

# 1 Introdução

## 1.1 Os Sistemas Granulares (SG)

Os sistemas granulares (SG) são formados por um grande número de partículas macroscópicas, de tamanhos e formas irregulares. O exemplo mais conhecido é uma pilha de areia. Assim como sistemas moleculares usuais, SG podem apresentar fases sólida e fluida, dependendo das condições físicas a que estão submetidos. Por exemplo: um monte de areia em repouso comporta-se como um sólido, enquanto que se depositarmos areia numa superfície suficientemente inclinada veremos o comportamento de um fluido, ou ainda, se agitarmos suficientemente bem um pouco de areia dentro de um recipiente transparente poderemos observar um comportamento de um gás. A fig. (1.1) mostra um sistema composto por grãos de mostarda<sup>1</sup>, onde na parte interna do monte observamos uma estrutura sólida, enquanto que a parte mais externa tem uma forma fluidizada. Cada grão é constituído de muitos átomos, portanto possui muitos graus de liberdade internos. Os graus internos de liberdade estão acoplados aos graus externos (posição de CM e velocidades dos grãos) de modo que a energia do sistema pode ser intercambiada entre eles, isto se deve às colisões inelásticas entre os grãos, excitando os modos de vibração dos átomos e moléculas<sup>2,3</sup>. O resultado é que macroscopicamente a dinâmica desses sistemas apresenta um comportamento muito diferente dos sistemas moleculares usuais.

As colisões inelásticas entre as partículas que compõem o sistema desempenham um papel crucial. Se deixarmos, por exemplo, uma bola de gude cair sobre uma superfície de aço ela vai colidir inúmeras vezes com a superfície até que, eventualmente, ela pára. Ao passo que se colocarmos, digamos, dez bolas semelhantes, juntas num saco, e deixá-las cair, todas pararão praticamente ao primeiro impacto com a superfície. Isso ocorre porque além das colisões inelásticas sofridas pelas bolas com a superfície, haverá também inúmeras colisões inelásticas entre elas, onde em cada colisão haverá uma conversão de energia cinética das bolas (energia cinética de translação) para energia térmica (energia de vibração dos átomos e moléculas de cada bola). Graças a esse tipo de transferência de energia, os sacos de areia têm uma grande capacidade de absorver impactos. O mesmo acontece nas caixas de brita às margens de uma pista de automobilismo.



Figura 1.1: Sistema contendo grãos de mostarda (Phys. Today).

As interações entre grãos secos são predominantemente repulsivas e as energias típicas envolvidas na dinâmica dos sistemas constituídos por grãos de areia, por exemplo, são da ordem da energia potencial gravitacional dos grãos,  $mgd$  (nos sistemas em que a gravidade é levada em conta), onde  $m$  e  $d$  são a massa e o diâmetro típico dos grãos, respectivamente, e  $g$  é a aceleração gravitacional. Essa energia é da ordem ou maior do que  $10^{12}$  vezes  $k_B T$ , que é a energia térmica típica. As interações entre os grãos são também dependente das propriedades físicas do gás intersticial<sup>4</sup>. Para grãos muito pequenos, interações de Van der Waals começam, também, a se manifestar<sup>5</sup>.

É comum definir uma temperatura granular ( $T_g$ ) em termos da média da energia cinética dos grãos. Uma vez que  $T_g \gg k_B T$ , a temperatura

ordinária será irrelevante<sup>a</sup> para a dinâmica macroscópica do sistema <sup>b</sup>.

Se deixarmos um gás granular evoluir livremente no tempo (sem injeção de energia) ele não alcançará o estado estacionário como esperaríamos para os gases moleculares devido à inelasticidade das colisões que provocam um decréscimo na temperatura granular. Ao invés disso, o sistema alcançará um estado denominado Estado de Resfriamento Homogêneo (*Homogeneous Cooling State* - HCS), onde sua temperatura média decrescerá monotonicamente, inicialmente obedecendo à chamada lei de Haff:

$$T(t)T_0(1 + t/\tau)^{-m}, \quad (1.1)$$

onde,  $\tau$  é um intervalo de tempo transiente,  $m = 5/3$  para coeficiente de restituição dependente da velocidade e  $m = 2$  para coeficiente de restituição constante. Este comportamento será estudado com bastante cuidado nos capítulos subsequentes.

