

Universidade Federal do Ceará
Centro de Ciências - Departamento de Física

Um Modelo para a Formação de Padrões em Processos de Erosão-Deposição

Daniela de Oliveira Maionchi

Fortaleza

2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Universidade Federal do Ceará
Centro de Ciências - Departamento de Física

Tese de Doutorado

Um Modelo para a Formação de Padrões em Processos de Erosão-Deposição

Daniela de Oliveira Maionchi

Orientador: Raimundo Nogueira da Costa Filho

Coorientador: Hans Jürgen Herrmann

*Tese apresentada ao Departamento de Física da
Universidade Federal do Ceará como requisito parcial
para a obtenção do título de Doutor em Ciências*

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho (orientador) - UFC

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior - UFC

Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo - UFC

Prof. Dr. Luciano Rodrigues da Silva - UFRN

Prof. Dr. Andre Maurício Conceição de Sousa -UFS

Dedico esta tese a Elch,
Bär e Reiher, ou melhor,
Sofia, Johannes e Teresa

Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao professor Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho, pelo apoio, orientação e incentivo à realização deste trabalho.

Aos professores Dr. José Soares Andrade Jr. e Dr. Hans Jürgen Herrmann pela coorientação.

Ao professor Dr. Paulo de Tarso Cavalcante Freire, coordenador da pós-graduação do Departamento de Física.

Aos professores do curso de doutorado, pela valiosa formação.

Ao colega Apiano, pelo auxílio com o FLUENT.

Aos colegas Eric Parteli, Andres Olarte e Frank Raischel, pela companhia e atenção na minha estada na Alemanha.

Ao professor Dr. André Maurício Conceição de Sousa, pelas idéias e valiosas opiniões sobre este e outros trabalhos.

Ao meus amigos, Tayroni e Saulo Davi, a quem devo a companhia, toda a grande ajuda e as boas gargalhadas durante as horas cansativas de trabalho.

Aos caros amigos do Saturno, Roberto, Ana Teresa, Valmir e Philipe.

Às secretárias da pós-graduação, Ana Cleide e Rejane, por toda ajuda quando necessário.

Ao CNPq e ao DAAD, pelo suporte financeiro.

À minha mãe, Maria Teresa, a quem eu devo a mais profunda gratidão e admiração. Sem o seu apoio, certamente eu teria fraquejado durante as dificuldades.

Ao meu marido, Johannes, pela paciência, apoio e carinho, apesar da distância.

E finalmente, a minha princesa Sofia Helena, a quem dedico esse trabalho.

*"Sabido é que todo efeito tem sua causa,
e esta é uma universal verdade,
porém, não é possível evitar alguns erros de juízo,
ou de simples identificação,
pois acontece considerarmos que este efeito provém daquela causa,
quando afinal ela foi outra,
muito fora do alcance do entendimento que temos
e da ciência que julgávamos ter."*

José Saramago

Resumo

Neste trabalho, estudamos a formação de padrões através de simulações computacionais. Propomos um modelo que descreve o processo de erosão-deposição em um sistema de monocamada. Analisamos o processo de erosão existente na natureza sob o ponto de vista microscópico, ou seja, consideramos um meio granular com partículas esféricas bem definidas. Um fluido escoar através desse sistema devido a um gradiente de pressão. Utilizamos o software FLUENT para determinar o perfil de velocidade e o fluxo do fluido na rede de capilares gerada entre as partículas e, conseqüentemente, a permeabilidade de cada canal do sistema. Consideramos que a única força que age sobre cada partícula se deve ao fluido e é dada pela Lei de Stokes. Ao deslocarmos todas as partículas do sistema, fazemos duas considerações distintas quanto a interação entre elas: na primeira, o atrito entre os grãos é grande e na segunda, o atrito é nulo. Conforme o sistema evolui no tempo, os padrões obtidos dependem da porosidade considerada. Os padrões obtidos com a primeira consideração são semelhantes a alguns padrões já obtidos experimentalmente, enquanto a formação de canais observada com a segunda consideração é consistente com o que é observado em diversos fenômenos naturais.

Abstract

In this work, we study pattern formation through computer simulations. We propose a model that describes the erosion-deposition process in an one-layer system. We analyze the erosion process existing in nature from the microscopic point of view, what means that we consider a granular medium with well-defined spherical particles. A fluid flows through this system due to a gradient of pressure. We use the software FLUENT to determine the velocity profile and the flux of the fluid in network of capillaries created between the particles and hence, the permeability of each channel of the system. We consider that the only force acting on each particle is due to the fluid and is given by the Stokes Law. As the particles of the system are dislocated, we make two different considerations about interaction between them: in the first one, the friction between the grains is large and in the second one, the friction is null. As the system evolves in time, patterns obtained depend on the porosity considered. The patterns obtained with the first consideration are similiar to the patterns already obtained experimentally, while the formation of channels observed using the second one is consistent with that observed in a variety of natural phenomena.

Lista de Figuras

- 1.1 Acima: erosão causada pela água e pelo vento (www.achetudoeregiao.com.br/ANIMAIS/erosao.htm, www.univ-ab.pt/disciplinas/dchs/gfa2677/index.htm). Abaixo: formações por erosão em Theodore Roosevelt, National Park, North Dakota, USA e em Blue Mesa, Petrified Forest National Park, Arizona, USA (www.terrageria.com/parks). p. 3
- 1.2 Padrões observados na praia de Cumbuco, Fortaleza, Brasil. p. 4
- 1.3 Aparato experimental (1). Uma chapa quadrada de $130 \times 130 \text{mm}^2$. Uma suspensão de óxido de alumínio em pó de grãos com diâmetro médio de $d \simeq 30 \mu\text{m}$ e densidade $\rho \simeq 2.75 \text{g/cm}^3$ p. 5
- 1.4 Padrões observados no experimento de erosão (1). As estrias escuras correspondem às regiões onde o meio granular sofreu erosão. p. 6
- 1.5 (a) Diagrama de fases localizando os diferentes padrões no espaço ângulo θ - velocidade V e (b) ângulo característico φ em função da velocidade V para $\theta = 30^\circ$ (1). p. 7
- 2.1 O fluido flui no canal de comprimento L devido à diferença de pressão entre as extremidades a e b . A taxa de fluxo Q é calculada na seção de área A p. 27
- 2.2 (a) A triangulação não obedece as condições de Delaunay (as circunferências contêm mais de 3 pontos). (b) Triangulação de Delaunay para 4 pontos. p. 30
- 2.3 (a) A triangulação de Delaunay e (b) a rede de Voronoi. p. 31

2.4	Coeficiente de arrasto de uma esfera em função do número de Reynolds. Para pequenos valores de Re , a lei de Stokes é válida (2).	p. 33
2.5	Coeficiente de arrasto de uma esfera em função do número de Reynolds. Comparação entre a teoria de Newton e medidas recentes (3).	p. 34
2.6	Fluxo através de uma esfera (da direita para a esquerda) para diferentes números de Reynolds (4). Se um fluido com escoamento laminar flui em torno de um obstáculo, ele exerce uma força sobre o obstáculo. As forças de atrito aceleram o fluido para trás (contra a direção do escoamento) e o obstáculo para frente (na direção do fluido).	p. 36
3.1	Uma rede aleatória regularizada para 64 grãos com $l_0 = 2.7$ e sua triangulação (a) e rede de capilares (b).	p. 44
3.2	A distribuição de velocidade é determinada no canal de comprimento l , altura d e largura w . As condições de contorno são periódicas na direção x . A velocidade média do fluido v_f é calculada na seção retangular (5).	p. 46
3.3	Cada partícula do sistema é deslocada devido ao fluido que flui através de vários canais ao seu redor.	p. 52
3.4	(a) O vetor da força \vec{F} sobre uma partícula. (b) A força no ponto de contato entre duas partículas e a sua decomposição nas direções tangencial e radial (\vec{F}_t e \vec{F}_r).	p. 57
4.1	Fluxo Q num canal de comprimento l em função de ΔP para $w/d = 1.5$ e $l/d = 4.0$. À esquerda $w = 3.0$, $d = 2.0$ e $l = 8.0$ e à direita $w = 0.3$, $d = 0.2$ e $l = 0.8$.	p. 63
4.2	Velocidade média v_f num canal de comprimento l em função de ΔP para $w/d = 1.5$ e $l/d = 4.0$. À esquerda $w = 3.0$, $d = 2.0$ e $l = 8.0$ e à direita $w = 0.3$, $d = 0.2$ e $l = 0.8$.	p. 64

4.3	A distribuição de velocidade obtida numericamente com o FLUENT para (a) $w/d = 1.05$, (b) $w/d = 1.5$ e (c) $w/d = 2.0$. Três planos transversais da distribuição são mostrados para cada uma dessas situações, mais especificamente em $y/d = 1/4$, $1/2$ e $3/4$, da esquerda para a direita. A escala de cores mostra que a variação da cor azul para a cor vermelha corresponde a magnitudes de velocidade mais baixas para mais altas. A velocidade é maior na região de estrangulamento. A velocidade se torna maior na região uniforme para valores maiores de y	p. 66
4.4	Razão das permeabilidades κ/κ_0 em função de w/d . Os pontos da simulação obtidos com o FLUENT são (a) ajustados pela função $f(w/d)$ e (b) interpolados usando <i>cubic spline</i>	p. 67
4.5	Razão dos fluxos Q/Q_0 em função de w/d . Os pontos da simulação obtidos com o FLUENT são (a) ajustados pela função $(w/d)f(w/d)$ e (b) interpolados usando <i>cubic spline</i>	p. 68
4.6	Configurações iniciais. Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1). . .	p. 71
4.7	Configurações finais. Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1). . .	p. 75
4.8	Histogramas obtidos para os pares de grãos que estão em contato e cujas linhas que unem os seus centros de massa formam um ângulo α com o eixo x . Esses resultados representam a média sobre cinco realizações. Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).	p. 76

- 4.9 Evolução temporal para $\phi = 0.713$ ($l_0 = 2.7$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 50, 250, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000, 2250, 2500 e 2750. p. 77
- 4.10 Configuração para $\phi = 0.713$ ($l_0 = 2.7$) após 3600 passos de tempo ($t = 36$ s). p. 78
- 4.11 Evolução temporal para $\phi = 0.795$ ($l_0 = 3.2$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 100, 800, 1600, 2400, 3200, 4000, 4800, 5600, 6400, 7200, 8000 e 8800. p. 79
- 4.12 Configuração para $\phi = 0.795$ ($l_0 = 3.2$) após 10000 passos de tempo (1 min 40 s). p. 80
- 4.13 Histogramas das distâncias w/d entre os pares de grãos na *rede randômica regularizada*. Esse resultado representa a média sobre cinco realizações para a porosidade $\phi = 0.80$ ($l_0 = 3.2$). p. 81
- 4.14 A permeabilidade macroscópica κ/κ_0 no estado estacionário em função da porosidade ϕ do sistema. Os pontos foram obtidos através da simulação e a linha sólida é o melhor *fit* dado pela função $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, com os parâmetros $a = 21.5 \pm 0.5$ e $b = 4.0 \pm 0.1$ p. 81
- 4.15 Evolução temporal de κ/κ_0 . Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1). p. 82
- 4.16 Evolução temporal para $\phi = 0.64$ ($l_0 = 2.4$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000. p. 85
- 4.17 Evolução temporal para $\phi = 0.69$ ($l_0 = 2.6$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000. p. 86

4.18	Evolução temporal para $\phi = 0.73$ ($l_0 = 2.8$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.	p. 87
4.19	Evolução temporal para $\phi = 0.77$ ($l_0 = 3.0$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.	p. 88
4.20	Evolução temporal para $\phi = 0.80$ ($l_0 = 3.2$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.	p. 89
4.21	Histogramas das distâncias w/d entre os pares de grãos na <i>rede randômica regularizada</i> . Esse resultado representa a média sobre cinco realizações para a porosidade $\phi = 0.80$ ($l_0 = 3.2$).	p. 90
4.22	A permeabilidade macroscópica κ/κ_0 média em função da porosidade ϕ do sistema. Os pontos foram obtidos através da simulação e a linha sólida é o melhor <i>fit</i> dado pela função $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, com os parâmetros $a = 30.0 \pm 0.5$ e $b = 5.2 \pm 0.1$	p. 90
4.23	Evolução temporal de κ/κ_0 . Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).	p. 91
D.1	Aglomerados obtidos com DLA. À direita, o aglomerado cresceu a partir de uma semente central e à esquerda a partir de uma linha de sementes.	p. 112
D.2	Um exemplo típico de uma floresta de árvores de zinco. A floresta consiste de muitas árvores individuais de vários tamanhos que crescem no catodo de carbono linear. A fotografia mostra a visão parcial (cerca de 6cm) próximo ao centro do catodo.	p. 113

Sumário

1	INTRODUÇÃO	p. 1
2	TEORIA	p. 10
2.1	Fluxo de Fluidos Viscosos	p. 10
2.1.1	Conservação de Massa	p. 12
2.1.2	Conservação de Momento	p. 13
2.1.3	A Equação de Navier-Stokes	p. 15
2.1.4	Soluções da Equação de Navier-Stokes	p. 16
2.1.5	Análise Dimensional das Equações de Continuidade e de Movimento	p. 20
2.1.6	O Número de Reynolds	p. 21
2.2	Meios Porosos	p. 24
2.3	As Redes de Delaunay e Voronoi	p. 28
2.4	A Força de Arrasto	p. 32
2.4.1	A Força de Arrasto de Uma Esfera	p. 33
2.5	Dinâmica Molecular	p. 37
3	MODELO	p. 41
3.1	A Rede	p. 42

3.2	O Fluido	p. 45
3.2.1	FLUENT	p. 45
3.3	O Movimento das Partículas	p. 50
3.4	Propriedades do Sistema	p. 59
3.4.1	Porosidade	p. 59
3.4.2	Permeabilidade	p. 60
4	RESULTADOS	p. 62
4.1	O Fluido	p. 62
4.2	Os Padrões	p. 69
4.2.1	Primeiro Modelo (5)	p. 72
4.2.2	Segundo Modelo	p. 83
5	CONCLUSÃO	p. 93
	Referências Bibliográficas	p. 96
	Apêndice A – Equação constitutiva para um fluido Newtoniano	p. 104
	Apêndice B – A equação de Arrasto	p. 106
	Apêndice C – A Lei de Stokes	p. 108
	Apêndice D – DLA	p. 111

1 INTRODUÇÃO

A partir da década de 60, a formação de padrões se tornou uma área interdisciplinar importante e crescente. A formação espontânea de padrões na natureza corresponde a vários tipos de quebra de simetria de sistemas inicialmente homogêneos (6). Podemos encontrar exemplos de formação de padrões nas mais diversas áreas da Ciência. Na Biologia, por exemplo, podemos observar a estrutura de diversos tipos de folhas de plantas (7), os padrões formados em animais como girafas e zebras (8) e a distribuição espacial de populações (9, 10). Na Geografia podemos citar o transporte de partículas granulares (11–15), a formação dos flocos de neve, a erosão (1) e processos que levam a formação das dunas (16–21) e das rochas (22, 23). Já os cientistas políticos e sociais e os economistas têm grande interesse em entender, por exemplo, como ocorre o desenvolvimento urbano ou o processo de votação (24). Finalmente, na Física podemos observar fenômenos de solidificação em interfaces sólido-líquido (25) e diversos cristais que sofrem transições de fase (26–34).

Em geral, um conjunto de conceitos fundamentais que descrevem processos fora do equilíbrio é adotado no estudo de uma variedade de sistemas complexos na natureza e na tecnologia onde ocorre a formação de padrões. Embora muito progresso tenha sido feito para melhor compreender a dinâmica dos padrões nos últimos anos, muitas questões fundamentais ainda estão em aberto. Por exemplo, a existência de classes de universalidade para comportamentos com padrões ainda não está esclarecida. Um estudo mais profundo nesta área é fundamental para resolver esse tipo de questão, já que ela apresenta implicações práticas significantes para o controle de quase todo processo

tecnológico que apresenta formação de padrões em algum estágio.

Os problemas que envolvem formação de padrões podem ser analisados basicamente de três formas: teórica; experimental; e simulacional. Pelo fato da ausência de uma teoria completa para lidar com os diversos fenômenos que apresentam padrões, muito do que se sabe sobre esse assunto hoje se deve a experimentos e simulações. Para alguns sistemas, somente resultados numéricos são analisados, como é o caso de sistemas ecológicos, onde pode ser praticamente impossível se obter qualquer tipo de dado. Já para outros sistemas, muitos resultados experimentais já foram obtidos e o que se almeja é reproduzi-los numericamente, como é o caso de sistemas geológicos, por exemplo.

A preservação da natureza e a proteção do meio ambiente são questões importantes nas agendas de governos e organizações não-governamentais. Conseqüentemente, essas questões têm sido alvo de intenso estudo, onde o principal interesse é compreender como as ações do homem afetam o meio ambiente. Podemos citar o desmatamento e a poluição do ar como responsáveis por mudanças climáticas que resultam em enchentes e erosão. Em particular, a erosão tem sido um dos principais fatores na diminuição da qualidade de vida de alguma comunidade porque ela afeta o solo gerando um impacto negativo na economia.

Além dos aspectos econômicos e ecológicos, o fenômeno da erosão também atrai o interesse tanto de geólogos como físicos. Para a Geologia, esta é uma área extremamente rica pois muitos dos padrões observados em ambientes naturais são formados a partir da erosão ou por processos de deposição, como podemos ver na Figura 1.1. Na Física, a formação desses padrões apresenta uma rica variedade de escalas espacial e temporal.

O processo de formação de padrões em sistemas granulares está diretamente relacionado ao transporte elementar de partículas sólidas por um fluido e apresenta uma rica fenomenologia com diversas aplicações (35, 36).

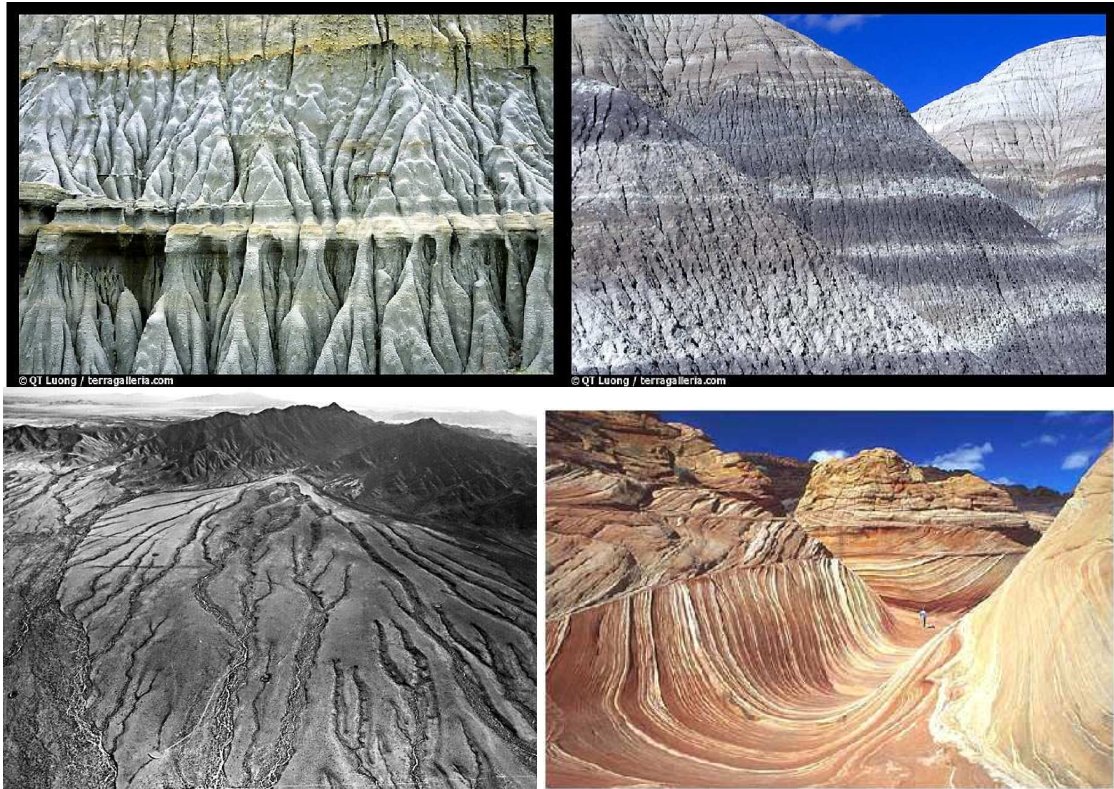


Figura 1.1: Acima: erosão causada pela água e pelo vento (www.achetudoeregiao.com.br/ANIMAIS/erosao.htm, www.univ-ab.pt/disciplinas/dchs/gfa2677/index.htm). Abaixo: formações por erosão em Theodore Roosevelt, National Park, North Dakota, USA e em Blue Mesa, Petrified Forest National Park, Arizona, USA (www.terrageria.com/parks).

Como sabemos, a erosão é provocada por fatores naturais como chuvas e ventos, e também pela devastação de florestas pelo homem. Por isso, se faz necessário uma melhor compreensão dos processos envolvidos nesse fenômeno para que possamos fazer previsões. Conhecendo os fatores envolvidos no processo é interessante saber como a erosão ocorre ao analisarmos diferentes ambientes. Por exemplo, para formações rochosas variadas, o solo não irá responder da mesma maneira ao desgaste causado pela erosão. Da mesma forma, onde as chuvas são mais frequentes e intensas, ou onde não existe vegetação o desgaste do solo deve ser ainda maior.

Baseado neste fenômeno, uma questão fundamental que continua em aberto é como



Figura 1.2: Padrões observados na praia de Cumbuco, Fortaleza, Brasil.

os objetos formados por materiais granulares respondem a ação de todos esses fatores (ou forças) externos?

Diversos experimentos (37–53) têm sido realizados nos últimos anos para diferentes sistemas granulares com o intuito de responder a essa questão. Um experimento interessante (1) mostra a formação de diferentes padrões causados pelo fluxo de um nível de água através de uma camada de sedimento que pode sofrer erosão. O fenômeno descrito é semelhante ao que ocorre quando, por exemplo, o mar carrega a areia da praia (Figura 1.2) ou quando é feita a drenagem de um reservatório.

O aparato experimental é mostrado na Figura 1.3. Ele consiste de uma chapa quadrada de $130 \times 130 \text{ mm}^2$ localizada dentro de um recipiente. Para iniciar o procedimento, o aparato deve estar na horizontal ($\theta = 0$) e o recipiente deve ser preenchido com água. Em seguida, sobre a chapa é depositada uma suspensão de óxido de alumínio em pó de grãos com diâmetro médio de $d \simeq 30 \mu\text{m}$ e densidade $\rho \simeq 2.75 \text{ g/cm}^3$. Quando a camada de sedimento apresenta uma altura típica de 1 mm , o aparato é inclinado até o ângulo θ . A chapa é então puxada por um motor com uma velocidade V para fora do líquido, conforme mostrado na Figura 1.3.

Conforme a variação na inclinação do plano e na velocidade do fluido, é possível obter uma variedade de estruturas, as quais são apresentadas na Figura 1.4. Os padrões

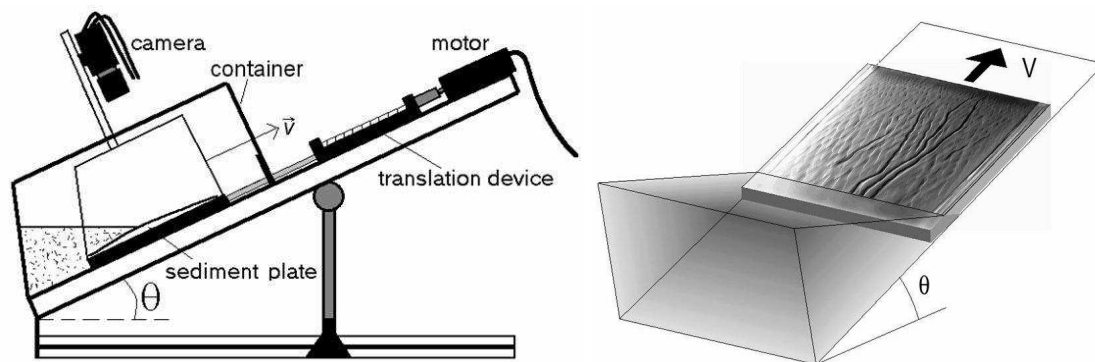


Figura 1.3: Aparato experimental (1). Uma chapa quadrada de $130 \times 130 \text{mm}^2$. Uma suspensão de óxido de alumínio em pó de grãos com diâmetro médio de $d \simeq 30 \mu\text{m}$ e densidade $\rho \simeq 2.75 \text{g/cm}^3$.

se formam rapidamente, tipicamente 5 s após a chapa com o sedimento ser totalmente puxada para fora do líquido. Os elementos que caracterizam esta estrutura têm uma ligeira descida de ponta arredondada e um perfil de altura como escamas de peixe ou telhas, ou seja, o sedimento é mais espesso na ponta de baixo com uma diminuição superficial para cima, com uma ponta afiada. Esse regime é limitado pelo ângulo máximo de estabilidade $\theta_m = 35^\circ$, acima do qual a camada de sedimento sofreria uma avalanche espontânea.

Para um certo intervalo de valores de θ e V , é possível identificar padrões do tipo *zig-zag* com ângulos característicos bem definidos. Variando ambos parâmetros, é possível construir o diagrama de fases da Figura 1.5 (a). Como a maioria das estruturas do tipo *zig-zag* se encontram na região acima da linha pontilhada, o ângulo θ foi fixado em 30° e, para vários valores de V , o ângulo característico φ foi medido. O resultado é mostrado na Figura 1.5 (b) e apresenta valores de φ decrescendo de 90° até 30° , conforme a velocidade aumenta. Esse experimento sugere, portanto, que um sistema simples composto de material granular pode apresentar uma variedade de padrões ao interagir com fluido.

O fluxo de material granular em planos também desperta interesse no contexto de processos industriais e de instabilidades geofísicas como avalanches e desmoronamen-

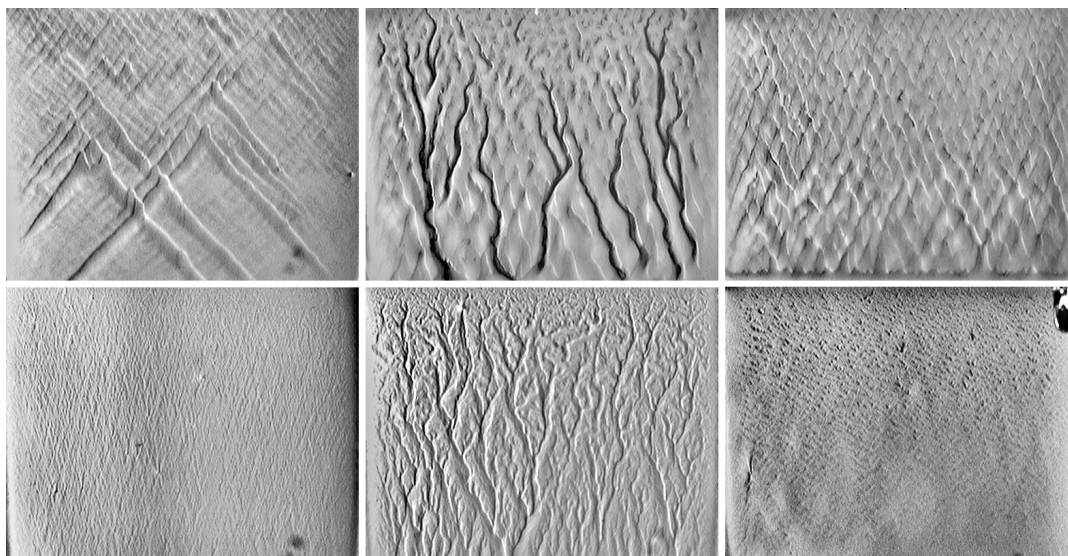


Figura 1.4: Padrões observados no experimento de erosão (1). As estrias escuras correspondem às regiões onde o meio granular sofreu erosão.

tos. Esses fluxos apresentam caráter complexo, exibindo uma variedade de regimes diferentes, assim como efeitos de segregação de partículas e instabilidades (54).

Embora muito do conhecimento prático da erosão venha de leis empíricas, várias tentativas foram feitas do ponto de vista da Física Estatística (55, 56), por exemplo, para entender a dinâmica de formação de rios (57). No entanto, o grande problema surge ao tentar relacionar as propriedades básicas de transporte de um meio granular por um fluido à formação de padrões em larga escala (57, 58).

Isso tem aumentado ainda mais o interesse em descrever teoricamente esse tipo de sistema (59–66) e tentar visualizá-lo através de simulação computacional. Assim, um modelo que descreva os diversos tipos de meios granulares bem como a interação dos grãos (ou aglomerados destes) com o fluido e que considere a influência de diversos fatores externos ainda está para ser desenvolvido.

Neste trabalho, apresentamos um modelo que leva em consideração a interação de dois meios diferentes: um meio granular e um fluido que escoar através dele.

