

1 Introdução

1.1 Sistemas granulares

Sistemas granulares (SG) são grandes aglomerações de partículas macroscópicas. Estas partículas podem variar em tamanho, forma, densidade e na rugosidade em sua superfície. Damos a estas partículas a denominação genérica de grãos.

Em contato, os grãos podem sofrer tanto interações atrativas quanto repulsivas. Forças de van der Waals se tornam importantes quando o diâmetro do grão é menor que $80\mu\text{m}$. A umidade do ar pode formar películas de água em superfícies úmidas de maneira que apareçam forças chamadas coesivas sobre os grãos em contato (a 50% de umidade, forças coesivas aparecem em grãos de vidro de $80 - 100\mu\text{m}$). Por causa da fricção podem aparecer cargas nas superfícies dos grãos que produzem forças eletrostáticas repulsivas.

Um dos parâmetros mais importantes que determina o comportamento de um sistema granular é a sua densidade (número de grãos por unidade de volume). Sistemas compactos se comportam como sólidos enquanto sistemas mais rarefeitos se comportam como fluidos. Sistemas de densidade intermediária se comportam de maneira mais complexa, podendo passar de um comportamento tipo fluido a um tipo sólido inclusive.

1.1.1 Sistemas granulares compactos

Um dos pioneiros no estudo de meios granulares foi Osborne Reynolds. Em seu último trabalho² introduziu o conceito de **dilatância**: quando se submete um meio granular compacto a uma deformação, os grãos dentro do meio granular se separam uns dos outros, mudando assim o grau de compactação, a fim de se deformar. Isto se produz sempre que a densidade do sistema seja maior que a densidade de Reynolds ρ_R . Com essa hipótese se explicam alguns fenômenos que são facilmente observados no cotidiano. Quando uma garrafa com água é preenchida de grãos de vidro de $400\mu\text{m}$, de maneira que o nível de água forme uma camada fina sobre os grãos, pode-se observar que o nível de água desaparece ao comprimir-se a garrafa,



Figura 1.1: Sistema contendo grãos de mostarda. H.M.Jaeger, S.R. Nagel, R.P. Behringer, Phys. Today 49 (1996).

ao contrário do que se poderia esperar mas em acordo com o conceito de dilatância. Se se dá um leve golpe a esta garrafa de modo que os grãos se compactem vemos que a camada de água aparece novamente. Finalmente, ao descomprimir a garrafa para que torne à sua forma original o nível de água novamente desaparece, já que ao descomprimir a garrafa a deformamos novamente.

Outro ponto importante é a forma que o sistema adota quando, por exemplo, deixamos cair grãos, como a areia, sobre uma mesa. Neste caso se forma um montículo cônico sobre a mesa e o ângulo que forma o cone com a mesa, chamado ângulo de repouso, constitui uma propriedade do material granular. O ângulo típico de repouso para a areia está na faixa de 25° - 35° . Um problema teórico por resolver é como determinar, a partir das propriedades do grão, o ângulo de repouso. Um modelo simples de Alonso et al.³ trata de uma inclinação que se forma ao acrescentar grão a grão no montículo, o material granular. Por simplicidade se considera um sistema unidimensional onde as partículas que podem deslizar pela inclinação estão localizadas na posição $x = 0, 1, 2, \dots$, medida em unidades do diâmetro da partícula, σ , e a uma altura $h(x)$. Uma partícula na posição x com energia e_i , para deslocar-se à posição $x + 1$ deve vencer a barreira de potencial U que representa as forças de atrito entre os grãos. Quando a partícula passa à posição $x + 1$, de acordo com a conservação de energia, sua energia é $e_i + mgh(x) - mgh(x + 1)$ e, devido à perda de energia, devida à colisão, considerando um coeficiente

de restituição r , a energia final, e'_i , nesta posição, é

$$e'_i = r(e_i + mg\Delta h), \quad (1.1)$$

onde $\Delta h = h(x) - h(x+1)$. Quando $e'_i < U$ a partícula permanece nesta posição mas quando $e'_i \geq U$ a partícula se desloca até a posição seguinte. O estado estacionário se consegue quando as partículas têm energia suficiente apenas para deslizar pela pendente ($U = e'_i = e_i$), então, a equação (1.1) se escreve

$$U = r(U + mg\Delta h)$$

e como a pendente é dada por $\tan \theta = \Delta h/\sigma$ obtemos

$$\tan \theta = \frac{U(1-r)}{mg\sigma r}. \quad (1.2)$$

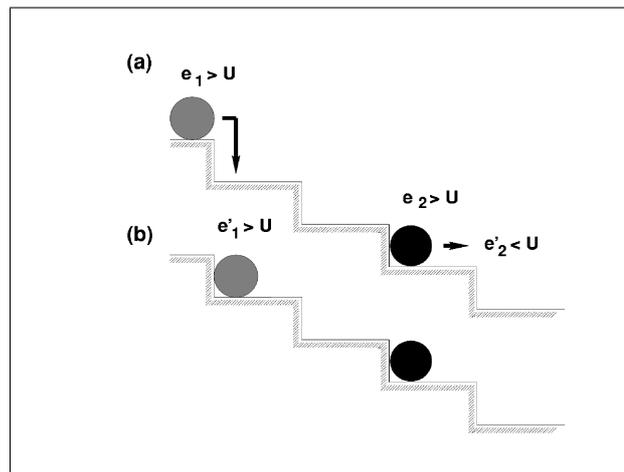


Figura 1.2: Vista esquemática da evolução de uma pilha; J. J. Alonso et al. Phys. Rev. E **58** 1998

1.1.2 Sistema granular fluidizado

Um meio granular pode fluir de maneira análoga a um fluido. Ambos sistemas, o granular, constituído por partículas microscópicas, e o fluido, constituído por moléculas, têm um comportamento coletivo que oculta a granularidade do material. Por este motivo se começou a estudar estes sistemas usando os mesmos métodos usados na descrição de fluidos moleculares, ou seja, formularam-se equações hidrodinâmicas para o sistema. Bagnolds introduziu o conceito de viscosidade η para o fluxo de areia em 1954. Ele encontrou empiricamente que η é proporcional à velocidade tangencial e não uma constante como nos líquidos newtonianos como o ar ou a água. Na seqüência, Haff desenvolveu uma teoria baseada nas equações de conservação

que se obtém na hidrodinâmica⁴.

Consideremos um sistema de esferas idênticas, de diâmetro σ , separadas por uma distância média s de maneira que $s \ll \sigma$. Desta maneira a densidade ρ torna-se

$$\rho = \frac{m}{(s + \sigma)^3} \approx \frac{m}{\sigma^3} \equiv \text{Constante.} \quad (1.3)$$

Definimos a temperatura granular como

$$\frac{d}{2} T_g = \left\langle \frac{1}{2} m (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle \quad (1.4)$$

onde $\mathbf{u} = \langle \mathbf{v} \rangle$ e d é a dimensão do espaço em que se trabalha. A partir da definição de temperatura granular definimos a velocidade térmica $v(t)$ tal que

$$T_g = \frac{1}{2} m v^2(t). \quad (1.5)$$

Com esta definição o tempo de colisão é $\tau \sim s/v$ e portanto a frequência das colisões é v/s .

Pode ser feita uma aplicação direta da teoria de Haff ao estudo do chamado **Estado de Resfriamento Homogêneo** cuja sigla em inglês é **HCS** (Homogeneous Cooling State), estado no qual não há flutuações da velocidade e da densidade e onde v não tem dependência espacial. A equação equivalente à de conservação de energia para este estado, em que as derivadas espaciais se cancelam, se reduz a

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{2} \rho v^2 \right\} = -I, \quad (1.6)$$

onde I é a taxa de perda de energia por unidade de tempo e de volume. A hipótese de que só as colisões binárias são importantes em fluidos moleculares diluídos pode ser aplicada aos sistemas granulares. Isto se deve a que, considerando um fluido de esferas duras, o alcance da interação de superfície δ comparado ao tamanho do grão é muito pequeno, $\delta/\sigma \ll 1$. Por esse motivo não há superposição dos potenciais de interação nos sistemas granulares como acontece nos fluidos moleculares a grandes densidades.