Diversos fenômenos interessantes têm sido observados em experimentos feitos com grãos, o Efeito Castanha do Pará (*Brazil-Nut Effect*) é um dos mais populares. Esse fenômeno ocorre quando temos um sistema composto de grãos de diferentes tamanhos sendo agitados dentro de um recipiente. Observamos que os grãos maiores tendem a subir até atingirem a superfície livre. Na agricultura os processos de limpeza de grãos utilizam-se desse fenômeno para separar as impurezas. Na agricultura familiar, em geral, os produtores não dispõem de máquinas sofisticadas. Portanto, no processo manual de colheita do feijão, os grãos saem misturados com torrões de terra, gravetos de madeira, etc, e o processo de limpeza consiste em “chacoalhar” os grãos dentro de uma peneira com crivos de diâmetro um pouco menores do que o dos grãos, de modo que as impurezas maiores do que os grãos de feijão<sup>c</sup> surgirão na superfície livre, enquanto que as menores sairão pelos crivos (veja fig. 1.2).

Um outro fenômeno muito interessante é visto em experiências feitas com recipientes contendo materiais granulares sob vibrações e/ou rotações. Esse movimento induz grãos de diferentes tamanhos a se aglomerar em diferentes regiões do espaço<sup>6</sup>. Esse fenômeno, em particular, parece violar o princípio do aumento da entropia, segundo o qual uma mistura homogênea seria favorecida, já que não há energia atrativa envolvida. Esse aparente decréscimo na entropia do sistema é devido ao irrelevante papel

<sup>a</sup>Ser irrelevante, neste caso, significa que a temperatura ordinária não participa de forma direta e significativamente da dinâmica granular, embora ela terá, como veremos mais tarde, um papel semelhante ao da temperatura de um banho térmico.

<sup>b</sup>Podemos acrescentar ainda que as velocidades típicas dos grãos são da ordem de  $10^0 m/s$ , e as velocidades típicas dos átomos são da ordem de  $10^3 m/s$ . Sendo a razão entre a massa de um grão e a massa do átomo da ordem de  $10^{23}$ , segue que  $\frac{T_g}{k_B T} \simeq 10^{12} \gg 1$ .

<sup>c</sup>Agradecemos ao Sr. Pergentino Vernek que nos cedeu a amostra dos grãos.

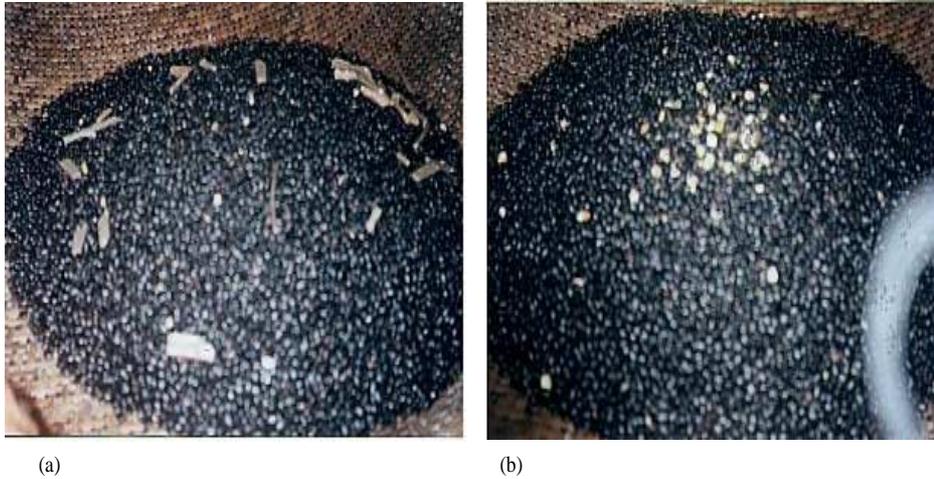


Figura 1.2: a) Separação de impurezas dos grãos de feijão: observe os gravetos sobre o feijão. b) Separação de grãos de milho dos grãos de feijão.

da temperatura  $T$  no processo macroscópico. Lembramos que as hipóteses termodinâmicas ( $\Delta S \geq 0$ ) são irrelevantes para o comportamento do centro de massa dos grãos.

