

2 Hidrodinâmica do Gás Granular

Alguns sistemas podem ser bem descritos usando-se um conjunto de equações hidrodinâmicas. Estas, sob determinadas condições, podem ser usadas para descrever um gás granular rarefeito. Para tal sistema, elas podem ser postuladas a priori, ou derivadas da equação de Boltzmann-Enskog. Os coeficientes de transporte, que assim como para um gás usual, para um gás de grãos, podem ser obtidos analiticamente. Neste capítulo mostraremos os passos mais importantes para a derivação das equações hidrodinâmicas, a partir da equação de Boltzmann, e do método de Chapman-Enskog para obter os coeficientes de transporte para um gás granular a baixa densidade, na ausência de forças externas, no qual os grãos colidem inelasticamente com um coeficiente de restituição dependente da velocidade relativa inicial de impacto entre eles.

2.1 Hidrodinâmica

Em um gás molecular existem dois tipos bem distintos de escalas de espaço e tempo: as escalas microscópicas, caracterizadas pelo livre caminho médio (distância média entre colisões sucessivas) e tempo médio entre colisões; e as escalas macroscópicas, que se caracterizam pelo tempo de evolução das variáveis hidrodinâmicas e o tamanho de suas inhomogeneidades espaciais. Esta separação de escalas significa que as variáveis macroscópicas variam muito pouco no espaço e no tempo se medidas nas unidades microscópicas.

Em um sistema hidrodinâmico, uma variável macroscópica, por exemplo a densidade, pode variar apreciavelmente para uma distância de apenas 1 mm. No caso de um gás molecular o número de partículas dentro de um volume de 1 mm³ é tão grande que podemos dividi-lo em pequenas partes, nas quais a variável em questão varia suavemente. Assim sendo, o sistema pode ser tratado como um meio contínuo, e podemos definir uma função distribuição de densidades $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, com a qual podemos calcular a média de uma variável qualquer $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$:

$$\langle \phi \rangle(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{n} \int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \text{ onde } n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.1)$$

Devido ao tamanho dos grãos, sua densidade em número de partículas

é bem menor que a de um sistema hidrodinâmico usual. Por exemplo, em 1 mm^3 de água há cerca de 10^{19} moléculas, enquanto num mesmo volume de areia existem apenas cerca de 10 grãos. Isto gera algumas dúvidas sobre a aplicabilidade da hipótese de meio contínuo para sistemas granulares.

Poderíamos pensar que num experimento com sistemas granulares bastaria apenas utilizarmos um sistema cujo tamanho fosse muito maior que o tamanho típico dos grãos. Então poderíamos aplicar com sucesso a hipótese de contínuo. Contudo, na prática, se para um fluido molecular temos que a razão entre o tamanho do sistema e o diâmetro das moléculas pode chegar a ser da ordem de 10^8 , num sistema composto por grãos de areia esta seria somente de 10^3 . Logo, uma simples mudança de escala não é suficiente para tratar o sistema neste modelo.

Um fator crucial que devemos considerar é a inerente inelasticidade das colisões granulares. Se tomarmos um sistema denso no qual a distância média entre os centros de massa dos grãos é pouco maior que seus diâmetros, ao qual é fornecido energia externa de maneira que possam acontecer um número razoável de colisões, a cada colisão acontece uma perda grande de energia e o livre caminho médio é da ordem de poucos diâmetros. Portanto nesta escala as variáveis macroscópicas variam significativamente, mas se usarmos uma escala de comprimento e tempo muito maiores que o livre caminho médio e o tempo médio de colisão respectivamente, poderemos, no regime descrito acima (gás granular), tratar o sistema de maneira hidrodinâmica.

A evolução temporal da função distribuição de velocidades é determinada pela equação de Boltzmann (sem campo externo, por simplicidade):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}, \quad (2.2)$$

onde o termo do lado direito leva em consideração o efeito das colisões.

Multiplicando os dois lados desta equação e integrando-a em \mathbf{v} obtemos a evolução da média de uma função devido às colisões $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ ¹²:

$$\int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.3)$$

Usando a definição de média (equação 2.1) podemos reescrever o primeiro termo do lado direito da equação acima como:

$$\int d\mathbf{v} \phi \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{v} \phi f = \frac{\partial}{\partial t} n \langle \phi \rangle; \quad (2.4)$$

e o segundo como:

$$\int d\mathbf{v} \phi v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \int d\mathbf{v} v_i \phi f - \int d\mathbf{v} v_i f \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} n \langle v_i \phi \rangle - n \left\langle v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right\rangle. \quad (2.5)$$

onde foi usada a notação $w_i = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{w}$. Assim:

$$\int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} = \frac{\partial}{\partial t} n \langle \phi \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} n \langle v_i \phi \rangle - n \left\langle v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right\rangle. \quad (2.6)$$

