



PUC
RIO

PIBIC 2007-2008

Nome do Departamento: Física

Nome do(a) Aluno(a): Eduardo Henrique Filizzola Colombo

Nome do(a) Orientador(a): Welles Antonio Martinez Morgado

Título do Projeto: ESTUDO DO GÁS DE GRÃOS POR DSMC

Relatório Final:

NOME DO ORIENTADOR: Welles A. M. Morgado

NOME DO ALUNO: Eduardo Henrique Filizzola Colombo

PROJETO: ESTUDO DO GÁS DE GRÃOS POR DSMC

DEPARTAMENTO: Física

OBJETIVOS:

Objetivos da linha de pesquisa seguida por Eduardo são de estudar fluxo de grãos rápidos em tubos ou em situações com alimentação de energia. Nosso objetivo é entender aspectos importantes de física de não-equilíbrio assim como simular sistemas muito grandes de grãos em movimento rápido.

METODOLOGIA:

O método chamado DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) para estudar a evolução do sistema [2]. Neste método a evolução do sistema se faz de forma estocástica. O sistema é dividido em células de uma rede. Em cada etapa a dinâmica é dividida em partes: evolução estocástica livre (as partículas mudam, ou não, de células dependendo de sorteio); colisões entre partículas (através de sorteio é definido o número de colisões em cada célula, e estas são distribuídas entre os pares presentes em cada célula); aplicação das condições de contorno (paredes rígidas, fixas ou vibrando, fluxos de partículas contínuos via condições periódicas, etc) [1].

O Gás de Grãos (GG) tem sido estudado numérica e experimentalmente [3], especialmente em duas dimensões. Um dos métodos mais eficientes consiste em colocar algumas centenas de grãos (pequenas esferas de aço) entre duas placas verticais transparentes e fazer com que a parede inferior vibre, injetando energia no sistema. O sistema é fotografado (cerca de 2000 vezes por segundo) e cada trajetória individual pode ser seguida (a precisão é da ordem de um píxel ou menor) e as velocidades obtidas experimentalmente [3].

Nosso método de estudo permite que possamos reproduzir estes tipos de experimento de maneira mais fiel à física de

grãos que modelos anteriores que não levam em conta efeitos tais como o volume excluído [1]. Em nosso modelo levamos em conta a ocupação máxima possível para cada célula assim como a ocupação crítica para a qual o sistema se torna um aglomerado granular. Isto faz com que possamos lidar com GG em densidades mais altas do que antes atingido por modelos semelhantes.

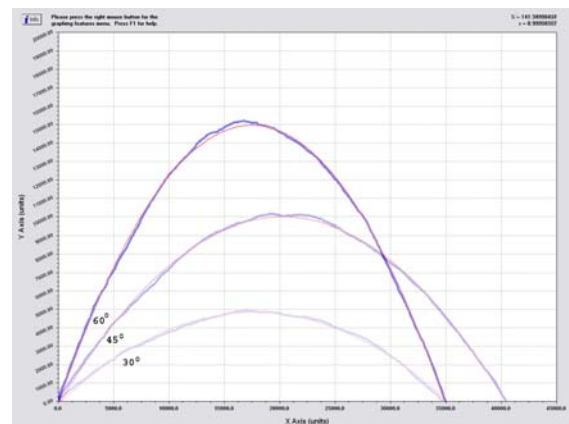
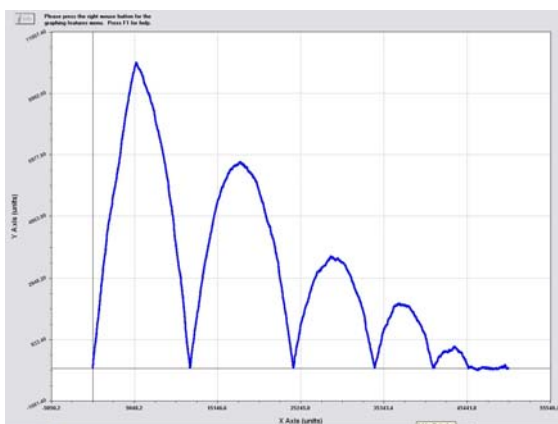
Podemos também estudar sistemas de grãos em fluxo rápido através de tubos, modelos com velocidade supersônica e com a presença de obstáculos. Uma das características mais importantes de nosso modelo é poder rodar simulações contendo centenas de milhares, e até milhões de partículas, de modo eficiente e rápido, mesmo em um "notebook".

