

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 da 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, desenvolvendo uma modelagem capaz de lidar com regime de alta densidade.

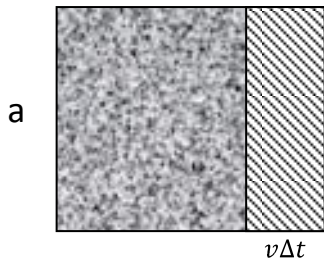
Metodologia e Resultados

Inicialmente nossa preocupação era de reconstruir o modelo, sugerido pela primeira vez, por G.A. Bird [2]. Bird aplicou a teoria desenvolvida por Boltzmann em Teoria Cinética em uma analogia onde os grãos representariam as moléculas.

O modelo, desde sua primeira sugestão, passou por aperfeiçoamentos, chegando a uma forma semelhante a que iremos descrever a seguir. Entretanto, todos autores enfatizavam o limite do modelo que estavam usando, principalmente em regiões críticas em que o sistema estaria em limiar de uma transição de fase.

Neste trabalho adotamos o desenvolvimento de uma DSMC da seguinte forma. O espaço é definido em forma matricial bidimensional (i,j) , onde cada elemento da matriz recebe o nome de célula. As células identificadas por c_{ij} possuem forma quadrada de aresta fixa a e podem ser ocupadas até que fiquem cheias, ou seja, até que as partículas em seu arranjo, qualquer que seja este, estejam ocupando toda a área a^2 . Definimos o número máximo de partículas como $N_{max} = \frac{a^2}{\sigma} f$, onde σ é a área do grão e f o fator de empacotamento que depende do arranjo. Adotamos um valor fixo $f = 0.7$ (este valor pode ser obtido experimentalmente para cada arranjo, consideramos um arranjo aleatório). As células representam a discretização do espaço onde a partícula pode estar, sendo então omitida a informação de sua posição exata dentro célula. A falta desta informação na é problema, na verdade, é uma condição para aplicarmos a equação de Boltzmann que faz a hipótese de caos molecular.

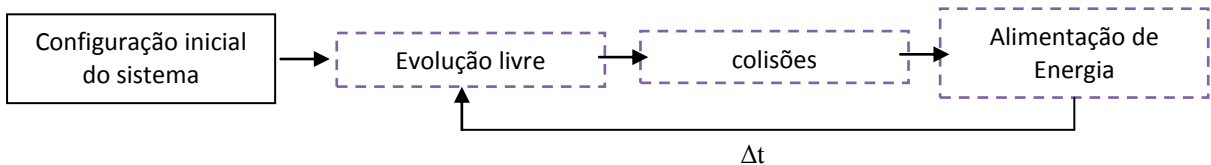
As partículas localizadas espacialmente evoluem de acordo com a probabilidade de deslocamento entre células (jump). Sendo Δt a variação do tempo computacional e \vec{v} , a velocidade da partícula, a probabilidade de deslocamento na direção de uma das coordenadas, é definida por exemplo, para \hat{i} , como, $p_+ = \frac{(\vec{v} \cdot \hat{i}) \Delta t}{a}$. Logo, então sendo X uma variável aleatória entre zero e um. Se $X < p_+$, o deslocamento da partícula n no instante $t + 1$, pode ser escrita, para a direção i , por exemplo, como $i_{n,t+1} = i_{n,t} + \frac{(\vec{v} \cdot \hat{i})}{|(\vec{v} \cdot \hat{i})|}$.



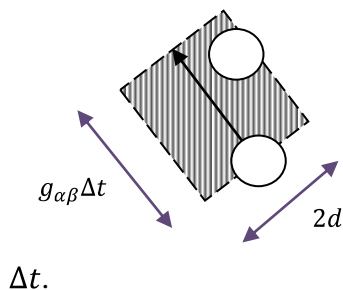
A escolha dos valores de Δt e a é tal que o sempre $v\Delta t < a$. Esta escolha é, também, importante, como veremos mais a frente, para o cálculo das colisões entre partículas.

Toda evolução espacial do sistema é feita sempre problemas exceto nos casos de fronteira, onde a partícula é refletida, e “problematicamente” no caso onde a célula de destino está cheia.

Esta parte descreve o comportamento de um gás de grãos livre, onde as partículas não interagem, seria o caso de um sistema extremamente rarefeito. As colisões acontecem em seguida da evolução livre do sistema. Um fluxograma do programa pode ser visto abaixo, onde definimos três etapas.