2.2 O efeito das Colisões

Se não houvessem colisões, todas as partículas que estivessem em um determinado volume do espaço de fases $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ centrado em (\mathbf{r}, \mathbf{v}) num instante t estariam num mesmo volume centrado em $(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v} + \mathbf{a}\delta t)$ num instante $t + \delta t$. Porém, neste intervalo de tempo podem acontecer colisões dentro deste volume, diminuindo o número de partículas nele, e ainda outras partículas podem entrar neste volume provenientes de colisões fora dele. Logo a função distribuição varia com o tempo. Isto pode ser expressado da seguinte maneira:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \delta t = (G - P)\delta t, \quad (2.7)$$

onde $Gd\mathbf{r}d\mathbf{v}\delta t$ é o número de colisões ocorrendo entre t e $t + \delta t$ na qual uma das partículas está em $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ depois da colisão, e $Pd\mathbf{r}d\mathbf{v}\delta t$ é o número de colisões ocorrendo entre t e $t + \delta t$ na qual uma das partículas está em $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ antes da colisão.

Para avaliar G e P temos de tomar um intervalo de tempo δt pequeno suficiente de modo a acontecer apenas uma colisão por partícula. Para tanto temos de ter um gás suficientemente diluído.

2.3 A Colisão Granular

O estudo da dinâmica de sistemas granulares a nível microscópico é muito complexo, uma vez que os grãos possuem formas irregulares, e conseqüentemente propriedades elásticas que dependem da forma. Para facilitar a descrição da colisão entre grãos utilizaremos o modelo de esferas rígidas viscoelásticas. Na ausência de forças externas, a taxa de colisão para duas esferas de diâmetro $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ com velocidades iniciais \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 , respectivamente pode ser calculada com o auxílio do cilindro de colisão e nos dá:

$$d\nu(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = F(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}| bdbd\epsilon d\mathbf{r}d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \delta t, \quad (2.8)$$

onde $F(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t)$ é a função de correlação a duas partículas, que nos dá probabilidade de um par de partículas com velocidades \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 estarem dentro do volume do cilindro de colisão, dado por $bdbd\epsilon |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}| \delta t$, onde $|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}| \delta t$ é

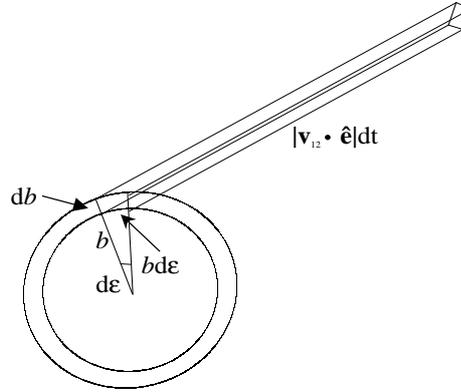


Figura 2.1: O cilindro de colisão onde b é o parâmetro de impacto.

o comprimento do cilindro de colisão (distância percorrida pela partícula 2 antes de colidir com a partícula 1, tomando como referencial a partícula 1) cuja a área da seção de choque é $bdbd\epsilon$ e \hat{e} é o vetor unitário na direção da reta que une o centro de massa das duas partículas no instante da colisão, dado por:

$$\hat{e} \equiv \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}. \quad (2.9)$$

A relação entre os parâmetros da seção de choque b e ϵ , depende das propriedades das interações entre as partículas. Para esferas rígidas de mesmo diâmetro, temos que $bdbd\epsilon = \sigma^2 d\epsilon'$, onde $\epsilon' = -\epsilon$. Neste caso temos:

$$d\nu(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = F(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) \sigma^2 \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{e}| d\epsilon' d\mathbf{r} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 dt, \quad (2.10)$$

onde $\Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{e})$ é a função de Heaviside que seleciona as direções das velocidades para as quais a colisão acontece.

