

## 4 O Modelo CDS

### 4.1 Descrição

Oono e Puri<sup>21</sup> apresentaram um esquema computacional para o estudo da dinâmica de separação de fases, que considerava o sistema como composto por células dinâmicas, o modelo de Células Dinâmicas (CDS). Posteriormente este modelo foi utilizado também com sucesso no estudo da dinâmica de copolímeros<sup>22</sup>. Ele é inspirado na idéia de mapeamento de um determinado sistema sobre ele mesmo. Esse mapeamento é baseado na construção de um espaço-tempo discreto: a discretização do espaço consiste em cobri-lo com um reticulado  $L$  de células de tamanhos fixos. O estado (configuração) de cada célula num determinado instante de tempo é caracterizado por um conjunto de parâmetros de ordem  $\{\psi_n(t)\}$ , e a partir da configuração das unidades básicas podemos descrever o estado do sistema como um todo. É definido ainda sobre esse espaço uma conveniente regra  $T^L$  que dirá como será a configuração de um parâmetro num determinado instante a partir de sua configuração num instante imediatamente anterior  $\psi_n(t + \tau) = T^L \psi_n(t)$ . Esta regra depende da dinâmica interna da célula e de sua relação com as demais.

Conceitualmente, podemos dizer que o modelo CDS se assemelha ao esquema de discretização de Euler para equações diferenciais. No entanto, o CDS apresenta mais vantagens, uma vez que não temos nenhum compromisso em satisfazer as condições exigidas pelas equações diferenciais. Portanto, temos uma certa liberdade para alterar o esquema, incorporando termos empíricos<sup>23</sup>, bem como de novos parâmetros<sup>a</sup>, a fim de melhorar a descrição física do sistema. Contudo, a física representada pelo CDS tende àquela representada pelas equações diferenciais, no limite em que o tamanho da rede utilizada tenda ao infinito.

No caso da dinâmica de separação de fase em uma mistura binária<sup>21</sup>, o parâmetro de ordem utilizado é a diferença entre a concentração dos dois elementos A e B ( $\psi = \rho_A - \rho_B$ ), que obedece uma equação do tipo Cahn-Hilliard.

---

<sup>a</sup>estes parâmetros adicionais não precisam estar diretamente relacionados a configuração de cada célula, mas ajudam a melhorar a regra de evolução dos outros parâmetros, de modo a adequar melhor o esquema computacional à fenomenologia do sistema

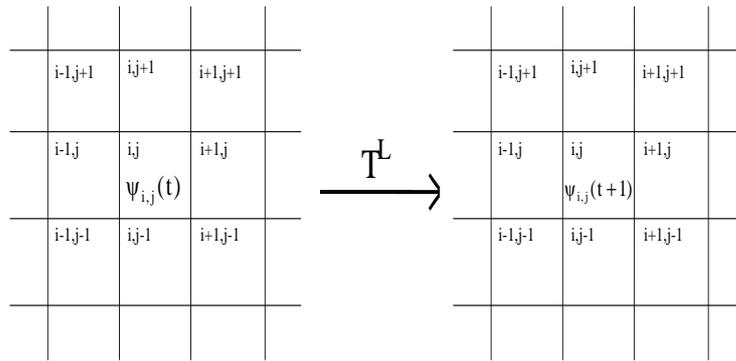


Figura 4.1: Representação esquemática de um CDS. Os reticulados representam o conjuntos de células e os  $\psi$ s representam o conjunto de parâmetros que descreverão a dinâmica do sistema

Shinozaki<sup>23,24</sup> propôs a utilização do modelo CDS para a dinâmica de fluidos, descrita usualmente pela equação de Navier-Stokes. A idéia principal é que, dentro de uma célula nesse espaço discreto, a dinâmica é influenciada pelas células vizinhas e por sua dinâmica interna. No nosso caso, vamos descrever a dinâmica, não de um fluido usual, mas de um fluido granular. Esta é usualmente descrita por equações semelhantes às equações de Navier-Stokes para um fluido molecular (ver eqs. 2.99-2.101), cujos parâmetros de ordem serão semelhantes às variáveis hidrodinâmicas usuais.