A melhor metodologia aqui empregada será utilizada em um primeiro momento para estudar características físicas de modelos anteriores que sofriam com a instabilidade da simulação com relação a flutuações de densidade.

REALIZAÇÕES:

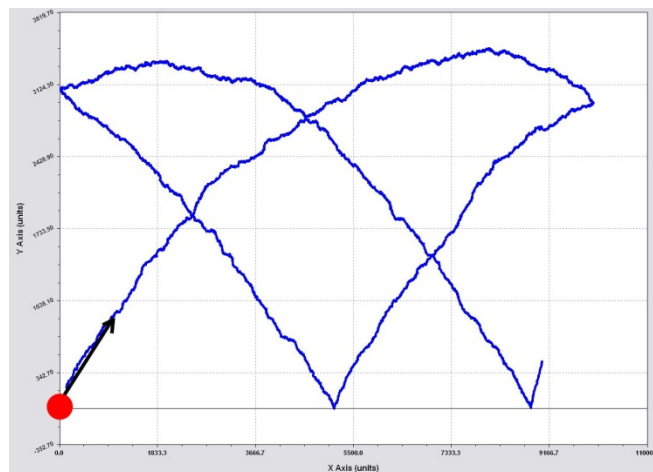
A introdução do projeto foi dedicada a uma abordagem computacional da mecânica estatística de sistemas de grãos em fluxo rápido. Antes do estudo da física do problema, a aleatoriedade do mesmo é estudada. Isto representa boa parte do que foi feito por nós até agora. As primeiras simulação foram desenvolvidas em linguagem C, simulando uma roleta. O objetivo era verificar que se o número de passos fosse grande veríamos que cada casa foi sorteada, praticamente, o mesmo número de vezes.

O conceito de um modelo estocástico aplicado ao estudo da física é então usado em situações triviais já conhecidas.

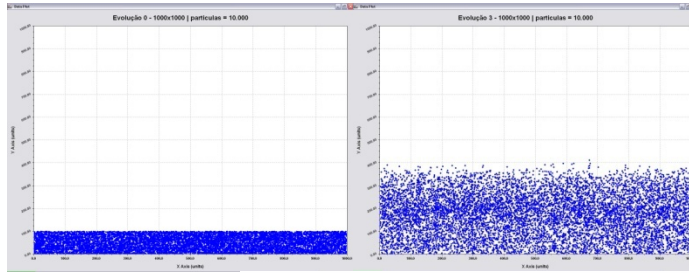


As figuras acima ilustram o primeiro contato com a física estatística e a comparação com o modelo newtoniano. Desde o início a compreensão das vantagens e desvantagens desta nova abordagem já estava sendo adquirida, possibilitando uma base para algo mais complexo.

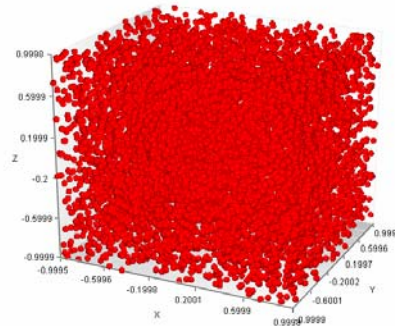
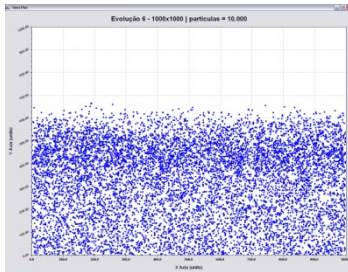
O objetivo inicial era criar uma ferramenta que possibilitasse a observação do comportamento de um gás granular. Podendo ser interpretado como um sistema de esferas rígidas, o próximo passo, lidando com uma única esfera ainda, era fazer seu confinamento em uma caixa virtual.



