

**Italo'Ivo Lima Dias Pinto**

***Propriedades de transporte em meios granulares  
unidimensionais.***

João Pessoa

2010

**Italo'Ivo Lima Dias Pinto**

***Propriedades de transporte em meios granulares  
unidimensionais.***

Orientador:  
Alexandre da Silva Rosas

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

João Pessoa

2010

P659p      Pinto, Italo'Ivo Lima Dias.  
Propriedades de transporte em meios granulares  
unidimensionais / Italo'Ivo Lima Dias Pinto.- - João Pessoa :  
[s.n.], 2010.  
46f. : il.

Orientador: Alexandre da Silva Rosas.  
Dissertação(Mestrado) - UFPB/CCEN.

1.Física. 2.Sistemas unidimensionais. 3.Meios granulares.  
4.Propagação de pulsos. 5.Conductividade térmica.

UFPB/BC

CDU: 53(043)



Universidade Federal da Paraíba  
Centro de Ciências Exatas e da Natureza  
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

### DECLARAÇÃO

A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 25 de fevereiro de 2011, na Sala de Reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, **aprova com distinção** o Sr. **Ítalo'Ivo Lima Dias Pinto** na defesa de sua dissertação intitulada "*Propriedades de transporte em meios granulares unidimensionais*".

João Pessoa, 25 de fevereiro de 2011

Orientador:

Prof. Dr. Alexandre da Silva Rosas  
(DF/UFPB)

Co-Orientador:

NÃO HÁ

---  
(---)

1º Examinador:

Prof. Dr. Marcos Oriá  
(DF/UFPB)

2º Examinador:

Prof. Dr. Welles Morgado  
(PUC-Rio)

# *Resumo*

Estudamos dois problemas envolvendo meios granulares, o transporte de calor em gases granulares viscosos e a propagação de pulsos mecânicos em cadeias granulares de anéis toróidais. Para estudar o transporte de calor em gases granulares, consideramos dois mecanismos de dissipação viscosa durante as colisões entre grãos. No primeiro mecanismo, a força dissipativa é proporcional à velocidade do grão e dissipa não apenas energia mas também momentum. No outro, a força dissipativa é proporcional a velocidade relativa dos grãos e portanto conserva momento mesmo quando dissipa energia. Isso nos permite explorar o papel da conservação do momento nas propriedades de transporte de calor desse sistema não-linear unidimensional. Encontramos uma condutividade térmica não divergente com ou sem conservação de momento. Para o sistema onde não há conservação do momento obtemos que o fluxo de calor decresce mais rapidamente do que a perda de energia por dissipação devido aos choques inelásticos, diferente do que ocorre no sistema com momento conservado, indicando que a conservação de momento apresenta um papel relevante. Também implementamos uma aproximação de colisões binárias para estudar a propagação de pulsos em uma cadeia unidimensional de anéis toroidais (O-rings). Em particular, chegamos a resultados analíticos a partir dos quais a velocidade do pulso é obtida por quadratura simples. A velocidade do pulso assim calculada é comparada com a velocidade obtida por integração numérica das equações de movimento. Estudamos cadeias com e sem precompressão, cadeias precomprimidas por uma força constante nas duas extremidades, (precompressão constante) e cadeias precomprimidas pela gravidade (precompressão variável). A aplicação da aproximação de colisões binárias para cadeias precomprimidas nos dá uma importante generalização de uma teoria que até então só havia sido desenvolvida para cadeias sem precompressão, ou seja, para cadeias em vácuo sônico. As velocidades calculadas usando a aproximação de colisões binárias apresentaram uma boa concordância com os resultados obtidos a partir das simulações numéricas, com erros relativos inferiores a 8%.

Palavras chaves: sistemas unidimensionais, meios granulares, condutividade térmica, propagação de pulsos, aproximação de colisões binárias.

# *Abstract*

We study two problems involving granular media, the heat transport in viscous granular gases and the mechanical pulse propagation in a granular chains of toroidal ring. To study the heat transport in granular gases, we consider two mechanisms of viscous dissipation during collisions between grains. In the first mechanism, the dissipative force is proportional to the speed of the grain and dissipates not only energy but also momentum. On the other hand, the dissipative force is proportional to the relative velocity of grains and therefore conserves momentum when it dissipates energy. This allows us to explore the role of the conservation of momentum in the heat transport properties of one-dimensional nonlinear systems. We found a thermal conductivity not divergent with or without conservation of momentum. For the system where there is conservation of momentum we obtain the heat flux decreases faster than the energy loss by inelastic dissipation due to shocks, unlike what happens with the momentum conserving system, indicating that the conservation of momentum has a role relevant. We also implemented an approximation of binary collisions to study the propagation of pulses in a one-dimensional chain of O-rings. In particular, we get the analytical results from which the pulse velocity is obtained by simple quadrature. The pulse velocity thus calculated is compared with the velocity obtained by numerical integration of the equations of motion. We study chains with and without precompression, chains precompressed by a constant force at both ends (constant precompression), chains precompressed by gravity (variable precompression). The application of binary collisions approximation for precompressed chains gives us an important generalization of a theory, which until then had been developed for chains without precompression, in other words sonic vacuum state. The velocities calculated using the approximation of binary collisions showed a good agreement with the results obtained from numerical simulations, with relative errors lesser than 8%.

Key-words: unidimensional systems, granular media, heat conductivity, pulse propagation, binary collisions approximation.

# *Sumário*

|          |                                                                                            |       |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>                                                                          | p. 7  |
| <b>2</b> | <b>Fundamentação Teórica</b>                                                               | p. 12 |
| 2.1      | Transporte de calor em gases granulares unidimensionais viscosos. . . . .                  | p. 12 |
| 2.1.1    | Modelo de gás granular utilizado. . . . .                                                  | p. 14 |
| 2.1.2    | Modelo do banho térmico utilizado na simulação. . . . .                                    | p. 20 |
| 2.2      | Propagação de pulsos não-lineares em uma cadeia unidimensional de anéis toroidais. . . . . | p. 22 |
| 2.2.1    | Modelo de simulação para cadeia granular unidimensional de anéis toroidais. . . . .        | p. 23 |
| 2.2.2    | Método preditor-corretor de Gears para solução de equações diferenciais. . . . .           | p. 24 |
| 2.2.3    | Aproximação binária com e sem precompressão para uma cadeia de anéis toroidais. . . . .    | p. 25 |
| <b>3</b> | <b>Resultados</b>                                                                          | p. 28 |
| 3.1      | Transporte de calor em gases granulares unidimensionais viscosos. . . . .                  | p. 28 |
| 3.2      | Propagação de pulsos não-lineares em uma cadeia unidimensional de anéis toroidais. . . . . | p. 36 |
| <b>4</b> | <b>Conclusões e Perspectivas</b>                                                           | p. 43 |
|          | <b>Referências Bibliográficas</b>                                                          | p. 46 |

# 1 *Introdução*

Os meios granulares são de fundamental importância no contexto industrial e geofísico. São várias as aplicações industriais de materiais granulares nas áreas de produção de alimentos, medicamentos, agroindústria, construção, entre muitas outras aplicações [1]. Quanto a processos geológicos os meios granulares são importantes no que diz respeito a deslizamentos de terra, erosão e em maior escala no deslocamento de placas tectônicas [2, 3, 4]. Em pesquisas realizadas, estima-se que cerca de 40% da capacidade de algumas de nossas instalações industriais é desperdiçada devido a problemas relacionados com o transporte de grãos [5, 6]. Em geral o transporte de materiais granulares em indústrias é realizado utilizando esteiras, esteiras com pás ou transporte de grãos através de leito fluidizado, processo através do qual é utilizado um fluxo de ar para tornar fluido o material a ser transportado e dessa forma facilitar o seu transporte [1].

Diante da grande importância tecnológica dos meios granulares o interesse por modelos que descrevam o comportamento dos grãos possui uma longa história com uma extensa literatura de engenharia dedicada ao assunto. Podemos citar contribuições de alguns nomes notáveis na área como: Coulomb (1773) em seus estudos e pesquisas propôs as ideias de atrito estático [7], Faraday (1831) descobriu a instabilidade convectiva em grãos sob efeito de vibração [8] e, Reynolds (1885) introduziu a ideia de dilatância, onde um meio granular deve expandir ao estar sujeito a qualquer cisalhamento [9]. Nas últimas duas décadas houve a retomada de interesse por estudos nessa área por vários físicos e alguns tópicos específicos destes estudos serão discutidos ao longo do presente trabalho.

Uma das características dos meios granulares que despertam a curiosidade, é o fato de que meios granulares podem apresentar propriedades de fluidos, gases ou sólidos. Uma pilha de areia com inclinação menor que o ângulo de repouso, apresenta características de um sólido, o material permanece em repouso mesmo sujeito a tensões em sua superfície. Se a pilha de grãos for inclinada com ângulo maior que o ângulo de repouso os grãos superficiais vão fluir. Esse fluxo é diferente do fluxo de um fluido comum no sentido de que apenas as camadas superficiais vão escoar, enquanto o centro da pilha vai permanecer em repouso [3].

Há vários modelos teóricos que tentam descrever fluxos de meios granulares. Estes modelos são tratados pela hidrodinâmica granular. Nestes modelos em geral o meio granular é tratado como um meio contínuo, que resulta em equações diferenciais semelhantes a equação de Navier-Stokes [3]. Podemos destacar duas características importantes dos sistemas granulares, a primeira é que a temperatura tem pouca influência nos meios granulares; e a segunda característica é que o sistema pode apresentar interação dissipativa devido ao atrito entre os grãos bem como choques inelásticos entre eles [3]. Contudo, em meios granulares sujeitos a vibração ocorre uma fluidização do meio. Os grãos adquirem velocidades e o meio se comporta como uma espécie de gás, ou seja, apresentam comportamentos típicos de gases. Nesse estado é possível definir uma espécie de “temperatura granular” baseada nas velocidades dos grãos sob agitação em analogia a temperatura de gases reais [3, 4, 11]. Porém devido à natureza inelástica das colisões surgem resultados bastante diferentes da termodinâmica e hidrodinâmica clássicas [3]. Recentemente D’Anna mostrou que um meio granular fluidizado através de vibração, se comporta como um banho “térmico” que satisfaz uma relação de flutuação-dissipação, e determinou experimentalmente a viscosidade granular e temperatura granular de um sistema granular fluidizado através das vibrações da base sobre a qual o sistema estava colocado [10].

Um dos efeitos observados em meios granulares devido a fluidização é o chamado efeito castanha do Pará: Os grãos de tamanhos maiores sobe para a superfície do meio fluidizado devido agitação, esse efeito ocorre independente da densidade do grão maior [3]. Outro interessante fenômeno, porém de natureza estática, ocorre quando um recipiente cheio de grãos apresenta uma pressão no centro do fundo do recipiente independente da altura da coluna de grãos, esse fenômeno ocorre a partir de uma determinada altura devido a redistribuição da força peso para as paredes do recipiente [3]. Esses fenômenos ocorrem devido a redistribuição de forças causadas pelas interações de contato que ocorrem entre os grãos.

A geometria dos grãos, forma de contato entre eles e a distribuição espacial determina o potencial de interação entre dois ou mais grãos. Na modelagem dessas interações são geralmente introduzidos apenas termos não-lineares da compressão, que podemos definir como a distância em que os centros geométricos dos grãos se aproximam a partir da posição em que estão apenas se tocando, como mostrado na figura 1.1 [12]. Além dos termos do potencial serem não-lineares, a interação só ocorre durante o contato dos grãos, essa discretização do meio é outra fonte de não-linearidade do problema. Como geralmente o potencial de interação não apresenta termo linear muitos autores se referem a essas interações exclusivamente não-lineares como uma interação fortemente não-linear. Devido a não linearidade desses problemas o tratamento analítico se torna bastante complicado, sendo predominantemente baseado em aproximações suportadas por resultados experimentais e simulações computacionais.

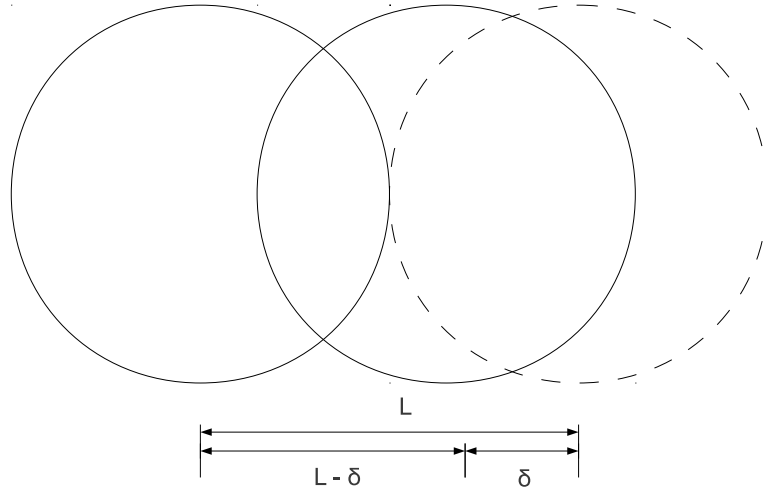


Figura 1.1: Dois grãos esféricos se comprimindo em linhas sólidas, a distância entre o centro de cada grão é  $L - \delta$ , em linhas tracejadas estão apresentadas as posições onde os grãos estão apenas em contato com distância  $L$  entre os centros,  $\delta$  é a compressão entre eles.

A dificuldade do tratamento analítico dos sistemas granulares se deve em parte a não linearidade das equações de movimento introduzidas pelo potencial de interação. Como exemplo podemos destacar que para grãos esféricos a interação ocorre através do potencial de Hertz ( $V = A\delta^{5/2}$ ), onde  $\delta$  é a compressão entre os grãos e  $A$  é uma constante que depende das propriedades do material do qual os grãos são compostos e apresenta a seguinte forma,  $A = \frac{\sqrt{2R}}{3} \frac{E_s}{1 - \nu_s^2}$ , onde  $R$  é o raio dos grãos,  $E_s$  é o módulo de Young (que determina a rigidez do material e é obtido pela razão entre a tensão a qual o material está submetido e a deformação sofrida) e  $\nu_s$  é a razão de Poisson (que é dada pela razão entre a deformação do sólido na direção transversal ao sentido de aplicação da força e a deformação na direção do sentido de aplicação da força). Esse potencial pode ser obtido levando-se em consideração a deformação elástica dos grãos [12]. Recentemente o potencial  $V = A\delta^{5/2} + B\delta^7$  foi estudado [13, 14]. Esse potencial foi determinado a partir de observações experimentais, para o caso em que anéis toroidais (O-rings) são usados como molas não lineares [13]. Esse tipo de potencial contém um termo dominante ( $\delta^{5/2}$ ) para pequenas compressões e o outro termo ( $\delta^7$ ) dominando no regime de altas compressões.

Um dos problemas por nós tratados (durante o nosso programa de mestrado) foi o desenvolvimento de uma aproximação binária para uma cadeia unidimensional de anéis toroidais [14]. A utilização da aproximação binária para o estudo da propagação de ondas em cadeias granulares foi introduzida por Rosas et al. em [15], e desde então, essa aproximação vem sendo utilizada para descrever ondas solitárias de pequena amplitude viajando em vários tipos de cadeias granulares unidimensionais [14, 15, 16, 17, 18].

A importância do estudo de cadeias granulares unidimensionais advém do fato de que em sistemas granulares tridimensionais as tensões entre os grãos (sejam devido ao peso dos próprios grãos ou algum outro agente externo provocando compressão) se concentram em cadeias de grãos unidimensionais chamadas “dedos de forças” [19]. Essas estruturas assumem um papel importante na configuração do sistema sustentando os grãos de camadas superiores e redistribuindo as forças de compressão para outras regiões do sistema. Esse mecanismo de redistribuição de forças dá origem ao fenômeno em que, a partir de uma determinada altura de uma coluna de grãos em repouso em um recipiente, a pressão em uma região no fundo do recipiente não depende da altura da coluna de grãos acima dessa região. Nesse caso a força peso dos grãos da parte superior da coluna é redistribuída para as paredes do recipiente [3].

