$

em que ν_t é o modelo da turbulência, l é um comprimento característico da turbulência e da vorticidade, $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação do fluido, u_x é a velocidade do fluido na direção de escoamento e y é a direção da gravidade.

O cisalhamento do fluido controla algumas características do fluido, como por exemplo o regime de escoamento. A equação que rege o cisalhamento é a equação ??:

$$\tau = \rho^f \left(\nu + l^2 \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right| \right) \frac{\partial u_x}{\partial y}, \quad (25)$$

em que τ é cisalhamento do fluido, ρ^f é a densidade do fluido, ν é a viscosidade intrínseca do fluido, $l^2 \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right|$ é a viscosidade que insere o efeito médio da turbulência no fluido e $\frac{\partial u_x}{\partial y}$ é o tensor da taxa de deformação do fluido e é equivalente à equação ??.

Para que o

escoamento seja laminar em um fluido newtoniano, o termo de viscosidade turbulenta deve ser nulo.

Para a mistura do fluido e do granular, tomamos o comprimento característico da turbulência sempre acima das camadas estáticas do material granular, e portanto assumimos o comportamento descrito pela equação ?? do comprimento característico da turbulência proposto por van Driest [??]:

$$l(y_b) = \begin{cases} 0 & \text{se } y \leq y_b, \\ \kappa(y - y_b) \left[1 - e^{-(y-y_b)\frac{u_*}{\nu \mathcal{R}_{vD}}} \right] & \text{se } y > y_b, \end{cases} \quad (26a)$$

$$l(y_b) = \begin{cases} 0 & \text{se } y \leq y_b, \\ \kappa(y - y_b) \left[1 - e^{-(y-y_b)\frac{u_*}{\nu \mathcal{R}_{vD}}} \right] & \text{se } y > y_b, \end{cases} \quad (26b)$$

em que $l(y_b)$ é o comprimento característico da turbulência, $\kappa \simeq 0,4$ é a constante de von Karman, y é a altura do fluido, y_b é a posição do topo da camada dos sólidos não transportados, u_* é a velocidade característica de cisalhamento imposta no topo do fluido, ν é a viscosidade do fluido e $\mathcal{R}_{vD} \simeq 26$ é o número Reynolds de van Driest [??]. Porém outros comprimentos característicos da turbulência foram levados em consideração e estão descritos nas referências [????].

3.1.3 Discretização temporal

Para a simulação computacional dos corpos sólidos, as equações da cinemática devem ser reescritas como expansões da série de Taylor, interpolando o sistema de equações de velocidade pelo algoritmo conhecido como *Velocity Verlet* [????]. As equações de movimento discretizadas no tempo, em função do passo de tempo Δt , tornam-se como no conjunto de equações ??:

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n \Delta t + \frac{\vec{a}_i^n}{2} (\Delta t)^2, \quad (27a)$$

$$Translacional \quad \vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^n + \frac{\vec{a}_i^n + \vec{a}_i^{n+1}}{2} \Delta t, \quad (27b)$$

$$\vec{a}_i^{n+1} = \frac{\sum_j \vec{F}_{i,j}^{n+1} + \sum \vec{F}_{i,ext}^{n+1}}{m_i}, \quad (27c)$$

$$\theta_i^{n+1} = \theta_i^n + \vec{\omega}_i^n \Delta t + \frac{\vec{\alpha}_i^n}{2} (\Delta t)^2, \quad (27d)$$

$$Rotacional \quad \vec{\omega}_i^{n+1} = \vec{\omega}_i^n + \frac{\vec{\alpha}_i^n + \vec{\alpha}_i^{n+1}}{2} \Delta t, \quad (27e)$$

$$\vec{\alpha}_i^{n+1} = I_i^{-1} \sum_j \vec{\tau}_{i,j}^n, \quad (27f)$$

em que i é o índice do corpo que movimenta, j é o índice do corpo em contato com o corpo i , n é o passo de tempo, \vec{r} é a posição do corpo, \vec{v} é a velocidade do corpo, \vec{a} é a aceleração do corpo, Δt é o tamanho do passo de tempo, $\vec{F}_{i,j}$ é a força de contato entre os corpos i e j , \vec{F}_{ext} são as forças externas, como gravidade e força que o fluido exerce sobre o corpo, m

é a massa do corpo, θ é a posição angular do corpo, $\vec{\omega}$ é a velocidade angular do corpo, $\vec{\alpha}$ é a aceleração angular do corpo, $\vec{\tau}$ é o torque sobre o corpo, I é o momento de inércia do corpo.

O conjunto de equações ?? está escrito para o sistema 2D, uma vez que só há um grau de liberdade para a rotação, e consequentemente todas as equações passam a ser escritas em função de um único parâmetro. A aproximação da velocidade como a ponderação entre as acelerações no instante de tempo atual e futuro é a chave para a minimização da imprecisão gerada pela discretização [??].

Para o fluido, discretizamos a equação ?? de forma explícita¹. Por causa da não linearidade das equações no termo de turbulência, ainda não conseguimos escrever uma expressão implícita² para este sistema. Alguns livros tratam exclusivamente o assunto da discretização da equação de difusão linear e estão referenciados em [?????????]. A equação para o fluido, em sua forma discretizada torna-se então o sistema de equações ??:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_x^{n+1} = u_x^n + \frac{\Delta t}{\rho^f \Delta y} [\tau_k^n - \tau_{k-1}^n] - \frac{\Delta t}{\rho^f} P_k^n, \\ \tau_k^n = \rho^f \left[\nu + l_k^2 \left| \frac{u_{xk+1}^n - u_{xk}^n}{\Delta y} \right| \right] \left(\frac{u_{xk-1}^n - u_{xk}^n}{\Delta y} \right), \end{array} \right. \quad (28a)$$

$$\left. \begin{array}{l} \\ \tau_k^n = \rho^f \left[\nu + l_k^2 \left| \frac{u_{xk+1}^n - u_{xk}^n}{\Delta y} \right| \right] \left(\frac{u_{xk-1}^n - u_{xk}^n}{\Delta y} \right), \end{array} \right. \quad (28b)$$

em que k é o índice discretização espacial do fluido, n é o passo de tempo, u_x é a velocidade de escoamento do fluido, Δy é o espaçamento da malha do fluido, Δt é o intervalo entre os passos de tempo, ρ^f é a densidade do fluido, τ é o cisalhamento do fluido, P é a pressão que os corpos sólidos fazem no fluido, ν é a viscosidade do fluido e l é o comprimento característico da turbulência.

3.2 Algoritmo

Além das equações que regem o sistema, uma série de procedimentos devem ser realizados para que a simulação possa ocorrer. Cada um destes passos são essenciais para que a simulação ocorra, e são dependentes uns dos outros. O algoritmo ?? determina as rotinas para a execução da simulação. Utilizamos o *Gear Predictor-Corrector* de 3^a ordem com o *Velocity Verlet* para realizar as simulações [??].

¹ A forma explícita de resolução de um método de equações de diferenças resolve o sistema para o próximo passo de tempo com as operações originais da equação diferencial. Toda a discretização é feita sobre as funções do passo de tempo atual resultando no passo de tempo posterior. A desvantagem desta técnica é o fator de instabilidade da solução que pode vir a ocorrer. A vantagem é que o sistema sempre pode ser escrito por estas equações.

² A forma implícita de resolução de um método de equações de diferenças resolve o sistema do próximo passo de tempo com base nas raízes da equação diferencial do problema. Toda a discretização é feita considerando as raízes que solucionam a equação. A desvantagem desta técnica é o fato de nem sempre existir algoritmo que encontre as raízes. A vantagem é que o fator de estabilidade é mais permissivo.

Algorithm 1: Dadas as entradas do problema, como posições iniciais dos corpos, velocidades e acelerações, o algoritmo de Dinâmica Molecular monta uma lista de corpos que são vizinhos delimitados por uma certa região, então prediz a posição e a velocidade dos corpos no próximo instante de tempo, procura os contatos que foram formados com a predição, calcula as forças entre cada corpo em contato e inclui as forças externas, corrige as previsões de velocidade e aceleração de cada corpo e calcula a dinâmica do fluido. Assim um passo de Dinâmica Molecular é construído. Retirado de [??].

```

Entrada : configuração de dados inicial da simulação
Saída : resposta e medições de simulação ao longo do tempo
while não atingida a condição de parada da simulação do
    if chegou a hora de listar os Vizinhos then
        | Determinar a lista de corpos Vizinhos;
    end
    Predictor;
    Detectar Contatos;
    Cálculo de Forças;
    Corretor;
    if Possui Fluido then
        | Cálculo do Fluido;
    end
end
```

As condições de parada do algoritmo dependem do objetivo da simulação. Alguns exemplos, como estabilidade de pilhas estáticas, flutuações de energia, quebra das cadeias de forças, velocidade média do sistema, número de passos de tempo, entre vários outros parâmetros medíveis dentro da simulação podem se tornar o critério de parada da simulação. Nesta tese, utilizamos como principal critério de parada o número de passos de tempo de simulação.

Faremos uma breve discussão a respeito de cada uma das rotinas do algoritmo ???. Para maiores detalhes, as referências [??????] possuem maiores explanações sobre as rotinas, com exemplos e algoritmos.

3.2.1 Vizinhos

Apesar de não ser a forma mais simples do algoritmo de localização de vizinhos, esta é mais eficiente, e está descrita em [??]. Consiste criar a lista de todos os corpos que pertencem à uma certa região de possível interação. A criação da lista minimiza o número de comparações feitas durante a execução, o que proporciona o maior desempenho computacional. O artigo "*Methods of parallel computation applied on granular simulations*"[??] revela as diferenças entre alguns métodos da criação das listas de corpos que interagem entre si. Este artigo foi escrito durante a elaboração deste projeto de tese e está no apêndice ???. O algoritmo ?? refere-se a criação da lista dos corpos que tem a possibilidade de interação

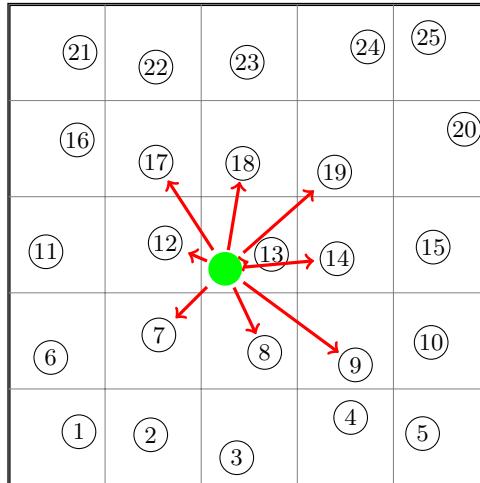


Figura 7 – A busca realizada no algoritmo ?? ocorre entre os corpos com sua região de vizinhança imediatamente adjacente. Figura retirada de [??].

entre si.

Algorithm 2: Algoritmo para criação da lista de corpos vizinhos. Retirado de [??].

```

Input: posição dos corpos
Output: lista de Vizinhos
Dividir o espaço em regiões;
foreach corpo do
    | Inserir o corpo na lista da região que pertence;
    | Inserir o corpo nas listas adjacentes da região que pertence;
end
```

A figura ?? mostra as regiões que o corpo marcado deve estar listado. Para maiores detalhes, as referências [????].

3.2.2 Predictor

A rotina de predição atualiza as posições e as velocidades dos corpos, permitindo que todas as forças sejam calculadas em função dos novos valores. No conjunto de equações ??, equações que envolvem os termos com índice n são atualizados nesta rotina. O algoritmo ?? mostra a estrutura da rotina de predição.

3.2.3 Detectar contatos

A rotina de detecção de contatos utiliza da lista de vizinhos gerada pelo algoritmo ?? para checar se o par listado corpo/vizinho possuem interpenetração, descrita na equação ??, e então gera uma nova lista de corpos que se interpenetram para ser utilizadas no algoritmo ?? . O algoritmo ?? descreve esta operação.

Algorithm 3: Rotina de predição das variáveis de estado dos corpos. Retirado de [??].

Entrada : posições, velocidades, acelerações e o passo de tempo Δt
Saída : posições, parcela das velocidades
forall corpos **do**
 | Calcular as posições;
 | Prever as velocidades;
end

Algorithm 4: Rotina de detecção de contatos. Retirado de [??].

Entrada : lista de Vizinhos
Saída : lista de Contatos
forall corpos Vizinhos **do**
 | Calcular Interpenetração $\delta_{i,j}$ entre corpos i e j ;
 | **if** $\delta_{i,j} > 0$ **then**
 | Insere o par na lista de contatos;
 | **end**
end

3.2.4 Cálculo de forças

A rotina de calcular as forças utiliza da lista de contatos gerada pelo algoritmo ?? para calcular as forças de contato entre os corpos, como forças elásticas (equação ??), forças de amortecimento (equação ??) e forças de atrito (equação ??). Além das forças de contato, os corpos sofrem a força gravitacional e a interação com o fluido (equações ?? e ??). O algoritmo ?? contém a execução do calculo das forças.

3.2.5 Corretor

A rotina de correção atualiza as velocidades e as acelerações dos corpos. As forças calculadas no cálculo de forças é utilizada aqui para realizar o *Velocity Verlet* e determinar as acelerações do próximo passo de tempo. No conjunto de equações ??, as equações que envolvem os termos com índice $n + 1$ são atualizadas nesta rotina. O algoritmo ?? mostra a estrutura da rotina de correção.

3.2.6 Fluido

A rotina de cálculo do fluido consiste na atualização da malha do fluido³ em função do sistema de equações ?. A malha deste fluido é unidimensional, uma vez que consideramos a variação de velocidades apenas na direção y . Assim, consideramos uma malha linear de

³ A malha do fluido consiste na divisão geométrica do espaço para realizar simulação, e é baseada em pontos discretos do espaço associados a uma função contínua. Este processo é o método de elementos finitos, ou *Finite Element Method (FEM)* [??].

Algorithm 5: Aqui são calculadas as resultantes das forças em cada corpo.

A força \vec{N} é a força normal, contribuição da força elástica \vec{F}^{el} e força de amortecimento \vec{F}^{am} (equações ?? e ??), F^d é a força de rolamento de um corpo sobre o outro, que deve ser comparado com a força de atrito estático máxima μN . Retirado e adaptado de [??].

Entrada :posições, velocidades, lista de contatos e perfil de velocidades do fluido

Saída :forças e torques atuantes nos corpos

foreach corpo **do**

- Aplicar gravidade;
- foreach** elemento da lista de contatos **do**

 - Calcula força normal \vec{N} ;
 - Calcula força F^d no rolamento de corpos;
 - if** $|F^d| < \mu |\vec{N}|$ **then**

 - $\vec{F}^{at+} = \vec{F}^d \hat{t}$;

 - else**

 - $\vec{F}^{at+} = \mu \sin(\vec{F}^d) \vec{N} \hat{t}$;

 - end**
 - Calcula torque;

- end**
- if** possui fluido **then**

 - Calcula força de Arquimedes;
 - Calcula força de arrasto;

- end**

end

Algorithm 6: Rotina de correção das variáveis dos corpos. Retirado de [??].

Entrada :resultante das forças e o passo de tempo Δt

Saída :estado dos corpos prontos para o próximo passo de tempo

foreach corpo **do**

- Calcular as acelerações;
- Corrigir as velocidades;

end

espaçamento Δy , sendo que Δy é uma fração do grão médio do sistema. Para uma boa amostragem, utilizamos $\Delta y \simeq 0.1d$, em que d é o diâmetro médio do grão. Para o cálculo da pressão que o fluido exerce sobre o grão, utilizamos a fração do corpo que pertence à camada em que o mesmo está inserido. A soma de todas as frações de corpos na camada resulta no coeficiente de compactação^{??}.

Algorithm 7: Rotina que atualiza os estados do fluido para o próximo passo de tempo.

Entrada : perfil de velocidades e cisalhamento do fluido, forças de arrasto e arquimedes nos grãos, passos de tempo Δt e de espaço Δy

Saída : estado do fluido para o próximo passo de tempo

```

foreach corpo do
    | Calcula as pressões dos corpos no fluido;
end
forall fluido do
    | Calcula o cisalhamento do fluido;
    | Atualiza a velocidade do fluido;
end
```

3.3 Parâmetros importantes

Em decorrência do modelo de forças apresentado, alguns parâmetros são importantes para as simulações. Por serem regidos por equações de diferenças em função do parâmetro temporal, alguns critérios devem ser obedecidos para que a simulação seja estável. Um dos parâmetros é a constante de tempo Δt , que em nossas simulações possui relação direta com o período de oscilação do modelo massa mola, dado por $\Delta t = \zeta \sqrt{m_{min}/k}$, em que ζ é um valor de ajuste, m_{min} é a menor massa do sistema e k é a constante de elasticidade. Os fatores que estabilizam as simulações que possuem o modelo massa mola devem ter $\zeta < 1/10$ [??????]. Nesta tese utilizaremos o fator de 1/10 para sistemas que não são vibrado e 1/100 para sistemas vibrados.

Outro importante parâmetro é o fator de amortecimento γ , ou o coeficiente de restituição ϵ . Pela natureza dissipativa dos materiais granulares, utilizam-se $\epsilon \simeq 0^4$, o que aproxima de $\gamma \simeq 2\sqrt{km_{min}}$ pois teremos regimes críticos na equação massa mola quando utilizarmos a menor massa dos dois corpos, e para todos os outros, o amortecimento será subcrítico [????].