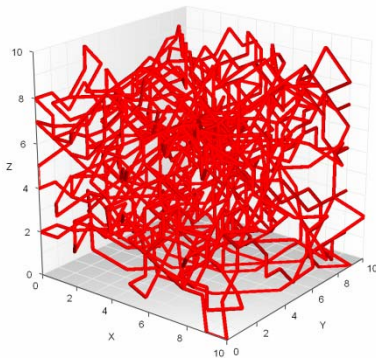
A dinâmica de uma partícula descrita por probabilidades foi estabelecida. A inclusão de mais partículas, considerando um deslocamento livre de colisões, não era difícil. O modelo já tomava forma, visualizamos distribuições de velocidades, "random walk", distribuição de partículas e tudo que ali era novo.



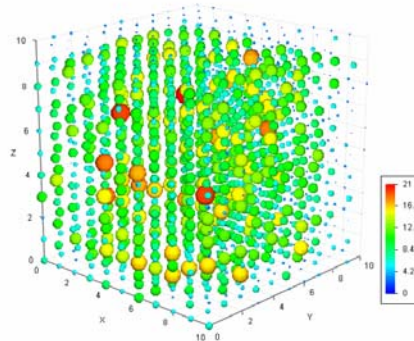
Initial Momentum distribution



Random walk

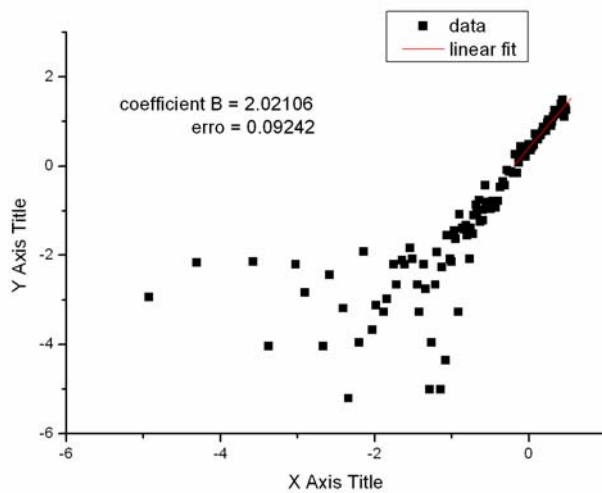
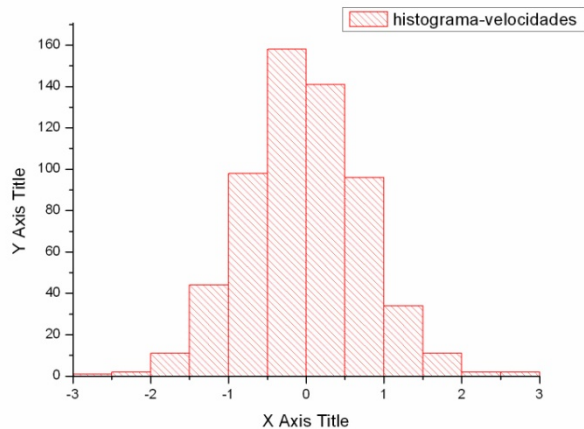


Level of Concentration per Cell



A escolha do desenvolvimento de um sistema guiado por probabilidades não foi por acaso, visava-se à construção de uma Simulação Direta de Monte Carlo (*Direct Simulation of Monte Carlo - DSMC*). Este modelo foi apresentado e discutido e seu desenvolvimento foi iniciado. Grande parte do trabalho foi realizada na inserção da fase colisões, até a presente data restam alguns pontos a serem fechados.

A verificação do modelo foi feita comprovando importantes leis que envolvem o comportamento estocástico e hidrodinâmico do sistema. A equação de Boltzmann foi a primeira etapa, a distribuição de velocidades deveria ser gaussiana, e com certas características em sua forma que variam com as especificações do sistema.



