

1 Introdução

1.1 Os Sistemas Granulares (SG)

Um sistema constituído por um número grande de grãos de tamanho macroscópico é chamado de sistema granular. Podemos encontrar um grande número de exemplos de materiais granulares na natureza: em processos geológicos tais como erosão, sedimentação e avalanches; na agricultura nas variadas formas de sementes; na indústria, nos processos de fabricação de muitos produtos, como cimento, remédios; na extração de minérios e muitos outros casos.

Os grãos em geral são rígidos e possuem diferentes formas, tamanhos, densidades e rugosidades nas suas superfícies. Eles interagem fortemente entre si. Quando grãos muito pequenos estão em contato, interações de Van der Waals tornam-se importantes. As interações entre grãos dependem também do fluido intersticial. Até mesmo a umidade do ar pode fazer com que surjam forças coesivas entre eles, devido às forças de tensão superficial do filme de água sobre eles¹. Entre grãos secos, as interações são predominantemente repulsivas e para algumas propriedades macroscópicas a presença do fluido intersticial é irrelevante.

Dependendo da densidade de número de partículas (número de grãos contidos num determinado volume), os sistemas granulares, assim como um sistema molecular clássico, podem se apresentar em fases sólida e fluida. Por exemplo, uma pilha de areia em repouso com uma certa inclinação, em relação a superfície onde esta localizada, menor que o seu ângulo de repouso comporta-se como um sólido, um vez que o material permanece estático mesmo sob a ação da gravidade. Se a pilha tiver uma inclinação maior que o ângulo de repouso os grãos da superfície da pilha começam a fluir. Contudo, este fluido não é como um fluido comum, pois apenas uma camada de superfície se movimenta, enquanto todo o resto do sistema permanece em repouso. Isto pode ser visto na figura (1.1). Podemos ver um fluido granular também como um gás denso, pois gases em geral são compostos por partículas discretas para as quais as forças coesivas podem ser desprezadas. Um exemplo de gás granular é uma tempestade de areia.

As trajetórias de grãos e moléculas são descritas pela mecânica clássica, mas as moléculas por sua vez, exibem sua natureza quântica por efetuarem



Figura 1.1: Sistema contendo grãos de mostarda (T. Shimbrot and F. J. Mozzio, Phys. Today **53**(3) (2000) 25-30).

colisões perfeitamente elásticas entre si. Grãos no entanto, são sistemas clássicos e as colisões que efetuam sempre implicam numa perda de energia cinética sob forma de calor para os seus graus de liberdade internos^{2,3}. Esta inerente inelasticidade das colisões entre grãos origina nos sistemas granulares comportamentos dinâmicos do sistema macroscópico bem diferentes do que se esperaria para um sistema molecular nas mesmas condições .

No caso do estado sólido, a distribuição de forças numa pilha de areia em repouso não é homogênea como em um fluido usual, mas formam-se cadeias dentro da pilha com diferentes intensidades de força. Em um recipiente cilíndrico contendo grãos em repouso, tal como um silo de sementes, a pressão na sua base, acima de uma certa altura, não cresce a medida que aumenta a altura do material sobre ela depositado, como se esperaria para um fluido estático usual (este fenômeno é conhecido como Efeito Jensen). Devido às forças de contato entre os grãos e fricção com os lados do recipiente, suas paredes laterais tem de suportar uma força extra.

Outro fenômeno interessante é a compactação e descompactação de materiais granulares, cujo o estudo pode ser aplicado no entendimento de processos de avalanches e formação de solo. Podemos ver este efeito através

de uma experiência bem simples: se pegarmos um tubo de ensaio com areia podemos colocar em meio a areia e retirar um lápis com facilidade. Contudo se colocarmos o lápis e dermos algumas pancadinhas na lateral do tubo, ficará mais difícil tirar o lápis. Isto porque, as pancadas fazem com que os grãos se compactem aumentando o atrito com a superfície do lápis. Porém se girarmos o lápis dentro do tubo ele poderá ser retirado com facilidade, pois este procedimento descompacta os grãos próximos ao lápis⁴.