Para o fluido, três parâmetros adimensionais de controle são importantes: a razão de densidade, descrita pela equação ??, o número de Reynolds, que relaciona as forças iniciais com as forças viscosas, descrito pela equação ?? e o número de Shields, que relaciona as forças de arrasto com as forças iniciais, descrito pela equação ?? [??].

⁴ A relação entre o coeficiente de restituição e o coeficiente de amortecimento podem ser encontrados em [??].

A seguir, a equação que descreve a razão de densidades entre grão e fluido:

$$\mathcal{D}_R = \frac{\rho^{body}}{\rho^f}, \quad (29)$$

em que \mathcal{D}_R é a razão de densidade, ρ^{body} é a densidade do corpo e ρ^f é a densidade do fluido.

O segundo parâmetro adimensional de controle do fluido é o número de Reynolds, dado pela equação:

$$\mathcal{R} = \frac{d}{\nu} \sqrt{(\mathcal{D}_R - 1) gd}, \quad (30)$$

em que \mathcal{R} é o número de Reynolds na escala do corpo, d é o diâmetro médio do corpo, ν é a viscosidade do fluido, \mathcal{D}_R é a razão de densidade e g é o valor de gravidade do sistema.

O terceiro parâmetro adimensional de controle do fluido é o número de Shields, dado pela equação:

$$\Theta = \frac{u_*^2}{(\mathcal{D}_R - 1) gd}, \quad (31)$$

em que Θ é o número de Shields, u_* é a velocidade de cisalhamento imposta para o fluido, \mathcal{D}_R é a razão de densidade, g é o valor de gravidade do sistema e d é o diâmetro médio do corpo.

No próximo capítulo descreveremos o efeito castanha do Pará (*BNE*) e como montamos a simulação que leva a este efeito.

4 Efeito Castanha do Pará - *Brazil Nut Effect (BNE)*

Historicamente, o fenômeno conhecido como efeito castanha do Pará deu-se em função das exportações da castanha do Pará em contêineres, por navios, e sempre que chegavam ao destino, observam-se que as maiores castanhas estavam no topo. Inicialmente pensou-se que os comerciantes brasileiros arranjavam as castanhas de modo que as maiores estivessem em cima e, as menores e quebradas em baixo. Após investigação, foi verificado que as castanhas maiores ascendiam devido a vibração que os contêineres sofriam ao longo do transporte, por isso o efeito ficou conhecido como efeito castanha do Pará, ou *Brazil Nut Effect (BNE)* [??].

O BNE ocorre quando um grão, maior que os grãos do meio, sobe contra a gravidade no meio granular agitado. Este fenômeno está associado com a fase granular do sistema. Num sistema granular sólido, o grão maior fica estático. Com o aumento da agitação, o sistema passa para o estado líquido, permitindo que haja movimentação dos grãos no sistema [??]. A movimentação do material ocorre em correntes de convecção que se formam próximas das paredes e pelo preenchimento do espaço anteriormente ocupado pelo grão maior, com o efeito catraca [????].

Vários diagramas de fase foram observados para alguns dos parâmetros do BNE. Dentre as principais variáveis estão a razão de diâmetros dos grãos e a razão de densidades [?????????????????????]. Dentro das caracterizações dos planos de fase, a aceleração adimensional, mostrado na equação ??, é o parâmetro de comparação relacionado à subida do intruso.

$$\Gamma = \frac{A\omega^2}{g}, \quad (32)$$

em que Γ é o adimensional, A é a amplitude de vibração do sistema, ω é a frequência de vibração e g é o valor da gravidade.

Nesta parte da tese, utilizaremos 2500 grãos. O diâmetro médio do grão é $d = 1 \pm 2.5\%$, distribuídos uniformemente. O diâmetro do intruso é de $D = 5$ vezes o diâmetro médio dos grãos. A densidade de todos os grãos é a mesma, e vale $\rho = 1/\pi$, e portanto a massa média dos grãos é de $m = 0,25$, exceto quando estiver ressaltado nas figuras. A constante de mola na direção normal é de $k_n = 1000$ e a tangencial é de $k_t = 750$. A atuação do amortecedor é no regime crítico ($\gamma = 2\sqrt{mk}$), e vale aproximadamente $\gamma = \sqrt{10}$. O atrito dos grãos valem $\mu = 0,5$, tanto entre grãos, quanto entre paredes, quando houver. O passo de tempo ($dt = pT$) vale aproximadamente $dt = \frac{1}{2000\sqrt{10}}$, utilizando a fração de $p = 0,01$ do período de oscilação do modelo de contato massa mola $T = \sqrt{\frac{m}{k}}$. A largura da

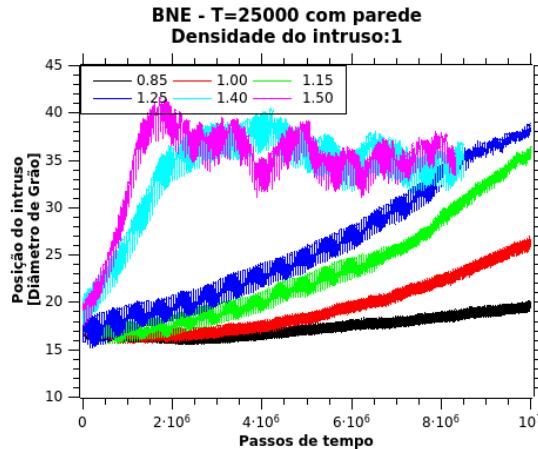


Figura 8 – Média de 10 amostras da subida do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 25000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema possui atrito nas paredes e densidade do intruso igual a dos grãos.

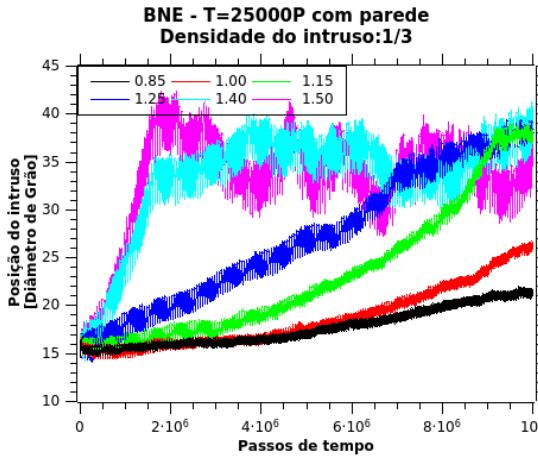


Figura 9 – Média de 5 amostras da subida do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 25000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema possui atrito nas paredes e densidade do intruso é $\frac{1}{3}$ da densidade dos grãos.

caixa é de $L = 37.5$ diâmetros de grão.

Inicialmente, estudamos o sistema com paredes no fundo e nas laterais, formando uma caixa. Observamos nestas simulações correntes de convecção próximos às paredes.

Percebemos que intrusos mais densos sobem mais lentamente que intrusos menos densos. Os tempos de subida, quando comparados, podem ser ordenados das figuras ?? < ?? < ?. Assim como as correntes de convecção são mais intensas, o intruso sobe mais rapidamente e cai mais rapidamente, visto na amplitude de $\Gamma = 1,5$ para as figuras ??, ?? e ??, respectivamente.

Quando retirado o atrito entre os grãos e as paredes, temos que o efeito da convecção no sistema diminui, ocasionando em uma subida mais lenta que quando o atrito

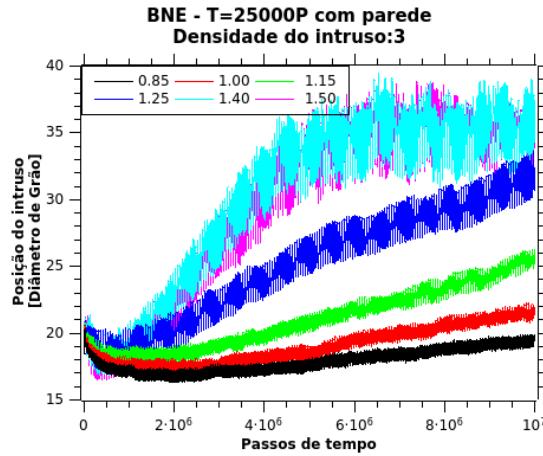


Figura 10 – Média de 5 amostras da subida do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 25000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema possui atrito nas paredes e densidade do intruso é 3 vezes a densidade dos grãos.

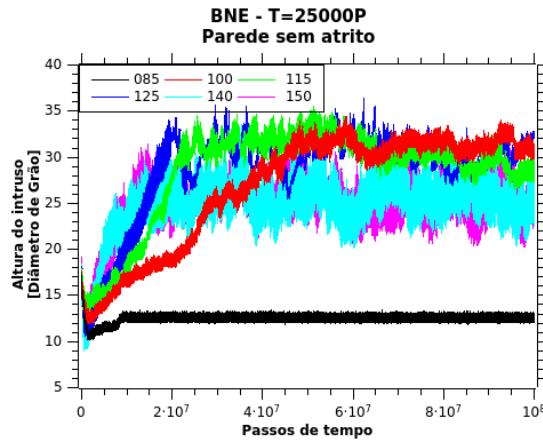


Figura 11 – Média de 3 amostras da subida do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 25000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema não possui atrito nas paredes.

está presente. A figura ?? mostra a subida do intruso no sistema em que as paredes não possuem atrito.

Ao comparar os tempos de subida do sistema que possui atrito nas paredes (figura ??) com o sistema que não possui atrito nas paredes (figura ??), percebemos que o tempo de subida é maior, além de que o sistema que possui agitação menor que a gravidade não sobe, mostrando que um dos fatores que importam para o *BNE* são as correntes de convecção formadas próximas das paredes.

Quando retiramos o atrito do sistema, o intruso chega ao fundo do sistema, independente da amplitude de vibração. A figura ?? exibe o comportamento do intruso para o sistema sem atrito.

Se ao invés de retirarmos o atrito, retirarmos as paredes laterais formando uma

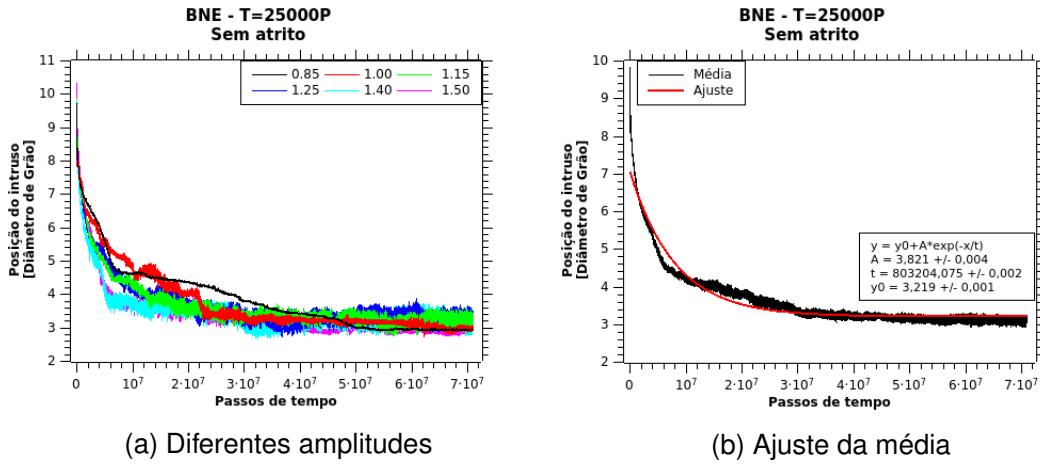


Figura 12 – Amostra da queda do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 25000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema não possui atrito. A figura ?? possui a média das curvas apresentadas na figura ?? e uma o ajuste de um decaimento exponencial em função do tempo, da posição do intruso até o fundo do sistema.

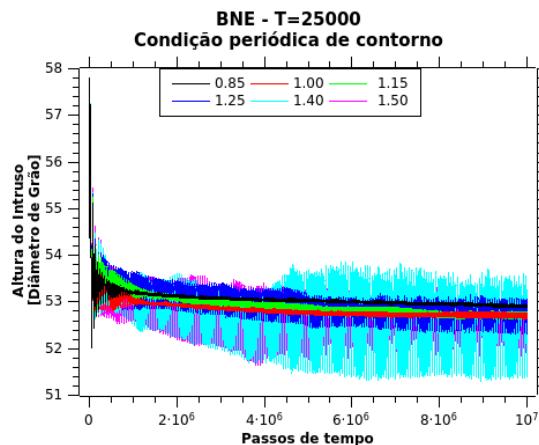


Figura 13 – Média de 5 amostras da posição do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 25000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema não possui paredes, mas condição periódica de contorno.

condição periódica de contorno de largura 28 diâmetros de grão, verificaremos que o *BNE* não acontece para o período de vibração de 25000 passos de tempo, como mostrado na figura ??.

Já no caso de períodos maiores, o BNE ocorre. A figura ?? exemplifica o *BNE* ocorrendo com condição periódica de contorno e período de vibração de 30000 passos de tempo.

Na figura ??, percebemos que acelerações menores que a gravidade não fazem o intruso ascender, enquanto acelerações próximas da gravidade tem um movimento de ascensão lento e em saltos. Por não haver paredes, as correntes de convecção não se formam no sistema, o que faz com que o intruso atinja o topo e não desça mais.

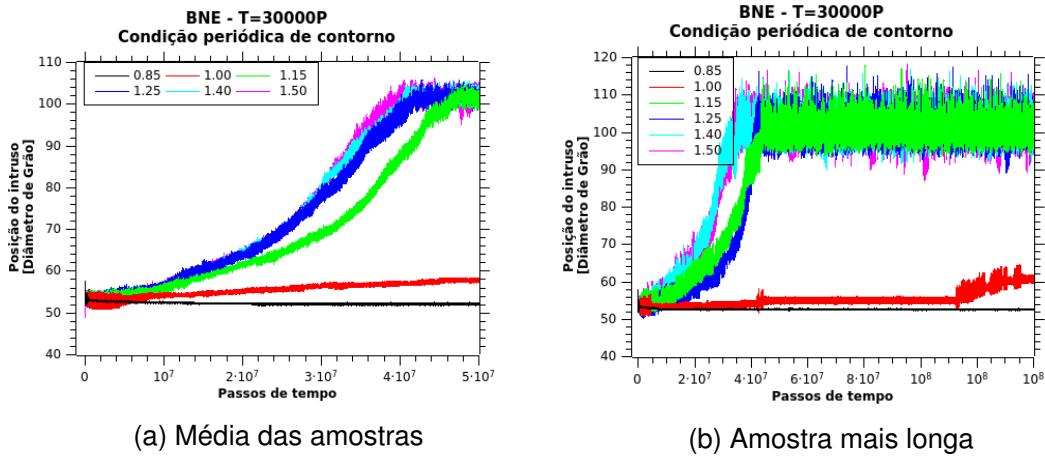


Figura 14 – Média de 10 amostras da subida do intruso em função do adimensional de aceleração. O período de agitação é de 30000 passos de tempo em uma forma senoidal. Este sistema não possui paredes, mas condição periódica de contorno. A figura ?? mostra a amostra com maior passos de tempo de simulação.

No próximo capítulo, descreveremos os modos de transporte de grãos quando arrastados por um fluido.

5 Transporte de Sedimentos

O transporte de sedimentos é o movimento de partículas sólidas, carregadas por um fluido em uma certa distância, que escoam na mesma direção. O transporte é uma combinação entre a ação da gravidade no sistema e as forças de arraste do fluido. Um vasto número de fenômenos estão relacionados com o transporte de fluidos, como em processos industriais (ao transportar minérios por um mineroduto), ou a transformação das paisagens (na formação ou desaparecimento de dunas) [??]. O resultado de ação dos diferentes tipos de fluidos, com características diversas, resultam em fenômenos diferentes, como processos causados por água: erosão pluvial, erosão fluvial e assoreamento; e processos causados pelo vento: dunas, desertificação.

Pode-se classificar os tipos de transporte como mostrado na figura ??, em que os sedimentos são retirados de um local e depositados em outro, em diferentes escalas temporais e espaciais. Uma formação pode aparecer na escala de minutos com alguns centímetros de altura nos fundos de rios e oceanos, até formações geológicas de milhares de anos com centenas de quilômetros de extensão.

Materiais sólidos podem ser transportados pelos seguintes modos: *bed load*, que é o transporte de material rolando sobre uma fina camada da base granular e ocorre quando a força gravitacional é a força mais preponderante no sistema [??] ocorrer no fundo dos riachos e lagos e na superfície de um terreno; *saltation*, que é o transporte de material que colide com a base granular em saltos, ocorrendo quando as forças gravitacionais e de arraste são as mais relevantes no sistema, podendo ser visto em rios e nos processos erosivos dos ventos; e finalmente *suspension*, que é o modo de transporte de material em que as forças de arraste causadas pelas flutuações turbulentas passam a ser da ordem de grandeza do peso dos grãos e dominam a dinâmica do sistema [??], podendo ser observado em tempestades de areia ou ao varrer-se a poeira de casa.

