

2 Tratamento para o Gás Granular

O presente capítulo analisa matematicamente os materiais granulares, em especial o gás granular. Algumas das principais abordagens envolvem conceitos trazidos da Hidrodinâmica Clássica, da Teoria Cinética dos Gases, complementadas por simulação numérica, do tipo Dinâmica Molecular ou Monte Carlo. Supomos ausência de gravidade na maior parte das vezes quando tratamos do gás granular.

2.1 Métodos Contínuos

Podemos considerar a areia fluindo ao longo de uma canaleta, ou mesmo vibrando sobre uma placa, como um fluido: Podemos fazer uma descrição do seu movimento de acordo com as equações de movimento dos fluidos. O primeiro passo nesse sentido foi dado por Bagnold [5] ao introduzir o conceito de viscosidade, η , para um fluxo de grãos de areia. Ele encontrou empiricamente a lei que determina que η é proporcional à velocidade, e não uma constante, como no caso de fluidos newtonianos (água, ar, ...).

A teoria cinética para sistemas granulares foi desenvolvida principalmente a partir do início dos anos 80 [4, 12], e descreve um meio granular em movimento através do arcabouço da dinâmica dos fluidos. Uma de suas principais contribuições foi a adição de um termo de dissipação nas equações do fluxo de energia.

2.1.1 Comparações Entre Sistemas Granulares e Fluidos

Antes de prosseguirmos com o nosso estudo do gás granular e das principais equações envolvidas nele, é importante comentar algumas comparações importantes entre sistemas granulares e sistemas fluidos simples.

Tamanhos de grãos e moléculas

Quando propriedades das partículas constituintes de um sistema devem ser consideradas, a diferença mais óbvia entre grãos e moléculas está no

tamanho macroscópico dos grãos (e sua massa macroscópica). Um grão de areia, que é o exemplo mais comum de uma partícula granular, é da ordem de 10^{18} vezes mais massivo e volumoso que, digamos, uma molécula de água. Embora esta seja uma diferença notável, isso não impede que, na descrição microscópica do movimento das partículas constituintes do sistema, ambas sejam tratadas de maneira similar utilizando-se técnicas de Teoria Cinética.

Não-conservação da energia

Apesar das trajetórias dos grãos e das moléculas poderem ser descritas pela Mecânica Clássica, a natureza quântica de uma molécula é exibida através de sua capacidade de sofrer colisões totalmente elásticas. Por outro lado, os grãos são totalmente clássicos e todas as colisões envolvem perda de energia cinética, que reaparece como calor nos grãos envolvidos na colisão. Em sistemas granulares, o fato da energia cinética não se conservar na colisão entre os grãos leva a um comportamento macroscópico totalmente diferente daquele esperado de um sistema molecular.

Grãos não são partículas idênticas

Não há dois grãos precisamente idênticos. Espera-se que a existência de um espectro de tamanhos e formas de grãos introduza uma série de complicações no desenvolvimento de uma modelagem teórica de sistemas granulares. Entretanto, no modelo a ser apresentado no capítulo seguinte, consideramos que os grãos possuem, com boa aproximação, o mesmo tamanho e forma esférica, e que as pequenas diferenças não têm grandes efeitos sobre o movimento.

Interações entre grãos não são centrais

Como os grãos reais não são exatamente esféricos (e alguns estão bem longe disso) e também apresentam superfícies rugosas, forças (tangenciais) de atrito podem existir e, portanto, a força de interação entre dois grãos não é central. Isto significa que na maioria das colisões entre grãos haverá movimento de rotação devido ao torque das forças. Embora moléculas não sejam necessariamente esféricas, muitas podem ser consideradas aproximadamente como tal, além de não haver uma quantidade análoga à força de atrito. Contudo, moléculas também podem ter graus de rotação excitados durante colisões moleculares.

Validade da hipótese do contínuo

Devido ao tamanho das partículas granulares, sua densidade (partículas/volume) é muito menor do que a densidade de partículas de um fluido molecular correspondente. Isto levanta algumas dúvidas sobre a validade da hipótese do contínuo. Um milímetro cúbico de água contém, aproximadamente, 10^{19} moléculas, mas o mesmo volume de areia pode conter 10 grãos, ou menos. Num sistema hidrodinâmico, quantidades macroscópicas, como a velocidade do fluido, por exemplo, podem mudar significativamente ao longo de 1 mm . Contudo, o número de moléculas envolvidas é tão grande que podemos dividir 1 mm^3 em volumes menores, e ainda assim teremos um grande número delas em cada um desses volumes, de forma que a mudança nas quantidades macroscópicas entre sub-volumes sucessivos seja muito pequena. Por outro lado, num sistema granular, não podemos seguir o mesmo procedimento com a mesma precisão.

Se o único comprimento de escala num experimento envolvendo fluxo granular fosse o tamanho dos grãos, a hipótese do contínuo seria bem adequada tanto aos sistemas hidrodinâmicos como aos materiais granulares, pois não haveria como distinguir entre os dois sistemas. Entretanto, há pelo menos dois outros comprimentos (independentes) que sempre entram em qualquer experimento com fluxo de grãos. Um deles é o tamanho do recipiente que contém o material. A razão entre essa dimensão linear e o diâmetro molecular pode ser da ordem de 10^8 , enquanto a razão correspondente poderia ser de apenas 10^3 para um sistema de grãos de areia (e sistemas de grãos de areia são muito pequenos quando comparados com alguns sistemas granulares de interesse prático).