1.2 O Gás Granular

Qualitativamente, materiais granulares podem fluir como fluidos, e há uma variedade de modelos teóricos para descrever tais fluidos⁴. Estes modelos são comumente chamados de hidrodinâmica granular, no sentido de que usam-se teorias para meios contínuos, consistindo de equações diferenciais análogas às equações de Navier-Stokes para fluidos moleculares. 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^{5,6}. 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 de computadores cada vez mais sofisticados, chegando a aproximadamente 10^6 partículas.

Para efeito de aproximação, frequentemente usamos idealizações como fluidos densos e lentos e gases rarefeitos rápidos para o desenvolvimento de modelos teóricos. Para representar estes regimes distintos são usados mecanismos de alimentação de energia, tais como, vibrações. Isto se faz necessário, pois, em sistemas granulares reais, as colisões entre os grãos fazem com que sua energia cinética de translação seja rapidamente convertida em energia térmica (energia de vibração dos átomos de cada grão) o que pode fazer com que o sistema se apresente simultaneamente como uma coexistência dos dois tipos de fluidos em regiões diferentes do espaço, e finalmente chegue

ao repouso. Contudo, quando a densidade é suficientemente baixa, modelos apropriados de teoria cinética podem ser usados.

Na elaboração de modelos teóricos é comum definir uma espécie de temperatura granular em termos das flutuações de velocidade em torno do fluxo medio de velocidades. Contudo esta temperatura (energia cinética média dos grãos) é muito maior que a temperatura ordinaria. A título de comparação, um grao típico de 1 mm de diâmetro possui um volume de 10^{-9} mm^3 massa de cerca de 10^{-5} kg e cerca de 10^{16} átomos. A velocidade típica de vibração desses átomos é da ordem da velocidade do som, cerca de 10^4 m/s . A velocidade granular típica é ordem de 1 m/s . A razão abaixo nos dá o valor típico das flutuações térmicas comparadas à energia cinética média por grão :

$$\frac{k_B T}{T_g} \sim \frac{v_{\text{atomo}}^2}{10^{16} v_g^2} \sim \frac{10^8}{10^{16}} \sim 10^{-8} \ll 1. \quad (1.1)$$

Portanto, as flutuações térmicas são irrelevantes para o tratamento da evolução temporal dos sistemas granulares.

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 Haff⁷:

$$T(t) = T_0(1 + t/\tau)^{-m}, \quad (1.2)$$

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

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 espaço⁸. 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 da temperatura T^a no processo macroscópico e assim as hipóteses

^aa diminuição da temperatura granular se deve a transferência de energia dos graus de liberdade translacionais para os graus de liberdade internos, portanto a temperatura ordinária atua como uma espécie de banho térmico

termodinâmicas ($\Delta S \geq 0$) são irrelevantes para o comportamento do centro de massa dos grãos.

Os processos de mistura e separação de grãos de diferentes formas e densidades tem muita aplicabilidade na indústria, por exemplo, para separação de pós (quando isto é ou não desejável) e na indústria farmacêutica, para fabricação de compostos formados por diferentes drogas em forma de grãos, onde o controle da proporção dos componentes e da homogeneidade da mistura podem ser muito importantes.

Quando um recipiente contendo grãos de diferentes tamanhos é chacoalhado na direção vertical os grãos maiores tendem a migrar para a superfície livre, independente da sua densidade. Este fenômeno é conhecido como Efeito Castanha do Pará (Brazil-Nut Effect) porque em misturas alimentícias como granolas, devido aos chacoalhamentos que acontecem durante o transporte as castanhas se separam dos outros grãos, acumulando-se na superfície.