Até agora tratamos de descrever a evolução livre do sistema. Seguiremos com a descrição da etapa de colisões, na qual faremos uso direto da equação de Boltzmann. Resolveremos a equação de Boltzmann por meio de um algoritmo que será descrito a seguir. Em cada célula com n partículas são montados $\frac{n(n-1)}{2}$ pares virtuais de possíveis colisões. Sendo $g_{\alpha\beta}$ o módulo da velocidade relativa entre duas partículas α e β , a probabilidade de colisão entre elas pode ser feita analisando a probabilidade de uma delas pertencer ao alcance da outra dentro de um intervalo de tempo, como mostrado abaixo. Matematicamente,



$$p_{\alpha\beta} = \frac{2d g_{\alpha\beta} \Delta t}{A^*}$$

Onde, A^* é a área efetiva (área da célula menos a área ocupada).

Dessa maneira, pares são sorteados e garantimos que uma mesma partícula nunca colidirá duas vezes no intervalo Δt .

Quando um par é sorteado, efetuamos a colisão que tem como consequência novas velocidades e perda de energia para este par, já que usualmente, para grãos, o coeficiente de restituição ϵ é menor que um.

Sendo 1 e 2 as partículas em questão, vetorialmente,

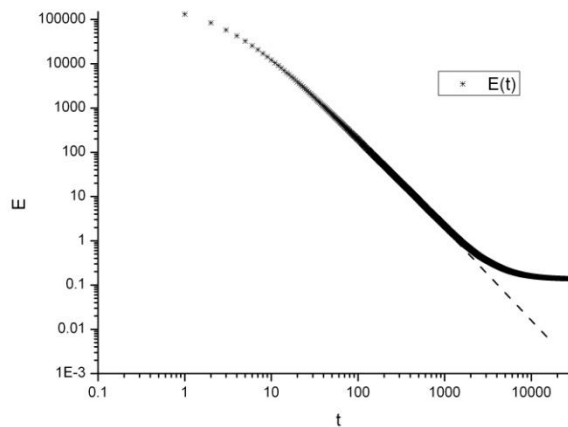
$$\vec{v}_2' = \vec{v}_2 - \frac{(1 + \epsilon)m_1}{m_1 + m_2} \hat{k} \hat{k} \cdot \vec{g}_{12}$$

$$\vec{v}_1' = \vec{v}_1 - \frac{(1 + \epsilon)m_2}{m_1 + m_2} \hat{k} \hat{k} \cdot \vec{g}_{12}$$

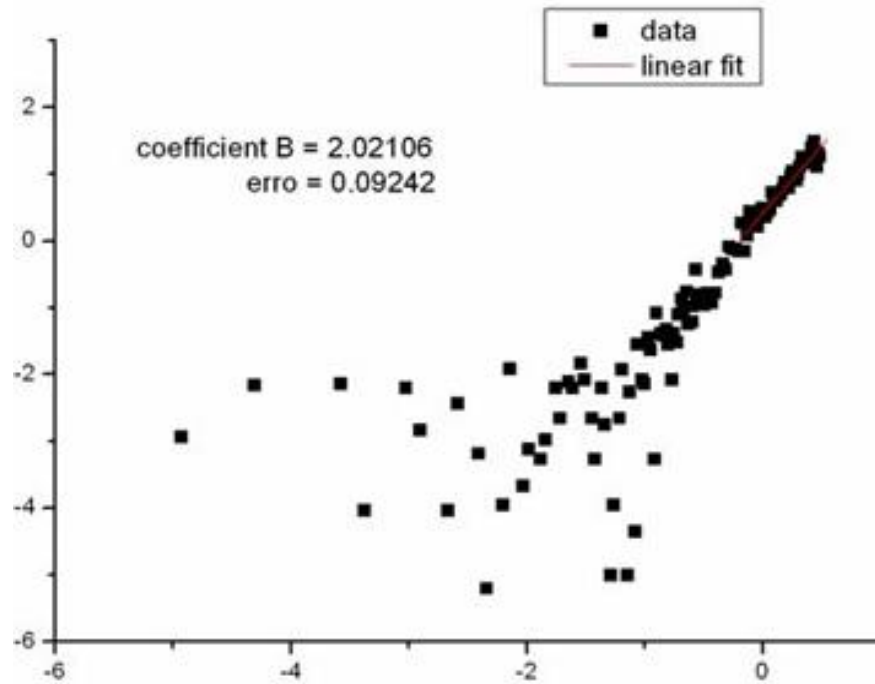
Onde \hat{k} é o vetor unitário que lida os centros de massa. No nosso caso, \hat{k} é sorteado com devido cuidado já que tem ligação direta com a velocidade relativa entre as partículas, em termos técnicos, fazemos o sorteio do parâmetro de impacto na direção da velocidade relativa.