O outro comprimento surge da existência de inelasticidade nas colisões entre dois grãos. Neste caso, para uma melhor compreensão, consideremos a resposta do sistema a uma injeção localizada (um pulso, por exemplo) de energia. Após um certo número n de colisões, a energia cinética no pulso será diminuída por um fator de e^{-1} . Para vermos isso, suponhamos que, a cada colisão, a energia sofra um decréscimo de $e^{-d/\ell}$. Quando as n colisões tiverem ocorrido, teremos uma diminuição de

$$e^{-nd/\ell} = e^{-1}$$

na energia, onde

$$n d = \ell.$$

O raio correspondente do pulso, nesse instante, fornece o comprimento em

questão, ℓ . Se a inelasticidade envolvida for grande, n não será grande e, assim, ℓ será igual a uns poucos múltiplos do diâmetro granular. Dessa forma, ao menos enquanto o transporte de energia estiver sendo considerado, não é difícil conceber situações onde mudanças em quantidades macroscópicas podem ocorrer ao longo de distâncias da ordem de poucos diâmetros dos grãos.

Interações entre grãos não possuem atração de longo alcance

Geralmente as interações intermoleculares em um fluido possuem um “núcleo repulsivo” devido ao princípio da exclusão de Pauli, bem como uma atração de curto alcance (relativamente fraca) que é responsável por fenômenos como a tensão superficial, e que desempenha um importante papel na avaliação de propriedades do fluido, como a viscosidade. Para sistemas granulares, os grãos podem ser considerados como esferas rígidas durante a interação, e também assumimos que não há parte atrativa. Quando a presença de cargas elétricas torna-se importante no caso estudado, ou quando filmes na superfície dos grãos introduzem uma certa quantidade de coesão, as aproximações assumidas aqui devem ser revistas.

A Hipótese de colisões binárias

Uma simplificação muito utilizada em gases moleculares, embora de validade duvidosa para sistemas densos, é que apenas colisões binárias são importantes na evolução dinâmica do fluido. Essa hipótese certamente não é válida para densidades em que as caudas dos potenciais de moléculas vizinhas no fluido começam a se sobrepor. Contudo, em um fluido de esferas rígidas, devido à ausência de potenciais com cauda, a hipótese de colisões binárias permanece válida em densidades maiores. No caso granular, o alcance φ da interação superficial não é nulo, mas é determinado por características tais como a rugosidade da superfície do grão. A razão entre φ e o diâmetro δ de um grão é

$$\frac{\varphi}{\delta} \ll 1.$$

Já para o caso molecular,

$$\frac{\varphi}{\delta} \approx 1.$$

Portanto, essa hipótese é muito mais adequada a sistemas granulares, como o descrito aqui, do que a fluidos moleculares.

2.1.2

O Estado Físico do Meio Granular Denso

Até aqui foram comentadas várias aproximações importantes para os modelos que tratam do estado físico das partículas que compõem a maioria dos sistemas granulares estudados na literatura, tais como grãos sendo esféricos e rígidos, sem coesão, etc. Além destas aproximações, consideraremos que as equações apresentadas a seguir assumem uma densidade ρ grande o bastante para que o espaçamento médio entre os grãos vizinhos, s , seja sempre menor que o diâmetro δ dos grãos. Ou seja, assumiremos que

$$s \ll \delta. \quad (2.1)$$

Seja, por simplicidade, um sistema de esferas suaves idênticas, de massa m e diâmetro δ , no qual apenas interações binárias e colisões centrais (sem rotações) acontecem. Seja s a distância típica de separação entre os grãos, como mostra a fig.(2.1).

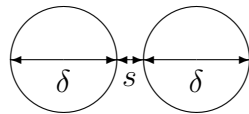


Figura 2.1: Duas esferas de diâmetro δ separadas por uma distância s .

Dadas as hipóteses acima, há uma simplificação considerável nas equações do movimento, que resulta do fato que a densidade ρ é aproximadamente constante. A dependência de ρ em relação a s é dada por

$$\rho \approx \frac{m}{(s + \delta)^3}, \quad (2.2)$$

tal que

$$\rho \approx \frac{m}{\delta^3} \quad (2.3)$$

sob a condição (2.1). O efeito prático que temos aqui é que derivadas da densidade podem ser igualadas a zero, com a conseqüente redução na complexidade dos cálculos.

Por outro lado, um processo de transporte envolverá uma taxa de colisão proporcional a s^{-1} . Uma vez que s^{-1} pode abranger todo o intervalo $[\delta^{-1}, \infty[$ e ainda satisfazer à condição (2.1), fica claro que as propriedades de transporte são bastante sensíveis ao valor de s e, conseqüentemente, à densidade.

Outra observação a ser feita é que, embora estejamos considerando ρ grande o bastante, tal que $s \ll \delta$, não haverá a possibilidade de termos $s = 0$. Em qualquer colisão, especificamente, a separação entre os dois grãos envolvidos tende a zero. Porém, s , definido no ponto da colisão, permanece não-nulo, uma vez que representa a separação média dos grãos naquela vizinhança. Para $s = 0$, os grãos não perderiam o contato por longos períodos de tempo, e ficariam grudados, deslizando uns sobre os outros. No caso oposto, $s \neq 0$, os grãos colidiriam continuamente uns contra os outros, como moléculas num fluido.

Uma última questão importante deve ser levantada a respeito do papel do fluido intersticial. Todos os resultados obtidos aqui assumem que as trajetórias dos grãos entre as colisões não são afetadas pela presença de ar, água ou outro fluido. Ou seja, os cálculos se aplicam a um fluxo de grãos no vácuo.

Com tais premissas, podemos analisar agora as equações que descrevem o fluxo granular.