Devido a essa distribuição de tensões em cadeias unidimensionais, a propagação de pulsos em cadeias granulares se torna um problema muito importante para entender a dinâmica de sistemas granulares tridimensionais. Um impacto em uma das extremidades de uma cadeia granular unidimensional vai dar origem a uma onda mecânica que vai se propagar através da cadeia por compressão dos grãos, essa onda vai ser profundamente modificada pelas condições da cadeia e pelo modo como ela foi produzida [20]. Nosso objetivo é estudar a propagação dessas ondas através de uma abordagem analítica. Para isso podemos destacar duas abordagens opostas para tratar o fenômeno da propagação de pulsos em cadeias granulares. Uma delas é a aproximação contínua onde a cadeia granular é tratada como um meio contínuo [19] e através de tratamento analítico é possível descrever um sóliton viajando ao longo da cadeia. A outra abordagem se trata da aproximação de choques binários, onde se considera que o pulso se propaga através de choques entre dois grãos de cada vez [15]. Nesse trabalho usaremos a aproximação binária, com essa aproximação pode-se estimar a velocidade de propagação do pulso na cadeia e portanto o tempo de residência do pulso em cada grão. O entendimento da propagação de ondas em meios granulares é a chave para o desenvolvimento de novos mecanismos para absorção de choques, formas de detecção de objetos enterrados e o mecanismo que dá origem a fluidização de sistemas granulares sujeitos a vibrações [21].

Já mencionamos que os meios granulares ora se apresentam com o comportamento semelhante a gases, ora se apresentam com comportamento semelhante a sólidos. Quando sujeitos a agitação mecânica os meios granulares apresentam um certo grau de fluidização, seja na superfície ou em todo o meio, gerando um estado fluido diluído chamado gás granular diluído [22, 23, 24]. Devido a essa curiosa propriedade de fluidização dos materiais granulares, surgiram vários estudos sobre gases granulares. Em [24] foi obtido através de simulações numéricas que um sistema de gás granular viscoso (não apresentando conservação de energia e momento linear) com condição periódica de contorno (os grãos estão confinados em um círculo) apre-

senta uma distribuição de velocidades simétrica, apresentando dois picos bem definidos com baixa probabilidade de grãos com velocidade nula. Também foi mostrado que em um modelo semelhante, onde não é considerada a distribuição espacial dos grãos, a distribuição de velocidades também apresenta os dois picos, mas com algumas diferenças qualitativas da distribuição obtida levando em conta a distribuição espacial dos grãos. Isto indica que a não conservação de energia e momento linear em um sistema unidimensional de gases granulares implica em baixas probabilidades de grãos com baixa velocidade, diferente da distribuição de probabilidade de Maxwell-Boltzmann que é obtida para um gás clássico, onde não há dissipação de energia, nem interação entre as partículas. Através de simulações numéricas foi visto que em um modelo de um gás granular unidimensional apresentando choques inelásticos com conservação de momento entre dois banhos térmicos, há uma tendência a formação de aglomerados que crescem com o tempo e se movimentam ao longo do sistema de forma aleatória, semelhante ao problema do andarilho aleatório, até se chocar com uma das paredes térmicas que limitam o sistema [25]. Também é observado o transporte de calor anômalo em sistemas semelhantes, onde o fluxo de calor não obedece a lei de Fourier, apresentando uma condutividade térmica que depende do comprimento do sistema [11]. Esse fluxo de calor anômalo se deve a não conservação de energia e é observado independente da conservação do momento linear, porém a condutividade térmica não diverge como foi observado em outros sistemas unidimensionais que apresentam a condutividade térmica dependente do comprimento [11, 26, 27, 28].

## 2 *Fundamentação Teórica*

Nesta pesquisa estudamos dois tipos de fenômenos de transporte em meios granulares unidimensionais, primeiramente estudamos o transporte de calor em um gás granular unidimensional diluído. Esse estudo foi motivado pela observação de fenômenos anômalos no transporte de calor em sistemas unidimensionais não conservativos. Nossa principal preocupação foi investigar o papel da conservação do momentum no transporte de calor em sistemas unidimensionais. Para tanto comparamos os resultados que obtivemos utilizando modelos de gases granulares unidimensionais dissipativos (não conservam energia) em duas situações: com conservação de momentum e sem a conservação de momentum. Na próxima seção (2.1) os modelos usados na simulação são discutidos em detalhes. Na seção 3.1 são discutidos os resultados obtidos.

O segundo fenômeno tratado foi a propagação de pulsos em cadeias granulares unidimensionais onde utilizamos o potencial de dupla lei de potências. Esse potencial foi obtido empiricamente por Nesterenko [13], em cadeias granulares onde anéis toróidais são utilizados como molas não lineares. Aplicamos uma generalização da aproximação de colisões binárias [15], em sistemas sujeitos a precompressão. Note-se que até então tal aproximação só era aplicada a sistemas sem compressão inicial, ou seja, no estado de vácuo sônico. Os resultados que obtivemos com a aproximação de colisões binárias foram comparados com resultados que obtivemos através de simulação usando técnicas de dinâmica molecular [14]. Detalhes sobre o modelo da simulação e sobre a aplicação da aproximação de colisões binárias estão apresentados na seção 2.2 e os resultados obtidos estão apresentados na seção 3.2.

### 2.1 Transporte de calor em gases granulares unidimensionais viscosos.

Para sólidos contínuos tridimensionais podemos calcular o fluxo de calor  $\vec{J}(\vec{r}, t)$  através da lei de Fourier, que estabelece que o fluxo de calor entre dois pontos  $(x_1, x_2)$  de temperaturas  $T_2$  e  $T_1$  é proporcional ao gradiente da temperatura, então,

$$\vec{J} = -\kappa \vec{\nabla} T \quad (2.1)$$

onde  $\kappa$  é a condutividade térmica. Em sistemas tridimensionais  $\kappa$  normalmente não apresenta dependência temporal nem com o volume do sistema. Para o caso unidimensional é esperado que a lei de Fourier assuma a forma  $J(x,t) = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}$ . Porém é observado em vários modelos de sistemas unidimensionais que a condutividade térmica cresce com o tamanho do sistema  $\kappa \sim x^\alpha$ , onde  $\alpha$  varia de 0,32 a 0,44 [26]. Em [27] é mostrado analiticamente que para redes clássicas unidimensionais com potenciais de interação que dependem apenas das coordenadas das posições dos corpos vizinhos, e sistemas com pressão não nula no limite termodinâmico, implica em uma condutividade térmica  $\kappa$  divergente. Para fluidos unidimensionais com ruído térmico, e com conservação do momentum o fluxo de calor depende do comprimento do sistema  $L$  na forma  $j = (\delta T)/L^{2/3}$ , como mostrado em [28].

Um modelo de choques inelásticos entre grãos pode ser formulado através da utilização de um coeficiente de restituição como introduzido em [25] e [22]. Porém, nas nossas simulações, a dissipação foi introduzida através de um termo viscoso nas equações de movimento durante a colisão de dois grãos. Utilizamos dois modelos. O primeiro onde a força viscosa depende da velocidade relativa entre os grãos. Nesse tipo de colisão a energia é dissipada porém o momentum é conservado. No segundo modelo a força viscosa depende da velocidade dos grãos em relação ao meio onde estão inseridos, dessa forma tem-se dissipação do momentum e da energia. Assim pudemos obter um modelo onde não é apresentada a conservação do momentum. Os modelos onde a dissipação de energia se dá através do uso do coeficiente de restituição conservam momentum. De fato, para o modelo que utilizamos onde é conservado o momentum, podemos obter o coeficiente de restituição como função da viscosidade. Isso é possível para o caso específico do potencial harmônico como será discutido posteriormente. Para outros tipos de potenciais como o potencial de Hertz e o potencial de dupla lei de potências, o coeficiente de restituição depende da velocidade relativa dos grãos. Nosso modelo assume também gás granular diluído, dessa forma todas as colisões ocorrem de forma binária, não havendo portanto a interação simultânea de 3 ou mais grãos.

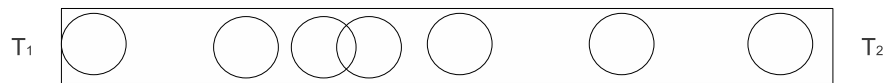


Figura 2.1: Sistema de gás granular unidimensional entre dois banhos térmicos.

Nosso modelo considera uma configuração onde o gás granular está confinado em uma caixa unidimensional e suas extremidades estão em contato com banhos térmicos a diferentes temperaturas como mostrado na figura 2.1. A diferença de temperatura entre as extremidades do sistema vai induzir um fluxo de calor através do gás, nosso interesse é estudar o comportamento desse transporte de calor em dois modelos de gases granulares distintos, um deles apresentando conservação de momentum enquanto o outro não conserva momentum. Após o choque com as paredes térmicas, os grãos retornam com uma velocidade sorteada a partir de uma distribuição de probabilidade que será apresentada mais adiante na subseção 2.1.2. Nas simulações consideramos que o gás granular é diluído, sendo assim só ocorrem colisões entre pares de grãos, não ocorrendo colisões entre 3 ou mais grãos. Nas subseções seguintes apresentamos os dois modelos utilizados de interação entre grãos (seção 2.1.1) no gás granular e o modelo utilizado para simular paredes térmicas (seção 2.1.2).

### 2.1.1 Modelo de gás granular utilizado.

Utilizamos nas simulações numéricas dois modelos de gases granulares, onde a diferença entre eles se dá na forma em que a energia é dissipada. Pelas colisões inelásticas, o caso em que a dissipação é proporcional a velocidade relativa dos dois grãos e; no outro modelo a dissipação é proporcional a velocidade absoluta dos grãos. De modo geral o potencial de interação entre dois grãos durante o choque é dado por uma lei de potências da compressão  $\delta_{k,k+1} = y_{k+1} - y_k$  [12]:

$$\begin{aligned} V(\delta_{k,k+1}) &= \frac{a}{n} |\delta_{k,k+1}|^n, & \delta \leq 0 \\ V(\delta_{k,k+1}) &= 0, & \delta \geq 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde  $y_k$  é o deslocamento do centro de massa do grão  $k$  a partir do ponto de contato com seus vizinhos sem precompressão. O termo  $a$  é um fator que depende do módulo de Young, da razão de Poisson e do raio de curvatura principal da superfície no ponto de contato. O expoente  $n$  depende da geometria do grão. Por exemplo para grãos esféricos  $n = 5/2$ , para grãos cilíndricos  $n = 2$ . Por simplicidade estudamos apenas o caso harmônico ( $n = 2$ ) onde as equações de movimento durante o choque entre dois grãos são integráveis, para outros valores de  $n$  as equações de movimento serão não-lineares e geralmente sem solução analítica.

Nesse trabalho, consideramos o caso de grãos cilíndricos. Logo, considerando a dissipação

dependendo da velocidade relativa, as equações de movimento são:

$$\begin{aligned} m\ddot{y}_1 &= [-\tilde{\gamma}(\dot{y}_1 - \dot{y}_2) - a(y_1 - y_2)]\theta(y_1 - y_2), \\ m\ddot{y}_2 &= [\tilde{\gamma}(\dot{y}_1 + \dot{y}_2) - a(y_1 - y_2)]\theta(y_1 - y_2) \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde  $m$  é a massa do grão,  $\tilde{\gamma}$  é o termo viscoso responsável pela dissipação durante o choque entre os grãos e  $\theta$  é a função degrau de Heaviside que garante que a interação só ocorre durante o contato entre os grãos além [2].

Para facilitar manipulações algébricas podemos usar as seguintes transformações para variáveis adimensionais:

$$y_k = \left(\frac{mv_0^2}{a}\right)^{1/n} x_k, \quad \tau = \frac{1}{v_0} \left(\frac{mv_0^2}{a}\right)^{1/n} t, \quad \gamma = \frac{\tilde{\gamma}}{mv_0} \left(\frac{mv_0^2}{a}\right)^{1/n}. \quad (2.4)$$

Nesse caso  $v_0$  é uma velocidade arbitrária, as outras velocidades podem ser expressas em função de  $v_0$ . Com essa mudança de variáveis, reescrevemos as equações de movimento na forma:

$$\begin{aligned} \ddot{x}_1 &= [-\gamma(\dot{x}_1 - \dot{x}_2) - (x_1 - x_2)]\theta(x_1 - x_2), \\ \ddot{x}_2 &= [\gamma(\dot{x}_1 - \dot{x}_2) + (x_1 - x_2)]\theta(x_1 - x_2), \end{aligned} \quad (2.5)$$

as equações de movimento escritas nesse formato facilitam o estudo do problema por reduzir o número de parâmetros do problema para apenas o parâmetro  $\gamma$  que é uma combinação dos parâmetros nas variáveis originais ( $\tilde{\gamma}$ ,  $m$  e  $a$ ). Partindo dessas equações de movimento sabendo as velocidades iniciais  $v_1$  e  $v_2$  dos grãos 1 e 2 podemos obter as novas velocidades  $u_1$  e  $u_2$  após a colisão:

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{1}{2}[1 - e^{-\gamma t_0}]v_1 + \frac{1}{2}[1 + e^{-\gamma t_0}]v_2, \\ u_2 &= \frac{1}{2}[1 + e^{-\gamma t_0}]v_1 + \frac{1}{2}[1 - e^{-\gamma t_0}]v_2, \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde  $t_0 = \frac{\pi}{\sqrt{2 - \gamma^2}}$  é o tempo de colisão entre os dois grãos. É interessante notar que partindo das equações (2.5) utilizando a segunda lei de Newton para o centro de massa temos,  $\ddot{x}_1 + \ddot{x}_2 = \frac{dp}{dt} = 0$  e portanto o momentum do centro de massa é conservado. Podemos também obter esse resultado através da soma das equações (2.6), dessa forma temos  $u_1 + u_2 = v_1 + v_2$ , portanto dessa forma também mostramos que o momentum do centro de massa é conservado.

No outro modelo que utilizamos a energia dissipada depende da velocidade absoluta dos grãos, mais uma vez usando a transformação de variáveis 2.4, no caso harmônico ( $n = 2$ ) as

equações de movimento assumem a forma:

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= [-\gamma\dot{x}_1 - (x_1 - x_2)]\theta(x_1 - x_2), \\ \ddot{x}_2 &= [\gamma\dot{x}_2 + (x_1 - x_2)]\theta(x_1 - x_2).\end{aligned}\quad (2.7)$$

Uma dissipação dependente da velocidade absoluta dos grãos pode surgir devido a uma interação dos grãos com o meio e mais uma vez as equações de movimento podem ser resolvidas analiticamente. As soluções das equações (2.7) são:

$$\begin{aligned}u_1 &= \frac{1}{2}[e^{-\gamma t_0} - e^{-\gamma t_0/2}]v_1 + \frac{1}{2}[e^{-\gamma t_0} + e^{-\gamma t_0/2}]v_2, \\ u_2 &= \frac{1}{2}[e^{-\gamma t_0} + e^{-\gamma t_0/2}]v_1 + \frac{1}{2}[e^{-\gamma t_0} - e^{-\gamma t_0/2}]v_2,\end{aligned}\quad (2.8)$$

onde  $t_0 = 2\pi/(\sqrt{8 - \gamma^2})$  é a duração da colisão. Neste caso, somando as equações (2.8), temos  $u_1 + u_2 = [v_1 + v_2]e^{-\gamma t_0}$ , e portanto nesse caso o momentum do centro de massa apresenta uma dissipação que depende da viscosidade  $\gamma$ .

