

## 5 Resultados Numéricos e discussões

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados que obtivemos a partir da simulação com o modelo CDS. Alguns resultados aqui apresentados já foram obtidos por outros métodos. No entanto, nosso objetivo em apresentá-los é mostrar a confiabilidade do modelo CDS para a descrição da dinâmica de sistemas granulares.

### 5.1 Descrição do sistema

Simularemos computacionalmente sistemas constituídos por gases granulares confinados em uma caixa bidimensional. Tais sistemas já têm sido bem estudados por diversos autores (Menon<sup>9</sup>, Kudrolli<sup>26</sup>, etc.), embora muitos fenômenos não estejam ainda bem entendidos. Nosso principal objetivo ao estudá-los é comparar nossos resultados com os de outros autores.

#### 5.1.1 Configuração inicial dos parâmetros

Consideraremos uma caixa quadrada de lado  $L_x = L_y = L$ , contendo  $N$  grãos que colidem inelasticamente entre si. A densidade em número de grãos será  $n = N/L^2$ . Tomemos um reticulado de  $L^2$  células unitárias para cobrir o sistema. Escolhemos os valores iniciais das constantes  $T_{g0}^* = 10$  e  $n_0^* = 0.1$  e inicializamos o sistema com as seguintes condições:

$$\begin{aligned} Tg^*(i, j, 0) &= T_{g0}^* \left(1 + \frac{\alpha_{ij}}{10}\right), \\ n^*(i, j, 0) &= n_0^* \left(1 + \frac{\alpha_{ij}}{10}\right), \\ \mathbf{u}^*(i, j, 0) &= 0, \end{aligned}$$

onde os  $0 < \alpha_{ij} < 1$  são números aleatórios com distribuição uniforme. Estas condições garantem que o sistema inicialmente tem pequenas flutuações na densidade e temperatura granular (da ordem de um décimo do seus valores médios). Sem essas flutuações o CDS geraria estados sempre homogêneos. Essas flutuações iniciais farão com que surjam flutuações também no fluxo de grãos. O valor de  $n_0$  garante a condição de baixa densidade e está dentro da faixa de valores utilizados por outros autores<sup>26,25</sup>.

Os valores de  $\kappa_0, \mu_0, \eta_0$  e  $\zeta_0$  foram 0,008, 0,00006, 0,004 e 1 respectivamente. Para estes valores  $a \approx 97\sigma$  e  $a \approx 35,2l$ . Esses valores

foram escolhidos de modo que cada célula de lado  $a$  contenha um número razoável de grãos, a fim de que possamos estudar a evolução das variáveis dentro das células. Para esses valores de parâmetros, podemos esperar que ocorram muitas colisões dentro de cada célula<sup>a</sup>. Além disso nesse caso usamos  $L = 32$  de modo que o tamanho do sistema físico que estamos simulando é dado por  $aL \approx 1100l_c$ .

## 5.2 Gás Infinito

São usadas condições de contorno periódicas em todos os lados da caixa. Apesar de não ser muito realista com este sistema podemos estudarmos o comportamento dos parâmetros sem termos de nos preocupar tanto com os efeitos das paredes.

Durante a fase inicial da simulação, enquanto o sistema se “resfria”, injetamos energia no mesmo de acordo com um mecanismo dado por:

$$Tg(i, j, t + 1) = Tg(i, j, t) + A\alpha_{ij} \frac{n(i, j, t)}{n_0}, \quad (5.1)$$

onde  $A = 0.0023$  é a taxa com de injeção de energia<sup>b</sup>. Esta forma de injetar energia favorece a uniformização da distribuição de densidade durante o estado estacionário, pois, como veremos adiante, temos o comportamento aproximado da densidade e temperatura  $n \propto (1/T_g)$ , assim sendo se injetarmos mais energia onde a densidade é mais alta ela tenderá a diminuir. Deixamos então o sistema atingir o estado estacionário. Isto ocorre para  $t \approx 3000$ . A fig. (5.1) mostra a evolução da temperatura granular média, mostrando os regimes pelos quais o sistema passa.