Obtemos a taxa de colisão inversa (colisão entre partículas com velocidades iniciais \mathbf{v}'_1 e \mathbf{v}'_2 cujas velocidades finais eram \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 , respectivamente) a partir de uma análise similar à que fizemos para taxa de colisão direta (2.10), desta vez trocando \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 por \mathbf{v}'_1 e \mathbf{v}'_2 :

$$d\nu(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2) = F(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, t) \sigma^2 \Theta(-\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{e}) |\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{e}| d\epsilon' d\mathbf{r} d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2 dt. \quad (2.11)$$

Para obtermos o termo de colisão da Equação de Boltzmann, precisamos escrever a equação acima em termo das velocidades \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 . Vejamos então como se relacionam as velocidades \mathbf{v}'_1 e \mathbf{v}'_2 antes e \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 depois de uma colisão entre grãos. Consideremos partículas de mesma massa. Na ausencia de forças externas o momento total se conserva, logo,

$$\mathbf{v}'_1 + \mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2. \quad (2.12)$$

Com o vetor unitário $\hat{\mathbf{e}}$ decompomos o momento relativo $\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ em componentes c

$$\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 = (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)_r + (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)_t, \quad (2.13)$$

onde as componentes tangencial e radial são dadas por:

$$(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)_r = [(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{e}}]\hat{\mathbf{e}}, \quad (2.14)$$

e

$$(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)_t = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 - [(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{e}}]\hat{\mathbf{e}}. \quad (2.15)$$

Uma vez que as partículas são suaves, os graus de liberdade de rotação podem ser desprezados, logo a componente tangencial do momento relativo não se altera com a colisão. Já a parte tangencial se relaciona como:

$$(\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2)_r = -r(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)_r, \quad (2.16)$$

onde r é o coeficiente de restituição.

Desse modo podemos escrever:

$$(\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2) = -(1+r)[(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{e}}]\hat{\mathbf{e}} + (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2). \quad (2.17)$$

Utilizando as equações (2.12 e 2.17) podemos escrever as velocidades finais das partículas em termos das iniciais e do coeficiente de restituição:

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 - \frac{(1+r)}{2}[(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{e}}]\hat{\mathbf{e}} \quad (2.18)$$

e

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 + \frac{(1+r)}{2}[(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{e}}]\hat{\mathbf{e}}. \quad (2.19)$$

Muitos autores tem considerado o coeficiente de restituição constante, e esta hipótese simplifica bastante a análise. Contudo ela não concorda completamente com resultados experimentais. É verificado experimentalmente que coeficiente de restituição depende da velocidade inicial do impacto $g = |(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\mathbf{e}}|$ e tende para 1 para valores pequenos de

g , ou seja, as colisões se tornam cada vez mais elásticas. Usando o modelo de esferas viscoelásticas suaves temos o coeficiente de restituição¹³:

$$r = 1 - Cg^{1/5} + \frac{3}{5}C^2g^{2/5} \dots, \quad (2.20)$$

onde C depende das características elásticas e dissipativas das partículas. Observe que :

$$\lim_{g \rightarrow 0} r = 1. \quad (2.21)$$

A partir das relações entre as velocidades pré e pós-colisionais (2.3) e (2.3), encontramos que:

$$\Theta(-\mathbf{v}'_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}) = \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}), \quad (2.22)$$

$$g' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2 = \chi(g) g d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2, \quad (2.23)$$

onde o fator

$$\chi(|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|) = 1 + \frac{11}{5}C|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|^{1/5} + \frac{66}{25}C^2|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|^{2/5} \mp \dots \quad (2.24)$$

provém da relação $g' = r(g)g$ e do jacobiano da transformação das velocidades $(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2) \rightarrow (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$:

$$\frac{\partial(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2)}{\partial(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)} = \frac{1}{|r + g'r|} \quad (2.25)$$

Reescrevemos então a taxa de colisão inversa como:

$$d\nu(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2) = \chi(g)F(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, t)\sigma^2\Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}})|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|d\hat{\mathbf{e}}drd\mathbf{v}_1d\mathbf{v}_2\delta t \quad (2.26)$$

Com as taxas de colisão direta e inversa determinamos os termos de ganho e perda G e P :

$$Gd\mathbf{r}d\mathbf{v}_1\delta t = d\mathbf{r}d\mathbf{v}_1\delta t\sigma^2 \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\mathbf{e}}\Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}})|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|\chi F(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, t), \quad (2.27)$$

e

$$Pd\mathbf{r}d\mathbf{v}_1\delta t = d\mathbf{r}d\mathbf{v}_1\delta t\sigma^2 \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\mathbf{e}}\Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}})|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|F(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t). \quad (2.28)$$

Consideraremos agora que partículas afastadas por uma distância maior que seu diâmetro, antes de colidirem, estão descorrelacionadas. Esta aproximação é conhecida como "caos molecular". Desta forma temos:

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) = g_2(\sigma)f(\mathbf{v}_1, t)f(\mathbf{v}_2, t) \quad (2.29)$$

e

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, t) = g_2(\sigma) f(\mathbf{v}'_1, t) f(\mathbf{v}'_2, t) \quad (2.30)$$

Onde o valor de contato da função de distribuição a duas partículas $g_2(\sigma)$ leva em consideração o aumento da frequência de colisões devido ao efeito de volume excluído. Numa colisão no plano temos¹⁴:

$$g_2(\sigma) = \left(1 - \frac{7\phi}{16}\right) \frac{1}{(1 - \phi)^2}, \quad (2.31)$$

onde $\phi = n\pi\sigma^2/4$ é a fração de empacotamento, na qual n representa a densidade de número de partículas.