Para ambos os casos estudados assumimos que o tempo de contato entre os grãos é curto, portanto  $\gamma t_0 \ll 1$ . Além disso nosso modelo considera que o gás é suficientemente diluído, apresentando apenas choques binários, ou seja, choques entre dois grãos, não ocorrendo interação entre 3 ou mais grãos simultaneamente.

Devido a dissipação de energia, a partir de um determinado valor do coeficiente de dissipação  $\gamma$  a energia fornecida pelos banhos térmicos é totalmente dissipada pelo gás granular e portanto não há transporte de energia. A seguir faremos um cálculo desse limite de viscosidade para que haja o transporte de calor através do sistema. Devido à dissipação da energia durante o choque, a diferença da energia cinética antes e depois do choque no modelo onde há conservação de momentum é dada por:

$$\Delta E = \frac{1}{2}(u_1^2 + u_2^2) - \frac{1}{2}(v_1^2 + v_2^2) = -\left(\frac{v_1^2}{2} - v_1 v_2 + \frac{v_2^2}{2}\right)\gamma t_0 + O[\gamma]^2. \quad (2.9)$$

Podemos evidenciar o termo  $E_{inicial} = \frac{v_1^2}{2} + \frac{v_2^2}{2}$  e com isso podemos reescrever (2.9) na forma:

$$\Delta E = -E_{inicial} \left(1 - \frac{2v_2/v_1}{1 + (v_2/v_1)^2}\right)\gamma t_0 \quad (2.10)$$

O termo  $b = 1 - \frac{2v_2/v_1}{1 + (v_2/v_1)^2}$  possui valor da ordem de 1 conforme mostrado na figura 2.2.

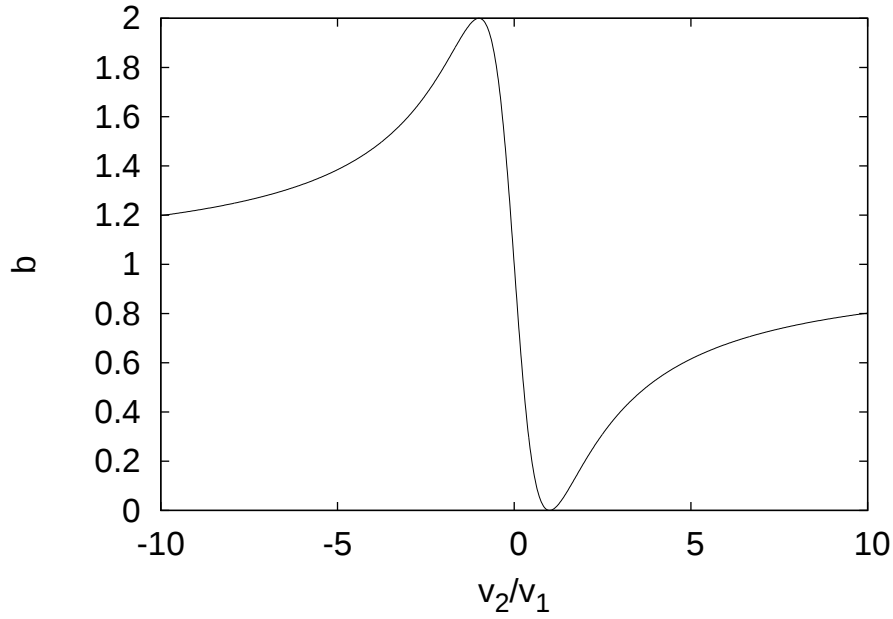


Figura 2.2: Comportamento do parâmetro  $b = 1 - \frac{2v_2/v_1}{1 + (v_2/v_1)^2}$ , no modelo com conservação do momentum, pode-se ver claramente que o valor de  $b$  está entre os valores 0 e 2.

No modelo onde não há conservação de momentum a diferença de energia cinética é dada por:

$$\Delta E = \frac{1}{2}(u_1^2 + u_2^2) - \frac{1}{2}(v_1^2 + v_2^2) = -\frac{1}{4}(3v_1^2 + 2v_1v_2 + 3v_2^2)\gamma t_0 + O[\gamma]^2 \quad (2.11)$$

Como feito no caso anterior, podemos evidenciar o termo  $E_{inicial} = \frac{v_1^2}{2} + \frac{v_2^2}{2}$  e reescrever (2.11) na forma:

$$\Delta E = -E_{inicial} \left( \frac{3}{2} + \frac{v_2/v_1}{1 + (v_2/v_1)^2} \right) \gamma t_0. \quad (2.12)$$

Para esse caso o parâmetro  $b = \frac{3}{2} + \frac{v_2/v_1}{1 + (v_2/v_1)^2}$  também possui valor da ordem de 1 conforme mostrado na figura 2.3.

Para ambos os casos  $b$  representa a forma que a energia dissipada pelo choque depende das velocidades iniciais dos grãos. Para que ocorra choque entre os grãos 1 e 2, considerando que o grão 1 está a esquerda do grão 2 e o eixo das coordenadas está orientado da esquerda para a direita, devemos obedecer a condição:

$$v_1 > v_2. \quad (2.13)$$

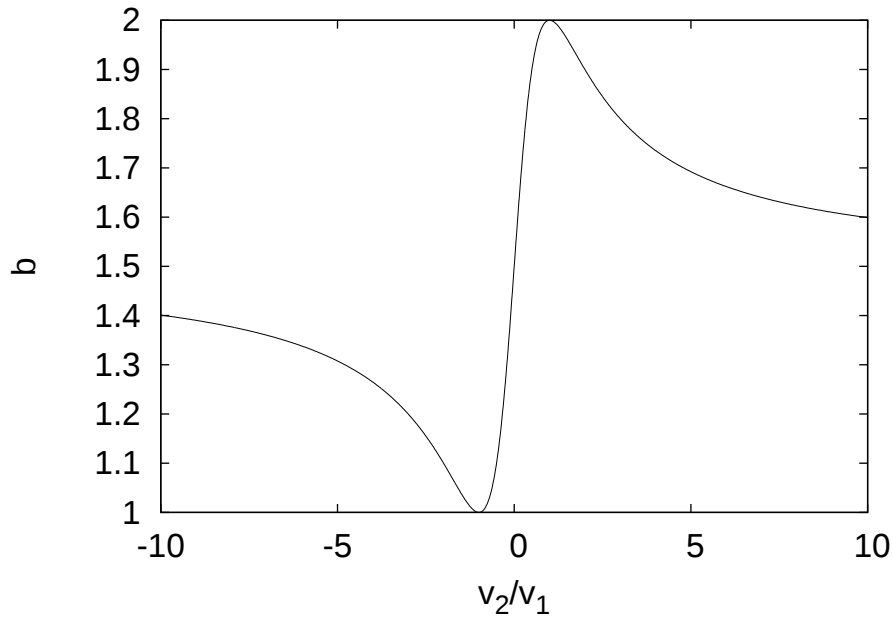


Figura 2.3: Comportamento do parâmetro  $b = \frac{3}{2} + \frac{v_2/v_1}{1 + (v_2/v_1)^2}$ , no modelo sem a conservação do momentum, pode-se ver claramente que o valor de  $b$  está entre os valores 0 e 1,5.

Usando a condição (2.13), podemos destacar algumas situações físicas diferentes para os possíveis casos de  $\frac{v_2}{v_1}$ :

- Para o caso onde temos  $\frac{v_2}{v_1} < -1$ , a condição (2.13) vai implicar em  $v_1 > 0$  e  $v_2 < 0$ , com  $|v_2| > |v_1|$ . Portanto os grãos apresentam velocidades em sentidos contrários onde o grão da direita se move com maior velocidade. O limite assintótico para ambos os modelos de grãos é o equivalente a ter  $v_2 \gg v_1$ , e a dissipação para esse caso vai se aproximar do valor da dissipação para o caso onde  $\frac{v_2}{v_1} = 0$ , pois apresenta uma situação física simétrica. Para o caso com conservação de momentum a dissipação aumenta a medida que a velocidade relativa aumenta, ou seja, quando  $\frac{v_2}{v_1}$  se aproxima de  $-1$ . Para o caso com dissipação de momentum a energia dissipada será menor a medida que a velocidade relativa será menor, isso ocorre devido a um aumento da energia armazenada na forma de energia potencial durante o choque, e a consequente diminuição da velocidade de ambos os grãos durante o choque.
- $\frac{v_2}{v_1} = -1$ , situação onde  $v_2 = -v_1$ , os dois grãos possuem mesmo módulo da velocidade, porém em sentidos opostos. Para o caso com conservação de momentum esse ponto é onde há maior dissipação de energia, pois apresenta maior velocidade relativa. Para o caso com dissipação de momentum a dissipação da energia será mínima. Isso ocorre

devido ao fato do tempo de colisão não depender da velocidade relativa, e a dissipação depender apenas da velocidade absoluta de cada grão e durante o choque para  $\frac{v_2}{v_1} = -1$  os grãos apresentam maior quantidade de energia armazenada na forma de energia potencial.

- Para  $-1 < \frac{v_2}{v_1} < 0$ , ainda temos a condição  $v_1 > 0$  e  $v_2 < 0$ , porém  $|v_2| < |v_1|$ . Os grãos se aproximam com velocidades em sentidos opostos mas diferente do caso anterior o grão da esquerda se move com maior velocidade. Nesse caso o aumento do valor de  $\frac{v_2}{v_1}$  significa uma diminuição da velocidade relativa, para o caso específico onde  $\frac{v_2}{v_1} = 0$  temos o grão 2 em repouso e o grão 1 se movendo em sua direção. Nesse caso para o sistema com conservação de momentum há a diminuição da dissipação da energia e para o sistema com dissipação de momentum há o aumento da dissipação da energia. O valor da dissipação para  $\frac{v_2}{v_1} = 0$  é o equivalente aos limites assintóticos para os casos com dissipação e sem dissipação de momentum.
- Para o caso  $0 < \frac{v_2}{v_1} < 1$  a condição (2.13) resulta no caso onde  $v_1 > 0$  e  $v_2 > 0$ , com  $|v_1| > |v_2|$ . Nesse caso os grãos se deslocam para a direita, com o grão da esquerda se deslocando mais rapidamente que o grão da direita. Nesse caso ainda temos a diminuição da velocidade relativa e portanto para o sistema com conservação de momentum há a diminuição da dissipação da energia. Para o sistema com dissipação de momentum há o aumento da dissipação da energia até os limites do ponto  $\frac{v_2}{v_1} = 1$ .
- No ponto  $\frac{v_2}{v_1} = 1$ , temos  $v_2 = v_1$ , os dois grãos se movimentam com mesma velocidade e mesmo sentido, portanto a velocidade relativa entre os grãos é nula. Para o caso com conservação de energia esse ponto a dissipação seria mínima, pois a velocidade relativa é nula. Para o caso com dissipação de momentum esse ponto apresentaria dissipação máxima, pois a energia armazenada na forma de energia potencial seria mínima. Esse ponto só deve ser considerado como caso limite, pois quando os dois grãos possuem a mesma velocidade o choque não ocorre.
- Para o caso  $\frac{v_2}{v_1} > 1$  temos  $v_1 < 0$  e  $v_2 < 0$ , onde  $|v_1| < |v_2|$ . Nesse caso os grãos se deslocam para a esquerda, com o grão da direita se deslocando mais rapidamente que o grão da esquerda. Nesse caso para o sistema com conservação de momentum há o aumento da dissipação pois há o aumento da velocidade relativa e para o sistema com dissipação de momentum há a diminuição da dissipação. Assintoticamente o valor da dissipação tende ao mesmo valor de dissipação calculada para o ponto  $\frac{v_2}{v_1} = 0$ , pois a medida que o valor de  $\frac{v_2}{v_1}$  aumenta há a diminuição da velocidade relativa.

Em resumo, temos que para o sistema com conservação de momentum a parcela da energia dissipada é maior para os casos onde a velocidade relativa dos grãos é maior e decresce até zero para o caso limite onde a velocidade relativa é zero, pois a dissipação depende da velocidade relativa. Para o caso com dissipação de momentum, a dissipação de energia diminui conforme aumenta a velocidade relativa dos grãos, isso ocorre pois o tempo de choque não depende das velocidades dos grãos, além disso, para velocidades relativas maiores, uma maior parcela da energia é armazenada na forma de energia potencial durante o choque.

De forma geral podemos escrever para ambos os casos a relação entre a energia antes e após o choque:

$$E_{final} = E_{inicial}(1 - b\gamma t_0), \quad (2.14)$$

onde  $b$  é uma quantidade adimensional com ordem próxima de 1. Utilizando (2.14) para  $N$  choques podemos estimar a energia transmitida até o  $N$ -ésimo grão como  $E_N \sim E_0(1 - \gamma t_0)^N$ . Contudo um grão em contato com a parede quente tem uma energia média  $E_q \leq \frac{k_b T_1}{2}$  e para que haja o transporte de energia até a parede fria o grão deve chegar com energia maior que  $E_f \leq \frac{k_b T_2}{2}$  e portanto para que haja transporte de energia entre os dois banhos térmicos o sistema deve obedecer a condição  $E_f \leq E_q(1 - \gamma t_0)^N$ , isolando  $\gamma$  e substituindo as expressões de  $E_q$  e  $E_f$  podemos obter:

$$\gamma \leq 1 - \left( \frac{T_2}{T_1} \right)^{1/N}, \quad (2.15)$$

essa é a condição para que haja transporte de calor através do gás granular, caso a viscosidade ultrapasse esse limite o gás vai agir como um sorvedouro de energia, dissipando a energia cedida por ambas as paredes térmicas.

### 2.1.2 Modelo do banho térmico utilizado na simulação.

Para observar o transporte de calor através do gás granular, em cada uma das extremidades do sistema foi “colocado” um banho térmico. Para um gás granular suficientemente diluído, a diferença de temperatura entre os dois banhos gera o gradiente de temperatura necessário para que haja o transporte de calor. Dois modelos de banhos térmicos são comumente utilizados em simulações. Em um deles, a partícula que se choca com a parede retorna com uma velocidade aleatória sorteada a partir de uma distribuição de probabilidade gaussiana da forma:

$$P(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(\frac{-mv^2}{2k_B T}\right), \quad (2.16)$$

no outro modelo, a distribuição de probabilidade da qual a velocidade é sorteada tem a forma:

$$P(v) = \frac{m|v|}{k_B T} \exp\left(\frac{-mv^2}{2k_B T}\right), \quad (2.17)$$

onde para ambas as distribuições,  $m$  é a massa da partícula,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura granular.

A distribuição de velocidades (2.17) apresenta baixa probabilidade de velocidades próximas de 0, diferente da distribuição (2.16) onde as velocidades mais prováveis estão em torno de 0. Em [29] essas duas distribuições foram utilizadas em simulações usando-se modelos de gás ideal e com esferas rígidas. As condições de contorno (2.16) levam a resultados qualitativos diferentes dos resultados clássicos, levando a resultados incorretos das simulações.

Foi observado que em um sistema de gás ideal clássico, em contato com um reservatório térmico com modelos de paredes do tipo (2.16), resulta numa temperatura de equilíbrio diferente da temperatura do reservatório. Além disso, foi observado também a inomogeneidade da distribuição espacial de partículas, que se concentram próxima as paredes do sistema. Enquanto isso o modelo (2.16) não apresenta esses problemas. Portanto, em nosso trabalho, utilizamos o modelo de banho térmico (2.17).