O primeiro declive da curva mostra um regime onde a taxa de energia perdida devido às colisões é maior do que a taxa de injeção, portanto a energia decresce até atingir o estado estacionário. Fisicamente, isso traduz o fato de que à medida em que a temperatura granular decresce as velocidades típicas das partículas ( $v_g \propto \sqrt{T_g}$ ) também decrescem, ficando o sistema cada vez mais elástico. No regime estacionário, as taxas de perda e injeção de energia são iguais. No regime de resfriamento homogêneo não há injeção de energia e o sistema, portanto, sempre se resfriará. É sobre o regime de resfriamento que estamos interessados.

<sup>a</sup>Estado de resfriamento homogêneo.

<sup>b</sup>estimamos este valor a partir da Lei de Haff para sistemas viscoelásticos (??), colocando a temperatura do estado estacionário de  $T_g \approx 1$

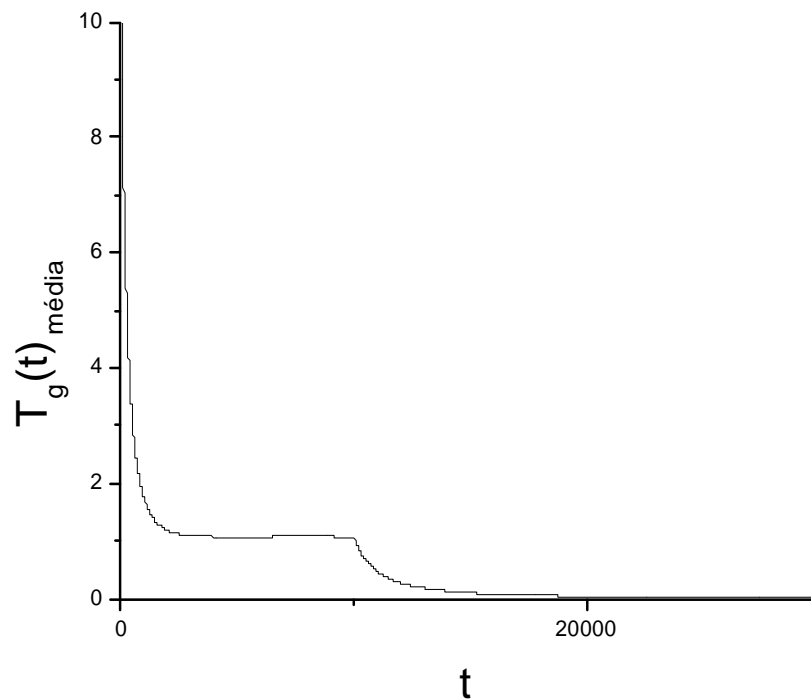


Figura 5.1: Estado do sistema em termos da evolução temporal da temperatura granular.

### 5.2.1 A inclusão da Matriz K

À medida que o sistema vai “congelando” observamos a formação de vórtices e a tendência a glomerações, caracterizada pela elevação da densidade de alguns pontos um pouco acima da média. Se deixarmos o sistema evoluir sem um mecanismo para abarcar a coexistência entre gás e aglomerados, haverá somente uma pequena variação da densidade<sup>11</sup>, cerca de  $0,85 \leq n^*/n_0^* \leq 1,20$ , o que não caracteriza a presença de aglomerados<sup>19</sup>.

O nosso mecanismo atua da seguinte maneira. Quando em algum sítio a densidade excede um determinado valor crítico  $n_c$ , fechamos todos os fluxos de saída deste sítio, com a matriz  $K$ . A partir deste momento a densidade neste sítio começa a aumentar. Este processo continuará até que eventualmente as células vizinhas também atinjam a densidade crítica, impedindo todas as trocas com as demais células. Porém isto levaria a um aumento muito grande da densidade. O que fazemos então é estabelecer uma densidade máxima  $n_{max}$  para qual os sítios vizinhos tem também suas saídas fechadas. Com isto os fluxos de entrada do sítio que atingiu a densidade

máxima se anulam também, a partir deste momento a densidade neste sítio, onde o aglomerado começou a se formar, interrompe o seu crescimento. Estes mecanismos garantem a coexistência entre as fases de gás e aglomerados.

