

# 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

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.

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.

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]).

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. 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.

### Conclusão

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 - 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