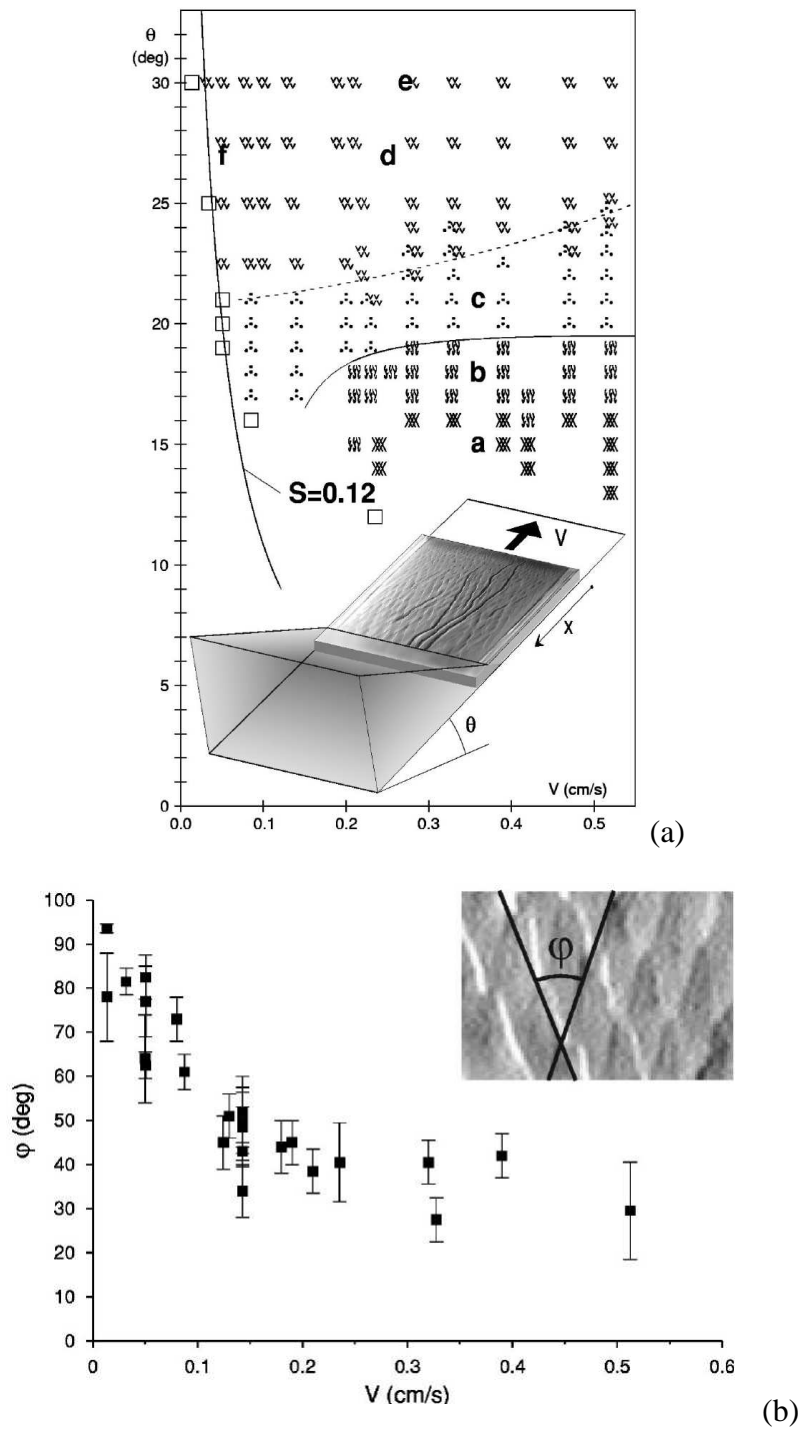


Figura 1.5: (a) Diagrama de fases localizando os diferentes padrões no espaço ângulo θ - velocidade V e (b) ângulo característico ϕ em função da velocidade V para $\theta = 30^\circ$ (1).

Pretendemos, assim, estimulados pelos resultados já obtidos na literatura e pela existência de estruturas semelhantes na natureza, observar através de simulações computacionais a formação de padrões que são provocados pelo processo da erosão-deposição.

Alguns autores (38, 39, 41, 46) têm mostrado que o tamanho e a forma das partículas influenciam drasticamente a propagação do fluido e a formação dos padrões. No entanto, iremos simplificar o material granular considerando os grãos como partículas esféricas que se encontram sobre um plano perfeitamente liso e formam um sistema de monocamada. Além disso, conforme os resultados obtidos em (1), o nosso objetivo é descobrir a relação entre as estruturas observadas e o ângulo característico de cada tipo de padrão.

Para tratar esse problema, precisamos analisar primeiramente cada um dos meios separadamente: o meio granular e o fluido. O meio granular é modelado por uma *rede randômica regularizada* (RRR). Nessa rede, é feita uma triangulação de Delaunay (67) (e conseqüentemente, a rede dual de Voronoi (68)), com o intuito de descrever como o fluido escoar através das partículas. A ferramenta utilizada para calcular a dinâmica do fluido é o software FLUENT (69), o qual é capaz de resolver a equação de Navier-Stokes nas regiões delimitadas pela triangulação. A equação de Navier-Stokes é obtida considerando-se a conservação de massa e momento do fluido. Ela é uma equação diferencial que rege a dinâmica dos fluidos e estabelece relações entre as taxas de variação da velocidade e da pressão do fluido.

Consideramos que o fluido apresenta sempre regime laminar ao atravessar o meio granular, o que é equivalente a dizer, que o número de Reynolds que representa o sistema é bem menor que 1. O número de Reynolds é um número adimensional usado em mecânica dos fluidos para identificar o regime de escoamento de um determinado fluido e consiste do quociente das forças de inércia pelas forças de viscosidade. Dessa forma, devemos utilizar a lei de Darcy, a qual é uma lei empírica que apresenta uma relação linear entre a velocidade do fluido e o gradiente de pressão, onde o coeficiente linear relaciona características do fluido (viscosidade) e do meio poroso (permeabilidade). Além disso, consideramos que a única força que age sobre cada partícula do meio granular se

deve ao fluido e é dada pela Lei de Stokes, ou seja, a força é proporcional a velocidade relativa entre o fluido e a partícula. Assim, a força total sobre cada grão é dada pela soma da força de Stokes devido ao fluido proveniente de diversas direções.

No Capítulo 2 apresentamos a teoria necessária para desenvolver o modelo. No que se refere a fluidos viscosos, apresentamos como a equação de Navier Stokes e o número de Reynolds são obtidos e qual a sua importância na teoria de fluidos. Além disso, discutimos sobre a força de arrasto, principalmente sobre a Lei de Stokes. Quanto ao meio poroso, apresentamos a Lei de Darcy.

No Capítulo 3, descrevemos o modelo usado para simular os padrões de erosão-deposição. Apresentamos primeiramente como a *rede randômica regularizada* é construída. Em seguida, descrevemos a configuração utilizada nas simulações com o FLUENT e obtemos as equações de movimento para cada partícula do sistema. Mostramos, também, como a permeabilidade do sistema é calculada em função da porosidade. Além disso, propomos dois tipos de interações entre as partículas: com atrito grande e com atrito nulo. O nosso objetivo é estudar a influência do tipo de interação entre as partículas na formação de padrões.

No Capítulo 4, apresentamos e discutimos os resultados obtidos usando o FLUENT. Além disso, mostramos os padrões obtidos para diferentes valores de porosidade usando ambas considerações de interação entre os grãos. A relação entre a permeabilidade do sistema e a porosidade também é apresentada usando ambas considerações.

Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos as conclusões e perspectivas do trabalho.

2 TEORIA

Neste capítulo, apresentamos a teoria de fluidos e de meios porosos (70–72) necessária para desenvolver nosso modelo. Na primeira seção, descrevemos o escoamento de fluidos viscosos e analisamos o número de Reynolds para diferentes regimes. Nas seções seguintes, descrevemos a teoria de fluidos em meios porosos e a força de arrasto que se deve ao fluido. Além disso, descrevemos ainda a teoria de Dinâmica Molecular e sua utilização no estudo desse problema.

2.1 Fluxo de Fluidos Viscosos

A propriedade física que caracteriza a resistência ao fluxo de fluidos simples é a *viscosidade*. A lei de viscosidade de Newton é equivalente à segunda lei de Newton, onde a viscosidade μ é análoga a massa m .

As propriedades do fluxo viscoso de um fluido isotérmico podem ser descritas através das equações de conservação de massa e conservação de momento. Ao aplicarmos a lei de conservação de massa a um pequeno elemento de volume num fluido que escoar, podemos determinar a Equação de Continuidade. Já a equação de movimento do fluido é uma generalização da conservação de momento, e trata-se da equação mais importante para esse tipo de sistema. Juntas, essas duas equações descrevem o fluxo do fluido em que estamos interessados.

Primeiramente, definimos as derivadas temporais que ocorrem nesse formalismo.

- Derivada Temporal Parcial, $\frac{\partial F}{\partial t}$: Descreve como a variável varia no tempo num ponto *fixo* no espaço;
- Derivada Temporal Total, $\frac{dF}{dt}$: Descreve como a variável varia no tempo para um observador que se move com velocidade $(\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt})$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial F}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{dz}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt}; \quad (2.1)$$

- Derivada Temporal Substancial, $\frac{DF}{Dt}$: A velocidade do observador é justamente a velocidade local do fluido $\vec{\mathbf{u}} = (u_x, u_y, u_z)$

$$\frac{DF}{Dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + u_x \frac{\partial F}{\partial x} + u_y \frac{\partial F}{\partial y} + u_z \frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i u_i \frac{\partial F}{\partial x_i}. \quad (2.2)$$

Além disso, freqüentemente precisaremos converter integrais de superfície em integrais de volume (ou vice-versa) usando o Teorema de Gauss

$$\int_V \frac{\partial F}{\partial x_i} dV = \int_A F dA_i. \quad (2.3)$$

Note que $F(\vec{\mathbf{x}}, t)$ é um tensor de um rank qualquer. V pode ser um *volume fixo no espaço* ou um *volume material*, que contém as partículas do fluido e cuja superfície se move com o fluido, e A é a superfície de contorno.

Ao desenvolvermos a expressão para as leis de conservação, precisamos determinar a derivada temporal de integrais do tipo $\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F dV$. De acordo com o Teorema de Leibnitz, temos que:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(\vec{\mathbf{x}}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dV + \int_{A(t)} F \vec{\mathbf{u}}_A \cdot d\vec{\mathbf{A}}, \quad (2.4)$$

onde $\vec{\mathbf{u}}_A$ é a velocidade do contorno e $A(t)$ é a superfície de $V(t)$.

Para um volume fixo $\vec{\mathbf{u}}_A = \mathbf{0}$

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F(\vec{\mathbf{x}}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dV. \quad (2.5)$$

Para um volume material a superfície se move com o fluido e temos $\vec{\mathbf{u}}_A = \vec{\mathbf{u}}$, onde $\vec{\mathbf{u}}$ é a velocidade do fluido.

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} F(\vec{\mathbf{x}}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial F}{\partial t} dV + \int_{A(t)} F \vec{\mathbf{u}} \cdot d\vec{\mathbf{A}}. \quad (2.6)$$

Esse é o Teorema de Transporte de Reynolds.

Nas seções seguintes, iremos considerar a conservação de massa e momento do fluido para determinar a sua equação de movimento. Duas relações importantes que obtemos são a equação de continuidade e a equação de movimento de Cauchy. Assumindo certas condições, essas equações nos levam a dedução da Equação de Navier-Stokes, muito utilizada para resolver a dinâmica de fluidos em diversas situações.

2.1.1 Conservação de Massa

Considere um volume fixo no espaço. A taxa de crescimento de massa dentro deste volume é

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV. \quad (2.7)$$

A taxa de fluxo de massa para fora do volume é

$$\int_A \rho \vec{\mathbf{u}} \cdot d\vec{\mathbf{A}}. \quad (2.8)$$

Para que haja conservação de massa, a soma desses dois termos deve se anular. Usando a lei de Gauss, temos

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{\mathbf{u}}) \right] dv = 0. \quad (2.9)$$

Essa relação é válida para qualquer volume, o que é possível somente se o integrando se anula em todos os pontos do espaço. Assim

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{\mathbf{u}}) = 0, \quad (2.10)$$

que é a *equação de continuidade* e expressa a forma diferencial do princípio de conservação de massa.

Em termos da derivada temporal substancial,

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_i u_i \frac{\partial\rho}{\partial x_i} \quad \rightarrow \quad \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{\mathbf{u}} = 0. \quad (2.11)$$

Essa equação descreve a taxa de variação da densidade ao seguirmos uma partícula do fluido; $D\rho/Dt$ pode ser não nulo devido a variações de pressão, temperatura ou composição. Um fluido é chamado incompressível se sua densidade não muda com a pressão. Nesse caso, a equação da continuidade se reduz a

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{u}} = 0, \quad (2.12)$$

independente se o fluxo é estacionário ou não.

2.1.2 Conservação de Momento

As forças que agem sobre um elemento de fluido podem ser divididas em três classes, forças no corpo, forças de linha e forças de cisalhamento.

As forças no corpo são aquelas que não resultam de contato físico, mas de um campo de força, que pode ser gravitacional, magnético ou elétrico. Elas se distribuem pela massa do fluido e são proporcionais a massa. Denotaremos essa força por unidade de massa por $\vec{\mathbf{g}}$.

As forças de linha são forças de tensão superficial que agem ao longo de uma linha e são proporcionais a extensão dessa linha. Essas forças não aparecem diretamente nas equações de movimento, mas nas condições de contorno.

As forças de cisalhamento são aquelas exercidas num elemento de área pelo volume externo através de contato direto. Elas são proporcionais a extensão da área e são expressas por unidade de área. Essas forças podem ser separadas em componentes normal e tangencial a área; assim, a força $d\vec{\mathbf{F}}$ atuando no elemento de área $d\vec{\mathbf{A}}$ tem compo-

nente dF_n normal a área e componente dF_s tangencial a área. Os tensores normal e de cisalhamento nesse elemento são definidos respectivamente por

$$\tau_n = \frac{dF_n}{dA}, \quad \tau_s = \frac{dF_s}{dA}. \quad (2.13)$$

Essas são definições escalares das componentes de *stress*. O *stress* num ponto é na verdade especificado por um tensor de *stress* τ_{ij} de nove componentes. Esse tensor é simétrico e, assim, possuiu somente seis componentes independentes. O primeiro índice indica a direção da normal a superfície onde o *stress* está sendo considerado e o segundo indica a direção em que o *stress* age. Assim, os elementos da diagonal τ_{11} , τ_{22} e τ_{33} da matriz de *stress* correspondem ao *stress* normal, e os elementos fora da diagonal os *stress* tangencial e transverso.

Vamos considerar o movimento de um elemento de fluido infinitesimal e usar a segunda lei de Newton, que requer que a força total sobre o elemento deve ser igual a massa vezes a aceleração do elemento. Na direção x_1 a soma das forças na superfície é dada por

$$\left(\frac{\partial \tau_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{21}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{31}}{\partial x_3} \right) dx_1 dx_2 dx_3 = \frac{\partial \tau_{j1}}{\partial x_j} dV. \quad (2.14)$$

Generalizando, a i -ésima componente da força de cisalhamento por unidade de volume do elemento é $\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$. Dessa forma, se \vec{g} é a força no corpo por unidade de massa, $\rho \vec{g}$ é a força sobre o corpo por unidade de volume. A segunda lei de Newton pode ser reescrita como

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho g_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2.15)$$

Essa é a equação de movimento que relaciona aceleração a força total num ponto e vale para qualquer meio contínuo, não interessa como o tensor de *stress* está relacionado com o campo de deformação. Essa equação é também conhecida como *equação de movimento de Cauchy*.

2.1.3 A Equação de Navier-Stokes

A relação entre o *stress* e a deformação num contínuo é chamada de *equação constitutiva* (72). Vamos considerar uma equação que relaciona o *stress* à taxa de *strain* num fluido de forma linear, ou seja, um fluido Newtoniano (veja Apêndice A).

$$\tau_{ij} = - \left(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{\mathbf{u}} \right) \delta_{ij} + 2\mu e_{ij}. \quad (2.16)$$

A equação de movimento de um fluido Newtoniano é obtida ao substituirmos a equação constitutiva na equação de Cauchy, de onde temos

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[2\mu e_{ij} - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{\mathbf{u}}) \delta_{ij} \right]. \quad (2.17)$$

Essa é a forma geral da *equação de Navier-Stokes*. Ela é uma equação diferencial que estabelece relações entre as taxas de variação da velocidade e da pressão do fluido. Essa equação, para o caso mais simples de um fluido ideal com viscosidade zero, estabelece que a aceleração é proporcional a derivada da pressão interna.

A viscosidade μ pode ser uma função do estado termodinâmico, mas considerando que as diferenças de temperatura são pequenas no fluido tomamos μ como sendo constante. Assim,

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \left[\nabla^2 u_i + \frac{1}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{\mathbf{u}}) \delta_{ij} \right], \quad (2.18)$$

onde

$$\nabla^2 u_i = \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_3^2} \quad (2.19)$$

é o Laplaciano de u_i . Para fluidos incompressíveis $\nabla \cdot \vec{\mathbf{u}} = 0$, e a equação de Navier-Stokes se reduz a

$$\rho \frac{D\vec{\mathbf{u}}}{Dt} = \rho \vec{\mathbf{g}} - \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{\mathbf{u}}. \quad (2.20)$$

A equação de Navier-Stokes foi denominada assim após Claude-Louis Navier e George Gabriel Stokes desenvolverem um conjunto de equações que descrevem o movimento das substâncias fluidas tais como líquidos e gases. Esta equação estabelece

que mudanças no momento e aceleração de uma partícula fluida são simplesmente o produto das mudanças na pressão e nas forças viscosas dissipativas, que se originam na interação molecular, atuando dentro do fluido.

Essa equação é muito útil porque ela descreve a física de um grande número de fenômenos de interesse econômico e acadêmico. Ela é usada para modelar, por exemplo, o clima, correntes oceânicas, fluxos da água em canos, o movimento das estrelas dentro da galáxia, fluxo ao redor de aerofólios e propagação de fumaça em incêndios. Ela também é usada no projeto de aeronaves e carros, no estudo do fluxo sanguíneo, no projeto de usinas de força e na análise dos efeitos da poluição.

2.1.4 Soluções da Equação de Navier-Stokes

As soluções exatas da equação de Navier-Stokes para um dado problema físico podem ser obtidas, em termos práticos, somente para casos bem simples. Estes casos envolvem freqüentemente escoamentos em regime não-turbulento e em estado estacionário, no qual a viscosidade do fluido é grande ou sua velocidade pequena (número de Reynolds pequeno).

Para situações mais complexas, tais como um sistema de clima global ou a sustentação em uma asa de avião, as soluções para a equação de Navier-Stokes freqüentemente devem ser encontradas com a ajuda de computadores. Este é um campo da ciência conhecido como *CFD* (sigla do inglês Computational Fluid Dynamics - Dinâmica dos Fluidos Computacional).

Nesta seção, apresentamos algumas configurações nas quais a equação de Navier-Stokes pode ser resolvida analiticamente. Mais especificamente, mostramos a solução dessa equação para o escoamento de um fluido através de um plano inclinado e através de um canal com seção de área circular. A importância de ambas soluções reside no fato de apresentarem formas simples, tanto para o fluxo como para o perfil de velocidade, que podem ser utilizadas como aproximações em sistemas mais complexos.

Fluxo através de um plano inclinado

Vamos analisar o escoamento numa região de comprimento L suficientemente longe das extremidades onde o fluido entra e sai, de forma a excluir os efeitos de distúrbio existentes nessas regiões. Dessa forma, a única componente da velocidade existente é $\vec{u} = u_z \hat{z}$ ($u_x = u_y = 0$). Da equação de continuidade temos então que

$$\frac{\partial u_z(x, z)}{\partial z} = 0. \quad (2.21)$$

Se considerarmos que o escoamento está em estado estacionário, ou seja,

$$\frac{\partial u_z(x, z)}{\partial t} = 0, \quad (2.22)$$

então a equação de Navier-Stokes se reduz a

$$-\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 u_z(x, z)}{\partial x^2} + \rho g \cos \beta = 0, \quad (2.23)$$

onde β é o ângulo de inclinação do plano.

Se definirmos a variável $P = p - \rho g z \cos \beta$ como a pressão efetiva, a equação acima fica

$$\mu \frac{\partial^2 u_z(x, z)}{\partial x^2} = \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (2.24)$$

Integrando, obtemos

$$u_z(x, z) = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial P}{\partial z} x^2 + C_1 x + C_2. \quad (2.25)$$

As constantes de integração são obtidas usando as condições de contorno

$$u_z(x, z) = 0 \text{ em } x = 0 \text{ e } x = h, \quad (2.26)$$

o que nos leva a $C_1 = -\frac{h}{2\mu} \frac{\partial P}{\partial z}$ e $C_2 = 0$. Substituindo essas constantes na equação acima

obtemos finalmente a seguinte distribuição de velocidade

$$u_z(x, z) = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial P}{\partial z} x(h-x). \quad (2.27)$$

Podemos assim calcular a taxa de fluxo Q para um filme de espessura W

$$Q = \int_0^W \int_0^h u_z(x, z) dx dy = -\frac{h^3 W}{12\mu} \frac{\partial P}{\partial z} \quad (2.28)$$

e a velocidade média $\langle u_z(x, z) \rangle$

$$\langle u_z(x, z) \rangle = \frac{Q}{\int_0^W \int_0^h dx dy} = \frac{Q}{hW} = -\frac{h^2}{12\mu} \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (2.29)$$

Fluxo através de um canal circular

Novamente, consideramos o escoamento numa região de comprimento L suficientemente longe das extremidades. A única componente da velocidade existente é $\vec{u} = u_z \hat{z}$ ($u_\rho = u_\theta = 0$). Da equação de continuidade temos que

$$\frac{\partial u_z(\rho, z)}{\partial z} = 0. \quad (2.30)$$

Consideramos novamente também que o escoamento está em estado estacionário. Nesse caso a equação de Navier-Stokes se reduz a

$$-\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial u}{\partial \rho} \right) + \rho g \cos \beta = 0, \quad (2.31)$$

já que, em coordenadas cilíndricas

$$\nabla^2 u = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial u}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}. \quad (2.32)$$

Utilizando a pressão efetiva, a expressão 2.31 se reduz a

$$\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial u}{\partial \rho} \right) = \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (2.33)$$

Integrando, obtemos

$$u_z(\rho, z) = \frac{\rho^2}{4\mu} \frac{\partial P}{\partial z} + C_1 \ln \rho + C_2. \quad (2.34)$$

As condições de contorno são dadas por

$$u_z(\rho, z) = 0 \text{ em } \rho = R \text{ e } u_z(\rho, z) \text{ finito em } \rho = 0, \quad (2.35)$$

de onde obtemos as constantes de integração $C_1 = 0$ e $C_2 = -\frac{R^2}{4\mu} \frac{\partial P}{\partial z}$. Dessa forma, a distribuição de velocidades é dada por

$$u_z(\rho, z) = \frac{1}{4\mu} \frac{\partial P}{\partial z} (\rho^2 - R^2). \quad (2.36)$$

O fluxo total e a velocidade média $\langle u_z(\rho, z) \rangle$ do fluido através da seção circular são dados por

$$Q = \int_0^R \int_0^{2\pi} \pi u_z(\rho, z) \rho d\rho d\theta = -\frac{\pi R^4}{8\mu} \frac{\partial P}{\partial z}, \quad (2.37)$$

$$\langle u_z(\rho, z) \rangle = \frac{Q}{\int_0^R \int_0^{2\pi} \pi \rho d\rho d\theta} = \frac{Q}{\pi R^2} = -\frac{R^2}{8\mu} \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (2.38)$$

A expressão para o fluxo foi derivada experimentalmente por Hagen e formulada por Poiseuille e por isso é conhecida como lei de Hagen-Poiseuille (73).

Na próxima seção nos atemos a uma discussão mais detalhada sobre o número de Reynolds. Mostramos, através da análise dimensional das equações de continuidade e de movimento, como o número de Reynolds é obtido e como ele depende dos parâmetros que descrevem tanto o fluido como a geometria do sistema. Além disso, discutimos sobre os regimes laminar e turbulento em canais e sobre a relação entre modelos e sistemas reais.

2.1.5 Análise Dimensional das Equações de Continuidade e de Movimento

Vamos fazer uma análise dimensional das equações de continuidade e de movimento para o caso de sistemas com densidade e viscosidade constantes (70). Para muitos sistemas que envolvem escoamentos de fluidos, podemos selecionar um comprimento característico D e uma velocidade característica V . Assim, por exemplo, para o escoamento num tubo com seção de área circular, D geralmente se refere ao diâmetro do tubo e V à velocidade média do fluido; para o fluido ao redor de uma esfera, D pode ser seu diâmetro e V a velocidade do fluido longe da esfera. Essa escolha é arbitrária, mas uma vez que foi feita podemos definir as seguintes variáveis adimensionais e operações diferenciais

$$\vec{\mathbf{u}}^* = \frac{\vec{\mathbf{u}}}{V}; \quad p^* = \frac{p - p_0}{\rho V^2}; \quad t^* = \frac{tV}{D}, \quad (2.39)$$

$$x^* = \frac{x}{D}; \quad y^* = \frac{y}{D}; \quad z^* = \frac{z}{D}, \quad (2.40)$$

$$\nabla^* = D\nabla = \left(\delta_1 \frac{\partial}{\partial x^*} + \delta_2 \frac{\partial}{\partial y^*} + \delta_3 \frac{\partial}{\partial z^*} \right), \quad (2.41)$$

$$\nabla^{*2} = D^2\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2}{\partial z^{*2}} \right), \quad (2.42)$$

$$\frac{D}{Dt^*} = \left(\frac{D}{V} \right) \frac{D}{Dt}, \quad (2.43)$$

onde p_0 é somente alguma pressão de referência conveniente.

Se considerarmos as equações de continuidade e de movimento para fluidos Newtonianos de viscosidade e densidade constantes, podemos reescrevê-las em termos das variáveis adimensionais simplesmente escrevendo $\vec{\mathbf{u}}$, p , t , x , y , z , ∇ , ∇^2 e D/Dt em termos de $\vec{\mathbf{u}}^*$, p^* , t^* , x^* , y^* , z^* , ∇^* , ∇^{*2} e D/Dt^* . Assim, essas equações ficam, respectivamente

$$\frac{1}{D} \nabla^* \cdot v^* V = 0, \quad (2.44)$$

$$\rho \left(\frac{V}{D} \right) \frac{D}{Dt^*} (v^* V) = - \left(\frac{1}{D} \nabla^* \cdot p^* \rho V^2 \right) + \mu \frac{1}{D^2} \nabla^{*2} (\vec{\mathbf{v}}^* V) + \rho \vec{\mathbf{g}}. \quad (2.45)$$

Com um pouco de álgebra elas se reduzem a

$$\nabla^* \cdot \vec{v}^* = 0, \quad (2.46)$$

$$\frac{Dv^*}{Dt^*} = -\nabla^* p^* + \left[\frac{\mu}{DV\rho} \right] \nabla^{*2} \vec{v}^* + \left[\frac{gD}{V^2} \right] \frac{\vec{g}}{g}. \quad (2.47)$$

Note que nas formas adimensionais das equações os *fatores de escala*, ou seja, as variáveis que descrevem o tamanho e a velocidade do sistema, se concentram em dois grupos adimensionais

$$Re = \left[\frac{DV\rho}{\mu} \right] = \text{Número de Reynolds}, \quad (2.48)$$

$$Fr = \left[\frac{V^2}{gD} \right] = \text{Número de Froude}. \quad (2.49)$$

Se tivermos então dois sistemas diferentes onde os números de Reynolds e de Froude sejam os mesmos, então os dois sistemas são descritos por equações diferenciais adimensionais idênticas. E mais, se as condições iniciais e de contorno forem as mesmas, então os dois sistemas são matematicamente idênticos, ou seja, as distribuições de velocidade e pressão adimensionais são as mesmas para ambos sistemas. Tais sistemas são chamados de *dinamicamente similares* (70).

2.1.6 O Número de Reynolds

O coeficiente, número ou módulo de Reynolds (abreviado como *Re*) (74, 75) é um número adimensional usado em mecânica dos fluidos para o cálculo do regime de escoamento de determinado fluido sobre uma superfície. É utilizado, por exemplo, em projetos de tubulações industriais e asas de aviões. O seu nome vem de Osborne Reynolds, um físico e engenheiro hidráulico irlandês. O seu significado físico é um quociente de forças: forças de inércia por forças de viscosidade. Dessa forma, esse número quantifica a relativa importância desses dois tipos de forças para diferentes condições de escoamento.

Quando a velocidade de um fluido que escoar em um canal excede um certo va-

lor crítico, o regime de escoamento passa de laminar para turbulento, exceto em uma camada extremamente fina junto a parede do tubo, chamada camada limite, onde o escoamento permanece laminar. Além da camada limite, o escoamento é turbulento. O regime de escoamento, se laminar ou turbulento, é determinado pelo número de Reynolds. O escoamento em regime laminar ocorre para baixo número de Reynolds, onde as forças viscosas são dominantes e é caracterizado por um movimento suave e constante do fluido. Já o escoamento em regime turbulento ocorre para alto número de Reynolds e é dominado pelas forças inerciais, o que tende a provocar um movimento altamente irregular, caracterizado por vórtices locais e outras flutuações no escoamento (74).

No caso do escoamento através de um tubo de seção circular, as grandezas envolvidas nesse número podem ser identificadas como D o diâmetro do tubo e V a velocidade média em que o fluido escoar. Para essa situação, verifica-se experimentalmente que o escoamento do fluido é

- laminar se $Re < 2000$
- turbulento se $Re > 3000$

Entre estes dois valores o escoamento é considerado como de transição. Ou seja, podemos variar tanto D como V para obtermos o regime em que queremos trabalhar. Ainda, na prática evita-se trabalhar com configurações que apresentem número de Reynolds entre 2000 e 3000 de forma a garantir que o escoamento apresente regime laminar ou turbulento, já que previsões sobre o comportamento do fluido podem ser difíceis no regime de transição (74).

Mas o número de Reynolds não define o regime somente em tubos, mas a princípio em qualquer sistema que envolva o escoamento de um fluido, podendo seu cálculo ser simples como no caso do tubo, ou muito complexo para sistemas com geometria complicada. O número de Reynolds constitui a base do comportamento de sistemas reais, pelo uso de modelos físicos reduzidos. Um exemplo comum é o túnel aerodinâmico onde se medem forças desta natureza em modelos de asas de aviões, automóveis, edificações. Pode-se dizer que dois sistemas são dinamicamente semelhantes se o número

de Reynolds, for o mesmo para ambos. D refere-se em geral, a qualquer dimensão do sistema, por exemplo a corda de asa de um avião (comprimento do bordo de ataque ao bordo de fuga), o comprimento de um navio, a altura de um edifício.

