Simulação Estocástica de Sistemas Granulares

Aluno: Eduardo Henrique Filizzola Colombo
Orientador: Welles Antonio Martinez Morgado

Introdução

Nos baseamos no modelo de uma Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC) para representar a dinâmica de um sistema granular bidimensional. Este método resolve a equação probabilística de Boltzmann para gases, e tem se mostrado extremamente eficiente em termos de custo computacional. Lidamos, aqui, com as complicações, desta equação, que surgem quando aplicadas a este tipo de situação. Com isso, podemos simular altas densidades (aglomerados – *clusters*), tirando o limite da interpretação estocástica do DSMC, aumentando seu campo de aplicação, seja na área industrial ou no entendimento da física de não-equilíbrio.

Objetivos

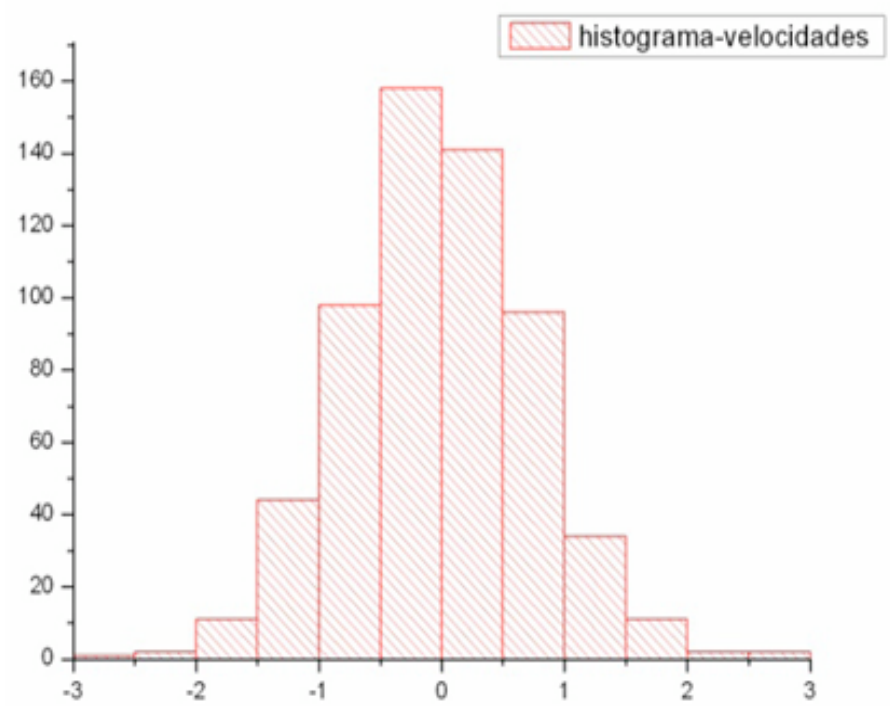
Descrever de uma maneira completa a dinâmica de sistemas granulares por meio de uma simulação estocástica, entendendo principalmente o seu comportamento em altas densidades, algo novo para este tipo de simulação.