Nosso objetivo é construir um modelo CDS inspirado nesse esquema de discretização, aplicando-o às conhecidas equações hidrodinâmicas (eqs. 2.99-2.101). No apêndice (A.1) discretizamos o Laplaciano para rede quadrada 2D, utilizando esse esquema. Escrevemos:

$$\nabla_{CDS}^2 \psi = \langle\langle f \rangle\rangle - f,$$

com

$$\langle\langle f \rangle\rangle \equiv \frac{1}{6} \sum_{NN} f + \frac{1}{12} \sum_{NNN} f, \tag{4.1}$$

onde  $\sum_{NN}$  e  $\sum_{NNN}$  simbolizam somas sobre os primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. A relação entre o Laplaciano usual e o Laplaciano no CDS é ( $\nabla^2 = 3\nabla_{CDS}^2$ ) (ver epêndice A.1). É fácil interpretar fisicamente o laplaciano de uma determinada função num determinado ponto: ele é, essencialmente, a diferença entre uma média ponderada dos valores da função nas vizinhanças desse ponto e seu valor no ponto considerado. Por isso é utilizado para governar os processos de difusão.

### 4.1.1 Exemplo de Discretização

A título de exemplo, suponhamos que queiramos simular a difusão de calor em uma barra de comprimento finito  $L$ , termicamente isolada (fig 4.1.1). A discretização do espaço no CDS consiste em dividir a barra em células de

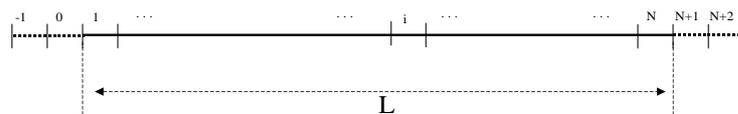


Figura 4.2: Representação esquemática da divisão de uma barra em  $N$  células unitárias. As células  $\{-1, 0, N + 1, N + 2\}$  são as células adicionais que facilitarão a implementação das condições de contorno.

tamanho unitário. Suponhamos que a barra esteja ao longo do eixo  $x$ , entre  $x = 0$  e  $x = L$ . Se as extremidades da barra estiverem termicamente isoladas, devemos ter por condições de contorno,  $J(0) = J(L) = 0$ , onde  $J(x)$  é o fluxo de calor ao longo da barra, dado pela lei de Fourier:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}, \quad (4.2)$$

com o fluxo de calor  $J(x)$  dado por:

$$J(x, t) = -\kappa \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}, \quad (4.3)$$

onde  $T$  é a temperatura e  $\kappa$  é a condutividade térmica. Se  $\kappa$  for constante teremos:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T(x, t). \quad (4.4)$$

No CDS as eq. (4.4) seria:

$$T(i, t + 1) - T(i, t) = -\kappa_{CDS} (\langle T \rangle - T(i, t)), \quad (4.5)$$

onde

$$\langle T \rangle = \frac{T(i + 1) + T(i - 1)}{2}, \quad (4.6)$$

com  $\kappa_{CDS} = 2\kappa$ .

Para as condições de contorno, o que fazemos é simplesmente criar células adicionais (veja fig. 4.1.1), impondo simetrias convenientes, de modo que o fluxo de calor nas extremidades seja nulo. Nesse caso as células adicionais seriam imagens especulares das que de fato representam a barra, isto é,  $T(-1) = T(1)$ , numa extremidade e  $T(L + 1) = T(L - 1)$ , na outra. Isto garante a simetria necessária em  $x = 0$  e  $x = L$ .

Outra maneira de reproduzir estas condições é a seguinte. Reescrevemos a equação (4.5), como:

$$\begin{aligned} T(i, t + 1) - T(i, t) &= -\frac{\kappa_{CDS}}{2} \{ [T(i + 1, t) - T(i, t)] + [T(i - 1, t) - T(i, t)] \} \\ &= -\frac{\kappa_{CDS}}{2} \left\{ \sum_{r=-1}^{+1} [T(i + r, t) - T(i, t)] \right\} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Nesta forma a equação acima pode ser interpretada como sendo contituida por fluxos entre um sítio  $(i, j)$  e seus primeiros vizinhos  $(i + 1)$  e  $(i - 1)$ . Logo, nas extremidades, basta impedir que estes fluxos aconteçam que obtemos a condição de contorno desejada. Vejamos como isto pode ser feito na seção seguinte.