### 5.3 Resultados

Como podemos ver na sequência de figuras 5.2 , no momento em que o fornecimento de energia é interrompido ( $t = 10000$ ) o sistema se encontra relativamente homogêneo . A seguir as flutuações começam a crescer, então o mecanismo da matriz  $K$ , entra em ação em um determinada célula quando  $n_c > 0,13$ . A densidade então aumenta até um valor máximo  $n_{max} = 0,25$ , e também a área ocupada pelas aglomerações cresce.

Comparando os gráficos (a) e (b) da densidade e temperatura granular nas figuras 5.2 e 5.3, observamos que elas são quase que complementares uma da outra, isto é, onde a densidade é alta a temperatura granular é baixa, e vice versa. Isso é análogo ao caso de um gás ideal sob pressão uniforme<sup>27</sup>, onde  $\rho \propto 1/T$ .

É fácil entender fisicamente os resultados acima. Dentro das regiões de maior densidade o número de colisões por unidade de tempo aumenta, fazendo com que a temperatura granular diminua mais rapidamente, ao contrário do que ocorre nas regiões de baixas densidades. Com a diminuição mais rápida da temperatura nessas regiões, as velocidades dos grãos nessas regiões também diminuem rapidamente, e, portanto, o sistema deve ficar aglomerado e menos inelástico. Contudo, esperamos a homogeneização<sup>28</sup> para  $t \rightarrow \infty$ .

A homogeneidade do sistema em  $t = 10.000$  pode ser visualizada também pela distribuição do campo de velocidade na figura 5.4, no quadro (a). Contudo a medida que o sistema se resfria começam a surgir vórtices, como pode ser visto no quadro (b). Estes vórtices aparecem devido à tendência das velocidades se colimarem após as colisões e como o momento total deve se conservar, vórtices aparecem. Observemos que os vórtices se formam em pares (vórtice e antivórtice). Isso se deve ao fato de que o momento angular total do sistema deve se conservar, uma vez que não há torques externos atuando sobre o mesmo. Se não incluíssemos o mecanismo para a formação de aglomerados observaríamos que os vórtices menores (menores comprimentos de onda) iriam desaparecendo, dando lugar aos vórtices maiores (maiores comprimentos de onda). Isso já havia sido predito na nossa análise de instabilidades. Porém os aglomerados atuam com atratores de partículas destruindo os vórtices como vemos nos quadros (c) e (d).

