

1

Introdução

Materiais granulares são constituídos por um grande número de entidades macroscópicas e sólidas, os grãos. Os sistemas granulares possuem grãos de tamanhos que podem variar desde pó (poeira), com $10^{-4} m$, até asteróides (anéis planetários), com mais de $10^2 m$. Esses sistemas estão amplamente presentes na natureza e também desempenham um papel importante em um grande número de processos industriais. Assim como sistemas moleculares, os sistemas granulares podem apresentar fase sólida, líquida e gasosa, dependendo das condições físicas impostas externamente. Um exemplo bem familiar é o da pilha de areia: em repouso, comporta-se como um sólido; depositada numa superfície plana e bastante inclinada, comporta-se como um fluido; ou ainda, suficientemente agitada dentro de um recipiente, apresenta o comportamento de um gás (se a quantidade de grãos for pequena). Além disso, vários aspectos das teorias por trás desses modelos podem ser aplicados a muitos fenômenos que, tradicionalmente, não estão associados aos materiais granulares. Como exemplos, podemos citar o movimento de fluxo de linhas em supercondutores, fluxo de tráfego, aglomeração de galáxias e anéis planetários.

Grãos são tipicamente rígidos e podem apresentar diferentes densidades, formas, tamanhos e rugosidades de superfície. Além disso, misturas reais de grãos são caracterizadas por uma distribuição variada de tamanhos, como mostra a figura 1.1, usada em uma aplicação industrial. Vemos ali uma larga distribuição de tamanhos, bem como diferentes formas geométricas para diferentes tamanhos dos grãos.

Entre os grãos existem interações de vários tipos. Durante o contato entre os grãos encontramos forças elásticas compressivas e de van der Waals (que tornam-se muito relevantes quando o diâmetro dos grãos é menor que $80 \mu m$, e estes encontram-se próximos uns dos outros). Em geral, um certo grau de umidade é encontrado no ar e, portanto, se a superfície dos grãos estiver úmida, um filme de água pode cobrir os mesmos (figura 1.2) e formar um meio líquido que permeia o espaço entre eles. Esta umidade gera forças de atração entre os grãos devido à tensão superficial.