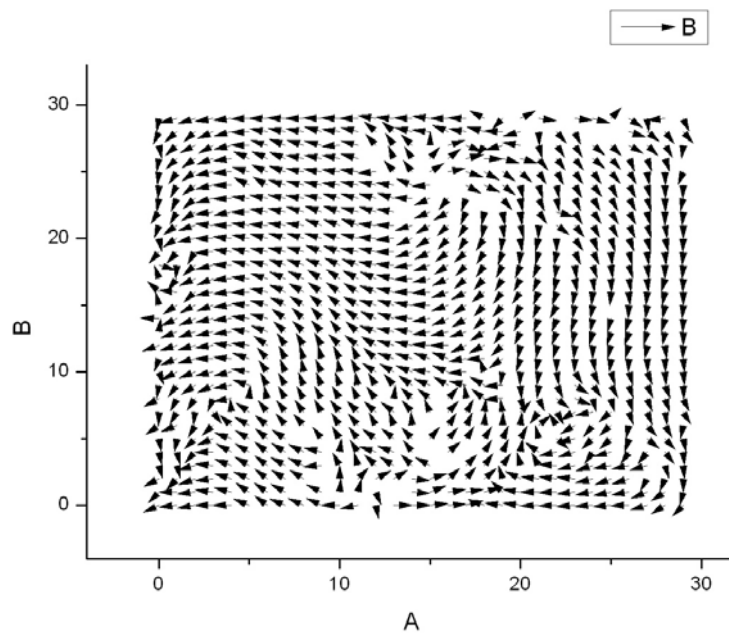
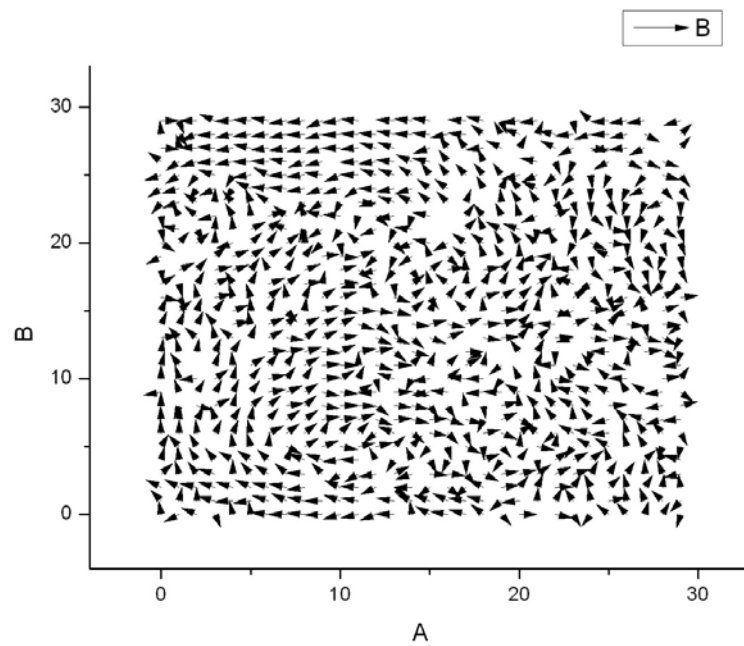
Como vemos na figura acima, a potência 2,02 é uma excelente aproximação para uma distribuição Gaussiana.

Com certa garantia que o modelo estava funcionando como planejado, buscávamos a observação de alguns fenômenos típicos de sistemas granulares, aparição de vórtices e a Lei de Haff, que seria mais uma comprovação.