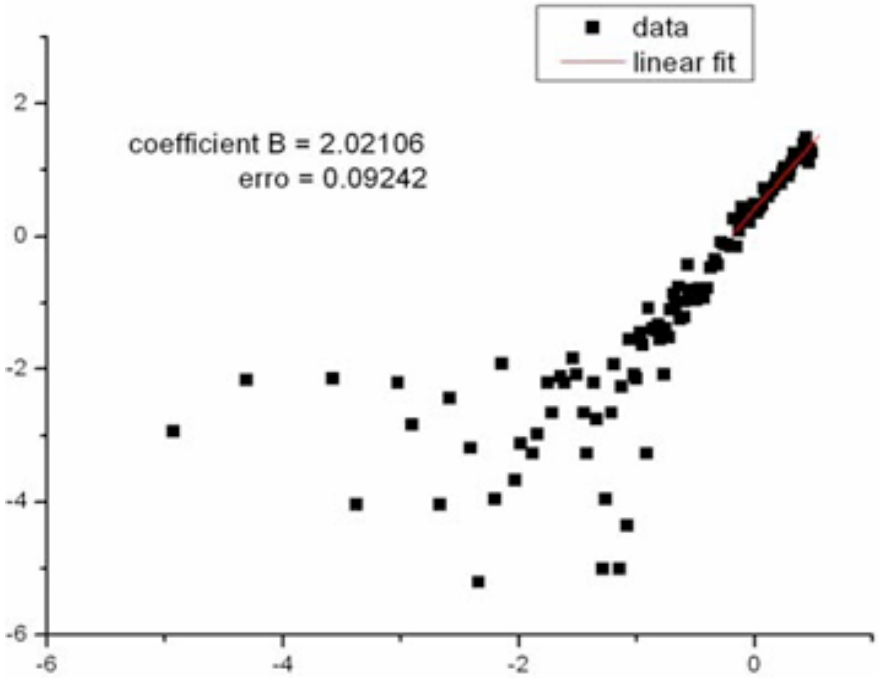
Metodologia e Resultados

Em primeira etapa, construímos um modelo para resolver as equações de Boltzmann. Utilizamos o método DSMC que já vem sendo aplicado ao estudo de diversos casos. Apesar de alguns problemas, já evidenciados na simulação de grãos, causados pelas colisões inelástica não previstas em gases, o DSMC é uma importante ferramenta no estudo da física de não-equilíbrio para este tipo de sistema.

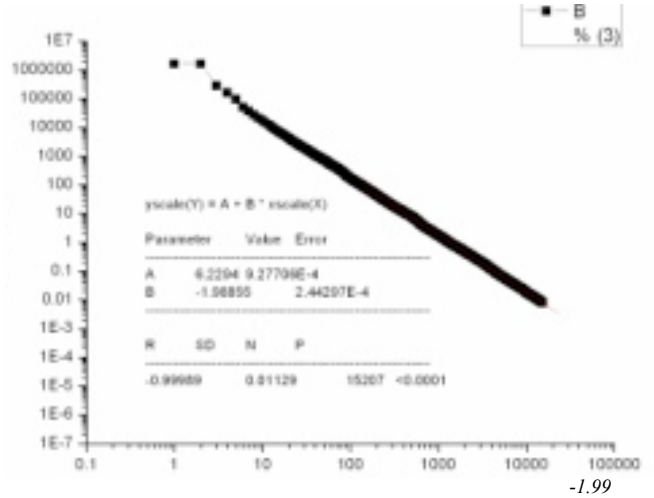
O modelo se baseia em dividir o espaço 2D em células. O deslocamento das partículas (*jump*) é feito probabilisticamente, por meio das equações tradicionais de movimento em uma primeira etapa de evolução do sistema. Em uma segunda etapa, colidimos as partículas. A equação de Boltzmann fornece a taxa de colisão, que é função, principalmente da densidade local, ou seja, da densidade da célula. Está claro que somente partículas na mesma célula podem colidir, isto é uma excelente aproximação, visto que definimos a escala do sistema de maneira que o livre caminho médio seja menor que a aresta da célula. Ao fim da etapa de colisões o algoritmo é reiniciado, percorrendo as mesmas rotinas.

O desenvolvimento até este ponto fornece inúmeras informações de extrema importância. A primeira delas é a distribuição de velocidades (figuras 1 e 2), criada pela própria equação de Boltzmann durante colisões. A segunda, talvez mais importante é a lei de decaimento de energia, descrita por P.K. Haff (figura 3). Em ambas verificações o modelo se mostrou preciso, provando sua validade. É importante enfatizar, que o tempo computacional para obtenção dos dados foi extremamente pequeno comparado com outros métodos de simulação, como Dinâmica Molecular.