Modelos monofásicos não são capazes de reproduzir a física envolvida neste pro-

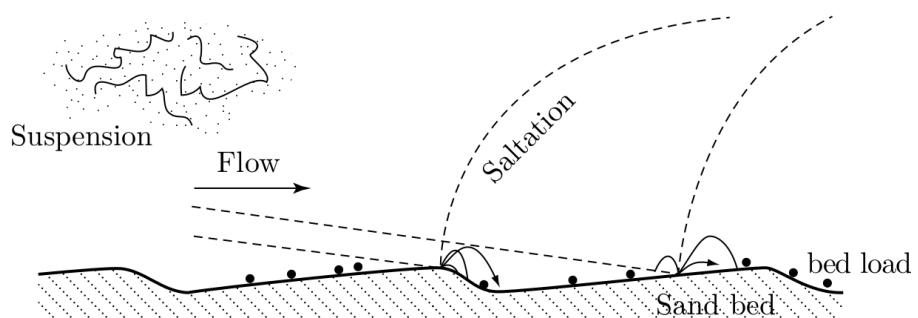


Figura 15 – Diagrama esquemático dos diferentes modos de transporte. Retirado de [??].

blema. Modelos de materiais granulares sem a presença de fluido não exibem as propriedades dos modos de transporte como *bed load*, *saltation* e *suspension*. Assim como os modelos de fluidos sem os sedimentos não são capazes de descrever as propriedades de deposição, de erosão ou mesmo de saturação. Sendo assim, é necessário que o modelo possua as duas fases estejam descritas, sedimento e fluido.

Duas propriedades intrínsecas do arraste são a escala de comprimento de saturação L_{sat} e a escala de tempo de saturação T_{sat} . A escala de comprimento de saturação quantifica a distância característica para que os grãos tenham a densidade máxima transportada pelo fluido q_{sat} . Já a escala de tempo de saturação indica o tempo característico para que a densidade de material transportado decaia quando a velocidade do fluido decair bruscamente, ou para que a densidade de material transportado aumente quando a velocidade do fluido aumentar bruscamente [??].

Visando um modelo que seja capaz de reproduzir tais características, o uso de *Discrete Element Method (DEM)* combinado com o uso de *Finite Element Method (FEM)* simulam o comportamento dos materiais e do fluido, interagindo as diferentes abordagens contínua do fluido e discreta do material granular.

Para descrever o comportamento interativo entre o fluido e o material granular, utilizaremos simulações computacionais baseadas nos trabalhos do professor Dr. Philippe Claudin [??????]. Impondo as condições iniciais do fluido, mede-se o tempo necessário para que o novo regime atinja as condições estacionárias. O número de grãos que escoa pelo sistema, no regime estacionário, fornece o fluxo volumétrico saturado q_{sat} , que serve de parâmetro para comparação e medição do tempo de saturação e do comprimento de saturação. Repete-se o processo para cada parâmetro de entrada, quantificando assim, as diferentes transições entre os modos de transporte.

Inicialmente, validamos o fluido, e então, interagimos fluido e grãos. Na validação do fluido observamos se a discretização contempla o modelo contínuo. Montamos uma malha unidimensional espaçada por um tamanho fixo ao longo de uma reta, que denominamos de direção y . A ideia é que haja escoamento na direção perpendicular, denominada de x , e que as camadas não troquem massa ou pressão, mas quantidade de movimento, que se reflete na velocidade do fluido. Tensão de cisalhamento e velocidade do fluido estão intimamente associados pelo conjunto de equações ?? e ??.

Considerando que o cisalhamento do fluido pode ser predominantemente laminar, ou seja, quando o número de Reynolds (equação ??) for muito pequeno (tipicamente $\mathcal{R} < 0.01$), o fluido escoará em regime laminar. Podemos aproximar o cisalhamento por contribuição apenas da parcela de viscosidade do fluido, e teremos então uma equação do tipo difusão linear, e que possui solução analítica no regime estacionário dada pela equação

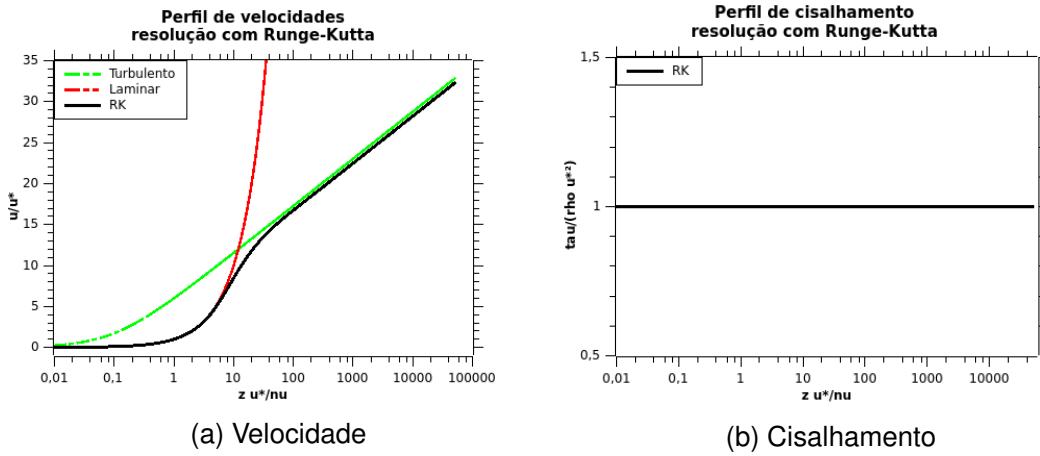


Figura 16 – Resultado do fluido estacionário. Na figura ?? está a solução da equação ?? para a velocidade, utilizando o método de Runge-Kutta de 4^a ordem. Na figura ?? está a solução do cisalhamento.

??:

$$u(y) = \frac{u_*^2}{\nu} y, \quad (33)$$

em que u é a velocidade de escoamento do fluido, u_* é a velocidade característica de cisalhamento imposta ao fluido, ν é a viscosidade do fluido e y é a altura da coluna de fluido.

Considerando que o cisalhamento do fluido pode ser predominantemente turbulento, ou seja, quando o número de Reynolds (equação ??) for muito grande (tipicamente $\mathcal{R} > 1000$), o fluido escoará em regime turbulento. Podemos aproximar o cisalhamento por contribuição apenas da parcela de viscosidade turbulenta, e teremos então o regime estacionário dado pela equação ??.

$$u(y) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left| 1 + \frac{u_*}{0,1\nu} y \right|, \quad (34)$$

em que u é a velocidade de escoamento do fluido, u_* é a velocidade característica de cisalhamento imposta ao fluido, ν é a viscosidade do fluido, $\kappa \simeq 0,4$ é a constante de von Karman e y é a altura da coluna de fluido [??].

Para descobrir o regime estacionário do fluido, utilizamos o método de Runge-Kutta de 4^a ordem sobre a equação ??, que é a equação de van Driest [??], e encontramos a curva da figura ??.

$$\left(\nu + l^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \right) \frac{\partial u}{\partial y} = u_*^2, \quad (35)$$

em que ν é a viscosidade do sistema, u é a velocidade de escoamento do fluido, u_* é a velocidade característica do cisalhamento imposto ao fluido e l é o comprimento de mistura da turbulência, dado pela equação ??.

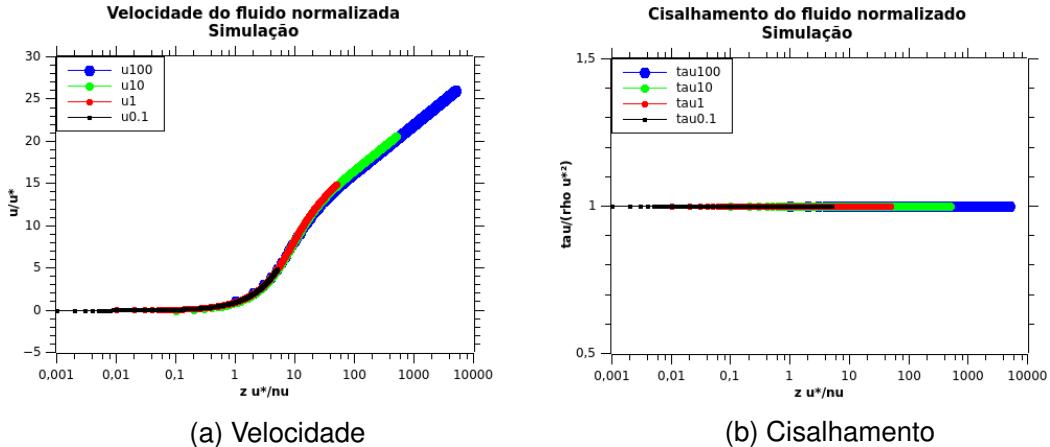


Figura 17 – Resultado do fluido estacionário. Na figura ?? está a evolução do conjunto de equações ?? e ?? com a observação da velocidade. Na figura ?? está o cisalhamento. Em ambos os casos, há variação do número de Reynolds para cada uma das curvas.

As simulações do fluido colapsam em uma única curva com diferentes valores do número de Reynolds. A figura ?? contém os perfis de velocidade normalizados para diferentes números de Reynolds. A validação das simulações é obtida por meio da comparação entre o cisalhamento do fluido no regime estacionário e o esperado nas equações do cisalhamento, em regime estacionário. Apesar da velocidade apresentar um perfil não linear por inserção da turbulência, observamos que o cisalhamento é constante ao longo do perfil de alturas. Com a constância do cisalhamento, tem-se a indicação de que o sistema é invariante no tempo, e portanto está no regime estacionário.

Comparando os perfis do método de Runge-Kutta de 4^a ordem para resolver as equações ??, ?? e ??, vimos na figura ?? que o perfil laminar encaixa-se para números de Reynolds baixos e que o perfil turbulento encaixa-se em números de Reynolds altos. Por se tratar do regime estacionário, o perfil de cisalhamento é uma constante, como na figura ??.

Após checado que as simulações do fluido convergem para a solução apresentada pelo Runge-Kutta de 4^a ordem, apresentado na figura ??, e que o perfil de cisalhamento do fluido é constante ao longo de toda altura, apresentado na figura ??, inserimos os grãos no sistema e verificamos se as propriedades ainda continuam válidas.

A figura ?? mostra o cisalhamento de um sistema com 8000 grãos, com dispersão dos diâmetros em 20%, constante de mola na direção normal $k_n = 1000$, constante de mola na direção tangencial $k_t = 750$, coeficiente de amortecimento $\gamma = 13,6265$, coeficiente de atrito $\mu = 0,5$, distribuídos em uma base de 200 diâmetros de grão, com condição periódica de contorno, imersos em um fluido de razão de densidade 1/2, número de Reynolds $\mathcal{R} = 0.1$ e número de Shields $\Theta = 0.01$. O resultado é amostrado em 20 simulações, com o cálculo

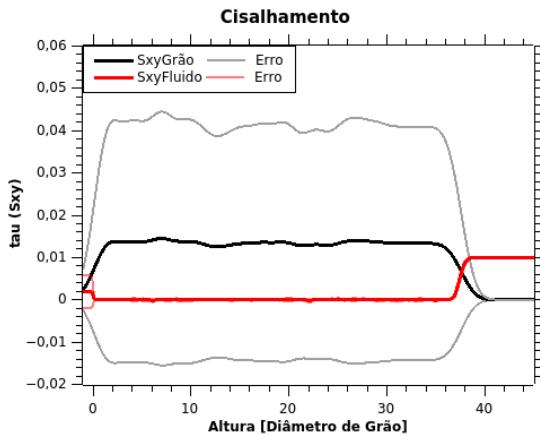


Figura 18 – Perfil de cisalhamento dos grãos e do fluido no regime estacionário.

de tensão de cisalhamento nos grãos descrito pela equação ?? [????]:

$$\sigma_{xy} = \sum_i \sum_j \frac{\vec{F}_{i,j} \cdot \hat{x} \vec{r}_{i,j} \cdot \hat{y}}{2d\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-\frac{(y-r_i \cdot \hat{y}-r_{i,j} \cdot \hat{y})^2}{w}} ds, \quad (36)$$

em que σ_{xy} é o perfil de cisalhamento que os grãos sofrem, i e j são os índices dos grãos que estão em contato, $\vec{F}_{i,j} \cdot \hat{x}$ é a componente x da força de contato entre os grãos, $\vec{r}_{i,j} \cdot \hat{y}$ é a componente do vetor de contato entre os grãos, d é o diâmetro médio dos grãos, y é a altura do perfil analisado, $r_i \cdot \hat{y}$ é a posição do grão e a integral é uma função de *coarse-graining*, que deve ser positiva e normalizada. Neste caso escolhemos a função gaussiana para melhor suavização do perfil de cisalhamento.

Para o sistema da figura ?? escolhemos os parâmetros do número de Shields e de Reynolds que não arrastassem os grãos, para podermos analisar a influência do fluido no regime estacionário. O perfil de cisalhamento transmitido do fluido para os grãos encaixa-se dentro da faixa esperada, apesar dos cisalhamentos não serem os mesmos, a convergência não é exata por se tratar da interação do meio contínuo com o meio discreto.

Até agora, estivemos preocupados com a consistência física do problema. Os próximos passo são reproduzir os modos de transportes *bead load* e *saltation* descritos por Orencio Durán [??] e medir os tempos de para a acomodação do regime estacionário, determinando assim o tempo de saturação dos modos de transporte dos sedimentos.

6 Cronograma e Plano de Estudos

6.1 Cronograma

Apresentamos uma proposta de doutorado sanduíche para iniciar dos trabalhos com o prof. Dr. Philippe Claudin, do laboratório *Physique et Méchanique des Millieux Hétérogènes* (PMMH) da *École Supérieure de Physique et Chimie Industrielles de la ville de Paris* (ESPCI) em Setembro de 2018 e retornar ao Brasil em Julho de 2019. A tabela ?? contém a proposta das atividades do doutorado sanduíche. Pretende-se contribuir com o desenvolvimento científico através da escrita de ao menos um artigo, publicado em periódico que possua alto fator de impacto ao final desta parceria.

Atividades	Mês do ano											
	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	
Revisão bibliográfica	X	X	X	X	X	X	X	X				
Equacionamento do modelo	X	X	X	X	X							
Escrita do código fonte		X	X	X	X	X	X	X	X			
Validação do modelo			X	X	X	X	X	X	X	X		
Escrita da tese			X	X	X	X	X	X	X	X	X	
Resultados preliminares			X	X								
Ajustes dos parâmetros						X	X	X				
Análise dos resultados finais								X	X	X	X	
Participação em congresso					X	X						
Escrita do artigo									X	X		

Tabela 1 – Atividades programadas para a realização do doutorado sanduíche.

Após o retorno ao Brasil, pretendemos seguir com o cronograma apresentado na tabela ??, que contempla o encerramento desta tese pela compilação dos resultados obtidos durante o tempo de desenvolvimento do sanduíche e anteriormente.

Atividades	Mês do ano				
	Ago	Set	Out	Nov	Dez
Compilação dos resultados	X	X			
Escrita da tese	X	X	X		
Marcação da banca				X	
Defesa da tese					X

Tabela 2 – Atividades programadas para a realização após o retorno do doutorado sanduíche.

6.2 Plano de estudos do doutorado sanduíche

Faremos uma revisão da bibliografia baseada nos métodos de simulação de materiais granulares, o qual o candidato, o orientador e o coorientador já possuem experiência e publicações internacional. A adição as técnicas de simulação da mecânica dos fluidos ao problema caracteriza-o como um problema de transporte. Tal revisão tem o intuito de aprimorar as técnicas computacionais e o melhor embasamento no equacionamento da interação entre fluido e granular, além de verificar o estado da arte e as últimas tendências do problema.

Como a definição do trabalho e de validação prévia, revemos a forma de equacionar a mecânica dos fluidos. O intuito é de encontrar uma forma computacional mais estável para resolver o FEM. Estudamos o sistema descrito no artigo *"Numerical simulation of turbulent sediment transport, from bed load to saltation."*, publicado na *Physics of Fluids*, de autoria do Dr. Philippe Claudin, o coorientador [??].

Aprimoraremos o código fonte, adequando das equações que regem o sistema. Validaremos o modelo baseando-se nos resultados da literatura, como os modos de transportes e suas propriedades. Utilizaremos as métricas já descritas pela geografia física e pela mecânica estatística.

Analisaremos os resultados preliminares do transporte de grãos como base para o início da validação das equações do modelo e das regras que regem o sistema, a fim de obter resultados que exprimam a realidade. Em seguida, ajustaremos os parâmetros necessários para a realização específica das propriedades na qual desejamos observar e documentar em forma de artigos e na base da tese a ser escrita.

A participação em um congresso na área e a publicação em periódico internacional de relevância tornam-se de importantes para a divulgação das ideias e dos resultados. O congresso tem objetivo de fazer contatos com outros grupos de pesquisa, aprimorando assim as habilidades e a colaboração entre os assuntos tratados em âmbito internacional. O artigo promove boa oportunidade posicionar bem o Brasil e o CEFET-MG com as revistas de relevância para a ciência internacional. O código fonte é um dos produtos diretos da pesquisa, e que pode ser patenteado após a conclusão da mesma.

7 Conclusões Parciais

Para os as simulações do BNE conseguimos reproduzir as propriedades de ascensão do intruso com diferentes densidades, diferentes amplitudes de vibração e diferentes frequências de vibração, observando a importância do atrito nas paredes do sistema. Mais do que isso, conseguimos realizar o BNE em um sistema que possui condição periódica de contorno e suas diferenças para o sistema de caixa fechada.