Em nossas simulações, quando um grão se choca com uma das paredes, a energia do grão antes do choque é transmitida para a parede e computada como energia absorvida pela parede. Após isso o grão recebe a nova velocidade, independente da velocidade anterior, calculada a partir de (2.17), essa energia que o grão recebe após o choque é computada como energia injetada pela parede. Podemos dessa forma calcular o fluxo de calor através do sistema pela quantidade de energia absorvida e injetada pelas paredes do sistema.

Para implementar na simulação esse sorteio de velocidades utilizamos um gerador de números aleatórios. Para obter números sorteados obedecendo a distribuição de probabilidade (2.17) utilizamos uma transformação que, aplicada aos números aleatórios gerados por uma distribuição uniforme, resultam em números aleatórios segundo a distribuição desejada [30].

Para obter tal transformação, iniciamos com a distribuição uniforme:

$$p(x)dx = dx \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (2.18)$$

e satisfazendo a condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1. \quad (2.19)$$

Por outro lado, para que haja a conservação da probabilidade,

$$p(y)dy = p(x)dx \quad (2.20)$$

onde  $p(y)$  é a distribuição que queremos depois da transformação e  $p(x)$  é a distribuição inicial, em nosso caso a distribuição uniforme, implica em:

$$p(y)dy = dx. \quad (2.21)$$

Integrando esta última expressão, obtemos:

$$x(y) = \int_0^y p(y')dy' \quad (2.22)$$

Que é a distribuição cumulativa de  $p(y)$ . Onde  $y$  é definido no intervalo  $[0, \infty]$ .

Para o caso do banho térmico utilizado, nas variáveis adimensionais introduzidas através das transformações (2.4) onde a massa dos grãos reescalada é 1. a distribuição (2.17) toma a forma:

$$x = \frac{1}{k_B T} \int_0^v v' \exp\left(-\frac{v'^2}{2K_b T}\right) dv' = \left[1 - \exp\left(-\frac{v^2}{2K_b T}\right)\right] \quad (2.23)$$

resolvendo (2.23) para  $v$ , temos:

$$v = \sqrt{-2k_B T \ln(1-x)}. \quad (2.24)$$

Portanto, usando um gerador de números aleatórios com probabilidade uniforme podemos gerar valores obedecendo à distribuição (2.17) e dessa forma implementar o banho térmico na simulação.

## 2.2 Propagação de pulsos não-lineares em uma cadeia unidimensional de anéis toroidais.

Em [13] foi apresentado um trabalho experimental com uma cadeia unidimensional de anéis toroidais (O-rings) colocados entre cilindros de metal, de maneira que os anéis agem como molas não-lineares. Nesse arranjo o potencial de interação empírico obtido é dado por

$$V = mA\delta^{5/2} + mB\delta^7, \quad (2.25)$$

onde

$$A = 1,25\pi DE/md^{1/2},$$

$$B = 50\pi DE/md^5,$$

sendo  $d$  o diâmetro da secção transversal,  $D$  o diâmetro médio dos toróides,  $E$  o módulo de Young e  $m$  a massa dos cilindros metálicos. É interessante notar que para esse potencial temos um termo que domina no regime de grandes compressões ( $B\delta^7$ ) e o outro termo domina no regime de pequenas compressões ( $A\delta^{5/2}$ ). Com esse arranjo foi estudada a propagação de ondas solitárias geradas por choques de curta duração e ondas de choque geradas por colisões com longa duração. Foi observado que para impulsos longos há a tendência de formação de trens de ondas solitárias neste tipo de material. Esse tipo de impulso é gerado quando o tempo de contato do primeiro choque é mais longo que o tempo de residência do pulso em um grão, nesse caso o choque inicial é dado por um objeto com massa maior do que a massa dos grãos na cadeia [13].

Nós consideramos a cadeia em 3 configurações iniciais: O primeiro caso os grãos estão inicialmente apenas em contato sem precompressão, esta configuração foi proposta em [13], no segundo caso a cadeia é comprimida por uma força de mesma intensidade e sentido oposto em ambas as extremidades da cadeia, o terceiro caso a cadeia está sujeita à força gravitacional, fazendo com que a precompressão seja variável ao longo da cadeia. Para esses 3 casos estudamos a propagação de ondas geradas por choques de curta duração com um grão de mesma massa dos grãos que compõe a cadeia. Comparamos o resultado de simulações da propagação do pulso ao longo da cadeia com os resultados obtidos com a aproximação binária [15]. As simulações foram feitas usando um modelo de dinâmica molecular, onde as equações de movimento foram resolvidas numericamente utilizando o método Preditor-Corretor de Gears de sexta ordem [31]. O resultado das simulações foram comparados com os resultados numéricos obtidos com a aproximação binária.

### 2.2.1 Modelo de simulação para cadeia granular unidimensional de anéis toroidais.

A simulação da propagação do pulso em uma cadeia de anéis consistiu da integração numérica através do método preditor-corretor de Gear de sexta ordem, que será apresentado na sessão posterior.

A equação de movimento para um grão  $k$  com seu centro de massa na posição  $u_k$  sendo comprimido pelos grãos  $k - 1$  e  $k + 1$  em um dado tempo  $\tau$ , utilizando o potencial (2.25) a

equação de movimento para o grão  $k$  assume a forma:

$$\frac{d^2 u_k}{d\tau^2} = A \left[ (u_{k-1} - u_k)^{3/2} - (u_k - u_{k+1})^{3/2} \right] + B \left[ (u_{k-1} - u_k)^6 - (u_k - u_{k+1})^6 \right] + \frac{F_k}{m}, \quad (2.26)$$

o termo  $F_k$  é a força externa a qual o grão  $k$  está submetido. Para cadeias sem precompressão  $F_k = 0$  para qualquer  $k$ , para grãos com precompressão constante  $F_1 = -F_N = F$  e  $F_k = 0$  para todos os outros  $k$  para a cadeia sujeita a gravidade temos  $F = kmg$  para  $k = 1, 2, 3, \dots, N-1$  e  $F_N = -Nmg$ , onde  $g$  é a aceleração da gravidade. Usando a seguinte mudança de variáveis, tornando as variáveis adimensionais:

$$x_k = \left( \frac{A}{v_0^2} \right)^{2/5} u_k, \quad t = v_0 \left( \frac{A}{v_0^2} \right)^{2/5} \tau, \quad (2.27)$$

Essa transformação é o análogo da transformação 2.4 para o potencial (2.25). Desta maneira podemos reescrever as equações de movimento na forma adimensional:

$$\ddot{x}_k = \left[ (x_k - x_{k+1})^{3/2} - (x_{k-1} - x_k)^{3/2} \right] + \tilde{B} \left[ (x_k - x_{k+1})^6 - (x_{k-1} - x_k)^6 \right] + f_k \quad (2.28)$$

onde  $\tilde{B} = \frac{B}{A} \left( \frac{v_0^2}{A} \right)^{9/5}$ ,  $f_k = \frac{F_k}{mv_0^2} \left( \frac{v_0^2}{A} \right)^{2/5}$  e  $v_0$  é a velocidade inicial do primeiro grão nas variáveis originais. Nas variáveis adimensionais a velocidade inicial do primeiro grão é sempre 1. Desta forma uma variação do parâmetro  $b$  pode representar tanto uma mudança na velocidade inicial do primeiro grão, quanto uma modificação nas propriedades do material que compõem os grãos nas variáveis originais.

### 2.2.2 Método preditor-corretor de Gears para solução de equações diferenciais.

Os métodos do tipo preditor-corretor consistem na determinação, a partir da posição e suas derivadas, do valor da posição no tempo posterior  $t + \Delta t$  através de uma expansão de Taylor. Após a determinação da posição no tempo  $t + \Delta t$  (preditor), a posição calculada é corrigida através da diferença do termo de terceira ordem e a força a qual o sistema está sujeito (corretor). Através da diferença entre o valor calculado pelo preditor e o valor calculado através da força resultante a nova posição é corrigida através de coeficientes calculados para maximizar a estabilidade do método.

No caso do preditor-corretor de Gear de sexta ordem, que foi o utilizado nas nossas simulações, o preditor determina a nova posição através de uma expansão em Taylor até sexta ordem:

$$x(t + \Delta t) = x^{(1)}(t)\Delta t + \frac{1}{2}x^{(2)}(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}x^{(3)}(t)(\Delta t)^3 + \frac{1}{24}x^{(4)}(t)(\Delta t)^4 + \frac{1}{120}x^{(5)}(t)(\Delta t)^5; \quad (2.29)$$

$$x^{(1)}(t + \Delta t) = x^{(2)}(t)\Delta t + \frac{1}{2}x^{(3)}(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}x^{(4)}(t)(\Delta t)^3 + \frac{1}{24}x^{(5)}(t)(\Delta t)^4; \quad (2.30)$$

$$x^{(2)}(t + \Delta t) = x^{(3)}(t)\Delta t + \frac{1}{2}x^{(4)}(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}x^{(5)}(t)(\Delta t)^3; \quad (2.31)$$

$$x^{(3)}(t + \Delta t) = x^{(4)}(t)\Delta t + \frac{1}{2}x^{(5)}(t)(\Delta t)^2; \quad (2.32)$$

$$x^{(4)}(t + \Delta t) = x^{(5)}(t)\Delta t; \quad (2.33)$$

onde  $x^{(m)} = \frac{d^m x}{dt^m}$ .

O corretor consiste em multiplicar a diferença  $\Delta a = \frac{F}{m} - \frac{d^2 x(t + \Delta t)}{dt^2}$  por coeficientes  $C_n$  determinados de forma a assegurar a estabilidade do método [31] e somar aos resultados estimados pelo preditor.

$$x_{corr.}(t + \Delta t) = x(t + \Delta t) + C_1 \Delta a, \quad (2.34)$$

$$x_{corr.}^{(1)}(t + \Delta t) = x^{(1)}(t + \Delta t) + C_2 \Delta a, \quad (2.35)$$

$$x_{corr.}^{(2)}(t + \Delta t) = x^{(2)}(t + \Delta t) + C_3 \Delta a, \quad (2.36)$$

$$x_{corr.}^{(3)}(t + \Delta t) = x^{(3)}(t + \Delta t) + C_4 \Delta a, \quad (2.37)$$

$$x_{corr.}^{(4)}(t + \Delta t) = x^{(4)}(t + \Delta t) + C_5 \Delta a, \quad (2.38)$$

$$x_{corr.}^{(5)}(t + \Delta t) = x^{(5)}(t + \Delta t) + C_6 \Delta a, \quad (2.39)$$

onde as constantes  $C_n$  foram determinadas por Gear em [31]. Eles dependem do intervalo de tempo  $\Delta t$  entre os passos, e os valores dos coeficientes  $C_n$  são:  $C_1 = \frac{3\Delta t^2}{40}$ ,  $C_2 = \frac{251\Delta t}{720}$ ,  $C_3 = 1$ ,  $C_4 = \frac{11}{6\Delta t}$ ,  $C_5 = \frac{2}{(\Delta t)^2}$ ,  $C_6 = \frac{1}{(\Delta t)^3}$ . Usando esse método para integrar as equações de movimento de cada grão, podemos resolver o problema numericamente.

### 2.2.3 Aproximação binária com e sem precompressão para uma cadeia de anéis toroidais.

A aproximação binária consiste em considerar que o pulso se propaga através de choques entre pares de partículas, uma a uma. Tratando o problema dessa forma, podemos estimar a velocidade de propagação do pulso. As equações de movimento para os dois grãos envolvidos

na colisão, são:

$$\ddot{x}_1 = -(x_1 - x_2)^{3/2} - \tilde{B}(x_1 - x_2)^6 + f \quad (2.40)$$

$$\ddot{x}_2 = (x_1 - x_2)^{3/2} + \tilde{B}(x_1 - x_2)^6 - f \quad (2.41)$$

onde consideramos que o grão 1 está a esquerda do grão 2 e  $f$  é a força necessária para manter uma precompressão  $\delta$ , tal que  $F = \delta^{3/2} + \tilde{B}\delta^6$ . Para tratar analiticamente esse problema, definimos a variável  $z_- = x_1 - x_2$  e subtraindo as equações (2.40) e (2.41), temos:

$$\ddot{z}_- = -2Az_-^{3/2} - 2Bz_-^6 + 2F \quad (2.42)$$

Essa equação corresponde a uma equação de movimento associada ao potencial

$$V(z_-) = \frac{4z_-^{5/2}}{5} + \frac{2\tilde{B}z_-^7}{7} - 2Fz_- \quad (2.43)$$

Utilizando a conservação da energia, podemos equacionar a energia do sistema em qualquer momento com a energia inicial, dessa forma podemos obter a equação:

$$K(z_-) + V(z_-) = K(0) + V(0) \quad (2.44)$$

onde  $K(z_-)$  e  $V(z_-)$  são respectivamente as energias cinética e potencial para a compressão  $z_-$  e portanto, temos:

$$\frac{1}{2}\dot{z}_-^2 + \frac{4z_-^{5/2}}{5} + \frac{\tilde{B}z_-^7}{7} - 2Fz_- = \frac{1}{2}v_0^2 + \frac{4\delta^{5/2}}{5} + \frac{2\tilde{B}\delta^7}{7} - 2F\delta \quad (2.45)$$

Resolvendo essa equação para  $\dot{z}_-$ , podemos obter:

$$\dot{z}_- = \left[ v_0^2 + \frac{8}{5} \left( \delta^{5/2} - z_-^{5/2} \right) + \frac{4\tilde{B}}{7} (\delta^7 - z_-^7) + 4F(z_- - \delta) \right]^{1/2} \quad (2.46)$$

Portanto o tempo de residência do pulso em um grão  $k$ , definido como o tempo que o grão  $k$  possui uma velocidade maior que ambos os vizinhos, é dado por:

$$t = \int_{\delta}^{z_m} \left[ v_0^2 + \frac{8}{5} \left( \delta^{5/2} - z_-^{5/2} \right) + \frac{4\tilde{B}}{7} (\delta^7 - z_-^7) + 4F(z_- - \delta) \right]^{-1/2} dz_-, \quad (2.47)$$

onde  $z_m$  é a compressão máxima e portanto podemos calcular através da condição  $\dot{z}_- = 0$ . Assim

a partir da equação (2.45)  $z_m$  é dado pela raiz da equação:

$$v_0^2 + \frac{8}{5} \left( \delta^{5/2} - z_m^{5/2} \right) + \frac{4\tilde{B}}{7} \left( \delta^7 - z_m^7 \right) + 4F(z_m - \delta) = 0. \quad (2.48)$$

O cálculo de  $z_m$  e da integral (2.47) deve ser feito numericamente, dessa forma podemos obter um valor numérico aproximado da velocidade de propagação do pulso. A velocidade de um pulso em uma cadeia pode ser calculada através dessa aproximação e na seção 3.2 são comparados os resultados da aproximação binária com os resultados das simulações numéricas.

## 3 *Resultados*

### 3.1 Transporte de calor em gases granulares unidimensionais viscosos.

Conforme mencionado anteriormente, foram estudados dois modelos de sistemas de gases granulares. Um onde a dissipação é proporcional à velocidade absoluta do grão. Portanto do tipo “atrito viscoso” ( $-\gamma v$ ), em analogia ao que ocorre com corpos em movimento dentro de um fluido em repouso. O segundo modelo a dissipação é proporcional à velocidade relativa dos grãos durante o choque. Dando origem a um choque inelástico, esse tipo de choque ocorre com grãos compostos de materiais viscoelásticos.

Quando há o transporte de calor através de um sistema entre duas regiões com temperaturas fixas, em um dado momento, o fluxo de calor vai se tornar constante, esse estado de fluxo de calor constante é chamado estado estacionário. Uma característica do estado estacionário do sistema é que a distribuição de velocidades iniciais das partículas do gás não exerce influência no comportamento do sistema nesse estado. Em [32] foi mostrado que sistemas com interações dissipativas, como as usadas em nossos modelos, podem apresentar modificações nas características do estado estacionário do sistema. Uma dessas mudanças é a modificação na distribuição de Maxwell-Boltzmann associada ao estado estacionário do sistema. Nosso foco foi o transporte de calor através do sistema em estado estacionário.