Para que dois escoamentos distintos sejam similares eles devem apresentar a mesma geometria e os mesmos número de Reynolds e de Euler, ou seja,

$$Re^* = Re, \quad (2.50)$$

$$Eu^* = Eu, \quad \text{i.e.} \quad \frac{p^*}{\rho^* v^{*2}} = \frac{p}{\rho v^2}, \quad (2.51)$$

onde as quantidades marcadas com * se referem ao escoamento no modelo e sem o * ao escoamento real. O número de Euler expressa a relação entre uma queda de pressão local e a energia cinética por volume, e é usado para caracterizar perdas no fluxo (76).

Isso permite que experimentos sejam realizados com modelos reduzidos em canais de água ou túneis de vento e os dados correlacionados com os escoamentos reais, poupando custos e tempo experimentais. Note que para garantir a similaridade dinâmica, outros números adimensionais podem ser necessários, como por exemplo o número de Mach (relação entre a velocidade do objeto e a velocidade do som), usado para fluidos compressíveis (77), ou o número de Froude, que governa escoamentos em superfícies livres (78).

2.2 Meios Porosos

A propriedade única de um meio poroso e que o distingue de outros corpos sólidos é sua complicada estrutura de poros. A maioria dos meios porosos contém uma rede tridimensional interconectada de canais capilares de tamanhos e formas não-uniformes, comumente chamados de poros. Fluxo de fluidos, difusão e condução elétrica em meios porosos aparecem juntamente com contornos microscópicos complicados. Uma alternativa para lidar com essa dificuldade é considerar uma aproximação contínua do meio na qual nenhuma atenção é dada a estrutura porosa. Esse tratamento é adequado para a descrição fenomenológica de processos de transporte macroscópicos nesse tipo de estrutura, mas falha ao tentar explicar muitas observações que dependem das propriedades dos canais microscópicos e do comportamento dos fluidos na escala microscópica.

Com a exceção de metais, algumas rochas densas e alguns plásticos, todo sólido pode ser considerado poroso. São exemplos de meios porosos: leitos, rochas porosas, agregados fibrosos como tecidos e filtros, e partículas catalíticas contendo micro-poros extremamente pequenos. Assim, os meios porosos compreendem uma larga variedade de materiais. Por esse motivo, os meios porosos são divididos em classes, de acordo com o tipo de poros que eles contêm. Uma classificação conhecida categoriza os meios porosos em vazios, capilarizados e espaços forçados (79). Os meios porosos vazios são caracterizados pelo fato das paredes apresentarem um efeito insignificante sobre o fenômeno hidrodinâmico no seu interior. Em meios capilarizados, as paredes exercem alguma influência sobre o escoamento, mas os efeitos decorrentes da estrutura molecular do fluido são desprezíveis. Já nos espaços forçados, a estrutura molecular do fluido influi consideravelmente no escoamento.

Além disso, os meios porosos podem ser classificados como tendo seus poros interconectados ou não. Nos casos de poros interconectados, a parte sólida do meio poroso representa a fase dispersa. Por exemplo, meios porosos granulares e fibrosos apresentam poros interconectados. Os meios porosos podem também ser naturais (rochas e solo) ou sintéticos (filtros industriais). Outra classificação se baseia na distribuição es-

pacial dos poros, ou dos grãos ou fibras, que podem estar distribuídos ordenadamente ou de maneira aleatória, esta última abrangendo a grande maioria dos meios porosos reais.

Como exemplos de materiais porosos a serem estudados são aqueles que apresentam poros relativamente pequenos onde pode estar contido algum fluido e aqueles que são permeáveis para uma variedade de fluidos, ou seja, os fluidos são capazes de penetrar no material por uma face e emergir por outra.

Todas as propriedades macroscópicas de um meio poroso são influenciadas pela estrutura porosa. Os parâmetros que caracterizam essa estrutura são aqueles determinados completamente pela estrutura porosa do meio e que não dependem de nenhuma outra propriedade. Esses parâmetros macroscópicos representam o comportamento médio de um sistema contendo muitos poros. Os parâmetros mais importantes são a *porosidade* e a *permeabilidade*.

A *porosidade* ϕ é a fração do volume de *bulk* do sistema poroso que é ocupado por espaço de poros. Dependendo do tipo de meio poroso, a porosidade pode variar de próximo de zero a quase a unidade. Podemos distinguir dois tipos de espaço de poros; um que forma uma fase contínua dentro do meio poroso, chamado espaço de poros interconectado ou efetivo, e outro que consiste de poros isolados ou não-interconectados no meio. No último caso, os poros não contribuem para o transporte de matéria através do meio poroso da forma como os poros efetivos fazem. Já que a massa do meio poroso reside totalmente na matriz sólida, temos

$$m = \rho_s V_s = \rho_B V_B, \quad (2.52)$$

onde m é a massa do sólido, ρ_s é a densidade do sólido, ρ_B é a densidade do *bulk*, V_s é o volume do sólido e V_B é o volume do *bulk*. Por definição de porosidade, temos então que

$$\phi = 1 - \frac{V_s}{V_B} = 1 - \frac{\rho_B}{\rho_s}. \quad (2.53)$$

A *permeabilidade* se refere à condutividade do meio poroso com respeito a perme-

ação do fluido Newtoniano. Usada nesse senso geral, a permeabilidade é de utilidade limitada porque seu valor em um determinado sistema poroso depende das propriedades do fluido que o permeia e do mecanismo de permeação. Assim, é mais útil considerar o parâmetro que mede a contribuição do meio poroso à condutividade que é independente das propriedades do fluido e dos mecanismos do escoamento. Essa quantidade é a *permeabilidade específica* κ , que aqui denominaremos de *permeabilidade*; seu valor é determinado unicamente pela estrutura de poros.

A permeabilidade κ é definida pela *lei de Darcy* (70). Na fluidodinâmica, esta é uma equação constitutiva derivada fenomenologicamente e que descreve o escoamento de um fluido através de um meio poroso. Esta lei foi formulada por Henry Darcy, baseada nos resultados de experimentos do escoamento de água através de camadas de areia (80). Uma das aplicações desta lei é feita, por exemplo, no estudo do escoamento de água em aquíferos. A lei de Darcy pode ser também usada para descrever o escoamento de óleo, água e gás em reservatórios de petróleo (81, 82).

A lei de Darcy é uma relação de proporção entre o fluxo instantâneo Q numa determinada seção de área A através de um meio poroso e o gradiente de pressão entre as extremidades de uma certa distância L (Fig. 2.1). A constante de proporcionalidade é dada pela razão entre a permeabilidade κ e a viscosidade μ , ou seja, por um parâmetro que define o meio (κ) e por outro que descreve o fluido (μ). Como a velocidade média v_f do fluxo que atravessa a seção de A é dada pela razão entre o fluxo Q e a área A , a lei de Darcy pode ser escrita como

$$\vec{v}_f = -\frac{\kappa}{\mu} \vec{\nabla} p, \quad (2.54)$$

onde p a pressão efetiva. O sinal negativo vem do fato do fluido escoar da região de maior pressão para a região de menor pressão. Essa é uma lei linear, similar a lei de Newton de viscosidade, a lei de Ohm de eletricidade, a lei de Fourier de condução de calor e a lei de Fick de difusão.

A lei de Darcy é válida somente para um fluxo suficientemente lento, unidirecional e estático. Felizmente, a maioria dos fluxos de água no solo obedece a essas condições. Conforme encontrado na literatura, fluxos com número de Reynolds menor que 1

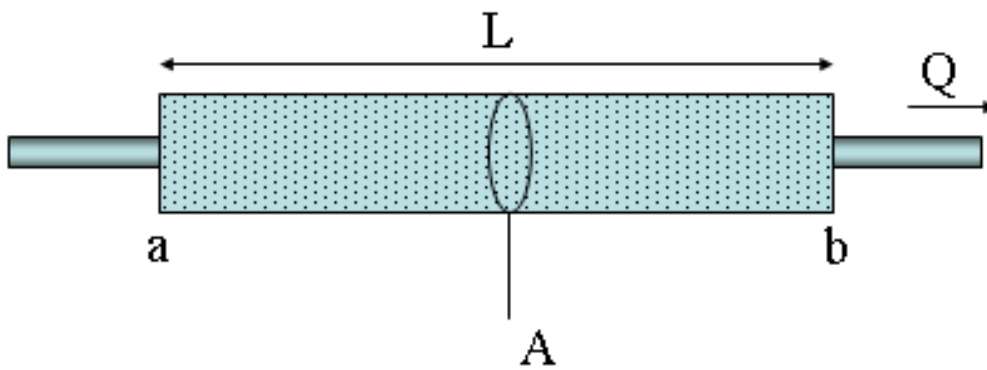


Figura 2.1: O fluido flui no canal de comprimento L devido à diferença de pressão entre as extremidades a e b . A taxa de fluxo Q é calculada na seção de área A .

apresentam regime laminar e, por isso, a lei de Darcy é válida.

2.3 As Redes de Delaunay e Voronoi

Como já foi dito, os meios porosos podem ser representados por uma rede tridimensional interconectada de canais capilares de diferentes tamanhos e formas não-uniformes chamados de poros. Esses canais capilares podem ser construídos com o auxílio da rede de Voronoi (ou da sua rede dual, a rede triangular de Delaunay), as quais apresentamos a seguir.

A triangulação foi inventada em 1934 por Boris Delaunay (67). Segundo a definição, a triangulação de Delaunay de um conjunto de pontos no plano P é uma triangulação $DT(P)$ tal que nenhum ponto em P esteja no interior da circunferência formada pelos três vértices de qualquer triângulo em $DT(P)$. Com base na definição, a circunferência de um triângulo formada por três pontos do conjunto original de pontos está vazia se ela não contém vértices além daqueles três que a definem. A condição de Delaunay afirma que um conjunto de triângulos é construído usando a triangulação de Delaunay se todas as circunferências de todos os triângulos na rede estão vazias. Esta é a definição original para espaços bidimensionais. É possível usá-la em espaços tridimensionais utilizando uma esfera circunscrita ao invés de uma circunferência.

Para um conjunto de pontos sobre a mesma linha não há triangulação de Delaunay (na realidade, a noção de triangulação é indefinida para esse caso). Para 4 pontos sobre o mesmo círculo (por exemplo, os vértices de um retângulo), a triangulação de Delaunay não é única; claramente, as duas possíveis triangulações que dividem o quadrado em dois triângulos satisfazem a condição de Delaunay. As generalizações são possíveis para métricas além da euclidiana. No entanto, nestes casos, não é possível garantir a existência da triangulação de Delaunay e ainda que esta seja única.

Se considerarmos uma rede com n pontos e d dimensões, a triangulação de Delaunay apresenta algumas propriedades (67):

- A união de todos os simplexes na triangulação consiste da cobertura convexa dos pontos.

- A triangulação de Delaunay contém, no máximo, $O(n^{d/2})$ simplexes.
- No plano ($d = 2$), se houver b vértices sobre a cobertura convexa, então qualquer triangulação dos pontos tem no máximo $2n - 2 - b$ triângulos, acrescido de uma face exterior (característica de Euler) (83).
- A triangulação de Delaunay maximiza o ângulo mínimo. Comparado com qualquer outra triangulação dos pontos, o menor ângulo na triangulação de Delaunay é pelo menos tão grande quanto o menor ângulo em qualquer outro triângulo. No entanto, a triangulação de Delaunay não necessariamente minimiza o ângulo máximo.
- Um círculo que circunscreve qualquer triângulo de Delaunay não contém quaisquer outros pontos de entrada no seu interior.
- Se um círculo passando por dois dos pontos de entrada não contém qualquer outro ponto no seu interior, então o segmento ligando os dois pontos é uma face da triangulação de Delaunay destes pontos.
- A triangulação de Delaunay de um conjunto de pontos no espaço d -dimensional é a projeção da cobertura convexa das projeções dos pontos sobre um parabolóide em $(d + 1)$ dimensões.
- Para um ponto p no interior da cobertura convexa de uma triangulação de Delaunay, o vértice mais próximo de p não é necessariamente um dos vértices do triângulo que contém p .

Um exemplo de como essas regras são aplicadas pode ser observado na Figura 2.2. No primeiro caso, a maneira como a face comum aos dois triângulos é construída não obedece às condições de Delaunay, já que as circunferências contêm mais de 3 pontos e a soma dos ângulos opostos a face é maior do que 180° . Já no segundo caso, somente trocando a face comum de posição, as regras de Delaunay passam a ser obedecidas.

A triangulação de Delaunay de um conjunto discreto de pontos P corresponde a rede dual de Voronoi para P . O diagrama de Voronoi, assim chamado em homenagem

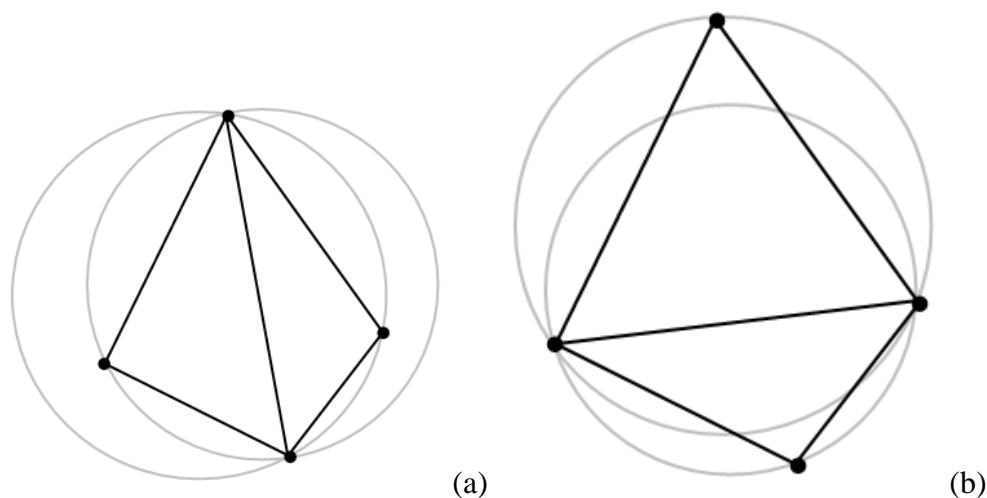


Figura 2.2: (a) A triangulação não obedece às condições de Delaunay (as circunferências contêm mais de 3 pontos). (b) Triangulação de Delaunay para 4 pontos.

a Georgy Voronoi, é um tipo especial de decomposição de um espaço métrico determinado por distâncias para um conjunto discreto de objetos no espaço, por exemplo, um conjunto de pontos discretos. No caso mais simples e mais comum, no plano, para um conjunto de pontos S , o diagrama de Voronoi para S é a partição do plano que associa uma região $V(p)$ com cada ponto p de S de tal forma que todos os pontos em $V(p)$ estão mais próximos de p do que qualquer outro ponto em S .

Para qualquer conjunto S discreto (topologicamente) de pontos no espaço euclidiano e para quase qualquer ponto x , há um ponto de S mais próximo de x . A palavra "quase" é usada para indicar exceções onde um ponto x pode ser igualmente perto de dois ou mais pontos de S . Se S contém apenas dois pontos, a e b , então o conjunto de todos os pontos equidistante de a e b é um hiperplano, um subespaço de dimensão 1. O hiperplano é a fronteira entre o conjunto de todos os pontos mais próximos de a do que b , e do conjunto de todos os pontos mais próximos de b do que a . É o bissetor perpendicular do segmento de linha de a a b .

Em geral, o conjunto de todos os pontos mais próximos de um ponto c de S do que qualquer outro ponto de S é o interior de um poliedro convexo chamado de domínio de

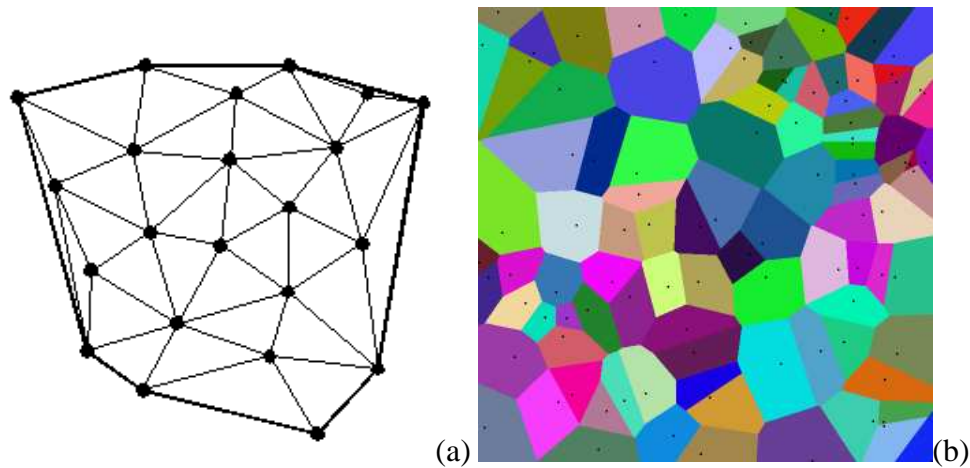


Figura 2.3: (a) A triangulação de Delaunay e (b) a rede de Voronoi.

Dirichlet ou célula de Voronoi de c . O conjunto de tais poleiedros ocupa todo o espaço, e corresponde a rede de Voronoi do conjunto S . Se a dimensão do espaço é apenas 2, é fácil visualizar a rede de Voronoi e, nesse caso, ela pode ser chamada de diagrama de Voronoi.

A rede de Voronoi apresenta as seguintes propriedades (68):

- O grafo dual para um diagrama de Voronoi corresponde à triangulação de Delaunay para o mesmo conjunto de pontos S .
- O par de pontos mais próximos corresponde a duas células adjacentes no Voronoi diagrama.
- Dois pontos são adjacentes sobre a cobertura convexa se e somente se as suas células de Voronoi compartilham um lado infinitamente longo.

Finalmente, na Figura 2.3 apresentamos um exemplo de triangulação de Delaunay e da rede de Voronoi para o caso bidimensional.

2.4 A Força de Arrasto

A força de arrasto é uma força aerodinâmica que se opõe ao movimento de um objeto através de um fluido (líquido ou gás). Ela é uma força mecânica que se deve à interação entre o objeto sólido e o fluido, ou seja, para que ela exista é necessário que o objeto e o fluido estejam em contato. Além disso, deve haver uma diferença de velocidade entre o objeto e o fluido, independente se o objeto se move através do fluido estático ou se o fluido escoar através do objeto sólido.

A origem dessa força se deve ao atrito das moléculas do fluido com a superfície sólida do objeto e, por isso, depende das propriedades de ambos. Por exemplo, um objeto liso irá sofrer uma força de arrasto menor do que um objeto áspero. Da mesma forma, a viscosidade do fluido irá influenciar a magnitude desta força. Além disso, devemos considerar a forma do objeto. Conforme o fluido escoar através do objeto, a velocidade e a pressão locais são alteradas. Já que a pressão é uma medida do momento das moléculas do fluido e uma mudança no momento produz uma força, uma variação na distribuição de pressão irá produzir uma força sobre o objeto. Podemos obter a magnitude dessa força simplesmente integrando a pressão local vezes a área da superfície ao redor de todo o objeto. A componente da força aerodinâmica que se opõe ao movimento é a força de arrasto; a componente perpendicular ao movimento é a força de *lift* ou ascensão. Ambas forças agem no *centro de pressão* do objeto.

A equação de arrasto, também chamada de arrasto quadrático foi introduzida por Lord Rayleigh e é dada por

$$\vec{\mathbf{F}}_d = -\frac{1}{2}\rho v^2 A C_A \hat{\mathbf{v}}, \quad (2.55)$$

onde ρ é a densidade do fluido, v é a velocidade do objeto relativa ao fluido, A é a área de referência, C_A é o coeficiente de arrasto (uma constante adimensional) e $\hat{\mathbf{v}}$ é o vetor unitário que indica a direção da velocidade (o sinal negativo indica que o arrasto ocorre na direção contrária a da velocidade). Sua dedução é apresentada no Apêndice B. A área de referência A é considerada a área de projeção de um objeto no plano perpendicular à direção de movimento. Por exemplo, para uma esfera de raio R , $A = \pi R^2$.

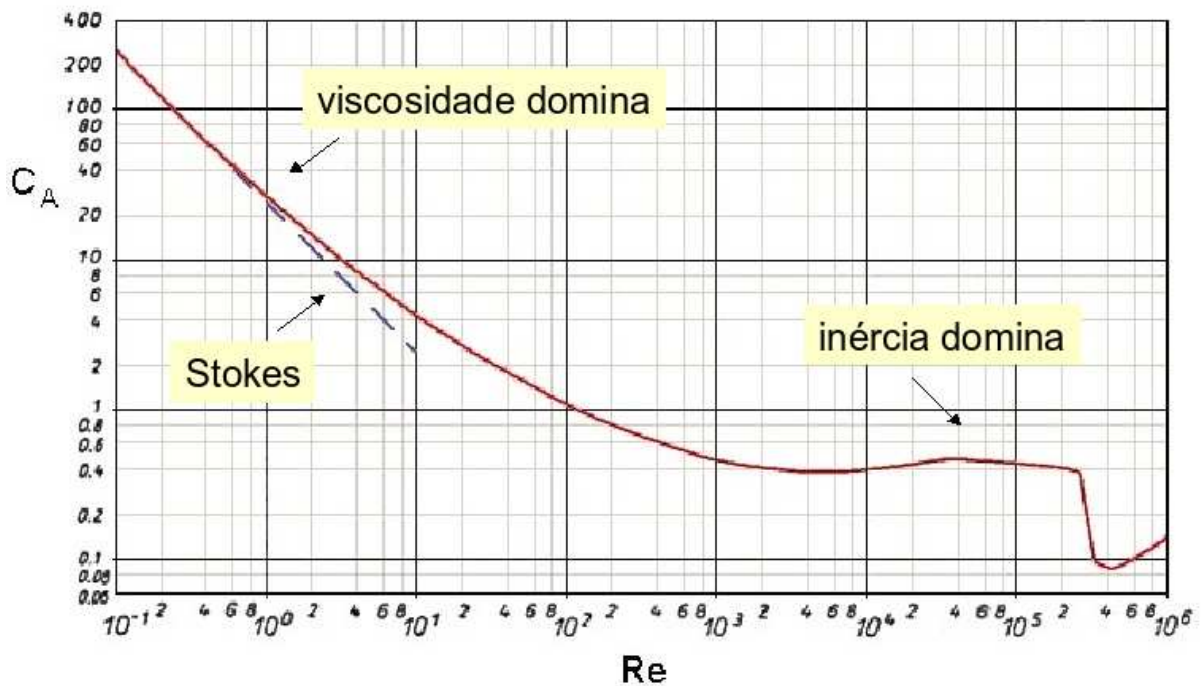


Figura 2.4: Coeficiente de arrasto de uma esfera em função do número de Reynolds. Para pequenos valores de Re , a lei de Stokes é válida (2).

2.4.1 A Força de Arrasto de Uma Esfera

Estudos sobre a magnitude da força de arrasto sobre esferas devido ao movimento estacionário de um fluido viscoso iniciaram-se com os experimentos de Newton em 1710, o qual obteve a seguinte equação para a força (72)

$$F_c = 0.22\pi\rho R^2 v_f^2 \quad (2.56)$$

para velocidades relativamente altas, onde F_c é a força exercida sobre a esfera, R o raio e ρ a densidade do material que flui. Essa relação leva em conta os efeitos de inércia, já que consideram-se situações com número de Reynolds no intervalo $10^3 < Re < 10^5$ e, conseqüentemente, coeficiente de arrasto $C_A = 0.4 - 0.5$.

Para baixas velocidades $Re \ll 1$, Stokes, em 1850, sugeriu que os efeitos inerciais

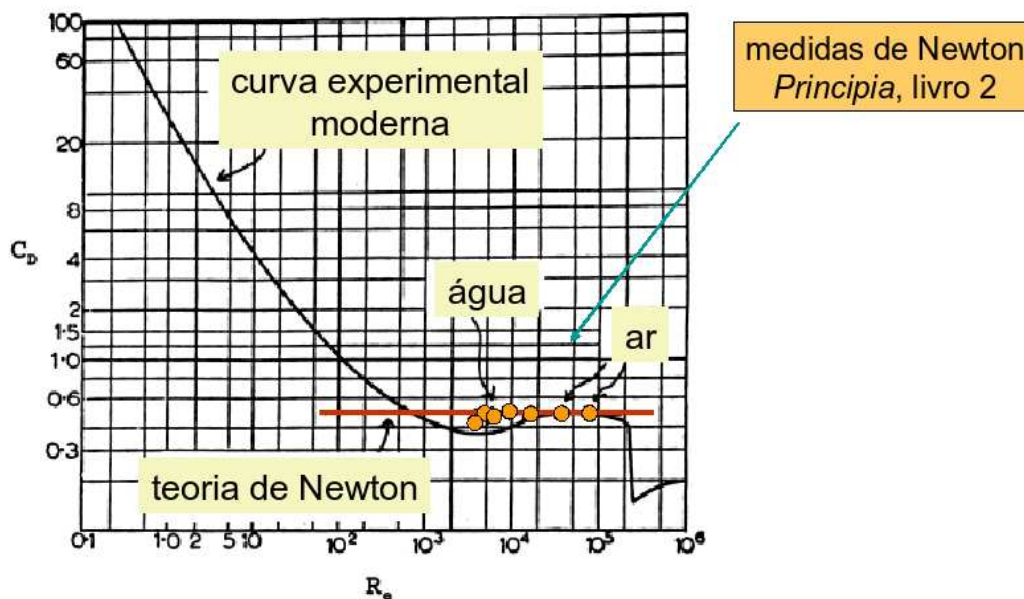


Figura 2.5: Coeficiente de arrasto de uma esfera em função do número de Reynolds. Comparação entre a teoria de Newton e medidas recentes (3).

são tão pequenos que eles podem ser desprezados nas equações de Navier-Stokes. Além disso, nessa situação, o coeficiente de arrasto é dado por $C_A = 24/Re$. A sua aproximação assintótica oferece então um campo de fluxo simétrico ao redor da esfera. A força de arrasto obtida é (72)

$$F_c = 6\pi\mu Rv_f, \quad (2.57)$$

onde μ é a viscosidade do fluido e F_c consiste de $\frac{2}{3}$ de força cisalhamento e $\frac{1}{3}$ de forças de pressão. Essa expressão é conhecida como lei de Stokes e também pode ser obtida em termos da velocidade terminal de uma esfera que cai através de um fluido (veja Apêndice C).

É bom lembrar que a lei de Stokes é válida para sistemas com número de Reynolds bem menor do que 1; para valores de Re maiores, a lei de Stokes prevê uma força de arrasto que é cerca de 10% menor (72).

Na Figura 2.4 apresentamos o resultado experimental que relaciona o coeficiente de

arrasto e o número de Reynolds (2). Na Figura 2.5 apresentamos uma comparação entre a teoria de Newton e os dados recentes obtidos para a curva $C_A \times Re$ (3). É interessante notar que, para o intervalo de Reynolds usado, os resultados encontrados tanto para a água como para o ar correspondem ao que Newton previu. No entanto, para os demais valores de Reynolds, essa teoria se mostra inválida.

Podemos notar que, para $Re < 0.5$, o coeficiente de atrito varia linearmente com o número de Reynolds, conforme previsto teoricamente por Stokes. Nesse regime, o escoamento apresenta regime laminar. Conforme o número de Reynolds aumenta, mais especificamente para $10^1 < Re < 10^4$, uma onda aparece atrás da esfera. Nessa região a relação entre C_A e Re pode ser aproximada pela equação de arrasto de Newton. A depressão em C_A que aparece para Re entre 10^5 e 10^6 , conhecida como crise do arrasto, corresponde à formação de uma camada limite turbulenta em frente à esfera, acompanhada por uma estreita onda atrás desta que faz com que a força de arrasto diminua. Os resultados obtidos por Taneda (4) para o escoamento através de uma esfera para diferentes números de Reynolds são mostrados na Figura 2.6.

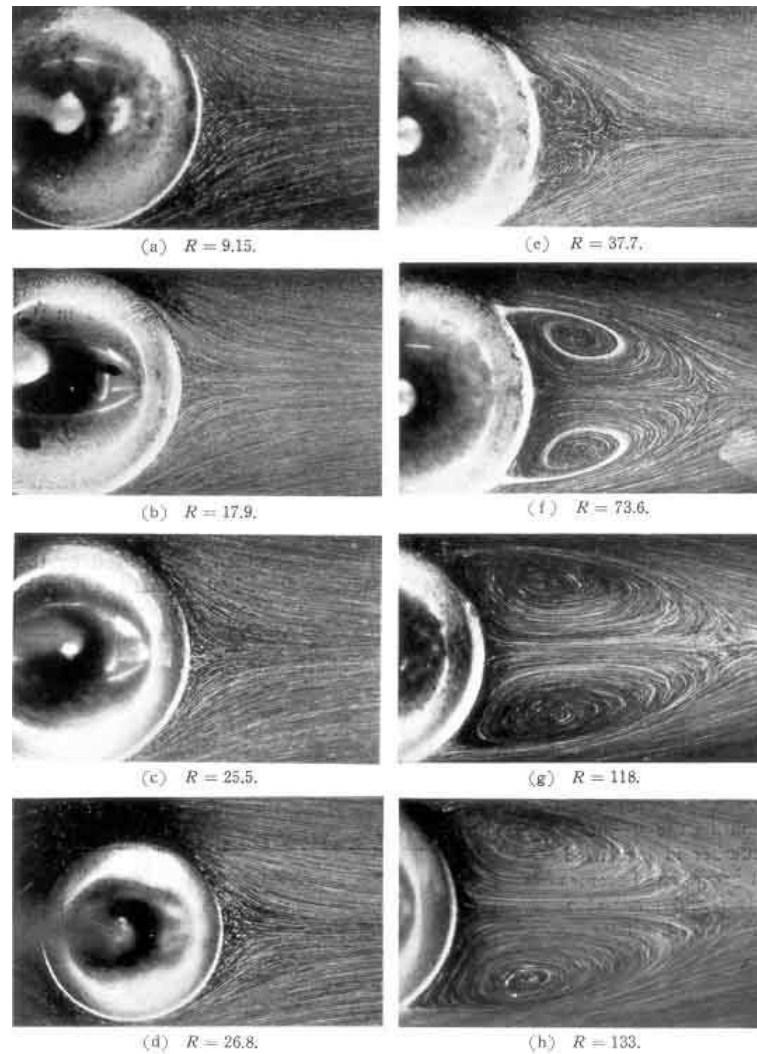


Figura 2.6: Fluxo através de uma esfera (da direita para a esquerda) para diferentes números de Reynolds (4). Se um fluido com escoamento laminar flui em torno de um obstáculo, ele exerce uma força sobre o obstáculo. As forças de atrito aceleram o fluido para trás (contra a direção do escoamento) e o obstáculo para frente (na direção do fluido).