Colisão entre dois grãos: De acordo com a definição do coeficiente de restituição r , a velocidade relativa $v_2 - v_1$ de duas partículas que colidem se relaciona com a velocidade relativa após a colisão, $v'_2 - v'_1$, pela equação

$$(v'_2 - v'_1) \cdot \hat{n}_{12} = -r(v_2 - v_1) \cdot \hat{n}_{12}, \quad (1.7)$$

onde \hat{n}_{12} é um vetor unitário ao longo do vetor que une os centros das partículas. Como numa colisão deve haver conservação de momento as velocidades pré-colisionais se relacionam com as pós-colisionais pelas equações

$$\begin{aligned} v'_1 &= v_1 - \frac{(1+r)}{2} [\hat{n}_{12} \cdot (v_1 - v_2)] \hat{n}_{12}, \\ v'_2 &= v_2 + \frac{(1+r)}{2} [\hat{n}_{12} \cdot (v_1 - v_2)] \hat{n}_{12}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

A variação da energia cinética numa colisão é, de acordo com as equações acima,

$$\Delta E = -\frac{1}{4} m [(v_1 - v_2) \cdot \hat{n}_{12}]^2 (1 - r^2).$$

A equação acima sugere a seguinte estimativa para a perda de energia numa colisão binária em função da velocidade térmica das partículas, v ,

$$\Delta E \sim (1 - r^2) \frac{1}{2} m v^2. \quad (1.9)$$

Multiplicando a equação acima pelo número de colisões por segundo v/s e dividindo por σ^3 obtemos a taxa à qual a energia é perdida, por unidade de tempo e de volume⁴:

$$I = \gamma \rho \frac{v^3}{s} \quad (1.10)$$

onde γ é um fator adimensional proporcional a $(1 - r^2)$. A equação de conservação da energia se escreve agora

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{2} \rho v^2 \right\} = -\gamma \rho \frac{v^3}{s}. \quad (1.11)$$

Como $\rho = \text{constante}$ e considerando uma velocidade térmica inicial $v(0) = v_o$ a solução da equação acima é dada por

$$v(t) = \frac{v_o}{1 + t/\tau}, \quad (1.12)$$

onde

$$\tau = \frac{s}{2\gamma v_o} \quad (1.13)$$

é a escala de tempo do decaimento da velocidade média. Pode-se ver que quando $r=1$, o que corresponde a um sistema elástico, $\gamma=0$, tomando o sistema, neste caso, um tempo infinito de esfriamento.

A lei de esfriamento de $v(t)$ encontrada, implica que a temperatura granular, devido à dissipação, decai como

$$T_g \propto \frac{1}{t^2} \quad (1.14)$$

no **HCS**. Este resultado conhecido como a **lei de Haff** foi reproduzido posteriormente mediante outras abordagens teóricas ao **HCS**.

1.1.3 Validade da Hidrodinâmica nos Sistemas Granulares

A hidrodinâmica se baseia na hipótese de que o tempo com que ocorrem as variações macroscópicas dentro de um sistema é muito lento em comparação ao tempo típico de colisão e ao tempo de relaxação do sistema. Também se requer que o comprimento de onda típico das variações espaciais sejam grandes em comparação ao caminho livre médio e o tamanho das partículas constituintes. Como consequência disso, equações médias de conservação local do número de partículas, o momento e a energia descrevem a evolução do sistema.

Alcançar estas condições (limite contínuo) requer a possibilidade de definir no sistema um volume l^3 , chamado **elemento de volume representativo**, capaz de conter um número suficiente de partículas para que as médias sobre este volume sejam representativas da região. Em outras palavras, valores médios sobre elementos de volume representativos vizinhos não devem apresentar grandes flutuações.

Há duas dificuldades em encontrar um elemento de volume representativo para os sistemas granulares. Nos fluidos moleculares este requerimento é facilmente alcançado dado o tamanho das partículas. Um cubo de 1mm contém 10^{20} moléculas de ar. Todavia, fluidos granulares podem conter poucos grãos em 1mm^3 , de um a uma centena de grãos de areia por exemplo.

Para que uma teoria do contínuo funcione é necessário que as dimensões do sistema sejam grandes comparadas com o livre caminho médio, l_c , para o mesmo. Em experimentos recentes⁵ em duas dimensões foi observado que para sistemas da ordem de apenas $5l_c$ a descrição hidrodinâmica funciona bem. Para estes sistemas, o volume (área em $2D$) é da ordem de $(30\sigma)^2$, onde $\sigma \approx 3\text{mm}$. Em nossa análise posterior sempre suporemos que a dimensão do sistema é tal que $l \gg l_c$.

A dissipação de energia introduz no sistema gradientes de energia. Se se imagina uma cadeia de grãos de diâmetro σ que é golpeada em um extremo, como o grão cede ao seu vizinho uma fração r da energia recebida pelo golpe, se poderá deduzir que o n -ésimo grão na cadeia recebe uma fração r^{n-1} da energia produzida pelo golpe. Como a distância entre o grão do extremo e o n -ésimo grão é $(n-1)\sigma$ podemos escrever a seguinte relação para a perda de energia em função da distância

$$e(x) = r^{x/\sigma} = e^{(x/\sigma) \ln r} = e^{-x/l_\sigma} \quad (1.15)$$

onde $l_\sigma = -\sigma/\ln r$ é o comprimento característico de dissipação. Assim o elemento de volume representativo l^3 deve ser tal que $l < l_\sigma$. Estas dificuldades não devem inibir a aplicação da teoria sempre que se observe, em cada caso, quão bem esta se aplica.

Existem exemplos nos quais é duvidosa a aplicação dos conceitos da hidrodinâmica nos sistemas granulares. Um experimento muito interessante em que se põe em movimento a areia depositada num vaso através de sucessivas agitações verticais (Jaeger e Nagel, 1992) mostra o seguinte padrão para duas sucessivas sacudidas da areia:

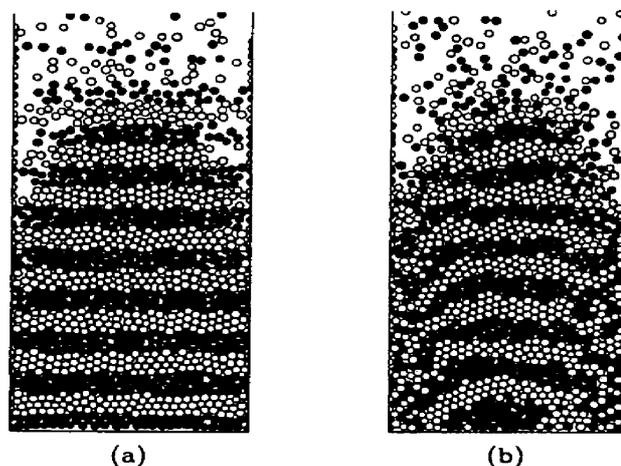


Figura 1.3: Posição dos grãos de areia em duas sucessivas sacudidas; L. P. Kadanoff, Rev. Mod. Phys. **71** (1999)

Nesta simulação as partículas estão coloridas de maneira que podemos notar na figura (b) em relação à (a) que as camadas se distorcem nos extremos, misturando-se as partículas com as das outras camadas, enquanto no centro as partículas não apresentam movimento relativo. A espessura destas camadas não é suficiente para fazer uma descrição hidrodinâmica do sistema.

Na seguinte experiência temos um vaso com partículas granulares que é agitado verticalmente com uma aceleração máxima $\Gamma = \omega^2 A/g$ relativa a \mathbf{g} um número \mathbf{t} de vezes. A cada sacudida o sistema se torna mais compacto, aumentando sua densidade. A densidade que o sistema adquire depois de uma sacudida depende de sua densidade prévia, como se vê na figura (1.4).

A relação entre a densidade ρ e o número de sacudidas \mathbf{t} é dada por

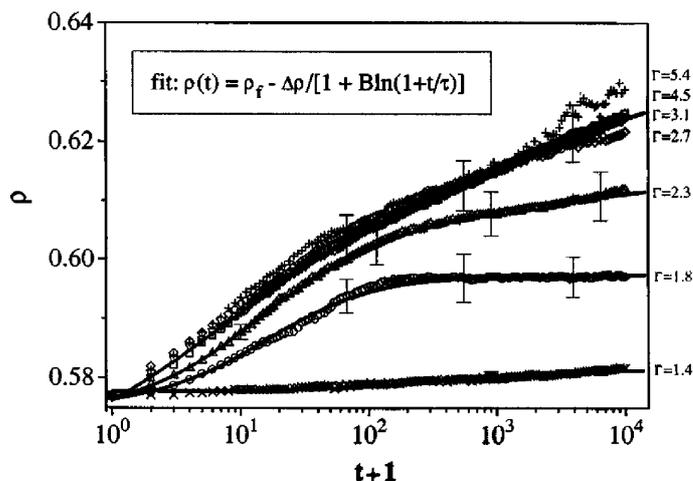


Figura 1.4: Compactação de um material granular. L. P. Kadanoff, Rev. Mod. Phys. **71** (1999)

$$\rho(\infty) - \rho(t) = A / \log(1 + t/\tau).$$

Este tipo de dependência implica em um termo de memória nas equações que descrevem o comportamento do sistema o que não seria adequado para fazer uma descrição hidrodinâmica do sistema.