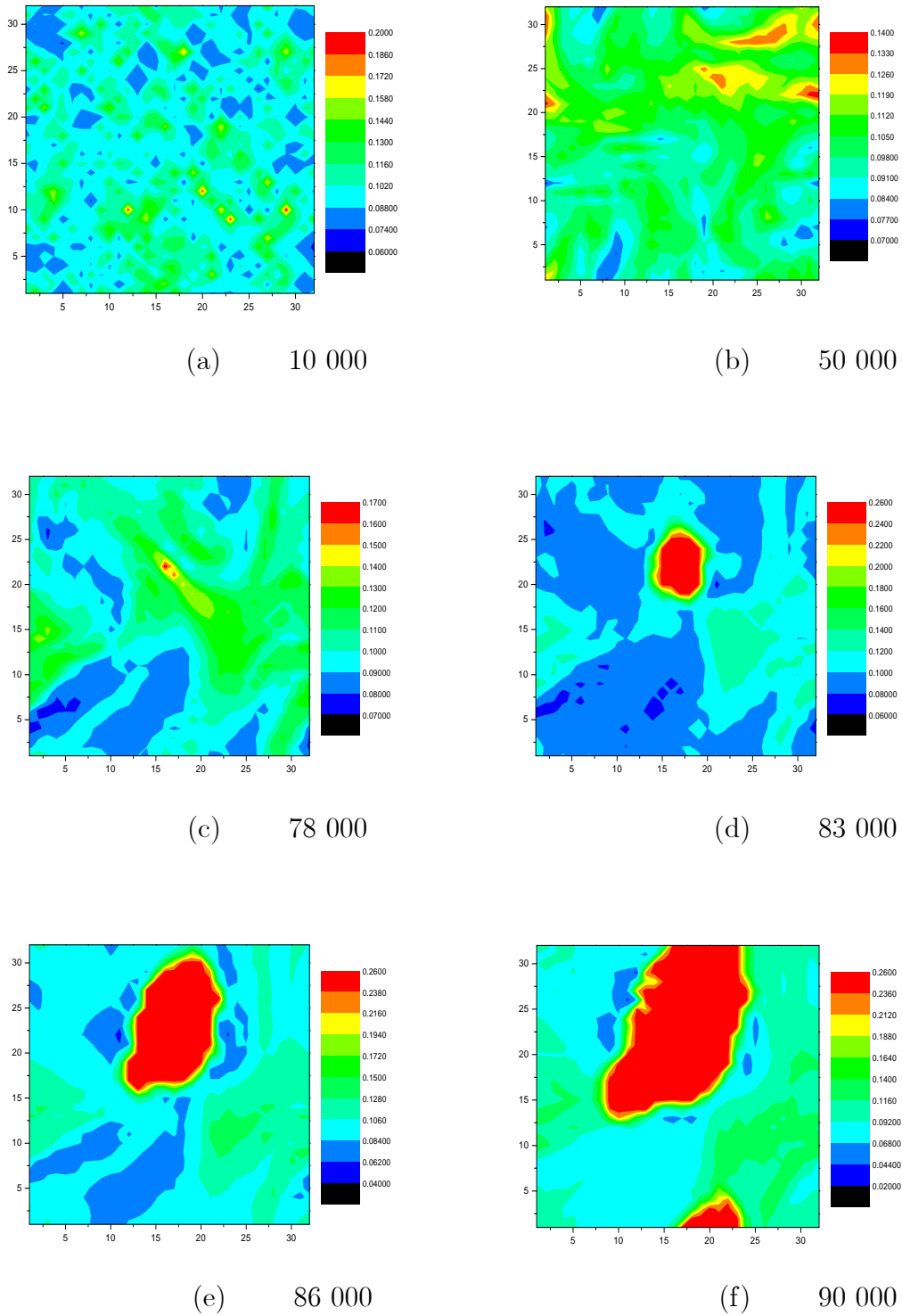


Figura 5.2: Distribuição de densidade para o sistema com injeção de energia uniforme.