Equações hidrodinâmicas

Sejam as equações de movimento dadas pelas equações de conservação da mecânica clássica:

★ Conservação da massa

Se $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)$ é a velocidade macroscópica local média do fluxo de grãos no sistema, a conservação da massa leva a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0, \quad (2.4)$$

onde $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ é o vetor posição. Uma vez que assumimos ρ aproximadamente constante, podemos obter então

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.5)$$

★ Conservação do momento

Queremos derivar uma equação para descrever a conservação do momento para um sistema granular. Em hidrodinâmica, a equação de evolução do momento (Navier-Stokes) incorpora um termo da força devida à viscosidade que é proporcional ao termo $\partial u_i / \partial x_k$. O coeficiente de proporcionalidade η (viscosidade) é formado dimensionalmente por uma densidade, um comprimento e uma velocidade. Esta última é a velocidade quadrática média que, com boa aproximação, é considerada constante. Assim, em muitos casos, η pode ser considerado um parâmetro constante. Em um fluxo granular, um termo de viscosidade pode ser

construído dimensionalmente, mas uma vez que as velocidades existentes são aproximadamente da mesma ordem da velocidade do fluxo, o termo de força é não-linear em u [13].

Entretanto, como supostamente as velocidades num fluxo granular variam muito lentamente de um ponto a outro, e como a viscosidade surge do movimento relativo de diferentes partes do sistema, podemos, com boa aproximação, considerar, em um sistema granular, que o termo da força possui uma forma semelhante àquela encontrada em um sistema hidrodinâmico. Portanto, a equação para a evolução do momento é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) = - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[p \delta_{ik} + \rho u_i u_k - \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \right], \quad (2.6)$$

onde $p = p(\vec{x}, t)$ é a pressão. Os estresses não-diagonais são da forma

$$\eta \frac{\partial u_i}{\partial x_k}.$$

A quantidade η pode ser chamada de coeficiente de viscosidade, embora desempenhe um papel mais ativo em um sistema granular do que em um sistema hidrodinâmico. As propriedades de transporte do meio dependem da velocidade relativa de grãos vizinhos. Esta velocidade relativa pode ser escrita em termos de u , mas não pode incorporar sua propriedade direcional. Dessa forma, devemos assumir que η (e outros coeficientes similares) depende da energia do fluxo. Segue que uma descrição consistente de um fluxo de grãos deve, necessariamente, envolver uma equação para a energia, além das equações (2.4) e (2.6).

★ A equação da energia

A equação da conservação da energia é considerada aqui com a mesma forma da equação hidrodinâmica análoga:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\rho u_k \left(\frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} \rho u^2 + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) \right. \\ &\quad - u_i \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \\ &\quad \left. - \kappa \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) \right] \\ &\quad + \rho u_i g_i - I. \end{aligned} \quad (2.7)$$

A grandeza v é equivalente, num sistema granular, à velocidade térmica. Da mesma forma, κ corresponde à difusividade térmica. (Contudo, assim como η , a forma e o valor de κ serão determinados pelo estado do fluxo, como veremos posteriormente.) Uma vez que dividimos a energia em duas partes, a energia cinética do fluxo, $\frac{1}{2}\rho u^2$, e a energia interna, $\frac{1}{2}\rho v^2$, podemos considerar que $\frac{1}{2}\rho v^2$ comporta-se como a temperatura granular do sistema

$$T_g = \frac{1}{2}\rho v^2$$

Este paralelo é uma forma conveniente de descrever o sistema, embora seja importante ressaltar que não é possível fazer uma analogia completa com a Termodinâmica. Por exemplo, um sistema granular está geralmente longe do equilíbrio, e não sabemos se a função distribuição de velocidade, num ponto onde a energia interna (translacional) por partícula é $\frac{1}{2}\rho v^2$, é de fato caracterizada por uma distribuição de Maxwell-Boltzmann, com $k_B T$ correspondendo a $\frac{1}{2}\rho v^2$. Em muitos casos isto não acontece, e distribuições que diferem da forma de Maxwell-Boltzmann aparecem.

A quantidade I representa a taxa na qual a energia do sistema é perdida devido ao fato das colisões entre os grãos serem de natureza inelástica. Como η e κ , I depende da taxa de colisões, e assim de v e s . Veremos na seção a seguir modelos simples para estas três quantidades.

Coefficientes de transporte

Podemos usar alguns argumentos clássicos da Teoria Cinética dos Gases para a obtenção de expressões para η , κ e I , bem como uma equação de estado relacionando p , T_g e ρ .

★ Viscosidade

Consideremos duas camadas de esferas deslizando uma sobre a outra, como mostra a figura (2.2). O gradiente da velocidade do fluxo, u , encontra-se na direção y , perpendicular a essas duas camadas de grãos, de forma que, na média, a camada superior move-se com uma velocidade relativa de Δu em relação à camada inferior.

Quando ocorrem colisões entre grãos das duas camadas, há transferência de momento de magnitude $m \Delta u$ na direção do fluxo. O estresse de cisalhamento, Σ , exercido pela camada de cima sobre a camada inferior

(ou seja, a força tangencial exercida por uma camada sobre a outra), na direção do fluxo, é dado por

$$\Sigma \sim \frac{m \Delta u}{\delta^2} \frac{v}{s}, \quad (2.8)$$

onde

$$\frac{v}{s} = \frac{1}{\tau}$$

representa a taxa de colisões (sendo τ o tempo médio entre duas colisões).