1.2 Aglomerados e Colapso inelástico

O estudo dos gases granulares tem sido feito principalmente mediante simulações computacionais. Na figura (1.5) mostramos duas simulações realizadas por McNamara e Young⁶. Na simulação, as partículas começam com posições e velocidades escolhidas aleatoriamente de uma distribuição Gaussiana. Em ambas as figuras se mostra o estado do sistema depois de um grande número de colisões. Na figura (1.5a), que trata de um sistema quase elástico ($r \leq 1$), pode-se ver que só pequenas correlações entre as partículas e as colisões mais recentes se desenvolveram. No caso (1.5b), que trata de um sistema mais inelástico, se observam agrupamentos de partículas, formando regiões mais densas. Chama-se estes agrupamentos de **aglomerados**(clusters). Na figura (1.6) se mostra uma simulação realizada por Goldhrich e Zanetti⁷, com uma quantidade de partículas consideravelmente maior do que a simulação anterior. Este sistema, que tem o mesmo valor para r que o caso da figura(1.5b) apresenta mais aglomerados de partículas. Os autores argumentam que estes aglomerados são o resultado de instabilidades hidrodinâmicas: regiões de menor temperatura granular

têm menor pressão. A estas regiões, então, ocorrem mais partículas de maneira a igualar a pressão. Como nestas regiões as colisões são mais frequentes, a temperatura se reduz ainda mais, até formar regiões de muito alta densidade.

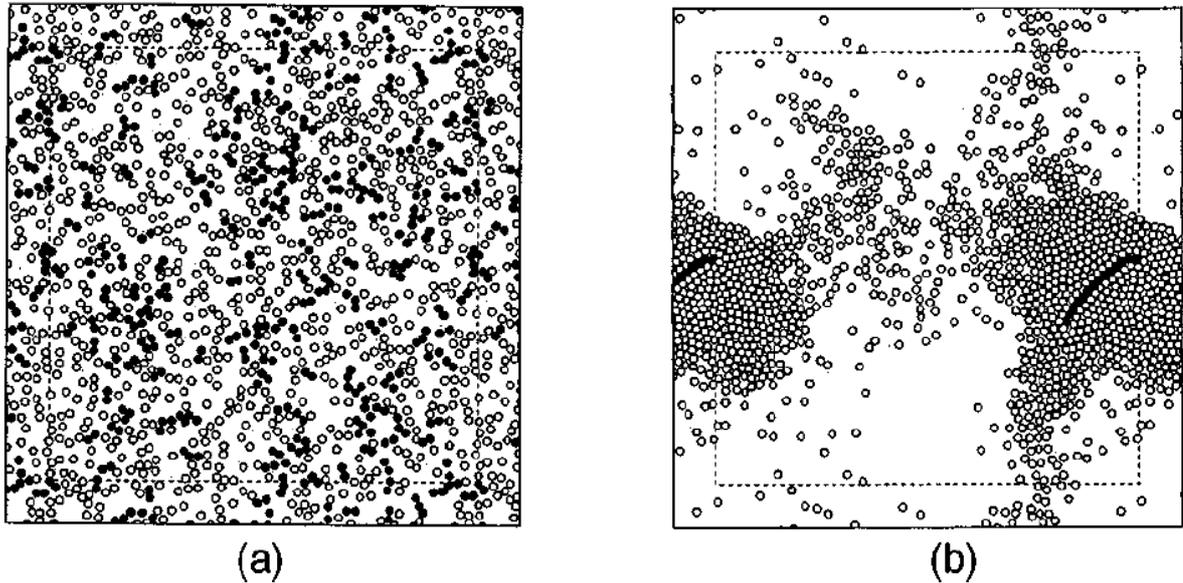


Figura 1.5: Simulação do movimento granular para (a) $r = 0.99$ e (b) $r = 0.6$ McNamara, S., and W. R. Young, 1994, Phys. Rev. E **50** R28-R31

Existe outro sintoma causado pela tendência indefinida das partículas a formar aglomerados e a sofrer colisões: partículas podem sofrer um número infinito de colisões num período finito de tempo. O exemplo mais simples é o de uma bola de coeficiente de restituição r que cai verticalmente sobre uma superfície plana. Supondo que a bola cai inicialmente de uma altura h_o esta levará um tempo $t_0 = \sqrt{2h_o/g}$ para alcançar o solo. Depois de quicar, a bola levará $t_1 = 2r\sqrt{2h_o/g}$ para alcançar o solo novamente. Assim a bola quicará infinitas vezes antes de deter-se no solo, contudo empregando um tempo finito,

$$t_c = \sqrt{\frac{2h_o}{g} \frac{1+r}{1-r}},$$

neste processo. Este fenômeno é chamado **colapso inelástico**. Na figura (1.5b) as partículas escuras formam uma região curva. Estas partículas colidem infinitas vezes em um tempo finito.

1.3 Distribuição de velocidades no gás granular

Em um fluido molecular, a energia cinética média é determinada pela temperatura do banho térmico com o qual o fluido está em contato e a

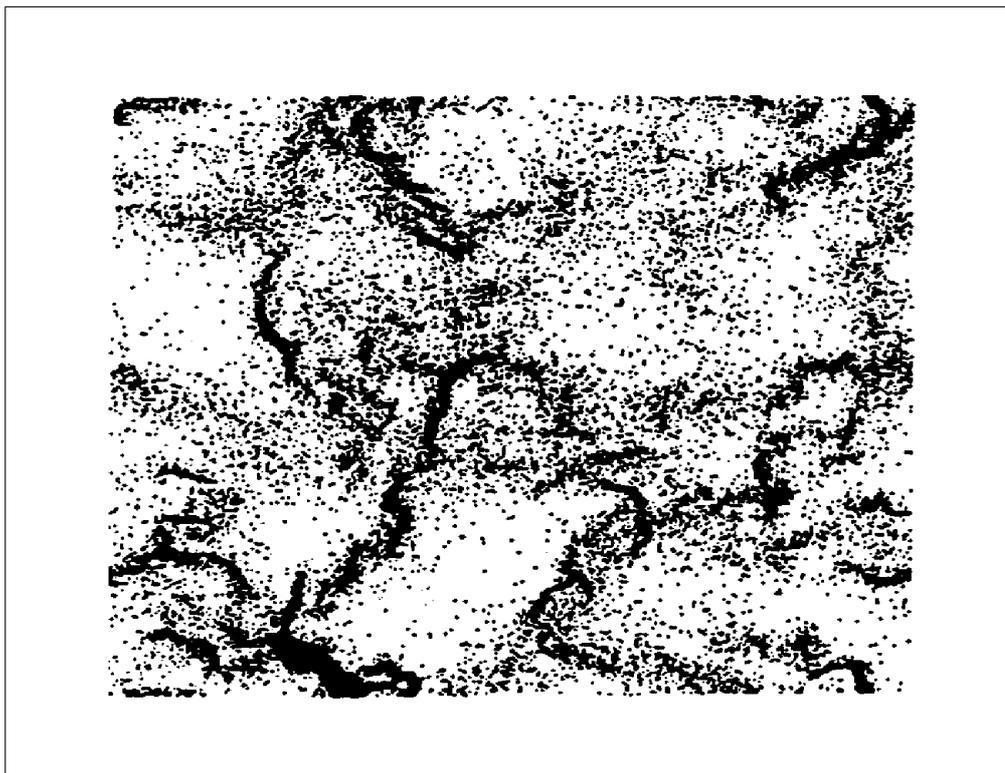


Figura 1.6: Descrição do movimento granular para um sistema formado de 40000 partículas com $r = 0.6$. Goldhirsch, I., and G. Zanetti, 1993, Phys. Rev. Lett. **70**, 1619

distribuição de velocidades é do tipo Maxwell-Boltzmann. Nas primeiras formulações de teorias cinéticas dos gases granulares foi assumido que a distribuição que devia descrever as flutuações no interior do gás granular era a de Maxwell-Boltzmann. Em trabalhos teóricos posteriores e simulações em gases inelásticos livres e conduzidos foi encontrada uma variedade de distribuições diferentes da Gaussiana: exponenciais, leis de potências, e outras, inclusive a própria Gaussiana.

As distribuições não-Gaussianas se atribuíram à formação dos aglomerados: dentro destes as partículas são particularmente lentas e entre os aglomerados o caminho médio é maior, sendo assim partículas com velocidades maiores das que haviam antes da formação dos aglomerados podem existir⁸. Por isto como se vê na figura (1.7) a distribuição de velocidades neste regime apresenta um incremento a velocidade nula e caudas nos extremos. Estas distribuições anômalas têm como característica a superpopulação, em comparação com a distribuição Gaussiana, para grandes velocidades.