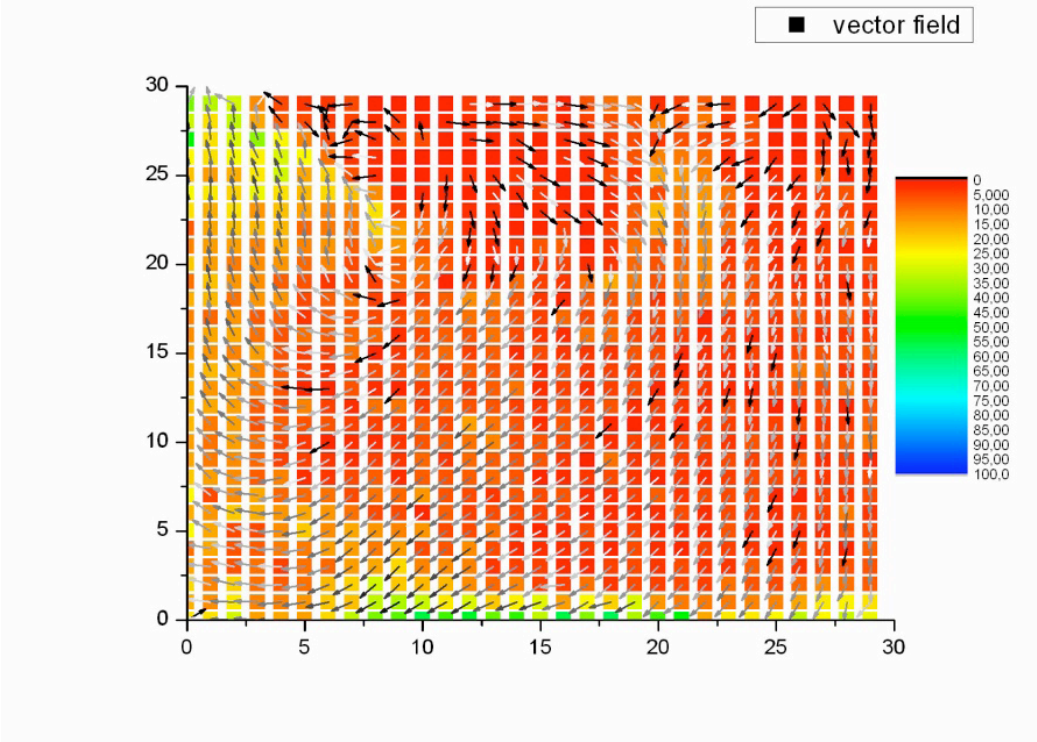


(figura 1 e 2 - distribuição gaussina de velocidades)



(figura 3 – decaimento de energia ~ t^-1.99)

Podemos ainda verificar alguns fenômenos durante o resfriamento, como o aparecimento natural de vórtices, e uma tendência à aglomeração. A figura abaixo mostra o mapeamento das densidades e do campo de velocidades, deixando claro os dois fenômenos.



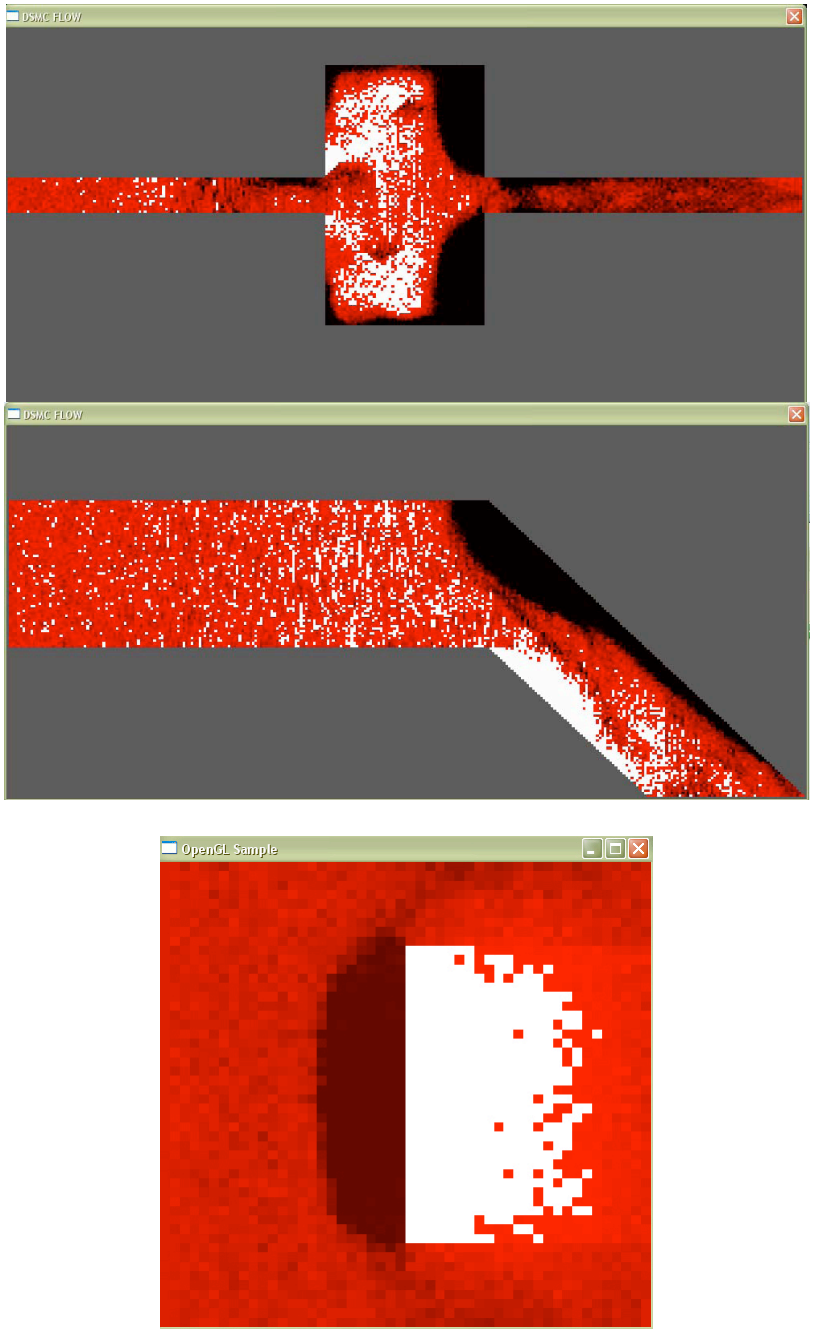
(figura 4 – vórtices e aglomeração)