Osborne Reynolds, um dos pioneiros no estudo dos sistemas granulares, introduziu o conceito de dilatância<sup>5</sup>. Ele propôs uma experiência que pode ser realizada colocando-se areia e água dentro de uma garrafa plástica elástica. Observa-se que qualquer deformação da garrafa faz com que o nível da água abaixe, ao invés de subir, como ingenuamente esperaríamos. O fato é que os grãos inicialmente estão tão acomodados (densidade  $\rho > \rho_{Reynolds} \equiv$  densidade crítica de mobilidade) que para se movimentarem relativamente uns aos outros precisam, primeiramente, afastar-se de uma certa distância entre si, e é exatamente esse espaço entre eles que a água ocupa, descendo portanto sua superfície livre.

A distribuição de forças no interior de um recipiente contendo grãos não se comporta como nos sistemas usuais. Por exemplo num silo contendo grãos, a força exercida pelo peso dos grãos sobre o fundo não varia linearmente com a altura<sup>1</sup>. As paredes dos silos desempenham um papel importante na sustentação do material, podendo ruir, caso não sejam bem dimensionadas.

Além de experimentos, simulações computacionais têm se mostrado muito eficientes na descrição de fenômenos em sistemas granulares em particular, e mecânico-estatístico em geral. No caso de sistemas granulares,

através de simulações computacionais, muitos autores têm observado desvios da distribuição maxweliana de velocidades para um gás granular no estado estacionário<sup>7</sup>, injetando energia no sistema por mecanismos convenientes, como mostra a fig. (1.3), obtida por J. Herrmann, S. Luding e R. Caferio<sup>8</sup>, para um sistema de grãos em uma caixa bidimensional em seu estado estacionário. Esses autores, entre outros, encontraram uma distribuição do tipo  $Ae^{-av_x^\alpha}$ , com  $\alpha = 1,41$  numa simulação com 11 000 grãos. Observa-se também no HCS a formação de aglomerados e vórtices.

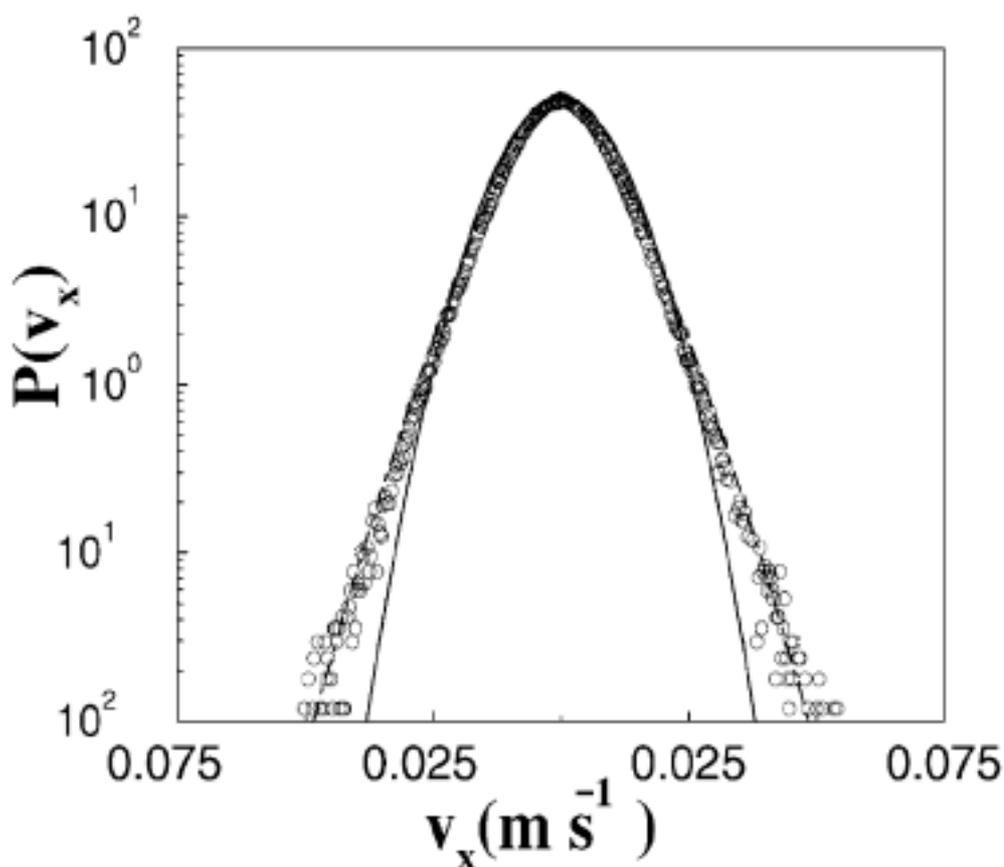


Figura 1.3: Distribuição de velocidades. A linha contínua é a curva gaussiana e a tracejada é uma exponencial esticada do tipo  $Ae^{-av_x^\alpha}$ , com  $\alpha = 1,41$ . (Hans J. Herrmann, S. Luding and R. Caferio, *Physica A* **295** (2001) 93-100).