Desta maneira, quando um sistema granular é inicializado com uma certa distribuição de velocidades e se o deixa evoluir livremente de acordo

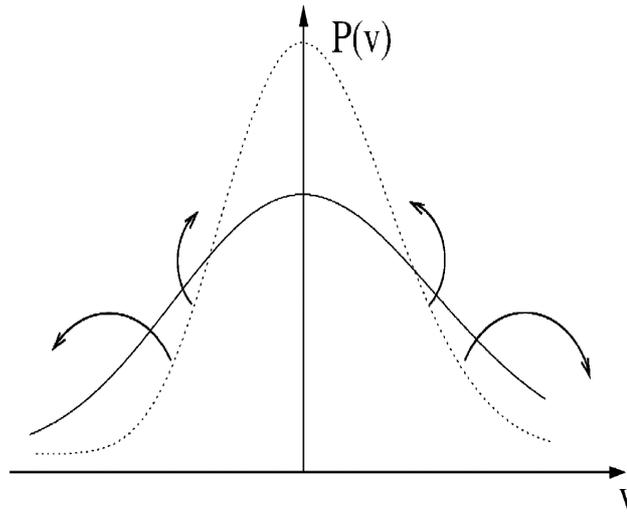


Figura 1.7: Evolução esquemática da função distribuição de velocidades na presença dos aglomerados. H. J. Hermann, S. Luding, R. Cafiero *Physics A* **295** (2001)

com a teoria cinética⁴ discutida acima este se resfria e a energia decresce como

$$E \propto \frac{1}{t^2}. \quad (1.16)$$

Depois de um tempo, quando se observa o aparecimento dos aglomerados, devido à instabilidade mencionada acima, a energia decresce como⁹

$$E \propto \frac{1}{t}, \quad (1.17)$$

pois no aglomerado a velocidade relativa dos grãos é nula, reduzindo assim a taxa de dissipação da energia cinética. O esfriamento de um gás dissipativo não leva a um estado estacionário. Uma forma de evitar isto é conduzir o sistema, ou seja, injetar-lhe energia de maneira a compensar a energia que se dissipa. A condução do sistema granular pode ser feita de diferentes maneiras, a mais comum é a condução aditiva em que se adiciona à componente da velocidade do grão uma velocidade de referência v_o :

$$v(t + \delta t) = v(t) + \eta v_o, \quad (1.18)$$

a cada intervalo regular Δt e onde η é um número aleatório Gaussiano. Este modelo também conhecido como modelo democrático será usado no posterior desenvolvimento desta tese. Cafiero et al¹⁰ generalizaram esta condução a

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \eta |v|^\delta v_o^{1-\delta}, \quad (1.19)$$

onde o caso $\delta = 1$ corresponde a uma condução multiplicativa e $\delta = 0$ à equação (1.18). Simulando sistemas em duas dimensões os autores analisaram a distribuição de velocidades como função de r e fixaram a forma

$$f_o \exp(-B|v_x|^\alpha), \quad (1.20)$$

onde f_o , B , e α são parâmetros fixos. Foi encontrado $\alpha=2$ no limite $r \rightarrow 1$, uma distribuição Gaussiana, como esperado. Para pequenos valores de r encontraram $\alpha = \frac{3-2\delta}{2}$. Correspondendo-lhe então, quando $\delta=0$ (condução aditiva, equação (1.18)), o valor $\alpha=3/2$. Estes resultados foram encontrados supondo que o coeficiente de restituição é constante. No caso de um coeficiente de restituição dependente da velocidade o estudo do comportamento de cauda foi feito por Brilliantov e Pöschel para o resfriamento homogêneo¹¹, no capítulo 6 desta tese se estuda o caso de injeção de energia correspondente¹².

Experimentos foram realizados para estudar os gases granulares em estado estacionário. Florence Rouyer e Narayan Menon⁵ desenvolveram uma experiência para estudar um gás granular homogêneo em duas dimensões. Nessa experiência, de 100 a 500 esferas de aço de diâmetro $d=1.6\text{mm}$, confinados entre duas placas verticais e paralelas separadas de uma distância apenas maior que o diâmetro dos grãos ($1.09 \pm 0.02d$) e fechada aos lados por outras duas paredes, a fim de formar uma caixa bidimensional, são agitadas vertical e senoidalmente com uma amplitude de $A \leq 3.5d$ e uma frequência $f \leq 70\text{hz}$ (aceleração máxima de $\Gamma = A(2\pi f)^2$) mostrando a seguinte distribuição de velocidades observada na figura (1.8A). Na figura se mostra a distribuição $P(V_x)$ escalada por $\sigma = (v_x^2)^{1/2}$, para diferentes frequências e amplitudes e igual densidade média, obtida nesta experiência. Vemos que a distribuição é mais larga para velocidades grandes do que a distribuição Gaussiana. Também se observa que a distribuição é igual para diferentes valores de Γ e f o que significa que esta não depende das características do banho térmico granular. Os autores supuseram também uma distribuição na forma $C \exp[-\beta(|v_x|/\sigma)^\alpha]$. Num gráfico $-\ln(-\ln P(v_x))$ contra $\ln(|V_x|/\sigma)$ encontraram $\alpha = 1.51$ e $\beta = 0.78$ (figura(1.8B)).

Também foi testada a hipótese de que as distribuições não-Gaussianas se devem à formação de aglomerados no gás. Para isso definiram uma densidade local $N_R(n)$: número de vezes que $(n-1)$ esferas são contadas dentro de um círculo de raio R . No gráfico da figura(1.9) vê-se que a relação entre $N_R(n)$ e n é Gaussiana para diferentes valores da densidade e de R o que significa que a distribuição é aleatória. O valor local de σ^2 (velocidade quadrática média) decresce conforme n aumenta. Não obstante, como se mostra na figura (1.10), a forma da distribuição de velocidades não muda com a densidade local, n .

Assim, a variação da densidade local afeta a temperatura granular local mas a distribuição não-Gaussiana não resulta de correlações associadas à

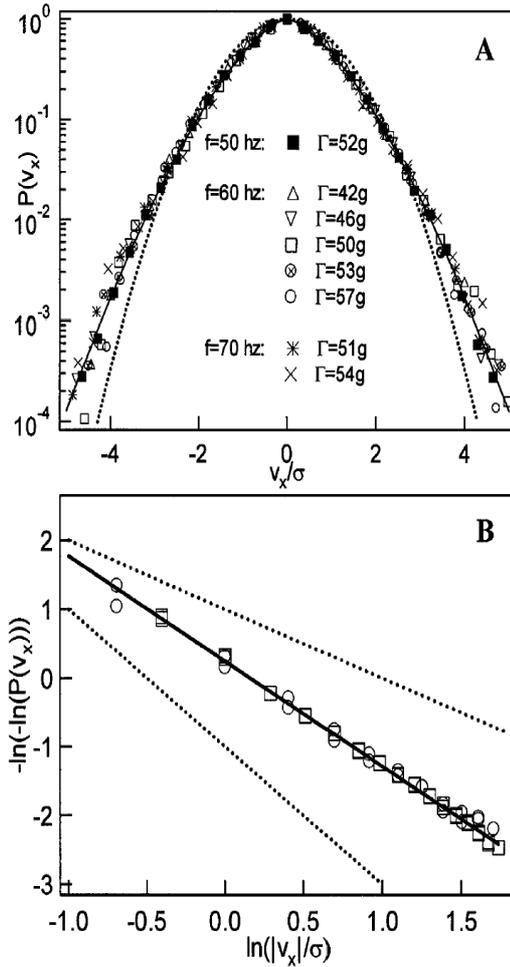


Figura 1.8: (a) Distribuição escalada com a velocidade horizontal, $P(v_x/\sigma)$, para $\rho = 0.15$ e diferentes valores de f e Γ . A linha pontilhada é uma Gaussiana $\exp[-\frac{1}{2}(v_x/\sigma)^2]$. (b) A pendente da linha experimental é -1.52 ; as linhas pontilhadas com pendentes -1 e -2 correspondem a uma exponencial e a uma gaussiana respectivamente. F. Rouyer and N. Menon; Phys. Rev. Lett. **85**(2000)

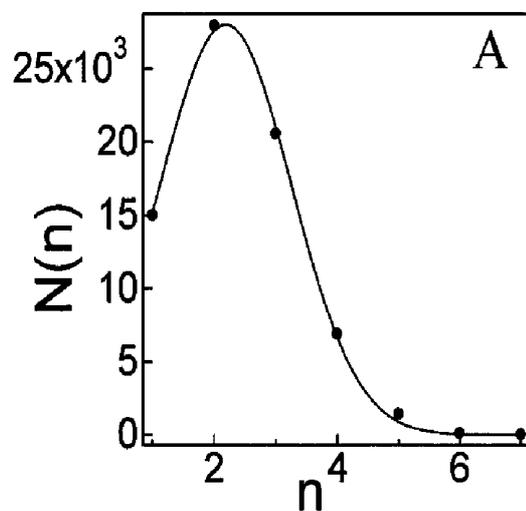


Figura 1.9: $N_R(n)$, o número de vezes que $n - 1$ esferas são contadas dentro de um círculo de raio R (para $R=2.6\text{mm}$ e $\rho=0.25$). F. Rouyer and N. Menon; Phys. Rev. Lett. **85**(2000)

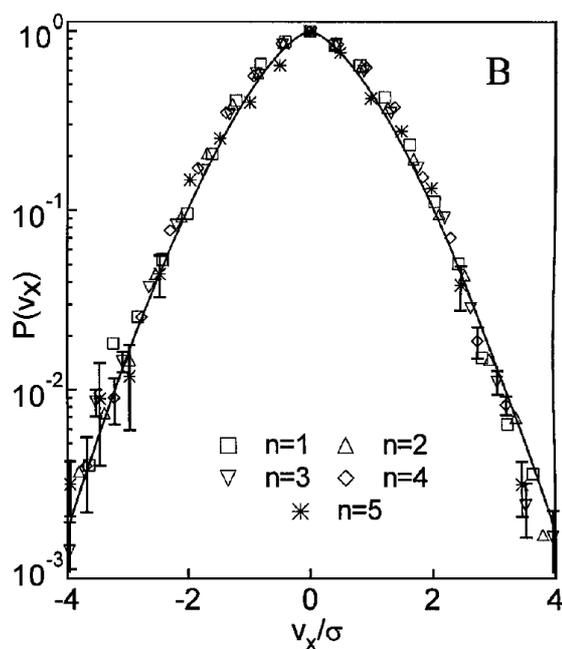


Figura 1.10: $P(v_x/\sigma)$ para diferentes valores da densidade local n . A linha sólida corresponde à função $\exp[-0.80(|v_x/\sigma|)^{3/2}]$. F. Rouyer and N. Menon; Phys. Rev. Lett. **85**(2000)

densidade. Apesar de não ter aglomerados tem distribuição não gaussiana.