Nesta primeira parte, trabalhamos com um regime homogêneo de resfriamento, mas como já apontado em outros estudos, instabilidades eram previstas no campo de densidades que provocariam o colapso do sistema (figura 4 acima).

Em uma célula, que tenha mais partículas que seus vizinhos, a taxa de colisão é maior. Está característica resulta em um gradiente de pressão para dentro da célula, levando a um crescimento exponencial da densidade. Corrigimos este problema com aplicação do conceito de volume excluído, ou seja, um limite para o volume ocupado (proposta sugerida em [3]). Esta correção trouxe mais realidade a física do sistema, mas, em compensação, teríamos que lidar com conseqüência de termos uma célula cheia, e descrever sua interação com a

vizinhança. Definimos está célula como “cluster”, um conjunto de grãos aglomerados que apresentam uma dinâmica coletiva. Nesse caso, todo tipo de simulação encontra dificuldades. O grande número de cálculos que ocorrem pelas inúmeras interações, já que o espaço entre os grãos é reduzido a valores próximos, ou iguais, a zero. O custo computacional se torna extremamente grande, tornando está situação um grande objeto de estudo.

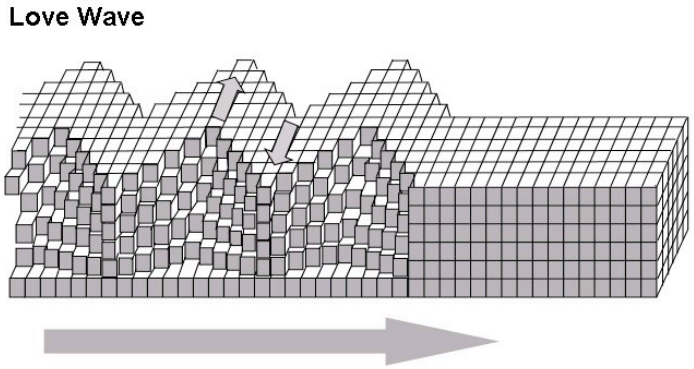
Fizemos uma descrição primária para o tratamento dos “clusters”. Nos enfocamos, brevemente, em observar o comportamento de um fluxo granular seco de alta velocidade em tubulações. A seguir mostramos os resultados qualitativos de algumas simulações:



(figura 5 – fluxo granular em algumas situações de interesse)

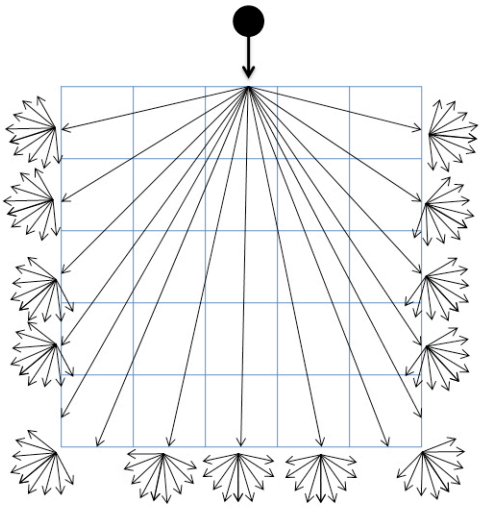
Conseguimos alguns resultados interessantes, mas, entendíamos que a descrição da dinâmica dos clusters estava sendo feita ainda de maneira um pouco superficial, e nos focamos a entender como aprimorar a modelagem.