#### 4.1.2 A Matriz $K$

Genericamente, tomemos um sistema bidimensional caracterizado pelo conjunto de variáveis  $\phi_1(x, y), \phi_2(x, y), \dots, \phi_{N-1}(x, y), \phi_N(x, y)$ , onde a evolução de cada um delas é determinada por equações diferenciais que as relacionam

entre si. Analogamente ao que foi feito para o exemplo anterior podemos discretizar a equação de evolução de um dado parâmetro e escrevê-la como:

$$\begin{aligned} \phi_l(i, j, t + 1) - \phi_l(i, j, t) = & \sum_{r,s} \{F_1 [\phi_1(i + r, j + s, t) - \phi_1(i, j, t)] \\ & + F_2 [\phi_2(i + r, j + s, t) - \phi_2(i, j, t)] + \dots \\ & + F_l [\phi_l(i + r, j + s, t) - \phi_l(i, j, t)] + \dots \\ & + F_N [\phi_N(i + r, j + s, t) - \phi_N(i, j, t)]\}, \quad (4.8) \end{aligned}$$

onde  $F_l(i, j, t) \equiv F_l[\phi_1(i, j, t); \phi_2(i, j, t); \dots; \phi_l(i, j, t); \dots; \phi_N(i, j, t)]$  é uma função qualquer das variáveis  $\phi$ ;  $(i + r, j + s)$  são as coordenadas das células em que interagem, através de fluxos, com a célula  $(i, j)$ .

Assim podemos interpretar a evolução de um parâmetro na célula como sendo feita através de trocas com as outras células vizinhas, esquematicamente, para uma rede quadrada podemos ver isto na figura (4.1.2)

Introduzimos um novo parâmetro, a matriz  $K \equiv K(i, j, l, m) \equiv K_{(l,m) \rightarrow (i,j)}$ , associado a cada um dos canais de fluxo de uma determinada célula com as outras, cuja função é controlar estas trocas em suas paredes, proibindo ou permitindo que elas aconteçam, conforme a conveniência.

Usando a matriz  $K$  reescrevemos o lado direito da equação acima:

$$\begin{aligned} \sum_{r,s} \{ & F_1 [K(i, j, i + r, j + s) \phi_1(i + r, j + s, t) - K(i + r, j + s, i, j) \phi_1(i, j, t)] + \\ & F_2 [K(i, j, i + r, j + s) \phi_2(i + r, j + s, t) - K(i + r, j + s, i, j) \phi_2(i, j, t)] + \dots \\ & + \dots + F_l [K(i, j, i + r, j + s) \phi_l(i + r, j + s, t) - K(i + r, j + s, i, j) \phi_l(i, j, t)] + \dots \\ & + F_N [K(i, j, i + r, j + s) \phi_N(i + r, j + s, t) - K(i + r, j + s, i, j) \phi_N(i, j, t)]\}, \quad (4.9) \end{aligned}$$

onde os elementos da matriz do tipo  $K(i + r, j + s, i, j)$ , estão relacionados aos fluxos de saída, e os elementos do tipo  $K(i, j, i + r, j + s)$  estão ligados aos fluxos de entrada<sup>b</sup>. Assim sendo, se um elemento  $K_{(i,j) \rightarrow (i+r,j+s)} = 1$  o fluxo é permitido, porém se  $K_{(i,j) \rightarrow (i+r,j+s)} = 0$  o fluxo é proibido.

Na extremidade do sistema basta fecharmos os fluxos na direção adequada para simularmos as condições de contorno tipo parede, no caso da barra, isto significa impedir trocas entre os sítios (0) e (1) e entre os sítios (L) e (L+1).

No caso dos outros parâmetros que utilizaremos, implementaremos as simetrias convenientes, utilizando a mesma idéia. Na discretização de todas as demais derivadas que aparecerão nas equações, procedemos de maneira análoga.