Finalmente se mostrou, figura(1.11), que a distribuição de velocidades não varia com a densidade média (o parâmetro α mostrou pequenas variações). Se esperaria uma distribuição Gaussiana no limite diluído dado que neste limite se reduzem as correlações devidas à inelasticidade do gás. Isto, para os autores, indica que o limite diluído e o limite elástico não são equivalentes.

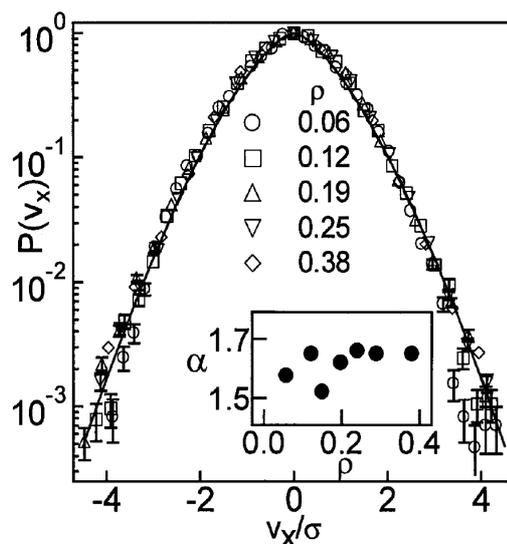


Figura 1.11: $P(v_x/\sigma)$ para diferentes valores de ρ . A linha sólida corresponde à função $\exp[-0.80(|v_x|/\sigma)^{3/2}]$. F. Rouyer and N. Menon; Phys. Rev. Lett. **85**(2000)

1.4 Teoria cinética

Com a finalidade de poder estudar teoricamente a distribuição de velocidades, Goldstein e Shapiro¹³ estudaram um sistema granular composto de esferas rugosas e inelásticas de diâmetro σ e analisaram-no na base da equação cinética de Boltzmann Enskog. Define-se aparte do coeficiente de restituição r , devido à inelasticidade, o coeficiente β que mede a rugosidade da esfera ($-1 < \beta < 1$). Devido a esta rugosidade as esferas apresentam velocidade angular. As velocidades pré-colisionais $\mathbf{v}_1, \omega_1, \mathbf{v}_2, \omega_2$ e pós-colisionais $\mathbf{v}'_1, \omega'_1, \mathbf{v}'_2, \omega'_2$ de duas esferas que colidem ($\hat{n}_{12} \cdot \mathbf{v}_{12} > 0$) apresentam velocidades relativas pré-colisionais na direção do vetor \hat{n}_{12} , g_{12n} , e perpendicular a este vetor, $\mathbf{g}_{21\tau}$:

$$g_{12n} = (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{n}_{12}) \quad \mathbf{g}_{21\tau} = \mathbf{v}_{12} - \hat{n}_{12}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{n}_{12}) - \frac{1}{2}\sigma\hat{n}_{12} \times (\omega_1 + \omega_2). \quad (1.21)$$

A relação com as velocidades relativas pós-colisionais se obtém mediante a hipótese do impacto inelástico

$$g'_{12n} = -r g_{12n} \quad \mathbf{g}'_{21\tau} = -\beta \mathbf{g}_{21\tau} \quad (1.22)$$

onde $r = r(g'_{12n})$ e $\beta = \beta(g'_{12n}, g_{21\tau})$. Somando a esta hipótese a conservação do momento linear e o momento angular durante a colisão se encontra a relação entre as velocidades pré-colisionais e pós-colisionais ^a.

Definindo a função distribuição de estados $f_1 \equiv f(x, v, t)$ (probabilidade da partícula estar no estado definido pelas variáveis de posição, velocidade e tempo respectivamente) e derivando em relação ao tempo obtemos

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial_c f}{\partial t}, \quad (1.23)$$

onde $\frac{\partial v}{\partial t} = 0$ já que se supõe que não há forças externas e $\frac{\partial_c f}{\partial t}$ é o termo colisional, que em ausência de colisões é igual a zero. Para o sistema colisional temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial_c f}{\partial t} = & \int d^3 v_2 d^3 \omega_2 d^2 \hat{n}_{12} S(\hat{n}_{12} \cdot v_{12}) \left[\Lambda f^{(2)}(x, v''_1, \omega''_1; x + \sigma \hat{n}_{12}, v''_2, \omega''_2; t) \right. \\ & \left. - f^{(2)}(x, v_1, \omega_1; x - \sigma \hat{n}_{12}, v_2, \omega_2; t) \right], \end{aligned} \quad (1.24)$$

onde $f^{(2)}$ é a distribuição de velocidades a duas partículas (probabilidade das partículas terem a configuração dada pelas variáveis respeitivas) antes e depois de colisão. Também temos que

$$\Lambda = -\partial(v''_1, v''_2, \omega''_1, \omega''_2) / \partial(v_1, v_2, \omega_1, \omega_2) \tilde{r}^{-1}, \quad (1.25)$$

onde Λ é o Jacobiano da transformação de velocidades, $\tilde{r}(g_{21\hat{n}})$ é o coeficiente de restituição que depende da velocidade relativa. $S(\hat{n}_{12} \cdot v_{12}) = \sigma^2 \hat{n}_{12} \cdot v_{12} \theta(\hat{n}_{12} \cdot v_{12})$ donde θ é a função de Heaviside. As equações acima não formam um sistema fechado. Um sistema fechado é obtido invocando a hipótese do caos molecular (podemos supor que a função de duas partículas, $f^{(2)}$, se escreve como o produto da função distribuição, $f^{(1)}$, para cada partícula), modificado para incluir o fator de frequência de Enskog $g(n)$

$$\begin{aligned} f^{(2)}[\mathbf{x} + \sigma \hat{n}_{12}(1 - \lambda), \mathbf{v}_1, \omega_1; \mathbf{x} - \lambda \sigma \hat{n}_{12}, \mathbf{v}_2, \omega_2; t] \\ = f_1[\mathbf{x} + \sigma \hat{n}_{12}(1 - \lambda)] f_2[\mathbf{x} - \lambda \sigma \hat{n}_{12}] g[\mathbf{x} + \sigma(\frac{1}{2} - \lambda)] \end{aligned} \quad (1.26)$$

Em ausência de forças externas e de fontes o sistema passa por um estado cinético e subseqüentemente por um estado hidrodinâmico. No estado hidrodinâmico, o sistema evolui de maneira que $f_1^{(0)} = f^{(0)}(n, v_1, T_g(t))$ onde $T_g(t)$ é a energia cinética média do sistema ou a temperatura granular como foi definido acima. No caso de um estado com homogeneidade espacial, de

^a Apêndice referência [13]

esferas suaves ($\beta = -1$, as velocidades angulares permanecem constantes) e $r = \text{constante}$ a equação (1.23) se escreve

$$\frac{df_1^{(0)}}{dt} = g(n)I(f^{(0)}, f^{(0)}) \quad (1.27)$$

com

$$I(f^{(0)}, f^{(0)}) = \int d^3v_2 d^2n_{12} S(n_{12} \cdot v_{12}) [\Lambda f^{(0)}(v_1'', t) f^{(0)}(v_2'', t) - f^{(0)}(v_1, t) f^{(0)}(v_2, t)]. \quad (1.28)$$

Onde $\Lambda = 1/r^2$ é obtido a partir do Jacobiano da transformação de velocidades. v_1'' e v_2'' são as velocidades pré-colisionais e v_1 e v_2 são as pós-colisionais relacionados pela transformação (1.8). Assumindo que $f^{(0)}$ é isotrópico pode-se fazer

$$f_i^{(0)} = \frac{n}{(T_g/m)^{3/2}} F_i \quad F_i = F(V_i^2, r) \quad i = 1, 2, \quad (1.29)$$

onde $V_1 = v_1(m/T_g)^{1/2}$ e r é o coeficiente de restituição, assim a dependência temporal de f_1^0 fica embutida em $T_g = T_g(t)$. Com estas considerações se obtém a equação que governa a evolução temporal da energia cinética durante o processo de dissipação

$$\frac{dT_g}{dt} = K_r(F, F)(lm^{1/2})^{-1}T_g^{3/2}, \quad (1.30)$$

onde

$$K_r(F, F) = -\frac{\pi(1-r^2)}{16} \int d^3v_1 d^3v_2 F_1 F_2 (V_2 - V_1)^3 \quad (1.31)$$

e $l = (\sigma gn)^{-1}$ é um análogo do livre caminho médio nos gases densos. Como $K_r(F, F)$ é independente do tempo (depende apenas do parâmetro r) a solução da equação de balance de energia é imediatamente calculada:

$$T_g(t) = \frac{T_g(0)}{(1+t/\delta)^2}. \quad (1.32)$$

Aqui, $T_g(0)$ é a temperatura inicial, a escala de tempo do decaimento é dada por

$$\delta = -(2t_0)/K_r(F, F),$$

e $t_0 = (T_g(0)/m)^{-1/2}l$ é o tempo comparável ao tempo médio livre no sistema granular. Pode-se notar que quando r se aproxima da unidade, $K_r(F, F) \sim 0$, e ambos os tempos são significativamente diferentes. Como pode-se esperar a lei de Haff é reproduzida.