Assim escrevemos o termo de colisão da equação de Boltzmann-Enskog para um gás de partículas viscoelásticas com distribuição homogênea como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}_1, t) &= g_2(\sigma) \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e} \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| \\ &\quad [\chi f(\mathbf{v}'_1, t) f(\mathbf{v}'_2, t) - f(\mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{v}_2, t)] \\ &= g_2(\sigma) I(f, f). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Pode-se demonstrar também que¹⁵:

$$\int d\mathbf{v}_1 \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}_1, t) = \frac{1}{2} g_2(\sigma) \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e} \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| f(\mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{v}_2, t) \Delta[\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) + \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2)], \quad (2.33)$$

onde $\Delta\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i) \equiv [\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_i) - \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i)]$ é a variação de $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ em uma colisão.

2.4 Equações Hidrodinâmicas

As variáveis hidrodinâmicas são médias definidas por¹²:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.34)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \langle \mathbf{v} \rangle, \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{2} n(\mathbf{r}, t) T_g(\mathbf{r}, t) &= \int d\mathbf{v} \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \\ &= n(\mathbf{r}, t) \left\langle \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.36)$$

sendo $n(\mathbf{r}, t)$ a densidade em número de partículas, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ o fluxo, $T(\mathbf{r}, t)$ a temperatura e d a dimensão do espaço ($d = 1, 2, 3$). Para obtermos a evolução dessas médias basta substituímos as funções abaixo na equação 2.6, que correspondem, respectivamente à massa, ao momento linear e à energia.

$$\phi_1 = m, \quad (2.37)$$

$$\phi_2(\mathbf{v}) = m\mathbf{v}, \quad (2.38)$$

$$\phi_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = m|\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2/2, \quad (2.39)$$

Uma vez que a massa das partículas se conserva em uma colisão, para ϕ_1 temos:

$$\frac{\partial}{\partial t}mn + \frac{\partial}{\partial x_i}nm\langle v_i \rangle = 0 \quad (2.40)$$

Das definições de densidade e fluxo (2.34 e 2.35), temos:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(nu_i) = 0. \quad (2.41)$$

Analogamente, para obtermos a evolução do momento linear médio substituímos ϕ_2 na equação (2.6)

$$\frac{\partial}{\partial t}n\langle mv_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i}n\langle mv_i v_j \rangle - n \left\langle v_i \frac{\partial mv_i}{\partial x_i} \right\rangle = 0 \quad (2.42)$$

Pois, da equação (2.12) vemos que o momento linear se conserva e conseqüentemente teremos em (2.33) que:

$$\Delta[\phi_2(\mathbf{v}_1) + \phi_2(\mathbf{v}_2)] = \Delta[m\mathbf{v}_1 + m\mathbf{v}_2] = 0. \quad (2.43)$$

O termo $\langle v_i v_j \rangle$ pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \langle v_i v_j \rangle &= \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle + u_j \langle v_i \rangle + u_i \langle v_j \rangle - u_i u_j \\ &= \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle + u_i u_j. \end{aligned} \quad (2.44)$$

O primeiro termo do lado direito pode ser identificado como o tensor de pressão, definido por

$$P_{ij} = nm\langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle. \quad (2.45)$$

Logo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(nu_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}P_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j}(nu_i u_j) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) u_i + \frac{1}{nm} \frac{\partial}{\partial x_j} P_{ij} = 0. \quad (2.46)$$

Onde usamos a equação 2.41 e também:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.47)$$

A inelasticidade das colisões leva a uma diminuição da energia cinética, dada por $\Delta[\phi_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) + \phi_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2)]$. Das equações (2.3) e (2.3), temos:

$$\Delta \left[\frac{1}{2} m \mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2} m \mathbf{v}_2^2 \right] = -\frac{1}{4} m (1 - r^2) [\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}]^2. \quad (2.48)$$

E a equação (2.33) se escreve como:

$$\int d\mathbf{v}_1 \phi_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}_1, t) = -\frac{1}{8} g_2(\sigma) m \sigma^2 \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\mathbf{e}} \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}| f(\mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{v}_2, t) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{e}}|^2 (1 - r^2) = -\frac{d}{2} \zeta n T_g. \quad (2.49)$$