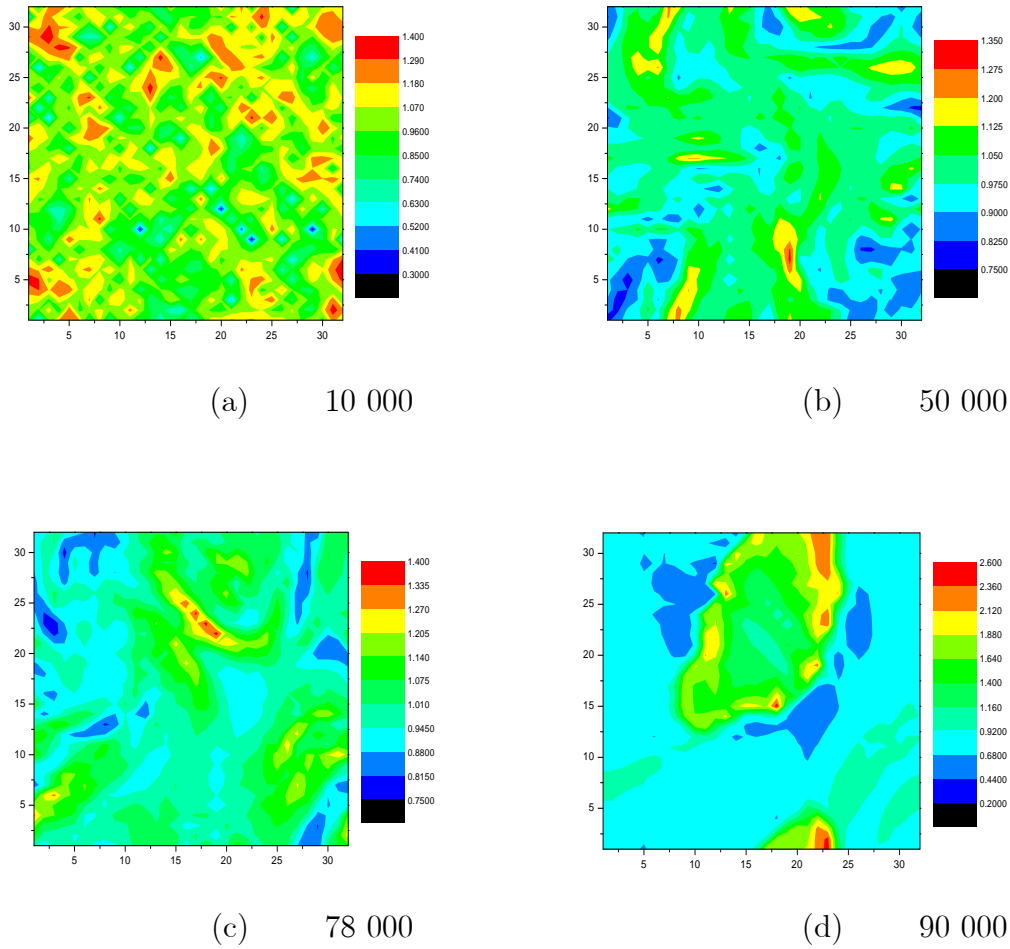


Figura 5.3: Distribuição da temperatura granular para o sistema com injeção de energia uniforme.

A medida o sistema se resfria ele vai se tornando cada vez mais elástico como foi previsto anteriormente, portanto poderia se pensar em deixá-lo evoluir até que volte a se homogeneizar novamente. Porém, apesar de conseguirmos tratar presença dos aglomerados em nosso modelo, ainda não desenvolvemos um mecanismo para a dissolução dos aglomerados. Contudo a versatilidade deste modelo nos deixa confiantes de que isto poderá ser feito posteriormente.

### 5.3.1 Outra Forma de Injeção de Energia

Utilizaremos uma nova maneira de injetar energia semelhante ao mecanismo anterior, porém não o faremos para toda a rede e sim, apenas para os sítios que se encontram nas extremidades superior e inferior.