O incremento Δu é a mudança em u ao longo de uma distância da ordem de δ , tal que

$$\frac{\Delta u}{\delta} \sim \frac{du}{dy}.$$

O estresse pode ser posto na forma

$$\Sigma = b_1 \delta^2 \rho \frac{v}{s} \frac{du}{dy}, \quad (2.9)$$

onde b_1 é uma constante adimensional. Comparando este exemplo bidimensional com a eq.(2.6), temos então

$$\eta = b_1 \delta^2 \rho \frac{v}{s} \quad (2.10)$$

como a expressão para o coeficiente de viscosidade.

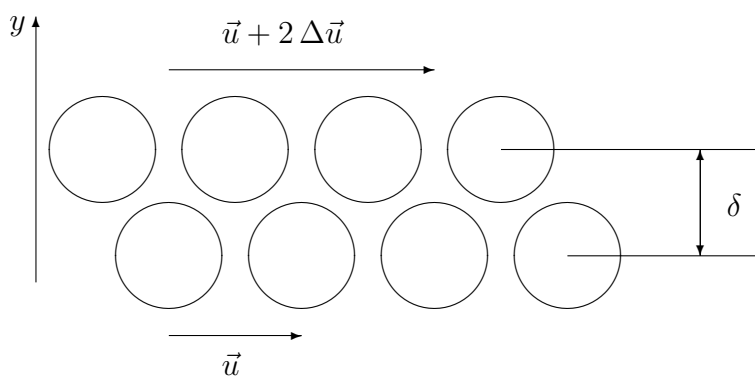


Figura 2.2: Representação esquemática do cisalhamento entre duas camadas.

★ Difusividade térmica

O termo de difusividade térmica, κ , que aparece na eq.(2.7), pode ser encontrado de uma forma similar à usada para a viscosidade η . O fluxo de energia devido às colisões entre grãos é, em média, a energia transferida por colisão, multiplicada pela taxa de colisão e dividida pela área. A energia média transferida é dada por $mv\Delta v$, onde Δv é a diferença na velocidade térmica média entre grãos vizinhos e, portanto,

$$\begin{aligned} Q &\sim \frac{m v \Delta v}{\delta^2} \frac{v}{s} \\ &= -b_2 \delta^2 \frac{v}{s} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) \\ &= -b_2 \delta^2 \frac{v}{s} \frac{\partial T_g}{\partial y}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde b_2 é uma constante adimensional, e

$$\begin{aligned} \delta^2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) &= \frac{1}{2} \frac{m}{\delta} \frac{\partial}{\partial y} v^2 \\ &= \frac{mv}{\delta} \frac{\partial v}{\partial y} \\ &= \frac{mv\Delta v}{\delta^2}. \end{aligned}$$

O termo que envolve κ na eq.(2.7) é o divergente do fluxo interno de energia. Com isso, identificamos

$$\kappa = b_2 \delta^2 \frac{v}{s}. \quad (2.12)$$

★ Taxa de dissipação

Na eq.(2.7), a taxa I representa a energia perdida para o sistema, de forma irreversível, devido ao fato das colisões entre os grãos serem inelásticas. Seja r o coeficiente de restituição que descreve a colisão entre dois grãos. A velocidade relativa entre eles é dada por $V'_2 - V'_1$ após a colisão, e por $V_2 - V_1$ antes da mesma. Além disso, podemos considerar que

$$(V'_2 - V'_1) = -r (V_2 - V_1) \sim v,$$

ou seja, que ambas as velocidades relativas são da ordem da velocidade térmica v . Com isso, podemos escrever que a energia perdida por colisão tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{2} m \left[(V_2' - V_1')^2 - (V_2 - V_1)^2 \right] \\ &\sim - (1 - r^2) \frac{1}{2} m v^2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Multiplicando-se a eq.(2.13) pela taxa de colisão, v/s , e pela densidade numérica, n , temos a taxa na qual a energia é perdida através das colisões, por unidade de volume e por segundo:

$$I = b_3 (1 - r^2) \rho \frac{v^3}{s} \sim T_g^{3/2}, \quad (2.14)$$

onde b_3 é um fator adimensional.

★ Equação de estado

É necessário, agora, relacionar a pressão p , os coeficientes de transporte η e κ , e o termo de dissipação I às variáveis que aparecem nas equações de conservação já estudadas. Uma típica transferência de momento em uma colisão entre grãos é da ordem de mv . O tempo médio entre duas colisões é dado por $\tau \sim s/v$. Portanto, a pressão (momento transferido por unidade de área e unidade de tempo) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} p &\sim \frac{mv}{\tau} \frac{1}{\delta^2} \\ &\sim \rho \delta \frac{v^2}{s}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

A partir da eq.(2.2), temos que:

$$\frac{m}{\rho} = (s + \delta)^3 \approx \delta^3 + 3\delta^2 s \quad \Rightarrow \quad s \approx \frac{m}{3\rho\delta^2} - \frac{\delta}{3}.$$

Assim:

$$\begin{aligned} p &\sim \rho \delta \frac{v^2}{\frac{m}{3\rho\delta^2} - \frac{\delta}{3}} \\ &\sim \rho \delta \frac{3v^2}{\frac{m}{\rho\delta^2} - \delta} \\ p &= \frac{b_0}{6} \rho \delta \frac{3v^2}{\frac{m}{\rho\delta^2} - \delta} \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde b_0 é outra constante adimensional de proporcionalidade.

Podemos, ainda, reescrever a eq.(2.16) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \left(\frac{m}{\rho \delta^2} - \delta \right) p &= \frac{b_0}{2} \rho \delta v^2 \\ &= b_0 \delta T_g, \end{aligned} \quad (2.17)$$

onde

$$T_g = \frac{1}{2} \rho v^2$$

é a temperatura granular.