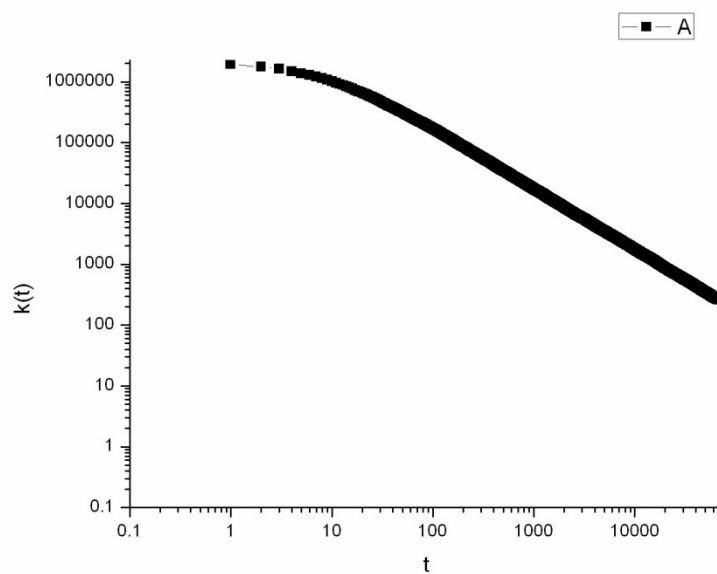
Com a facilidade de evoluir um sistema complexo por um longo período de tempo, conseguimos ver rapidamente os vórtices preditos pela teoria cinética. Estes ocorrem pois as colisões entre grãos são inelásticas, sendo que as velocidades de dois grãos após a colisão são mais colimadas

do que antes da mesma. Assim, a medida que o tempo passa e o sistema dissipa energia, as velocidades tendem a se alinhar. A conservação dos momentos linear e angular total (conservados em cada colisão e inicialmente nulos) leva ao aparecimento de vórtices e anti-vórtices.

Na s figuras abaixo, vemos como uma configuração inicialmente desordenada passa a apresentar os vórtices acima mencionados.



A lei de Haff é um ponto importantíssimo para a comprovação da validade de nosso modelo. Descrevendo o decrescimento de energia cinética média por grão (temperatura granular) de um gás granular. Resultados positivos foram obtidos, entretanto é cedo afirmar que o modelo está completo. A fase de colisão, como citado, é de extrema importância para todo decorrer de uma evolução, e devido a complexidade de sua lógica deve se ter cautela, mais teste devem ser feitos. Esta evolução leva ao decrescimento da energia como t^{-2} , como pode ser verificado no experimento numérico abaixo (energia $\sim t^{-1.99}$).

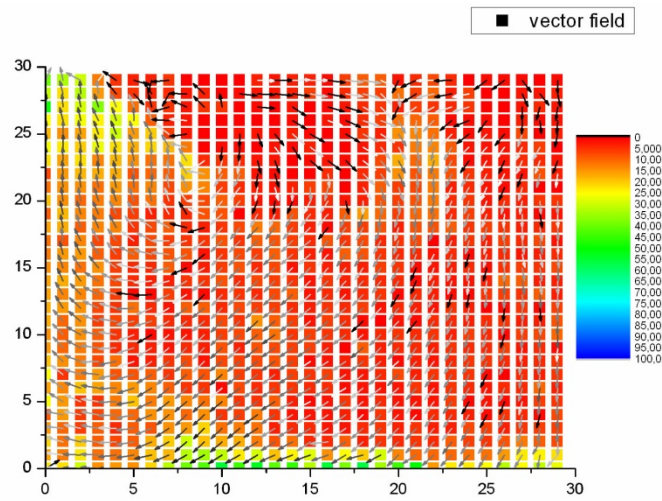


Até este ponto o gás granular é razoavelmente descrito. Entretanto, o modelo falha para altas densidades, então, decidimos incluir um transição de fase no modelo, onde criamos a fase "cluster", que tem como características: alta densidade e baixo momento - uma instabilidade do sistema que desvia dos padrões de *Haff* e *Boltzmann*. Esse desvio não foi ainda verificado e talvez pelo limite do próprio modelo não venha aparecer, mas é de extremo interesse que isso venha ser adicionado. Esta é nossa contribuição mais original para este problema.

Logo foi possível observar uma análise completa do sistema, vetores de velocidade e distribuição da concentração.

A seguir mostramos diversas aplicações para o fluxo de grãos usando nosso modelo.