Substituindo $\phi_3 = m |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2 / 2$ na equação (2.6)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\langle \frac{m}{2} |\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2 \right\rangle &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} n \langle m |\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2 \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} n \langle m v_i |\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2 \rangle \\ &- n \left\langle m v_i \frac{\partial}{\partial x_i} |\mathbf{v} - \mathbf{u}|^2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Definindo o vetor fluxo de calor como

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2} n \langle (\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle, \quad (2.51)$$

das definições de temperatura (2.36) e tensor de pressão (2.45), temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} n \langle v_i |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle &= \frac{1}{2} n \langle (v_i - u_i) |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle + \frac{1}{2} n u_i \langle |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle \\ &= q_i + \frac{d}{2} n T_g u_i, \end{aligned} \quad (2.52)$$

e

$$\left\langle v_i \frac{\partial}{\partial x_i} |v_j - u_j|^2 \right\rangle = -2 \langle v_i (v_j - u_j) \rangle \frac{\partial}{\partial x_i} u_j = P_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} u_j. \quad (2.53)$$

Após algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$\frac{d}{2} n \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) T_g + \left(\frac{\partial}{\partial x_i} q_i + P_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} u_j \right) + \frac{d}{2} \zeta n T_g = 0. \quad (2.54)$$

Das equações (2.41), (2.4) e (2.54) temos então a evolução das variáveis que escrevemos sinteticamente como:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{u}) = 0, \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{n} \nabla \cdot \vec{P} = 0, \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T_g + \frac{2}{dn} (\nabla \cdot \mathbf{q} + \vec{P} : (\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u})) + \zeta T_g = 0. \quad (2.57)$$

Com exceção da taxa de decaimento da temperatura ζT , as equações acima possuem a mesma estrutura das equações para um gás molecular usual.

Este sistema de equações será fechado se o tensor de pressão \vec{P} e fluxo de calor \mathbf{q} puderem ser expressos em termos das variáveis hidrodinâmicas. Para isto nós aplicaremos o método de Chapman-Enskog.

2.5 O Método de Chapman-Enskog

Esse método é baseado em duas importantes hipóteses: primeiramente a evolução da função distribuição é completamente determinada pela evolução de seus primeiros momentos, ou seja, sua dependência espacial e temporal é somente através das variáveis hidrodinâmicas:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f[\mathbf{v}, n(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), T_g(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.58)$$

Como segunda hipótese, é assumido que o gás apresenta somente pequenas inhomogeneidades em uma escala microscópica. Assim temos uma hierarquia nas escalas de comprimento, e podemos fazer uma expansão por escala da função distribuição :

$$f = f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \lambda^2 f^{(2)} + \dots, \quad (2.59)$$

onde λ é um parâmetro pequeno que relaciona a escala microscópica com a macroscópica dado por¹³:

$$\lambda = \frac{l_{\text{livre caminho medio}}}{L_{\text{gradientes}}} \propto \frac{1}{n} \quad (2.60)$$

Desta maneira cada potência do parâmetro λ corresponde a ordem do gradiente. Então $f^{(0)}$ se refere ao estado homogêneo (gradientes nulos), $f^{(1)}$ corresponde a aproximação linear nos gradientes das variáveis, $f^{(2)}$ é a aproximação com termos quadráticos, e assim sucessivamente. Assumimos também, uma hierarquia nas escalas de tempo e, conseqüentemente, uma hierarquia nas derivadas temporais

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial^{(0)}}{\partial t} + \lambda \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\partial^{(2)}}{\partial t} \dots, \quad (2.61)$$

onde cada ordem da derivada temporal está relacionada a uma mesma ordem do gradiente.

Este é método de Chapman-Enskog usual para a solução de equações cinéticas. Em um gás molecular é adota-se $f^{(0)}$ como sendo a distribuição de equilíbrio de Maxwell, que é estacionária, logo $\partial_t^{(0)} f^{(0)} = 0$. Porém, como já foi mencionado, devido a inelasticidade das colisões, um gás de grãos sem alimentação de energia não atinge um estado estacionário. Portanto para tais sistemas homogêneos, devemos ter como $f^{(0)}$ a função distribuição para o estado de resfriamento homogêneo, cuja a forma detalharemos a seguir.

2.6 Evolução da Temperatura Granular

Analogamente a um gas molecular, definimos a temperatura granular como a energia cinética média das partículas (grãos), obtida a partir do segundo momento da função distribuição (equação 2.1).

$$\frac{d}{2}nT_g(t) = \int d\mathbf{v} \frac{mv^2}{2} f(\mathbf{v}, t) = \frac{d}{2}n \frac{mv_g^2(t)}{2} \quad (2.62)$$

sendo $v_g(t)$ a velocidade típica dos grãos e d a dimensão do espaço ($d = 1, 2, 3$).