---

<sup>b</sup>observe que os elementos de matriz estão relacionados aos canais de fluxo, logo, um mesmo elemento pode estar ligado a um controle de fluxo de saída ou de entrada, dependendo da célula  $(i, j)$  que usamos como referência

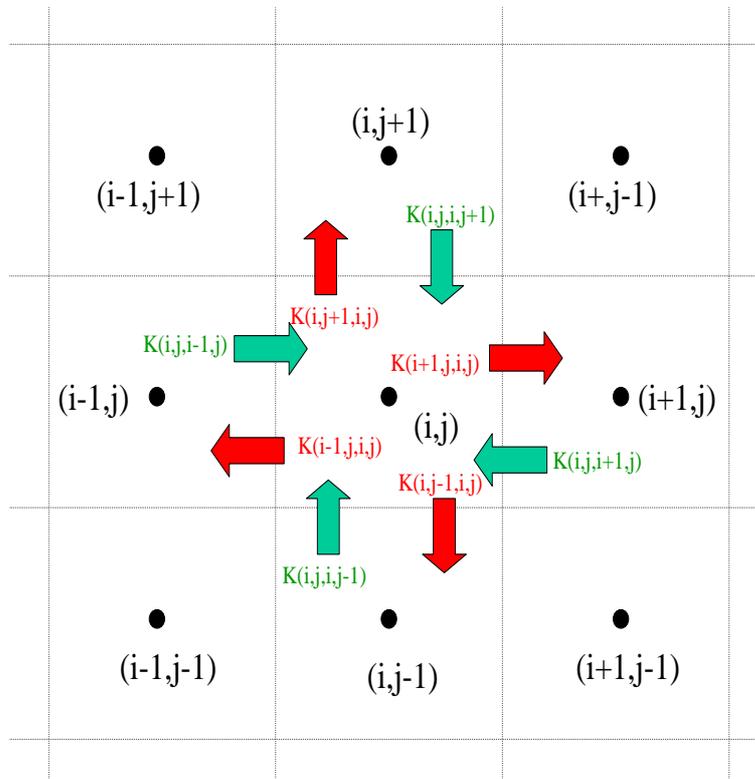


Figura 4.3: Representação esquemática dos fluxos entre um sítio e seus primeiros vizinhos em uma rede bidimensional, onde as setas representam os fluxos de entrada e saída

### 4.1.3 A Introdução dos Aglomerados no Modelo

Como vimos no capítulo anterior, algumas regiões do gás granular começam a capturar partículas, aumentando a densidade local. Assim, na visão do modelo CDS, podemos interpretar estas regiões como sítios meramente absorventes. Desta maneira podemos usar este novo parâmetro para permitir que uma determinada célula haja apenas fluxos de entrada, veja figura (4.1.3).

## 4.2 Vantagens do Modelo para o Tratamento de Aglomerados

Não são poucas as vantagens do modelo CDS. O baixo custo computacional permite-nos estudar sistemas grandes. Devido a simplicidade