Essas forças de atração são globalmente chamadas de forças de coesão

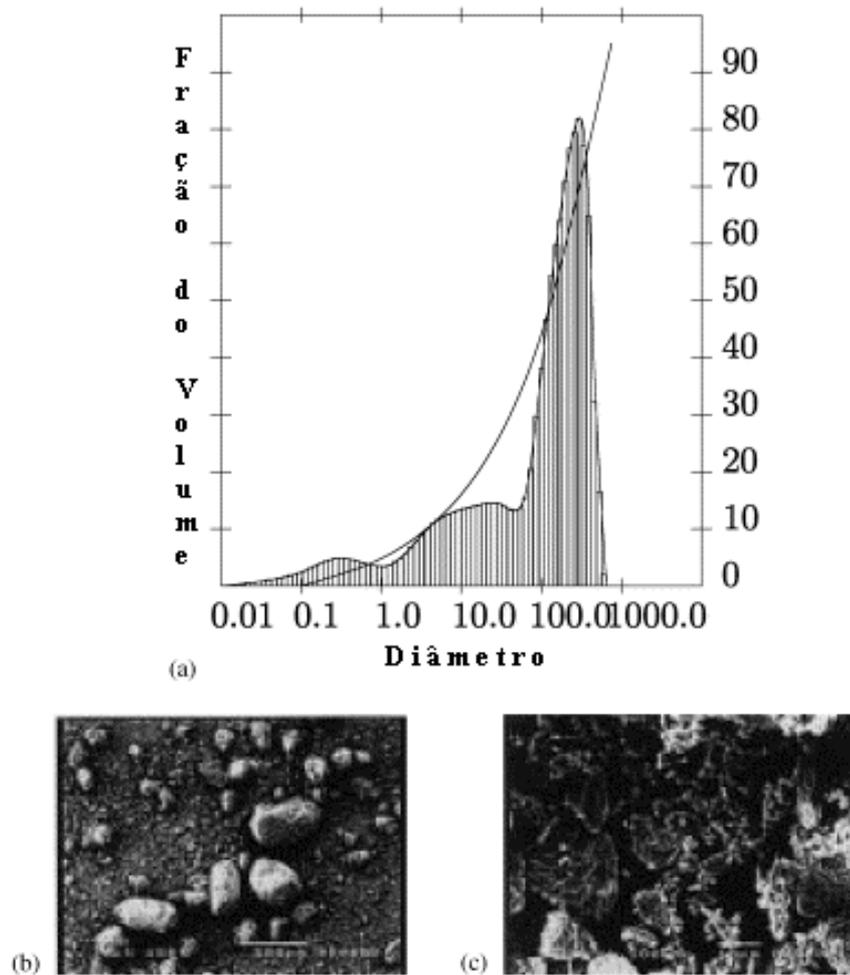


Figura 1.1: (a) Exemplo para uma distribuição de tamanhos diferentes de grãos, com os diâmetros dos mesmos medidos em μm . Abaixo, fotos tiradas com um microscópio em escalas de $500 \mu m$ (b) e de $10 \mu m$ (c). Figura reproduzida do artigo [1].

e também tornam-se relevantes apenas abaixo de um determinado valor para o tamanho dos grãos (além de depender do grau de umidade). Fora as forças atrativas, há também as forças eletrostáticas repulsivas, que surgem devido às cargas sobre a superfície dos grãos, originadas do atrito entre eles.

Um dos pioneiros no estudo dos meios granulares foi Osborne Reynolds, que introduziu entre outros o conceito de dilatância [3], um efeito facilmente observado quando caminhamos sobre a areia úmida numa praia. Ao exercermos uma pressão na areia com nossos pés, a região ao redor deles torna-se imediatamente ressecada. Reynolds explicou esse fato mostrando através de um experimento bem simples (um recipiente, com uma parede deformável, cheio com areia e um nível de água suficiente) que, dado que os grãos antes da deformação estão compactados acima de uma determinada densidade crítica (conhecida como densidade de Reynolds, ρ_R), eles precisam se separar por uma certa distância antes de moverem uns em relação aos outros (considerando que

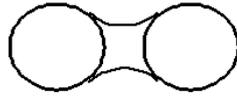


Figura 1.2: Dois grãos cobertos por um filme de água. A tensão superficial encontrada aí gera forças de atração entre os grãos.

os grãos são essencialmente rígidos) quando a compressão é aplicada. Assim a água escorre pelo espaço criado na areia “seca”. Ao liberarmos a pressão, o processo inverso acontece. A figura 1.3 mostra o experimento de Reynolds.

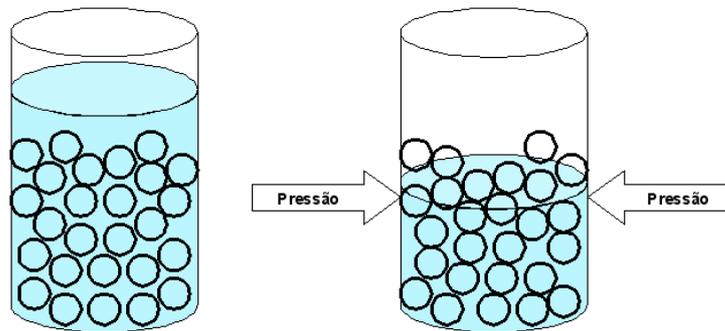


Figura 1.3: Experimento de Reynolds. O recipiente contém grãos e uma certa quantidade de água. Ao aplicarmos uma pressão na parede lateral, os grãos atingem uma configuração onde a água penetra nos espaços entre eles, fazendo com que o nível da água no recipiente diminua.

Um dos parâmetros mais importantes que caracterizam um sistema granular é a sua densidade. Ela controla o comportamento mecânico do sistema. A figura 1.4 mostra o resultado de uma simulação computacional de um sistema compactado de discos de tamanhos idênticos, porém com diferentes densidades. No quadro (c) da figura, vemos a aparência ordenada da estrutura, típica de uma alta densidade. O quadro (b) mostra a situação quando o sistema se encontra justamente com a densidade crítica de Reynolds, ρ_R . Trata-se do maior valor da densidade no qual o efeito da dilatância, descrito anteriormente, não ocorre durante a deformação. Finalmente, no quadro (a), o sistema encontra-se tão diluído que não mais observamos a dilatância quando ele é submetido a uma compressão. Neste caso, o sistema granular responde a uma compressão como um sólido usual o faz.