Este desenvolvimento encerra basicamente a preparação para futuras tentativas em aprimorar este modelo. Com esta ferramenta inúmeros trabalhos foram feitos na literatura, e obtiveram enorme sucesso no estudo de sistemas granulares e na física de não equilíbrio.

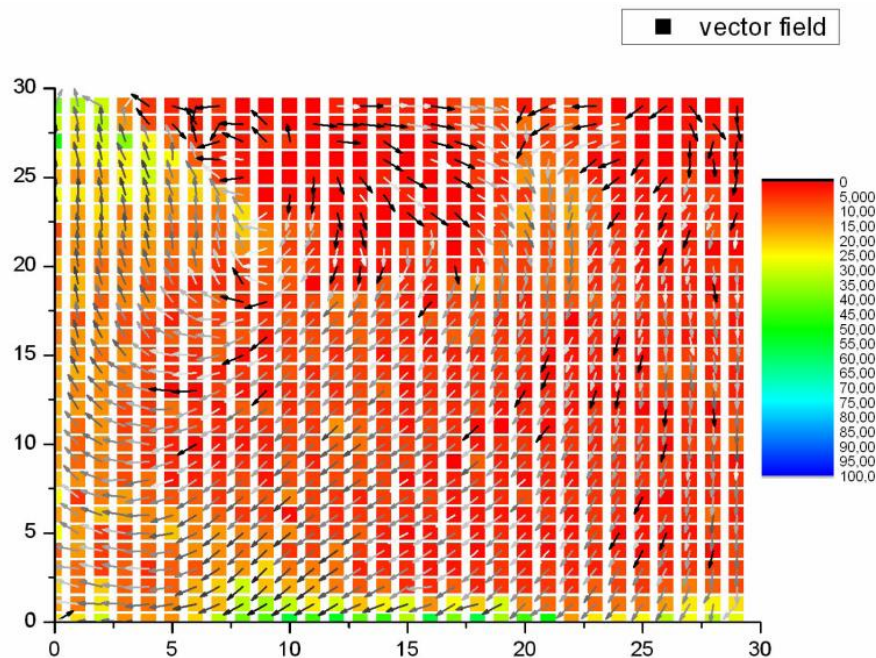
Conseguimos reproduzir importantes da literatura. O primeiro deles, mostrado a primeira vez por P.K Haff ([3] - 1983) refere ao decaimento de energia característico em um resfriamento homogêneo. No gráfico log-log abaixo vemos que sistema decai inicialmente de acordo com a linha tracejada com inclinação -2 prevista por Haff. E posteriormente um desvio desse decaimento. Este fenômeno de desvio é o primeiro passo para evidência de uma transição de fase que analisaremos mais a frente. Conseguimos obter excelentes resultados com erro numérico na terceira casa decimal.



Outro resultado extremamente relevante é a análise da distribuição de velocidades, proposta gaussiana pela distribuição de Maxwell-Boltzmann, que sofre variações de acordo com as características do sistema. Para um sistema bem distribuído, vemos que esta afirmação confere. O gráfico abaixo mostra a obtenção do expoente da distribuição ($\alpha = 2$).



Com a observação de fenômenos de auto-organização, como vortex, observamos que o sistema começa a se desviar da trajetória esperado na situação de não equilíbrio.