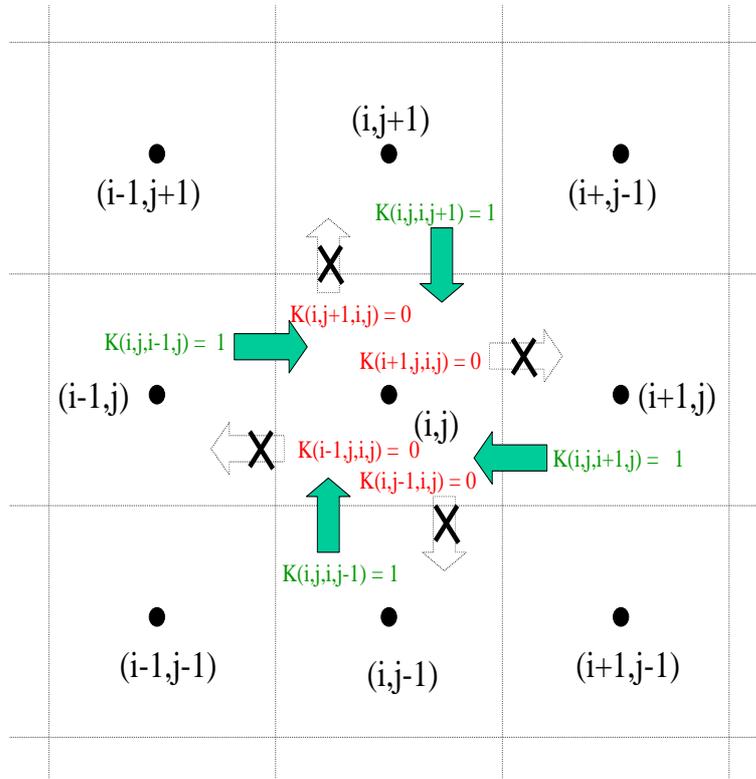


Figura 4.4: Representação esquemática dos fluxos entre os sítos de uma rede idimensional, onde as setas representam os fluxos de entrada e saída

na implementação podemos simular sistemas com as mais variadas condições de contornos. Além disso é muito fácil introduzir no CDS os mais variados ingredientes físicos, de maneira natural, possibilitando-nos assim estender o estudo a outros regimes, como por exemplo para a presença de aglomerados.

#### 4.2.1 Relações entre valores computacionais e valores físicos reais

Na simulação, a escala de comprimento é fixada pelas dimensões  $(L_x, L_y)$  do sistema que estamos simulando. Isto é feito como segue:

$$\begin{aligned} \text{Simulação} &\rightarrow \text{Hidrodinâmica,} \\ \text{Unidade de comprimento} &\rightarrow a, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (i, j) &\rightarrow (x = ia, y = ja), \\ (N_x, N_y) &\rightarrow (L_x = N_x a, L_y = N_y a), \\ \text{Unidade de massa} &\rightarrow m, \\ \text{Unidade de tempo} &\rightarrow \tau, \\ \psi(i \pm 1, j \pm 1, t + 1) &\rightarrow \psi(x \pm a, y \pm a, t + \tau). \end{aligned}$$

Podemos escrever as derivadas usadas nas equações de CDS (até  $\mathcal{O}(a^4)$ ) como:

$$\begin{aligned} \psi_x &= a \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, t), & \psi_y &= a \frac{\partial}{\partial y} \psi(x, y, t), \\ \psi_{xx} &= a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, y, t), & \psi_{yy} &= a^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(x, y, t), \text{ etc, e} \\ \langle\langle A \rangle\rangle - A &= \frac{1}{3} a^2 \nabla^2 A. \end{aligned}$$

Também, mantendo termos até primeira ordem nas derivadas temporais temos:

$$\psi(t + \tau) \approx \psi(t) + \tau \frac{\partial}{\partial t} \psi(t).$$

### 4.2.2 Escalas Físicas

Precisamos escolher velocidades e densidades de maneira a estabelecer as condições iniciais para a simulação. A escala física que usaremos está relacionada às velocidades típicas dos grãos  $v_{g0}$ . Os valores numéricos que usamos na simulação correspondem a essas unidades escaladas. De fato, são elas:

$$T_g^* = \frac{T_g}{T_0} = \frac{2T_g}{mv_{g0}^2}, \quad (4.10)$$

$$n^* = n \frac{\pi \sigma^2}{4}, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{v_{g0}}, \quad (4.12)$$

$$t^* = \frac{t}{\tau}, \quad (4.13)$$

$$\nabla^* = a^2 \nabla. \quad (4.14)$$

No que segue, usaremos as equações (4.10), (4.11) e (4.12) para fazer a conexão entre os valores experimentais e nossos valores de simulação computacional.

