

## 3 O Modelo CDS

Todos os fenômenos físicos descritos matematicamente, em princípio, podem ser estudados por abordagens diferentes: podem ser descritos por equações diferenciais, simulações computacionais a partir de primeiros princípios, etc. No entanto, em muitos casos essas equações não podem ser resolvidas exatamente, e somos obrigados, então, a lançar mão de métodos numéricos aproximados.

Devido à complexidade que as equações diferenciais geralmente apresentam, boas soluções numéricas requerem um alto custo computacional. Dependendo das informações físicas que queiramos extrair do sistema, podemos explorar outras maneiras de descrevê-lo, como por exemplo, um mapeamento do movimento de um corpo por uma seqüência de fotos ao longo de sua trajetória pode ser pensada como uma descrição simples do seu movimento.

### 3.1 Descrição

O modelo CDS apresentado por Oono e Puri<sup>31</sup>, para o estudo da dinâmica de separação de fases e utilizado também com sucesso no estudo da dinâmica de polímeros<sup>32</sup> é inspirado na idéia de mapeamento de um determinado fenômeno. Esse mapeamento é baseado na construção de um espaço-tempo discreto. Essa discretização do espaço consiste em cobri-lo com um reticulado de células de tamanhos fixos, às quais é associado um parâmetro de ordem (ou um conjunto deles) que caracterizará a configuração do sistema num determinado instante. É definido ainda sobre esse espaço uma conveniente regra que dirá como será a configuração de um sistema num determinado instante a partir de sua configuração num instante imediatamente anterior. Numa linguagem matemática, poderíamos pensar num operador  $T^L$  (fig. 3.1), definido sobre um reticulado  $L$ , que, atuando sobre um conjunto de parâmetros de ordem  $\psi(t)$ , no instante  $t$ , nos levará ao mesmo conjunto de parâmetros transladado temporalmente para o instante  $t + \tau$ , isto é,  $\psi(t + \tau) = T^L\psi(t)$ .

Num certo sentido, podemos dizer que o modelo CDS é análogo ao esquema de discretização de Euler para equações diferenciais, no entanto, para o CDS não temos nenhum compromisso em satisfazer as condições

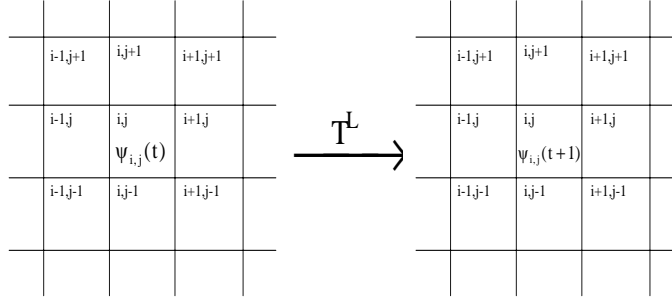


Figura 3.1: Representação esquemática de um CDS. Os reticulados representam o conjuntos de células e os  $\psi$ s representam o conjunto de parâmetros que descreverão a dinâmica do sistema

exigidas pelas equações diferenciais, portanto, estamos livres para incorporar termos empíricos a fim de melhorar a descrição física do sistema<sup>33</sup>.

No caso da dinâmica de separação de fase em uma mistura binária<sup>31</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.

Shinozaki<sup>33,34</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. 2.28-2.30), cujos parâmetros de ordem serão semelhantes às variáveis hidrodinâmicas usuais.

Nosso objetivo é construir nosso modelo CDS inspirado nesse esquema de discretização, aplicando-o às conhecidas equações hidrodinâmicas (eqs. 2.28-2.30). 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

$$\langle\langle f \rangle\rangle \equiv \frac{1}{6} \sum_{NN} f + \frac{1}{12} \sum_{NNN} f, \tag{3.1}$$

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. A título de exemplo, suponhamos que queiramos simular a difusão de calor em uma barra de comprimento finito  $L$ , termicamente isolada (fig 3.1). A discretização do espaço no CDS consiste em

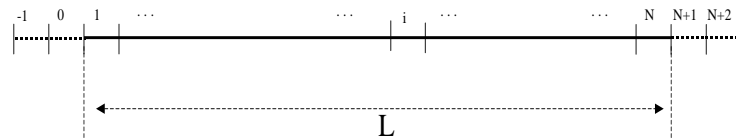


Figura 3.2: Representação esquemática da divisão de uma barra em  $N$  células unitárias. As células  $\{-1, 0, N + 1, N + 2\}$  são as células adicionais que facilitarão a implementação das condições de contorno.