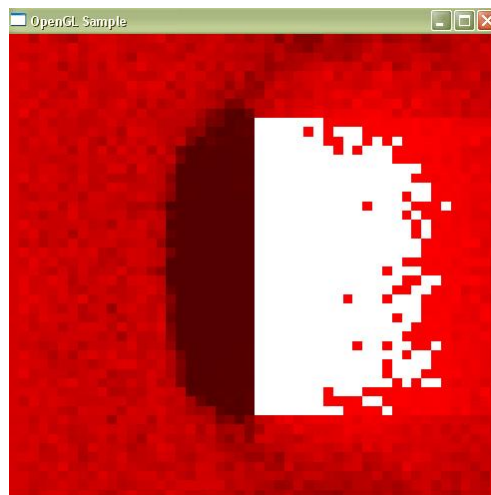
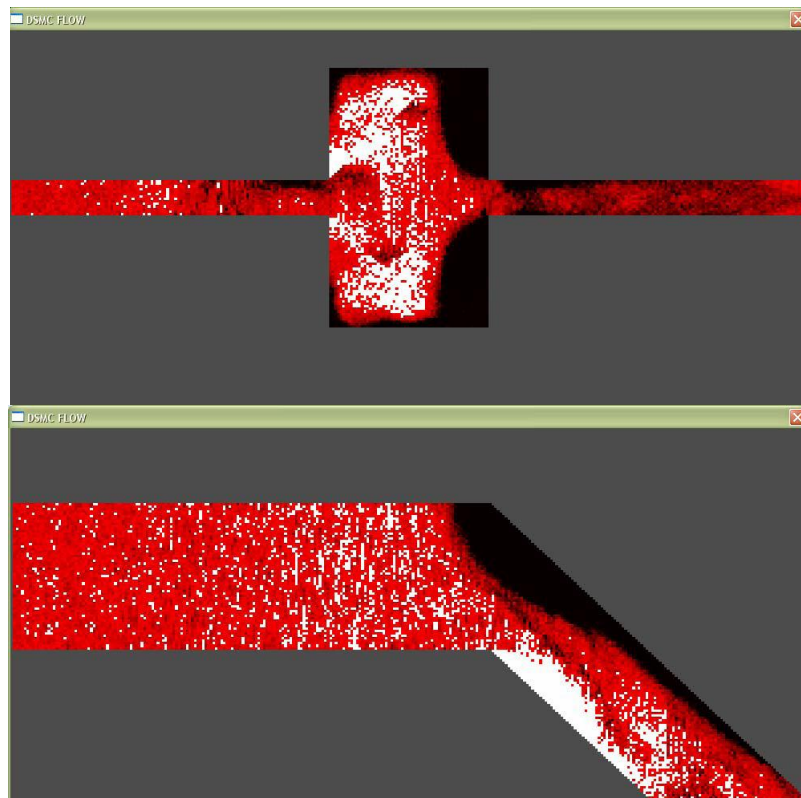


Com a intenção de reproduzir já feitos na literatura, como por Morgado e Muccionlo [1], incluímos a já mencionada etapa de alimentação de energia, que traz a possibilidade manter um sistema em estado fixo de energia, sendo possível ver o comportamento do sistema em cada estado específico e observar a existência de uma transição de fase. Entretanto,

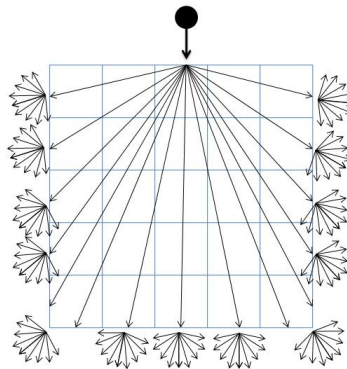
sabemos que para estados onde o sistema sofre um processo de aglomeração, por exemplo, o nosso modelo falha.

Desenvolvemos uma extensão desse modelo. De uma maneira simples, tentamos descrever a troca de momento entre uma célula cheia com um meio externo. Definimos que quando uma célula é totalmente ocupada ele se torna um cluster (aglomerado). Nessa situação as partículas possuem mesma velocidade e estão espaçadas de uma distancia ínfima. Isso nos leva diretamente a uma taxa nula de colisões já que as velocidades relativas são zero. Toda a célula tem um comportamento altamente correlacionado, fazendo todas as partículas se moverem juntas e serem um meio de propagação de momento quando atingidas.