Os autores também avaliaram o efeito do coeficiente de restituição r na função de distribuição. Por esse motivo expandiram a função F_1 em uma série em termos dos polinômios de Sonine (apêndice, seção A.2.2)

$$F_1 = F_1^{(0)} \sum_{i=0}^{\infty} a_i S_{1/2}^{(i)}(\tilde{V}_1^2), \quad \tilde{V}_1^2 = V_1^2/\alpha_t, \quad (1.33)$$

onde a_i são funções adimensionais do parâmetro r , $F_1^{(0)}$ é a função de Maxwell-Boltzmann ou distribuição Gaussiana

$$F_1^{(0)} = (\pi\alpha_t)^{-3/2} \exp(-V_1^2/\alpha_t), \quad (1.34)$$

e $S_m^{(n)}$ são os polinômios de Sonine (apêndice, seção A.2.2), $\alpha_t = 4/3$. Os dois primeiros coeficientes são $a_0 = 1$ e $a_1 = 0$. Em primeira aproximação é suficiente calcular o coeficiente a_2 ¹³:

$$a_2 = \frac{16(1-r)(1-2r^2)}{64 + (1-r)[190(1+r^2) + 147]}. \quad (1.35)$$

Se mostra assim que $|a_2| \ll 0.04$ para todos os valores de r . Substituindo a expansão (1.33) e usando os coeficientes a_0 , a_1 e a_2 em (1.31) se obtém

$$K_r(F, F) = -\left(\frac{2\pi}{3}\right)^{1/2} \frac{4}{3}(1-r^2) \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right). \quad (1.36)$$

Como se vê a diferença entre a distribuição $f^{(0)}$ e a de Maxwell-Boltzmann produz apenas uma pequena correção na equação hidrodinâmica (1.30).

T. P. C. van Noije e M.H. Ernst¹⁴ estudaram um sistemas de esferas rígidas inelásticas ou discos (sistemas em duas ou três dimensões) usando a equação de Enskog-Boltzmann para uma distribuição homogênea $f(\mathbf{v}, t)$ em ausência de forças externas tanto para o caso de esfriamento homogêneo e o sistema estacionário uniformemente injetado de energia. Como assinalado por Goldshtein e Shapiro a equação (1.28) admite uma solução isotrópica escalada que depende da temperatura granular como

$$f(\mathbf{v}, t) = \frac{n}{v_0^d(t)} \tilde{f}\left(\frac{v}{v_0(t)}\right) \quad (1.37)$$

onde d é a dimensão do sistema granular. Esta forma escalada de $f(\mathbf{v}, t)$ é semelhante à forma escalada (1.29). A relação entre a temperatura granular e a função $f(\mathbf{v}, t)$ é dada pela equação

$$\frac{d}{2} n T_g(t) = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m v^2 f(\mathbf{v}, t). \quad (1.38)$$

Usando a transformação (1.37) a equação (A.58) se escreve

$$\frac{\mu_2}{d} \left(d + \mathbf{c}_1 \frac{d}{d\mathbf{c}_1} \right) \tilde{f}(\mathbf{c}_1) = \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) \quad (1.39)$$

com

$$\tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) = \int d\mathbf{c}_2 \int d\hat{n}_{12} \Theta(\hat{n}_{12} \cdot \mathbf{c}_{12}) \hat{n}_{12} \cdot \mathbf{c}_{12} \left\{ \frac{1}{r^2} f(c'_1) f(c'_2) - f(c_1) f(c_2) \right\} \quad (1.40)$$

e $\mu_2 = - \int d\mathbf{c}_1 c_1^2 \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f})$. Expressando $\tilde{f}(\mathbf{c}_1)$ em função dos polinômios de Sonine e seguindo o procedimento usado no trabalho anterior os autores encontraram igual decaimento da temperatura granular e uma pequena correção com relação a distribuição Gaussiana dada pelo coeficiente a_2 . Porém foi assinalado um erro algébrico no cálculo de a_2 feito por Goldstein et al. O valor correto de a_2 encontrado foi

$$a_2 = \frac{16(1-r)(1-2r^2)}{9+24d+8rd-41r+30(1-r)r^2}. \quad (1.41)$$

Este coeficiente obedece $|a_2| \ll 0.2$ para $r \in (0, 1)$ enquanto o coeficiente achado por Goldstein e Shapiro¹³ obedecia $|a_2| \ll 0.04$ para $r \in (0, 1)$. Não obstante, a conclusão da referencia [13] de que a distribuição é bem aproximada pela distribuição de Maxwell continuou válida para valores do coeficiente de restituição compreendidas no intervalo $0.6 \lesssim r < 1$. Para estudar um sistema com injeção de energia os autores formularam a equação

$$\partial_t f(\mathbf{v}_1, t) = g(n) I(f, f) + \frac{\xi_0^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_1^2} \right) f(\mathbf{v}_1, t) \quad (1.42)$$

que com a transformação escalada e para o caso estacionário em que a função distribuição f não depende do tempo se escreve

$$\tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) + \frac{\xi_0^2}{2v_0^3 g n \sigma^{d-1}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{c}_1^2} \right) \tilde{f}(\mathbf{c}_1) = 0 \quad (1.43)$$

com o qual encontraram a velocidade média estacionária seguinte

$$v_0 = \left(\frac{d\xi_0^2}{\mu_2 g n \sigma^{d-1}} \right)^{1/3}. \quad (1.44)$$

O coeficiente a_2 para este caso apresentou também valores pequenos ($a_2 < 0.086$ em duas dimensões e $a_2 < 0.067$ em três) e portanto pequenas correções à distribuição Maxwelliana. Os valores achados para o coeficiente a_2 concordaram com simulações computacionais. Os autores também analisaram o comportamento das distribuição de velocidades para velocidades muito grandes. Em outras palavras analisaram o limite $\mathbf{c}_1 \gg 1$ da equação (1.39) que corresponde ao caso de resfriamento homogêneo e a (1.43) que corresponde ao caso de injeção de energia. Usando a aproximação

$$\tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) \sim \beta_1 c_1 \tilde{f}(c)$$

onde $\beta_1 = \pi^{d-1}/\Gamma(1/2(d+1))$, válida para $c \gg 1$ na equação (1.39) e cancelando o primeiro termo do lado direito desta equação, por ser menor em relação ao segundo, a equação se escreve

$$\frac{\mu_2}{d} c \frac{d}{dc} \tilde{f}(c) = -\beta_1 c_1 \tilde{f}(c)$$

cuja solução é da forma $\tilde{f}(c) \sim \mathcal{C} \exp(-\frac{\beta_1 d}{\mu_2} c)$. Esta solução representa o comportamento da função distribuição para grandes velocidades no caso de resfriamento homogêneo.

Passando ao caso do gás granular com injeção de energia temos que a equação (1.43) para c_1 muito grande se escreve

$$-\beta_1 c \tilde{f}(c) + \frac{\mu_2}{2d} \left(\frac{d^2}{dc^2} + \frac{d-1}{c} \frac{d}{dc} \right) \tilde{f}(c) = 0,$$

inserindo uma solução da forma $\tilde{f}(c) \propto \exp(-Ac^B)$ se obteve a solução $B = 3/2$ e $A = \frac{2}{3} \sqrt{2d\beta_1/\mu_2}$.