Para o sedimento de transportes, conseguimos validar as propriedades físicas que regem o sistema, condizendo simulação com a conservação de movimento. Validamos o fluido de acordo com a literatura e acoplamos grão e fluido de forma a interagirem sobre as leis da física.

Apêndices

APÊNDICE A – Artigos publicados

A seguir os artigos publicados desde o início desta pesquisa. O primeiro artigo apresentado refere-se a publicação feita sobre este doutoramento, com resultados mistos das técnicas utilizadas na dissertação de mestrado [??] e este projeto de tese. O segundo e terceiro artigos apresentados referem-se a publicações feitas durante a dissertação, mas que expressam as técnicas utilizadas neste projeto de tese.

A.1 *Methods of parallel computation applied on granular simulations*

Este artigo foi publicado no quatrienal do congresso *Powders & Grains 2017*, que é o maior congresso sobre materiais granulares, e que está em sua 8^a edição.

Methods of parallel computation applied on granular simulations

Gustavo H. B. Martins^{1,*} and Alibens P. F. Atman^{1,2,3, **}

¹Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - PPG-MMC, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Av. Amazonas 7675, 30510-000, Belo Horizonte, MG, Brazil.

²Physics and Mathematics Department, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Av. Amazonas 7675, 30510-000, Belo Horizonte, MG, Brazil.

³Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Sistemas Complexos (INCT-SC).

Abstract. Every year, parallel computing has become cheaper and more accessible. As consequence, applications were spreading over all research areas. Granular materials is a promising area for parallel computing. To prove this statement we study the impact of parallel computing in simulations of the BNE (Brazil Nut Effect). This property is due the remarkable arising of an intruder confined to a granular media when vertically shaken against gravity. By means of DEM (Discrete Element Methods) simulations, we study the code performance testing different methods to improve clock time. A comparison between serial and parallel algorithms, using OpenMP® is also shown. The best improvement was obtained by optimizing the function that find contacts using Verlet's cells.

1 Introduction

Granular materials have high relevance in Nature as well in humans activities like in mining, in food industry, in construction technology [3–9]. Basically, granular materials are everywhere, from sand to snow, from iron ore pellets to corn grains, from dust to stones. This ubiquity justify the high importance to know their behavior in order to use and manipulate them under different situations.

Several phenomena displayed by granular materials are quite surprising, and in general is a very difficult task to predict the behavior of a substantial quantity of granular material subjected to external loading, a very common situation. Perform experiments under controlled environment is the most desired approach to acquire knowledge about these systems, but most of time only with a detailed modeling of the system is possible to verify theoretical hypothesis. Thus, it is essential to develop a reliable computational model able to predict and reproduce granular behavior under different situations, and increasing system sizes.

Given the importance and presence of granular materials in the world, simulations offer lots of advantages for testing possible characteristic states, to predict behaviors, to save money in execution of projects, and to help plan next moves in engineering for instance. But some disadvantages may be present also, as the increasing of computation time for large systems sizes. With the increasing number of agents in simulation, higher is the computation

time. Most cases, this increasing relation is quadratic in time because the nature of operations.

To improve simulations, and save time, more than one machine can execute the tasks at same time. Parallelization can solve single parts of the problem separately and get them together as part of the final solution, saving total operation time. Also, many researchers are using parallel computation resources in scientific programs to simulate DEM in particles systems [1, 2]. These DEMs are commonly used to simulate different kind of systems, like dense granular materials.

Is possible to perform parallelization in clusters of pc's or multicore computers, since they have more than one CPU (Central Processing Unit) available, that exchange information between them. In the model we use, some operations can be done separately, each one in one processor. More processors used, generally result in lower total execution time from a given job. The increasing number of cores in processors nowadays has turned this possibility very accessible. Also, GPUs (Graphics Processing Units) are becoming a cheaper option to improve a lot computational power.

Given all these possibilities to improve simulations, we propose to measure different techniques to simulate a paradigmatic example of granular system, the Brazil Nut Effect (BNE), and compare the performance of the algorithms. The BNE is a typical segregation phenomena observed in granular materials, which still have several open issues to be explored by simulations. We present results of BNE with frictional and frictionless walls.

In section 2, the methodology to simulate the system is shown, with different proposals to improve the time spent

*e-mail: gmartins@adm.cefetmg.br

**e-mail: atman@dppg.cefetmg.br

on serial and parallel algorithms, and some results. In section 3, the BNE results using these codes. In section 4, the main conclusions we got from our experiments.

2 Methods to save time in simulations

To simulate granular systems computationally, some models can be used [10]. One of this models considers rigid grains which are allowed to display some degree of interpenetrations, which are used in Kelvin-Voight rheology model, Cundal-Strack elastic contact in normal directions, and Coulomb friction in tangent direction, as shown in figure 1. By this, MD (Molecular Dynamics, that is a DEM) can be used [10–12] to integrate the motion equations of the grains directly from Newtons' laws. By choosing an appropriated time step, several different methods can be used to integrate these equations.

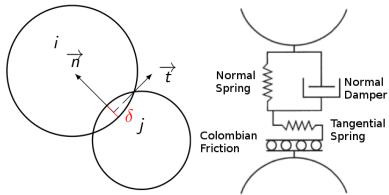


Figure 1. Force model between grain's interactions. i and j are particles that have contact each other. δ is the interpenetration value between the contact ij . n is the direction of the normal contact force. t is the direction of the tangential friction force.

In MD, a predictor-corrector method is used, and its scheme can be seen in Figure 2. The routine *Predict states* solves the kinematic equations over all grains over a single step. The routine *Detect contacts* find grains in contacts each other and store into a list. For the implementation without routine *Set list of neighbors*, *Detect contacts* look for all possible pair of grains for contacts, at every time step, and requires two loops over all grains. Otherwise, *Detect contacts* focus the search to the list of neighbor grains, and require one loop over the neighbor list. Both cases, it is produced a list of contacts, with the predicted states. The routine *Calculate forces* calculate the contact forces and also gravitational, requiring one loop over all particles and one loop over the list of contacts. The routine *Correct predicted states* corrects the predicted states and requires one loop over all particles. If the routine *Set list of neighbors* have Verlet's list implemented, it will search all possible pairs of neighboring grains, and requires two loops over all grains with a given frequency. If the routine *Set list of neighbors* have Verlet's cells implemented, it will search all neighbors grains' dividing the space in regions and look for possobli pair of contact grains only inside a cell and its neighboring cells. It requires one loop over all grains and other over all grains in the cells' neighbors.

To parallelize the simulation, all barriers should be identified to do a proper implementation. The first barrier is a temporal barrier, and happens in simulation each step. This first barrier can't be jumped by the temporal

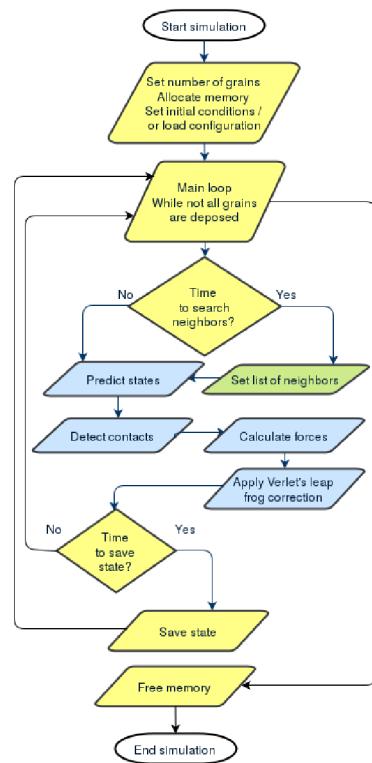


Figure 2. Flowchart of the simulation to simulate granular system using MD. Yellow operations can't be parallelized. Blue operations can be parallelized using CPUs. Green operation is the function that consume most processing, and can be parallelized based onto the type of implementation: *Set list of neighbors* as Verlet's list is the first improvement to reduce time in simulations. *Set list of neighbors* as Verlet's cells is the second improvement to reduce time in simulations.

dependency of the system, as future depends on all past calculation done. Each particle can be treated independently, and at that point, the following routines *Predict states*, *Detect contacts*, *Correct predicted states* and *Set list of neighbors*, using Verlet's list, have no barrier to parallelize, so all loops were done to distribute all calculations to each processor available independently to read and write on memory. In the routine *Set list of neighbors*, using none of Verlet's improvement, the *Set list of neighbors* have no function, once all time steps the contact is calculated inside *Detect contacts*, and no barrier is present in parallelization. If the routine *Set list of neighbors* is using Verlet's cells, one barrier happens to insert grains in the cell it belongs, because to write on one same cell, two processors may try to do at same time. In the routine *Calculate forces* a barrier may happen, depending on implementation. If the 3rd Newton's law is applied on both bodies at same computational sequence when one contact happen, a barrier should be present to prevent memory concurrency by two or more contacts in a particle. This implementation gives an advantage of computation in serial execution that reduces the calculation by half, but a disadvantage in parallel execution by one barrier. The way done here is to calculate the pair of action and reaction separately, in each particle's loop.

The most expansive routine is detect contacts that searches all grains in contact each other, and its computational complexity can be written in function of the number of grains (n), as $O(n^2)$ with Verlet's list, and $O(n \log n)$ with Verlet's cells. Other routines have computational complexity $O(n)$. So, the total complexity of this algorithm can be written as $O(n^2)$ for Verlet's list, and $O(n \log n)$ for Verlet's cells.

2.1 Time spend

The clock time to simulate the system depends on the number of particles, the number of steps the system is simulated, the dynamic of the grains, the number of process running on the machine or cluster, the machine or cluster itself, the method used to implement the solution and many other controllable and uncontrollable variables.

To have an optimized parallel code, one need to know how much time serial functions costs, and their parallelizable portion. The results of time spent by each routine, in seconds, can be found on table 1, table 2 and table 3. The function *Detect contact* is the one which displays best results for application of parallization algorithm. In fact, Verlet's list and Verlet's cells are optimizations for the search algorithm. Both saves computational time and store closer grains into one list. The system do not update the neighbor list all steps of simulation, but only at a given frequency.

Table 1 shown the profile of serial runs of the code with 10^3 grains. For this number of grains, Verlet's cells and Verlet's list have little impact on execution times, but the simple search is the slowest, as expected. Table 2 have the profile of serial running of the code for 10^4 grains, and at this number of grains, Verlet's cells are faster than Verlet's list. Table 3 have the profile of serial running of the code for 10^5 grains, only for Verlet's list and Verlet's cells, because the simplest implementation got no result running after one week with this number of grains, and Verlet's cells are still faster than Verlet's list.

To compare and understand the parallelization, some metrics are defined. One of them is the performance of the system, that is the clock time measured by running that code. Faster codes gives lower results. Our results of performance can be found in figure 3, and for simulations with number of grains higher than 10^3 , Verlet's cells gives best results.

The speedup is the comparison between clock time of execution in serial and the clock time of execution in parallel of same algorithm. It gives the tendency of the parallelization of the code. Best results gives higher curves. Our results of speedup, shown in figure 4, evince that parallelization decreased clock time to perform simulations above than 10^3 particles in the system. We can also conclude that *Detect contacts* without Verlet's implementations and Verlet's list are much more parallelizable than Verlet's list.

The efficiency is the comparison between speedup and the number of processors used. It gives the average utilization of each processor in the algorithm. Best results tends

Table 1. Clock time spent, in seconds, on each routine of serial running of the code for 10^3 grains for 10^3 time steps.

Function	Simplest	List	Cells
Predict states	0.01	0.03	0.03
Detect contact	22.47	0.15	0.18
Calculate forces	0.01	0.01	0.01
Correct states	0.01	0.04	0.02
List of neighbors	--	0.22	0.01

Table 2. Clock time spent, in seconds, on each routine of serial running of the code for 10^4 grains for 10^3 time steps.

Function	Simplest	List	Cells
Predict states	0.27	0.19	0.21
Detect contact	2048	1.98	1.84
Calculate forces	0.09	0.06	0.05
Correct states	0.27	0.34	0.30
List of neighbors	--	23.18	0.05

Table 3. Clock time spent, in seconds, on each routine of serial running of the code for 10^5 grains for 10^3 time steps.

Function	Simplest	List	Cells
Predict states	--	2.93	2.87
Detect contact	--	19.87	19.77
Calculate forces	--	0.93	0.86
Correct states	--	3.87	3.73
List of neighbors	--	2,322.96	0.59

to have value 1, the full use of each processor. Figure 4 shown us that *Detect contacts* without Verlet's implementations and Verlet's list uses more the computational resources at same time than Verlet's cells implementation. For higher number of grains, they occupy more the computational resources, justifying the good use of parallelization with large systems.

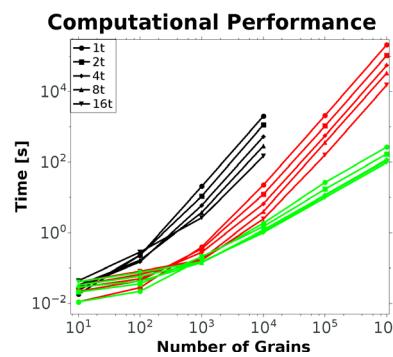


Figure 3. Performance of the system. This compares the results without Verlet's methods (in black), Verlet's list (in red) and Verlet's cells (in green). The number of processors used to simulate varies from 1 to 16, indicated on the legend.

3 Brazil Nut Effect (BNE)

The system has been validated comparing results with the theory of BNE [8, 9, 13, 14]. BNE is a segregation phe-

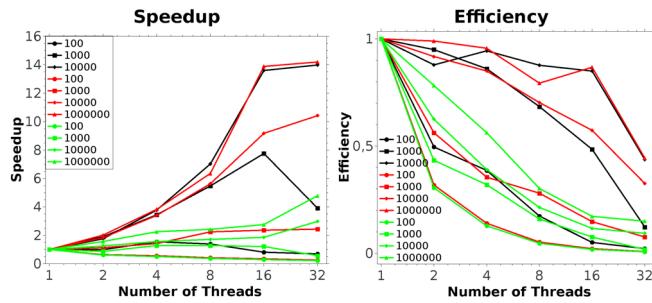


Figure 4. Speedup and Efficiency of the system. This compares the results without Verlet's methods (in black), Verlet's list (in red) and Verlet's cells (in green). The number of grains used to simulate varies from 100 to 1000000, indicated on the legend.

nomena which occurs when a system is shaken and a grain which is larger than the other grains in the media, rises to the surface. Friction is also an important influence to BNE, as can be seen in Figure 5, the larger grain rises in both cases for dimensionless accelerations higher than 1.00, but comparing friction walls with frictionless walls, the intruder with friction walls rises much more than the one without friction.

The parameters of the simulated system were: 2500 grains, uniform polydispersion of the radius of grains around 5%, friction coefficient of 0.5 between grains, and between grains and walls, normal spring stiffness of 1000 adimensional unities [3], tangential spring stiffness of 750 a.u., the radius of the intruder equals 3 times the radius of the larger grains in the media, density of the system equals to π^{-1} in a. u., critical damping coefficient in normal direction, time step of one tenth of the typical colision time for the smallest grains in the system. An imposed sinusoidal force is submitted to the box at 2500 a.u. and the dimensionless acceleration, $\Gamma = A\omega^2/g$, is varying between 0.85 to 1.5.

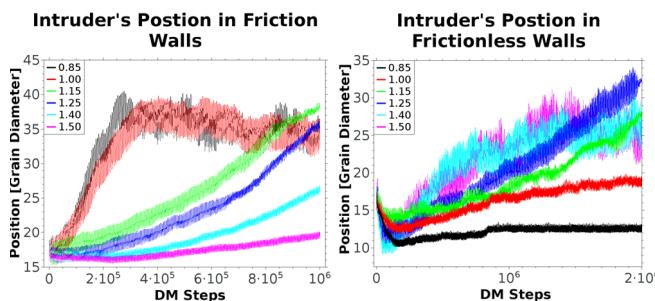


Figure 5. BNE with different amplitudes on the vibration. At left, grains have friction with walls. At right, walls have no friction.

4 Conclusions

We have presented the performance of serial and parallel MD code to simulate granular systems, with 3 different

implementations on the computational function that costs most. The implementation that shown best performance was Verlet's cells, and parallelization present higher gain with increasing number of grains. The BNE simulations evince that intruder's ascension is faster and get higher stationary positions when friction is present at grains and walls.

Acknowledgements

We thanks to CEFET-MG that gives us materials and conditions to develop our research. Special thanks to CEFET-MG, FAPEMIG, CAPES and CNPq for funding the research.