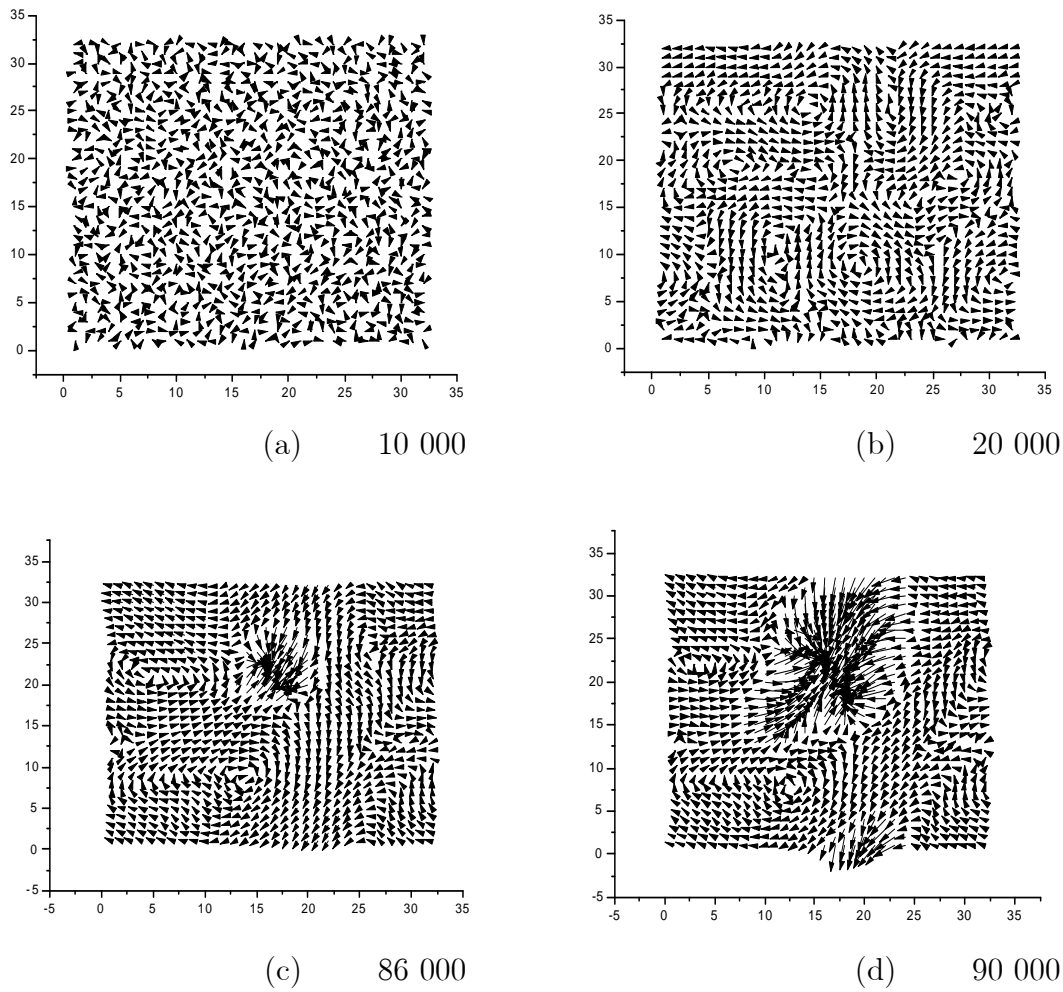


Figura 5.4: Distribuição do campo de velocidades para o sistema com injeção de energia uniforme.

$$\begin{aligned}
 Tg(i, 0, t + 1) &= Tg(i, 0, t) + A\alpha_{ij} \frac{n(i, 0, t)}{n_0} \\
 Tg(i, L, t + 1) &= Tg(i, L, t) + A\alpha_{ij} \frac{n(i, L, t)}{n_0}
 \end{aligned}
 \tag{5.2}$$

Desta maneira, contrária ao caso anterior, o sistema não tende a se uniformizar, mas sim espera-se que as partículas tendam a migrar das regiões de mais alta temperatura nas bordas, para a o meio onde a temperatura é mais baixa<sup>9</sup>, fazendo com que surjam regiões densas neste local. Assim, como desenvolvemos um esquema para tratar a formação de aglomerados poderemos descrever bem este sistema.

De fato podemos observar no quadro (a) da figura 5.5 referente ao instante do desligamento da injeção de energia, a tendência de migração das partículas para o meio da caixa, como previamos. Podemos ver também na