Os resultados encontrados nos trabalhos citados acima concordaram bem com a teoria, contudo não se havia levado em conta a possibilidade do coeficiente de restituição depender da velocidade de impacto das partículas. Brilliantov e Pöschel¹⁵ acharam uma expressão para o coeficiente de restituição r em função da velocidade de impacto $g = \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{n}_{12}$. Introduzindo $\xi(t)$, a compressão ou deformação das partículas durante uma colisão $\xi(t) = R_1 + R_2 - |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ (R_1, R_2 e $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ são os raios e as posições das esferas), se formula a equação

$$\ddot{\xi}(t) = \frac{F(\xi(t))}{m_f} \tag{1.45}$$

com as condições iniciais

$$\dot{\xi}(0) = g \quad \xi(0) = 0 \tag{1.46}$$

onde $F(\xi(t))$ é a força de interação entre as partículas durante a colisão. Esta força consiste de uma parte elástica e conservativa devida à deformação das partículas, ξ , e outra parte viscosa dividido à dissipação da energia que depende da taxa de deformação, $\dot{\xi}$. A parte conservativa é dada pela lei de Hertz para partículas esféricas

$$F_{el} = \frac{3}{2} \rho \xi^{3/2}, \quad \rho \equiv \frac{2Y}{3m_f(1-\nu^2)} \sqrt{R_f}, \tag{1.47}$$

Y e ν são, respectivamente, o módulo de Young e o quociente de Poisson do material das partículas, $m_f = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ onde m_1 e m_2 são as massas das esferas que colidem. A parte dissipativa vem dada por

$$F_{dis} = \frac{Y}{(1-\nu^2)} \sqrt{R_f A} \sqrt{\xi \dot{\xi}} \quad (1.48)$$

onde A é a constante dissipativa do material dado por

$$A = \frac{1}{3} \frac{(3\eta_2 - \eta_1)^2}{(3\eta_2 + 2\eta_1)} \left[\frac{(1-\nu^2)(1-2\nu)}{Y\nu^2} \right]. \quad (1.49)$$

As constantes de viscosidade η_1 e η_2 relacionam o tensor de estresse dissipativo ao tensor de taxa de deformação. A equação de movimento da deformação é então¹⁶

$$\ddot{\xi} + \rho \left(\xi^{3/2} + \frac{3}{2} A \sqrt{\xi \dot{\xi}} \right). \quad (1.50)$$

Esta equação também foi deduzida por outro método¹⁷. Supondo que a colisão se dá no tempo $t=0$ e que o impacto dura um intervalo de tempo t_c temos que de acordo com a definição de coeficiente de restituição

$$r = -\dot{\xi}(t_c)/\dot{\xi}(0). \quad (1.51)$$

Com estas condições T. Schwager et al.¹⁸ encontraram

$$r = 1 - C_1 A \rho^{2/5} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{n}_{12}|^{1/5} + C_2 A \rho^{4/5} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{n}_{12}|^{2/5} \mp \dots \quad (1.52)$$

onde $C_1 = 1.15344$ e $C_2 = 0.79826$. A equação de Enskog-Boltzmann se escreve neste caso como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(v_1, t) &= g_2(\sigma) \sigma^2 \int dv_2 \int d\hat{n}_{12} \Theta(-v_{12} \cdot \hat{n}_{12}) |v_{12} \cdot \hat{n}_{12}| \\ &\times \{ \chi f(v_1'', t) f(v_2'', t) - f(v_1, t) f(v_2, t) \}. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Onde o fator

$$\chi = 1 + \frac{11}{5} C_1 A \rho^{2/5} |v_{12} \cdot \hat{n}_{12}|^{1/5} + \frac{66}{25} C_1^2 A^2 \rho^{4/5} |v_{12} \cdot \hat{n}_{12}|^{2/5} + \dots \quad (1.54)$$

aparece a partir do Jacobiano da transformação $dv_1'' dv_2'' \rightarrow dv_1 dv_2$ e da relação dos comprimentos dos cilindros $r|v_1'' \cdot \hat{n}_{12}| dt = |v_{12} \cdot \hat{n}_{12}| dt$. Para o caso de o coeficiente de restituição ser constante tínhamos $\chi = 1/r^2 = \text{constante}$. Os autores escreveram a transformação (1.29) da seguinte maneira

$$f(v, t) = \frac{n}{v_0(t)^3} \tilde{f}(c, t), \quad \mathbf{c} = \mathbf{v}/v_0(t) \quad (1.55)$$

com

$$\tilde{f}(c, t) = \phi(c) \left\{ 1 + \sum_{p=1}^{\infty} a_p(t) S_p(c^2) \right\}$$

onde $\phi(c)$ é a distribuição Gaussiana. Agora os coeficientes $a(t)$ são dependentes do tempo. Com essa transformação temos que (1.53) se escreve

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v_0^2} \frac{dv_0}{dt} \left(3 + c_1 \frac{\partial}{\partial c_1} \right) \tilde{f}(\mathbf{c}, t) + \frac{1}{v_0} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{f}(\mathbf{c}, t) \\ & = g_2(\sigma) \sigma^2 n \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) \end{aligned}$$

onde a integral colisional é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\tilde{f}, \tilde{f}) &= \int d\mathbf{c}_2 \int d\hat{n}_{12} \Theta(-c_{12} \cdot \hat{n}_{12}) |c_{12} \cdot \hat{n}_{12}| \\ & \times \{ \tilde{\chi} \tilde{f}(c'_1, t) \tilde{f}(c'_2, t) - \tilde{f}(c_1, t) \tilde{f}(c_2, t) \}. \end{aligned}$$

O fator $\tilde{\chi}$, agora é igual a

$$\tilde{\chi} = 1 + \frac{11}{5} C_1 \delta' |c_{12} \cdot \hat{n}_{12}|^{1/5} + \frac{66}{25} C_1^2 \delta' |c_{12} \cdot \hat{n}_{12}|^{2/5} + \dots \quad (1.56)$$

e depende do tempo via

$$\delta' = A \rho^{2/5} \left[\frac{2 T_g(t)}{m} \right]^{1/10} = \delta \left[\frac{2 T_g}{T_o} \right]^{1/10} \quad (1.57)$$

onde $\delta = A \rho^{2/5} (T_o/m)^{1/10}$. Com estas considerações os autores encontraram que a temperatura granular evolui de acordo com o decaimento

$$u_o(t) = \frac{T_g(t)}{T_o} = \left(1 + \frac{t}{\tau_o} \right)^{-5/3}, \quad (1.58)$$

para $t \ll \tau_o$, onde $\tau_o^{-1} = (8 \times 5^{-7/5} \pi \Gamma(3/5)) (A g_2(\sigma) \sigma^2 n \rho^{2/5}) T_o^{6/10}$ e T_o é a temperatura granular inicial. Este resultado difere da lei de Haff porque aquela não levava em conta a dependência da velocidade de impacto no coeficiente de restituição. Para tempos $t \gg \tau_o$ se obteve o decaimento

$$u(t) = 3.26856 (t/\tau_o)^{-11/6}$$

O coeficiente $a_2(t)$ para valores pequenos do parâmetro $\delta = A \alpha^{2/5} T_o^{1/10}$ apresenta o comportamento mostrado na figura:

A distribuição inicial Maxwelliana ($a_2=0$) evolui para uma não-Maxwelliana ($a_2 \neq 0$) para posteriormente alcançar a distribuição final Maxwelliana ($a_2 \rightarrow 0$). Para valores grandes de δ , $a_2(t)$ evolui¹⁹ de acordo com o comportamento mostrado na figura:

1.5 Abordagem aos Gases Granulares a partir de primeiros princípios

As abordagens mostradas acima partiram ou de equações de conservação hidrodinâmicas ou de equações cinéticas para descrever a função distribuição. Um abordagem a partir de primeiros princípios foi desenvolvida¹ considerando o grão como uma partícula constituída de subpartículas (átomos, moléculas). Então se passou a denominar as variáveis que

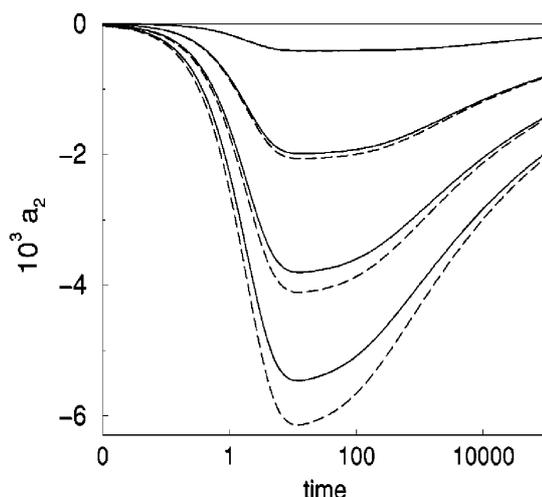


Figura 1.12: O coeficiente $a_2(t) : a_2(t) \times 1000$ para $\delta = 0.001, 0.005, 0.01$ e 0.015 (de baixo para cima). N. V. Brilliantov and T. Pöschel, Phys. Rev. E **61**(2000)

representam o a velocidade e a posição da partícula como variáveis externas, χ_T , e as variáveis que representam as posições e os momentos dos átomos dos grãos como variáveis interna, χ_I . Um hamiltoniano para um sistema livre que levasse em conta estes graus internos, χ_I , e externos, χ_T , foi construído (seção 2.1), $\mathcal{H}(\chi_T, \chi_I)$, a partir do qual se descreve a evolução temporal da função distribuição $\rho(\chi_T, \chi_I, t)$ mediante a equação de Liouville,

$$\partial_t \rho(\chi_T, \chi_I, t) = L \rho(\chi_T, \chi_I, t),$$

onde L é o Liouvilliano do sistema. Usando a teoria de eliminação das variáveis rápidas se consegue escrever uma equação para a função distribuição dos graus externos, $W(\chi_T, t)$. Para isso se usou o fato de a massa dos átomos, μ , ser muito menor do que a massa do grão, m , de maneira que um parâmetro $\epsilon = (\mu/m)^{1/2}$ foi estabelecido a fim de separar a equação de Liouville em uma parte lenta e outra rápida a fim de conseguir isolar desta equação uma para $W(\chi_T, t)$ que, em segunda ordem no parâmetro ϵ , é uma equação de Fokker-Planck da forma

$$\begin{aligned} \partial_t W(\chi_T, t) = & \left[\epsilon \left(-\frac{p^N}{m} \cdot \nabla_{r^N} + \nabla_{r^N} (U + \omega) \cdot \nabla_{p^N} \right) \right. \\ & \left. + \epsilon^2 \Gamma(r^N) : \nabla_{p^N} \left(\nabla_{p^N} + \beta \frac{p^N}{m} \right) \right] W(\chi_T, t) + \mathcal{O}(\epsilon^3) \end{aligned}$$

onde U é o potencial devido às forças externas e ω é um potencial efetivo devido à interação entre os grãos, $\beta = 1/k_B T$ e a função $\Gamma(r^N)$ contém as interações dissipativas próprias do sistema granular. Num trabalho