dividir o comprimento da barra em células de 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:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}, \tag{3.2}$$

com

$$J(x, t) = -\kappa \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}, \tag{3.3}$$

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

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = -\kappa \nabla^2 T(x, t). \tag{3.4}$$

No CDS as eq. (3.4) seria:

$$T(i, t + 1) - T(i, t) = -\kappa_{CDS}(\langle T \rangle - T(i, t)), \quad (3.5)$$

onde

$$\langle T \rangle = \frac{T(i + 1) + T(i - 1)}{2}, \quad (3.6)$$

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

Para as condições de contorno, o que fazemos é simplesmente criar células adicionais (veja fig. 3.1), impondo simetrias convenientes, de modo que o fluxo 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  $x = L$ . 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.

### 3.2 Vantagens do Modelo

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

### 3.3 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:

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

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

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

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

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

### 3.3.1 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:

$$T_g^* = \frac{T_g}{m v_{g0}^2}, \quad (3.7)$$

$$n^* = n d^2, \quad (3.8)$$

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{v_{g0}}, \quad (3.9)$$

$$t^* = \frac{t}{\tau}, \quad (3.10)$$

$$\nabla^* = a^2 \nabla. \quad (3.11)$$

No que segue, usaremos as equações (3.7), (3.8) e (3.9) para fazer a conexão entre os valores experimentais e nossos valores de simulação computacional.

## 3.4 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 (3.7), (3.8) e (3.9). A partir

de agora vamos trabalhar num sistema constituído por um gás granular bidimensional. Para tanto, reescrevamos as equações hidrodinâmicas (2.28, 2.29, 2.30) para este caso<sup>22</sup>:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (n\mathbf{u}) \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{mn}\nabla(nT_g) + \frac{\eta}{nm}\nabla \cdot [(\nabla\mathbf{u} + [\nabla\mathbf{u}]^\dagger - \nabla \cdot \mathbf{u})] - \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}T_g &= -\mathbf{u} \cdot \nabla T_g + \frac{\lambda}{n}\nabla \cdot (\nabla T_g) - T_g\nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\eta}{n}(\nabla\mathbf{u} + [\nabla\mathbf{u}]) : \nabla\mathbf{u} \\ &\quad - \frac{\eta}{n}(\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - BnT_g^{8/5}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Onde supomos que os coeficientes de transporte,  $\eta$  e  $\lambda$  dependem apenas da temperatura média do sistema. Isto é razoável pois estamos considerando um sistema onde a temperatura varia muito pouco com as coordenadas, isto é, o sistema quase homogêneo<sup>a</sup>. Neste caso podemos escrever as equações (3.12, 3.13 e 3.14), em termos de suas componentes como:

$$\partial_t n = -\partial_\alpha(nu_\alpha) \quad (3.15)$$

$$\partial_t u_\alpha = \frac{1}{mn}\partial_\alpha(nT_g) + \frac{\eta}{mn}\partial_\beta(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \frac{\eta}{mn}\partial_\alpha\partial_\beta u_\beta - u_\beta\partial_\beta u_\alpha \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \partial_t T_g &= -u_\alpha\partial_\alpha T_g + \frac{\lambda}{n}\nabla^2 T_g - T_g\partial_\alpha u_\alpha + \frac{\eta}{n}(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)\partial_\alpha u_\beta \\ &\quad - \frac{\eta}{n}(\partial_\alpha u_\alpha)^2 - nBT_g^{8/5} \end{aligned} \quad (3.17)$$

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:

$$\begin{aligned} T_g(i, j, t + 1) &= T_g(i, j, t) + \gamma \left[ - (T_{gx}Ux(i, j, t) + T_{gy}Uy(i, j, t)) - T_g(i, j, t) \right. \\ &\quad \times (Ux_x + Uy_y) + \frac{\lambda}{n(i, j, t)} [\langle\langle T_g \rangle\rangle_t - T_g(i, j, t)] \\ &\quad + \frac{\eta}{n(i, j, t)} (2Ux_x^2 + 2Uy_y^2 + Ux_y^2 + Uy_x^2 + 2Ux_yUy_x) \\ &\quad \left. - \frac{\eta}{n(i, j, t)} (Ux_x + Uy_y)^2 - Bn(i, j, t)T_g(i, j, t)^{8/5} \right], \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} Ux(i, j, t + 1) &= Ux(i, j, t) + \gamma \left[ -\frac{1}{n(i, j, t)} [n(i, j, t)T_{gx} + T_g(i, j, t)N_x] \right. \\ &\quad + \frac{\eta}{n(i, j, t)} [Ux_{xx} + Ux_{yy}] \\ &\quad \left. - [Ux(i, j, t)Ux_x + Uy(i, j, t)Ux_y] \right], \end{aligned} \quad (3.19)$$