### 4.3 As Equações do CDS

A partir das relações expostas anteriormente obtemos as equações para o CDS, equivalentes às equações de Navier-Stokes modificadas, para as

variáveis adimensionais dadas pelas equações (4.10), (4.11) e (4.12). A partir de agora vamos trabalhar num sistema constituído por um gás granular bidimensional. Para tanto, reescrevamos as equações hidrodinâmicas (2.99, 2.100, 2.101) para este caso<sup>18,13</sup>:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (n\mathbf{u}) \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{mn} \nabla(nT_g) + \frac{\eta}{nm} \nabla \cdot [(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger - \nabla \cdot \mathbf{u})] - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_g &= -\mathbf{u} \cdot \nabla T_g + \frac{\kappa}{n} \nabla \cdot (\nabla T_g) + \frac{\mu}{n} \nabla \cdot (\nabla n) - T_g \nabla \cdot \mathbf{u} \\ &+ \frac{\eta}{n} (\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]) : \nabla \mathbf{u} - \frac{\eta}{n} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \zeta T_g. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Estas equações são equivalentes a um conjunto de equações adimensionais:

$$\frac{\partial n^*}{\partial t} = -\nabla^* \cdot (n^* \mathbf{u}^*), \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} &= -\frac{1}{mn^*} \nabla^*(n^* T_g^*) + \frac{\eta_0^* \sqrt{T_g^*}}{n^* m} \nabla^* \cdot [(\nabla^* \mathbf{u}^* + [\nabla^* \mathbf{u}^*]^\dagger - \nabla^* \cdot \mathbf{u}^*)] \\ &- \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^*, \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_g}{\partial t^*} &= -\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* T_g^* + \frac{\kappa_0^* \sqrt{T_g^*}}{n^*} \nabla^* \cdot (\nabla^* T_g^*) + \frac{\mu_0^* T_g^{*8/5}}{n^*} \nabla^* \cdot (\nabla^* n^*) * \\ &- T_g^* \nabla^* \cdot \mathbf{u}^* + \frac{\eta_0^* \sqrt{T_g^*}}{n^*} [(\nabla^* \mathbf{u}^* + [\nabla^* \mathbf{u}^*]^\dagger) : \nabla^* \mathbf{u}^* - (\nabla^* \cdot \mathbf{u}^*)^2] - \\ &\zeta_0^* n T_g^{*8/5}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde usamos o fato de que  $\eta$  e  $\kappa$  e são proporcionais a  $\sqrt{T_g}$ , e  $\mu \propto (T_g^*)^{8/5}/n$  e  $\zeta \propto n T_g^{3/5}$ .

### 4.3.1 Limite contínuo

A fim de estabelecer uma relação entre os parâmetros computacionais e os valores das variáveis físicas, em um sistema real, verifiquemos o limite contínuo para as equações do CDS (eqs. 4.34-4.37), utilizando as relações (4.10-4.14), podemos escrever, para a temperatura granular<sup>c</sup>:

$$\begin{aligned} \frac{2\tau}{mv_{g0}^2} \frac{\partial}{\partial t} T_g(\mathbf{r}, t) &\approx \gamma \left\{ -\frac{2a}{mv_{g0}^3} [\mathbf{u} \cdot \nabla T_g + T_g \nabla \cdot \mathbf{u}] + \frac{8\kappa_0^* a^2}{n\pi\sigma^2 mv_{g0}^3} \sqrt{\frac{2T_g}{m}} \nabla^2 T_g \right. \\ &+ \frac{8\mu_0^* a^2 T_g}{n^2 \pi \sigma^2 m v_{g0}^3} \left(\frac{T_g}{T_0}\right)^{1/10} \sqrt{\frac{2T_g}{m}} \nabla^2 n \\ &\left. + \frac{4\eta_0^* a^2}{n\pi\sigma^2 v_{g0}^3} \sqrt{\frac{2T_g}{m}} [(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger) : \nabla \mathbf{u} - (\nabla \cdot \mathbf{u})^2] - \right. \end{aligned}$$

<sup>c</sup>escolhemos a equação da temperatura granular porque nela aparecem todos os coeficientes os quais pretendemos avaliar