Ao contrário de um gás molecular, que com o tempo tende a se distribuir homogeneamente pelo espaço, em um gás granular a redução nas velocidades dos grãos devido as colisões provoca o surgimento de regiões de alta densidade (aglomerações de partículas) circundada por regiões de densidade mais baixa. Na figura (1.2) vemos experimentos com esferas de metal em uma superfície horizontal, às quais é fornecida energia através de vibrações mecânicas e eletricamente que mostram este tipo de regime.

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 maxwelliana de velocidades para um gás granular no estado estacionário⁹, injetando energia no sistema por mecanismos convenientes (como mostra a fig. (1.3), obtida por J. Herrmann, S. Luding e R. Caferio¹) para um sistema de grãos em uma caixa bidimensional obtém-se 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.

O conhecimento e uso de materiais granulares é bem antigo, haja visto as ampulhetas usadas desde a antiguidade para medir o tempo. Há muita literatura no campo da engenharia dedicada ao entendimento de como lidar com estes materiais. Contudo o domínio da tecnologia deles ainda não está tão desenvolvido quanto para fluidos convencionais. Estimam-se que na indústria farmacêutica são desperdiçados cerca de 40 por cento da capacidade de muitas plantas medicinais por problemas no transporte desses materiais¹⁰. Para alguns povos de algumas partes do mundo, inclusive de

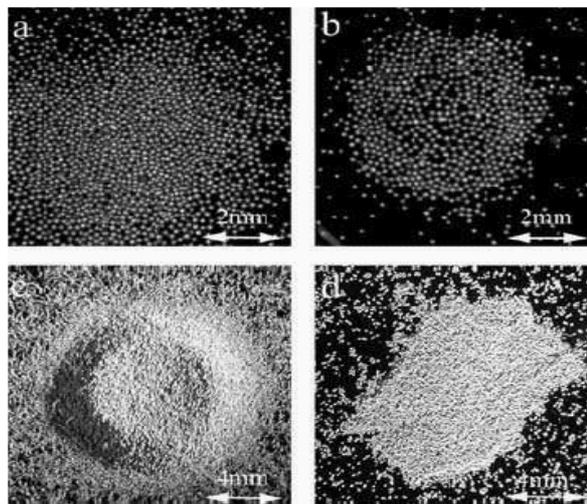


Figura 1.2: Nas figuras (a) e (b) aglomerados de esferas de metal movidas eletrostaticamente. Em (c) e (d) aglomerados em um sistema sob vibração mecânica. Na coluna da esquerda aglomerados tridimensionais e a direita bidimensionais (M. V. Sapozhnirov, I. S. Aranson, J. S. Olafsen, cond-mat/0211089-2002) .

algumas regiões do Brasil, que sofrem com a invasão de seus espaços por dunas, este desenvolvimento é de suma importância.

1.3 Objetivo

Como foi exposto os sistemas granulares apresentam comportamentos dinâmicos complicados, o que gera dificuldades para se estudá-los analiticamente. Além disso, as limitações apresentadas por alguns modelos computacionais nos motiva a construir um modelo que possa tratar sistemas grandes e que possa ser implementado com facilidade nas mais variadas condições de contorno. Mais além, o fato de os gases granulares apresentarem aglomeração desafia-nos a construir um método computacional que possa ser usado para o 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 estudar os diversos aspectos da dinâmica deste sistema. 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 no nível hidrodinâmico. Portanto, faremos uma breve dedução,