2.5 Dinâmica Molecular

O problema proposto neste trabalho refere-se a dinâmica de um meio granular, ou seja, refere-se ao estudo do movimento de inúmeras partículas que podem interagir entre si e com o meio externo. Esse é um típico problema conhecido como problema de N corpos.

O problema de N corpos originou-se na dinâmica do sistema solar, onde o problema geral é insolúvel para três ou mais corpos. Assim que a natureza atômica da matéria foi firmemente estabelecida, a mecânica quântica tomou conta do mundo microscópico. Mas uma grande parte do comportamento da matéria em seus vários estados ainda pode ser entendida em termos clássicos. Dessa forma, o problema clássico de N corpos é fundamental para compreendermos o assunto em nível microscópico. A solução numérica para esse problema é fornecida pela dinâmica molecular (DM) (84).

Para os sistemas em equilíbrio térmico, a mecânica estatística colaborou consideravelmente para o problema de N corpos, em especial sob o ponto de vista conceitual. A mecânica estatística fornece uma descrição formal baseada na função de partição de um sistema em equilíbrio; porém, com algumas exceções, respostas quantitativas são difíceis de serem obtidas, a não ser que aproximações sejam introduzidas e, mesmo assim, é necessário considerar que o sistema em estudo é grande. Uma vez fora de equilíbrio, a teoria tem muito pouco a dizer. As simulações de vários tipos, incluindo DM, ajudam a preencher as lacunas existentes e, no caso geral, são as responsáveis pelo progresso no estudo desses sistemas.

Desde o início, o papel dos computadores na investigação científica tem sido crucial, tanto no aspecto experimental, na análise de dados, como teórico, na formulação de modelos. Para a teoria, o computador tem proporcionado uma nova forma de entendimento. Ao invés de tentar obter expressões simplificadas de forma fechada que levem em conta aproximações, o computador é capaz de examinar o sistema original diretamente. Embora não haja uma fórmula analítica para resumir os resultados, todos os aspectos do comportamento podem ser estudados a partir dos dados numéricos obtidos.

Com a evolução da simulação computacional nos últimos vinte anos, esta tornou-se um método poderoso para o estudo científico da matéria condensada. Como áreas de aplicação, pode-se citar a modelagem molecular, modelos de spin, líquidos, dinâmica quântica, e outras. O conhecimento do modelo utilizado para a descrição da matéria real é de fundamental importância no tratamento computacional de um sistema de interesse. Uma grande variedade de técnicas de modelagem foram desenvolvidas ao longo dos anos para trabalhar no nível molecular além de DM, como por exemplo, Monte Carlo (85), técnicas envolvendo integral de caminho (86), DM combinada com teoria de função densidade do elétron (87), bem como abordagens discretas, como autômatos celulares e o método de rede de Boltzmann (88).

O fundamento para a simulação de DM é o conhecimento da equação do movimento para o sistema considerado. O algoritmo de um programa de DM consiste em determinar explicitamente as trajetórias (coordenadas e momentos conjugados em função do tempo) de pontos representativos do espaço de fase através da solução numérica das equações do movimento do sistema sob estudo. Escolhendo o passo de integração, a resolução temporal e extensão da trajetória podem ser adaptadas aos eixos de relaxação temporal para os processos dinâmicos. A partir da trajetória, propriedades de equilíbrio e grandezas dinâmicas podem ser calculadas em um programa de DM.

As primeiras simulações de DM foram realizadas por Alder e Wainwright (89) com o propósito de estudar o conhecido paradoxo da reversibilidade: um sistema clássico de muitas partículas é governado pelas equações temporais reversíveis enquanto a descrição macroscópica (termodinâmica) do mesmo sistema está baseada por leis irreversíveis. Eles mostraram que a distribuição de velocidades do sistema de 100 esferas impenetráveis convergia rapidamente ao equilíbrio. A primeira aplicação do método de DM ao estudo de materiais foi feita por Vineyard et al.(90) através da investigação do processo de dano no material por radiação usando um potencial repulsivo de curto alcance e um potencial responsável pela coesão do cristal. Em seguida, Rahman (91) foi o primeiro a investigar sistemas descritos por potenciais contínuos simulando o argônio líquido. Ao observar um sistema de 864 partículas, com condições periódicas de

contorno, foi possível reproduzir satisfatoriamente as propriedades termodinâmicas de sistemas reais. Mais informações sobre a história e uma coletânea de artigos sobre a aplicação de DM em sólidos podem ser encontradas na Ref. (92).

O objetivo básico da técnica de DM é observar a evolução do sistema dado através da determinação do movimento das partículas individuais. Devido às interações entre partículas, o sistema é capaz de manter tanto o equilíbrio mecânico quanto térmico, e no caso de perturbações externas o sistema pode atingir uma nova configuração de equilíbrio.

Em DM, calculamos a trajetória de fase do sistema que obedece à dinâmica de Newton-Hamilton. A partir de uma configuração inicial $\{\vec{\mathbf{r}}_i(t_0), \vec{\mathbf{v}}_i(t_0)\}$, $i = 1 \dots N$, para um dado tempo t_0 ($6N$ condições iniciais), as soluções das equações clássicas do movimento das N partículas interagindo através de potencial conhecido, tornam possível conhecer todas as configurações sucessivas $\{\vec{\mathbf{r}}_i(t_j), \vec{\mathbf{v}}_i(t_j)\}$, $t_j = j\Delta t$, com $j = 1, \dots$ para uma seqüência de tempos posteriores t_j . Se a Hamiltoniana do sistema for invariante por translação e rotação e for explicitamente independente do tempo então as correspondentes componentes dos momentos linear e angular, bem como a energia total, são conservadas. Esta lei de conservação de energia se aplica independentemente da existência ou não de um campo externo. A condição essencial é que a força que atua no sistema não dependa explicitamente do tempo ou da velocidade.

O procedimento tradicional na resolução das equações de Newton consiste em discretizar as equações diferenciais acopladas, ou seja, transformá-las em diferenças finitas. Partindo do pressuposto de que o potencial de interação, e portanto as forças entre partículas, são funções contínuas e diferenciáveis, dadas as condições iniciais em um instante t_0 , a posição, a velocidade e qualquer outra variável dinâmica, pode ser obtida em um instante de tempo posterior $t + \Delta t$ com a precisão adequada. A escolha de Δt é fundamental: não deve ser tão pequeno que o sistema não consiga evoluir (ou demore muito tempo para evoluir), e também não tão grande de modo que as constantes de movimento não se mantenham invariantes. Na maioria das vezes, Δt está relacionado com alguma frequência característica do sistema. Existe uma imensa variedade de

algoritmos, todos baseados em expansões do tipo da série de Taylor. Os mais empregados são os de diferença central (Beeman, leap-frog, Runge-Kutta, Verlet)(93–95), Gear (predictor-corrector) (89) e integradores simpléticos (96). O compromisso entre a precisão e o armazenamento de dados na memória do computador, na maioria das vezes, é determinante na escolha do algoritmo. Nos casos em que é preciso eliminar efeitos de superfície torna-se necessário o uso de condições periódicas de contorno. Um dos passos mais importantes e o que consome mais tempo computacional é o cálculo das forças entre as partículas.

Dado que, com a solução das equações do movimento, podemos realizar médias temporais, as grandezas macroscópicas podem assim ser calculadas. Deste modo, podemos determinar, a temperaturas finitas, a estrutura microscópica do sistema bem como as propriedades termodinâmicas.

O sistema que estudamos neste trabalho envolve a interação entre inúmeras partículas, mas a força que age sobre cada uma delas é proporcional a velocidade relativa entre o fluido e a partícula, como será mostrado no próximo capítulo. Assim, esse sistema não pode propriamente ser resolvido usando dinâmica molecular, já que uma das considerações para tal é a de que a força não dependa da explicitamente da velocidade. Mesmo assim, podemos construir um código específico para o nosso problema e que envolva características do método de DM. Por exemplo, podemos discretizar as equações de movimento e determinar o deslocamento e a velocidade de cada partícula, sendo que a escolha do intervalo de tempo adotado para cada passo de iteração deve ser escolhido de forma que a dinâmica obtida não dependa explicitamente do seu valor. Assim como na DM, o comportamento coletivo do sistema não pode ser previsto, mas pode ser caracterizado conhecendo-se a dinâmica de cada partícula do sistema. Além disso, conhecendo as soluções do nosso problema, ainda podemos resolver médias temporais (ou espaciais) de forma a obter quantidades macroscópicas que sejam interessantes para caracterizar o sistema. Ou seja, partimos da dinâmica microscópica para entender o comportamento macroscópico.

3 MODELO

Modelamos um sistema que envolve a interação de dois meios diferentes: um meio granular que pode se mover e um fluido incompressível e newtoniano que flui através dos grãos. Nesse modelo, assumimos que o movimento das partículas não transfere momento para o fluido. Naturalmente, uma aproximação mais realista consideraria a transferência de momento entre os grãos e o fluido ao somar a troca de momento de todas as partículas ao passarem através de um volume do fluido pré-definido. No balanço do momento, esse termo de transferência apareceria como uma fonte (97, 98). Nesse trabalho, assumimos um regime de estado quasi-estacionário, ou seja, o fluxo do fluido se adapta instantaneamente a geometria do meio poroso. Essa hipótese é válida desde que os efeitos inerciais não sejam relevantes. Conseqüentemente, o acoplamento hidrodinâmico entre o movimento das partículas e o fluxo do fluido é imposto ao resolvermos alternadamente a dinâmica das partículas e as equações do fluxo do estado estacionário.

Assim, o problema que estudamos se divide em três partes. Na primeira, iremos definir a rede usada para descrever o meio granular, ou seja, a *rede aleatória regularizada* e iremos definir quais os parâmetros usados para definir redes com diferentes porosidades. Na segunda, iremos descrever como o fluido escoar nessa rede. Ao invés de calcularmos exatamente qual o estado estacionário do fluido no meio granular, iremos criar uma rede de capilares através da qual o fluido por escoar. Cada um desses capilares está localizado entre um par de partículas e cada um desses pares apresenta diferentes valores para a distância entre os centros de massa das partículas. Assim, iremos determinar o perfil de velocidade estacionário e o fluxo do fluido que escoar através de cada um desses canais. Isso é equivalente a dizer que iremos determinar a dinâmica do

fluido na rede estática dos grãos. Com isso, podemos determinar qual a permeabilidade para cada um dos canais existentes no meio. É importante ressaltar que para cada valor diferente de distância entre o par de partículas, o cálculo da permeabilidade é realizado somente uma vez. Assim, conforme os grãos se movem no decorrer da simulação e novas redes de capilares são formadas, possuímos conhecimento prévio da permeabilidade em cada canal do sistema. Na terceira parte, apresentamos quais as forças que podem ser consideradas para agir sobre cada grão do sistema. Em particular, iremos nos ater à força que o fluido exerce sobre cada grão, ou seja, a força de arrasto. Nesse modelo, a força de arrasto é dada pela lei de Stokes, ou seja, a força é proporcional a velocidade relativa entre a partícula e o fluido. A velocidade do fluido em cada canal é determinada conhecendo-se a geometria do canal, a sua permeabilidade e o gradiente de pressão entre os seus extremos. Com isso, iremos apresentar a equação de movimento obtida para cada grão e calcular analiticamente como a velocidade e o deslocamento de cada partícula variam com o tempo. Considerando intervalos de tempo pequenos, podemos deslocar todas as partículas do valor calculado e obter uma nova configuração para o meio granular e a rede que o descreve. A partir daqui todo o processo descrito para o cálculo da força se repete e, dessa forma, podemos analisar a dinâmica da rede de grãos espacial e temporalmente.

3.1 A Rede

Para simplificar o sistema iremos considerar inicialmente nosso meio granular como uma rede composta por somente uma camada de grãos esféricos com massas e tamanhos idênticos. O meio granular é representado por uma *rede aleatória regularizada* (RRR) (5) bidimensional composta de $N \times N$ grãos. Para construir essa rede consideramos inicialmente uma rede regular quadrada onde os sítios se encontram sobre um plano horizontal e representam os centros de massa dos grãos de diâmetro d . A distância entre os centros de massa dos vizinhos mais próximos de cada grão é l_0 . Os pontos da rede são então deslocados aleatoriamente ao longo de um vetor com direção arbitrária (mas sempre sobre o plano) e com módulo também aleatório, mas menor do que a distância

entre os vizinhos mais próximos. Dessa forma, os pontos estão distribuídos aleatoriamente, mas com uma distância característica. A liberdade que temos para escolher o valor máximo do módulo do vetor arbitrário depende do valor l_0 que é escolhido, já que não devemos iniciar uma rede com grãos que se sobreponham. Assim, para evitar a sobreposição dos grãos, o valor máximo que o módulo deste vetor deslocamento pode assumir é $(l_0 - d)/2$.

Embora a construção da rede seja em duas dimensões, estamos na verdade descrevendo um sistema tridimensional de monocamada sobre uma superfície, pois apesar de os centros de massa das partículas se encontrarem sobre um plano $2D$, os grãos são considerados esféricos.

Consideramos que a rede apresenta condições de contorno laterais periódicas, ou seja, o fluido que sai por uma das laterais deve entrar na outra lateral. Somente os pontos localizados nas linhas inferior e superior da rede não são deslocados de um vetor aleatório, mantendo distância inicial l_0 entre os pontos vizinhos da mesma linha. Além disso, os pontos localizados nessas linhas nunca se movem. Dessa forma, a condição de contorno que impomos entre a base e o topo da rede é a de que qualquer ponto da rede (que não esteja localizado nas linhas da base e do topo) que se desloque para baixo da linha da base é substituído por um outro ponto logo abaixo a linha do topo. Caso não haja espaço nessa região para esse grão, ele permanece na posição original.

Com a rede que construímos com os grãos é possível gerar uma rede de capilares por onde o fluido escoar e que representa uma geometria complexa do espaço de poros. Para isso, o primeiro passo é realizar a triangulação de Delaunay (67) na rede, onde cada triângulo tem como vértices os próprios centros de massa dos grãos. O método de triangulação consiste basicamente em conectar cada ponto aos seus vizinhos mais próximos, mas de tal forma que as conexões não se cruzem. Com essa construção, podemos identificar as regiões que conectam um triângulo ao outro como sendo os poros. A conexão entre os poros gera uma rede de capilares que chamamos de rede de Voronoi (68). Na Figura 3.1, mostramos uma configuração inicial RRR e a sua respectiva triangulação e rede de capilares.

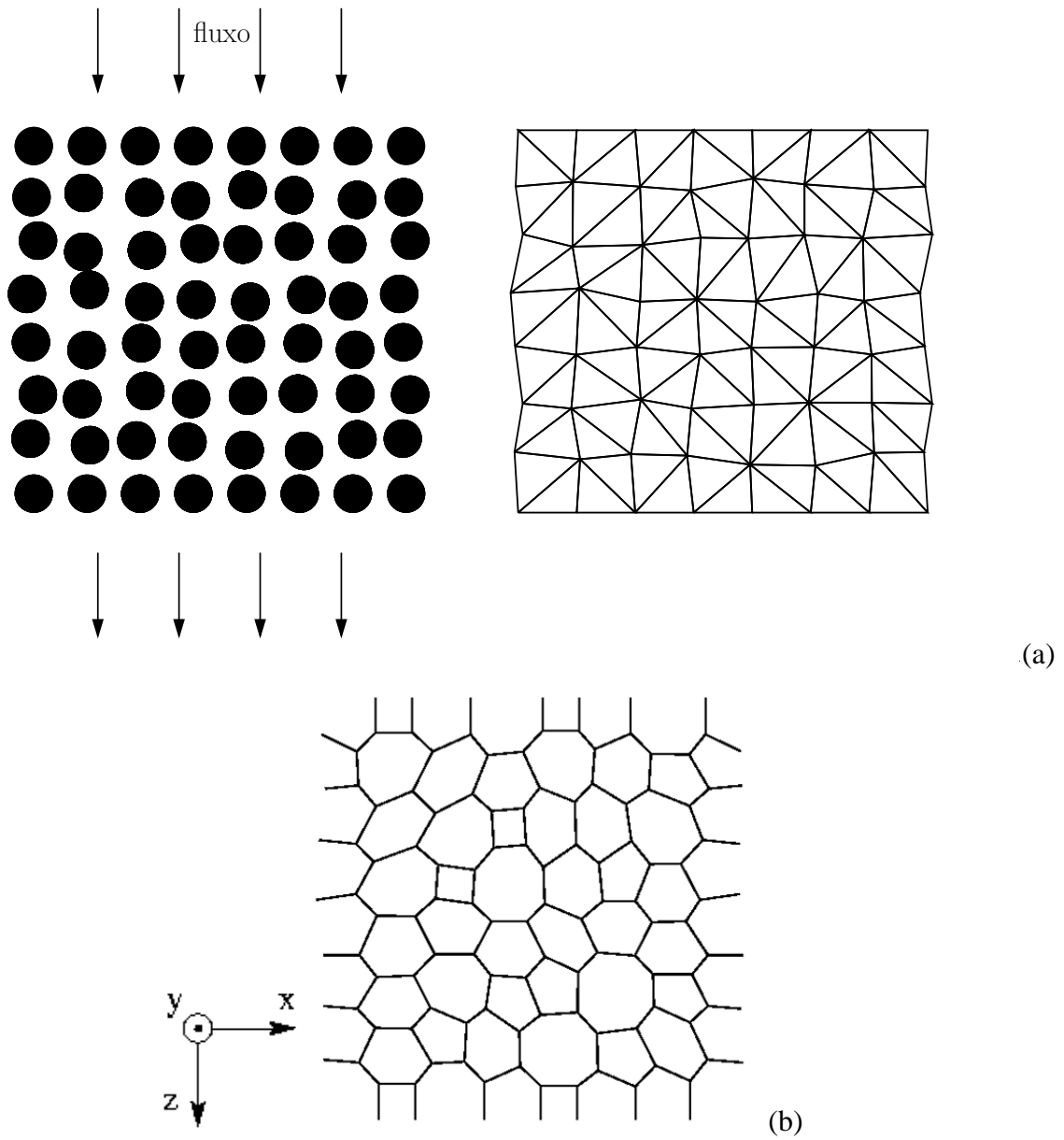


Figura 3.1: Uma rede aleatória regularizada para 64 grãos com $l_0 = 2.7$ e sua triangulação (a) e rede de capilares (b).

3.2 O Fluido

Consideramos que os grãos se encontram totalmente submersos num fluido (por exemplo, água). Vamos considerar que a densidade ρ e a viscosidade μ do fluido são constantes. O fluido flui na direção paralela ao solo e durante o processo de arrastamento dos grãos o fluido mantém sempre o mesmo nível com relação aos grãos.

Conforme já descrevemos na seção anterior, a rede de grãos que construímos apresenta uma rede de capilares com geometria complexa no espaço de poros. Dessa forma, não pretendemos determinar exatamente como o fluido escoar na rede de poros, mas queremos modelar os canais capilares entre cada par de grãos por canais com geometria mais simples. Iremos assumir que a geometria local entre cada par de grãos vizinhos i e j nessa rede pode ser modelada por um canal de comprimento l (a distância entre os baricentros dos triângulos adjacentes correspondentes), altura d e largura w igual a distância entre os centros de massa dos grãos. Se esse canal apresentar condições de contorno periódicas na direção x , a configuração deste canal é equivalente a um paralelepípedo preenchido por fluido e que contém em seu centro um grão esférico de diâmetro d , conforme apresentamos na Figura 3.2. Ambos planos da rede de partículas que descrevem o solo e a interface água/ar são ortogonais ao eixo y e o fluido sempre flui na direção z .

3.2.1 FLUENT

Para a configuração do canal tridimensional que apresentamos, resolvemos a equação de Navier-Stokes usando o software comercial CFD (*Computational Fluid Dynamics*) FLUENT (69).

Consideramos condições de contorno *no-slip* na base, ou seja, a velocidade do fluido deve ser nula na base, e assumimos que a base superior é livre de *shear-stress* (tensão de cisalhamento), já que a velocidade do fluido não é previamente definida no topo. Adicionalmente, não consideramos o efeito de tensão na superfície devido a interface

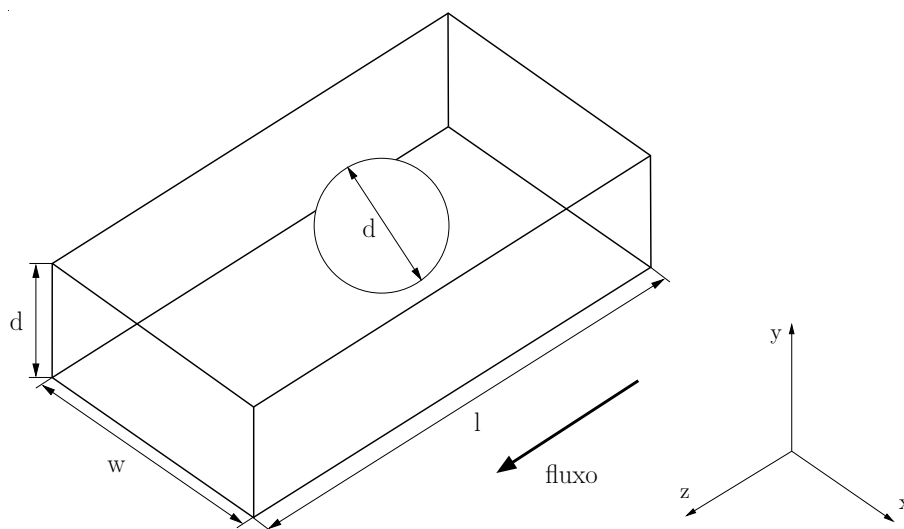


Figura 3.2: A distribuição de velocidade é determinada no canal de comprimento l , altura d e largura w . As condições de contorno são periódicas na direção x . A velocidade média do fluido v_f é calculada na seção retangular (5).

água/ar. Um gradiente de pressão Δp é imposto entre os dois extremos do canal na direção z , o qual deve ser suficientemente pequeno para garantir as condições de fluxo viscoso, ou seja, o fluxo num regime de baixo número de Reynolds. Nós utilizamos uma malha de tetraedros não estrutural para discretizar o canal e um esquema de diferenças finitas *upwind* (99) para realizar as simulações numéricas (99, 100). As distribuições estáveis de velocidades e pressão serão calculadas para diferentes geometrias do canal, mais especificamente, variando a razão w/d .

Já que consideramos um regime com baixo número de Reynolds, o fluxo através do canal pode ser caracterizado em termos da permeabilidade κ deste canal, através da relação

$$v_f = -\frac{\kappa \Delta p}{\mu l}, \quad (3.1)$$

ou seja, da lei de Darcy (80), onde μ é a viscosidade do fluido e v_f é a velocidade média do fluido. Note que essa é a velocidade do fluido com relação aos grãos. Se os grãos se movem, deve aparecer uma outra velocidade que reflete o fato dos grãos carregarem

parte do fluido com eles, mas isso não é levado em conta neste modelo. Discretizamos o termo $\partial p/\partial z = \Delta p/l$, já que consideramos que a pressão efetiva se refere a cada poro e não muda gradualmente. Além disso, o comprimento l é considerado constante nos cálculos com o FLUENT e seu valor é escolhido de forma que não seja curto demais para obtermos somente a região onde o fluido sofre distorção nas linhas de fluxo ao redor da esfera e nem longo demais para que a permeabilidade do canal não dependa da presença da esfera. Já que estamos interessados em analisar o comportamento do fluido no regime laminar, as distribuições de velocidade e pressão serão analisadas na seção retangular do canal onde as linhas de fluxo são unidirecionais (direção z .)

O valor de Δp utilizado nas simulações com o FLUENT deve ser suficientemente pequeno para garantir que o escoamento apresenta regime laminar, ou seja, que a lei de Darcy seja válida. Dessa forma, uma vez conhecida a distribuição de velocidade calculada pelo FLUENT para um dado canal caracterizado pela razão w/d , é possível obter numericamente a velocidade média v_f através da seção de área retangular ortogonal ao fluxo no sistema. Se repetirmos este procedimento para diferentes valores de Δp , podemos obter o valor da permeabilidade κ para cada valor de w/d diretamente do coeficiente angular da relação entre v_f e Δp .

Para diferentes valores de w/d devemos esperar, portanto, que a permeabilidade κ possa ser descrita através de uma relação do tipo

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = f\left(\frac{w}{d}\right), \quad (3.2)$$

onde κ_0 é o valor da permeabilidade para o canal caracterizado pela razão $w/d = 1$, ou seja, pela configuração onde o par de grãos está em contato. Assim, iremos obter o valor de κ/κ_0 para diferentes valores de w/d e a função $f(w/d)$ pode ser obtida através de um *fitting* ou da interpolação desses pontos.

Conforme o procedimento descrito acima, podemos portanto determinar a geometria local e a permeabilidade de todos os capilares do sistema. É importante ressaltar que

todas as componentes do campo de velocidade (incluindo as componentes verticais) são implicitamente consideradas no cálculo das permeabilidades dos canais capilares, já que o código CFD obtém soluções tridimensionais para a equação de Navier-Stokes e a equação de continuidade. Em seguida, as permeabilidades obtidas para cada canal são utilizadas para calcular o fluxo através de toda a rede de capilares do meio poroso. Assim, como todos os canais se encontram no mesmo plano podemos considerar que o fluxo é restrito a esse plano.

Entre as bases superior e inferior do sistema impomos um gradiente de pressão constante (101). O fluido é injetado na parte superior da rede e a atravessa até alcançar a parte inferior. As seguintes equações de conservação de massa local são impostas em cada poro do sistema, de forma a garantir que o fluido escoe através de todo o espaço de poros:

$$\sum_j g_{ij}(p_i - p_j) = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, M, \quad (3.3)$$

onde M é o número total de nós (triângulos) existentes na rede. O índice j corresponde a todos os triângulos vizinhos ao triângulo i , p_i e p_j são as pressões efetivas nos poros i e j , respectivamente, e g_{ij} é a condutância hidráulica entre eles. A forma de g_{ij} deve depender da forma dos grãos e da geometria considerada através da qual o fluido escoia. Note que, pelo fato de estarmos lidando com uma rede de capilares, as equações de conservação 3.3 são equivalentes a lei de Kirchhoff para um circuito elétrico, onde o análogo à pressão efetiva é o potencial elétrico.

Para fluxos no regime laminar, sabemos que o fluxo Q e a diferença de pressão Δp apresentam uma relação linear, ou seja, $Q \propto \Delta p$. Dessa forma, as equações 3.3 são equivalentes às equações de conservação de fluxo em cada poro

$$\sum_j Q_{ij} = 0, \quad (3.4)$$

ou seja, o fluxo que entra deve ser o mesmo que sai de em um determinado poro, o que é equivalente a dizer que o fluxo que entra/sai por um dos lados do triângulo deve ser o mesmo que a soma dos fluxos que sai/entra pelos outros dois lados do triângulo.

Para a configuração utilizada, podemos facilmente observar que o fluxo através de cada par de grãos é dado por (101)

$$Q = v_f A = \frac{\kappa w d}{\mu l} \Delta p, \quad (3.5)$$

de onde obtemos $g_{ij} = \kappa w d / l$.

Dessa forma, as equações 3.3 correspondem a um conjunto de M equações lineares algébricas acopladas que devem ser resolvidas simultaneamente em termos das pressões em cada nó. Para cada uma dessas equações, o nó i pode estar conectado com no máximo 3 outros nós, já que o triângulo que engloba esse nó pode apresentar somente 3 vizinhos. Dessa forma, a matriz $M \times M$ que deve ser resolvida apresenta muitos elementos nulos, já que para cada linha da matriz existem no máximo 4 elementos não nulos (1 para p_i e 3 para p_j). O número de elementos não nulos em uma linha será menor do que 4 quando um dos nós vizinhos corresponder a base ou ao topo do sistema, onde o valor da pressão é definido previamente. Esse tipo de matriz é chamada de esparsa e pode ser resolvida usando uma subrotina padrão para matrizes esparsas. Devemos notar que o número de triângulos M depende da configuração dos grãos na rede e, por isso, pode mudar de valor conforme os grãos se movimentam. Conhecendo as pressões em cada poro, a velocidade média v_f do fluido pode ser finalmente calculada em cada canal capilar da rede de poros. Como v_f depende da geometria de canal, a distribuição de velocidades em todo o sistema deve apresentar um perfil irregular e variável no tempo.

3.3 O Movimento das Partículas

Após calcularmos a distribuição de velocidades na rede de poros, precisamos determinar quais forças irão afetar o movimento de todos os grãos do sistema.

Da seção anterior, a distribuição de velocidade obtida para cada canal localizado entre dois grãos mostra que esse par de grãos não sofre ação do fluido que passa através desse canal. O único grão que poderá ser deslocado por tal fluido será aquele localizado a frente na direção do fluxo. Usando outros termos, se considerarmos o triângulo no qual dois de seus vértices correspondem aos grãos entre os quais o fluido escoar, o grão a ser deslocado está localizado no vértice restante. O deslocamento dos grãos ocorre sempre na direção do fluxo local.