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\zeta_0^* n \pi \sigma^2 T_g}{2 m v_{g0}^3} \left( \frac{T_g}{T_0} \right)^{1/10} \sqrt{\frac{2 T_g}{m}} \right\}, \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} T_g(\mathbf{r}, t) \approx & -\frac{a \gamma}{v_{g0} \tau} \{ [\mathbf{u} \cdot \nabla T_g - T_g \nabla \cdot \mathbf{u}] \\ & + \frac{4 \kappa_0^* a}{n \pi \sigma^2} \sqrt{\frac{2 T_g}{m}} \nabla^2 T_g + \frac{4 \mu_0^* a T_g}{n^2 \pi \sigma^2} \left( \frac{T_g}{T_0} \right)^{1/10} \sqrt{\frac{2 T_g}{m}} \nabla^2 n \\ & + \frac{2 \eta_0^* a}{n \pi \sigma^2} \sqrt{2 m T_g} [(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger) : \nabla \mathbf{u} - (\nabla \cdot \mathbf{u})^2] \\ & - \left. \frac{\zeta_0^* n \pi \sigma^2 T_g}{4 a} \left( \frac{T_g}{T_0} \right)^{1/10} \sqrt{\frac{2 T_g}{m}} \right\}. \end{aligned}$$

A escala de comprimento e de tempo estão relacionadas pela velocidade típica do grãos  $v_{g0}$  como  $a = v_{g0} \tau$ :

Desta forma identificamos os coeficientes de transporte e ataxa de resfriamento na equação anterior como:

$$\kappa = \frac{4 \kappa_0^* a}{\pi \sigma^2} \sqrt{\frac{2 T_g}{m}} = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{a}{\sigma} \right) \kappa_0^* \left( \frac{2}{\sigma} \sqrt{\frac{T_g}{m \pi}} \right), \quad (4.21)$$

$$\mu = \frac{4 \mu_0^* a T_g}{n \pi \sigma^2} \left( \frac{T_g}{T_0} \right)^{1/10} \sqrt{2 m T_g} = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{a}{\sigma} \right) \mu_0^* \left[ \frac{2 T_g}{n \sigma} \sqrt{\frac{T_g}{m \pi}} \left( \frac{T_g}{T_0} \right)^{1/10} \right], \quad (4.22)$$

$$\eta = \frac{2 \eta_0^* a}{n \pi \sigma^2} \sqrt{2 m T_g} = 4 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{\sigma}{a} \right) \eta_0^* \left( \frac{1}{2 \sigma} \sqrt{\frac{m T_g}{\pi}} \right), \quad (4.23)$$

e

$$\zeta = \frac{\zeta_0^* n \pi \sigma^2}{4 a} \sqrt{\frac{2 T_g}{m}} = \frac{\sqrt{2 \pi}}{8} \left( \frac{a}{\sigma} \right) \zeta_0^* \left[ 2 n \sigma \sqrt{\frac{\pi T_g}{m}} \left( \frac{T_g}{T_0} \right)^{1/10} \right], \quad (4.24)$$

As quantidades  $\kappa_0^*$ ,  $\mu_0^*$ ,  $\eta_0^*$  e  $\zeta_0^*$  são valores computacionais adimensionais. Comparando estes coeficientes com os resultados obtidos analiticamente nas equações (2.96), (2.97), (2.98) e (2.89), temos que:

$$\kappa_0^* = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{\sigma}{a} \right) \quad (4.25)$$

$$\mu_0^* = (1,811) \delta \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{\sigma}{a} \right) \quad (4.26)$$

$$\eta_0^* = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{\sigma}{a} \right) \quad (4.27)$$

$$\zeta_0^* = (1,294) \delta 4 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \frac{a}{\sigma} \right) \quad (4.28)$$

Adotamos o regime de baixa inelasticidade com  $\delta = 0.003$ . Escolhendo  $T_0 = 10$  isto equivale a um coeficiente de restituição inicial  $r \approx 0,99$  (sistema quase elástico), o que justifica a aproximação que fizemos para os coeficientes.

Para satisfazer a hipótese de meio contínuo, o tamanho da célula dinâmica  $a$  deve ser muito maior que o livre caminho médio para que as médias internas na célula façam sentido e colisões possam ocorrer. Para um gás diluído  $n^* \approx 0,1$  e  $g_2(\sigma) \approx 1$ , então temos o livre caminho médio dado por:

$$l_c \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n\sigma}} = \frac{\pi\sigma}{4\sqrt{2\pi n^*}} \Rightarrow \sigma = 4\sqrt{\frac{2}{\pi}} n^* l_c. \quad (4.29)$$

logo,

$$\frac{\sigma}{a} \approx 4\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(0,1)l_c}{a} \ll 1. \quad (4.30)$$

De fato, se escolhermos  $\zeta_0^* = 1$  temos, a partir das relações acima  $a \approx 35,2l_c$ , e para os demais coeficientes,  $\kappa_0^* = 0,008$ ,  $\mu_0^* = 0,00006$  e  $\eta_0^* = 0,004$ ; que estão dentro da faixa de valores utilizados por outros autores<sup>25</sup>.