References

- [1] Radeke, Charles A. and Glasser, Benjamin J. and Khiast, Johannes G., *Chemical Engineering Science* **65**, 6435-6442 (2010).
- [2] Cruz-Hidalgo, Raúl and Kanzaki, T. and Alonso-Marroquin, F. and Luding, S., *Powders and Grains 2013 AIP Conference Proceedings* **1542**, 169-172 (2013).
- [3] Atman, A. P. F. and Claudin, P. and Combe, G., *Computer Physics Communications* **180**, 612–615 (2009).
- [4] Andreotti, B. and Forterre Y. and Pouliquen O., *Granular Media: Between Fluid and Solid* (Cambridge University Press, São Paulo, 2013).
- [5] Atman, A. P. F. and Claudin, P. and Combe, G. and Martins, G. H. B., *Granular Matter* **16** 193-201 (2014).
- [6] J. Duran, A. Reisinger, and P. de Gennes, *Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials* (Springer, New York, 1999).
- [7] Atman, A. P. F. and Kolb, E. and Combe, G. and Paiva, H. A. and Martins, G. H. B., *Powders and Grains 2013 AIP Conference Proceedings* **1542**, 381-384 (2013).
- [8] Mehta, A., *Granular Physics* (Cambridge University Press, São Paulo, 2007).
- [9] Herrmann, H. and Hovi J. and Luding S., *Physics of Dry Granular Media* (Springer, Netherlands, 2013).
- [10] Pöschel, T. and Schwager, T., *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms* (Springer, Berlin Heidelberg, 2005).
- [11] Allen, M. P. and Tildesley, D. J., *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1991).
- [12] Hedman, Fredrik, *Algorithms for Molecular Dynamics Simulations* (Institutionen för fysikalisk kemi, oorganisk kemi och strukturkemi, 2006).
- [13] Gutiérrez, G. and Pozo, O. and Reyes, L. I. and Drake, J. F. and Ott, E. and others, *Europhysics Letters* **67**, 369-372 (2004).
- [14] Brito, R. and Soto, R., *The European Physical Journal Special Topics* **179**, 207-219 (2009).

A.2 *Mechanical properties of inclined frictional granular layers*

Este artigo foi publicado na *Granular Matter*, uma das maiores revistas sobre material granular e é uma revista A2 segundo a classificação *qualis* da CAPES e possui fator de impacto de 1,762.

Mechanical properties of inclined frictional granular layers

A. P. F. Atman · P. Claudin · G. Combe ·
G. H. B. Martins

Received: 8 July 2013 / Published online: 29 January 2014
© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014

Abstract We investigate the mechanical properties of inclined frictional granular layers prepared with different protocols by means of DEM numerical simulations. We perform an orthotropic elastic analysis of the stress response to a localized overload at the layer surface for several substrate tilt angles. The distance to the unjamming transition is controlled by the tilt angle α with respect to the critical angle α_c . We find that the shear modulus of the system decreases with α , but tends to a finite value as $\alpha \rightarrow \alpha_c$. We also study the behaviour of various microscopic quantities with α , and show in particular the evolution of the contact orientation with respect to the orthotropic axes and that of the distribution of the friction mobilisation at contact.

Keywords Granular systems · Elasticity · Jamming · DEM simulations

A. P. F. Atman

Departamento de Física e Matemática and National Institute of Science and Technology for Complex Systems, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG), Av. Amazonas 7675, Belo Horizonte, MG 30510-000, Brazil
e-mail: atman@dppg.cefetmg.br

P. Claudin (✉)

Laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes (PMMH), Univ. Paris Diderot, UMR 7636 CNRS, ESPCI, Univ. P. et M. Curie, 10 rue Vauquelin, 75231 Paris Cedex 05, France
e-mail: claudin@pmmh.espci.fr

G. Combe

UJF-Grenoble 1, Grenoble-INP, CNRS UMR 5521, 3SR Lab., B.P. 53, 38041 Grenoble Cedex 09, France
e-mail: gael.combe@ujf-grenoble.fr

G. H. B. Martins

Departamento de Física e Matemática, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG), Av. Amazonas 7675, Belo Horizonte, MG 30510-000, Brazil

1 Introduction

The nature of the jamming transition in granular systems has been investigated during the last decade, see recent reviews [29, 45]. Many studies have focused on frictionless discs or spheres, typically controlled in volume fraction ϕ or in pressure P [30, 32, 33], showing that the jamming transition is critical (scaling exponents, diverging length scale) [14, 32, 46] and related to isostaticity [1–3, 31, 32, 37, 44]. As the system loses its mechanical rigidity at the transition, its shear modulus G is found to vanish as a power law with respect to the distance to jamming $\phi - \phi_c$, where ϕ_c is the critical volume fraction. The properties of frictional granular packings have also been investigated, see e.g. [40], but, in this context of elastic properties close to jamming, most of the studies have considered homogeneous systems under isotropic pressure [1–3, 11, 22, 23, 39, 42, 47]. In the frictional case, the Liu-Nagel jamming concept [27, 28] must be revised [9]. In particular, jamming and isostatic points do not coincide any more [45], and one thus can expect a finite shear modulus at the transition.

In this paper, we consider static layers of frictional grains under gravity, by means of two-dimensional discrete element simulations (standard Molecular Dynamics [36]), and investigate their mechanical properties through the analysis of their stress response to a localized overload \mathbf{F}_0 at the layer surface, a technique particularly developed by and dear to R.P. Behringer, see e.g. [5, 16]. Expanding the work published in [8], we present here the detailed analysis of layers prepared with three different protocols. The outline is as follows. We first describe the numerical system, its preparation and the computation of the stress response. In the next section, we present an orthotropic elastic analysis of the stress profiles, and detail the fitting procedure. Then, a section is

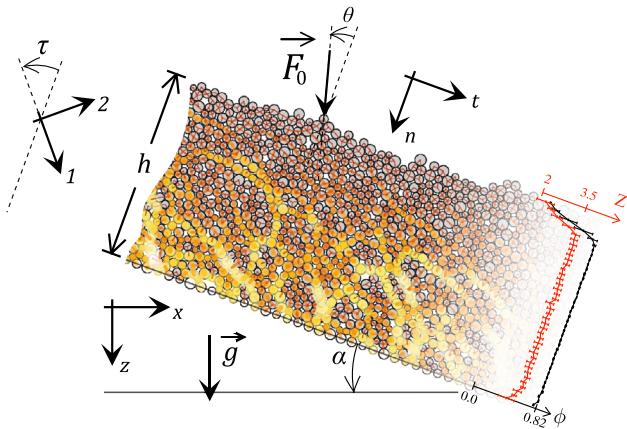


Fig. 1 System set-up and notations. x is the horizontal axis. z is the vertical one, along which acts gravity \mathbf{g} . The granular layer (here GG preparation), of average thickness h , is inclined at an angle α with respect to horizontal. t and n are the axis respectively tangential and normal to the layer. A localized force \mathbf{F}_0 , which makes an angle θ with respect to n , is applied on a grain close to the surface of the layer. The stress responses σ_{nn} and σ_{tn} to this overload are measured at the bottom of the layer (fixed grains in white). Axis $(1, 2)$, making an angle τ with respect to (n, t) , are those of the orthotropic elastic analysis. Black line volume fraction profile $\phi(n)$. Red line coordination number profile $Z(n)$. These are for the GG preparation. *Orangish colors* on grains: force chains (color figure online)

devoted to the measure and the interpretation of the microscopic data. Finally, conclusions and perspectives are drawn.

2 Numerical simulations

2.1 Numerical model and set-up

The numerical model is that described in [5, 18], with $N=3,600$ polydisperse frictional discs coupled, when overlapping, by normal and tangential linear springs, tangential forces being limited by the Coulomb condition with a friction coefficient $\mu = 0.5$. The typical thickness of the layer is $h \simeq 23$ grain diameters, i.e. a system aspect ratio around $1/6$. The layers are prepared at a *fixed* angle α with respect to the horizontal (see Fig. 1 for notations), and unjamming is approached as α is close to α_c , the critical value above which static layers cannot be equilibrated at that angle and always flow. Note that this unjamming point α_c is close in spirit to the situation of a jammed solid sheared up to its yield-stress [24]. It is also close, but different, to progressively tilted granular layers, which eventually loose their mechanical stability, see e.g., [21, 43].

In our simulations, the volume fraction in the layer is fairly uniform all through the layer depth (see Fig. 1) and roughly independent on the inclination angle. The control parameter for the jamming/unjamming transition is then the sole angle α . This situation is therefore qualitatively different to the homogeneous configurations submitted to isotropic pres-

sure cited above, and is effectively closer to an experimental set-up. No external pressure applied to the topmost layer of particles, i.e. the pressure in the system is due solely to the gravitational force acting on the particles themselves.

2.2 Three preparation protocols

Three different system preparations have been carried out: a grain-by-grain (GG), a rain-like (RL) and an avalanched (AV) deposition of the particles on a rough substrate consisting of fixed but size-distributed particles, inclined at the desired angle α . In the GG protocol, grains are added to the layer one after the other, with no initial velocity, at random t -positions and in contact with those already deposited. The time lag between two successive drops is sufficiently large to ensure the relaxation of the system before the next deposit. As for the RL preparation, all N grains are initially put at regular ‘flying’ positions above the bed, with no contact between the particles and no velocity. Then gravity is switched on, and they all fall down like a rain. Finally, for the AV preparation, we start from an initial steady and homogeneous flow running at a large inclination, then abruptly set the angle to the desired value of α and reduce the kinetic energy of the whole system. The layer is prepared when all grains have eventually reached static equilibrium (see [5] for more details).

Above a certain inclination α_c , these preparation procedures do not converge towards a static layer—the grains do not stop moving. The ‘solid-liquid’ transition occurs rather abruptly, over a typical inclination range $\Delta\alpha \simeq 0.5^\circ$ where only part of the simulations converge. This allows for a value of this critical angle defined at this precision. For both GG and AV preparations, we get $\alpha_c \simeq 20.8^\circ$. We have not studied systematically enough the RL preparation for inclinations around 20° to determine its critical angle with a good precision. However, we expect RL and AV data to be very similar close to α_c as in both cases the grains flow down the slope over long distances—typically several times the system size—before stopping, so that the initial configuration is effectively forgotten.

These three preparations mainly differ in their contact orientation (see Fig. 5). Their volume fractions does not vary much from $\alpha = 0^\circ$ to α_c . Typical values are $\phi \simeq 0.82$ for GG and $\phi \simeq 0.81$ for RL and AV. These are slightly larger than—or similar to—the critical value, estimated in our system at $\phi_c \simeq 0.81$ [12, 34, 39].

2.3 Stress response profiles

Once a layer is deposited, stabilized in an equilibrium state, an additional force \mathbf{F}_0 is applied on a grain close to the free surface, and a new equilibrium state is reached. Taking the difference between the states after and before the overload, one can compute the contact forces in response to \mathbf{F}_0 . Intro-

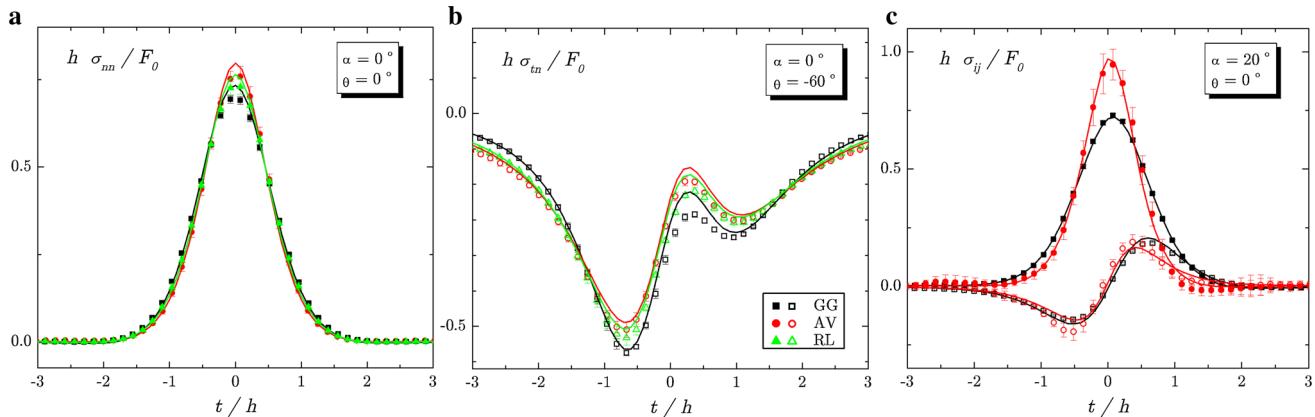


Fig. 2 Stress profiles for the different preparations. The layer inclination α and the overload angle θ are indicated in legend for each panel. Symbols numerical data (filled symbols σ_{nn} , empty symbols σ_{tn} , color

code see legend). Lines elastic fits (see Table 1 for the corresponding values of the fitting parameters) (color figure online)

Table 1 Values of the elastic parameters corresponding to the fits displayed in Fig. 2

$\alpha(^{\circ})$	Prep.	G/E_1	E_2/E_1	ν_{21}	$\tau(^{\circ})$
0	GG	0.403	0.80	0.20	93
	RL	0.303	0.69	0.23	93
	AV	0.275	0.71	0.26	91
20	GG	0.262	0.49	0.17	66
	AV	0.248	0.93	0.27	94

ducing a coarse graining length w , the corresponding stress response can be determined. Taking w of the order of few mean grain diameters (here $w = 6\langle d \rangle$) as well as an ensemble averaging of the data (here, for each tilt angle α , we average over 120–150 independent force loads, distributed on typically 10 layers in total), make the stress profiles quantitatively comparable to a continuum theory [18], such as elasticity, as discussed below. The amplitude of the overload was kept constant for all simulations: $F_0 = 1.0\langle m \rangle g$, where $\langle m \rangle$ is the average mass of the grains. This value is sufficiently small to ensure a linear [6, 7] and reversible response of the system for all values of α , including close to α_c .

Some examples of stress bottom profiles $\sigma_{nn}(t)$ and $\sigma_{tn}(t)$ are displayed in Fig. 2 for different values of the inclination α and of the angle θ that the overload force makes with the normal direction (see Fig. 1). Note that, as we deal with linear elasticity, the stresses can be rescaled by F_0/h . The normal stress data σ_{nn} show classical bell-shaped profiles, which do not differ much for all three preparations when the layer is horizontal ($\alpha = 0$) and the overload vertical ($\theta = 0$), see panel (a). However, one can distinguish between the preparations, especially GG from the two others, looking at the shear stress profiles σ_{tn} in response to a non-normal overload force ($\theta = -60^{\circ}$), see panel (b). The difference between GG and AV profiles is enhanced for the data at an inclination close to α_c , see panel (c).

3 Orthotropic elastic analysis

Experimental and numerical works have shown that the linear stress response of granular systems to a point force is well described by (possibly anisotropic) elasticity [4, 5, 17, 19, 20, 26, 38]. In this section, we introduce the framework of orthotropic elasticity, with which numerical response profiles such as those displayed in Fig. 2 can be fitted. The details of the computation of elastic response are available in “Appendix”.

3.1 Orthotropic elasticity

Orthotropic elasticity is characterized by a stiff axis (here labelled 1) and a soft one (labelled 2), associated to two Young moduli E_1 and $E_2 < E_1$, and to two Poisson coefficients ν_{12} and ν_{21} (note that, for symmetry reasons, $\nu_{12}/E_1 = \nu_{21}/E_2$). There is also a shear modulus G involved in the corresponding relation between stress and strain tensor components (Eq. 4). A last parameter of this modeling is the angle τ that the axes (1, 2) make with (n, t) (see Fig. 1).

Orthotropic stress responses to a point force \mathbf{F}_0 have been analytically computed in [35] for a semi-infinite medium ($h \rightarrow \infty$). For a given τ , they only depend on two combinations of the elastic parameters, noted R and T , (Eq. 14). For an elastic slab of finite layer thickness h , a semi-analytical integration, following the computation performed in [38] for isotropic elasticity, must be done (see “Appendix”). Rough bottom boundary conditions (zero displacement) are imposed. Besides the coefficients R and T , these bottom conditions involve a Poisson coefficient, say ν_{21} , so that, in total, five dimensionless numbers (τ , R , T , ν_{21} and θ) must be specified to produce the normalized bottom stress responses $\sigma_{ij}h/F_0$ as functions of the reduced tangential coordinate t/h .