A princípio, podemos considerar várias forças agindo sobre os grãos, como por exemplo, as forças de empuxo, gravitacional e de atrito, além da força que está associada a *energia cinética* do fluido, a força de arrasto. Como o sistema consiste de uma camada de partículas submersas, a força de empuxo é muito pequena comparada a força de arrasto e pode ser desprezada. Além disso, a gravidade agindo na direção y não é relevante nesse problema porque assumimos que não há atrito entre as partículas e o solo. Assim, a única força relevante agindo sobre as partículas é a força de arrasto \vec{F}_c .

A segunda lei de Newton é usada para determinar a aceleração que a partícula de massa m e diâmetro d adquire ao sofrer ação da força \vec{F}_c . Devemos ainda lembrar que a partícula não está em repouso e que a equação que devemos resolver para cada partícula depende não somente dos parâmetros relacionados a partícula (forma, densidade) e ao fluido (viscosidade), como também da velocidade relativa entre o fluido e a partícula. De acordo com a lei de Stokes, a força sobre cada partícula se resume a

$$\vec{F}_c = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = 3\pi\mu d \sum_i (\vec{v}_f^i - \vec{v}), \quad (3.6)$$

onde \vec{v}_f^i é a velocidade do fluido no canal i , \vec{v} é a velocidade da partícula e a soma vetorial no termo a direita é feita sobre os n canais ao redor da partícula cujos fluxos exercem

força de arrasto sobre essa partícula. Na Figura 3.3, mostramos os canais que devem ser considerados no cálculo da força sobre alguns grãos. Representamos tais grãos pela cor vermelha e os triângulos com contorno vermelho são os que possuem canais entre os dois grãos pretos restantes cujo fluxo irá exercer arrasto sobre o grão. Se observarmos os triângulos com contorno verde, os canais entre os dois grãos pretos irão apresentar fluxo no sentido inverso ao que poderia exercer arrasto sobre os grãos marcados com vermelho e, por isso, não devem ser considerados no somatório da equação 3.6. De acordo com a lei de Stokes, se a velocidade da partícula for menor que a velocidade do fluido, a força sobre ela é positiva, tendendo a aumentar a sua velocidade; e se a velocidade da partícula for maior que a velocidade do fluido, a força é negativa, tendendo a diminuir a sua velocidade. Isso significa que a força age sobre a partícula de forma que a sua velocidade sempre se aproxime da velocidade do fluido ao seu redor. Reescrevendo a equação 3.6, temos a seguinte equação de movimento

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = C(\sum_i \vec{v}_f^i - n\vec{v}), \quad (3.7)$$

onde

$$C = 18 \frac{\mu}{\rho_g d^2}, \quad (3.8)$$

e ρ_g é a densidade do grão.

Assim, para determinar a equação de movimento de cada partícula devemos resolver a seguinte equação

$$\int_{\vec{v}_0}^{\vec{v}} \frac{d\vec{v}}{(\sum_i \vec{v}_f^i - n\vec{v})} = C \int_0^{\Delta t} dt, \quad (3.9)$$

onde \vec{v}_0 é a velocidade no passo de tempo anterior.

Resolvendo essa integral, podemos escrever a velocidade \vec{v} assumida pelo grão e o deslocamento $\Delta\vec{r}$ causado pelo arrasto do fluido em cada grão após um intervalo de tempo Δt como

$$\vec{v} = \vec{v}_f - (\vec{v}_f - \vec{v}_0) e^{-nC\Delta t}, \quad (3.10)$$

$$\Delta\vec{r} = \vec{v}_f \Delta t + (\vec{v}_f - \vec{v}_0) \left(\frac{e^{-nC\Delta t} - 1}{nC} \right), \quad (3.11)$$

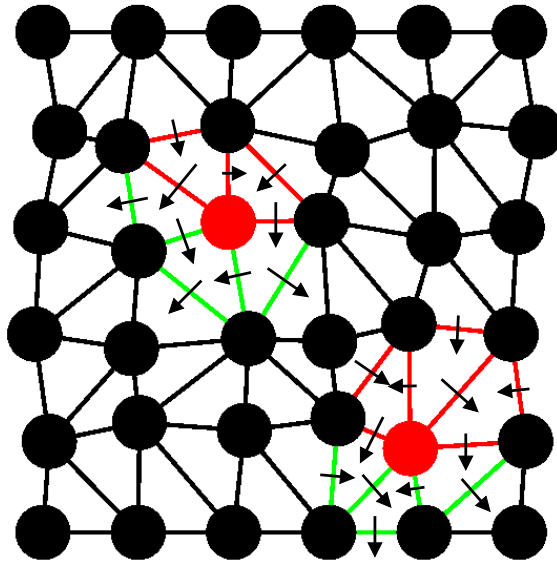


Figura 3.3: Cada partícula do sistema é deslocada devido ao fluido que flui através de vários canais ao seu redor.

onde $\vec{v}_f = \sum_i \vec{v}_f^i / n$.

Note que se $\Delta t \rightarrow 0$, podemos escrever $e^{-nC\Delta t} \approx 1 - nC\Delta t$ e, com isso, $\vec{v} \rightarrow \vec{v}_0$ e $\Delta \vec{r} \rightarrow \vec{v}_0 \Delta t$. Isso significa que para tempos infinitamente pequenos, a velocidade da partícula é constante e o deslocamento apresenta comportamento linear com o tempo. No entanto, se as partículas estiverem inicialmente paradas ($\vec{v}_0 = 0$) o sistema nunca vai se mexer. Assim, o intervalo de tempo escolhido não pode ser tão pequeno ao ponto de o sistema não sair do repouso. Mas se $\Delta t \rightarrow \infty$, então $\vec{v} \rightarrow \sum_i \vec{v}_f^i / n$ e $\Delta \vec{r} \rightarrow (\sum_i \vec{v}_f^i / n) \Delta t$, ou seja, a partícula se move com a mesma velocidade que o fluido ao seu redor, o que é de se esperar na situação de equilíbrio. Para outros valores de Δt , o valor da velocidade assumida pela partícula depende também do termo $nC\Delta t$. Assim, a escolha de Δt pequeno não garante que a velocidade será constante, já que ela também depende do valor de C , ou seja, das propriedades da partícula e do fluido. De forma geral, a velocidade \vec{v} irá corresponder a velocidade do fluido ao seu redor corrigida pelo termo que envolve $e^{-nC\Delta t}$. Da mesma forma, o deslocamento será dado por um termo linear no

tempo devido a velocidade do fluido e também uma correção que envolve a exponencial.

Numericamente, escolhemos decompor as equações vetoriais em duas componentes, uma na direção paralela ao fluxo de entrada no sistema (direção z) e outra perpendicular a essa (direção x), de forma a facilitar os cálculos. Conhecendo os valores da velocidade e do deslocamento nessas duas direções, deslocamos os centros de massa de cada grão de uma distância $\Delta\vec{r} = \Delta x \hat{x} + \Delta z \hat{z}$.

Após o cálculo do deslocamento de todos os grãos, devemos observar se existem partículas que se sobrepõem. Um método para determinar se há interação entre as partículas (102) consiste basicamente em calcular qual o tempo mínimo t_{min} necessário para que somente uma partícula do sistema toque alguma outra partícula. Esse tempo é então utilizado para evoluir todo o sistema. Se considerarmos que as partículas interagem somente aos pares, com esse método podemos determinar o tempo t_{ij} necessário para que haja contato entre cada par de partículas i e j . Assim, se as posições iniciais de duas partículas são $\vec{r}_i(0)$ e $\vec{r}_j(0)$, respectivamente, as suas posições finais após um tempo t_{ij} serão $\vec{r}_i(t_{ij}) = \vec{r}_i(0) + \Delta\vec{r}_i$ e $\vec{r}_j(t_{ij}) = \vec{r}_j(0) + \Delta\vec{r}_j$ e devem satisfazer a

$$|\vec{r}_i(t_{ij}) - \vec{r}_j(t_{ij})| = d. \quad (3.12)$$

Se considerarmos que as partículas se movem com velocidades constantes $\vec{v}_i(0)$ e $\vec{v}_j(0)$, respectivamente, então $\Delta\vec{r}_i = \vec{v}_i(0) t_{ij}$ e $\Delta\vec{r}_j = \vec{v}_j(0) t_{ij}$ e a expressão 3.12 se reduz a $|\vec{r}_{ij} + \vec{v}_{ij} t_{ij}|^2 = d^2$, onde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i(0) - \vec{r}_j(0)$ e $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i(0) - \vec{v}_j(0)$. Com isso é possível obtermos a seguinte expressão para t_{ij}

$$t_{ij} = \frac{-\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \pm \sqrt{(\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij})^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - d^2)}}{v_{ij}^2}. \quad (3.13)$$

Se as partículas estiverem se movendo no sentido a se distanciarem uma da outra, então $b_{ij} = \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} > 0$. Assim, para $b_{ij} < 0$, a seguinte condição deve ser satisfeita

$$b_{ij}^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - d^2) \geq 0. \quad (3.14)$$

Essa equação apresenta duas raízes, sendo que a menor delas corresponde ao contato entre as partículas. Assim, a solução encontrada para o tempo t_{ij} para as partículas i e j é dado por

$$t_{ij} = \frac{-b_{ij} - \sqrt{b_{ij}^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - d^2)}}{v_{ij}^2}. \quad (3.15)$$

Conhecendo os tempo t_{ij} para cada par de partículas é possível então determinar o tempo mínimo e determinar a dinâmica de todas as partículas do sistema.

No entanto, cada partícula do nosso modelo não se move com velocidade constante, mas com a velocidade determinada pela expressão 3.10, a qual apresenta uma dependência exponencial com o tempo. Isso significa que a expressão 3.12 passa a ser uma equação não-linear muito complicada de ser resolvida analiticamente para determinar o tempo t_{ij} , já que ela envolve um termo linear e outro exponencial no tempo.

A solução adotada foi considerar um tempo fixo $\Delta t = T$ para todas as partículas (suficientemente pequeno para garantir numericamente que a evolução dos padrões obtidos seja invariante quando comparada com resultados realizados com intervalos de tempo menores) e observar se ocorre sobreposição para cada par de partículas nesse intervalo de tempo. Caso ocorra, esse tempo é reduzido de um fator f . Caso ainda ocorra sobreposição, o tempo sofre redução novamente de f e assim por diante. Embora esse seja um método um pouco brusco, ele é equivalente ao método descrito acima para determinar o tempo de contato t_{ij} entre cada par de partículas. Obviamente, as partículas que não sofrem sobreposição têm sua dinâmica determinada no tempo T . Aqui adotamos $f = 1/2$.

Assim, conhecendo o intervalo de tempo t_{ij} após o qual ocorre contato entre duas partículas é possível a priori saber a força que age no ponto de contato entre elas. Essa força pode ser decomposta em duas componentes: \vec{F}_r na direção radial, ou seja, na direção da linha que une os centros de massa dos grãos e \vec{F}_t na direção perpendicular a esta, que chamamos de direção tangencial. Se conhecemos essas forças podemos determinar qual o deslocamento gerado em ambas direções. Naturalmente, não pode ocorrer movimento na direção radial, já que descartamos troca de momento entre as

partículas e não consideramos, dessa forma, que uma partícula possa empurrar a outra ou simplesmente sofrer uma colisão elástica nessa direção. O deslizamento na direção tangencial depende do atrito existente entre as partículas, sendo nulo se o atrito for infinito e máximo se não houver atrito. Ainda, caso ocorra movimento nessa direção, ele ocorre no intervalo de tempo $\Delta t' = T - t_{ij}$. Isso garante que todo o sistema se move no mesmo intervalo de tempo, sendo T sempre constante.

Iremos assumir que a força sobre a partícula é dada pela lei de Stokes (Eq. 3.6). A sua componente tangencial é então dada por

$$\vec{F}_t = 6\pi\mu R[\sum_i \vec{v}_f^i - n\vec{v}]_t. \quad (3.16)$$

Uma possibilidade para determinar o deslocamento da partícula é considerar que essa força é constante e calculá-la no ponto de contato, com $\vec{v} = \vec{v}_c$ sendo a velocidade da partícula exatamente quando ela toca a outra partícula e dada pela expressão 3.10 com $\Delta t = t_{ij}$. Assim, o problema se reduz a resolver a equação

$$\frac{d\vec{v}_t}{dt} = nC [\vec{v}_f - \vec{v}_c]_t, \quad (3.17)$$

onde $\vec{v}_f = \frac{\sum_i \vec{v}_f^i}{n}$ e cujas soluções para \vec{v}_t e $\Delta\vec{r}_t$ são

$$\vec{v}_t = [\vec{v}_c]_t + [\vec{v}_f - \vec{v}_c]_t nC\Delta t', \quad (3.18)$$

$$\Delta\vec{r}_t = [\vec{v}_c]_t\Delta t' + [\vec{v}_f - \vec{v}_c]_t nC\frac{\Delta t'^2}{2}. \quad (3.19)$$

A outra possibilidade é assumir que a força que age sobre a partícula obedece a lei de Stokes não só no ponto de contato, mas em toda sua trajetória. Assim, a equação a ser resolvida é

$$\frac{d\vec{v}_t}{dt} = C[\sum_i \vec{v}_f^i - n\vec{v}]_t, \quad (3.20)$$

cujas soluções após o intervalo de tempo $\Delta t'$ apresentam a mesma forma de 3.10 e 3.11

com velocidade inicial $\vec{v}_0 = \vec{v}_c$, ou seja

$$\vec{v}_t = [\vec{v}_f]_t - ([\vec{v}_f]_t - [\vec{v}_c]_t) e^{-nC\Delta t'}, \quad (3.21)$$

$$\Delta \vec{r}_t = [\vec{v}_f]_t \Delta t' + ([\vec{v}_f]_t - [\vec{v}_c]_t) \left(\frac{e^{-nC\Delta t'} - 1}{nC} \right), \quad (3.22)$$

onde $[\vec{v}_f]_t = [\sum_i \vec{v}_f^i]_t/n$.

Podemos notar em ambos casos que tanto a velocidade assumida pela partícula como o seu deslocamento são explicitamente dependentes do tempo, da velocidade da partícula no ponto de contato e das propriedades do fluido e do grão, ou seja, da constante C . Como a força que age sobre a partícula tende a aproximar a sua velocidade da velocidade do fluido ao seu redor, podemos dizer que a velocidade da partícula no ponto de contato é $\vec{v}_c \approx \sum_i \vec{v}_f^i/n$. Assim, a velocidade e o deslocamento da partícula dependem fortemente do produto $C \Delta t'$. Se $\Delta t' \rightarrow 0$ ambas soluções coincidem, ou seja, $\vec{v}_t \rightarrow [\vec{v}_c]_t$ e $\Delta \vec{r}_t \rightarrow [\vec{v}_c]_t \Delta t'$. Se $\Delta t' \rightarrow \infty$, o comportamento das soluções pode ser bastante distinto, já que no primeiro caso a velocidade ainda apresenta dependência temporal enquanto que no segundo caso a velocidade tende a um valor constante. Conseqüentemente, o deslocamento apresenta dependência quadrática com o tempo no primeiro caso e linear no segundo.

Embora não utilizemos intervalos de tempo grandes no nosso modelo, as soluções obtidas com ambas aproximações nos mostram que dependendo do valor do termo $nC\Delta t'$, o comportamento da velocidade pode ser bastante distinto. Como não é possível garantir que o termo $nC\Delta t'$ seja suficientemente pequeno (embora $\Delta t'$ seja, pois $0 < \Delta t' < T$) para adotarmos a solução obtida para $\Delta t' \rightarrow 0$, é necessária a escolha de uma das duas aproximações. Optamos por adotar as soluções obtidas com a segunda aproximação, já que dessa forma estamos assumindo que durante todo o processo de deslocamento no intervalo de tempo T a força que age sobre a partícula é da mesma forma, ou seja, explicitamente dependente da velocidade. Vale ressaltar que, após o tempo T , pode ocorrer de a partícula ainda se encontrar em contato com alguma outra partícula devido a impossibilidade de se locomover para outra posição, seja porque o

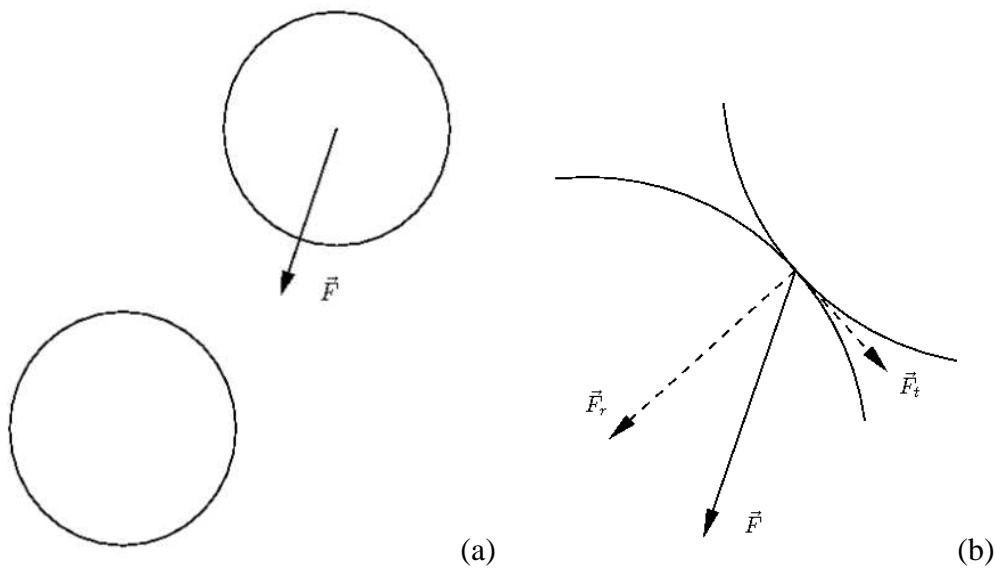


Figura 3.4: (a) O vetor da força \vec{F} sobre uma partícula. (b) A força no ponto de contato entre duas partículas e a sua decomposição nas direções tangencial e radial (\vec{F}_t e \vec{F}_r).

atrito entre elas impeça o seu movimento ou porque existem outras partículas ao seu redor. Nesse caso, o valor da velocidade que ela passa a assumir é $\vec{v} = 0$.

Na Figura 3.4 mostramos o vetor da força \vec{F} original agindo sobre uma partícula a ser deslocada e no ponto de contato entre essa partícula e uma outra juntamente com os dois vetores nos quais essa força é decomposta: \vec{F}_t na direção tangencial e \vec{F}_r na direção radial. Faremos duas considerações distintas. Na primeira, ambas componentes da força são descartadas. Isso é equivalente a considerarmos o atrito entre as partículas extremamente grande, já que excluindo a componente tangencial estamos desprezando a possibilidade da partícula continuar a se mover quando ela está em contato com outras partículas. Dessa forma, as partículas deslocadas podem estar, no máximo, em contato com qualquer outra partícula. Além disso, partículas que já se encontram em contato com alguma outra não são deslocadas, mas permanecem na sua posição original. Na segunda consideração, somente a componente radial da força é descartada, o que permite que o grão ainda se deslize na direção tangencial. Dessa forma, mesmo que o grão esteja inicialmente em contato com algum outro, ainda existe a possibilidade de ele ser

deslocado da sua posição original. Em outros termos, usando essa consideração estamos assumindo que o atrito entre os grãos é nulo.

Após o deslocamento de todas as partículas, o sistema de poros apresenta uma configuração diferente da observada no passo anterior. Assim, a cada passo da simulação, repetimos todo o processo descrito acima, desde a triangulação, passando pelo cálculo da distribuição de velocidades em todos os canais do sistema até o cálculo do deslocamento $\Delta\vec{r}$ de cada grão. Com ambos modelos é possível obter a evolução espacial dos grãos para sistemas com diferentes porosidades.

3.4 Propriedades do Sistema

Com o intuito de caracterizar o meio granular que modelamos, iremos apresentar nesta seção algumas das propriedades normalmente utilizadas para tanto: a porosidade e a permeabilidade.

3.4.1 Porosidade

Para o cálculo da porosidade, lembramos que todas as partícula esféricas do sistema se encontram submersas. Calculamos a razão entre o volume ocupado por todos os grãos e o volume total do sistema. Conforme já apresentado no capítulo anterior, a porosidade do sistema é dada por

$$\phi = 1 - \frac{V_{esf}}{V_{rede}}. \quad (3.23)$$

Considerando o sistema original, onde os grãos correspondem aos pontos de uma rede quadrada regular com distância típica l_0 , cada partícula se encontra dentro de uma região de volume dl_0^2 . Como a rede é formada por N^2 grãos, então o volume total do sistema é

$$V_{rede} = dl_0^2(N - 1)^2. \quad (3.24)$$

O volume ocupado por todos os grãos é facilmente calculado e é dado por

$$V_{esf} = \frac{\pi d^3}{6}(N - 1)^2. \quad (3.25)$$

Assim, a porosidade encontrada para esse sistema é

$$\phi = 1 - \frac{\pi d^2}{6 l_0^2} \quad (3.26)$$

Mantendo d constante, a porosidade do sistema depende somente de l_0 , sendo que quanto maior o valor de l_0 , maior o valor de ϕ . Além disso, esse sistema apresenta uma porosidade mínima ϕ_{min} quando todas as partículas estão em contato. Nesse caso,

considerando $l_0 = d$, determinamos que essa porosidade mínima vale $\phi_{min} = 0.476$.

3.4.2 Permeabilidade

Conforme apresentamos no capítulo anterior, a permeabilidade κ de um meio poroso é definida pela *lei de Darcy*. Para determinar a permeabilidade macroscópica desse meio, podemos reescrever essa lei como

$$\kappa = \mu v_M \frac{\Delta z}{\Delta p}, \quad (3.27)$$

onde κ depende da velocidade macroscópica do fluido v_M (a velocidade do fluido ao sair do meio poroso), da diferença de pressão Δp entre o topo e a base do sistema (gradiente de pressão macroscópica) e o do tamanho do sistema Δz (nesse caso, $(N - 1)l_0$). Note ainda que substituímos o termo da derivada $\partial p / \partial z$ da lei de Darcy pelo seu equivalente discreto $\Delta p / \Delta z$.

Para determinar a velocidade macroscópica basta conhecermos a velocidade com que o fluido sai do sistema e a geometria dos poros. Como consideramos que os grãos no topo e na base do sistema estão alinhados horizontalmente, a velocidade na saída do sistema é a média das velocidades do fluido através de cada par de grãos contidos na linha inferior. Assim, a velocidade macroscópica é facilmente obtida através da expressão

$$v_M = \frac{1}{N - 1} \sum_i v_f^i, \quad (3.28)$$

onde a soma é feita sobre os $(N - 1)$ canais na linha da base. Lembramos que a distância entre os pontos dessa linhas é constante e igual a l_0 e que, dessa forma, o fluxo é unidirecional. Além disso, Δz se refere ao tamanho do sistema que, nesse caso, é simplesmente dado por $(N - 1)l_0$. Fazendo essas substituições na expressão para a permeabilidade, temos

$$\kappa = \frac{\mu}{\Delta p} l_0 \sum_i v_f^i. \quad (3.29)$$

Para analisarmos a permeabilidade de forma adimensional, iremos dividir essa ex-

pressão pela permeabilidade κ_0 encontrada para o sistema com $l_0 = d$, de onde obtemos

$$\frac{\kappa}{\kappa_0} = \frac{\sum_i v_f^i l_0}{(\sum_i v_f^i)_0 d}. \quad (3.30)$$

Assim, conhecendo o termo que envolve as velocidades do fluido na saída do sistema ($\sum_i v_f^i$) para $l_0 = d$, precisamos somente determinar o valor do termo $\sum_i v_f^i$ na configuração estável para cada valor de l_0 utilizado (o que é equivalente a fixarmos o valor da porosidade ϕ). Isso é equivalente a dizer que a permeabilidade é também uma função da porosidade do sistema.

4 RESULTADOS

4.1 O Fluido

Se considerarmos duas partículas através das quais o fluido flui, tanto o fluxo como a velocidade média do fluido dependem da distância entre as partículas. Usamos a configuração do canal apresentado na Figura 3.2 e consideramos grãos com as mesmas propriedades do pó utilizado no experimento (1) apresentado na Introdução, ou seja, diâmetro $d = 30 \mu m$ e densidade $\rho = 2.75 g/cm^3$. Além disso, os grãos estão rodeadas por água, isto é, um fluido de viscosidade $\mu = 10^{-3} Pa.s$ e densidade $\rho = 1.0 g/cm^3$.

Determinamos, primeiramente, qual o gradiente de pressão Δp que deve ser imposto entre as extremidades do canal de comprimento l para que o escoamento apresente regime laminar. A razão w/d , onde w é a distância entre os centros de massa dos grãos (ou melhor, a largura do canal), e d é o diâmetro dos grãos, é variada no intervalo $1.0 < w/d < 10.0$, ou seja, podemos escrever $w = \epsilon d$. Sabemos que para baixos números de Reynolds a velocidade média v_f do fluido depende linearmente da diferença de pressão. Assim, na seção de área retangular do canal devemos ter

$$v_f = \frac{\kappa \Delta p}{\mu \Delta z} = \frac{\kappa \Delta p}{\mu d (l/d)}. \quad (4.1)$$

Fixando um valor de w , variamos o valor de Δp num intervalo que satisfaça a lei de Darcy, de onde determinamos o fluxo Q e a velocidade média do fluido v_f para cada valor de Δp . Com isso, podemos determinar o valor da permeabilidade κ a partir do coeficiente angular dessas curvas.

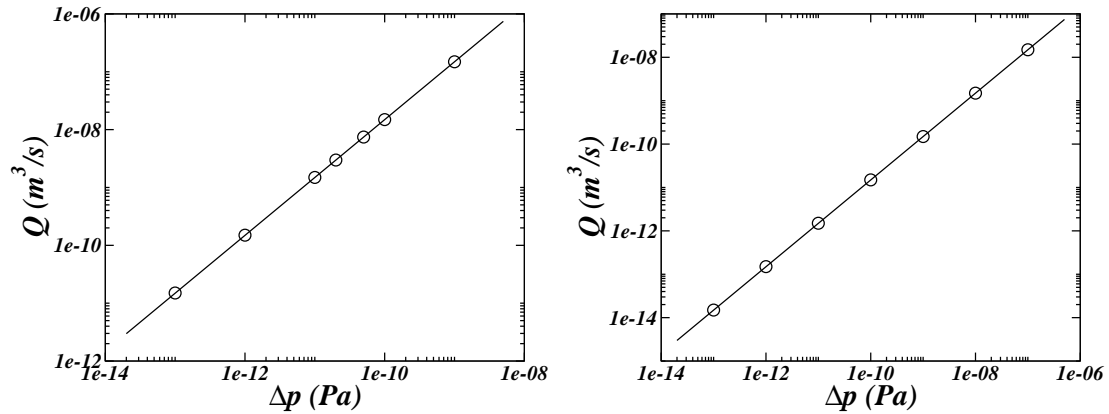


Figura 4.1: Fluxo Q num canal de comprimento l em função de ΔP para $w/d = 1.5$ e $l/d = 4.0$. À esquerda $w = 3.0$, $d = 2.0$ e $l = 8.0$ e à direita $w = 0.3$, $d = 0.2$ e $l = 0.8$.

Com os resultados obtidos a partir das simulações com o FLUENT, apresentamos na Figura 4.1 a dependência do fluxo Q com Δp para $w/d = 1.5$ e $l/d = 4$ em duas situações. À esquerda adotamos $w = 3.0\text{ m}$, $d = 2.0\text{ m}$ e $l = 8.0\text{ m}$ e à direita $w = 0.3\text{ m}$, $d = 0.2\text{ m}$ e $l = 0.8\text{ m}$, ou seja, os dois sistemas diferem somente de uma ordem de grandeza na escala de tamanho. Na Figura 4.2 apresentamos a dependência da velocidade média v_f com Δp para os mesmos sistemas. Para o primeiro sistema, obtivemos $\kappa = 0.2\text{ m}^2$ e para o segundo $\kappa = 2.0 \cdot 10^{-3}\text{ m}^2$. Assumindo que a permeabilidade é proporcional a área por onde o fluido escoar (70), podemos determinar a permeabilidade para qualquer outra escala de tamanho utilizando um dos valores determinados acima, desde que as razões w/d e l/d sejam mantidas constantes. Assim, como consideramos o fluxo através da seção de área retangular, podemos escrever a permeabilidade como $\kappa = \gamma w d = \gamma d^2 (w/d)$, onde γ é o fator de proporcionalidade. Assim, considerando a equação 4.1, podemos escrever a seguinte relação

$$\frac{v_f}{v_{f_i}} = \frac{w}{w_i} \frac{d}{d_i} \frac{l_i}{l} \frac{\Delta p}{\Delta p_i}, \quad (4.2)$$

onde o índice i se refere aos valores já conhecidos. Como a variação de escala considerada é a mesma em todas as direções, temos que $w/w_i = l/l_i = d/d_i$. Ainda, reescre-

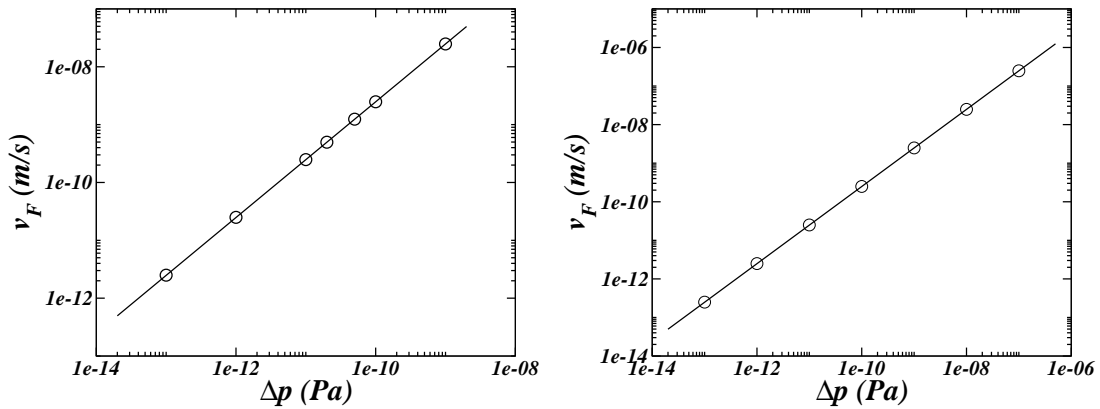


Figura 4.2: Velocidade média v_f num canal de comprimento l em função de ΔP para $w/d = 1.5$ e $l/d = 4.0$. À esquerda $w = 3.0$, $d = 2.0$ e $l = 8.0$ e à direita $w = 0.3$, $d = 0.2$ e $l = 0.8$.

vendo a equação acima em termos da permeabilidade, temos

$$\frac{\kappa}{l} = \frac{d}{d_i} \frac{\kappa_i}{l_i} \quad \rightarrow \quad \kappa = \left(\frac{d}{d_i} \right)^2 \kappa_i. \quad (4.3)$$

Por exemplo, conhecendo o valor da permeabilidade $\kappa_i = 0.2 \text{ m}^2$, obtida para o canal com $d_i = 2 \text{ m}$ e $w_i = 3.0 \text{ m}$, é possível determinar a permeabilidade κ para o canal que obedece a mesma razão $w/d = 1.5$ com $d = 30 \text{ }\mu\text{m}$, a qual vale $\kappa = 4.5 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$.