Sistemas granulares têm uma fenomenologia muito rica cujo comportamento freqüentemente difere daqueles observados em sólidos, líquidos e gases. Um exemplo bem conhecido é o do armazenamento de cereais em silos. Poderíamos assumir que, para calcularmos a pressão nas paredes do

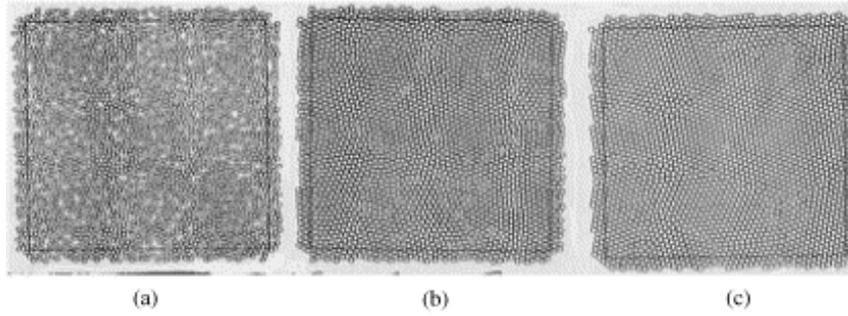


Figura 1.4: Sistema de disco de tamanhos idênticos com diferentes densidades: (a) $\rho = 0.5628$, (b) $\rho = 0.7394$ e (c) $\rho = 0.8681$. Figura reproduzida da referência [2].

silo, a aproximação hidrostática (pressão crescente com a profundidade) fosse suficiente. Entretanto, na prática, uma distribuição de estresse linear e irregular forma-se através dos grãos e, com isso, as pressões locais nas paredes podem atingir valores muito elevados, capazes de quebrar o silo e causar um grande dano.

Por outro lado, para sistemas granulares em fluxo, as colisões inelásticas entre as partículas que compõem o sistema desempenham um papel crucial em sua evolução. Se, por exemplo, deixarmos cair dez bolas de gude sobre uma superfície de aço, cada uma delas irá colidir várias vezes com a mesma até parar. Porém, se colocarmos as mesmas dez bolas de gude dentro de um saco, deixando o mesmo cair sobre a mesma superfície de aço, todas as bolas irão parar após um pequeno intervalo de tempo. Isto se deve ao fato de que, além das colisões inelásticas entre as bolas e a superfície, há também várias colisões entre as próprias bolas, com a conversão de energia cinética em energia térmica. Esse é um dos motivos pelos quais os sacos de areia têm uma boa capacidade de absorver impactos.

As interações entre grãos de areia secos são predominantemente repulsivas. As energias típicas envolvidas na dinâmica desses sistemas são da ordem da energia mecânica desses grãos,

$$mgd + \frac{1}{2}mv^2,$$

onde m e d são a massa e o diâmetro típico dos grãos, g a aceleração da gravidade e v a velocidade típica. Essa energia, para grãos de areia de $d \sim 3 \times 10^{-4} m$ com $v \sim 10^0 m/s$, é da ordem de (ou até maior que) $10^{13} k_B T$, onde $k_B T$ é a energia térmica tipicamente associada a 1 grau de liberdade em equilíbrio ¹. As interações entre os grãos podem depender também das

¹ $k_B = 1,381 \times 10^{-23} J/K$ é a constante de Boltzmann. Para sistemas granulares, escrevemos T com dimensão de energia, equivalente a $k_B = 1$.

propriedades físicas do gás intersticial.

