

ESTUDO DO GÁS DE GRÃOS POR DSMC

Aluno: Eduardo Henrique Filizzola Colombo
Orientador: Welles A. M. Morgado

Introdução

Foi feito um estudo do gás de grãos (2-d ou 3-d) utilizando a técnica do DSMC (Direct Simulation Monte Carlo). Esta técnica permite grande economia de tempo computacional com pouca perda de informação sobre o estado do sistema e tem sido empregada com sucesso no estudo deste tipo de problemas [1,2].

Variados “set-ups” foram estudados que reproduzem razoavelmente o esperado experimentalmente. Estes são importantes para uma melhor compreensão da dinâmica de grãos em movimento rápido.

Objetivos

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 á 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.

Conclusões

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.