Na Figura 4.3, mostramos diferentes distribuições do perfil de velocidade para canais definidos, respectivamente, pela razão $w/d = 1.05, 1.5$ e 2.0 . Para cada caso, as distribuições se referem às alturas $y/d = 1/4, 1/2$ e $3/4$, respectivamente. Para todos os casos a diferença de pressão vale $\Delta p = 10^{-12} \text{ Pa}$ e a razão $l/d = 4$. Usamos a mesma escala para apresentar os três casos. Desta forma, podemos notar que para maiores valores de permeabilidade (maiores valores de w/d e, respectivamente, maiores valores de Re), a velocidade atinge os maiores valores. Além disso, em todos os casos, a velocidade do fluido é sempre maior na região próxima a partícula, tendendo a se tornar uniforme conforme se distancia da partícula. Já que a velocidade no fluido na base deve assumir valor nulo, é para os maiores valores de y/d . que a velocidade assume valores maiores.

Finalmente, determinamos como a permeabilidade do canal depende da distância w entre dois grãos, ou melhor, da razão w/d . Essa relação é fundamental já que, como exposto no capítulo anterior, usamos uma *rede randômica* e a distância entre os pares de grãos não é constante. Usando o FLUENT, podemos determinar a velocidade média, o fluxo e a permeabilidade κ para cada valor de w/d . Para tais simulações utilizamos $l/d = 5$. Escrevemos a permeabilidade do canal como $\kappa = \kappa_0 f(w/d)$, onde κ_0 é a permeabilidade do canal de largura $w = d$. A função $f(w/d)$ pode ser obtida através de um *fitting* dos pontos obtidos das simulações ou através do método de interpolação. Esse último método permite construir um novo conjunto de dados a partir do conjunto discreto de dados pontuais conhecidos $(w/d, \kappa/\kappa_0)$, ou seja, ele permite fazer a reconstrução (aproximada) de uma função apenas conhecendo algumas das suas abscissas e respectivas ordenadas. A função resultante passa garantidamente nos pontos fornecidos e pode ser um mero ajuste em relação aos outros pontos.

Os pontos obtidos pelo FLUENT são apresentados na Figura 4.4, onde o valor encontrado para κ_0 foi $6.75 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$ (para canais que apresentam $d = 30 \mu\text{m}$). À esquerda, mostramos o melhor *fitting* encontrado para $f(w/d)$, que é dado pela função

$$f(w/d) = 1 + \frac{a(w/d - 1)^2}{[1 + b(w/d - 1)]^2}, \quad (4.4)$$

onde $a = 109.4$ e $b = 1.65$. À direita apresentamos a curva obtida usando interpolação do tipo *cubic spline*, que consiste basicamente em interpolar cada par de pontos usando um polinômio de ordem cúbica, mas de forma que a função gerada seja contínua e duas vezes diferenciável nos pontos conhecidos. Podemos notar que em ambos casos as curvas têm um comportamento de saturação, o que sugere que o valor de saturação de $f(w/d)$ deva ser determinado.

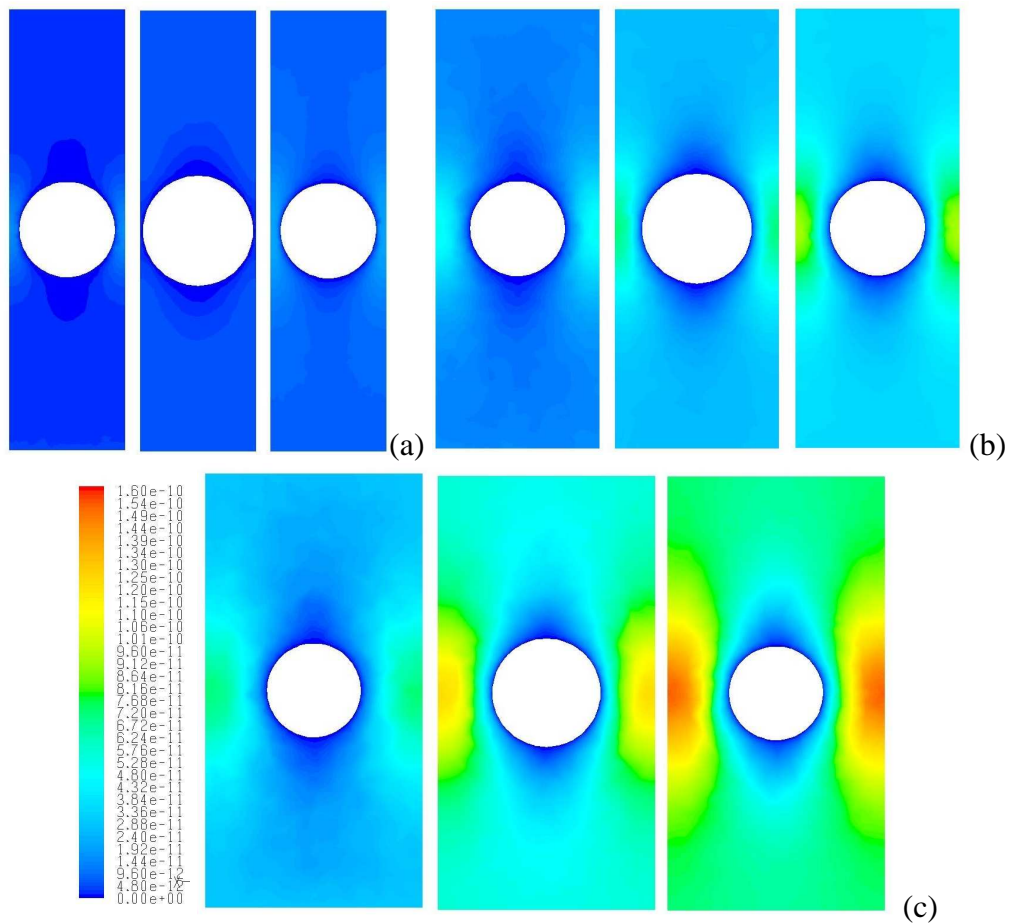


Figura 4.3: A distribuição de velocidade obtida numericamente com o FLUENT para (a) $w/d = 1.05$, (b) $w/d = 1.5$ e (c) $w/d = 2.0$. Três planos transversais da distribuição são mostrados para cada uma dessas situações, mais especificamente em $y/d = 1/4$, $1/2$ e $3/4$, da esquerda para a direita. A escala de cores mostra que a variação da cor azul para a cor vermelha corresponde a magnitudes de velocidade mais baixas para mais altas. A velocidade é maior na região de estrangulamento. A velocidade se torna maior na região uniforme para valores maiores de y .

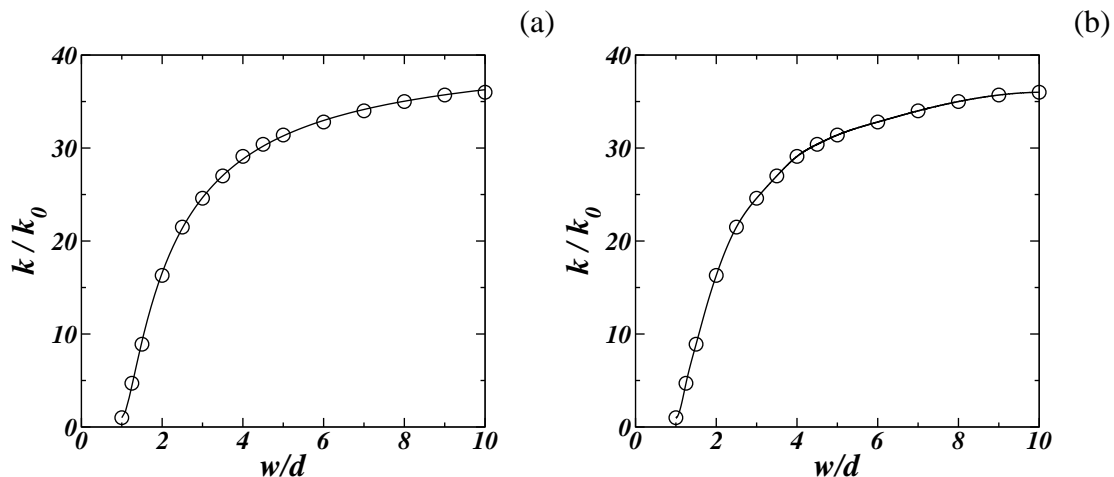


Figura 4.4: Razão das permeabilidades κ/κ_0 em função de w/d . Os pontos da simulação obtidos com o FLUENT são (a) ajustados pela função $f(w/d)$ e (b) interpolados usando *cubic spline*.

Considerando $w/d \rightarrow \infty$ na função da Equação 4.1 obtivemos $f(w/d) = 41.2$. Realizando simulação no FLUENT para o caso $w/d = 50.0$ nos fornece $f(w/d) = 40.3$. Para as simulações que realizamos posteriormente, optamos por utilizar a curva obtida pelo método da interpolação. A razão do fluxo do fluido Q/Q_0 (Q_0 é o fluxo quando $w = d$) também depende de w/d e, dessa forma, também está relacionada a $f(w/d)$. Escrevendo

$$Q = v_f A \quad \rightarrow \quad \frac{Q}{Q_0} = \frac{w}{d} \frac{\kappa}{\kappa_0} = g(w/d), \quad (4.5)$$

vemos que a razão do fluxo depende linearmente da função $f(w/d)$, onde w/d é o fator de proporcionalidade.

Na Figura 4.5, apresentamos os valores encontrados para Q/Q_0 em função de w/d . O melhor *fitting* encontrado para os pontos pode ser visto à esquerda, o qual é dado simplesmente por $g(w/d) = (w/d)f(w/d)$. À direita apresentamos a curva obtida usando novamente interpolação do tipo *cubic spline*.

Para finalizar, determinamos o número de Reynolds que caracteriza o sistema estu-

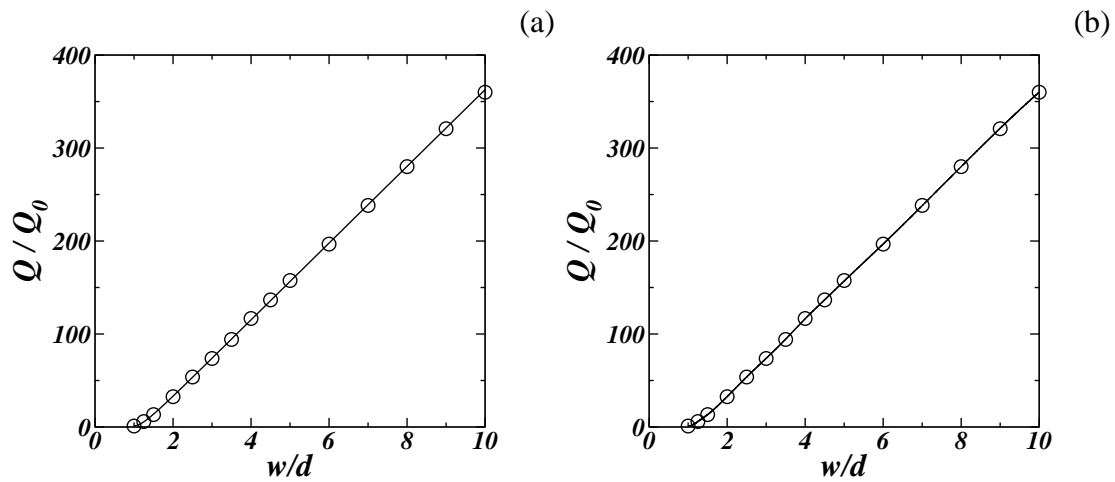


Figura 4.5: Razão dos fluxos Q/Q_0 em função de w/d . Os pontos da simulação obtidos com o FLUENT são (a) ajustados pela função $(w/d)f(w/d)$ e (b) interpolados usando *cubic spline*.

dado. O número de Reynolds é dado por

$$Re = \frac{dv_f \rho}{\mu} = \frac{\rho \kappa}{\mu^2} \frac{\Delta p}{(l/d)}. \quad (4.6)$$

Usando os valores da viscosidade e da densidade do fluido apresentados acima e lembrando que $l/d = 5$, temos

$$Re \approx 2.0 \cdot 10^8 \kappa \Delta p. \quad (4.7)$$

Assim, os valores considerados para κ e Δp são fundamentais para determinar o regime do fluido. Considerando o valor da maior permeabilidade que calculamos $\kappa = 2.4 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$ (para $w/d = 10.0$ e $d = 30 \mu\text{m}$), chegamos que Re vale $[0.05 \Delta p]$. Como estamos interessados no regime laminar, devemos ter $Re \ll 1$. Desta forma, a diferença de pressão deve satisfazer $\Delta p \ll 20 \text{ Pa}$.

4.2 Os Padrões

Nesta seção apresentamos os resultados obtidos com as simulações realizadas com o meio granular devido ao fluido que escoar através do sistema. Mostramos os padrões obtidos usando a primeira e a segunda considerações para sistemas caracterizados por diferentes porosidades. O passo de tempo escolhido deve ser suficientemente pequeno para garantir numericamente que a evolução do padrão se mantenha invariante quando comparado a simulações realizadas para passos de tempo menores. Resultados quantitativos que descrevem esses padrões e que relacionam a permeabilidade macroscópica com a porosidade também são apresentados para ambos casos.

Realizamos simulações testes para diversos tamanhos de redes, variando de 10×10 até 50×50 . Como o tempo de simulação aumenta substancialmente conforme o tamanho da rede cresce, as simulações que apresentamos foram todas realizadas numa rede de tamanho 32×32 . O fluido escoar através dessa rede em condições de Reynolds baixo ($Re \ll 1$). A porosidade do espaço de poros pode variar no intervalo $0.47 < \phi < 0.8$. Para cada valor de porosidade, obtemos resultados para cinco diferentes realizações, somente variando a configuração inicial do espaço de poros. Além disso, conforme já dito anteriormente, adotamos $d = 30 \mu m$, $\rho = 2.75 g/cm^3$ e $\mu = 10^{-3} Pa.s$, de onde obtemos $C = 7300 s^{-1}$. Com esse valor de C , o termo que envolve $e^{-nC\Delta t}$ nas equações 3.10 e 3.11 ($e^{-nC\Delta t'}$ nas equações 3.21 e 3.22) tende a zero se o intervalo de tempo $\Delta t \geq 10^{-2} s$ ($\Delta t' \geq 10^{-2} s$). Nesse caso, a equação de movimento de cada grão se reduz a

$$\vec{v} = \vec{v}_f, \quad (4.8)$$

$$\Delta \vec{r} = \vec{v}_f \Delta t - \frac{\vec{v}_f - \vec{v}_0}{nC} = \vec{v} \Delta t - \frac{\vec{v} - \vec{v}_0}{nC}, \quad (4.9)$$

onde $\vec{v}_f = \sum_i \vec{v}_f^i / n$. Ou seja, a velocidade da partícula assume o valor da velocidade média do fluido na região onde ela se encontra e a partícula tende a se deslocar juntamente com o fluido. Ainda, se $\vec{v} - \vec{v}_0 \approx 0$, ou seja, se a velocidade da partícula não for praticamente alterada no intervalo de tempo Δt , o seu deslocamento passa a ter uma

dependência linear com o tempo, o que é equivalente a dizer que a força que age sobre ela não depende explicitamente da velocidade. Essa situação pode ser obtida ao considerarmos intervalos de tempo suficientemente pequenos de forma que a geometria do sistema seja alterada bem lentamente e os n canais responsáveis pelo deslocamento da partícula não sejam bruscamente modificados.

A porosidade mínima para o sistema granular é $\phi = 0.38$, o que corresponde a $l_0 = d = 2.0$. Na Figura 4.6 apresentamos a configuração inicial da rede para diversas porosidades, mais precisamente, $0.53 < \phi < 0.80$, o que é equivalente a $2.1 < l_0 < 3.2$, segundo a equação 3.26.

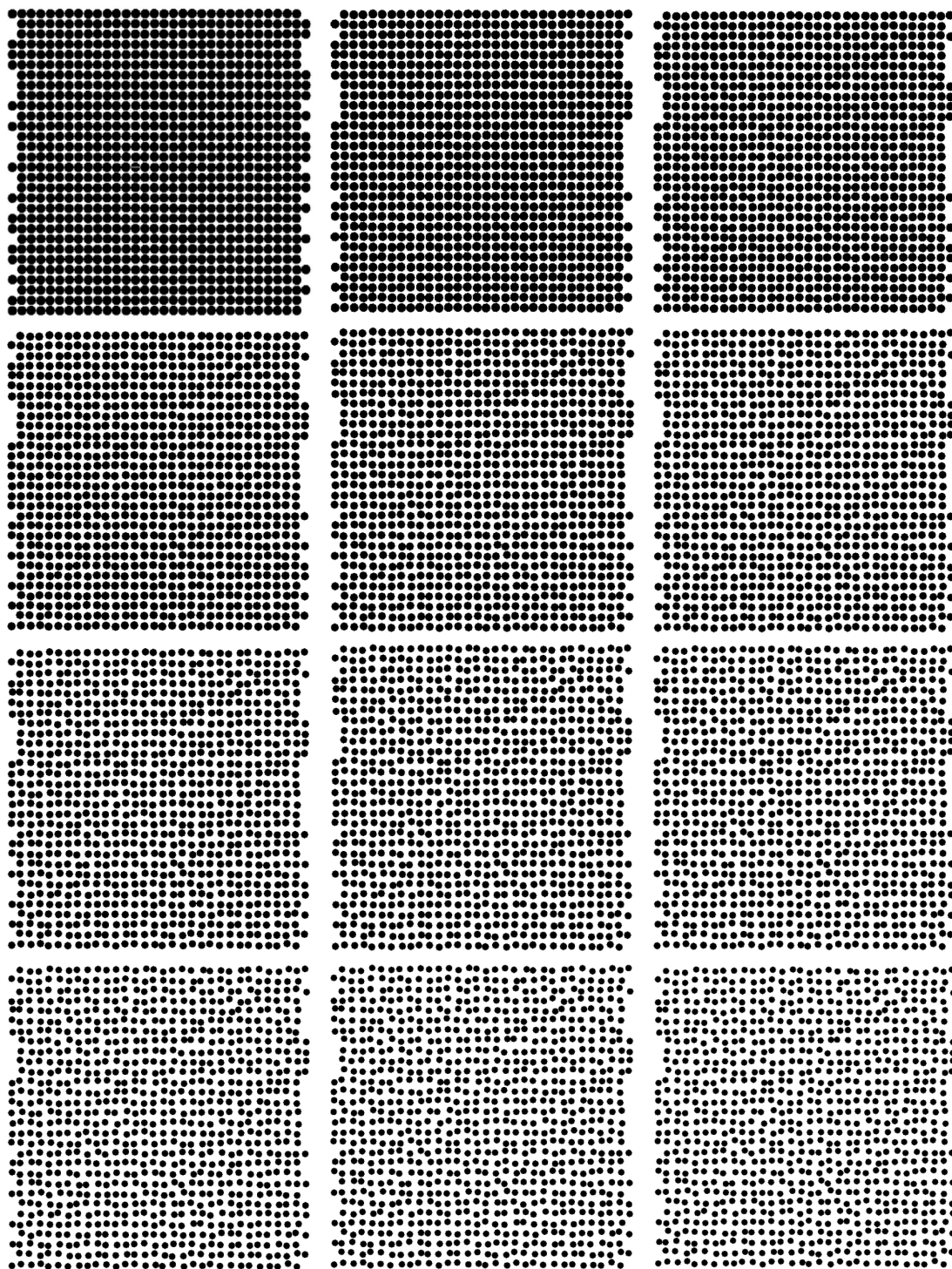


Figura 4.6: Configurações iniciais. Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).

4.2.1 Primeiro Modelo (5)

Os padrões que apresentamos nesta seção se referem ao sistema onde o atrito entre os grãos é muito grande, de forma que um grão ao tocar algum outro não se move mais. Isso é equivalente a descartar as componentes radial e tangencial da força \vec{F} que age sobre uma partícula. O grão só conseguirá se mover novamente se a partícula com quem ele está em contato se mover, ou se a força que age sobre ele deslocá-lo no sentido a afastá-lo do outro grão.

Em todos os casos, consideramos a diferença de pressão entre a base e o topo $\Delta p = 1 \text{ Pa}$ e o intervalo de tempo $\Delta t = 10^{-2} \text{ s}$. A simulação chega ao fim quando o sistema atinge o estado estacionário, ou seja, quando a estrutura formada pelos grãos se mantém inalterada com o tempo. Isso acontece quando todos os grãos estão em contato com outros grãos e não conseguem mais se mover em nenhuma direção.

Na Figura 4.7, mostramos as configurações estáveis finais para os diferentes valores de porosidade. Como pode ser observado, os padrões no estado estacionário dependem fortemente da porosidade do sistema. Para valores suficientemente grandes de ϕ , a ocorrência de *clusters* de partículas na forma de dendritos reflete o forte acoplamento entre a dinâmica do fluido e o movimento dos grãos, onde os canais preferenciais do fluido alinhados conduzem a uma alta permeabilidade global no sistema de poros. Para permeabilidades baixas, entretanto, nenhum padrão é observado. Isso é esperado, já que em sistemas compactos os grãos não possuem tanta mobilidade, enquanto em sistemas rarefeitos as partículas têm liberdade para se mover em quase todas as direções.

Muitas das estruturas obtidas usando esse modelo são semelhantes aos padrões estudados pelo modelo DLA (veja Apêndice D). Embora a dinâmica das partículas não seja determinada pelas mesmas regras em ambos modelos, em ambos casos ocorre a formação dos padrões dendríticos devido ao processo de deposição.

A tendência de se formarem padrões dendríticos nos quais as partículas se alinham em direções preferenciais pode ser estatisticamente quantificada se determinarmos para cada par de grãos em contato o ângulo α entre a linha que conecta os seus centros de

massa e a direção ortogonal ao escoamento, isto é, a direção x mostrada na Figura 3.2.

Na Figura 4.8, mostramos os histogramas dos ângulos $N(\alpha)$ para diferentes valores de permeabilidade ϕ , variando de 0.53 a 0.80. Para sistemas de baixa porosidade, $\phi < 0.65$, os resultados mostram que a maioria dos grãos está alinhada em torno do ângulo de 90° , embora para as porosidades não tão baixas haja a tendência de um número significativo de grãos se alinhar em torno do ângulo de $\alpha = 35^\circ$ (e na direção simétrica de 145°). Isso significa que as partículas tendem a se alinhar na direção vertical y , ou seja, na direção em que o fluido escoar, o que é esperado já que os grãos não podem se mover muito da sua posição na configuração inicial. Em sistemas com valores de porosidade intermediária, $0.65 < \phi < 0.75$, há uma variação substancial no ângulo de alinhamento preferencial. Para $0.65 < \phi < 0.70$, ocorre uma transição entre o comportamento descrito e o aparecimento de ângulos preferenciais, ou seja, as partículas deixam de se alinhar em torno de $\alpha = 35^\circ$ e tendem a dar preferência aos ângulos entre 50° e 130° . Para $0.70 < \phi < 0.75$, é possível identificar o ângulo preferencial em torno de $\alpha = 60^\circ$ (e da direção simétrica de 120°). Esse comportamento se assemelha ao do padrão *zig-zag* apresentado em (1). Para sistemas de alta porosidade, $\phi > 0.75$ ($l_0 > 2.9$), embora haja formação de padrões, nenhuma direção preferencial evidente pode ser observada, sendo que as partículas se alinham em ângulos entre 50° e 130° com aproximadamente a mesma probabilidade.

Além da configuração final encontrada para diferentes valores de porosidade, escolhemos alguns casos onde mostramos a evolução temporal do sistema até atingir o estado estacionário. Na Figura 4.9, apresentamos a evolução temporal do sistema de porosidade $\phi = 0.71$ ($l_0 = 2.7$), o qual é um exemplo de sistema onde podemos identificar o ângulo preferencial em torno de $\alpha = 60^\circ$. Na Figura 4.10, podemos ver a configuração final atingida pelo mesmo sistema. Na Figura 4.11, temos a evolução temporal do sistema de porosidade $\phi = 0.8$ ($l_0 = 3.2$) e na Figura 4.12, apresentamos a configuração final deste sistema. Em ambos casos podemos identificar o comportamento do tipo *zig-zag*.

Como a relação entre κ/κ_0 e w/d obtida com o FLUENT e utilizada na dinâmica

do meio granular foi obtida para $1.0 < w/d < 10.0$, precisamos observar se os valores de w/d que aparecem na simulação estão nesse mesmo intervalo. Na Figura 4.13 apresentamos o histograma das distâncias w/d entre os pares de partículas do sistema com a maior porosidade que estudamos, ou seja, $\phi = 0.8$. Assim, caso valores de $w/d > 10$ aparecessem na simulação do meio granular, não poderíamos garantir qual o valor correto de κ/κ_0 para tal situação. O número de par de partículas obtido para cada valor de w/d corresponde a uma média temporal, ou mais especificamente, a cada 10 iterações contamos quantas partículas se apresentam distanciadas da distância w/d e calculamos a média para todas essas iterações. Além da média temporal obtida para cada realização, calculamos para cada porosidade a média sobre as cinco realizações. Podemos verificar que a maior parte das distâncias ocorre para valores de w/d pequenos e que o máximo valor de w/d presente nas simulações ocorre entre $6.0 < w/d < 7.0$. Isso significa que a curva obtida com o FLUENT que utilizamos é adequada para as simulações realizadas.

Finalmente, é importante investigar as propriedades do escoamento no sistema poroso, ou seja, observar como a permeabilidade macroscópica κ varia em função da porosidade ϕ . Na Figura 4.14 mostramos que a razão entre a permeabilidade κ/κ_0 , onde κ é a permeabilidade do sistema estudado e κ_0 a permeabilidade do sistema onde $l_0 = 2.0$, apresenta o mesmo tipo de comportamento tanto para porosidades baixas como altas. Podemos descrever a relação entre os diferentes valores da permeabilidade e da porosidade encontrados nos resultados da simulação através de uma função de lei de potência do tipo $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, que também é apresentada na Figura 4.14, com $a = 21.5 \pm 0.5$ e $b = 4.0 \pm 0.1$. Ainda, na Figura 4.15, mostramos a evolução temporal da razão κ/κ_0 e mostramos que esta converge para um valor estável para cada valor de porosidade considerada. Desta forma, a permeabilidade macroscópica adotada para identificar cada sistema se refere ao valor encontrado para a configuração estacionária.

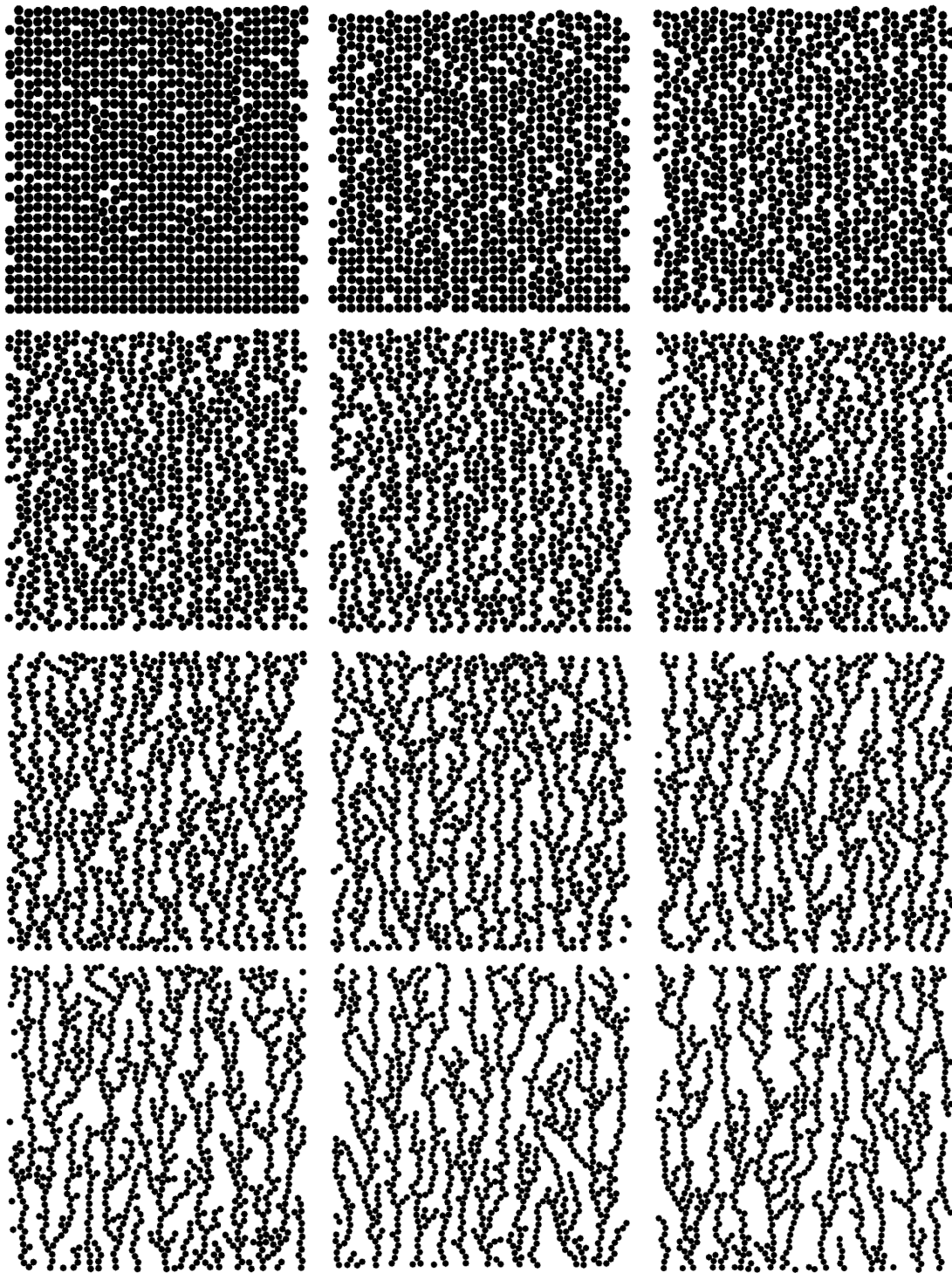


Figura 4.7: Configurações finais. Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).