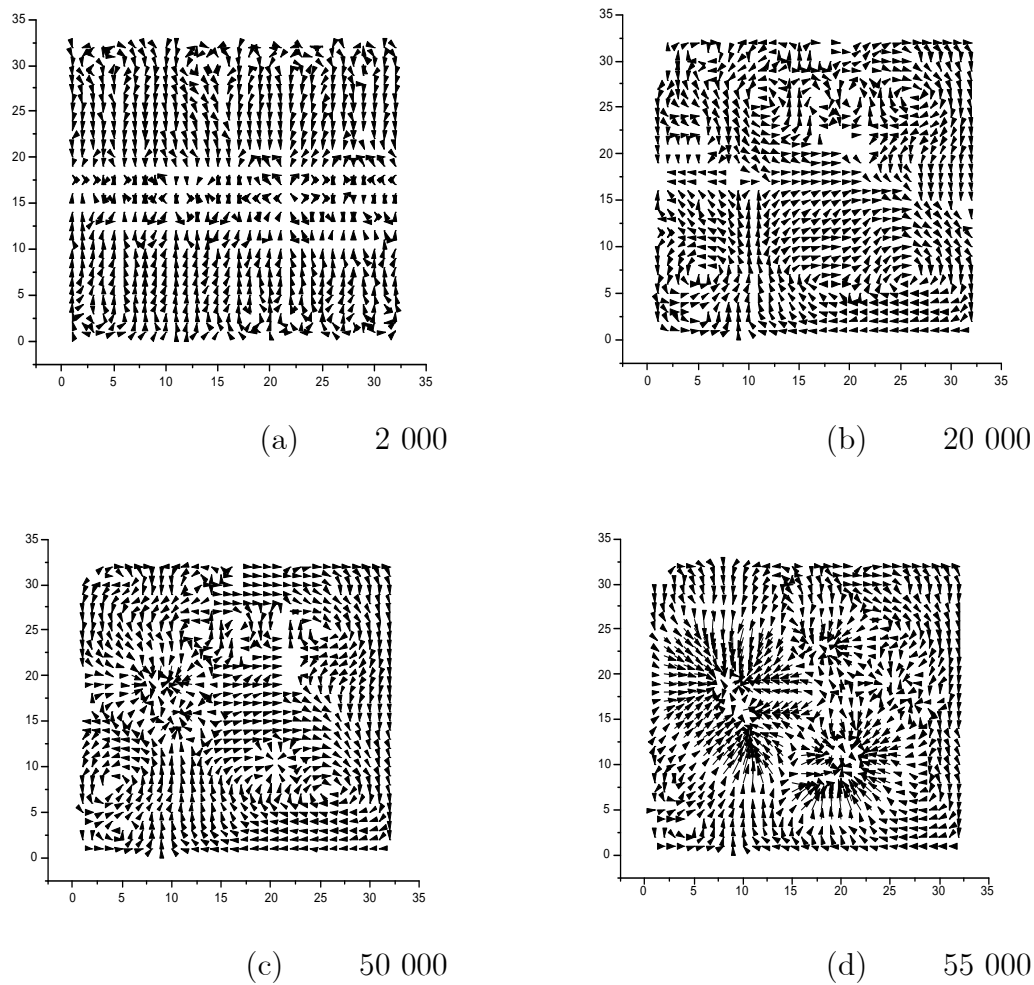


Figura 5.5: Distribuição do campo de velocidades para o sistema com injeção de energias nas bordas superior e inferior. No quadro (a) temos o instante do desligamento do fornecimento de energia.

seqüência de figuras 5.6 que o sistema se torna mais denso no centro, onde os aglomerados se formam. Por outro lado, para a temperatura granular (figura 5.7) observamos que mesmo após o desligamento da injeção de energia o sistema ainda permanece mais “quente” nas bordas superior e inferior. Isto se deve ao fato de que esta forma de injetar energia cria uma região de baixa pressão no meio da caixa, a qual atrai as partículas, e, devido a perda de energia pela inelasticidade das colisões elas não tem velocidade suficiente para escapar dessas regiões .



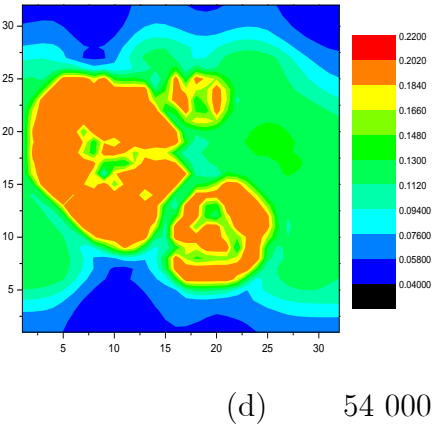
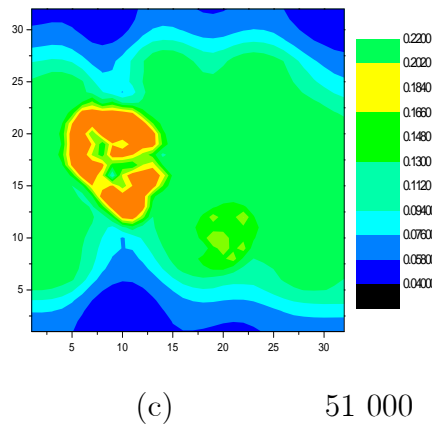
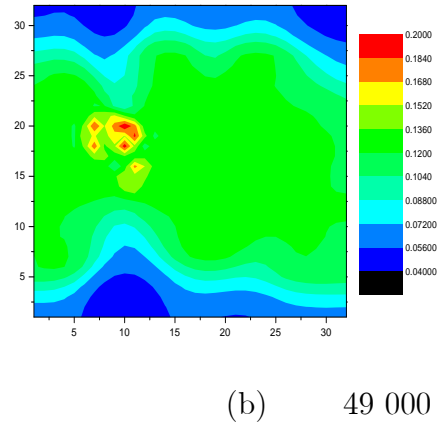
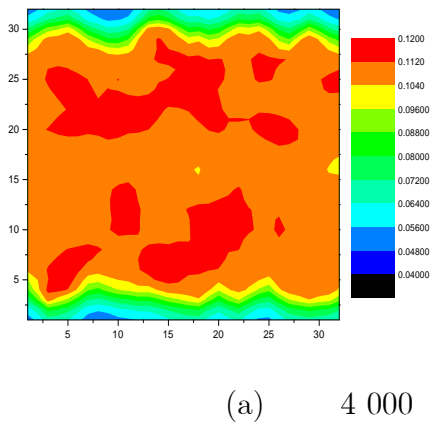