O fenômeno de aglomeração é resultado de um gradiente de pressão para dentro da célula elevando a densidade rapidamente. Com um primeiro modelo, configuramos situações onde claramente veríamos este fenômeno. Observando o comportamento de um fluxo granular seco de alta velocidade em tubulações vemos os seguintes resultados qualitativos:



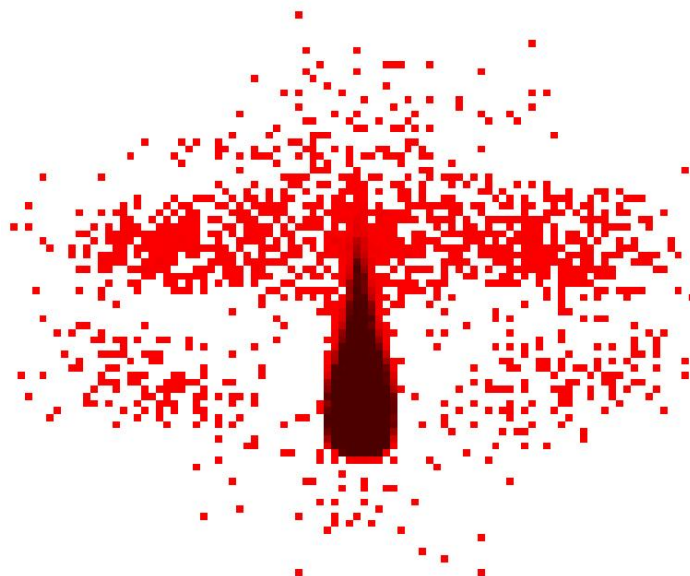
A descrição da dinâmica dos *clusters* é a parte mais importante deste estudo, por conseguir completar o campo de aplicação do modelo original. Os grãos transmitem impactos e tensões, principalmente, via arcos de força, cujas orientações são extremamente complicadas de serem previstas. Para nós, a descrição real do comportamento dos arcos é, de certa forma, incompatível com o modelo DSMC, e o meio de representá-los será feito pela analogia de casos como ondas sísmicas ([5] e [6]), com propagação radial desse momento. Entretanto, nos preocupamos em adicionar uma outra característica, a 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.



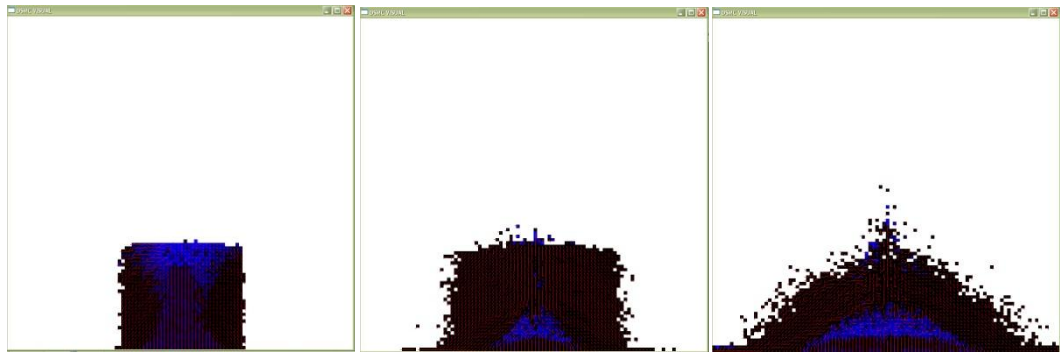
O momento passado para célula é distribuído para cada partícula em função de uma variável aleatória, que se encarrega de espalhar o momento.

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 $(-1,1)$;



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

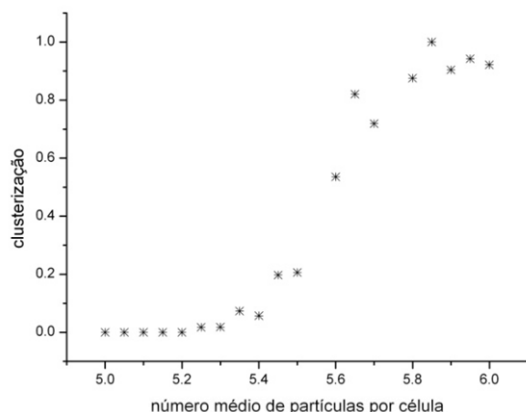
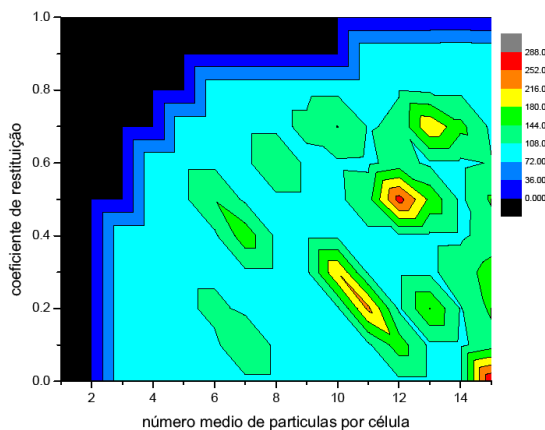