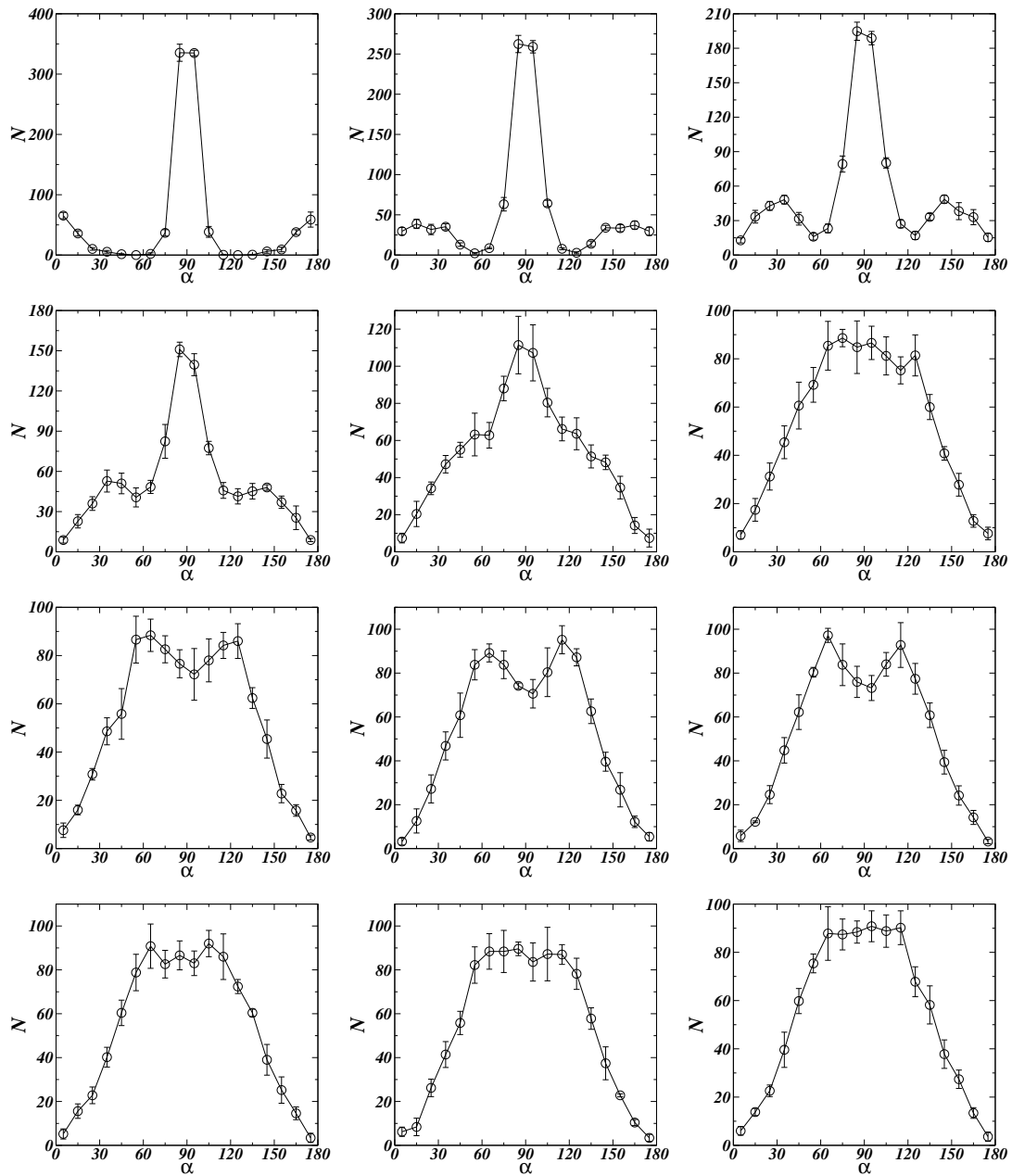


Figura 4.8: Histogramas obtidos para os pares de grãos que estão em contato e cujas linhas que unem os seus centros de massa formam um ângulo α com o eixo x . Esses resultados representam a média sobre cinco realizações. Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).

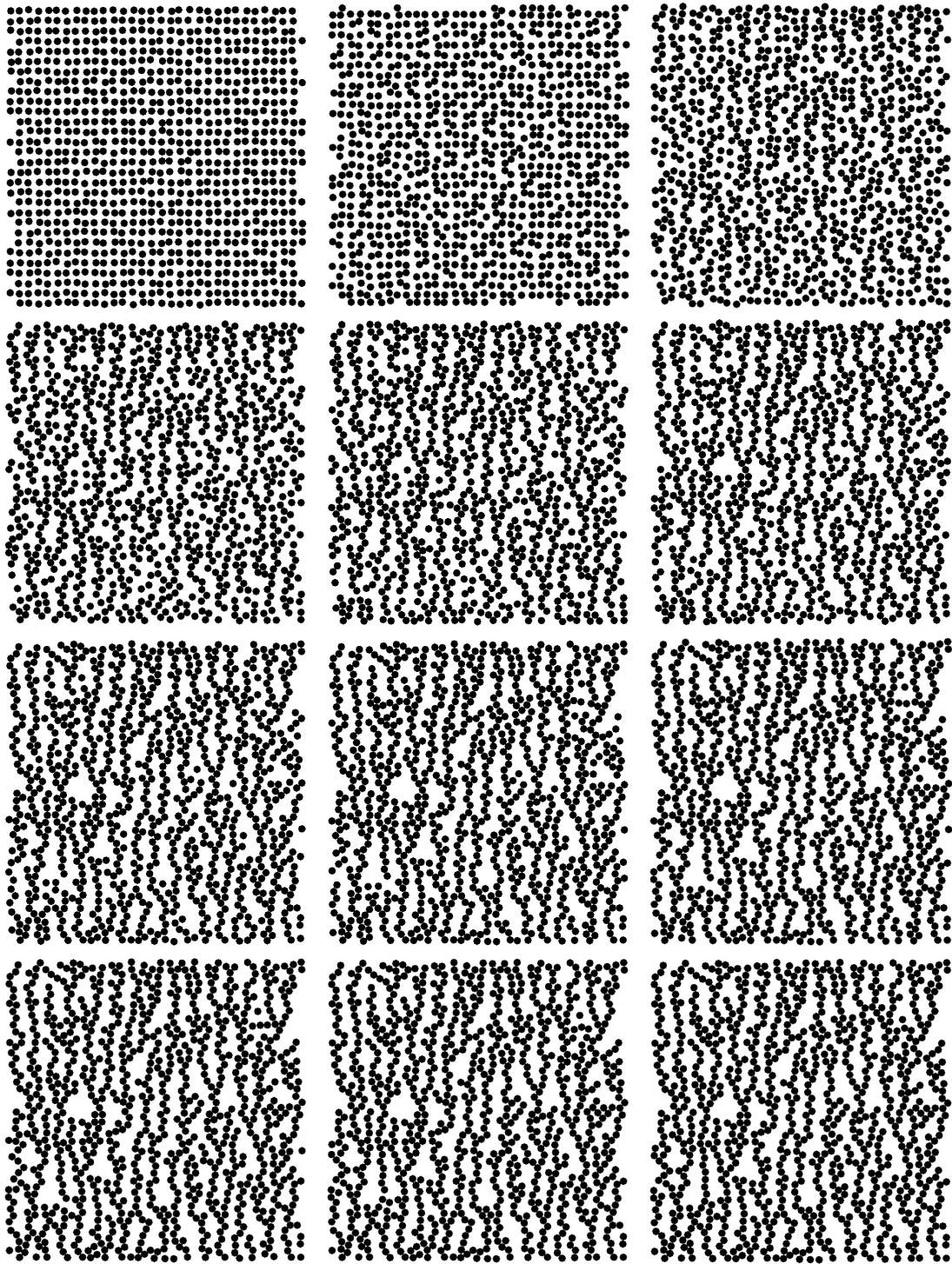


Figura 4.9: Evolução temporal para $\phi = 0.713$ ($l_0 = 2.7$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 50, 250, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000, 2250, 2500 e 2750.

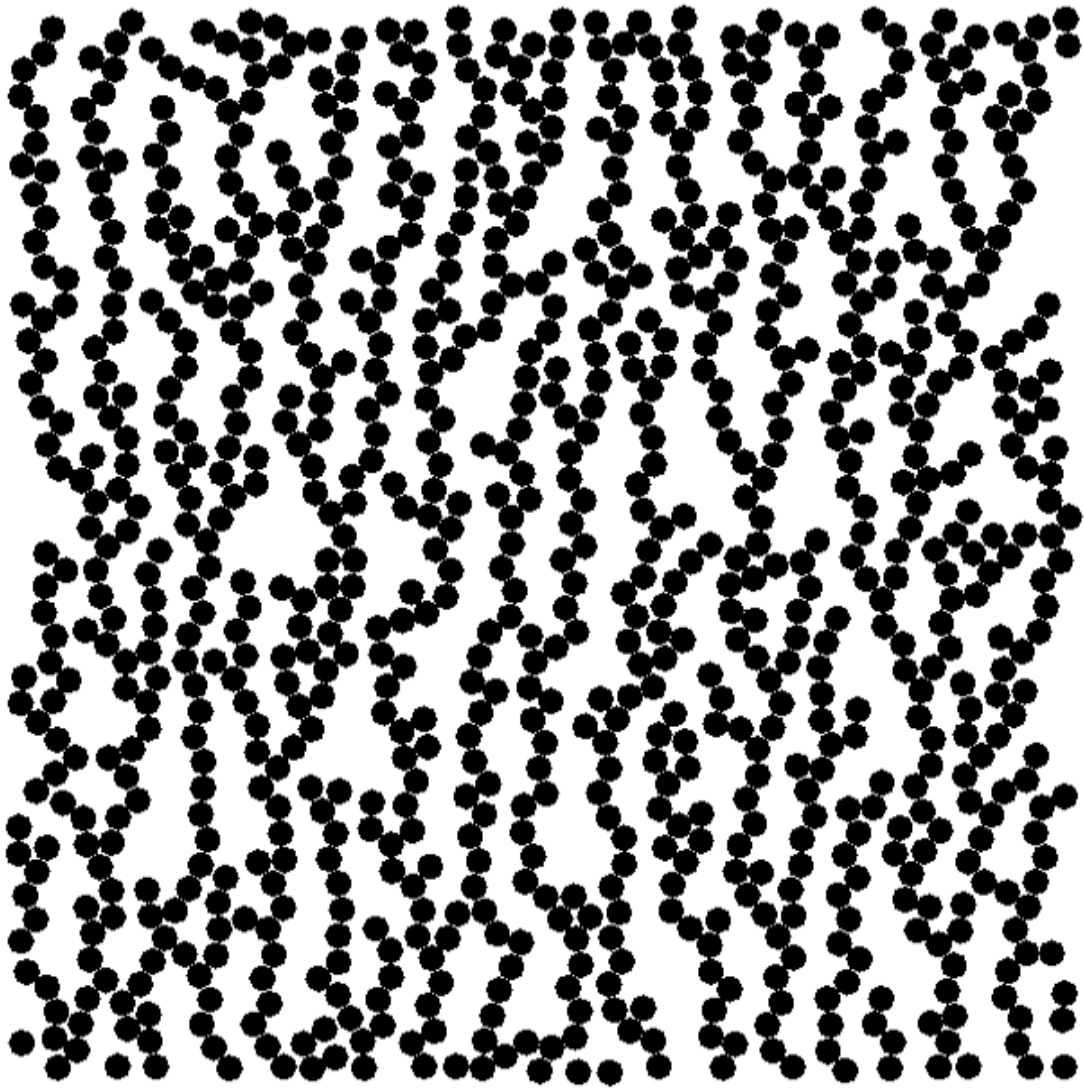


Figura 4.10: Configuração para $\phi = 0.713$ ($l_0 = 2.7$) após 3600 passos de tempo ($t = 36 s$).

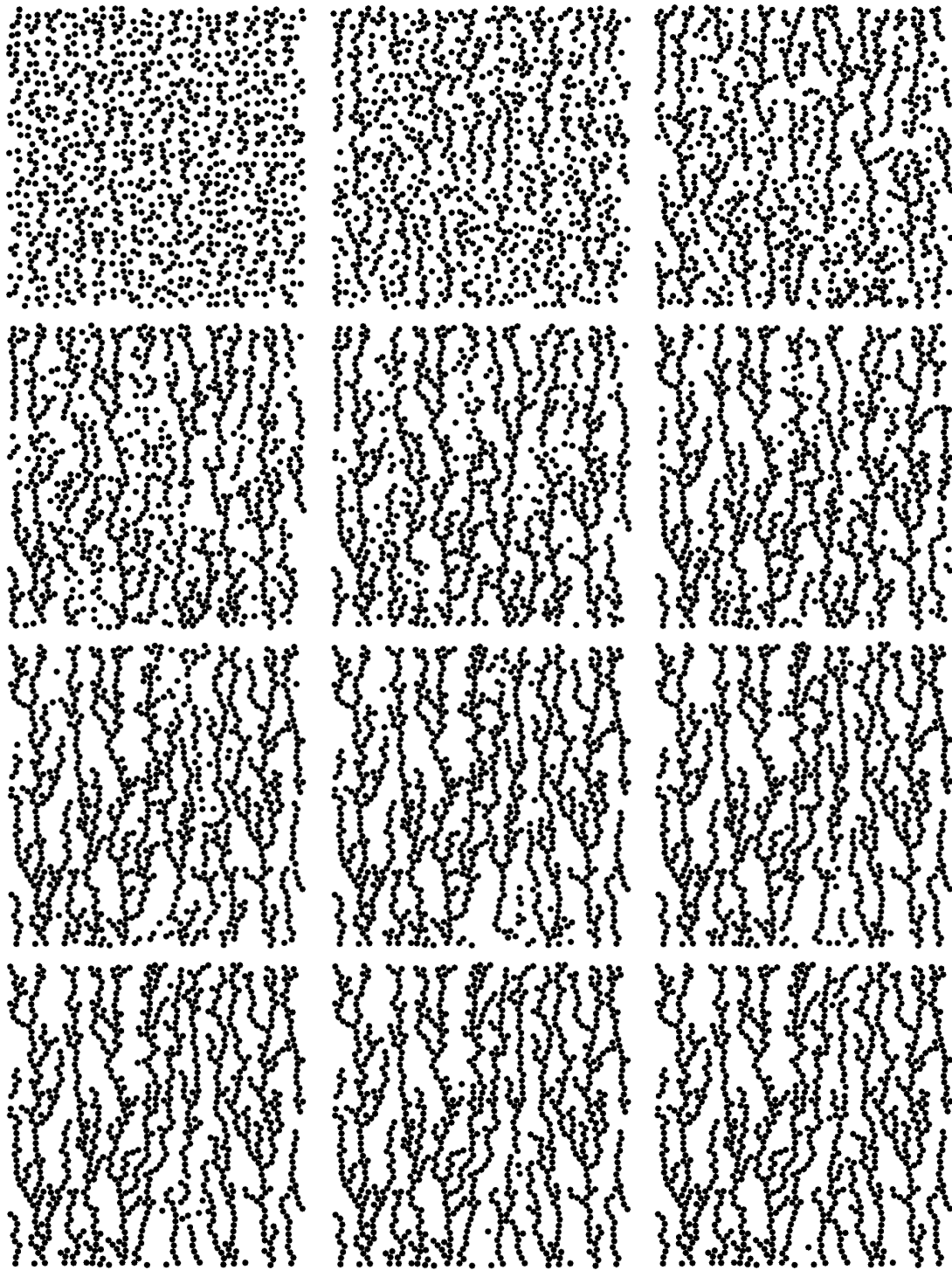


Figura 4.11: Evolução temporal para $\phi = 0.795$ ($l_0 = 3.2$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 100, 800, 1600, 2400, 3200, 4000, 4800, 5600, 6400, 7200, 8000 e 8800.

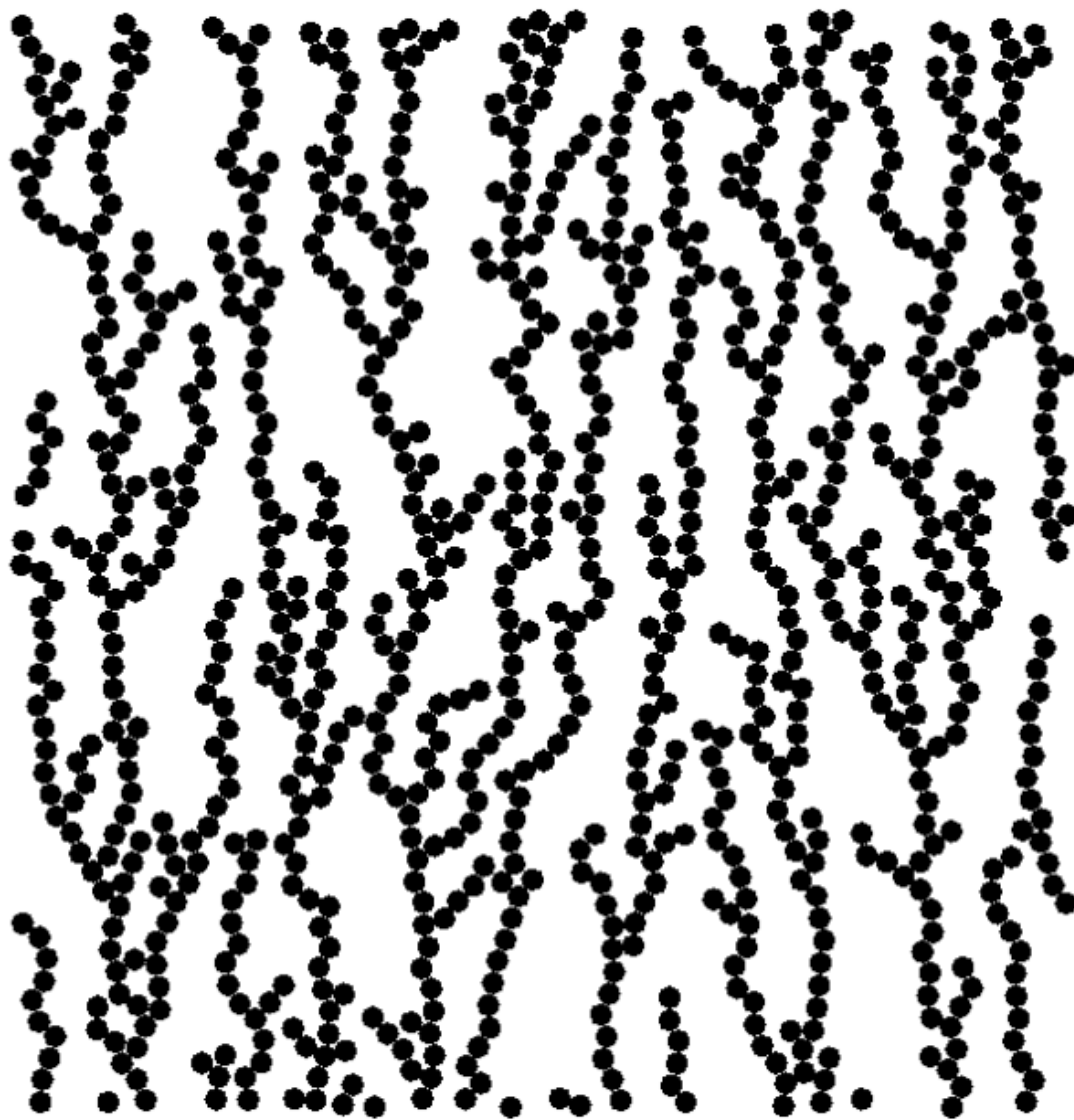


Figura 4.12: Configuração para $\phi = 0.795$ ($l_0 = 3.2$) após 10000 passos de tempo (1 *min* 40 *s*).

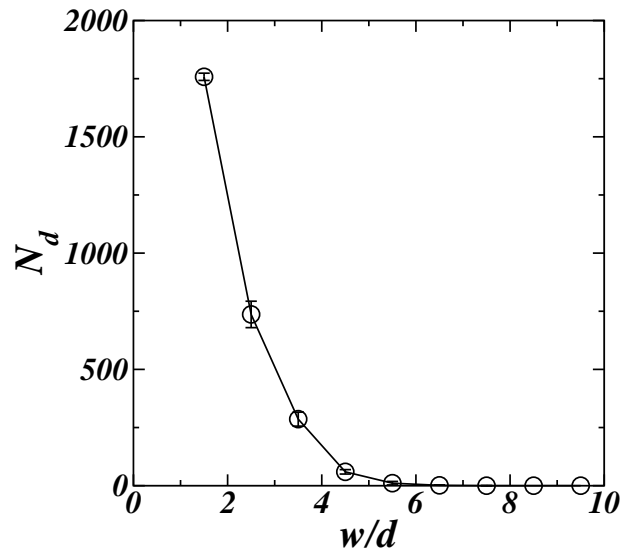


Figura 4.13: Histogramas das distâncias w/d entre os pares de grãos na *rede randômica regularizada*. Esse resultado representa a média sobre cinco realizações para a porosidade $\phi = 0.80$ ($l_0 = 3.2$).

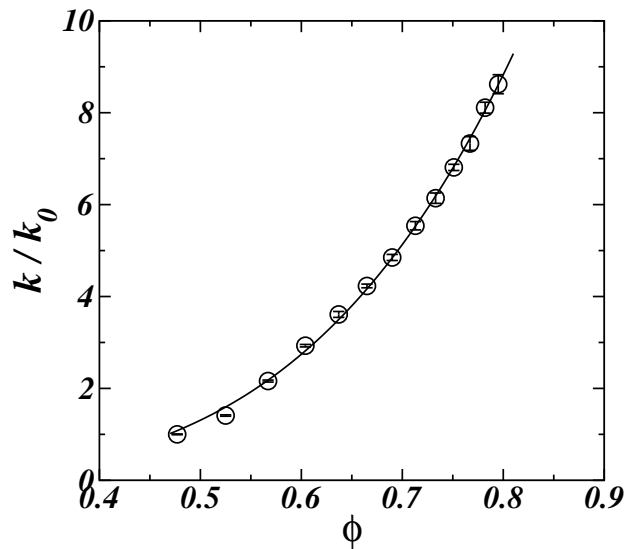


Figura 4.14: A permeabilidade macroscópica κ/κ_0 no estado estacionário em função da porosidade ϕ do sistema. Os pontos foram obtidos através da simulação e a linha sólida é o melhor *fit* dado pela função $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, com os parâmetros $a = 21.5 \pm 0.5$ e $b = 4.0 \pm 0.1$.

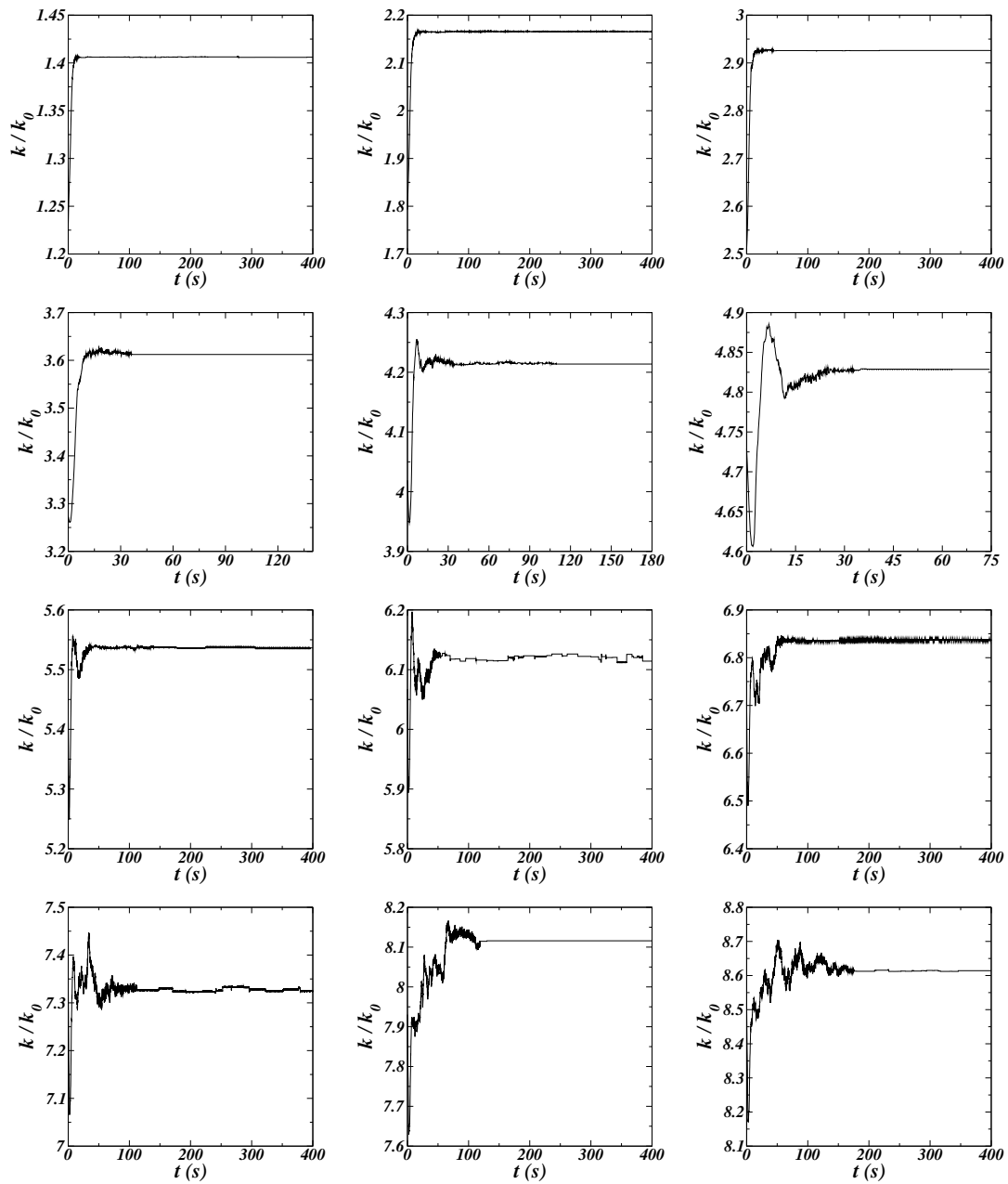


Figura 4.15: Evolução temporal de κ/κ_0 . Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).

4.2.2 Segundo Modelo

Os padrões que apresentamos nesta seção se referem ao sistema onde o atrito entre os grãos é nulo, ou seja, se um grão toca algum outro, ele ainda consegue se mover na direção tangencial, mesmo que a componente radial seja descartada. Isso é equivalente a excluir somente a componente radial \vec{F}_t da força, mantendo somente a componente tangencial \vec{F}_t da mesma.

Em todos os casos, consideramos a diferença de pressão entre a base e o topo $\Delta p = 1 \text{ Pa}$ e o intervalo de tempo $\Delta t = 10^{-1} \text{ s}$. Todas as simulações foram realizadas com 30000 passos de tempo.

Os padrões obtidos não atingem um estado estacionário, mas apresentam um comportamento aparentemente estável. As estruturas formadas não apresentam dendritos, mas são caracterizadas por canais que se formam na mesma direção do escoamento. Esse comportamento mostra que o fluido tende a se localizar no espaço, de forma que possa se mover mais rapidamente, ao invés de se ramificar entre os grãos de todo o sistema. Esse fenômeno é plausível e pode ser observado na natureza. Na verdade, sistemas com baixa porosidade não conseguem formar os canais, já que não há espaço suficiente para tal. Já para sistema mais rarefeitos, os canais se formam e são dificilmente destruídos. Durante a evolução destes sistemas, podem ser formados vários canais, mas eles tendem a se estreitar dando lugar a formação de um único canal mais largo. Nas Figuras 4.16-4.20, mostramos a evolução temporal, respectivamente, para porosidades $\phi = 0.64, 0.69, 0.73, 0.77, 0.80$ ($l_0 = 2.4, 2.6, 2.8, 3.0, 3.2$). Nessa figuras, podemos observar a formação dos canais descrita acima e a diferença de dinâmica para sistemas com porosidades maiores e menores.

Apresentamos também para esse modelo o histograma das distâncias w/d entre os pares de partícula do sistema para porosidade valendo $\phi = 0.8$ na Figura 4.21. Este histograma corresponde novamente a média temporal obtida a cada 10 iterações. Verificamos que usando esse modelo a maior parte das distâncias também ocorre para valores pequenos de w/d e que o maior valor de w/d encontrado nas simulações ocorre no in-

tervalo $6.0 < w/d < 7.0$. Dessa forma, garantimos que a curva obtida com o FLUENT é adequada também para as simulações realizadas com esse modelo.