Seja

$$N = \left(\frac{\rho}{m} \right) \mathcal{V}$$

o número de partículas e \mathcal{V} o volume, de forma que multiplicando a eq.(2.17) por N obtemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{m}{\rho \delta^2} - \delta \right) p \left(\frac{\rho}{m} \right) \mathcal{V} &= b_0 \delta T_g \left(\frac{\rho}{m} \right) \mathcal{V} \\ \left(\frac{m}{\rho} - \delta^3 \right) p \left(\frac{\rho}{m} \right) \mathcal{V} &= b_0 \delta^3 T_g \left(\frac{\rho}{m} \right) \mathcal{V} \\ (\mathcal{V} - N \delta^3) p &= (b_0 \delta^3) N T_g. \end{aligned} \quad (2.18)$$

A eq.(2.18) é similar à equação de estado de van der Waals, sem os termos que surgem da sobreposição das caudas dos potenciais moleculares de atração. A quantidade $N \delta^3$ corresponde ao termo de volume excluído.

As três equações diferenciais (2.4), (2.6) e (2.7), juntamente com as equações (2.10), (2.12), (2.14) e (2.16), para η , κ , I e p , constituem um conjunto fechado de equações que, com as devidas condições de contorno e condições iniciais, dão uma solução para os campos de velocidade, densidade, pressão e (através da eq.(2.18)) a temperatura de um fluido granular.

Até agora, vimos como as abordagens baseadas na Teoria Cinética e na Hidrodinâmica Clássica podem ser usadas no tratamento do gás granular. A seguir apresentaremos dois dos métodos numéricos mais usados para simular e descrever o comportamento de sistemas granulares.

2.2

Dinâmica Molecular

A Dinâmica Molecular desempenha o papel mais importante dentro dos métodos usados para descrever e simular sistemas granulares. Trata-se de uma solução numérica, dependente do tempo, das equações de movimento de Newton para todas as partículas que compõem o sistema granular.

2.2.1

Equações de Movimento

As partículas que compõem os materiais granulares interagem através de forças de curto alcance, isto é, via contato mecânico. Forças de longo alcance, como as eletromagnéticas, não são consideradas aqui. A dinâmica de um material granular é governada pelas equações de movimento de Newton para as coordenadas do centro de massa e os ângulos de Euler (se existir atrito de superfície) entre suas partículas i ($i = 1, 2, \dots, N$):

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\varphi}_j, \vec{\omega}_j) \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{\varphi}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\hat{J}_i} \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\varphi}_j, \vec{\omega}_j), \quad (j = 1, 2, \dots, N). \quad (2.20)$$

A força \vec{F}_i e o torque \vec{M}_i , que atuam sobre a partícula i de massa m_i , bem como o tensor de momento de inércia, \hat{J}_i , são funções das posições das partículas, \vec{r}_j , de suas orientações angulares, $\vec{\varphi}_j$, e das correspondentes velocidades, \vec{v}_j e $\vec{\omega}_j$. Quando são considerados apenas sistemas unidimensionais (no sentido de que discos ou esferas se movimentam linearmente), ou bidimensionais, a orientação angular de uma partícula fica descrita apenas por um escalar, φ_i , e o tensor de momento de inércia fica reduzido a um escalar, J_i . As equações acima podem, então, ser reescritas como

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \varphi_j, \omega_j) \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial t^2} = \frac{1}{J_i} M_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \varphi_j, \omega_j), \quad (j = 1, 2, \dots, N). \quad (2.22)$$

Computar as forças e os torques instantâneos é a parte central de cada simulação em Dinâmica Molecular.

Em geral, sistemas de equações diferenciais não-lineares acopladas, como os que obedecem às equações acima, não podem ser resolvidos analiticamente. A solução numérica dessas equações, isto é, a descrição das trajetórias de todas as partículas do sistema, é a chamada Dinâmica Molecular. Primeiramente essa

técnica foi desenvolvida para a simulação numérica de gases moleculares [14]. Hoje em dia, já existe a possibilidade de simular o comportamento de sistemas com bilhões de partículas em um período de tempo bem curto [15]. A simulação de sistemas granulares possui um alto custo computacional devido à interação peculiar entre os grãos: as partículas exercem enormes forças sobre as outras, mas apenas quando estão em contato mecânico. Contudo, uma vez que as partículas granulares são rígidas, as forças repulsivas de interação crescem bastante com a compressão toda vez que há contato entre os grãos. Para obtermos resultados confiáveis, devemos usar passos de integração no tempo muito pequenos para descrever as trajetórias das partículas do sistema.

Para grãos na ausência de campos de longo alcance, a força \vec{F}_i e o torque \vec{M}_i , que agem sobre uma partícula i , são dados pelo somatório dos pares de interação entre duas partículas i e j (com $i \neq j$):

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij}, \quad (2.23)$$

$$\vec{M}_i = \sum_{j=1}^N \vec{M}_{ij}. \quad (2.24)$$

A limitação dessa abordagem está no fato de que os grãos precisam ser, com boa aproximação, totalmente rígidos. Caso isso não ocorra, os detalhes das formas de interação entre as partículas devem ser contabilizados. Além disso, temos que lidar com outros três problemas quando utilizamos simulações em Dinâmica Molecular:

1. Somatório das forças e dos torques, de acordo com (2.23) e (2.24),
2. Integração das equações de movimento, de acordo com (2.19) e (2.20),
3. Extração de dados das trajetórias computadas.