Neste caso podemos escrever as equações (4.15, 4.16 e 4.17), em termos de suas componentes como:

$$\partial_t n = -\partial_\alpha (n u_\alpha) \quad (4.31)$$

$$\partial_t u_\alpha = \frac{1}{mn} \partial_\alpha (n T_g) + \frac{\eta}{mn} \partial_\beta (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \frac{\eta}{mn} \partial_\alpha \partial_\beta u_\beta - u_\beta \partial_\beta u_\alpha \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \partial_t T_g = & -u_\alpha \partial_\alpha T_g + \frac{\kappa}{n} \nabla^2 T_g + \frac{\mu}{n} \nabla^2 n - T_g \partial_\alpha u_\alpha + \frac{\eta}{n} (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) \partial_\alpha u_\beta \\ & - \frac{\eta}{n} (\partial_\alpha u_\alpha)^2 - \zeta T_g \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde  $\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$  e  $\alpha$  e  $\beta$  são as coordenadas cartesianas. Os índices repetidos são somados.

As equações do CDS correspondentes a estas últimas são escritas como:

$$\begin{aligned} T_g(i, j, t + 1) = & T_g(i, j, t) + \gamma \left[ - (T_{gx} Ux(i, j, t) + T_{gy} Uy(i, j, t)) - T_g(i, j, t) \right. \\ & \times (Ux_x + Uy_y) + \frac{\lambda}{n(i, j, t)} [ \langle \langle T_g \rangle \rangle_t - T_g(i, j, t) ] \\ & + \frac{\eta}{n(i, j, t)} (2Ux_x^2 + 2Uy_y^2 + Ux_y^2 + Uy_x^2 + 2Ux_y Uy_x) \\ & \left. - \frac{\eta}{n(i, j, t)} (Ux_x + Uy_y)^2 - \zeta T_g(i, j, t) \right], \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} Ux(i, j, t + 1) = & Ux(i, j, t) + \gamma \left[ - \frac{1}{n(i, j, t)} [ n(i, j, t) T_{gx} + T_g(i, j, t) N_x ] \right. \\ & + \frac{\eta}{n(i, j, t)} [ Ux_{xx} + Ux_{yy} ] \\ & \left. - [ Ux(i, j, t) Ux_x + Uy(i, j, t) Ux_y ] \right], \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned}
Uy(i, j, t + 1) = Uy(i, j, t) + \gamma & \left[ -\frac{1}{n(i, j, t)} [n(i, j, t)T_{gy} + T_g(i, j, t)N_y] \right. \\
& + \frac{\eta}{n(i, j, t)} [Uy_{yy} + Uy_{xx} + \\
& \left. -[Uy(i, j, t)Uy_y + Ux(i, j, t)Uy_x] \right], \tag{4.36}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n(i, j, t + 1) = n(i, j, t) + \gamma & [n(i, j, t)[Ux_x + Uy_y] + Ux(i, j, t)N_x \\
& + Uy(i, j, t)N_y]. \tag{4.37}
\end{aligned}$$

A matriz  $K$  aparece no laplaciano e nas derivadas, cuja forma explícita encontra-se no apêndice A.2.

Estas são as equações que governam a evolução temporal do CDS. O fator  $\gamma$  que aparece nas equações acima foi introduzido a fim de permitir o ajuste da rapidez com que o sistema computacional evolui

Desta forma contruímos um modelo CDS a partir das equações hidrodinâmicas para sistemas granulares, o qual utilizaremos para o estudo do comportamento dinâmico de sistemas constituídos por gases granulares aplicando diretamente nosso modelo, através de simulações computacionais.