Para sistemas onde há transporte de calor, o estado estacionário é em geral atingido para tempos longos. Inicialmente o sistema passa por um regime transiente, onde a condição inicial influencia o comportamento do sistema, e depois disso assumem taxas de transporte de calor independentes do estado inicial. As figuras 3.1 e 3.2 apresentam os gráficos da energia injetada e absorvida por cada parede ao longo do tempo. Para os dois modelos os estados estacionários são atingidos nos primeiros momentos da simulação. Nas figuras 3.1 e 3.2 podemos notar que nos instantes iniciais a taxa de injeção e absorção apresentam um comportamento não linear, caracterizando o estado transiente, mas em seguida a energia injetada e absorvida cresce linearmente com o tempo, indicando uma taxa de injeção e absorção constantes. O regime es-

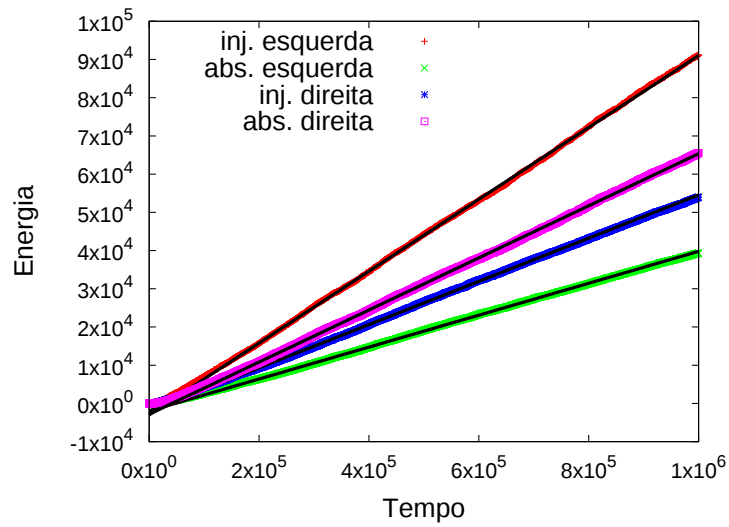


Figura 3.1: Energia injetada e absorvida pelas paredes do sistema. Para o modelo sem conservação do momentum, apresentando temperatura 6 na parede esquerda e 10 na parede direita. O gráfico apresenta temperatura inicial 1.

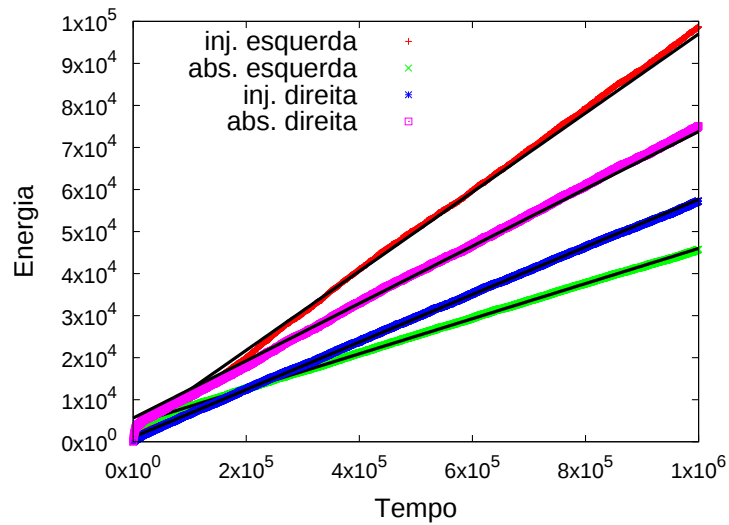


Figura 3.2: Energia injetada e absorvida pelas paredes do sistema. Para o modelo sem conservação do momentum, apresentando temperatura 6 na parede esquerda e 10 na parede direita. O gráfico apresenta temperatura inicial 6.

tacionário é caracterizado por essas taxas de injeção e absorção de energia constantes, nesse regime o sistema não sofre influência do seu estado inicial. Podemos observar nas figuras 3.1 e 3.2 que para ambos os gráficos temos retas ajustadas apresentando mesmo coeficiente angular para ambos os modelos, indicando uma taxa de transporte de calor constante e independente do estado inicial do sistema. Os resultados apresentados a partir daqui são obtidos para o sistema no estado estacionário.

A Figura 3.3 apresenta a taxa de transporte de energia líquida para os modelos com dissipação do momentum e sem dissipação do momentum. A taxa de transporte de energia líquida de um banho térmico ao outro é dada pela equação:  $E_t = (E_{inj.esq.} - E_{abs.esq.}) - (E_{inj.dir.} - E_{abs.dir.}) - E_{dis.}$ . Isto é, a energia transmitida  $E_t$  é dada pela diferença entre a energia injetada  $E_{inj.esq.}$  e absorvida  $E_{abs.esq.}$  da parede com maior temperatura menos a diferença entre a energia injetada  $E_{inj.dir.}$  e absorvida  $E_{abs.dir.}$  da parede com menor temperatura menos a energia dissipada  $E_{dis.}$  pelos choques inelásticos. A Figura 3.3 apresenta a relação de  $E_t$  e  $\Delta T$  para os dois modelos utilizados.

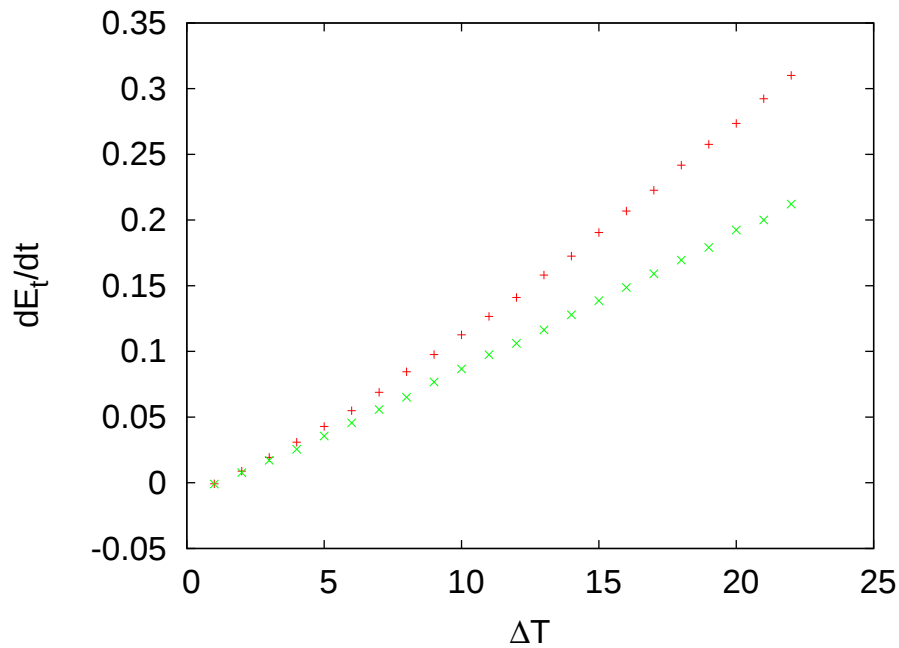


Figura 3.3: Transporte de calor líquido. Modelo com dissipação dependente da velocidade absoluta com + vermelho, modelo com dissipação dependente da velocidade relativa com x verde.

Na figura 3.3 podemos observar que  $E_t$  é nulo para valores de  $\Delta T$  muito pequenos e positivos. Esse resultados é consequência da condição de transporte de calor apresentada na eq. (2.15). Nessas circunstâncias, devido à pequena diferença de temperatura entre os banhos térmicos, a energia é dissipada com os choques inelásticos e portanto não ocorre transporte.

O transporte de calor através de um meio contínuo é descrito pela lei de Fourier:  $\vec{J} = -\kappa \vec{\nabla} T$ . Para um sistema unidimensional o termo  $\vec{\nabla} T$  torna-se apenas uma derivada com relação a posição. Esse termo é um importante parâmetro a ser observado quando há o fluxo de calor. Fisicamente, o gradiente de temperatura pode ser obtido do nosso modelo através do cálculo da temperatura local,  $S^2 = \frac{\langle v^2 \rangle}{2}$ . Para obter esse valor dividimos o sistema em partições e calculamos a média das velocidades quadráticas para 1000 sistemas divididos em 20 partições, cada

sistema possui 1000 grãos. A Figura 3.4 apresenta o gradiente de temperatura para o sistema com dissipação dependente da velocidade absoluta enquanto a Figura 3.5 apresenta o gradiente de temperatura para o sistema com dissipação dependente da velocidade relativa.

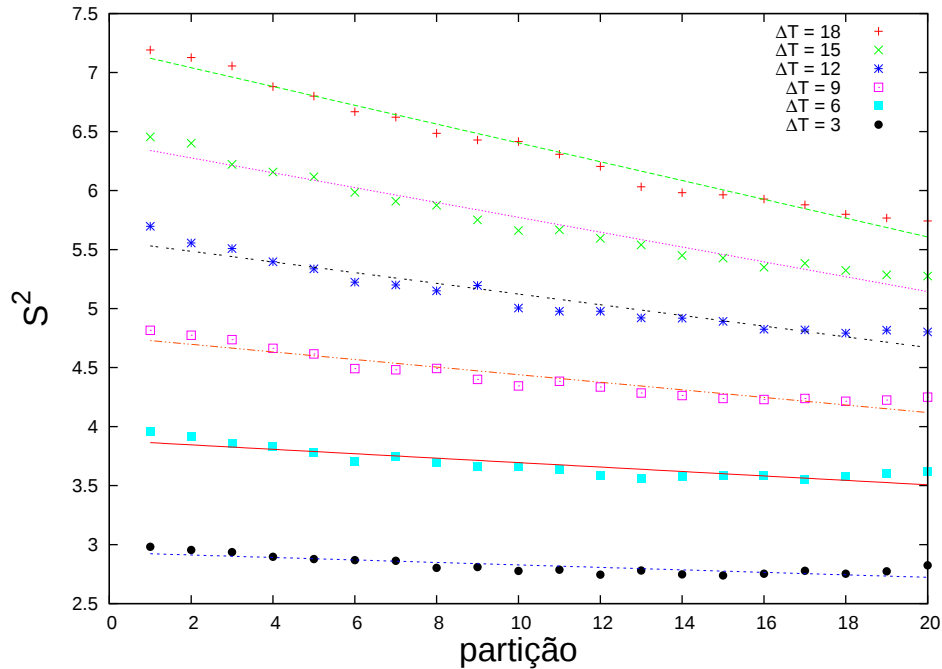


Figura 3.4: Gradiente de temperatura, modelo de grãos imersos em um fluido. Os pontos marcados com círculos (pretos) são para  $\Delta T = 3$ , quadrados (cianos) para  $\Delta T = 6$ , quadrados vazados (rosas) para  $\Delta T = 9$ , asteriscos (azuis) para  $\Delta T = 12$ , X (verdes) para  $\Delta T = 15$ , cruces (vermelhas) para  $\Delta T = 18$ .

O gradiente de temperatura apresenta comportamento de acordo com a lei de Fourier linear na região central do sistema para ambos os modelos e vários valores da diferença de temperatura  $\Delta T$ . A parede esquerda foi mantida a temperatura 3 constante e a parede direita teve sua temperatura variada de 6 a 21. Nas regiões próximas as extremidades, os banhos térmicos contribuem com o aumento da temperatura local, e esse efeito se torna mais acentuado a medida que aumenta a diferença de temperatura.

Em [26] e [27] são apresentados vários sistemas unidimensionais não-conservativos que apresentam um transporte anômalo de calor. A condutividade térmica  $\kappa$  nesses sistemas apresenta dependência com o comprimento do sistema em lei de potências. Em [27] utilizando a fórmula de Kubo, que relaciona a correlação temporal do fluxo de calor com a condutividade térmica, é mostrado analiticamente, que para alguns sistemas conservativos a condutividade térmica é divergente. As Figuras 3.6 e 3.7, apresentam o comportamento do fluxo de calor em função do comprimento do sistema. A densidade de grãos no sistema foi mantida constante, portanto o aumento no comprimento do sistema implica no aumento da quantidade de grãos en-

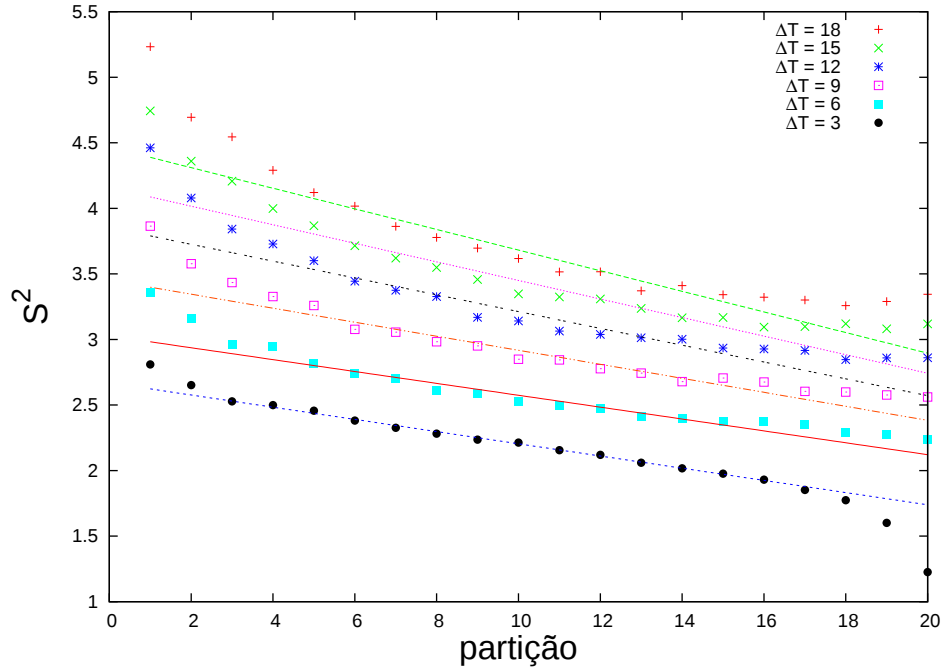


Figura 3.5: Gradiente de temperatura, modelo de grãos viscoelásticos. Os pontos marcados com círculos (pretos) são para  $\Delta T = 3$ , quadrados (cianos) para  $\Delta T = 6$ , quadrados vazados (rosas) para  $\Delta T = 9$ , asteriscos (azuis) para  $\Delta T = 12$ , X (verdes) para  $\Delta T = 15$ , cruces (vermelhas) para  $\Delta T = 18$ .

tre as extremidades do sistema. Nas variáveis adimensionais que foram usadas na simulação, os parâmetros usados foram: As temperaturas dos banhos térmicos 3 (parede esquerda) e 6 (parede direita) e a viscosidade usada foi  $\gamma = 1 \times 10^{-4}$ , escolhida de modo a satisfazer a relação (2.15) para os parâmetros utilizados. Podemos observar que conforme o comprimento do sistema aumenta as taxas de injeção e absorção de energia diminuem e a energia dissipada aumenta devido à necessidade de uma maior quantidade de choques para que a energia seja transmitida de uma parede a outra do sistema.