Da mesma forma como um problema de Mecânica de Fluidos precisa de condições iniciais e de contorno, a descrição de um sistema de partículas só fica completa se o comportamento das partículas na fronteira da região simulada é descrito, e se os valores iniciais das coordenadas e das velocidades das partículas forem dados.

2.2.2

Condições de Contorno

Em muitos casos, as propriedades de um sistema granular são substancialmente afetadas pela interação do material granular com as fronteiras do sistema - por exemplo, pelas propriedades do recipiente ou da superfície que contém o material. Muito cuidado deve ser tomado ao se descrever essa interação, pois os resultados podem ser bastante afetados por elas [16].

Outro ponto de fundamental importância é a modelagem realista da rugosidade das paredes que encerram os grãos. Infelizmente, a interação mecânica de corpos aproximadamente rígidos (ou seja, que podem se deformar levemente) com paredes ásperas ainda é pouco entendida. Um método muito eficiente para contornar esse problema consiste em considerar que tal interação obedece às mesmas regras das interações entre as partículas do sistema. Com isso, as paredes podem ser facilmente incorporadas à simulação, uma vez que nenhuma força extra precisa ser definida. Outras alternativas para se modelar a rugosidade das paredes podem ser encontradas, por exemplo, em modelos que usam a dinâmica molecular para simular o comportamento de materiais granulares submetidos a vibrações em duas dimensões [17, 18].

2.2.3

Condições Iniciais

As condições iniciais definem os valores das coordenadas $\vec{r}_i(t = 0)$, das velocidades $\vec{v}_i(t = 0)$, dos ângulos de Euler $\vec{\varphi}_i(t = 0)$ e das velocidades angulares $\vec{\omega}_i(t = 0)$, para $i = 1, \dots, N$. Para o caso das partículas esféricas, as forças de interação são independentes da orientação espacial e, portanto, não é preciso definir condições iniciais para $\vec{\varphi}_i$.

Condições iniciais são usadas apenas uma única vez na simulação, por isso não há a necessidade de se implementar algoritmos extremamente sofisticados para sua geração. Além disto, em muitos problemas estudados na prática, o comportamento de longo prazo do sistema é independente das condições iniciais. Se estivermos interessados nas características estacionárias de um sistema, as condições iniciais podem ser geradas aleatoriamente, apenas com o cuidado de não permitirmos que uma partícula se sobreponha a outra qualquer. Um esquema simples de geração de posições aleatórias é adequado a esses casos. Após o posicionamento correto de todas as partículas, os passos da simulação podem ser executados. Isto significa integrar as variáveis pertinentes até que o estado estacionário seja atingido. Correlações espúrias, tais como ter

inicialmente todas as partículas com a mesma velocidade, também devem ser evitadas.

2.2.4 Modelagem de Partículas Esféricas

O modelo mais simples para uma partícula granular é o de uma esfera. A maioria dos trabalhos encontrados na literatura faz uso do modelo esférico. Em duas dimensões as esferas são reduzidas a cilindros circulares.

Contato entre as esferas

Simulações que usam partículas esféricas são numericamente muito eficientes uma vez que as colisões podem ser identificadas de uma maneira muito simples: duas partículas estarão em contato mecânico se

$$\xi_{ij} \equiv R_i + R_j - |\vec{r}_i - \vec{r}_j| > 0, \quad (2.25)$$

ou seja, se a soma dos raios ($R_i + R_j$) exceder a distância entre os centros $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. A quantidade ξ_{ij} é chamada de compressão mútua entre duas partículas i e j . Para qualquer outra forma assumida pelos grãos, a detecção dos contatos é mais complicada do que no caso de grãos esféricos, pois dependerá da orientação de cada grão.

A força entre partículas em contato é descrita por

$$\vec{F}_{ij} = \begin{cases} \vec{F}_{ij}^n + \vec{F}_{ij}^t & \text{se } \xi_{ij} \geq 0 \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.26)$$

A força normal \vec{F}_{ij}^n causa mudanças no movimento de translação, enquanto a força tangencial \vec{F}_{ij}^t causa mudanças nos movimentos de rotação e translação das partículas. Ambas as componentes da força são funções da posição relativa, $\vec{r}_i - \vec{r}_j$, e da velocidade relativa, $\vec{v}_i - \vec{v}_j$, das partículas.

Componente normal da força

Quando duas partículas granulares colidem, parte da energia cinética de seu movimento relativo é dissipada, ou seja, é transformada em calor. Se as deformações das partículas forem consideradas pequenas, sua forma esférica é conservada (em média) após várias colisões. Além disso, a mudança na temperatura das partículas pode ser desprezada. Isto é justificado se o calor gerado for descarregado do material, ou se o calor gerado pelas deformações for muito menor que a energia térmica total do sistema.

Força linear

A força normal F^{n1} consiste de uma parte dissipativa e outra conservativa. No *ansatz* linear mais simples,

$$F^n = K\xi + \gamma \frac{d\xi}{dt}, \quad (2.27)$$

onde K e γ são as constantes elástica e dissipativa, respectivamente. Para colisões entre duas partículas, a força representada pela eq.(2.27) causa uma redução de r na velocidade das partículas. Este fator é chamado de coeficiente de restituição e é definido como

$$r \equiv \frac{g'}{g},$$

onde g é o módulo da velocidade relativa absoluta normal antes da colisão e g' é o valor correspondente após a colisão. Integrando-se as equações de movimento de Newton, encontramos o coeficiente de restituição correspondente à eq.(2.27):

$$r = \exp\left(-\frac{\pi\gamma}{2m^{eff}} \sqrt{\frac{K}{m^{eff}} - \left(\frac{\gamma}{2m^{eff}}\right)^2}\right), \quad (2.28)$$

onde

$$m^{eff} \equiv \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)}$$

é a massa efetiva das partículas envolvidas na colisão. O coeficiente de restituição é uma característica importante do material em questão. Como pode ser visto na eq.(2.28), a forma linear da parte elástica da força impõe ao coeficiente de restituição a independência da velocidade. Muitos resultados analíticos em teoria cinética de gases granulares foram obtidos através da eq.(2.27), isto é, com r constante em relação à velocidade relativa dos grãos. Entretanto, como vimos no capítulo anterior, em praticamente todos os casos há uma forte dependência do coeficiente r em relação à velocidade [19].