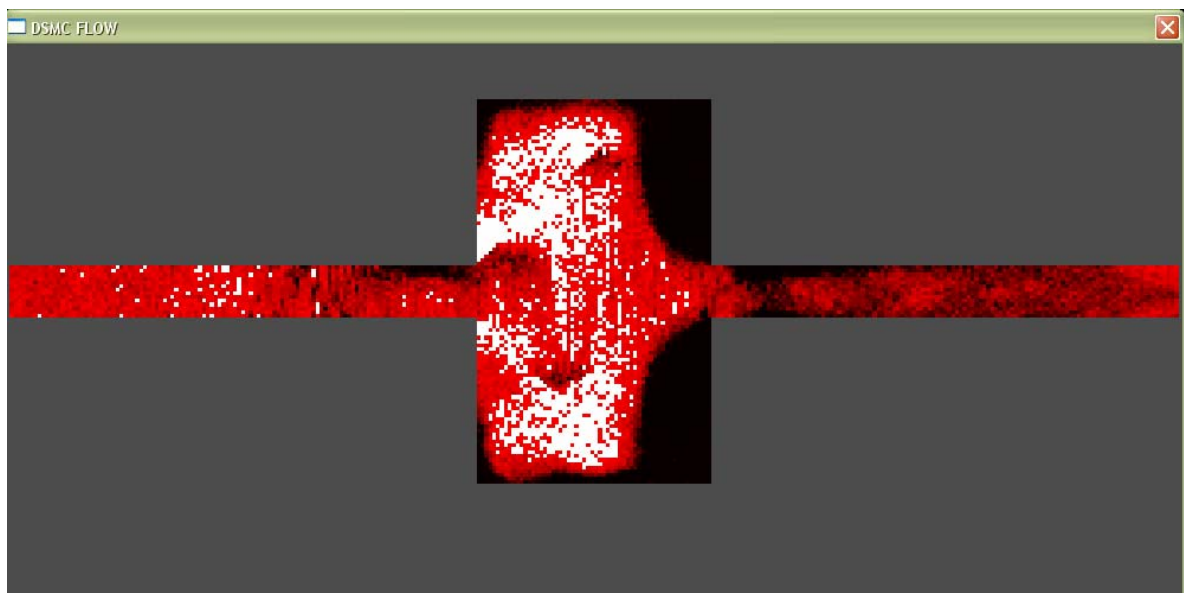
1) Gás granular 2D



2) fluxo em tubo com setor de expansão/contração

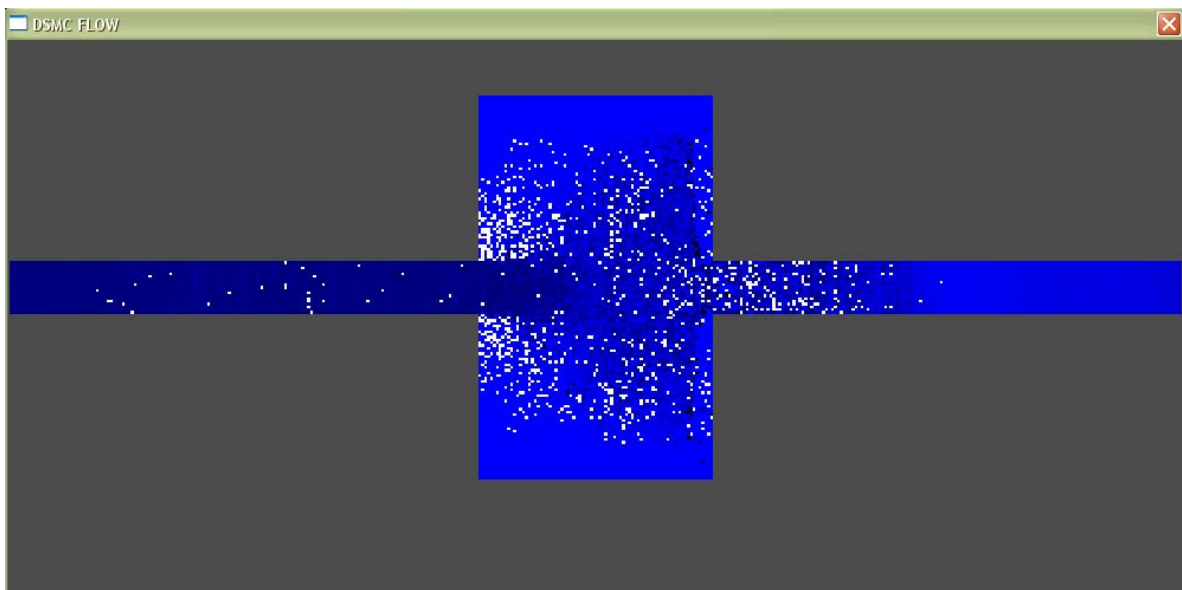
Durante o projeto trabalhou-se em uma ramificação da idéia original. Visto o potencial de aplicação prática do modelo foi desenvolvida uma versão que simula um fluxo granular em uma tubulação (2D). Algumas amostras foram tiradas e pode-se comparar com o comportamento hidrodinâmico.