Reescalando a função distribuição como

$$f(\mathbf{v}, t) = \frac{n}{v_g^d(t)} \tilde{f}(\mathbf{c}, t) \quad \text{com} \quad \mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{v_g(t)}, \quad (2.63)$$

podemos reescrever a temperatura granular:

$$T_g(t) = \frac{m}{d} \int d\mathbf{c} c^2 \tilde{f}(\mathbf{c}, t), \quad (2.64)$$

e a equação de Boltzmann-Enskog 2.2:

$$\frac{1}{v_g^2(t)} \frac{dv_g(t)}{dt} \left(3 + c_1 \frac{\partial}{\partial c_1} \tilde{f}(\mathbf{c}_1, t) + \frac{1}{v_g(t)} \frac{\partial}{\partial t} \right) \tilde{f}(\mathbf{c}_1, t) = g_2(\sigma) \sigma^{d-1} n \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) \quad (2.65)$$

Com a equação (2.33) encontramos que a evolução da temperatura granular no tempo é:

$$\frac{dT_g(t)}{dt} = \frac{1}{d} g_2(\sigma) m \sigma^{d-1} n v_g^3(t) \int d\mathbf{c}_1 c_1^2 \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) = -\frac{2}{d} B T_g \mu_2 \equiv -\zeta T_g \quad (2.66)$$

com $B \equiv B(t) = v_g(t) g_2(\sigma) m \sigma^{d-1} n$ e introduzimos os momentos da integral de colisão adimensionais, dados por:

$$\mu_p \equiv - \int d\mathbf{c}_1 c_1^p \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}). \quad (2.67)$$

Para o segundo momento temos:

$$\mu_2 = \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\hat{\mathbf{e}} \Theta(-\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}) |\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}|^3 \tilde{f}(\mathbf{c}_1, t) \tilde{f}(\mathbf{c}_2, t) (1 - \tilde{r}^2) \quad (2.68)$$

sendo \tilde{r} o coeficiente de restituição reescalado

$$\tilde{r} = 1 - C_1 \delta' |\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}|^{1/5} + C_1^2 \delta'^2 |\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}|^{2/5} \mp \dots \quad (2.69)$$

onde

$$\delta' \equiv C [v_g(t)]^{1/5} = C [2T_g(t)]^{1/10} \equiv \delta \left[\frac{2T_g(t)}{T_0} \right]^{1/10} \quad (2.70)$$

é um parâmetro no qual estão contidos os termos devidos aos efeitos dissipativos (onde consideramos $m = 1$ por simplicidade), com $\delta \equiv C T_0^{1/10}$ e $T_0 = T_g(0)$.

Se a dissipação é pequena, a função distribuição de velocidades é aproximada a uma distribuição de Maxwell e pode ser descrita por uma expansão em polinômios de Sonine:

$$\tilde{f}(\mathbf{c}, t) = \phi(c) \left(1 + \sum_{p=1}^{\infty} a_p(t) S_{\frac{d}{2}-1}^p(c^2) \right) \quad (2.71)$$

onde $\phi(c) \equiv \pi^{-3/2} \exp(-c^2)$ é a distribuição de Maxwell reescalada, $S_p(x)$ são os polinômios de Sonine e $a_k(t)$ são os coeficientes de Sonine dependentes do tempo.

Dado um número positivo s , tal que $s < 1$, os polinômios de Sonine $S_m^{(n)}(x)$ (m e x são reais e n é inteiro), são definidos pela expansão :

$$\frac{e^{-x} x^s}{(1-s)^{m+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} s^n S_m^{(n)}(x), \quad (2.72)$$

$$S_m^{(n)}(x) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(m+n)_{n-p}}{(n-p)! p!} (-x)^p,$$

onde o produto de q termos, $(r)_q$, é definido com segue:

$$(r)_q = r \times (r-1) \times (r-2) \times \dots \times (r-[q-1]). \quad (2.73)$$

Para um valor genérico de m temos:

$$S_m^{(0)}(x) = 1, \quad (2.74)$$

$$S_m^{(1)}(x) = m+1-x, \quad (2.75)$$

$$S_m^{(2)}(x) = \frac{1}{2}(m+2)(m+1) - (m+2)x + \frac{1}{2}x^2, \quad (2.76)$$

$$\vdots \quad (2.77)$$

Para o caso d dimensional temos $m = \frac{d}{2} - 1$, e:

$$S_{\frac{d}{2}-1}^{(0)}(c^2) = 1, \quad (2.78)$$

$$S_{\frac{d}{2}-1}^{(1)}(c^2) = \frac{d}{2} - c^2, \quad (2.79)$$

$$S_{\frac{d}{2}-1}^{(2)}(c^2) = \frac{d(d+2)}{8} - \frac{d+2}{2}c^2 + \frac{1}{2}c^4, \quad (2.80)$$

$$\vdots \quad (2.81)$$

Estes polinômios possuem a importante propriedade de ortogonalidade:

$$\int_0^{\infty} dx x^m e^{-x} S_m^{(n)}(x) S_m^{(n')}(x) = \delta_{nn'} \frac{\Gamma(m+1+n)}{n!}. \quad (2.82)$$