<sup>a</sup> Nosso sistema deve, portanto, permanecer sempre fluido com baixa densidade, isto é, não deve conter aglomerados. Por isso as grandes variações de densidade são suavizadas através de trocas com a vizinhança.

$$\begin{aligned}
 Uy(i, j, t + 1) = Uy(i, j, t) + \gamma \left[ -\frac{1}{n(i, j, t)} [n(i, j, t)T_{gy} + T_g(i, j, t)N_y] \right. \\
 \left. + \frac{\eta}{n(i, j, t)} [Uy_{yy} + Uy_{xx} + \right. \\
 \left. - [Uy(i, j, t)Uy_y + Ux(i, j, t)Uy_x] \right], \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 n(i, j, t + 1) = n(i, j, t) + \gamma [n(i, j, t)[Ux_x + Uy_y] + Ux(i, j, t)N_x \\
 + Uy(i, j, t)N_y]. \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

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. Estas equações são equivalentes a um conjunto de equações adimensionais:

$$\frac{\partial n^*}{\partial t} = -\nabla^* \cdot (n^* \mathbf{u}^*), \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} = -\frac{1}{mn^*} \nabla^* (n^* T_g^*) + \frac{\eta^* \sqrt{T_{g0}^*}}{n^* m} \nabla^* \cdot [(\nabla^* \mathbf{u}^* + [\nabla^* \mathbf{u}^*]^\dagger - \nabla^* \cdot \mathbf{u}^*)] \\
 - \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^*, \quad (3.23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial T_g^*}{\partial t^*} = -\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* T_g^* + \frac{\lambda^* \sqrt{T_{g0}^*}}{n^*} \nabla^* \cdot (\nabla^* T_g^*) - T_g^* \nabla^* \cdot \mathbf{u}^* + \frac{\eta^* \sqrt{T_{g0}^*}}{n^*} \\
 \times (\nabla^* \mathbf{u}^* + [\nabla^* \mathbf{u}^*]^\dagger) : \nabla^* \mathbf{u}^* - \frac{\eta^* \sqrt{T_{g0}^*}}{n^*} (\nabla^* \cdot \mathbf{u}^*)^2 - B^* n^* T_g^{*\frac{8}{5}}, \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

onde usamos o fato de que  $\eta$  e  $\lambda$  são proporcionais a  $\sqrt{T_{g0}}$ .

### 3.4.1 Limite contínuo

A fim de estabelecer uma relação entre os parâmetros computacionais e os valores das variáveis físicas, no mundo real, verifiquemos o limite contínuo para as equações do CDS (eqs. 3.18-3.21), utilizando as relações (3.7-3.11), podemos escrever, para a temperatura granular:

$$\begin{aligned}
 \frac{\tau}{mv_{g0}^2} \frac{\partial}{\partial t} T_g^*(\mathbf{r}, t) \approx \left[ -\frac{a\gamma}{mv_{g0}^3} \mathbf{u} \cdot \nabla T_g + \frac{a\gamma}{mv_{g0}^3} T_g \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\lambda\gamma a^2}{d^2 mv_{g0}^3 n \sqrt{m}} \nabla^2 T_g \right. \\
 \left. + \frac{\eta_0 \gamma a^2}{d^2 v_{g0}^3 \sqrt{m}} \frac{\sqrt{T_{g0}}}{n} (\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger) : \nabla \mathbf{u} \right. \\
 \left. - \frac{\eta_0 \gamma a^2}{d^2 v_{g0}^3 \sqrt{m}} \frac{\sqrt{T_{g0}}}{n} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{B d^2 \gamma}{(mv_{g0}^2)^{\frac{8}{5}}} n T_g \frac{8}{5} \right], \\
 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} T_g(\mathbf{r}, t) \approx -\frac{a\gamma}{v_{g0} \tau} [\mathbf{u} \cdot \nabla T_g - T_g \nabla \cdot \mathbf{u}] + \frac{\lambda\gamma}{n \tau \sqrt{m} v_{g0}} \nabla^2 T_g \\
 + \frac{\eta_0 \sqrt{m} \gamma \sqrt{T_{g0}}}{v_{g0} \tau} \frac{\sqrt{T_{g0}}}{n} (\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger) : \nabla \mathbf{u}
 \end{aligned}$$

$$-\frac{\eta_0 \sqrt{m} \gamma \sqrt{T_{g0}}}{v_{g0} \tau} \frac{1}{n} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{B a^2 \gamma}{m^{\frac{3}{5}} v_{g0}^{\frac{6}{5}} \tau} n T_g^{\frac{8}{5}}.$$