Acreditamos que nossa modelagem, apesar de extremamente simplificada, reproduz alguns resultados qualitativos relevantes.

Como descrito, o objetivo deste trabalho é entender a transição de fase de sistemas granulares, entender como é trajetória desse sistema até uma posição de equilíbrio.

Evidenciado por [1], um sistema granular bidimensional sobre a ação de paredes vibratórias apresenta um caráter transitório em função da densidade e do coeficiente de restituição, o que constitui uma proposta de um diagrama de fase. Entretanto, a transição de fase pode ocorrer de inúmeras maneiras. Focando, finalmente, no estudo dessa transição, obtivemos um diagrama quase que ilustrativo, com baixa resolução par verificar onde o sistema é gás completamente ou cluster.

A caracterização do sistema como gás é referente a sua distribuição praticamente homogeneia de densidade e, claramente como cluster, estamos nos referindo a um processo de concentração pontual dessa densidade.



Na parte escura e azul nenhuma cluster foi detectado. A região interna ao contorno azul possui instabilidades na densidade. O custo computacional para refinar este diagrama seria extremamente grande. Para corrigir este problema trataremos uma linha somente no diagrama que corte as duas regiões. Nos gráficos ao lado estão representados o diagrama e a linha fixa no eixo das ordenadas (coeficiente de restituição igual a 0.8) e variante no eixo das abscissas (número médio de partículas pro célula entre 5 e 6). Vemos claramente que a transição de fase é gradual. O parâmetro clusterização é diretamente proporcional ao número de clusters e aos respectivos tempos de vida. Ou seja, o número de clusters e/ou a estabilidade cresce suavemente durante a transição. É este resultado extremamente instigante que encerra nossos resultados.

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 melhorar os resultados, simulando durante mais tempo e mais vezes os casos para aperfeiçoar os dados e obter um idéia cada vez mais clara dos fenômenos intrigantes que envolvem o campo de estudo de sistemas granulares. Chegamos em um resultado extremamente interessante, mas cujo embasamento teórico é superficial e precisa ser aprimorado. Mostramos que a transição de fase de um sistema bidimensional sobre ação de uma alimentação de energia mecânica é suave e deve obedecer a alguma lei. O processo de clusterização, logo, tem um lei de formação de em termos de velocidade e quantidade, algo parecido com o caso de resfriamento de metais onde o meio líquido em alta temperatura começa a criar aglomerados quando a temperatura é reduzida. Nossos resultados precisam ser comparados com a literatura para terem sua validade verificada. Durante um longo período de trabalho desenvolvemos uma ferramenta capaz de simular com segurança inúmeros casos de extrema utilidade industrial na área de transporte ou de armazenamento. Isto trouxe uma compreensão ampla e detalhada sobre a física tratada. Temos a intenção de continuar este trabalho já que existem muitas perguntas a serem respondidas.

Referências

- 1 - W. A. M. Morgado e E. Mucciolo: *Numerical simulations of vibrated granular gases under realistic boundary conditions*. Physica A, v. **311**, n. 1-2, p. 150-168, 2002.
- 2 - G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon, Oxford (1994).
- 3 - P.K. Haff: Grain flow as fluid-mechanical phenomenon. J. Fluid Mech. (1983). v. **134**. pp. 401-430
- 4 - F. Rouyer e N. Menon: Physical Review Letters **85**, 3676, 2001.
- 5 - M. Muller e H. Herrmann, DSMC - A Stochastic algorithm for granular matter (1998).
- 5 - A.E.H. Love, "Some problems of geodynamics", 1911 (Chapter 11: Theory of the propagation of seismic waves)
- 6 - Viktorov, I.A. (1967) "Rayleigh and Lamb Waves: physical theory and applications", Plenum Press, New York