É comum definir uma temperatura granular (T_g) em termos da média da energia cinética dos grãos. Uma vez mostrado que $T_g \gg k_B T$, a temperatura ordinária será irrelevante para a dinâmica macroscópica do sistema. Isto significa que a temperatura ordinária não participa diretamente da dinâmica granular. Podemos acrescentar também que velocidades típicas dos grãos são da ordem de $10^0 m/s$, enquanto que as velocidades típicas dos átomos são da ordem de $10^3 - 10^4 m/s$. Como a razão entre a massa de um grão e a massa de um átomo é da ordem de 10^{23} , temos, portanto, que (visto o exemplo acima)

$$\frac{T_g}{k_B T} \gg 1.$$

Se deixarmos um gás granular inicialmente homogêneo evoluir livremente no tempo, ou seja, sem trocar energia com o meio externo, ele não alcançará um estado estacionário (como esperaríamos para os gases moleculares) devido à inelasticidade das colisões (que provoca um decréscimo na temperatura granular). Ao invés disso, o sistema alcançará inicialmente um estado de resfriamento homogêneo, onde sua temperatura média decrescerá monotonicamente, obedecendo (inicialmente) a Lei de Haff [4],

$$T(t) = T_0 \left(1 + \frac{t}{\tau}\right)^{-h},$$

onde τ é um intervalo de tempo transiente típico, e h é um expoente que assume diferentes valores de acordo com a dependência entre o coeficiente de restituição entre os grãos e a velocidade relativa inicial dos mesmos, r e v_{rel} , respectivamente. Usamos este conceito pois a maneira mais simples de caracterizarmos a dissipação que ocorre numa colisão inelástica é através do coeficiente de restituição, r . Com isso, determinamos o grau de perda de energia numa colisão, com $0 \leq r \leq 1$, sendo 0 o caso totalmente inelástico e 1 o caso perfeitamente elástico.

A Física de Grãos ainda é uma área eminentemente experimental, e trata de problemas bastante complexos que envolvem diversos tipos de interações entre os componentes do sistema. Por isso, são ainda poucas as previsões teóricas concretizadas que, de fato, anteciparam-se a resultados experimentais. Um dos primeiros modelos teóricos a dar contribuições significativas ao entendimento de sistemas granulares foi proposto por Bagnold [5], ajudando na compreensão de muitos fenômenos associados ao fluxo rápido de grãos. Este modelo baseia-se no equilíbrio entre o momento retirado do fluxo de ar e o momento absorvido pelos grãos em vôo. Outro, ainda mais antigo, de 1885, foi o modelo de Janssen que descreve a distribuição média do estresse em relação

à profundidade de um sistema estático de grãos [6]. Neste último, os grãos são tratados como um meio contínuo.

Uma das principais causas da dificuldade em se tratar teoricamente os sistemas granulares através dos métodos da Mecânica Estatística é a presença de grandes flutuações nas quantidades físicas relevantes. Nos sistemas moleculares usuais, podemos tomar um elemento de volume representativo e obter boas médias das variáveis dinâmicas dentro dele, pois encontra-se aí um grande número de moléculas. Isto nos permite passar ao limite do contínuo, ou seja, dos longos comprimentos de onda, com boa aproximação. Já nos sistemas granulares, não podemos nunca escolher um volume tal que contenha uma quantidade suficientemente grande de grãos devido ao tamanho macroscópico dos mesmos em relação ao recipiente.

Um problema freqüentemente abordado pelas linhas de pesquisa atuais em sistemas granulares é o da formação de aglomerados, que podem ser encontrados em muitos dos sistemas de interesse prático, tais como condutos e tubos para grãos.

Um instrumento bastante popular, onde podemos observar a presença de aglomerados, é a ampulheta. A possibilidade de medirmos (com boa precisão) a passagem do tempo com este dispositivo, deve-se ao fato de que o fluxo de grãos tem uma velocidade aproximadamente constante através do orifício central. Este fenômeno ocorre graças à uma característica dos aglomerados, os arcos, que fazem com que a pressão não dependa da altura da coluna de areia. A figura 1.5 mostra um esquema de uma ampulheta, com a formação de um aglomerado e a presença de um arco acima do orifício central.

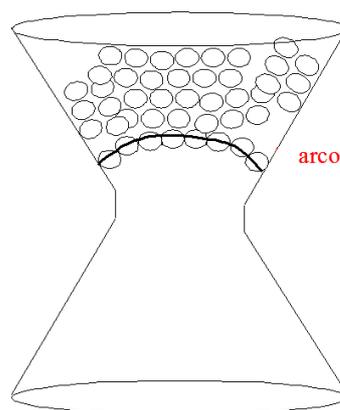


Figura 1.5: Aglomerado de grãos em uma ampulheta com a presença de um arco dentro dessa estrutura.