A descrição da dinâmica dos *clusters* é a parte mais importante deste estudo, por conseguir completar o campo de aplicação do modelo original. A primeira sugestão para reformular a interpretação desta fase do sistema, foi uma analogia. Assim como aproximamos o comportamento de grãos em baixas densidades ao de gases (equação de Boltzmann), iremos compreender o cluster como uma fase contínua, semelhante a um sólido, ou ainda a um fluido extremamente viscoso. Esta primeira idéia, de como é a forma dos clusters, traz possível descrição da propagação de uma onda de choque dentro da fase. Com isso, podemos começar a escrever a transferência de momento na interação *cluster*-gás. Partimos da idéia de propagação das ondas de Rayleigh e Love ([5] e [6]). A figura a baixo mostra uma ilustração da propagação da onda Love:



A descrição da propagação de uma onda em meio granular, vem sendo descrita usando equações que se aproximam, principalmente em relação ao decaimento da amplitude, das ondas Love. Consideramos propagação radial e conservação da energia.

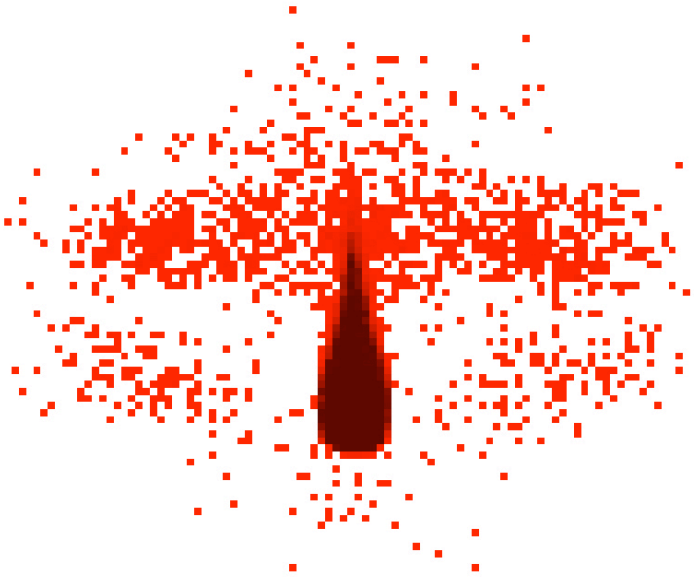
Os grãos transmitem impactos e tensões, principalmente, via arcos de força, cujas orientações são aleatórias, mas que obedecem a leis de formação. Para nós, a descrição real do comportamento dos arcos é, de certa forma, incompatível com o modelo DSMC, e o meio de representá-los é exatamente por esta analogia de propagação de ondas. Entretanto, nos preocupamos em adicionar uma outra característica, uma dispersão de transferência. Ou seja, o momento, quando transferido para uma célula, tem uma direção de propagação principal. Mas, entendemos, pelo próprio estudo dos arcos, que ocorrem ramificações de caráter aleatório, como já mencionado, então aplicamos uma dispersão na transferência. Abaixo segue uma figura que representa o esquema da transferência de momento.



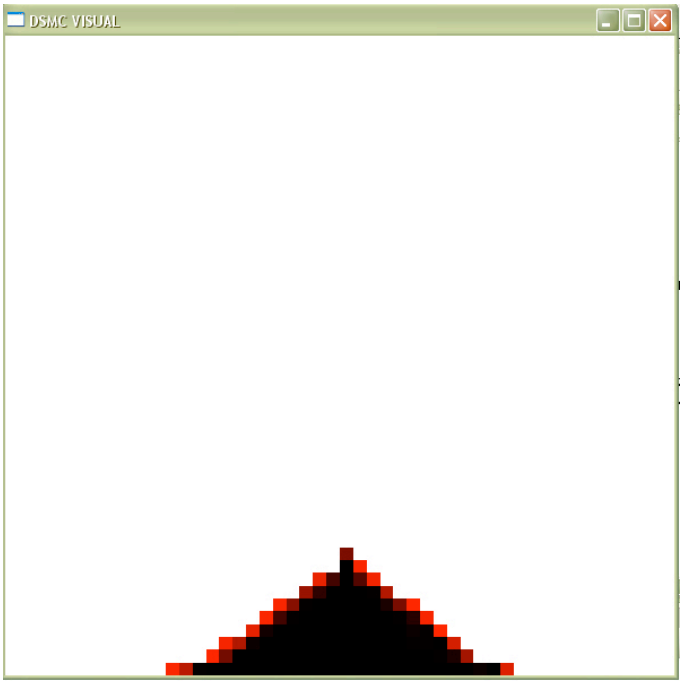
O momento passado para célula é distribuído para cada partícula em função de uma variável aleatória, que se encarrega de espalhar o momento.