Caso viscoelástico

A força de interação de esferas elásticas foi derivada em 1882 por H. Hertz [20] como uma função da deformação ξ e dos parâmetros Y (módulo de Young) e ν (razão de Poisson) do material:

$$F_{el}^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \xi^{3/2}, \quad (2.29)$$

onde

$$\frac{1}{R^{eff}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}. \quad (2.30)$$

¹A partir de agora, para não sobrecarregar a notação, os índices i e j serão omitidos.

A quantidade R^{eff} é chamada de raio efetivo das esferas que colidem. Esse resultado foi posteriormente generalizado para descrever o contato entre partículas viscoelásticas (amortecidas) [21]:

$$F^n = \frac{2Y\sqrt{R^{eff}}}{3(1-\nu^2)} \left(\xi^{3/2} + \mathcal{A}\sqrt{\xi} \frac{d\xi}{dt} \right), \quad (2.31)$$

com \mathcal{A} sendo uma constante dissipativa que depende da viscosidade do material. O termo dissipativo na eq.(2.31) segue da solução das equações viscoelásticas para esferas deformadas [21, 22].

As equações (2.29) e (2.31) servem apenas para esferas feitas do mesmo material. No caso em que as esferas possuem diferentes materiais constituintes, a modelagem fica mais complicada. A parte elástica tem a forma

$$F_{el}^n = \frac{4\sqrt{R^{eff}}}{3} \left(\frac{1-\nu_i^2}{Y_i} + \frac{1-\nu_j^2}{Y_j} \right)^{-1} \xi^{3/2}, \quad (2.32)$$

ou seja, a combinação $(1-\nu^2)/Y$ é adicionada para ambas as partículas. Fazendo $\nu_i = \nu_j$ e $Y_i = Y_j$, voltamos à eq.(2.29).

A parte dissipativa da interação não pode ser resolvida de uma forma tão direta como no caso da parte elástica. Em geral, não há uma maneira simples de se adicionar combinações de propriedades dissipativas para obtermos o parâmetro de amortecimento \mathcal{A} .

Componente tangencial da força

Partículas granulares nunca são, de fato, esferas perfeitamente lisas, uma vez que apresentam facetas ou texturas particulares nas superfícies. Portanto, nas colisões oblíquas existem (além das forças normais) forças tangenciais F^t , também conhecidas como forças de cisalhamento. Essas forças são determinadas principalmente pelas propriedades do material que constituem os grãos, e são essenciais na simulação realística de sistemas granulares. Em termos práticos, usaremos apenas a modelagem esférica pois esta representa um sistema granular bem o suficiente para ainda podermos aplicar técnicas analíticas ao mesmo.

Para a descrição das forças normais, assumimos uma forma exatamente esférica para os grãos. Por outro lado, sabemos que a existência de forças tangenciais provêm da textura da superfície dos mesmos, ou seja, através de desvios na forma perfeitamente esférica. Os métodos encontrados na literatura [7] para corrigir tal inconsistência possuem um alto custo computacional.

Entretanto, forças tangenciais podem ser modeladas de uma forma intuitivamente simples. A velocidade relevante para a força tangencial é a velocidade tangencial relativa das superfícies das partículas no ponto de

contato, v_{rel}^t . O ponto de contato é uma aproximação, uma vez que para a descrição das forças normais uma certa compressão ξ das esferas é assumida, o que implica uma superfície de contato, ou uma linha de contato em duas dimensões. Para parâmetros reais do material, em particular Y (módulo de Young), que possui valores da ordem de $10 - 200 \text{ GPa}$, o raio de contato é sempre muito menor que os raios das partículas que colidem. Portanto, numa colisão entre duas partículas i e j , o ponto de contato para i (ou para j) é definido como a interseção da superfície (não-deformada) da esfera i (ou da j) com o vetor $\vec{r}_i - \vec{r}_j$ que conecta os dois centros. Para o caso de esferas rígidas essa definição descreve o ponto de contato exatamente, enquanto que para o caso de esferas deformáveis trata-se de uma boa aproximação.

2.3

Dinâmica Molecular Dirigida por Eventos

Uma outra versão muito utilizada da Dinâmica Molecular é a chamada Dirigida por Eventos (EDMD). Nesta versão as forças não são calculadas a cada instante, mas ao invés disso as partículas são consideradas totalmente rígidas e as colisões acontecem com duração nula. Para este tipo de dinâmica, as interações entre as partículas são do tipo esferas rígidas, e as trocas de momento e energia se dão de maneira instantânea. A EDMD tira proveito deste fato de modo a separar o tempo em intervalos entre colisões sucessivas. Nestes intervalos a evolução temporal do sistema é em vôo (queda) livre. Portanto, calculados os intervalos de tempo entre cada colisão e a dinâmica da colisão entre as partículas, a evolução do sistema se torna razoavelmente simples e direta de implementar. Os algoritmos devem ser eficientes para construir a lista de colisões que deve ser constantemente atualizada. Um bom exemplo pode ser encontrado na referência [23], que mostra que o tempo de execução pode ser da ordem de $\ln N$, onde N é o número de partículas do sistema. Esta técnica tem sido muito utilizada no estudo de sistema de grãos, cuja dinâmica de colisão via o coeficiente de restituição é explicitado a seguir.