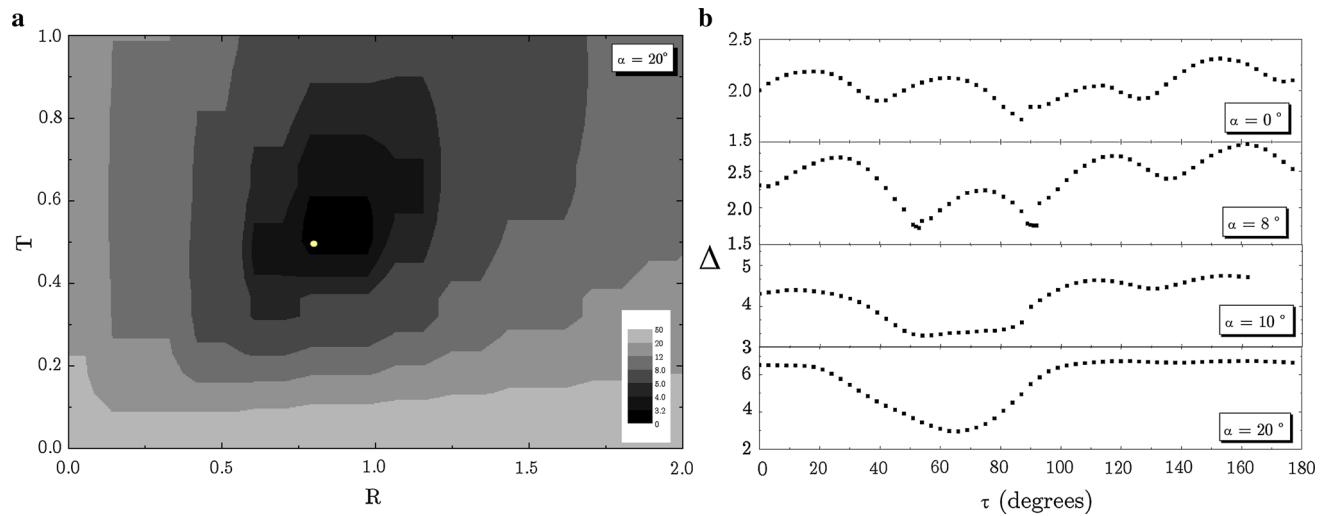


Fig. 3 Fitting technique. **a** Contour plot, in the \$(R, T)\$ parameter plane, of the normalized difference \$\Delta\$ (Eq. 1) between the numerical data and the elastic prediction. The other parameters are \$\nu_{21} = 0.15\$ and \$\tau = 66^\circ\$. The layer inclination is \$\alpha = 20^\circ\$. White bullet location of the best fit. **b**

Difference \$\Delta\$ as a function of the orthotropic angle \$\tau\$ for four values of \$\alpha\$ (see legends). These are GG data. For each of these points, all other parameters are also set to their best fitting values

3.2 Fitting numerical data

The idea is to fit the elastic response profiles to the numerical data, in order to extract the effective elastic parameters of the layer. For a given inclination \$\alpha\$, the four numbers \$\tau\$, \$R\$, \$T\$ and \$\nu_{21}\$ must be adjusted to reproduce at the same time the profiles measured for all three stress components \$\sigma_{nn}\$, \$\sigma_{tn}\$ and \$\sigma_{tt}\$, and for all overload angles \$\theta\$. This is achieved by minimizing the RMS difference

$$\Delta = \sqrt{\frac{1}{N_p} \sum_{\{i,j\}, \theta} \sum_{k=1}^{N_p} \left(\frac{\sigma_{ij}^k|_{\text{num}} - \sigma_{ij}^k|_{\text{elas}}}{\delta\sigma_{ij}^k} \right)^2}, \quad (1)$$

where \$N_p\$ is the number of data points in the profiles, and \$\delta\sigma_{ij}^k\$ is the standard deviation around the mean stress computed from the ensemble averaging.

An example of a contour plot of \$\Delta\$ in the \$(R, T)\$ plane, for given \$\tau\$ and \$\nu_{21}\$, is shown in Fig. 3a. There is a clear deepest point, which corresponds to the best fit. In Fig. 3b, we display \$\Delta\$ as a function of the orthotropic angle \$\tau\$, each point of these curves corresponding to the best fitting \$R, T\$ and \$\nu_{21}\$. These curves have been computed for the GG data at different inclination angles. It shows how the minimum, corresponding to the best fitting \$\tau\$, changes rather abruptly from \$\simeq 90^\circ\$ to \$\simeq 60^\circ\$ around \$\alpha \simeq 9^\circ\$ (see also next section and Fig. 5c).

Some of these fits are displayed in Fig. 2, for various angles \$\alpha\$ and \$\theta\$, and for the different preparations. The overall agreement between the elastic predictions and the numerical data is quantitatively good. In Fig. 4, we show the elastic modulus ratios \$G/E_1\$ and \$E_2/E_1\$ extracted from these fits, as func-

tion of the inclination. \$G/E_1\$ decreases with \$\alpha\$ but does not vanish close to the critical angle, in agreement with the observation that frictional granular systems remain hyperstatic at the unjamming transition [1–3, 23, 42]. Such a discontinuous behaviour at the transition has also been seen in simulations by Otsuki and Hayakawa [34] investigating the rheology of sheared frictional grains close to jamming, and in experimentally created shear-jammed states reported in [9]. The sudden drop of \$G/E_1\$ around \$\alpha \simeq 9^\circ\$ is associated with the change of the orthotropic directions mentioned above. The behaviour of \$E_2/E_1\$ also present an overall decrease with \$\alpha\$, except for the AV data close to \$\alpha_c\$. The complete interpretation of this behavior of the AV data is not entirely clear, but it is clearly related to an increase of friction mobilization at the contacts (see Figs. 5, 6 and discussion below).

4 Microscopic variables

In addition to the above global mechanical properties of the system, we have studied the evolution of various microscopic quantities with \$\alpha\$. The first one of interest is the coordination number \$Z\$, i.e. the average number of contacts per grain, here computed in the bulk of the layer, where it is fairly uniform—it obviously drops down close to the surface. \$Z\$ monotonously decreases with \$\alpha\$ for the GG preparation, while it stays approximately constant for RL and AV data (Fig. 5a). In all cases, it stays always far from the isostatic value \$Z_{\text{iso}} = 3\$ (for frictional grains in 2D). Grains of the bulk that only carry their own weight do not contribute much to the global stability of the contact network. As for so-called rattlers in gravity-free packings (see [13], chap. 6), these grains can be

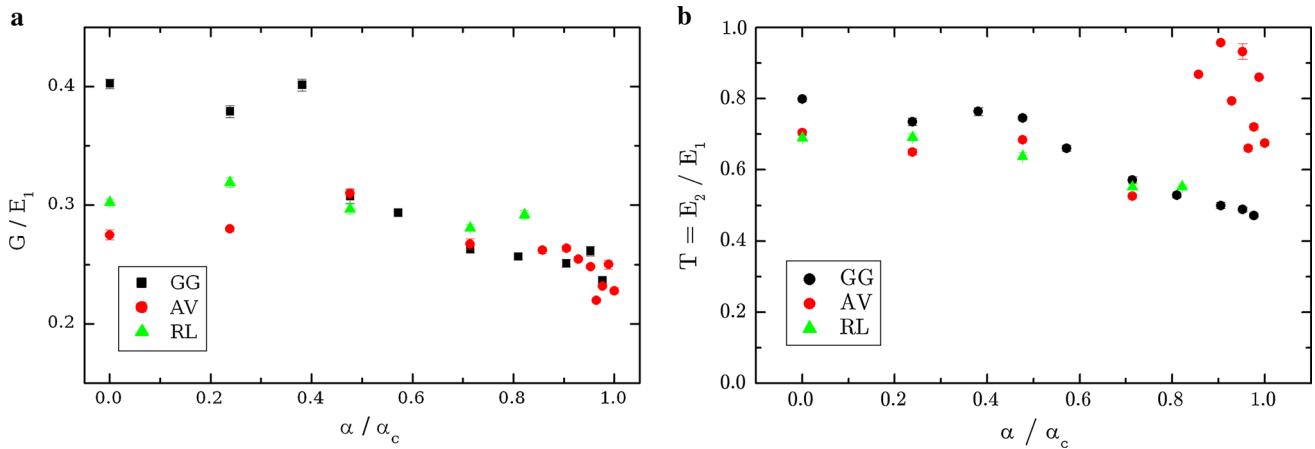


Fig. 4 Shear and Young moduli ratios G/E_1 (**a**) and E_2/E_1 (**b**) as functions of α/α_c . These data include all three preparations GG, RL and AV, see legend (color figure online)

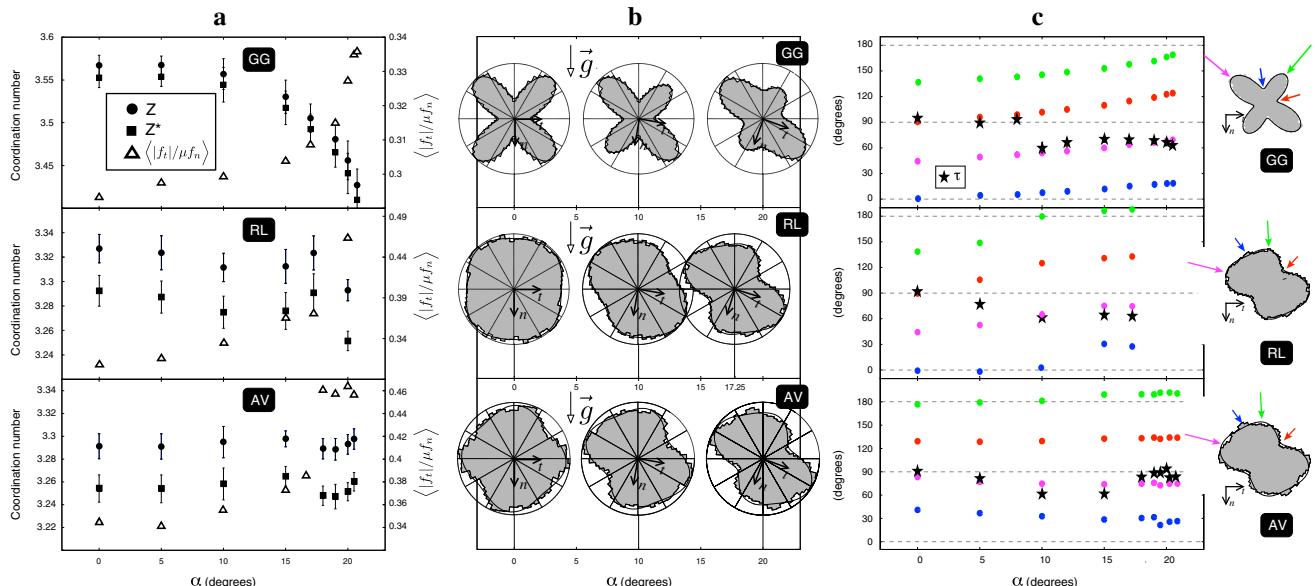


Fig. 5 Microscopic data for the three preparation protocols GG (top), RL (middle) and AV (bottom). **a** Coordination number Z (circle) and modified ('rattlers' removed) coordination number Z^* (square) as functions of the inclination of the layer α . Right y-axis: relative importance of the average friction mobilisation at contact (triangle). **b** Contact angle polar distributions at three inclination angles α . Solid black line fourth-

order Fourier fit. Gravity is vertical (black arrow). **c** Fitted orthotropic elastic angle τ as a function of α (star). The four characteristic angles of the contact angle distribution, computed with respect to the direction n , are also shown—these angles corresponds to the directions of the lobes, and those in between the lobes, see sketch and corresponding coloured arrows in legend (color figure online)

removed from the contact counting, leading to a modified coordination number of the layer Z^* (see Fig. 5a). However, we find that their number is roughly independent of α .

We have also studied the friction mobilisation at the contact level. In the MD simulations, the number of contacts with a ratio of the tangential force f_t to the normal force f_n strictly equal to the microscopic friction μ is zero when static equilibrium is reached. However, some of them are effectively close to the Coulomb criterion. We have first computed the average $\langle |f_t|/\mu f_n \rangle$. This quantity, displayed in Fig. 5a, increases as $\alpha \rightarrow \alpha_c$ for all three preparations, but its overall varia-

tion is weaker for the GG data (see right y-scales), as could be expected. More precisely, we also display in Fig. 6a, b the probability distribution function of the friction mobilisation at contact for the two preparations GG and AV, and for several inclinations. For the GG preparation, the distribution is only slightly skewed towards larger values of $|f_t|/\mu f_n$ when α is increased, but nothing particular happens close to $|f_t|/\mu f_n = 1$. For the AV preparation, however, a peak close to $|f_t|/\mu f_n = 1$ appears for $\alpha \gtrsim 18^\circ$, corresponding to quasi-sliding contacts. Figure 6d shows that they are uniformly distributed all through the layer depth. Following [23, 25, 41], we

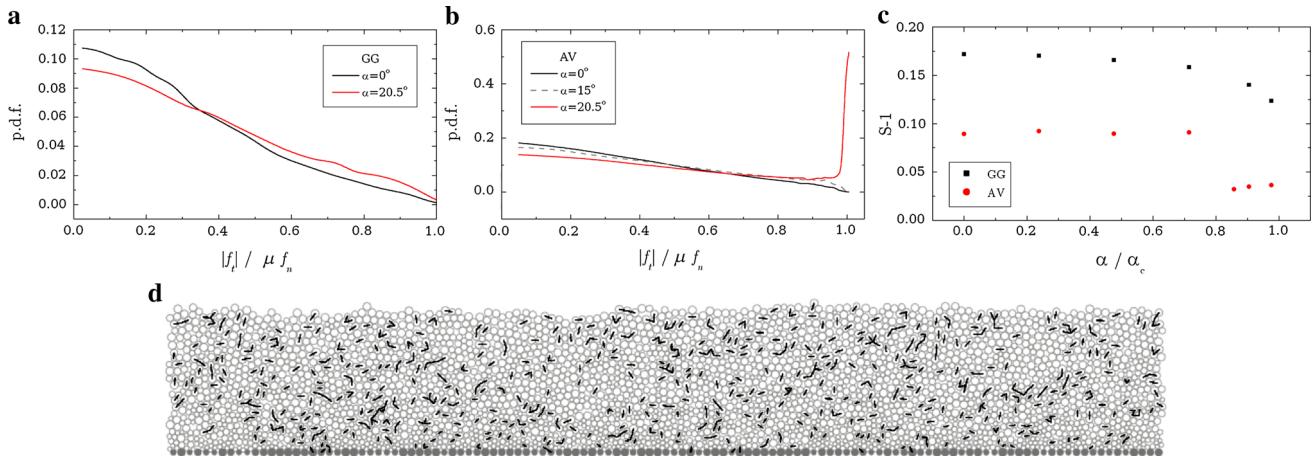


Fig. 6 Probability distribution function of the friction mobilisation at contact $|f_t| / (\mu f_n)$ for the GG (a) and the AV (b) preparations. The distributions for several values of α are displayed. For the AV preparation, the distribution at $\alpha = 18^\circ$ is not shown but is identical to that

at $\alpha = 20.5^\circ$. c Redundancy factor, as defined in [25], as a function of α / α_c . d Spatial distribution of quasi-sliding contacts (bold dashes) in an AV-layer at $\alpha = 20.5^\circ$ (color figure online)

have computed the redundancy factor S , i.e. the ratio of the total number of force degrees of freedom at contacts over the number of equilibrium equations, taking into account these quasi-sliding contacts: $S = (2n_c - n_s)/(3N)$, where n_c is the total number of contacts and n_s is the number of quasi-sliding contacts—recall the system is two-dimensional. We see that S decreases with α (see Fig. 6c), and, for the AV preparation, approaches 1 (the isostatic value), though remaining above this value at α_c .

Finally, we have studied contact angle distributions. Three of these distributions are represented as polar diagrams for $\alpha = 0, 10$ and 20 (or 17.25 for RL) degrees in Fig. 5b. Let us first comment the GG data. The four strongly pronounced lobes are typical of this preparation [13] (chap. 6). The vertical and horizontal directions are always in between these lobes. When the layer is horizontal ($\alpha = 0^\circ$), the orthotropic stiff and soft directions are also found to be (almost) along the horizontal and vertical axis respectively. Note that the fitting procedure effectively gives here $\tau = 93^\circ$ in this case, while $\tau = 90^\circ$ (or 0°) would have been expected for symmetry reasons. This effectively indicates the typical precision we have on the measure of this orthotropic angle. Close to the critical slope, however, the orthotropic orientations are close to those of the lobes, the stiff one being in the direction of the slope. As evidenced in Fig. 5c, the transition between these two microscopic configurations occurs around $\alpha \simeq 9^\circ$, i.e. well below α_c , in correspondence with the drop of G/E_1 between 8° and 10° (see Fig. 4). The polar distributions computed with RL and AV data are more isotropic than in the GG case (Fig. 5b). However, although the lobes are less pronounced, the overall behaviour of the RL data is similar to the GG ones. In the AV case, the orthotropic direction roughly follows that of the lobes over the all range of inclination.

5 Conclusions

To sum up, we have simulated 2D frictional and polydisperse granular layers under gravity inclined at an angle α , and investigated their mechanical and microscopic properties when the unjamming transition is approached. This work tells us what to expect in real experiments, i.e. a layer that becomes elastically softer as $\alpha \rightarrow \alpha_c$, as e.g. inferred from acoustic experiments on a granular packing in the vicinity of the transition [10]. More precisely, the shear modulus G and the stiff Young modulus E_1 both decrease with respect to the soft modulus E_2 , but not to the point at which the system would lose its rigidity before avalanching. In particular, as evidenced by the comparison of the curves in Figs. 4 and 5a, the shear modulus is not found to be a linear function of $Z - Z_{\text{iso}}$ (or $Z^* - Z_{\text{iso}}$), in contrast with the finding of [42] on homogeneous frictional systems, close to isostaticity. In fact, in agreement with the analysis of [21], the idea that the whole granular layer reaches the isostatic limit at the critical angle α_c is too simple because it ignores the anisotropy and inhomogeneity of the packing induced by the preparation and the gravity field. Interestingly, in the simple shear geometry considered in [25], the redundancy factor S does tend to 1 when the critical state is reached, but here remains (slightly) above this value for the avalanched layers, even though some (quasi) sliding contacts appear.

As for perspectives, similarly to what we did for the GG layers in [8], one should compute the vibration modes for the AV layers, taking into account the presence of these quasi-sliding contacts. Also, it could be interesting to use granular simulations with a rolling resistance [15] in order to explore a wider range of ϕ , Z and α .

Acknowledgments We thank I. Cota Carvalho, R. Mari and M. Wyart for fruitful discussions. This work is part of the ANR JamVibe, project # 0430 01. A.P.F. Atman has been partially supported by the exchange program ‘Science in Paris 2010’ (Mairie de Paris) and by a visiting professorship ‘ESPCI-Total’. A.P.F. Atman thanks CNPq and FAPEMIG Brazilian agencies for financial funding, and PMMH/ESPCI for hospitality.

