

ESTUDO DO GÁS GRANULAR VIA SIMULAÇÃO DIRETA DE MONTE CARLO

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

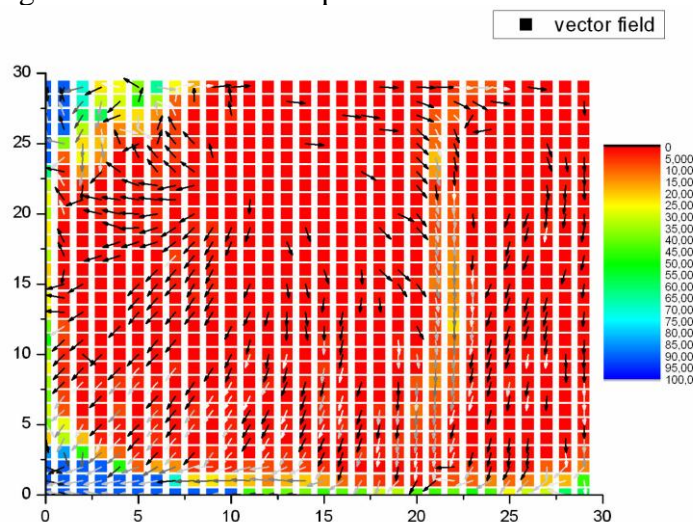
Introdução

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].

O estudo se baseou na modelagem computacional de um espaço bidimensional. Com a possibilidade de injeção de energia via paredes vibratórias conseguimos analisar o sistema em equilíbrio térmico observando seu comportamento em relação à distribuição de velocidades e de densidades do sistema em função, principalmente, do número de partículas e o coeficiente de restituição. Com esta base, podemos tentar maneiras de aperfeiçoar o modelo no ponto onde normalmente se tornaria inválido e impreciso. No DSMC, este problema ocorre em simulações de alta densidade. Aqui fazemos uma proposta de modo que o uso de uma simulação estocástica, mais eficiente computacionalmente, tenha seu campo de aplicação estendido na simulação desse tipo de problema de muitos corpos.

Objetivos

Nosso objetivo é entender aspectos importantes de física de não-equilíbrio assim como simular sistemas de muitos grãos em movimento rápido.



Metodologia

Utilizamos, assim como proposto originalmente em 1994 por G.A. Bird [2], a solução da equação de Boltzmann, a princípio para gases, para o caso de um sistema de baixa densidade de grãos, o que seria extremamente conveniente para situações de muitos corpos (100.000 – 1.000.000) em vista o número de cálculos que outras simulações como Dinâmica Molecular (MD) apresenta em problema semelhantes.

A respeito da simulação, fazemos pequena modificação em relação à modelagem, onde subdividimos o sistema em $L \times L$ células, uma interpretação via autômato celular. E, então, a evolução do sistema se faz de forma estocástica. Divido em células o sistema evolui em duas etapas; a primeira referente a evolução livre: as partículas mudam, ou não, de células dependendo de sorteio em função de suas probabilidades; e a segunda, colide pares de partículas internos a cada célula pela probabilidade calculada via equação de Boltzmann. Incluímos, como já mencionado, algumas condições de contorno especiais além das triviais pelo limite físico. Para o estudo estado do caso estacionário, modelamos paredes vibratórias nos extremos verticais da caixa bidimensional com o objetivo de injetar energia no sistema, já que este, ao contrário, do gás molecular em um aspecto geral, perde energia em suas colisões.

Entende-se claramente que existe um limite máximo de partículas dentro de uma célula. Este fato não era preocupante no caso de gases pelo fato das colisões serem completamente elásticas, o que não provocaria, como neste caso, a existência de gradiente de pressão na presença de flutuações na taxa de colisão. Para casos onde o limite da célula se torna máximo devemos lidar com a interação deste aglomerado granular em relação ao meio exterior, este fenômeno é discutido na literatura como transições de fase deste meio [3], que pode apresentar comportamento, como de um sólido, fluido, ou gás. Implementamos, então, como sugestão de modelagem para lidar com este ponto crítico do modelo, uma maneira de propagação da interação cluster-gás dentro do aglomerado.

Conclusões

O Gás de Grãos (GG) tem sido estudado numérica e experimentalmente [3], especialmente em duas dimensões. Nosso método de estudo permite que possamos reproduzir experimentos [3] 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”.

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.

Agora nosso foco é o estudo da transição de fase de um gás de grãos, verificando o limite desta transição, e o modo o qual esta ocorre.

Referências

- 1 - W. A. M. Morgado, E. R. Mucciolo, *Numerical simulation of vibrated granular gases under realistic boundary conditions* *Physica A* 311 (2002) 150.
- 2 - G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon, Oxford (1994).
- 3 - F. Rouyer e N. Menon, *Velocity Fluctuations in a Homogeneous 2D Granular Gas in Steady State*, *Physical Review Letters* 85, 3676, 2001.
- 4 - S. Ludwing, *Structure and cluster formation in granular media*, *Pramana J. Phys.*, Vol. 64