Caso de baixa densidade:

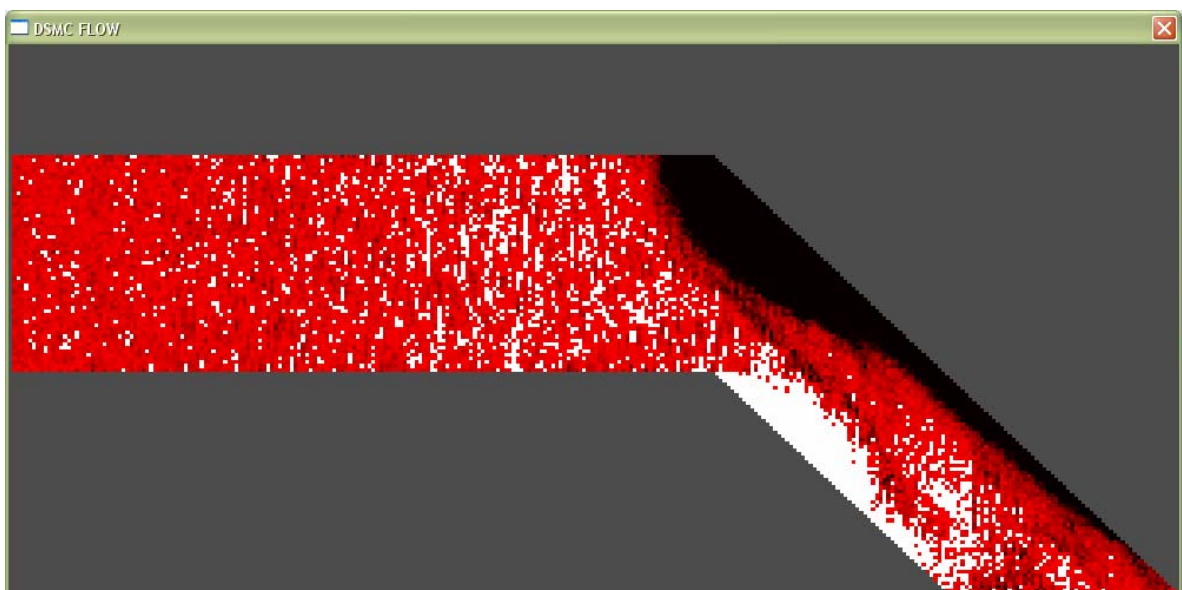


Caso de alta densidade:

Simulação rodada com 100.000 grãos em tempo real. Com a grande expansão no centro da tubulação os grãos tendem a se espalhar. Aparecem dois focos de turbulência simetricamente posicionados, observa-se então um grande resfriamento do fluxo granular indicado na figura a baixo em gradiente de azul (quanto mais claro menos energia).



3) Fluxo em "joelho"



O mesmo observa-se no caso clássico do "joelho", a angulação na tubulação dissipa energia. A taxa de colisão aumenta bastante nos truncamentos.

PERSPECTIVAS:

Nosso estudo permite reproduzir algumas das principais características do GG com baixo custo computacional. Este método permite evitar instabilidades na densidade que estão presentes em modelos anteriores.

Estamos calibrando nossas simulações para podermos obter em breve resultados quantitativamente corretos, dado que qualitativamente nosso sistema já reproduz muitos resultados da literatura, tais qual o aparecimento de aglomerados granulares e vórtices.

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*. Claredon, Oxford (1994).
- 3 - F. Rouyer e N. Menon: *Physical Review Letters* **85**, 3676, 2001.