O tratamento teórico dos sistemas granulares apresenta certas particularidades que dificultam uma simples aplicação dos métodos convencionais da mecânica estatística. Uma das principais causas dessas dificuldades são as flutuações, que nesses sistemas são inerentemente

grandes<sup>9,10</sup>. Nos sistemas moleculares usuais podemos tomar, por exemplo, um elemento de volume representativo, digamos de  $(10^{-5}m)^3$ , e fazer médias das variáveis dinâmicas dentro dele, pois encontra-se um grande número de moléculas (da ordem de  $10^{11}$ ) dentro desse volume, possibilitando-nos passar ao chamado limite contínuo. Nos sistemas granulares, ao contrário, devido às características já mencionadas, dentro de um volume muito maior só podemos encontrar apenas uns poucos grãos, pondo em cheque a validade do limite contínuo. Nesse aspecto, as simulações de dinâmica molecular se mostram bastante eficientes. Por outro lado, devido ao alto custo computacional, consegue-se simular apenas uns poucos milhares de partículas, embora esse número tenha crescido recentemente com a ajuda computadores cada vez mais sofisticados, chegando a aproximadamente  $10^6$  partículas.

Ultimamente, profissionais de diversas áreas têm demonstrado grande interesse no entendimento da dinâmica dos sistemas granulares pois a compreensão do mesmo terá grande utilidade em diversas áreas: na indústria farmacêutica, no processos geológicos, no transporte de materiais, na astrofísica, etc. Estimam-se que na indústria farmacêutica são desperdiçados cerca de 40 por cento da capacidade de muitas plantas medicinais por problemas no transporte desses materiais<sup>1</sup>.

## 1.2 Objetivo

As dificuldades em estudar analiticamente os diversos aspectos da dinâmica dos sistemas granulares e as limitações apresentada por alguns modelos computacionais nos motiva a construir um modelo que possa tratar sistemas grandes e que possam ser implementadas com facilidade as mais variadas condições de contorno. Além disso o fato de os gases granulares apresentarem aglomeração desafia-nos a construir um método computacional que possa ser eventualmente estendido ao estudo da coexistência dos aglomerados com o gás.

Nosso objetivo nesse trabalho é estudar, de forma marcadamente qualitativa, a evolução de um gás de grãos, implementando um modelo que permita explorar com facilidade diversas condições de contorno a que um sistema desses possa estar submetido. A razão para isso é que os gases são os problemas “simples” dos sistemas granulares que nos permitem começar a entender a física desses sistemas.

Estamos interessados essencialmente em processos que ocorrem ao nível hidrodinâmico, portanto, estudaremos o comportamento das variáveis que descrevem o sistema neste nível, a saber, a densidade e momento linear (quantidades conservadas), e a temperatura granular (quantidade

não conservada). Para isso construiremos um modelo de CDS para tratar um gás granular, visto que um gás granular apresenta diversos fenômenos interessantes que ainda não estão bem entendidos.

Este trabalho será organizado da seguinte forma: no capítulo 2 faremos uma breve revisão do estudo teórico dos sistemas granulares desde o ponto de vista microscópico até a hidrodinâmica, destacando algumas informações físicas interessantes. Ainda nesse capítulo (seção 2.5) desenvolveremos um modelo simples de gás granular. Na seção 2.6 apresentaremos uma análise de instabilidades das equações hidrodinâmicas. No capítulo 3 construiremos o modelo CDS. No capítulo 4 apresentaremos os resultados. Finalmente, no capítulo 5, apresentaremos nossas conclusões e comentários.

### 1.3 Futuras Aplicações

Além da possibilidade de estender nosso modelo ao tratamento das interações dos aglomerados num gás granular, esperamos poder tratar também sistemas com condições de contornos móveis, como por exemplo um gás comprimido por um pistão.