A formação desses aglomerados ocorre graças a um aumento das colisões entre os grãos dentro do sistema, seguido por uma redução da energia

cinética dos mesmos. Uma abordagem bastante comum desse problema é feita através de aproximações hidrodinâmicas, que fornecem resultados bem distintos para sistemas granulares inelásticos (cujos grãos apresentam coeficientes de restituição independentes da velocidade relativa entre eles) e elásticos (com coeficientes constantes). Tais resultados mostram que, ao contrário dos sistemas elásticos, as instabilidades na densidade dos grãos são apenas transientes nos sistemas com coeficientes de restituição dependentes da velocidade, nos casos em que consideramos a gravidade nula. Por isso, essa dependência que o coeficiente de restituição apresenta em relação à velocidade relativa dos grãos pode ser a causa da dissolução dos aglomerados em sistemas inelásticos.

Até o presente momento, vários modelos baseados em aproximações, tanto hidrodinâmicas como oriundas da teoria cinética, foram usados para descrever a formação e o comportamento de aglomerados em sistemas granulares em fluxo. Essa modelagem é bastante complexa e uma consequência direta dessa dificuldade é o surgimento de inúmeras técnicas de simulação numérica [7], que são usadas, por exemplo, para prever e otimizar o funcionamento de máquinas destinadas a operar com grãos, antes mesmo delas serem construídas. Experimentos com protótipos de engenharia são freqüentemente caros e, assim, tais simulações são um bom complemento, podendo até servirem como substitutas virtuais daqueles em alguns casos. Contudo, o uso de técnicas numéricas para a análise das instabilidades dos aglomerados granulares possui, em geral, um alto custo computacional quando nenhuma aproximação é utilizada. Isto se deve ao número colossal de colisões entre os grãos em um tempo finito. Além disso, para uma descrição mais precisa, é preciso alcançar tempos extremamente longos na evolução do sistema, bem como velocidades extremamente pequenas.

1.1

Objetivo

Na tentativa de descrever, de maneira contínua, o comportamento de um gás granular de baixa densidade, composto por grãos inelásticos, propomos um modelo teórico baseado em equações do tipo campo médio. O modelo analisa o comportamento de um aglomerado de grãos em 1 dimensão e apresenta soluções assintóticas para tempos muito longos. Diferentes comportamentos do coeficiente de restituição são considerados para as colisões entre os grãos. Trata-se de uma proposta de generalização do coeficiente de restituição dos grãos, a partir de vários casos particulares estudados na literatura [8].

Muitos artigos que tratam do comportamento do aglomerado granular

podem ser encontrados na literatura. Alguns dos mais notáveis fazem um bom resumo do assunto [9, 10, 11] (e nas referências). Entretanto, até o presente momento, poucos são os trabalhos que tratam do problema do aglomerado granular em tempos muito longos, dada a dificuldade computacional para se atingir tal limite. Com isso em mente, o presente trabalho contribui com um modelo teórico qualitativo, que apresenta uma forma generalizada para a forma do coeficiente de restituição. Com ele podemos encontrar, como resultados particulares, vários casos estudados até agora (como o caso elástico e o visco-elástico).

Esta tese está organizada da seguinte maneira: no capítulo 2 estudamos algumas das teorias usadas para o tratamento dos gases granulares. Analisamos as equações da hidrodinâmica granular para os sistemas de grãos em fluxo rápido. Além disso, discutimos as bases das técnicas de simulação numérica que utilizam equações de movimento, dependentes do tempo, para as partículas que compõem os sistemas granulares. Esta abordagem é conhecida como Dinâmica Molecular.

No capítulo 3, apresentamos a motivação principal para esta tese. Suas premissas básicas são discutidas a fim de situar o problema dentro do que é feito atualmente na área da física de grãos. As idéias principais são discutidas juntamente com as principais equações do modelo. No sentido de facilitar a compreensão, foram incluídos três apêndices com os desenvolvimentos matemáticos mais importantes.

No capítulo 4, discutimos as conclusões do trabalho. Para finalizar, ainda no mesmo capítulo, são deixadas sugestões para trabalhos futuros que podem complementar o que foi feito até agora.