Usando uma reescala onde o valor de  $\gamma$  é modificado de maneira que o produto  $\gamma L$  é mantido constante, a qual se deve ao fato de que para  $N$  choques a energia dissipada é proporcional a  $\gamma N$  e, como a densidade foi mantida constante quando variamos o comprimento do sistema, essa reescala resulta numa dissipação de energia independente do comprimento do sistema. Esse resultado está apresentado nas figuras 3.8 e 3.9 para ambos os modelos. Dessa forma podemos obter taxas de transporte que não dependem do comprimento e portanto uma condutividade térmica independente do comprimento do sistema, uma vez que para um gradiente de temperatura constante a condutividade térmica é proporcional ao fluxo de calor. Isso indica que o transporte anômalo de energia foi introduzido no sistema pela não conservação da energia. Como não há o crescimento da transmissão de energia com o aumento do comprimento do sis-

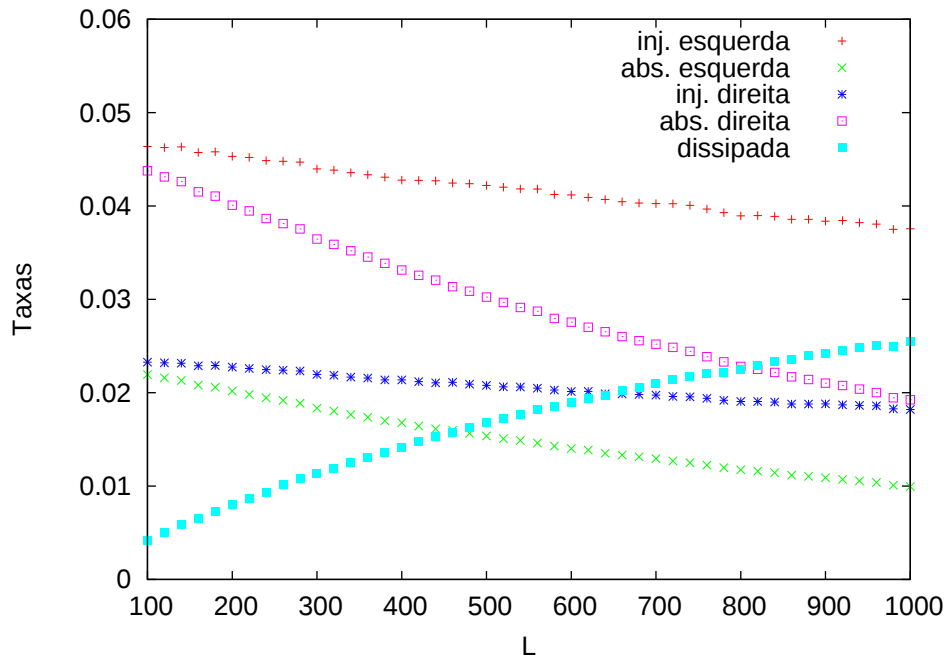


Figura 3.6: Dependência da condutividade térmica com o comprimento do sistema, modelo com dissipação do momentum.

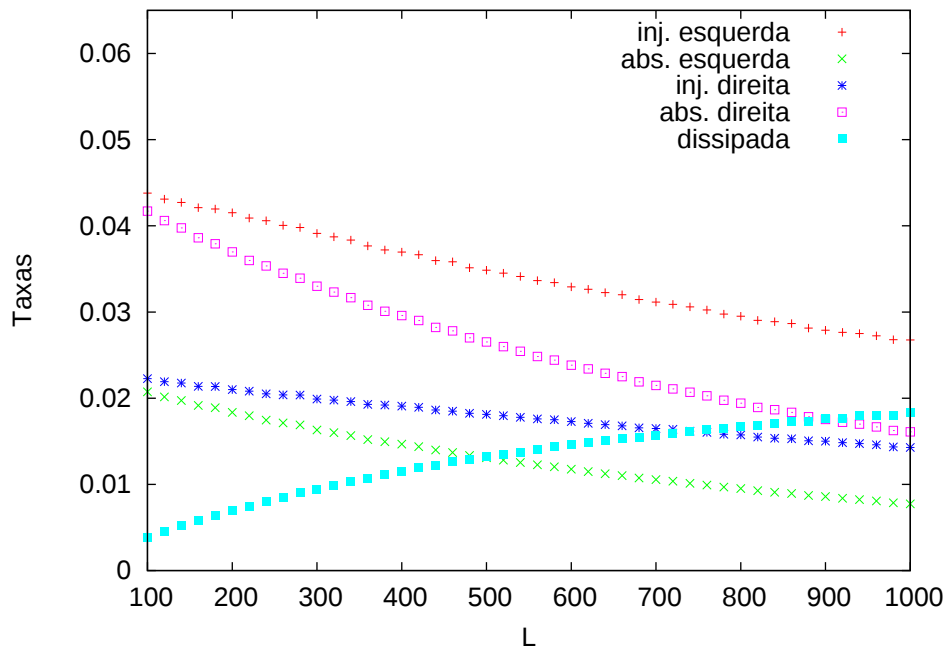


Figura 3.7: Dependência da condutividade térmica com o comprimento do sistema, modelo com conservação do momentum.

tema, e a condutividade térmica não apresenta divergência. Esse comportamento foi obtido para ambos os sistemas, independente da conservação do momento [11].

Pasini e Cordero [22], usando um modelo de gás granular, entre duas paredes térmicas,

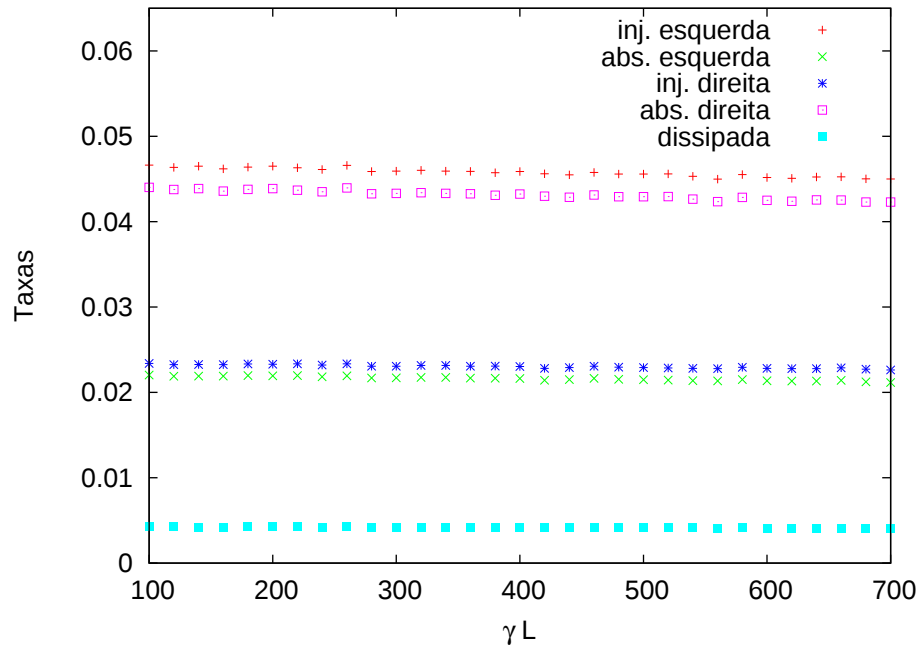


Figura 3.8: Dependência da condutividade térmica com o comprimento do sistema com reescala, modelo com dissipação do momentum.

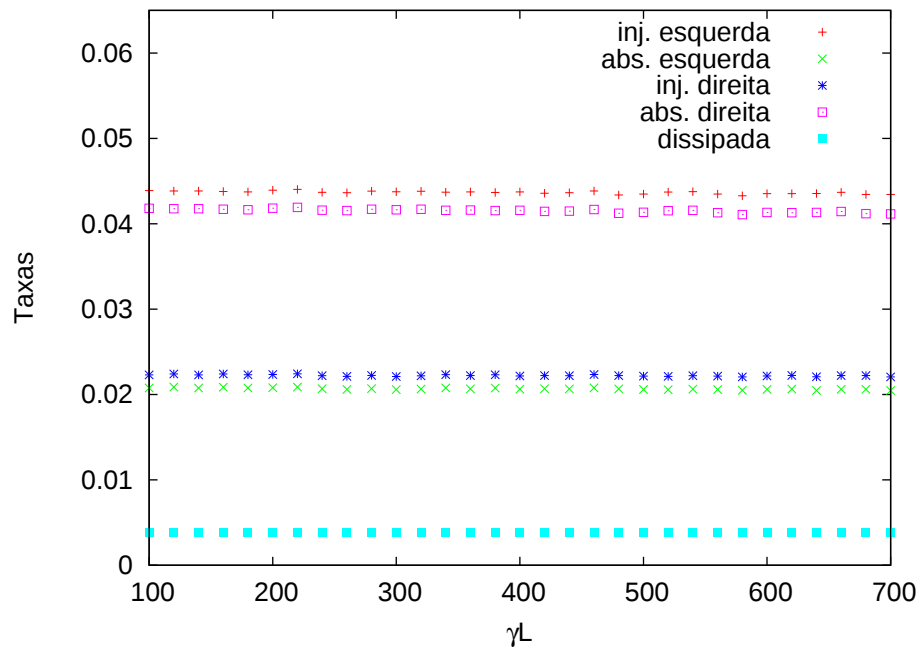


Figura 3.9: Dependência da condutividade térmica com o comprimento do sistema com reescala, modelo com conservação do momentum.

onde os grãos apresentam choques inelásticos (usando coeficiente de restituição) semelhante ao modelo aqui utilizado com conservação de momento, os autores obtiveram a formação de regiões com maior densidade de grãos. Utilizando os dois modelos estudados calculamos a

média quadrática da densidade local  $\langle \rho^2 \rangle$  para o sistema ao longo do tempo. A densidade local foi calculada dividindo-se o sistema em partições e calculando a densidade local de cada partição. Essa média em termos físicos representa a concentração dos grãos em regiões do sistema. Nossas simulações foram realizadas para sistemas com várias diferenças de temperatura entre as paredes. Os resultados obtidos estão apresentados nas Figuras 3.10 e 3.11.

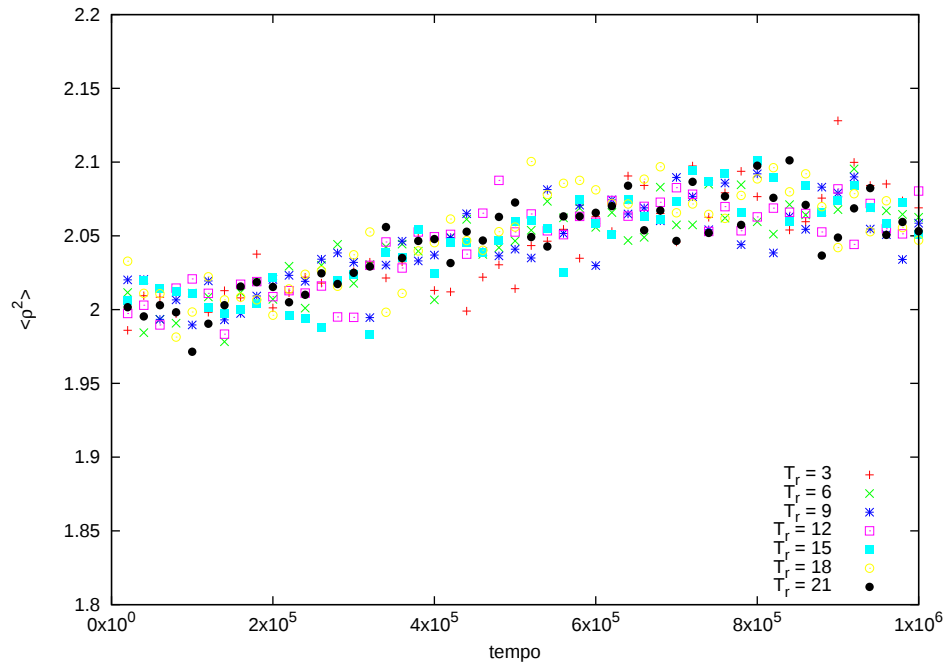


Figura 3.10: Distribuição de densidade, modelo com dissipação do momentum. A temperatura da parede esquerda foi mantida em 3 enquanto a temperatura da parede direita foi variada. Ver legenda no gráfico. Inicialmente o sistema estava com temperatura 1 e densidade 1.

Para ambos os sistemas há a tendência de formação de zonas com maior densidade de grãos, essa tendência pode ser notada pelo aumento do valor médio da densidade local que, para tempos longos, atinge um valor máximo e fica oscilando em torno desse valor. Para o sistema com dissipação dependente da velocidade absoluta dos grãos a diferença de temperatura entre as paredes não influencia a formação de aglomerados. O sistema com dissipação dependente da velocidade relativa dos grãos atinge valores maiores de densidade média local, e a tendência de formação de aglomerados cresce conforme cresce a diferença de temperatura entre as paredes do sistema. Isso indica que a conservação do momento pode ser responsável pela formação de aglomerados, esse argumento concorda com os resultados obtidos em [22], onde a formação de aglomerados foi observada porém usando um modelo de choques inelásticos, onde as velocidades finais dos grãos são calculadas através do coeficiente de restituição e portanto apresentando conservação de momento.

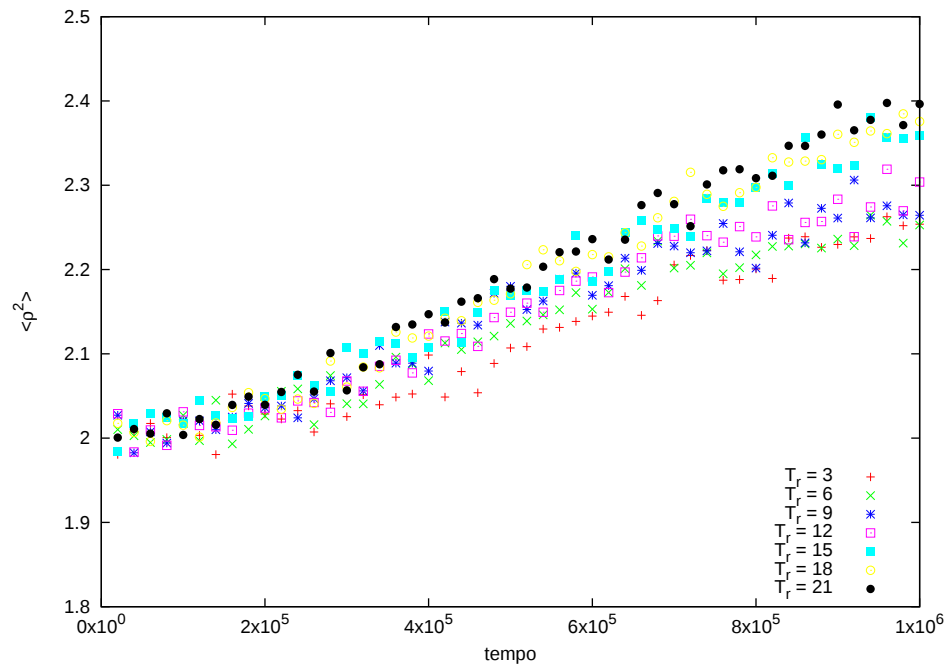


Figura 3.11: Distribuição de densidade, modelo sem dissipação do momentum. A temperatura da parede esquerda foi mantida em 3 enquanto a temperatura da parede direita foi variada. Ver legenda no gráfico. Inicialmente o sistema estava com temperatura 1 e densidade 1.

### 3.2 Propagação de pulsos não-lineares em uma cadeia unidimensional de anéis toroidais.

Em uma cadeia de grãos, um impacto em uma das extremidades da cadeia vai comprimir os demais grãos e gerar uma onda de compressão. Essa onda vai transportar a energia do impacto através da cadeia. O momento e a energia do primeiro impacto, assim como a disposição inicial dos grãos na cadeia vai determinar as propriedades da onda que se formará. A seguir são apresentados 3 casos de cadeias granulares com e sem precompressão, sujeitas a um impacto em uma de suas extremidades.