Caso Inelástico: sem atrito de superfície

No caso de colisões inelásticas, podemos descrever esta inelasticidade através do coeficiente de restituição. Este será definido por

$$r \equiv r(|\mathbf{g}|) = -\frac{\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g}'}{\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g}} \leq 0. \quad (2.33)$$

O caso $r = 1$ acontece quando a colisão é elástica. As variáveis que descrevem a colisão são as mesmas que para o caso elástico. As novas equações para as partes radial e tangencial serão:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g}' &= -r\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g} = -r\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \\ \mathbf{g}' - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g}' &= \mathbf{g} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{g} = (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1),\end{aligned}$$

As novas formas para as velocidades finais, como função do coeficiente de restituição serão:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_2 - \mathbf{v}'_1 &= (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - (1+r)\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \\ \mathbf{v}'_2 + \mathbf{v}'_1 &= \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_1.\end{aligned}\tag{2.34}$$

Daí obtemos as velocidades pós-colisionais em função das velocidades pré-colisionais e do vetor diretor da colisão:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_2 &= \mathbf{v}_2 - \frac{(1+r)}{2}\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \\ \mathbf{v}'_1 &= \mathbf{v}_1 + \frac{(1+r)}{2}\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1).\end{aligned}\tag{2.35}$$

Para massas e diâmetros diferentes temos que os cálculos seguem caminhos muito parecidos com o caso anterior. As velocidades relativas radial e tangencial seguem a mesma lei:

$$\mathbf{v}'_2 - \mathbf{v}'_1 = (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - (1+r)\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1).\tag{2.36}$$

A conservação de momento linear se escreve:

$$m_2\mathbf{v}'_2 + m_1\mathbf{v}'_1 = m_2\mathbf{v}_2 + m_1\mathbf{v}_1,$$

ou ainda

$$\mathbf{v}'_2 + \frac{m_1}{m_2}\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_2 + \frac{m_1}{m_2}\mathbf{v}_1.\tag{2.37}$$

Obtemos então:

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 - (1+r)\frac{m_1}{m_1+m_2}\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)\tag{2.38}$$

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + (1+r)\frac{m_2}{m_1+m_2}\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1).\tag{2.39}$$

As equações (2.38) e (2.39) dão as velocidades pós-colisionais das partículas no caso geral em que $m_1 \neq m_2$.

2.4

Limites da Abordagem Hidrodinâmica

Conforme mencionado no capítulo anterior, materiais granulares podem imitar o comportamento de gases, sólidos, fluidos e etc. Em muitos casos, podem ser tratados como um fluido molecular comum, modelados de maneira a esconder a granulosidade da substância constituinte. Portanto, é natural tentarmos aplicar as mesmas equações, conceitos e teorias, que funcionam para os fluidos moleculares aos materiais granulares.

Contudo, há uma diferença fundamental entre moléculas e grãos. Um fluido molecular usual conserva a energia dentro dos graus de liberdade observados. Assim, se injetarmos calor num fluido, esse calor irá contribuir para a energia cinética de cada molécula durante o processo de aumento da temperatura do fluido. Essa energia adicional nunca é perdida, exceto pela possibilidade de dissipação (ou radiação) através das paredes do recipiente que encerra o fluido. Por isso, neste caso, o movimento relativo das partículas constituintes nunca cessa.

Por outro lado, em um material granular, alguma energia é perdida durante as colisões entre as partículas. A energia na forma de calor é armazenada nos átomos dentro dos grãos, e não na forma de energia cinética dos grãos. Com isso, o sistema dissipa energia muito rapidamente. Se for abandonado a si mesmo, o sistema evoluirá até uma configuração sólida (ou vítrea), com o desaparecimento do movimento relativo. Assim, materiais como a areia, por exemplo, poderão nunca apresentar a relaxação para o equilíbrio uniforme global que é exigido pelas derivações usuais das equações hidrodinâmicas. Devido a essa falha, não podemos ter certeza de até onde as equações hidrodinâmicas descreverão o comportamento dos materiais granulares de uma maneira geral. Na realidade, estas equações falham ao aparecerem instabilidades no sistema. Estas instabilidades, que destroem o estado do gás homogêneo, são basicamente de dois tipos: vórtices e aglomerações (regiões de alta densidade). Os vórtices se devem à colimação natural das velocidades dos grãos pós-colisão, dado que os momentos linear e angular devem ser globalmente conservados para o gás em um recipiente. Daí vórtice e antivórtice aparecem. Os aglomerados são regiões que aparecem devido a flutuações na densidade. Uma flutuação positiva leva a maior densidade, mais colisões, mais dissipação e mais captura de grãos. Por conseguinte, há um aumento ainda maior na densidade. Este é o foco do presente trabalho.

A modelagem de colisões entre grãos através de coeficientes de restituição constantes pode ser muito simples e intuitiva, mas essa aproximação possui

várias limitações. Por exemplo, a aproximação de um meio granular por um gás de partículas rígidas, com coeficiente de restituição constante, pode levar a comportamentos não-físicos, como o colapso inelástico computacional [24]. De fato, sabemos que o coeficiente de restituição depende da velocidade relativa das partículas que colidem. Essa dependência é capturada por modelos tais como o modelo visco-elástico [19]. Para grãos não-esféricos, o coeficiente de restituição pode depender também do ponto de contato.