Figura 5.6: Distribuição de densidade para o sistema com injeção de energias nas bordas superior e inferior.

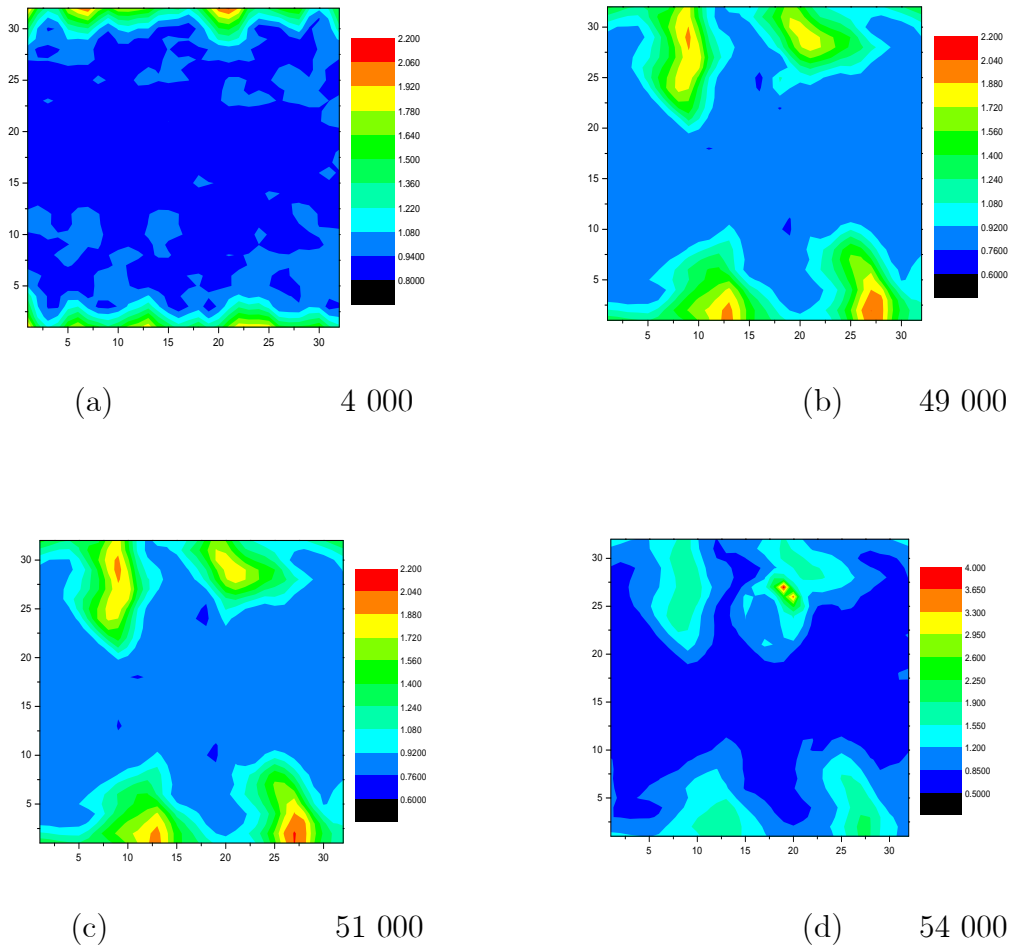


Figura 5.7: Distribuição de temperatura granular para o sistema com injeção de energias nas bordas superior e inferior.