No primeiro caso que estudamos, a propagação de uma onda formada pelo choque de um grão com uma das extremidades de uma cadeia de grãos inicialmente sem compressão mas em contato. Esse estado sem precompressão é chamado de vácuo sônico pois nesse tipo de cadeia granular não é possível a propagação de ondas sonoras [19]. Nesse caso vai surgir uma onda solitária com uma largura de poucos grãos, que se propaga ao longo de toda a cadeia com velocidade constante.

A Figura 3.12 mostra a evolução temporal da onda solitária. É mostrado o momento de cada grão  $K$ , ao longo do tempo para vários instantes diferentes. O pulso está compreendido entre

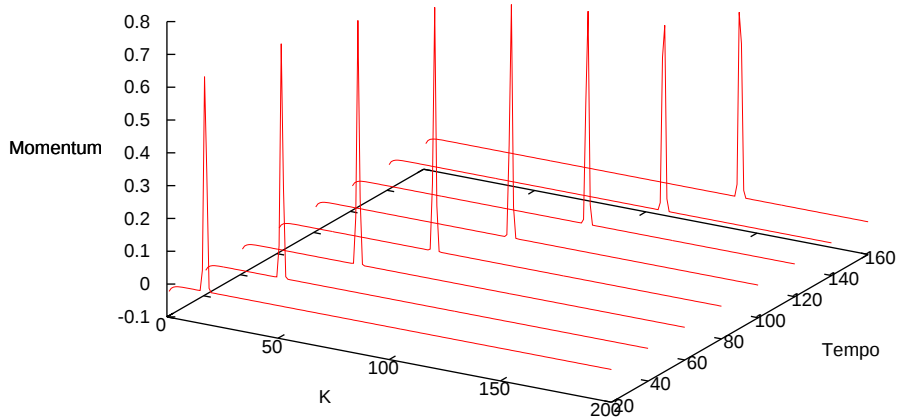


Figura 3.12: Dinâmica da propagação de uma onda solitária em uma cadeia inicialmente em estado de vácuo sônico.

poucos grãos e após a passagem do pulso os grãos voltam ao repouso na posição de equilíbrio.

Comparamos a velocidade da onda solitária prevista pela aproximação binária com os resultados obtidos através de simulações numéricas para cadeias de anéis toroidais com e sem precompressão. Para o caso sem precompressão, após um transiente nos primeiros grãos da cadeia, o pulso se propaga com velocidade constante ao longo de toda a rede. A figura 3.13 mostra a relação do grão  $K$  onde reside o pulso com o tempo. Sendo claramente linear o pulso se propaga com velocidade constante.

Na Figura 3.14 está a comparação dos resultados numéricos com os resultados obtidos através da aproximação binária, assim como o erro relativo dado por:  $\varepsilon = |(c_b - c_n)/c_b|$ , onde  $c_b$  é a velocidade do pulso obtida com a aproximação binária e  $c_n$  é a velocidade do pulso obtida numericamente. Pode-se observar que a aproximação binária apresenta uma boa concordância com os resultados numéricos, com erro relativo sempre inferior a 2,5%. A medida que o parâmetro  $\tilde{B}$  aumenta a aproximação binária apresenta resultados melhores. O aumento de  $\tilde{B}$  significa um potencial de grãos mais duros. Portanto para altos valores de  $\tilde{B}$  o pulso se torna mais estreito, fazendo com que a aproximação binária apresente melhores resultados com valores altos do parâmetro  $\tilde{B}$ . Em [15] foi desenvolvida a aproximação binária para potenciais do tipo  $V = \frac{a}{n} \delta^n$  e foi mostrado que o erro relativo diminui para valores maiores de  $n$ . Os valores máximos do erro relativo encontrados foram de 2%.

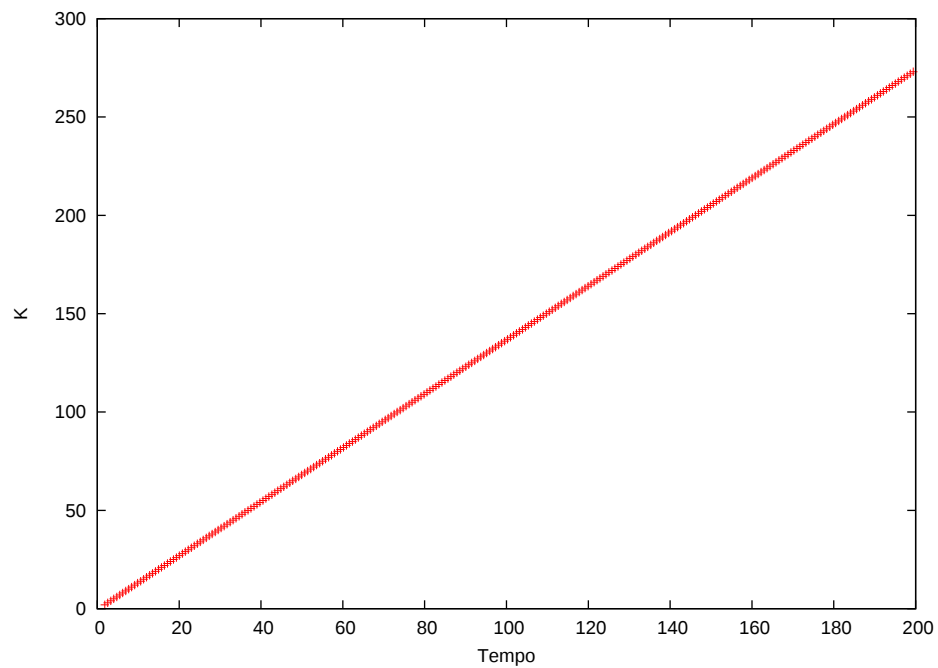


Figura 3.13: Posição do pulso ao longo do tempo em uma cadeia inicialmente em estado de vácuo sônico.

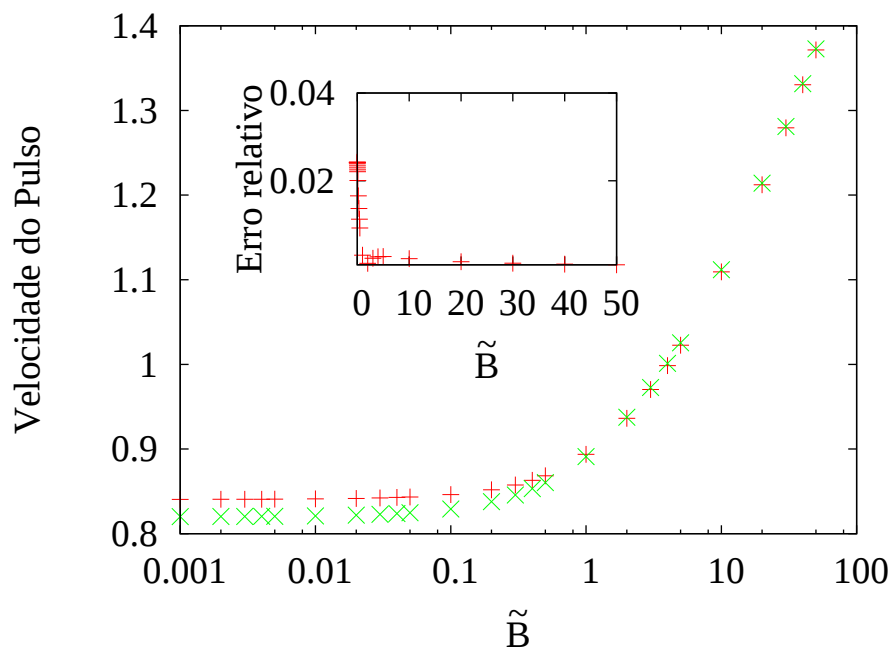


Figura 3.14: Velocidade do pulso em cadeia sem precompressão para diferentes valores do parâmetro  $\tilde{B}$ . Os pontos indicados por + (vermelhos) são as velocidades obtidas através da simulação e os pontos indicados por x (verdes) são as velocidades calculadas através da aproximação binária.

Para o caso com precompressão, a dinâmica do sistema se mostra mais complexa. Após o impacto, o pulso primário, desloca-se ao longo da cadeia, e deixa os grãos oscilando após

sua passagem. Na Figura 3.15, está mostrada a dinâmica da propagação dessa onda. O pulso primário se propaga com velocidade constante e a medida que a cauda de grãos oscilantes cresce, menor fica as velocidades dos grãos oscilando. O pulso primário compreende uma quantidade maior de grãos que a onda solitária observada em uma cadeia sem precompressão. Como a aproximação binária supõe um pulso estreito esperamos que essa modificação resulte em um erro maior nos resultados obtidos com essa aproximação.

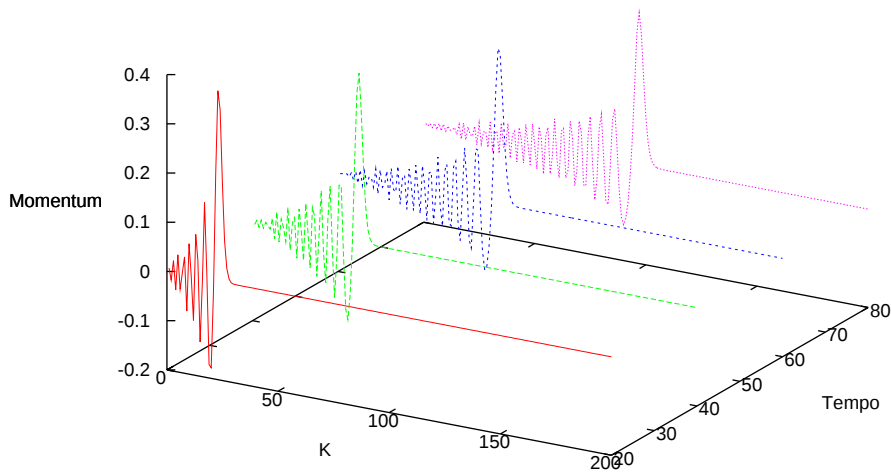


Figura 3.15: Dinâmica da propagação de uma onda em uma cadeia inicialmente sob precompressão.

No caso da cadeia com precompressão constante, embora a dinâmica do sistema seja diferente, o pulso também vai se propagar com velocidade constante e a aproximação binária também será válida, como mostrado na Figura 3.16. Nesta figura estão apresentados os resultados de simulações numéricas comparados com os resultados da aproximação binária para vários valores diferentes da precompressão inicial  $\delta$ .

Para valores maiores de precompressão o pulso se propaga mais rápido e largura do pulso cresce. Essa tendência de alargamento do pulso para maiores valores de compressão significa um maior erro relativo. A comparação foi feita para 3 valores de  $\tilde{B}$ :  $\tilde{B} = 10^{-5}$ ,  $\tilde{B} = 4$  e  $\tilde{B} = 20$ . Esses valores representam 3 regimes diferentes do sistema, quando o termo do pontencial com potência 5/2 domina ( $\tilde{B} = 10^{-5}$ ), quando o termo com potencia 7 domina ( $\tilde{B} = 20$ ) e quando os dois termos apresentam contribuições de mesma ordem de grandeza ( $\tilde{B} = 4$ ). Podemos ver que o erro relativo para o intervalo de precompressão estudado é sempre inferior a 8%, mostrando que a aproximação binária também é uma boa ferramenta para o caso de cadeia sujeita a

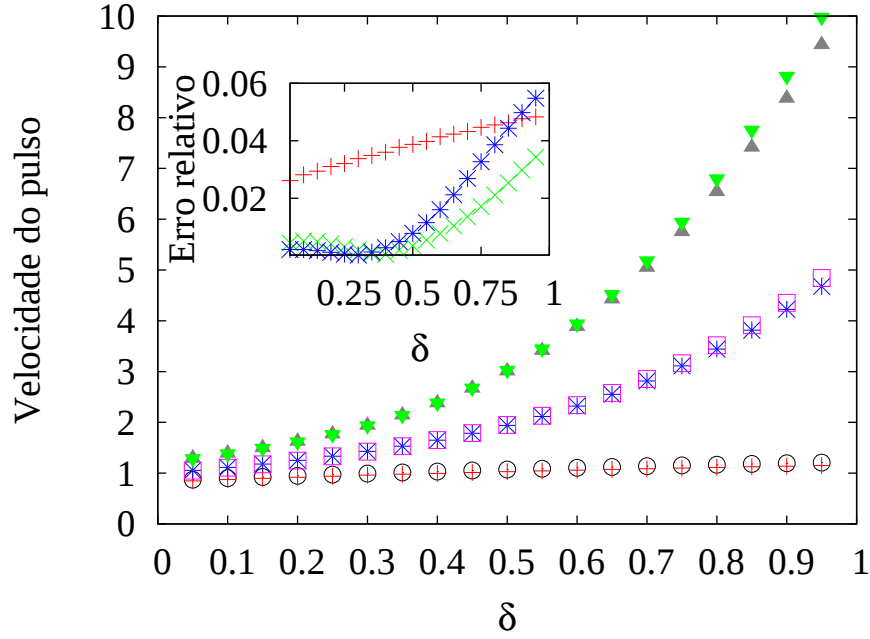


Figura 3.16: Velocidade do pulso para diferentes valores de precompressão inicial. Os pontos representados por + vermelhos e círculos pretos são as velocidades do pulso para um sistema onde o parâmetro  $\tilde{B} = 1 \times 10^{-5}$ , sendo o + vermelho o resultado da simulação e os círculos pretos o resultado da aproximação binária. Os pontos representados por \* azuis e quadrados vazados rosas são as velocidades do pulso para um sistema onde o parâmetro  $\tilde{B} = 4$ , sendo \* azul o resultado da simulação e quadrado vazado rosa o resultado da aproximação binária. Os pontos representados por triângulos com pontas para cima cinzas e triângulos com pontas para baixo verdes são as velocidades do pulso para um sistema onde o parâmetro  $\tilde{B} = 20$ , sendo triângulos com pontas para cima cinzas o resultado da simulação e triângulos com pontas para baixo verdes o resultado da aproximação binária.

precompressão. Os valores de  $\delta$  utilizados correspondem a até 13% do diâmetro dos anéis toroidais, sendo assim o intervalo utilizado deve compreender grande parte dos casos que podem ser estudados experimentalmente.

Para uma cadeia granular vertical sob ação da gravidade teremos que a compressão inicial de cada grão vai depender de sua altura na coluna, de modo que os grãos mais próximos à base da coluna estão sujeitos a uma precompressão maior. Desse modo, como foi visto para grãos precomprimidos que quando maior a precompressão, maior a velocidade de propagação do pulso. É esperado que o pulso não se propague com velocidade constante ao longo da coluna de grãos. Esse fato foi obtido nas simulações numéricas. O formato da onda se assemelha ao caso da cadeia com precompressão uniforme em alguns aspectos. Há a formação de um pulso primário e após a passagem desse pulso há a oscilação dos grãos. Porém diferente do caso de precompressão constante ao longo da cadeia, depois de um certo tempo os grãos atingem

novamente a posição de equilíbrio e a onda se propaga com o mesmo formato através da cadeia. Os perfis da dinâmica da propagação da onda em coluna granular sob ação gravitacional estão apresentados na Figura 3.17.