Na notação usada anteriormente em (2.71):

$$\int_0^{\infty} d\mathbf{c} \phi(c) S_{\frac{d}{2}-1}^{(p)}(c^2) S_{\frac{d}{2}-1}^{(p')}(c^2) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{\frac{d}{2}-1} \delta_{pp'} \frac{1}{n!} \Gamma\left(\frac{d}{2} + p\right) = \delta_{pp'} N_p. \quad (2.83)$$

Os coeficientes da expansão podem ser encontrados momentos da função distribuição $\tilde{f}(\mathbf{c}, t)$:

$$a_p = \frac{1}{N_p} \int d\mathbf{c} S_{\frac{d}{2}-1}^{(p)}(c^2) \tilde{f}(\mathbf{c}, t). \quad (2.84)$$

Devido à definição da temperatura granular, o primeiro coeficiente é nulo, enquanto os outros medem os desvios dos momentos da função distribuição de velocidades $\langle c^k \rangle$ em relação aos momentos da distribuição de Maxwell $\langle c^k \rangle_0$, por exemplo,

$$a_2 = \frac{\langle c^4 \rangle - \langle c^4 \rangle_0}{\langle c^4 \rangle_0} = \frac{4}{15} \langle c^4 \rangle - 1 \quad (2.85)$$

Então o coeficiente a_2 caracteriza o quarto momento da distribuição.

Para uma inelasticidade suficientemente pequena ($r \geq 0,6$), a função distribuição pode ser aproximada para o segundo coeficiente de Sonine, ou seja, os coeficientes de ordem mais alta a_k ($k \geq 3$) podem ser desprezados. Com esta aproximação, além da equação para a evolução da temperatura granular, temos mais uma para a_2 acoplada a ela¹⁵.

$$\frac{da_2}{dt} = \frac{4B}{3} \left(\mu_2(1 + a_2) - \frac{1}{5}\mu_4 \right) \quad (2.86)$$

Os momentos μ_2 e μ_4 podem ser obtidos em termos de $a_2(t)$ e $\delta'(t)$, e o sistema de equações acopladas (2.66) e (2.86), pode ser resolvido. Uma vez obtido o segundo coeficiente de Sonine como uma expansão no parâmetro $\delta'(t)$, temos então a forma da distribuição para um gás granular bidimensional^a no estado de resfriamento homogêneo:

$$\tilde{f}(\mathbf{c}, t) = \phi(c) \left(1 + a_2(t) S_0^2(c^2) \right), \quad (2.87)$$

com

$$a_2 = -0.388\delta' + 2.752\delta'^2 + \dots, \quad (2.88)$$

Com o segundo momento μ_2 encontramos a taxa de resfriamento:

$$\zeta = 2n\sigma \sqrt{\frac{\pi T_g}{m}} (1.294\delta'(t) - 2.093\delta'^2(t) + \dots), \quad (2.89)$$

^aEstamos particularmente interessados no caso bidimensional devido a as nossas simulações serem neste nível. Porém queremos enfatizar que este modelo na realidade é quase bidimensional, pois nos usamos o coeficiente de restituição para duas esferas viscoelásticas colidindo, e assumimos que o movimento das partículas esfericas do gás estão restritos ao plano.

2.7 Os coeficientes de Transporte

Com as hipóteses do método de Chapman-Enskog a equação de Boltzmann pode ser resolvida iterativamente para cada ordem de λ . é então usada para calcular o tensor de pressão P_{ij} e o vetor fluxo de calor \mathbf{q} .

Usando a expansão formal em termos do parâmetro λ podemos escrever a equação de Boltzmann-Enskog

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial^{(0)}}{\partial t} + \lambda \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + \dots \lambda \mathbf{v}_1 \cdot \nabla \right) (f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \dots) \\ & = I[(f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \dots), (f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \dots)], \end{aligned} \quad (2.90)$$

e coletamos os termos de mesma ordem em λ . Repetimos este mesmo procedimento com as equações hidrodinâmicas. Como já temos a forma de $f^{(0)b}$, podemos obter a forma de $f^{(1)}$:

$$f^{(1)} = \alpha \cdot \nabla \ln T_g + \beta \cdot \nabla \ln n + \gamma_{ij} \nabla_i \mathbf{u}_j, \quad (2.91)$$

a qual depende linearmente dos gradientes. Os coeficientes α , β e γ_{ij} são funções de \mathbf{v} e das variáveis hidrodinâmicas n, \mathbf{u} e T .