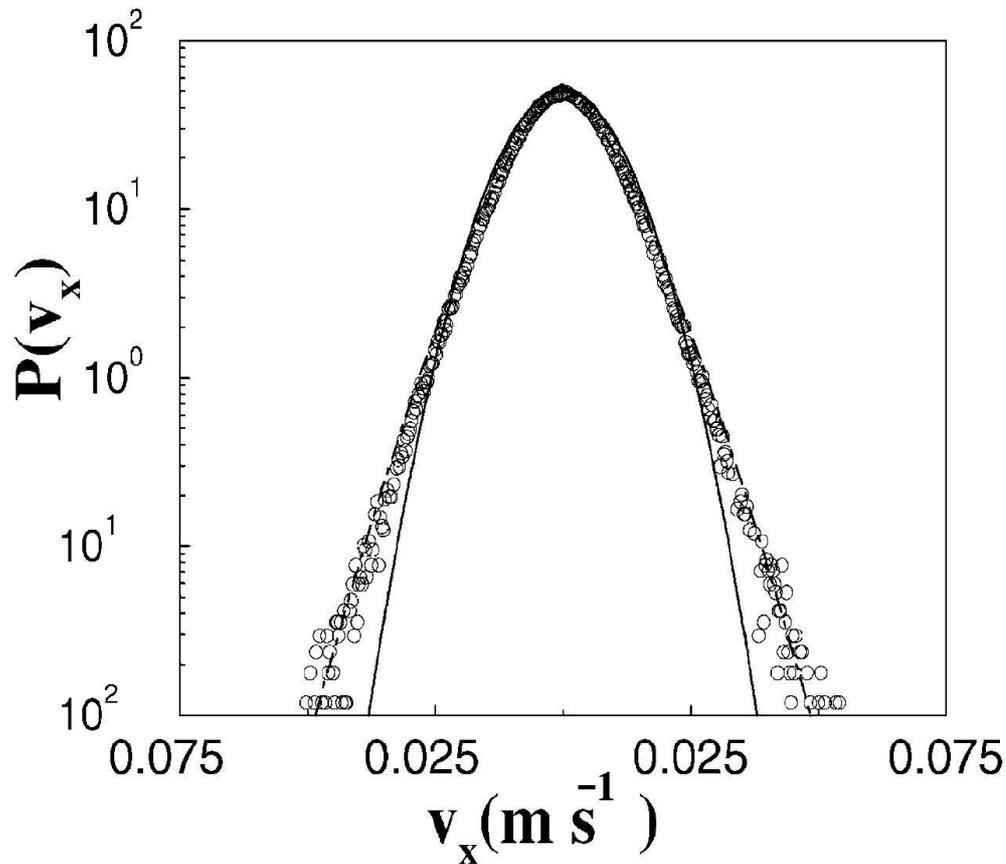


Figura 1.3: Distribuição de velocidades. A linha contínua é a curva gaussiana e a tracejada é uma exponencial esticada do tipo $Ae^{-\alpha v_x^\alpha}$, com $\alpha = 1,41$. (Hans J. Herrmann, S. Luding and R. Caferio, *Physica A* **295** (2001) 93-100).

destacando informações físicas importantes, das equações que governam o comportamento das variáveis que descrevem o sistema neste nível, a saber, a densidade e momento linear (quantidades conservadas), e a energia granular (quantidade não conservada). Dentre esses processos, nosso principal objetivo é estudar a formação de instabilidades no gás granular que levam ao surgimento de regiões densas no sistema. Para tanto faremos uma análise de instabilidades linear, destas equações.

Para estudar qualitativamente estes processos intentamos desenvolver um modelo computacional do tipo Cell Dynamic System (CDS), a partir de um modelo já utilizado com sucesso para descrever um gás granular sob diversas condições de contorno¹¹, implementando neste as condições necessárias para simular a fase de coexistência de gás e aglomerados, uma

vez que esse modelo não era capaz de tratar tal efeito. Para tal fim introduziremos um parâmetro computacional capaz de permitir, através de condições de contorno adequadas simular a coexistência destes dois regimes.

Com este novo parâmetro poderemos implementar ainda mais condições de contorno externas no sistema, e futuramente estudar sistemas como tubos com alargamento, estreitamento e curvas do tipo joelho ao longo de sua extensão, e ainda mais, a possibilidade de tratar a formação de aglomerados nos permite estudar os efeitos de um eventual entupimento de tais tubos. Pretendemos posteriormente introduzir a capacidade de mobilidade dos aglomerados, e com isto poder simular um fenômeno que se dá quando, num jato de gás dentro de um tubo, formam-se regiões densas que começam a atuar como um pistão que se move pela pressão do gás de grãos.