Com essa modelagem, nos preocupamos em observar o comportamento de sistemas extremamente densos. Estudamos colisões e o efeito da força da gravidade em aglomerados granulares e estamos perto de conseguir uma boa modelagem. Alguns resultados em situações clássicas são mostrados pelas seguintes figuras:

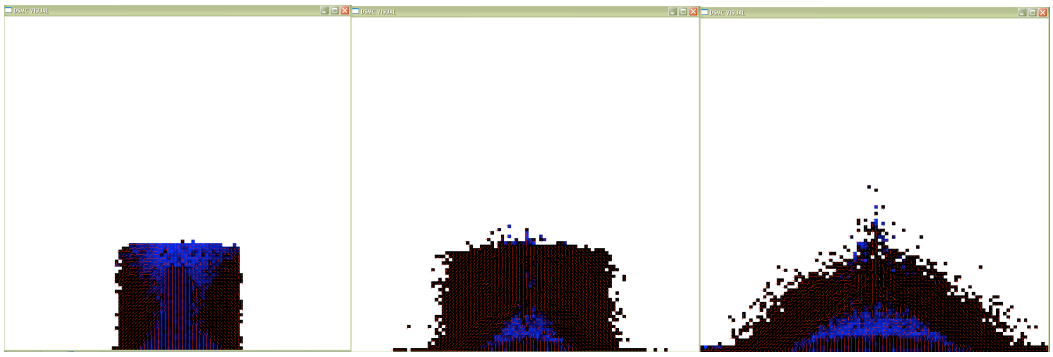
- Colisão entre clusters, com direções de velocidades (1,1) e (-1,1);



- Pilha de grãos formada a partir de deposição de um fluxo vertical de largura de uma célula;



- Seqüência de imagens de um aglomerado sobre a força da gravidade, leitura de momento (mais escuro maior valor);



Conclusão e Perspectiva

Nosso estudo permite reproduzir algumas das principais características de um sistema granular com baixo custo computacional. Este método permite evitar instabilidades na densidade que estão presentes em modelos anteriores. E com a evolução na descrição do comportamento dos clusters, trazemos uma maior aplicabilidade ao modelo.

Estamos calibrando nossas simulações para podermos obter, em breve, resultados quantitativamente corretos, dado que qualitativamente nosso sistema já reproduz muitos resultados da literatura, tais com o aparecimento de aglomerados granulares e vórtices. Seguimos com o objetivo de finalizar a descrição dos clusters, aprimorando nossa interpretação, podendo assim aplicá-lo primeiramente em situações para comprovação de sua validade, e posteriormente em situações dedicadas ao estudo da física de não-equilíbrio e em casos de cunho industrial, para transporte ou armazenamento.

Referências

1 – MORGADO, W. A. M.; MUCCIOLO, E. **Numerical simulations of vibrated granular gases under realistic boundary conditions**. Physica A, 2002, v. **311**, n. 1-2, p. 150-168.
2 – BIRD, G. A., **Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows**. Clarendon, Oxford (1994).
3 – HAFF, P.K.: Grain flow as fluid-mechanical phenomenon. J. Fluid Mech., 1983, v. 134. pp. 401-430
4 – ROUYER, F.; MENON, N.: **Velocity fluctuations in a homogeneous 2D granular gas in steady state** Physical Review Letters, 2001, 85, p. 3676.
5 – MULLER, M.; HERRMANN, H.: **DSMC - A Stochastic algorithm for granular matter** (1998).
6 – LOVE, A.E.H. **Some problems of geodynamics**, 1911 (Chapter 11: Theory of the propagation of seismic waves)
7 - VIKTOROV, I.A. **Rayleigh and Lamb Waves: physical theory and application**, Plenum Press, New York (1967)