Escrevendo o tensor de pressão como:

$$P_{ij}(\vec{r}, t) = p \delta_{ij} + m \int \left(V_i V_j - \frac{d}{3} \delta_{ij} V^2 \right) f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v}, \quad (2.92)$$

onde $p = nT$ é a pressão hidrostática; e o vetor fluxo de calor como:

$$\vec{q}(\vec{r}, t) = \int \left(\frac{mV^2}{2} - \frac{d+2}{2} T_g \right) \vec{V} f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v}, \quad (2.93)$$

onde $\vec{V} = \vec{v} - \vec{u}$

Para cada ordem de λ obtemos a correspondente ordem do tensor de pressão $P_{ij}^{(1)}$ e do fluxo de calor, e $\mathbf{q}^{(1)}$.

A solução de ordem zero dá:

$$\begin{aligned} P_{ij}^{(0)} &= \delta_{ij} p, \\ \mathbf{q}^{(0)} &= 0. \end{aligned} \quad (2.94)$$

E a aproximação de primeira ordem

$$\begin{aligned} P_{ij}^{(1)} &= \delta_{ij} p - \eta \left(\nabla_i \mathbf{u}_j + \nabla_j \mathbf{u}_i - \frac{2}{d} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \right), \\ \mathbf{q}^{(1)} &= -\kappa \nabla T_g - \mu \nabla n \end{aligned} \quad (2.95)$$

^bLembramos que usamos $f^{(0)}$ como sendo a distribuição para o estado de resfriamento homogêneo obtida na seção anterior.

Sendo η e κ os coeficientes de viscosidade e condutividade térmica, respectivamente. O coeficiente μ não possui um análogo para um gás molecular.

Mantendo até a primeira ordem substituímos^c $f = f^{(0)} + f^{(1)}$ nas equações (2.92) e (2.93) e comparamos com as equações (2.94) e (2.95) e obtemos, após algumas manipulações algébricas, os coeficientes κ , μ , η a partir dos coeficientes $\vec{\alpha}$, $\vec{\beta}$ e γ_{ij} respectivamente:

$$\kappa = \frac{2}{\sigma} \sqrt{\frac{T_g}{m\pi}} (1 - 0.700\delta'(t) + 11.89\delta'^2(t) + \dots), \quad (2.96)$$

$$\mu = \frac{2T}{n\sigma} \sqrt{\frac{T_g}{m\pi}} (1.811\delta'(t) + 0.056\delta'^2(t) + \dots), \quad (2.97)$$

e

$$\eta = \frac{1}{2\sigma} \sqrt{\frac{mT_g}{\pi}} (1 + 0.234\delta'(t) + 0.308\delta'^2(t) + \dots), \quad (2.98)$$

Nesta ordem de aproximação, obtemos as equações hidrodinâmicas de Navier-Stockes, substituindo P_{ij} e \mathbf{q} nas equações (2.55), (2.56) e (2.57):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (n\mathbf{u}) \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{mn} \nabla(nT) + \frac{1}{nm} \nabla \cdot \left[\eta \left(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger - \frac{2}{d} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right] - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (2.100)$$

$$n \frac{\partial T_g}{\partial t} = -n\mathbf{u} \cdot \nabla T_g + \frac{2}{d} \nabla \cdot (\kappa \nabla T_g) - \frac{2}{d} \nabla \cdot (\mu \nabla n) - \frac{2}{d} n T_g \nabla \cdot \mathbf{u} + \eta \left(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger \right) : \nabla \mathbf{u} - \frac{2}{d} \eta (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \zeta T_g \quad (2.101)$$

No que segue utilizaremos estas equações para estudar a evolução de um gás granular a baixa densidade. Numa primeira ordem de aproximação os coeficientes de condutividade térmica e viscosidade, possuem a mesma dependência na temperatura que um gás molecular¹⁶. A crucial diferença entre estes dois sistemas é de fato a perda de energia devido as colisões inelásticas, representada nas equações acima pela taxa de resfriamento, que em um gás de grãos origina comportamentos dinâmicos anômalos interessantes, dos quais alguns trataremos com mais detalhes posteriormente.

^c λ é um indicador da ordem de aproximação, portanto não precisa aparecer na expressão literal