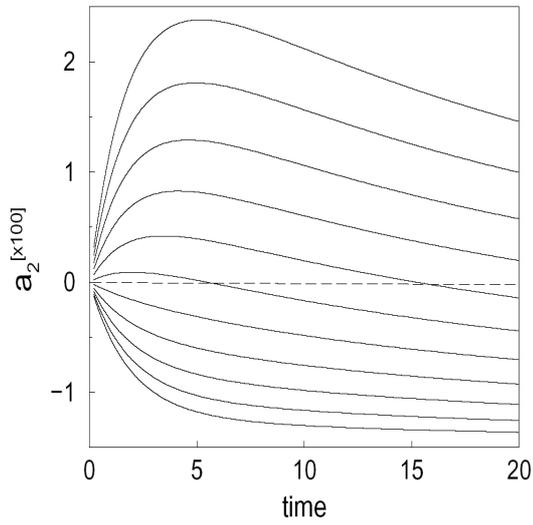


Figura 1.13: O coeficiente $a_2(t)$ de sonine para valores grandes da dissipação δ : $a_2(t) \times 100$ para $\delta = 0.1, 0.11, 0.12, \dots, 0.20$ (de baixo para cima). direita $a_2(t) \times 100$ para $\delta 0.16$. N. V. Brilliantov and T. Pöschel, cond-mat/0203401

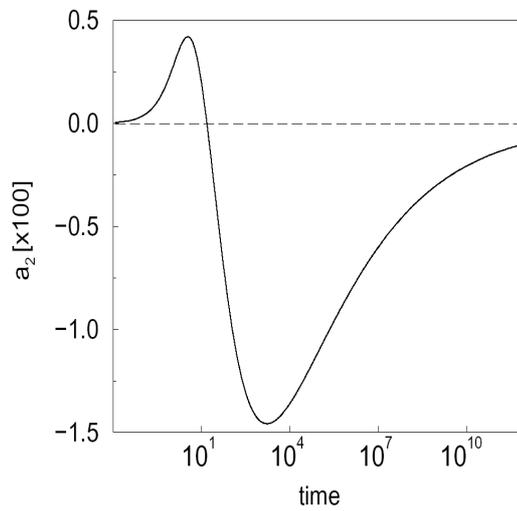


Figura 1.14: O coeficiente $a_2(t)$ de sonine para valores grandes da dissipação δ : $a_2(t) \times 100$ para $\delta 0.16$. N. V. Brilliantov and T. Pöschel, cond-mat/0203401

posterior²⁰ se encontrou, a partir da equação acima, uma equação cinética que descrevia a evolução temporal da função distribuição a uma partícula^{20,21}

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{p}_1) = & \int d\mathbf{p}_2 d\Omega \frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}{m} \sigma(\Omega) \left(f(\mathbf{p}'_1) f(\mathbf{p}'_2) - f(\mathbf{p}_1) f(\mathbf{p}_2) \right) \\ & + \mathcal{A} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot \left[-\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \frac{1}{mk_B T} \mathbf{p}_1 \right]. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Com esta equação foi calculado o decaimento da energia no sistema dissipativo livre e se encontrou que

$$T_g(t) = T_g(0) \left(1 + \frac{t}{\tau_o} \right)^{-5/3} \quad (1.60)$$

de acordo com a teoria apresentada acima, equação (1.58). Também partindo da equação (1.59) se encontrou uma equação para a deformação, h , de um grão durante o impacto¹⁷

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 h}{dt^2} = \frac{5}{4} k h^{3/2} - k' h^{1/2} \frac{dh}{dt}, \quad (1.61)$$

onde $\gamma = k' h^{1/2}$ é o coeficiente de dissipação do sistema^{17, 22, 23}. Resultado que foi encontrado por meio de métodos heurísticos¹⁶, equação (1.50). A relação entre ambas as abordagens resulta do fato de ao trabalhar a partir de primeiros princípios se está levando em conta a dependência da velocidade do coeficiente de restituição no sistema.

1.6 Objetivo

Como vimos nesta introdução aos sistemas granulares o estudo destes sistemas tem sido feito usando diretamente os conceitos da hidrodinâmica ou partindo de uma equação cinética para a distribuição de velocidades a uma partícula. Uma abordagem a partir de primeiros princípios foi realizada por Schofield e I. Oppenheim para um sistema granular livre¹. Este trabalho foi continuado posteriormente e aplicado ao caso do **HCS**²⁰. Nosso objetivo é dar continuação a estes trabalhos de maneira a incorporar ao sistema granular uma fonte externa de alimentação de energia a fim de conseguir um sistema estacionário e poder encontrar assim uma equação (equação de Boltzmann) que descreva a evolução temporal da função distribuição de velocidades e poder estudá-lo posteriormente a fim de observar o comportamento da função distribuição de velocidades em relação à distribuição Gaussiana e também observar o comportamento da temperatura granular¹².

A tese se desenvolve como segue: Estendemos primeiro a equação de Liouville, que descreve a evolução temporal da função densidade de estados

do sistema, a uma equação que descreva um sistema que recebe energia externa seguindo o modelo chamado democrático em que o sistema recebe energia de maneira que a cada intervalo de tempo τ_o o momento das partículas se incrementa em ζ_i . Neste trabalho imporemos o limite $\tau_o \rightarrow 0$ e $\zeta_i \rightarrow 0$ de maneira que a taxa de absorção de energia seja constante. Desta maneira encontramos uma equação pseudo-Liouvilliana que descreverá a evolução temporal da função densidade de estados do sistema $\rho \equiv \rho(\chi_T, \chi_I, t)$. Posteriormente usamos o método de eliminação de variáveis rápidas, identificando as variáveis externas com as lentas e as internas com as rápidas, a fim de conseguir uma equação que descreva a evolução temporal da função distribuição das variáveis externas do sistema $W(\chi_T, t)$. Para implementar este método separamos a equação de Liouville em duas partes uma, considerada a que contém os termos pequenos, levará o fator pequeno ε de maneira a poder expandir a equação pseudo-Liouvilliana até segunda ordem, seguindo o método de eliminação de variáveis rápidas, obtendo assim uma equação para $W(\chi_T, t)$. Esta equação incorpora um termo de alimentação de energia em relação à equação (1.59) achada por Oppenheim. Calculamos neste capítulo a derivada temporal da energia cinética média e assim estabelecemos uma ordem de grandeza para o termo de alimentação de energia. A partir da equação para $W(\chi_T, t)$ obteremos a hierarquia **BBGKY**^b do sistema e usando o método de separação em escalas de tempo conseguimos uma equação de Boltzmann para a função distribuição a uma partícula para o sistema com alimentação com energia externa. Aplicaremos posteriormente o método de expansão da função distribuição de velocidades em polinômios de Sonine para estudar o comportamento da função distribuição de velocidades em relação à distribuição Gaussiana. Para o caso de **HCS** encontramos a dependência temporal do decaimento da energia cinética achada nos trabalhos citados acima. Também testamos o Ansatz usado por Pöschel e vemos que a dependência temporal de φ obtida por Pöschel é similar à obtida com nossa equação. Finalmente estudamos o caso estacionário, calculamos o coeficiente a_2 e vemos que sua evolução cai para zero o que nos diz que no estado estacionário no regime em que trabalhamos (baixa densidade e baixa dissipação de energia) o sistema tende a uma distribuição Gaussiana²¹. No último capítulo damos as nossas conclusões.

Como futuras aplicações, esperamos estender este trabalho à derivação da equação de Boltzmann-Enskog a partir de primeiros princípios. Desta maneira levaríamos em consideração o tamanho dos grão e não apenas os

^bHierarquia de equações geradas a partir da distribuição $W(\chi_T, t)$ para as distribuições a s partículas, $f^{(s)}$, definidas pela relação (4.1).

consideraríamos como partículas pontuais como a equação de Boltzmann o faz.