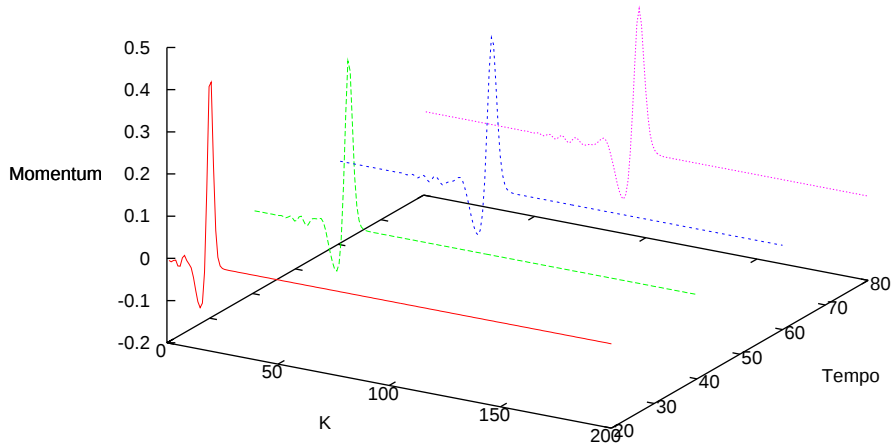


Figura 3.17: Dinâmica da propagação de uma onda em uma cadeia granular sob ação da gravidade.

A aplicação da aproximação binária para o caso de uma cadeia vertical sob ação da gravidade se dá de modo muito semelhante ao caso da cadeia sujeita a precompressão constante. O procedimento é modificado apenas pelo fato que a força de precompressão da altura em que se encontra o pulso. A Figura 3.18 apresenta a comparação dos resultados obtidos através da integração numérica das equações de movimento e os resultados obtidos através da aproximação de choques binários.

Consideramos os três seguintes casos  $\tilde{B} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $\tilde{B} = 4$  e  $\tilde{B} = 20$ . A modificação do valor de  $\tilde{B}$  fisicamente implica mudanças na velocidade inicial do primeiro grão nas variáveis originais e mudanças nas propriedades físicas do material dos grãos. Esses três valores foram escolhidos por representarem, cada um, diferentes regimes onde o termo com potencia  $3/2$  domina ( $\tilde{B} = 1 \times 10^{-5}$ ), onde o termo com potencia 7 domina ( $\tilde{B} = 20$ ) e onde os dois termos possuem contribuições de mesma ordem ( $\tilde{B} = 4$ ). Para o caso de valores de  $\tilde{B}$  maiores temos uma velocidade inicial do primeiro grão maior nas variáveis iniciais e portanto é esperado que o pulso se propague com uma velocidade maior, que foi um resultado que de fato encontramos.

É possível observar que a velocidade de propagação do pulso depende da altura em que

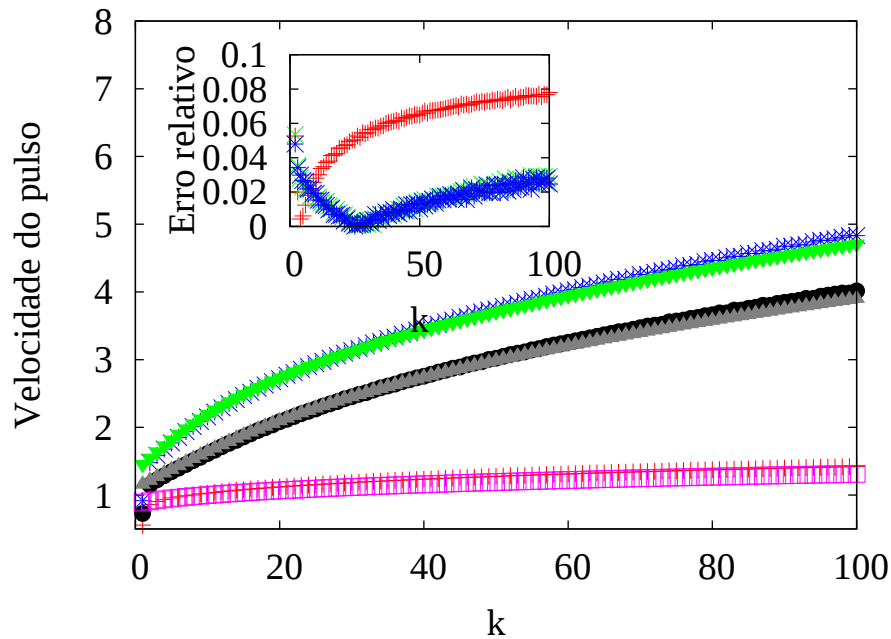


Figura 3.18: Velocidade do pulso em cadeia vertical sob efeito da gravidade. Os pontos representados por + vermelhos e quadrados vazados rosas são as velocidades do pulso para um sistema onde o parâmetro  $\tilde{B} = 1 \times 10^{-5}$ , sendo o + vermelho o resultado da simulação e os quadrados vazados rosas o resultado da aproximação binária. Os pontos representados por triângulos com pontas para cima cinzas e círculos pretos são as velocidades do pulso para um sistema onde o parâmetro  $\tilde{B} = 4$ , sendo triângulos com pontas para cima cinzas o resultado da simulação e círculos pretos o resultado da aproximação binária. Os pontos representados por \* azul e triângulos com pontas para baixo verdes são as velocidades do pulso para um sistema onde o parâmetro  $\tilde{B} = 20$ , sendo \* azul o resultado da simulação e triângulos com pontas para baixo verdes o resultado da aproximação binária.

o pulso se encontra na coluna de grãos, atingindo velocidades maiores conforme aumenta a precompressão nos grãos. A aproximação binária captura essa característica desse sistema e prevê a velocidade de propagação do pulso com uma boa precisão. Os resultados para esse sistema estão apresentados na figura 3.18. No gráfico menor está apresentado o erro relativo para os vários pontos em que os dois resultados foram comparados. O erro relativo sempre se apresenta menor que 10% e na maior parte dos pontos é menor que 5%.

## 4 *Conclusões e Perspectivas*

O transporte de calor em sistemas unidimensionais é um problema ainda em aberto. Os mecanismos que levam a violação da lei de Fourier para sistemas unidimensionais são ainda desconhecidos, assim como as condições para a validade ou violação dessa lei ainda não são claros. A conservação de momento é geralmente associada a divergência com o comprimento do sistema da condutividade térmica em sistemas unidimensionais [26]. O nosso estudo considerou dois sistemas de gases granulares não conservativos em energia. Um deles onde o momento também não se conserva e o outro cujo momento é conservado. Para ambos obtemos um fluxo de calor finito e gradiente de temperatura constante, implicando na condutividade térmica não divergente, diferente do que foi observado em outros sistemas unidimensionais dissipativos [26, 27, 28]. Os resultados das nossas simulações numéricas para os dois modelos estudados mostram que esse comportamento é independente da conservação de momentum durante os choques.

Foi investigado também que para os modelos de gases granulares estudados, há uma tendência de formação de regiões do sistema com maior concentração de grãos, um resultado semelhante foi obtido por Cordeiro [22]. O modelo utilizado por Cordeiro apresenta um gás granular diluído, ou seja, só há a ocorrência de choques binários. Os grãos apresentam choques inelásticos, modelados através de um coeficiente de restituição, que é a razão entre as velocidades posteriores e anteriores aos choques. Nosso caso apresenta uma dissipação modelada através de um termo viscoso  $\gamma$ , para o caso do potencial harmônico ( $V(\delta) = \delta^2$ ), podemos obter uma expressão para o coeficiente de restituição em função da viscosidade  $\gamma$ . Para outros tipos de potencial o coeficiente de restituição também depende da velocidade relativa dos grãos.

O outro problema que estudamos foi a propagação dos pulsos em cadeias de anéis toroidais que apresentam um potencial de interação de dupla lei de potências. Para três condições diferentes, para o vácuo sônico há a propagação de uma onda solitária estreita que viaja por toda a cadeia mantendo o mesmo formato. Para uma cadeia sujeita a uma precompressão constante há a formação de uma onda primária que mantém sua forma original e a medida que viaja pela cadeia deixa uma cauda de grãos oscilantes que diminuem a amplitude de oscilação a medida

que o pulso viaja pela cadeia, espalhando a energia cinética que causa as oscilações com os demais grãos da cadeia. E para o caso da cadeia precomprimida por uma força gravitacional, temos a formação de um pulso primário e uma pequena cauda que se propaga junto com o pulso primário ao longo da cadeia mantendo o mesmo formato.

A velocidade de propagação de pulsos em cadeias granulares pode ser calculada com uma boa precisão utilizando a aproximação binária. Duas modificações da aproximação binária original [15] foram aplicadas. Primeiro a aproximação binária foi utilizada para um potencial de dupla lei de potências, válido para cadeias granulares onde anéis toroidais agem como molas não lineares, até então a aproximação binária só tinha sido aplicada para o potencial de Hertz. O potencial de dupla lei de potências (anéis toroidais) foi escolhido por haver dados experimentais [13] disponíveis. Dessa forma foi possível mostrar que a aproximação funciona para outros tipos de potenciais além do potencial de Hertz. Além disso e talvez mais importante foi a aplicação da aproximação binária para o caso de cadeias sujeitas a precompressão. A precompressão faz com que a energia seja transportada através de compressões de mais de dois grãos ao mesmo tempo, mas ainda assim a aproximação binária mostra bons resultados, contudo apresentando erros relativos maiores quando a precompressão cresce. Para o caso de uma precompressão uniforme o erro cresce quando a precompressão é maior e para o caso onde a cadeia está sujeita a ação da gravidade, o erro cresce a medida que o pulso se propaga para a extremidade da cadeia que apresenta maior compressão.

Os próximos avanços para o desenvolvimento dos estudos de propagação de pulsos em meios granulares apontam para uma modificação na aproximação binária para sistemas granulares não conservativos, onde ocorre dissipação de energia devido a choques inelásticos. A aplicação da aproximação binária nesse tipo de sistema se torna um desafio por não apresentar a conservação de energia que na aproximação binária é uma condição muito importante e a energia dissipada depende da velocidade das partículas durante os choques, tornando difícil a obtenção de um comportamento da energia do sistema a medida que os choques ocorrem.

Além das aplicações da aproximação binária em sistemas unidimensionais, a propagação de ondas em meios granulares bi e tridimensionais também é um campo bastante inexplorado. Em [19] são citados vários resultados experimentais e simulações numéricas que mostram que a dinâmica de ondas em meios granulares bi e tridimensionais é profundamente afetada pela distribuição espacial dos grãos e a estrutura como as forças são distribuídas [33, 34].

Essas foram nossas contribuições para as atuais discussões sobre o transporte de calor em sistemas unidimensionais dissipativos e propagação de pulsos em cadeias granulares unidimensionais. O estudo desses problemas em sistemas granulares tem despertado o interesse da comu-

nidade científica nos últimos anos, apresentando ainda muitas lacunas principalmente no que diz respeito ao tratamento analítico desses problemas.

## *Referências Bibliográficas*

- [1] Foust, A.S. et al. *Princípios das Operações Unitárias*. 3ed. Rio de Janeiro: LTC, 2000.
- [2] Duran, J. *Sands, powders and grains: an introduction to the physics of granular materials*. 1. ed. New York: Springer, 2000.
- [3] Jaeger, H. M., Nagel, S. R., Behringer, R. P. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics* **68**, n. 4, p. 1259–1273, (1996).
- [4] Umbanhowar, P. B. Shaken sand - a granular fluid? *Nature* **424**, p. 886–887, (2003).
- [5] Ennis, B. J., Green J. and Davis R., *Particle Technology* **90**, 32, (1994).
- [6] Knowlton, T. M.; Carson J. W.; Klinzing G. E. and Yang W. C., *Particle Technology* **90**, 44, (1994).
- [7] Coulomb, C., in *Memoir de Mathematique et de Physique*, Vol. 7 (Academie des Sciences, L’Imprimerie Royale, Paris) p. 343, (1773).
- [8] Faraday, M., *Phil. Trans. R. Soc. London* **52**, 299, (1831).
- [9] Reynolds, O., *Philos. Mag.* **20**, 469, (1885).
- [10] D’Anna, G., Mayor P., Barrat, A., Loreto, V. and Nori, F., Observing brownian motion in vibration-fluidized granular matter, *Nature* **424**, 909-912, (2003).
- [11] I. L. D. Pinto, A. Rosas, K. Lindenberg, Energy transport in a one-dimensional granular gas, *Phys. Rev. E* **79**, 061307 (2009).
- [12] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, 3rd ed. (Pergamon Press, Oxford, 1986).
- [13] E. B. Herbold and V. F. Nesterenko, Solitary and shock waves in discrete strongly nonlinear double power-law materials, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 261902 (2007).
- [14] I. L. D. Pinto, A. Rosas, K. Lindenberg, A. Romero, Pulse propagation in a chain of O-rings with and without precompression. *Phys. Rev. E* **82**, 031308 (2010).
- [15] A. Rosas and K. Lindenberg, Pulse velocity in a granular chain, *Phys. Rev. E* **69**, 037601 (2004).
- [16] U. Harbola, A. Rosas, M. Esposito and K. Lindenberg, Pulse propagation in tapered granular chains: An analytic study, *Phys. Rev. E* **80**, 031303 (2009).
- [17] U. Harbola, A. Rosas, A. H. Romero, M. Esposito and K. Lindenberg, Pulse propagation in decorated granular chains: An analytical approach, *Phys. Rev. E* **80**, 051302 (2009).

- [18] U. Harbola, A. Rosas, A. H. Romero and K. Lindenberg, Pulse propagation in randomly decorated chains, *Phys. Rev. E* **82**, 011306 (2010).
- [19] V. F. Nesterenko, *Dynamics of Heterogenous Materials* (Springer, New York, 2001).
- [20] A. Rosas and K. Lindenberg, Pulse dynamics in a chain of granules with friction, *Phys. Rev. E* **68**, 041304 (2003).
- [21] E. Falcon, C. Larouche, S. Fauve and C. Coste, Collision of a 1-D column of beads with a wall, *Eur. Phys. J. B.* **5**, 111-131 (1998).
- [22] J. M. Pasini and P. Cordero, Clustering and fluidization in a one-dimensional granular system: Molecular dynamics and direct-simulation Monte Carlo method, *Phys. Rev. E* **63**, 041302 (2001).
- [23] R. Ramírez and P. Cordero, Kinetic description of a fluidized one-dimensional granular system, *Phys. Rev. E* **59**, 656 (1999).
- [24] A. Rosas, D. ben Avraham and K. Lindenberg, Velocity distribution in a viscous granular gas, *Phys. Rev. E* **71**, 032301 (2005).
- [25] Y. Du, H. Li, L. P. Kadanoff, Breakdown of hydrodynamics in a one-dimensional system of inelastic particles, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1268 (1995)
- [26] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Thermal conduction in classical low-dimensional lattices, *Phys. Rep.* **377**, 1 (2003).
- [27] T. Prosen and D. K. Campbell, Momentum conservation implies anomalous energy transport in 1D classical lattices, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2857 (2000).
- [28] O. Narayan and S. Ramaswamy, Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 200601 (2002).
- [29] R. Tehver, F. Toigo, J. Koplik, and J. R. Banavar, Thermal walls in computer simulations, *Phys. Rev. E* **57**, R17 (1998).
- [30] M. Hjorth-Jensen, *Computational Physics*, University of Oslo (2005).
- [31] Gear C. W., The automatic integration of ordinary differential equations, *Communications of the ACM* Volume **14** Number 3, March 1971.
- [32] T. Biben, J. Piasecki, Influence of dissipation on stationary states, *Phys. Rev. E* **59(2)**, 2192, (1999).
- [33] M.M. Mehrabadi, S. Nemat-Nasser Stress, Dilatancy and fabric in granular materials, *Mechanics of Materials* **2**, (n. 2), pp. 155-61 (1983).
- [34] Y. Zhu, A. Shukla, M. H. Sadd, The effects of microstructural fabric on dynamic load transfer in two-dimensional assemblies of elliptical particles, *J. Mech. Phys. Solids* **44**, no. 8, pp 1283-1303 (1996).