Appendix: Orthotropic elastic response

In this Appendix, we detail elastic calculations on a 2D orthotropic slab of finite thickness h . Following the notations of Fig. 1, we note (1, 2) the orthotropic directions, while (n, t) are the directions respectively normal and tangential to the slab. We note τ the angle between axes (1, 2) and (n, t). For the sake of the computation of the stress profiles in response to a force \mathbf{F}_0 applied at the free surface, one can switch off gravity, and the mechanical equilibrium of the system writes

$$\partial_n \sigma_{nn} + \partial_t \sigma_{tn} = 0 \quad \text{and} \quad \partial_n \sigma_{tn} + \partial_t \sigma_{tt} = 0, \quad (2)$$

where σ_{ij} is the stress tensor. We define the strain tensor u_{ij} from the displacement field u_i as $u_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$. It verifies the compatibility condition:

$$\partial_n^2 u_{nn} + \partial_t^2 u_{tt} - 2\partial_n \partial_t u_{tn} = 0. \quad (3)$$

Introducing the two Young moduli E_1 and $E_2 < E_1$, the shear modulus G and two Poisson coefficients ν_{12} and ν_{21} , the generalised Hooke’s law relating strain and stress tensors writes, in the orthotropic axes, as follows:

$$\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{22} \\ u_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{21}}{E_2} & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2G} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

We call \mathcal{W}_\dagger this 3×3 compliance matrix. It must be symmetric and these coefficients thus verify $\nu_{12}/E_1 = \nu_{21}/E_2$. Elastic energy is well defined if all moduli E_1, E_2, G are positive and $1 - \nu_{12}\nu_{21} > 0$. In (n, t) axes, we have

$$\begin{pmatrix} u_{nn} \\ u_{tt} \\ u_{tn} \end{pmatrix} = \mathcal{W}_\tau \begin{pmatrix} \sigma_{nn} \\ \sigma_{tt} \\ \sigma_{tn} \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad \mathcal{W}_\tau = \mathcal{Q}^{-1} \mathcal{W}_\dagger \mathcal{Q} \quad (5)$$

and the rotation matrix

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \cos^2 \tau & \sin^2 \tau & 2 \cos \tau \sin \tau \\ \sin^2 \tau & \cos^2 \tau & -2 \cos \tau \sin \tau \\ -\cos \tau \sin \tau & \cos \tau \sin \tau & \cos^2 \tau - \sin^2 \tau \end{pmatrix}. \quad (6)$$

The matrix \mathcal{W}_τ can be made explicit as follows:

$$\mathcal{W}_\tau = \frac{1}{E_2} \begin{pmatrix} A & -C & 2D \\ -C & B & 2F \\ D & F & H \end{pmatrix}, \quad (7)$$

with

$$A = T \cos^4 \tau + \sin^4 \tau + 2R \cos^2 \tau \sin^2 \tau, \quad (8)$$

$$B = \cos^4 \tau + T \sin^4 \tau + 2R \cos^2 \tau \sin^2 \tau, \quad (9)$$

$$C = \nu_{21} + \cos^2 \tau \sin^2 \tau (2R - 1 - T), \quad (10)$$

$$D = \cos \tau \sin \tau [(\sin^2 \tau - \cos^2 \tau)R + \cos^2 \tau (1 + T) - 1], \quad (11)$$

$$F = \cos \tau \sin \tau [(\cos^2 \tau - \sin^2 \tau)R + \sin^2 \tau (1 + T) - 1], \quad (12)$$

$$H = \nu_{21} - 2 \cos^2 \tau \sin^2 \tau (2R - 1 - T) + R, \quad (13)$$

and where we have introduced the two dimensionless numbers

$$T = \frac{E_2}{E_1} = \frac{\nu_{21}}{\nu_{12}}, \quad \text{and} \quad R = \frac{1}{2} E_2 \left(\frac{1}{G} - \frac{\nu_{12}}{E_1} - \frac{\nu_{21}}{E_2} \right). \quad (14)$$

With the four roots X_k ($k = 1, \dots, 4$) of the biquadratic equation $X^4 + 2RX^2 + T = 0$, that is

$$X = \pm \sqrt{-R \pm (R^2 - T)^{1/2}}, \quad (15)$$

the general solution of the problem can be written as sums of Fourier modes:

$$\sigma_{nn}(n, t) = \sum_{k=1}^4 \int_{-\infty}^{+\infty} b_k(q) e^{iqt+iY_k q n} dq, \quad (16)$$

$$\sigma_{tt}(n, t) = \sum_{k=1}^4 \int_{-\infty}^{+\infty} b_k(q) Y_k^2 e^{iqt+iY_k q n} dq, \quad (17)$$

$$\sigma_{tn}(n, t) = - \sum_{k=1}^4 \int_{-\infty}^{+\infty} b_k(q) Y_k e^{iqt+iY_k q n} dq, \quad (18)$$

where $Y_k = (X_k - \tan \tau)/(1 + X_k \tan \tau)$. The four functions b_k are determined by the boundary conditions at the top and the bottom of the slab.

At the free surface ($n = 0$), the overload force imposes two components of the stress:

$$\sigma_{nn} = F_0 \cos \theta \Delta(t) \quad \text{and} \quad \sigma_{tn} = F_0 \sin \theta \Delta(t), \quad (19)$$

where θ is the angle between \mathbf{F}_0 and the direction of the n axis (see Fig. 1), and where $\Delta(t)$ is a normalised function which tells how this force is distributed along the surface—e.g. a Dirac or a Gaussian of width w_F . We need here its Fourier transform $s(q)$. For the Gaussian case, $s(q) = \frac{1}{2\pi} \exp(-\frac{1}{2} w_F^2 q^2)$. We typically take $w_F \rightarrow 0$ (a δ -peak). These top conditions (19) then give

$$\sum_{k=1}^4 b_k = F_0 \cos \theta s(q) \quad \text{and} \quad \sum_{k=1}^4 b_k Y_k = -F_0 \sin \theta s(q). \quad (20)$$

At the bottom of the slab ($n = h$), we impose rigid and rough conditions, i.e. vanishing displacements in both t and

n directions: $u_t = u_n = 0$. In order to get equations on the functions b_k , we must transform these conditions into equations on the stress components. Taking its derivative along t , the condition $u_t = 0$ gives $u_{tt} = 0$, i.e.

$$-C\sigma_{nn} + B\sigma_{tt} + 2F\sigma_{tn} = 0, \quad (21)$$

leading to

$$\sum_{k=1}^4 b_k \left[-C - 2FY_k + BY_k^2 \right] e^{iY_k q h} = 0. \quad (22)$$

Similarly, the condition $u_n = 0$ gives, after a double derivative along t , the relation $2\partial_t u_{tn} = \partial_n u_{tt}$, leading to

$$\sum_{k=1}^4 b_k \left[2D + (C - 2H)Y_k + 4FY_k^2 - BY_k^3 \right] e^{iY_k q h} = 0. \quad (23)$$

The four linear Eqs. (20, 22, 23) can be inverted, leading to large but analytic expressions for the functions b_k . Integrations over q involved in Eqs. 16–18 must, however, be computed numerically. Finally, the stress components, made dimensionless by F_0/h , can be plotted for given values of the five parameters τ , T , R , v_{21} and θ , as functions of t/h at a given depth (e.g. $n = h$). We checked that the results are insensitive to the value of w_F/h , as long as it remains small.

References

1. Agnolin, I., Roux, J.-N.: Internal states of model isotropic granular packings. I. Assembling processes, geometry and contact networks. *Phys. Rev. E* **76**, 061302 (2007)
2. Agnolin, I., Roux, J.-N.: Internal states of model isotropic granular packings. II. Compression and pressure cycles. *Phys. Rev. E* **76**, 061303 (2007)
3. Agnolin, I., Roux, J.-N.: Internal states of model isotropic granular packings. III. Elastic properties. *Phys. Rev. E* **76**, 061304 (2007)
4. Atman, A.P.F., Brunet, P., Geng, J., Reydellet, G., Claudin, P., Behringer, R.P., Clément, E.: From the stress response function (back) to the sandpile ‘dip’. *Eur. Phys. J. E* **17**, 93 (2005)
5. Atman, A.P.F., Brunet, P., Geng, J., Reydellet, G., Combe, G., Claudin, P., Behringer, R.P., Clément, E.: Sensitivity of the stress response function to packing preparation. *J. Phys. Condens. Matter* **17**, S2391 (2005)
6. Atman, A.P.F., Claudin, P., Combe, G., Goldenberg, C., Goldhirsch, I.: Transitions in the response of a granular layer. In: Nakagawa, M., Luding, S. (eds.) Proceedings of the 6th International Conference on Micromechanics of Granular Media, Powders and Grains 2009, p. 492. American Institute of Physics (2009)
7. Atman, A.P.F., Claudin, P., Combe, G.: Departure from elasticity in granular layers: investigation of a crossover overload force. *Comput. Phys. Commun.* **180**, 612 (2009)
8. Atman, A.P.F., Claudin, P., Combe, G., Mari, R.: Mechanical response of an inclined frictional granular layer approaching unjamming. *Europhys. Lett.* **101**, 44006 (2013)
9. Bi, D., Zhang, J., Chakraborty, B., Behringer, R.P.: Jamming by shear. *Nature* **480**, 355 (2011)
10. Bonneau, L., Andreotti, B., Clément, E.: Evidence of Rayleigh–Hertz surface waves and shear stiffness anomaly in granular media. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 118001 (2008)
11. Brito, C., Dauchot, O., Biroli, G., Bouchaud, J.-P.: Elementary excitation modes in a granular glass above jamming. *Soft Matter* **6**, 3013 (2010)
12. da Cruz, F., Emam, S., Prochnow, M., Roux, J.-N., Chevoir, F.: Rheophysics of dense granular materials: discrete simulation of plane shear flows. *Phys. Rev. E* **72**, 021309 (2005)
13. Radjai, F., Dubois, F. (eds.): Discrete-Element Modeling of Granular Materials. ISTE, Wiley (2011)
14. Ellenbroek, W.G., van Hecke, M., van Saarloos, W.: Jammed frictionless disks: connecting local and global response. *Phys. Rev. E* **80**, 061307 (2009)
15. Estrada, N., Taboada, A., Radjai, F.: Shear strength and force transmission in granular media with rolling resistance. *Phys. Rev. E* **78**, 021301 (2008)
16. Geng, J., Howell, D., Longhi, E., Behringer, R.P., Reydellet, G., Vanel, L., Clément, E., Luding, S.: Footprints in sand: the response of a granular material to local perturbations. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 035506 (2001)
17. Gland, N., Wang, P., Makse, H.A.: Numerical study of the stress response of two-dimensional dense granular packings. *Eur. Phys. J. E* **20**, 179 (2006)
18. Goldenberg, C., Atman, A.P.F., Claudin, P., Combe, G., Goldhirsch, I.: Scale separation in granular packings: stress plateaus and fluctuations. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 168001 (2006)
19. Goldhirsch, I., Goldenberg, C.: On the microscopic foundations of elasticity. *Eur. Phys. J. E* **9**, 245 (2002)
20. Goldhirsch, I., Goldenberg, C.: Friction enhances elasticity in granular solids. *Nature* **435**, 188 (2005)
21. Henkes, S., Brito, C., Dauchot, O., van Saarloos, W.: Local coulomb versus global failure criterion for granular packings. *Soft Matter* **6**, 2939 (2010)
22. Henkes, S., Shundyak, K., van Saarloos, W., van Hecke, M.: Local contact numbers in two-dimensional packings of frictional disks. *Soft Matter* **6**, 2935 (2010)
23. Henkes, S., van Hecke, M., van Saarloos, W.: Critical jamming of frictional grains in the generalized isostaticity picture. *Europhys. Lett.* **90**, 14003 (2010)
24. Heussinger, C., Barrat, J.-L.: Jamming transition as probed by quasistatic shear flow. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 218303 (2009)
25. Kruyt, N.P.: Micromechanical study of plasticity of granular materials. *C. R. Mec.* **338**, 596 (2010)
26. Leonforte, F., Tanguy, A., Wittmer, J.P., Barrat, J.-L.: Continuum limit of amorphous elastic bodies II: linear response to a point source force. *Phys. Rev. B* **70**, 014203 (2004)
27. Liu, A.J., Nagel, S.R.: Nonlinear dynamics: jamming is not just cool any more. *Nature* **396**, 21 (1998)
28. Liu, A.J., Nagel, S.R.: Granular and jammed materials. *Soft Matter* **6**, 2869 (2010)
29. Liu, A.J., Nagel, S.R., van Saarloos, W., Wyart, M.: The jamming scenario—an introduction and outlook. In: Berthier, L., Biroli, G., Bouchaud, J.-P., Cipelletti, L., van Saarloos, W. (eds.) *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids, and Granular Media*, p. 298. Oxford University Press, Oxford (2011)
30. Majmudar, T.S., Sperl, M., Luding, S., Behringer, R.P.: Jamming transition in granular systems. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 058001 (2007)
31. Moukarzel, C.F.: Isostaticity in granular matter. *Granul. Matter* **3**, 41 (2001)
32. O’Hern, C.S., Langer, S.A., Liu, A.J., Nagel, S.R.: Random packings of frictionless particles. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 075507 (2002)
33. O’Hern, C.S., Silbert, L.E., Liu, A.J., Nagel, S.R.: Jamming at zero temperature and zero applied stress: the epitome of disorder. *Phys. Rev. E* **68**, 011306 (2003)

34. Otsuki, M., Hayakawa, H.: Critical scaling near jamming transition for frictional granular particles. *Phys. Rev. E* **83**, 051301 (2011)
35. Otto, M., Bouchaud, J.-P., Claudin, P., Socolar, J.E.S.: Anisotropy in granular media: classical elasticity and directed force chain network. *Phys. Rev. E* **67**, 031302 (2003)
36. Rapaport, D.C.: *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, Cambridge (1995)
37. Roux, J.-N.: Geometric origin of mechanical properties of granular materials. *Phys. Rev. E* **61**, 6802 (2000)
38. Serero, D., Reydellet, G., Claudin, P., Clément, E., Levine, D.: Stress response function of a granular layer: quantitative comparison between experiments and isotropic elasticity. *Eur. Phys. J. E* **6**, 169 (2001)
39. Silbert, L.E.: Jamming of frictional spheres and random loose packing. *Soft Matter* **6**, 2918 (2010)
40. Silbert, L.E., Ertaş, D., Grest, G.S., Halsey, T.C., Levine, D.: Geometry of frictionless and frictional sphere packings. *Phys. Rev. E* **65**, 031304 (2002)
41. Shundyak, K., van Hecke, M., van Saarloos, W.: Force mobilization and generalized isostaticity in jammed packings of frictional grains. *Phys. Rev. E* **75**, 010301 (2007)
42. Somfai, E., van Hecke, M., Ellenbroek, W.G., Shundyak, K., van Saarloos, W.: Critical and noncritical jamming of frictional grains. *Phys. Rev. E* **75**, 020301 (2007)
43. Staron, L., Villette, J.-P., Radjai, F.: Preavalanche instabilities in a granular pile. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 204302 (2002)
44. Tkachenko, A.V., Witten, T.A.: Stress propagation through frictionless granular material. *Phys. Rev. E* **60**, 687 (1999)
45. van Hecke, M.: Jamming of soft particles: geometry, mechanics, scaling and isostaticity. *J. Phys. Condens. Mat.* **22**, 033101 (2010)
46. Wyart, M., Nagel, S.R., Witten, T.A.: Geometric origin of excess low-frequency vibrational modes in weakly connected amorphous solids. *Europhys. Lett.* **72**, 486 (2005)
47. Zhang, H.P., Makse, H.A.: Jamming transition in emulsions and granular materials. *Phys. Rev. E* **72**, 011301 (2005)

A.3 *Non-Gaussian behavior in jamming / unjamming transition in dense granular materials*

Este artigo foi publicado no quatrienal do congresso *Powders & Grains 2013*, que é o maior congresso sobre materiais granulares, e que estava em sua 7^a edição.

Non-Gaussian behavior in jamming / unjamming transition in dense granular materials

A. P. F. Atman*, E. Kolb[†], G. Combe**, H. A. Paiva[‡] and G.H.B. Martins §

*Departamento de Física e Matemática and National Institute of Science and Technology for Complex Systems,
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG,
Av. Amazonas 7675, 30510-000, Belo Horizonte, MG, Brazil.

[†]PMMH, CNRS UMR 7636, UPMC and Université Paris Diderot, ESPCI-ParisTech,
10 rue Vauquelin, 75231 Paris Cedex 05, France

^{**}Laboratoire 3S-R (Sols,Solides,Structures - Risques) UMR 5521 (UJF, INPG, CNRS) BP 53, Grenoble, France.

[‡]Departamento de Física e Matemática, CEFET-MG.

[§]Departamento de Engenharia Elétrica, CEFET-MG.