A escala de tempo é fixada. Observando que, a fim de obtermos as equações hidrodinâmicas para a temperatura (3.14), escolhemos

$$\frac{a \gamma}{v_{g0} \tau} = 1 \Rightarrow \frac{\gamma}{\tau} = \frac{v_{g0}}{a} \quad (3.25)$$

assim

$$\lambda = \frac{\gamma \lambda^* \sqrt{T_{g0} a^2}}{\tau \sqrt{m} v_{g0} d^2} = \frac{\lambda^* \sqrt{T_{g0} a}}{\sqrt{m} d^2}, \quad (3.26)$$

$$\eta = \frac{\gamma \eta^* \sqrt{m T_{g0} a^2}}{\tau v_{g0} d^2} = \frac{\eta^* \sqrt{m T_{g0} a}}{d^2} \quad (3.27)$$

e

$$\bar{B} = \frac{d^2}{m^{\frac{3}{5}} v_{g0}^{\frac{1}{5}}} B. \quad (3.28)$$

As quantidades  $\lambda^*$ ,  $B^*$  e  $\eta^*$  são valores computacionais adimensionais.

A fim de comparar com os dados experimentais, observemos que para o caso de um sistema bidimensional os coeficientes de transportes são dados por<sup>35,36</sup>:

$$\eta = \eta(r) = \frac{5 \sqrt{m T_{g0}}}{32 d} \bar{\eta}(r), \quad (3.29)$$

$$\lambda = \lambda(r) = \frac{1 \sqrt{T_{g0}}}{16 d \sqrt{m}} \bar{\lambda}(r), \quad (3.30)$$

onde  $r$  é o coeficiente de restituição. De acordo com as eq. (3.26 e 3.27) temos:

$$\eta^* = \frac{5 \bar{\eta}(r)}{32} \left( \frac{d}{a} \right) \quad (3.31)$$

$$\lambda^* = \frac{\bar{\lambda}(r)}{16} \left( \frac{d}{a} \right). \quad (3.32)$$

Desde que para o caso quase elástico  $\eta(r) \approx \lambda(r) \approx 1$  (veja ref. 23) que os parâmetros computacionais  $\eta^*$  e  $\lambda^*$  devem ser pequenos, pois a razão  $d/a$  deve ser pequena. A razão física desta última afirmativa reside no fato de que cada célula dinâmica deve ter um tamanho muito maior que o livre caminho médio para que as médias internas à célula façam sentido e colisões possam ocorrer. De fato, sendo  $l$  o livre caminho médio, temos:



$$l = \frac{1}{nd} = \frac{d}{nd^2} = \frac{d}{n^*} \Rightarrow n^* = \frac{d}{l}. \quad (3.33)$$

Para um gás granular bastante diluído ( $n^* \approx 0, 1$ ),  $d \approx 0, 1l$ , logo

$$\frac{d}{a} \approx 0, 1l/a \ll 1. \quad (3.34)$$

A proposta original deste trabalho é o desenvolvimento de um modelo CDS aplicado a sistemas granulares, o que fizemos neste capítulo. Julgamos, portanto, estar de posse de um método eficiente para estudar esses sistemas. Nosso objetivo agora é estudar sistemas constituídos por gases granulares, aplicando diretamente nosso modelo, através de simulações computacionais<sup>b</sup>. Para tal, utilizaremos valores realistas do ponto de vista de comparação com resultados anteriores<sup>35</sup>, ou seja,  $\lambda = 0.002$ ,  $\eta = 0.005$ ,  $n^* = 0.1$ . Se por exemplo tomarmos valores grandes dos parâmetros ( $\lambda \gtrsim 0.01$ ,  $\eta \gtrsim 0.01$ ,  $n^* \gtrsim 0.6$ ), começam a surgir problemas numéricos inerentes ao modelo.

---

<sup>b</sup>O código do programa está listado no apêndice (A.2).