Abstract. Experiments of penetration of a cylindrical intruder inside a bidimensional dense and disordered granular media were reported recently showing the jamming / unjamming transition. In the present work, we perform molecular dynamics simulations with the same geometry in order to assess both kinematic and static features of jamming / unjamming transition. We study the statistics of the particles velocities at the neighborhood of the intruder to evince that both experiments and simulations present the same qualitative behavior. We observe that the probability density functions (PDF) of velocities deviate from Gaussian depending on the packing fraction of the granular assembly. In order to quantify these deviations we consider a q -Gaussian (Tsallis) function to fit the PDF's. The q -value can be an indication of the presence of long range correlations along the system. We compare the fitted PDF's obtained with those obtained using the stretched exponential, and sketch some conclusions concerning the nature of the correlations along a granular confined flow.

Keywords: jamming/unjamming transition, granular systems, q -gaussian distributions, flow in channels

PACS: 81.05.Rm, 05.10-a, 83.50.Ha

INTRODUCTION

Due to its importance for technological applications as well for better understanding of natural phenomena, in last years increasing interest has been paid on the so-called jamming/unjamming transition in confined granular systems [1, 2, 3, 4, 5]. Of particular interest is the clogging of granular material around an intruder – or obstacle– which is a quite common situation in the industry (transport and confining materials) or civil engineering (pile driving for deep foundations). From the mechanical point of view, this type of experiment may provide a better understanding of yielding in granular media by observing directly the structural and dynamic features of the mechanisms which govern the plasticity in dense granular media [4, 5, 6]. Thus, the study of the rheology of a confined granular system close to the jamming became one of the key points of current research, and one of the fundamental issues on current research is to characterize the velocity distribution which governs the system at different jamming/unjamming situations. It is well known that, assuming molecular chaos hypothesis, the expected distribution for a set of colliding particles is that from Maxwell-Boltzmann theory, the Gaussian distribution with its typical bell-shape format and, indeed, it is observed in dilute granular systems and granular

gases [7, 8]. However, previous studies in different confining situations (jamming) [9, 10, 11] have shown that the measured distribution usually deviates a lot from the Gaussian, and the function generally used to fit the data in this scenario is the stretched exponential [12, 13].

In this work, we propose to investigate the grain velocities' distribution around the intruder as a function of the packing fraction of the granular system, in order to verify a possible connection between the characteristic exponent of the distribution and the degree of jamming. We have fitted the data by two kinds of probability distribution functions (PDF's). First, we have considered the stretched exponential,

$$f_\alpha(x) = A * \exp(B * (x - x_0)^\alpha), \quad (1)$$

where A , B , and x_0 are free parameters usually employed in the fit function, and α is the degree of the distribution. Second, we have used the q -Gaussian which was proposed by C.Tsallis [14] as a generic distribution to describe pdf in non-extensive systems:

$$f_q(x) = \frac{\sqrt(D)}{C} (1 - Dx^2(1 - q))^{-\frac{1}{1-q}}, \quad (2)$$

where D is an adjustable parameter (analogous to the inverse of temperature in the Boltzmann-Gibbs formula-

METHODOLOGY

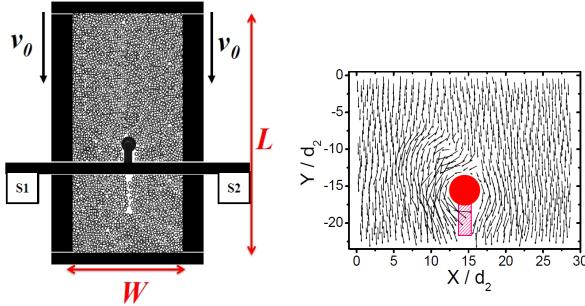


FIGURE 1. Schematic of the experiment. The containing box of dimensions $W = 54 d_2$ and $L \leq 94 d_2$ is placed horizontally over a translating plate and filled with the bidisperse mixture with 7 : 4 proportion of large to small disks. The arrows on both sides indicate the movement of the box at velocity v_0 ; the small circle in the middle marks the intruder, which is fixed in the laboratory frame and connected to two force sensors S1 and S2. The right panel shows a typical displacement map obtained between two successive snapshots with a magnification factor of 50.

tion) and C is a normalization factor. In the fitting procedure, we let D and C vary as free parameters. For tangential velocity distributions for q -gaussian as well as for stretched exponential fits, we also included a 4th parameter, x_0 in order to consider distributions not centered at the origin. The parameter q , which gives the name of this q -Gaussian PDF, is the control parameter which allows to recover the usual Gaussian distribution when $q = 1$, while for $q > 1$ we should expect long range correlations along the system. The major advantage of this particular choice for the PDF is its ability to fit all the data range with a single function, and no need to use a combination of stretched exponential and Gaussian to fit separately the tail and the central part of the distribution [3]. Another interesting feature of the q -Gaussian is the possibility to link directly the value of the q to the length of correlations along the system. For $q = 1$, we expect short range correlations, as assumed in the molecular chaos hypothesis; for $q > 1$, long-range correlations should arise in the system, and the distribution exhibits heavy tails. Thus, we expect that for unjammed, looser systems, the velocity distribution should be rather well described by Gaussian functions or q -Gaussians with $q \rightarrow 1$, while for jammed situations we expect to find a good fit with $q > 1$.

The paper is structured as the following: in the next section we present the experimental set up and the simulation method, and the analysis technique to build the distributions. Next, we compare the fitted exponent values for the experiments and simulations, and their dependence with the packing fraction ϕ and temporal evolution. Finally, we sketch some conclusions.

The experimental setup was already presented in details previously [5] and consists in an horizontal rectangular box filled with a bidisperse mixture of grains – see Figure 1. with $d_2 = 1.25 d_1$, where d_2 (d_1) is the diameter of the large (resp. small) species. In the experiments shown, typically around ~ 6500 grains were used. The packing fraction ϕ was adjusted to $0.8 < \phi < 0.84$, typically below or equal the jamming packing fraction for a frictional granular medium. A CCD camera of 1600×1200 pixels placed above the set-up recorded images every $d_2/30$ displacement of the box, while the box was pulled at a constant velocity v_0 along the tangential t direction. Then an image analysis software is used to localize the positions of grains in each image. By calculating the displacement of each grain between successive images, we construct the cumulative velocity PDF and fit with the q -Gaussian function and stretched exponential, as shown in Figure 2. More precisely, we measured the velocity distributions along the normal v_n and tangential v_t directions of box displacement. We used a minimum square method to obtain the best fit values for the PDF's using equations 1 and 2 as fitting functions.

The simulation is designed to be closer as possible to the experimental situation. We have used a molecular dynamics (MD) code in 2 dimensions, with velocity Verlet implementation and 3rd order Gear predictor-corrector [15]. The rheology for the particles was a modified version of the original Cundall-Strack model [16], with the contact between grains represented as normal and tangential springs, and Coulomb friction between grains. The simulated system has the same geometry, number of grains and aspect ratio as the experimental setup, but the range of packing fraction values simulated was a bit different from the experiments, since we can better explore the parameter space with simulations. Besides, the microscopic parameters were chosen in order to get the best performance for the code, and do not correspond literally to the values expected if a direct conversion of the experimental values was made. Thus, in normalized units the values used for the parameters were: $k_n = 1000$, $k_t = 750$ for the normal and tangential spring stiffnesses, and $\mu = 0.5$ for the friction coefficient. We have used a critical damping in the normal direction of the contacts, but no damping in the tangential one, only Coulomb friction dissipates energy in tangential contact direction. (Please find in [17] the precise definitions of the normalized unities and in [18] more details concerning the simulation method. The normalization of length used here was the width of the system, W).

We ran simulations with the same number of realizations as performed in the experiments. Then we averaged the same number of snapshots to build the velocity pdf's (the “snapshots” in simulations correspond to the config-

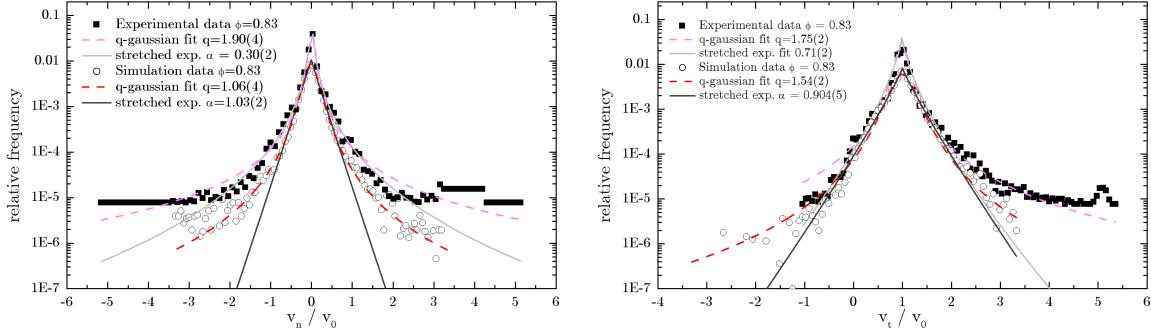


FIGURE 2. Velocities PDF's for experimental data and simulations. The distribution along the normal direction of displacement is shown at left while the distribution along the tangential direction is shown at right.

urations taken at the same frequency as in the experiment – at each $d_2/30$ displacement of the box. Thus, we were able to compare directly simulations with experimental data - Figure 2.

The distributions usually considered about 160 consecutive snapshots, and we averaged the velocities obtained from the displacements calculated between 2 consecutive snapshots (please find interesting features when different values of snapshots are used to calculate the displacement [19]). A typical experiment runs along 1600 snapshots and we can obtain the temporal evolution of the distribution. We show here only the results for distributions taken in front of the intruder in a region corresponding to the right panel of Figure 1. We study the temporal evolutions of the best fit parameters for the two PDF's used to fit the data as well the dependence of the fitted value at the half time of the experiment in function of the initial packing fraction ϕ .

DISCUSSION

In figures 2 we show some results for the velocities PDF's at the same packing fraction, for experiments and simulations. Despite not observing a perfect match, most of the qualitative features observed in the experimental PDF's were successfully reproduced by simulation and, sometimes, even quantitatively. For example, the distributions for $v_{n,t}/v_0 < 1$ show a remarkable match. Moreover, some observations were common to all packing fractions:

- First, it is clear that the confinement provoked by the presence of the intruder induces strong correlations for grains velocities, expressed by heavy tail distributions.
- Due probably to the box aspect ratio, longer than wider, we observe that the confining effect – jamming – is stronger in the normal velocities distribu-

tion than in tangential one. Thus, we have systematically verified that the stretched exponential fits v_n distributions better than q -Gaussian, since the systems are almost completely correlated along this direction.

- The v_t distributions were frequently asymmetrical, with heavy tails with different sizes for $v_t/v_0 > 1$ and $v_t/v_0 < 1$. The long heavy tails for $v_t/v_0 > 1$ systematically were better fitted by q -Gaussian.

The asymmetry observed in the tangential case can be explained considering the rectangular region of snapshot around the intruder: since the intruder is placed in the central bottom part of the region, most of the particles in average were placed in front of the intruder and moving with the same velocity as the box. As they approached the intruder, due to the flux conservation in average, the grains gained velocity, and competed to pass aside the intruder. Other grains which are located just in front of the intruder slowed down, and an excess of small velocities is observed in the distributions. The recirculation of grains just in the vicinity of the intruder (see the right panel in Figure 1) contributes for the negative values of velocities.

Another feature is the excess of velocities for experimental distributions close to $v_t/v_0 = 1$ and $v_n/v_0 = 0$, compared with simulations. This is probably due to the limited experimental frame of observation: When a new grain enters in the window observation, its preceding position is not known. Thus its first velocity is arbitrarily set to 0 in normal direction and to v_0 in the tangential one. Therefore we systematically observe an excess of velocities v_n close to zero or v_t close to v_0 in experiments compared with simulations where all the velocities are known, even outside the window observation.

Figure 3 shows the temporal evolution of the fitted parameter q from the q -Gaussian PDF's at the same value of packing fraction. We observe that the values obtained in the experiments are almost constant (except at the

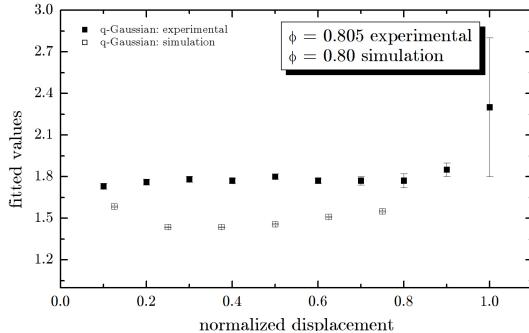


FIGURE 3. Temporal evolution of the exponents of the PDF's used to fit the data, for the packing fraction $\phi = 0.805$ in the experimental case, and $\phi = 0.8$ in simulation. Both plots show the q -Gaussian best fit for v_t in function of the normalized displacement of the containing box.

end of travelling), while in the simulations we observe a rather small but non-monotonic variation with time.

Figure 4 shows results for the fitted exponents q in function of the packing fraction. Clearly, the simulation data show a clear tendency for $q \rightarrow 3/2$ as the packing fraction increases. The experimental results, however, do not show clearly this feature, which could be due to the excess of experimental velocity v_t close to v_0 , as previously discussed. Another possible explanation, is the absence of friction between grains and the table in the case of the simulation. In simulations, since we considered the 2D case, we have no manner to implement this friction. In the experiments, the region in front of the intruder attains progressively a critical packing fraction as the box moves, and we can observe voids and inhomogeneities in the packing of grains. In simulations, the system is considerably more homogeneous, and maybe it can explain why the simulation displays monotonic dependence on the values of the fitted parameters with the packing fraction while the experimental results are inconclusive.

CONCLUSIONS AND PERSPECTIVES

We have presented experimental and simulation results for the velocity PDF's of confined granular systems in the presence of an intruder. We fit the data with q -Gaussian and stretched exponential functions, and sketch the temporal evolution of the fitted values. We verified that the system exhibits strong correlations in both normal and tangential directions, expressed by the $q > 1$ and $\alpha < 1$, but we could not verify quantitative concordance between the simulations and experiments. In simulations, a clear monotonic tendency was verified, pointing to $q \rightarrow 3/2$ and $\alpha \rightarrow 1$ as ϕ increases, but the experimental values do not display any clear tendency.

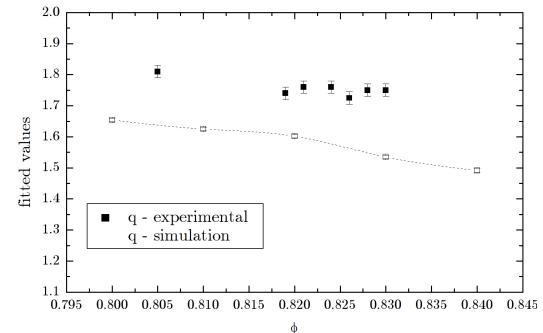


FIGURE 4. Dependence of the fitted values with the packing fraction. The best fitted values of the pdf used - q -Gaussian - were shown in function of the packing fraction at the half-time of the experiment, for v_t distribution.

ACKNOWLEDGMENTS

APFA and GHBM thanks FAPEMIG and CNPq for financial support. APFA and GC thanks CEFET and Université Joseph Fourier for making possible a 3 month invited professor grant.

REFERENCES

1. R. P. B. H. M. Jaeger, S. R. Nagel, *REV MOD PHYS* **68**, 1259 (1996).
2. M. S. Y. Murayama, *J PHYS SOC JAP* **67**, 1826 (1998).
3. P. R. N. S. Moka, *PHYS REV LETT* **95**, 068003 (2005).
4. J. L. P. C. E. C. E. Kolb, J. Cvikelinski, *PHYS REV E* **69**, 031306 (2004).
5. N. G. P. Cixous, E. Kolb, and J.-C. Charmet, *Powders and Grains 2009 AIP Conference Proceedings* **1145**, 539 (2009).
6. A. L. E. K. J. C. J. L. E. C. G. Caballero, E. Kolb, *J PHYS COND MATT* **17**, S2503 (2005).
7. F. C. M. J.S. van Zon, *PHYS REV LETT* **93**, 038001 (2004).
8. J. S. O. J. S. Urbach, *PHYS REV E* **60**, R2468 (1999).
9. A. K. D. L. Blair, *PHYS REV E* **64**, 050301(R) (2001).
10. A. K. A. V. Orpe, *PHYS REV LETT* **98**, 238001 (2007).
11. H. H. A. Kawarada, *J PHYS SOC JAP* **73**, 2037 (2004).
12. N. M. F. Rouyer, *PHYS REV LETT* **85**, 3676 (2000).
13. A. V. A. Puglisi, F. Cecconi, *J PHYS COND MATT* **17**, S2715 (2005).
14. C. Tsallis, *BRAZ J PHYS* **39**, 337 (2009).
15. D. T. M.P. Allen, *Computer simulation of liquids*, Oxford University Press, Oxford, 1987.
16. O. S. P.A. Cundall, *GEOTECHNIQUE* **29**, 47 (1979).
17. G. C. A.P.F. Atman, P. Claudin, *COMP PHYS COMM* **180**, 612 (2009).
18. J. G. G. R. G. C. P. C. R. P. B. E. C. A. P. F. Atman, P. Brunet, *J PHYS COND MATT* **17**, S2391 (2005).
19. G. V. V. Richefeu, G. Combe, *GÉOTECH LETT* **2**, 113 (2012).

APÊNDICE B – Códigos

Coloquei os códigos utilizados para este projeto de tese em um GIT para a maior comodidade e facilidade do acesso. O endereço eletrônico é <<https://github.com/BoscoWarhammer/Doutorado>>.