Novamente, investigamos as propriedades do escoamento no sistema poroso, observando como a razão das permeabilidades macroscópicas κ/κ_0 varia em função da porosidade ϕ . Na Figura 4.22 mostramos os resultados obtidos na simulação. Podemos observar que o comportamento da permeabilidade para baixas e altas porosidades é distinta. Para sistemas mais densos ($\phi < 0.6$) a permeabilidade varia bem lentamente, enquanto que para sistema rarefeitos ($\phi > 0.6$) a permeabilidade parece variar linearmente com a porosidade. Usamos a função $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, com os parâmetros $a = 30.0 \pm 0.5$ e $b = 5.2 \pm 0.1$ para descrever esse comportamento.

Na Figura 4.23, mostramos a evolução temporal da razão κ/κ_0 e mostramos que, diferente do resultado obtido com o modelo anterior, esta não converge para um valor estável. O valor de κ/κ_0 tende a aumentar com o tempo e então começa a apresentar um comportamento que oscila em torno de um valor médio. Para alguns valores de porosidade considerados, é possível observar claramente essas oscilações, enquanto que para outros ainda é necessário que o sistema evolua por mais tempo para atingir esse comportamento. Desta forma, a permeabilidade macroscópica adotada para identificar cada sistema se refere ao valor médio de κ para cada configuração, onde desprezamos o transiente inicial, ou seja, consideramos a média de κ entre $2000 s < t < 3000 s$. É interessante notar ainda, que o cálculo da permeabilidade para caracterizar esse sistema se trata de uma primeira aproximação, já que diferente do modelo anterior, a distribuição espacial do meio granular não é homogênea, mas tende a apresentar regiões distintas com alta e baixa concentrações de partículas.

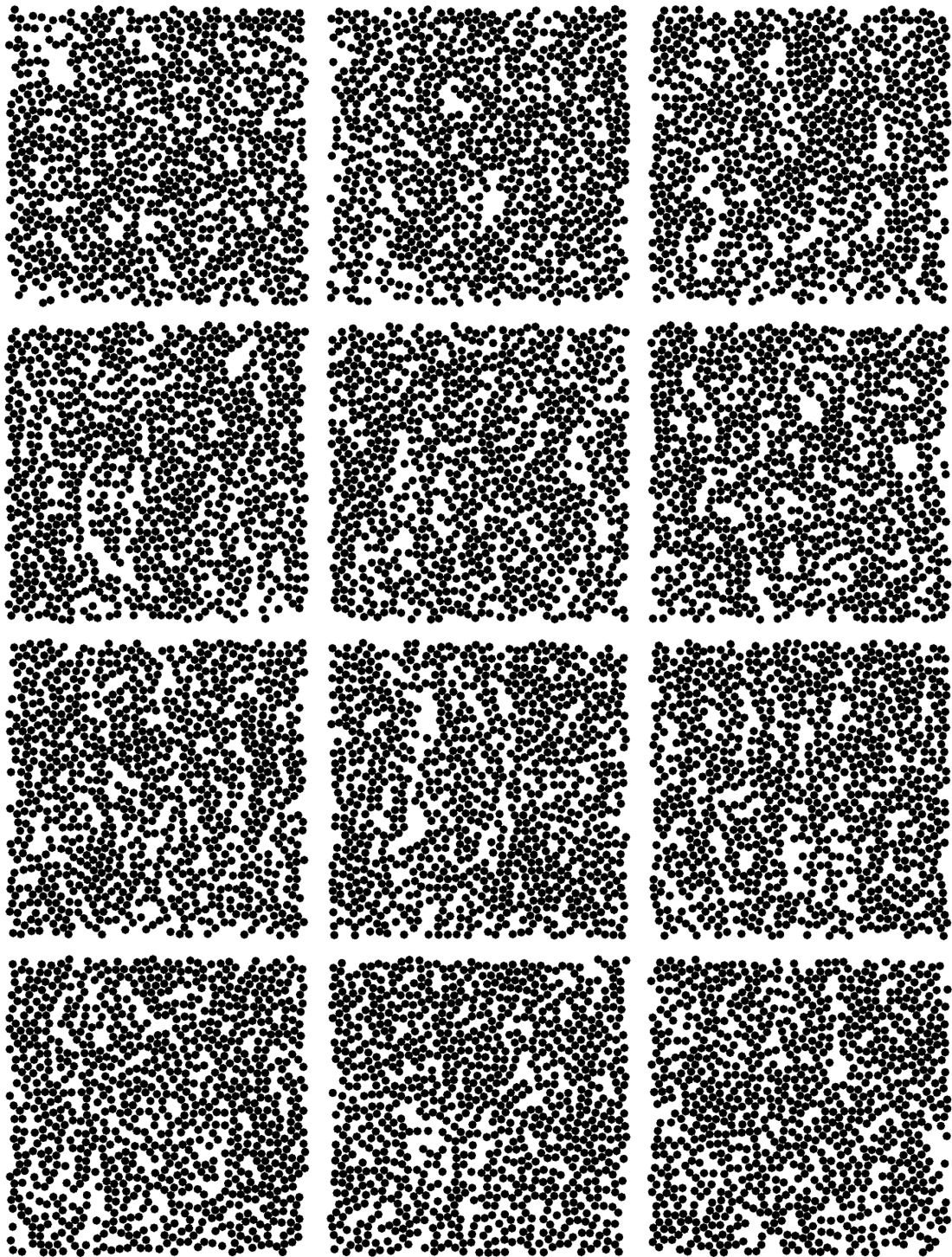


Figura 4.16: Evolução temporal para $\phi = 0.64$ ($l_0 = 2.4$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.

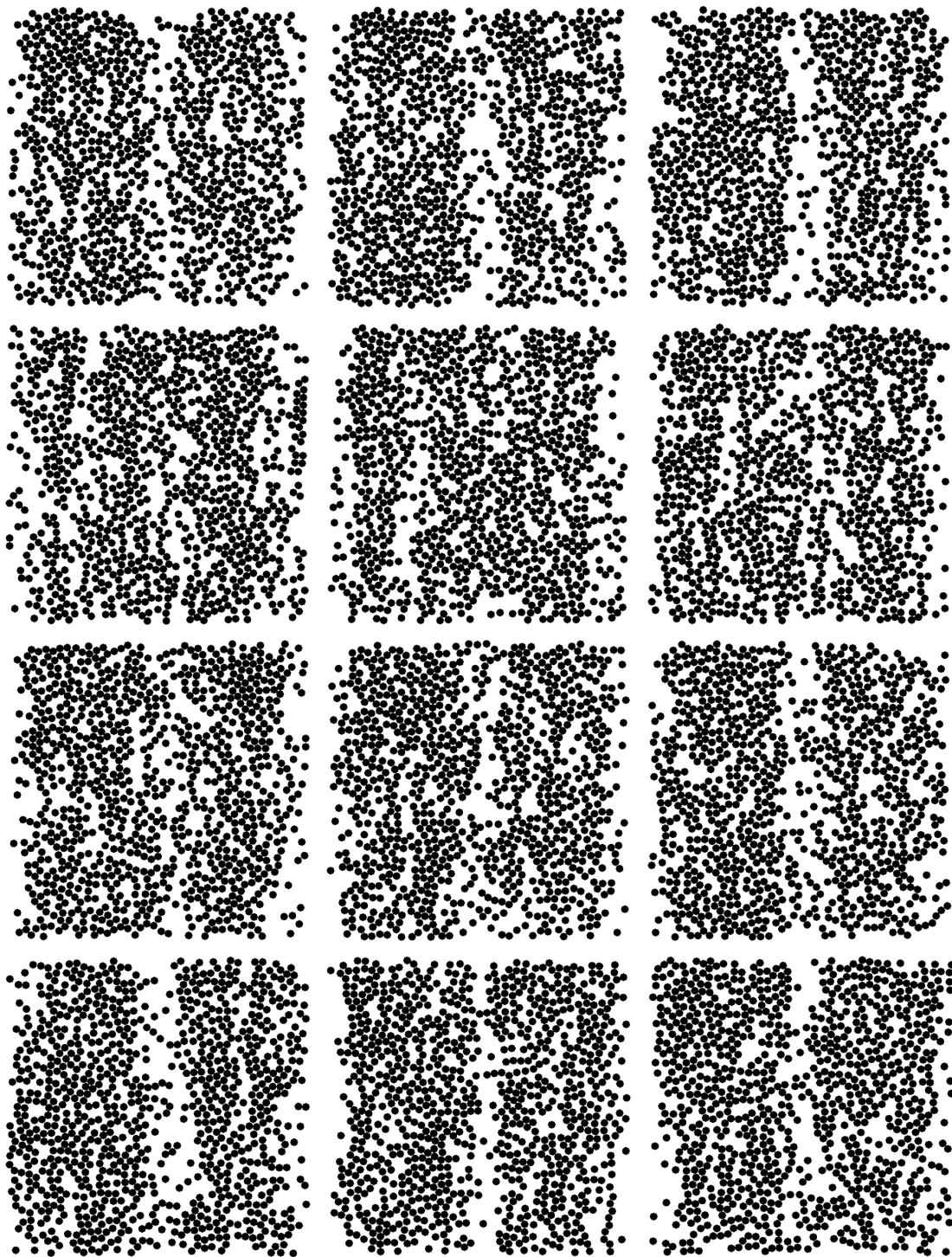


Figura 4.17: Evolução temporal para $\phi = 0.69$ ($l_0 = 2.6$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.

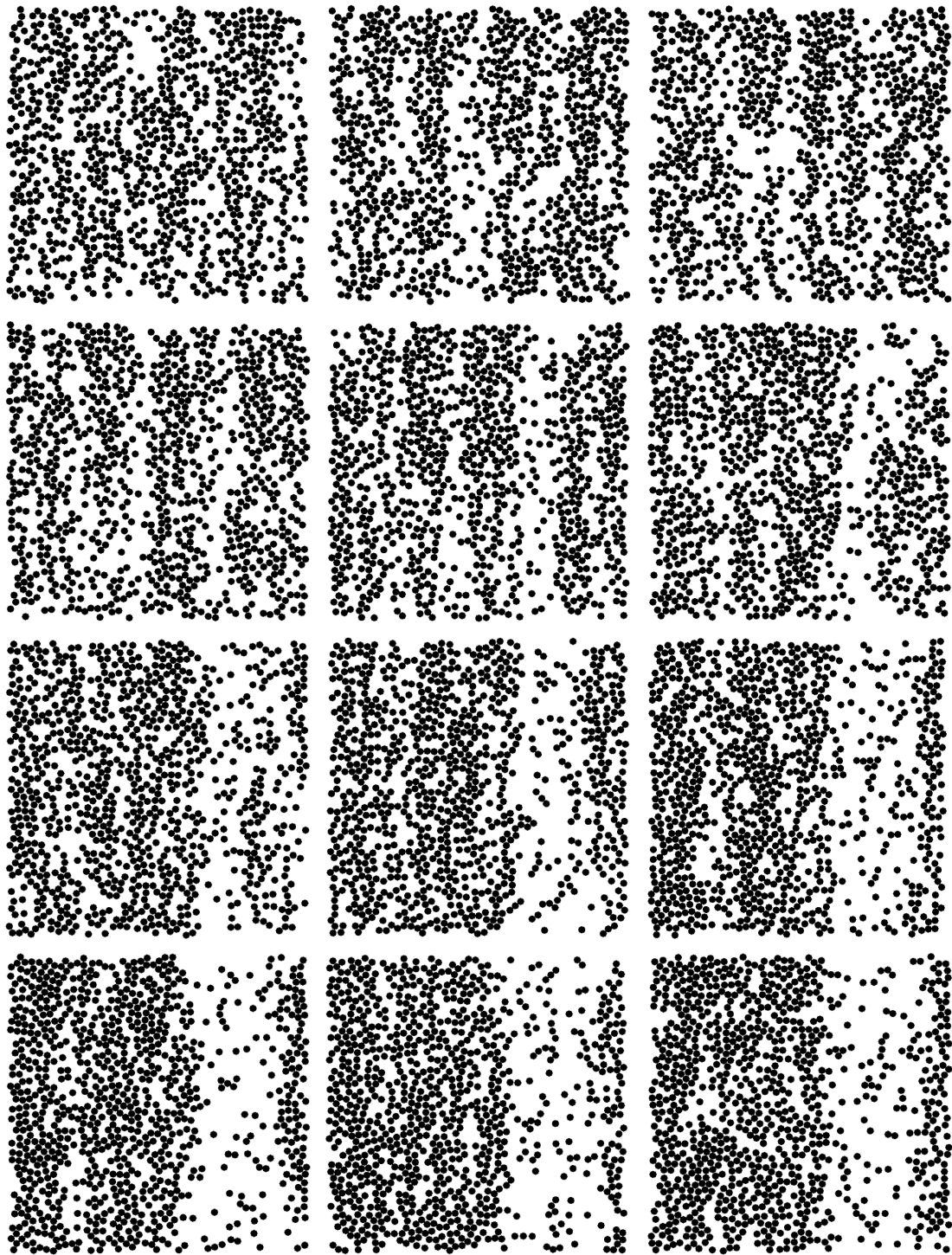


Figura 4.18: Evolução temporal para $\phi = 0.73$ ($l_0 = 2.8$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.

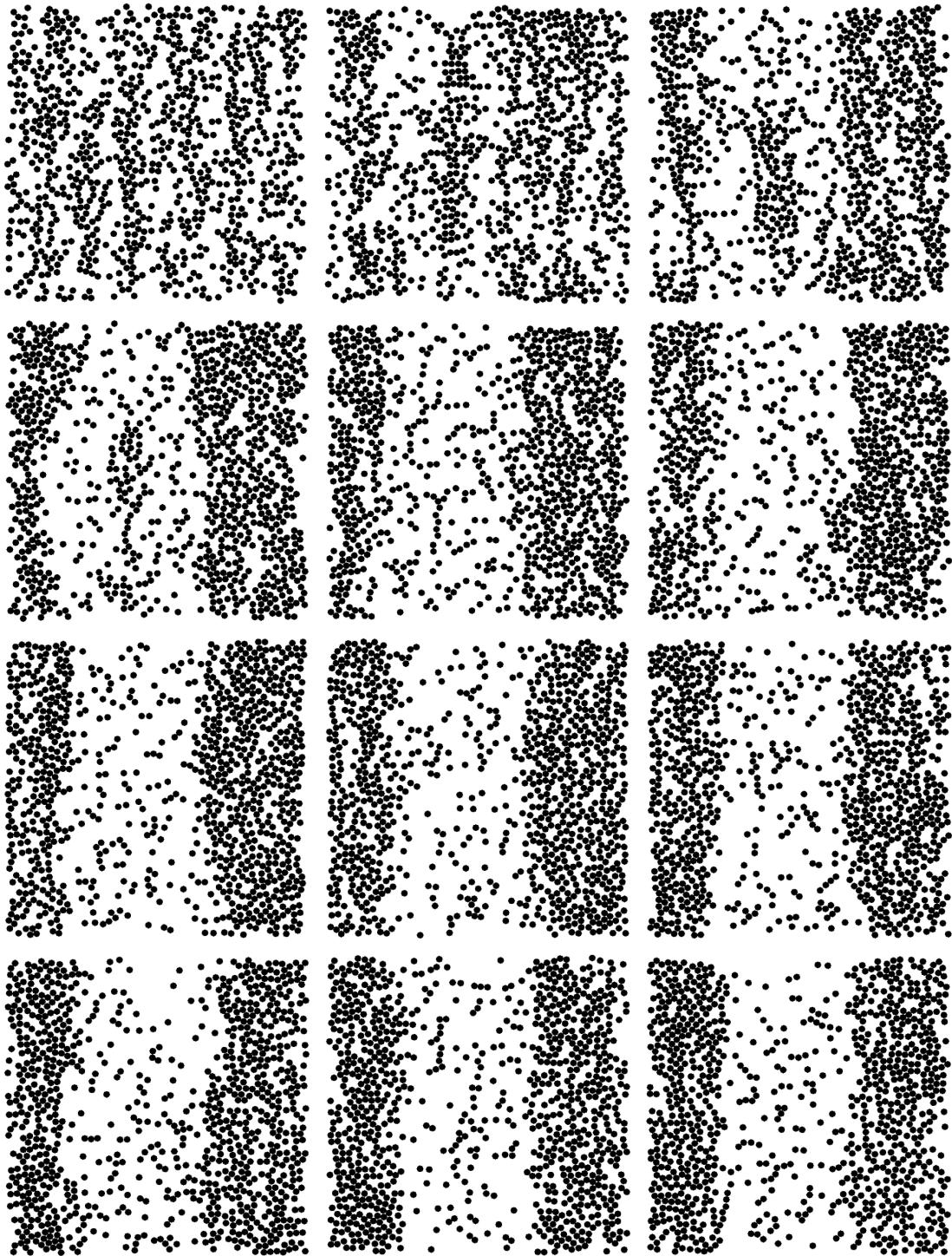


Figura 4.19: Evolução temporal para $\phi = 0.77$ ($l_0 = 3.0$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.

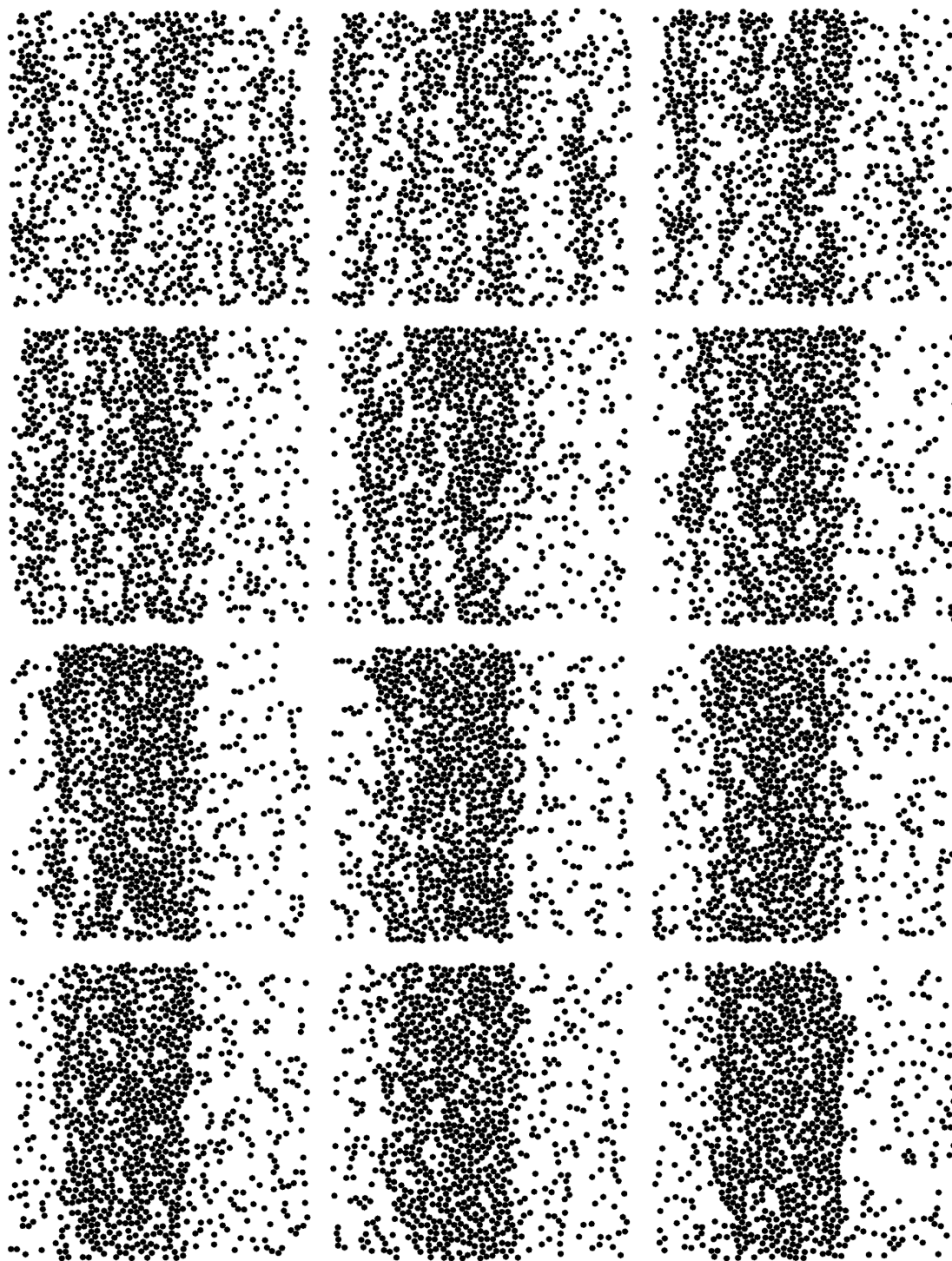


Figura 4.20: Evolução temporal para $\phi = 0.80$ ($l_0 = 3.2$). Da esquerda para a direita de cima para baixo os passos de tempo são 2500, 5000, 7500, 10000, 12500, 15000, 17500, 20000, 22500, 25000, 27500 e 30000.

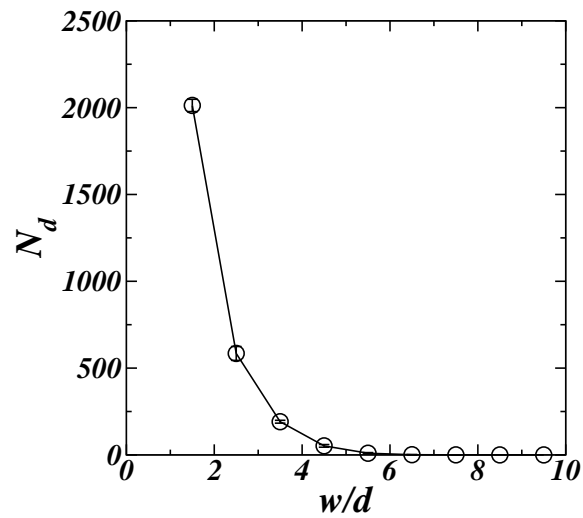


Figura 4.21: Histogramas das distâncias w/d entre os pares de grãos na *rede randômica regularizada*. Esse resultado representa a média sobre cinco realizações para a porosidade $\phi = 0.80$ ($l_0 = 3.2$).

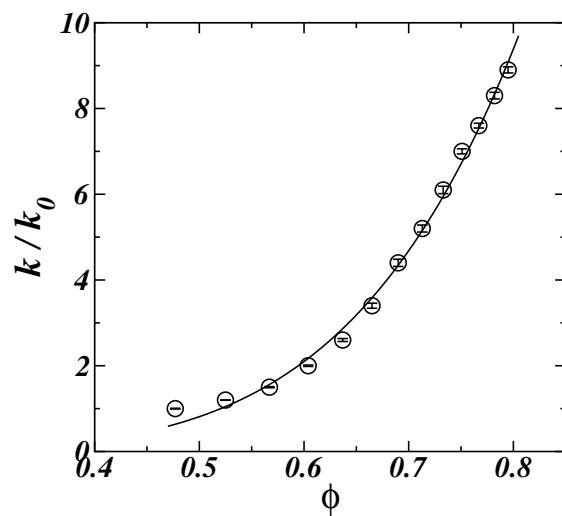


Figura 4.22: A permeabilidade macroscópica κ/κ_0 média em função da porosidade ϕ do sistema. Os pontos foram obtidos através da simulação e a linha sólida é o melhor *fit* dado pela função $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, com os parâmetros $a = 30.0 \pm 0.5$ e $b = 5.2 \pm 0.1$.

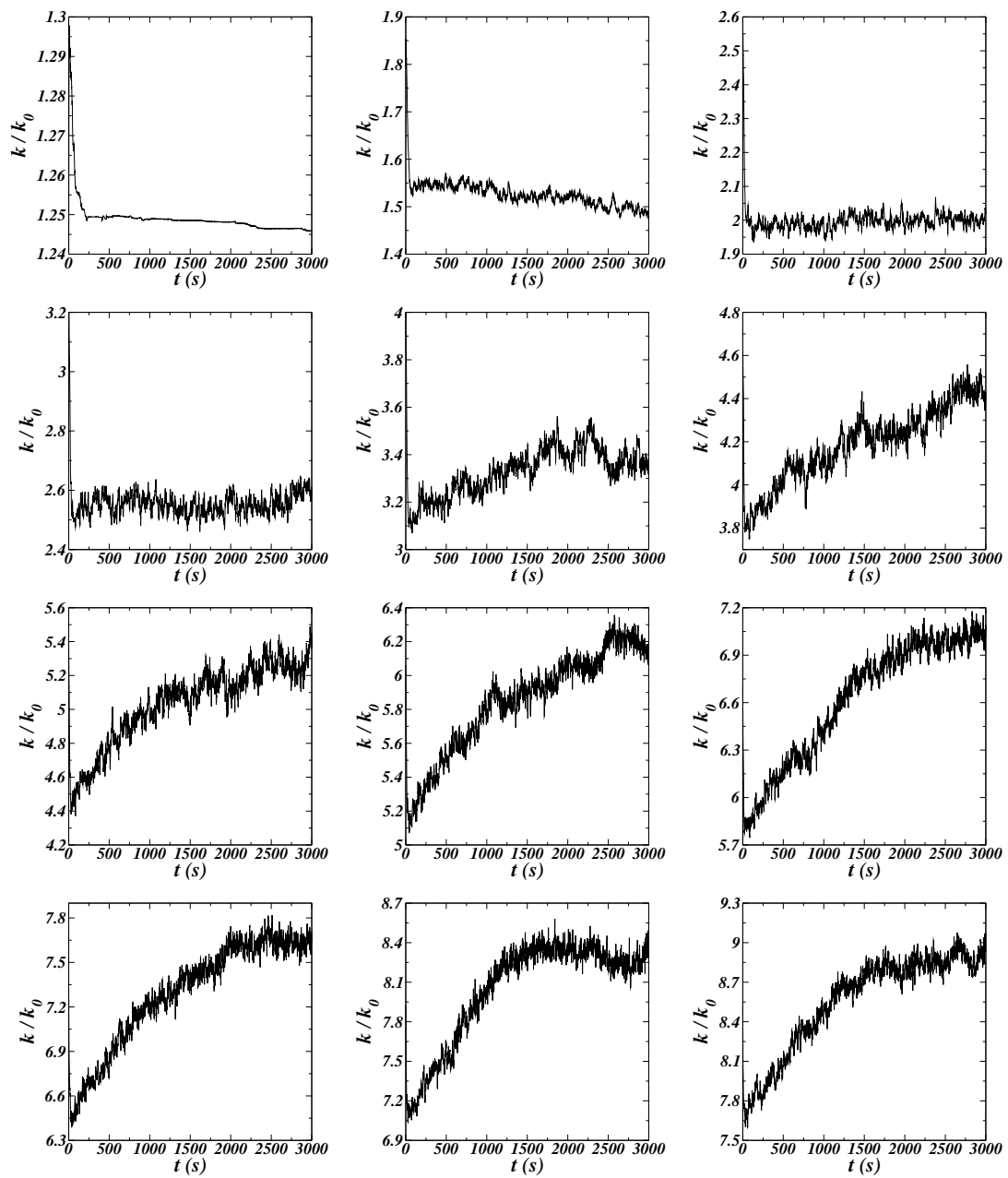


Figura 4.23: Evolução temporal de κ/κ_0 . Da esquerda para a direita de cima para baixo os valores de ϕ são 0.525, 0.567, 0.604, 0.637, 0.665, 0.690, 0.713, 0.733, 0.751, 0.767, 0.782 e 0.795 ($l_0 = 2.1$ a 3.2 variando de 0.1).

Comparando os resultados obtidos utilizando os dois modelos, notamos que a forma de interação considerada entre as partículas é fundamental na determinação do comportamento coletivo do sistema. Considerando o atrito entre as partículas grande, obtemos padrões caracterizados por dendritos; para atrito nulo entre as partículas ocorre a formação de canais.

Comparando a relação da permeabilidade com a porosidade determinada para ambos modelos, notamos que o seu comportamento para ambos sistemas é bem semelhante. Variando a porosidade no intervalo $0.47 < \phi < 0.8$ a razão de permeabilidades sempre apresenta valores no intervalo $1.0 < \kappa/\kappa_0 < 9.0$. Além disso, utilizando ambos modelos, os pontos obtidos com a simulação podem ser ajustados por uma função do tipo lei de potência, independente da porosidade considerada. Embora os parâmetros obtidos nos dois casos para a lei de potência não sejam os mesmos, eles são bem semelhantes. A diferença consiste somente dos valores encontrados para a permeabilidade no segundo caso serem um poucos maiores do que no primeiro caso. Apesar disso, o valor do expoente encontrado para a lei de potência $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$ que caracteriza cada os dois sistemas estudados pode ser utilizado para diferenciar os dois tipos de comportamento encontrados.

5 CONCLUSÃO

Desenvolvemos um modelo numérico capaz de simular o processo de erosão-deposição causado por um escoamento em regime laminar com a força de arrasto dada pela lei de Stokes em um sistema bidimensional. O modelo é baseado na interação de dois meios diferentes: um meio granular e um fluido incompressível e newtoniano que flui através dos grãos. Ele é constituído de três partes: definir a *rede randômica regularizada*, determinar o perfil de velocidade e o fluxo do fluido que escoar no sistema através de cada par de grãos e obter a equação de movimento e o deslocamento de cada grão.

A interação entre as partículas foi modelada de duas formas distintas: no primeiro modelo o atrito entre as partículas é grande e no segundo é nulo.

Os resultados que obtivemos para sistemas com grande atrito entre as partículas mostram a formação de padrões de erosão típicos caracterizados por alinhamento *zig-zag* muito similares a alguns padrões experimentais, como os obtidos em (1). Através de simulações computacionais usando esse modelo, fomos capazes de encontrar padrões com dendritos e de reproduzir os alinhamentos preferenciais das estruturas de *zig-zag* observadas em experimentos reais. Tais padrões sempre atingem o estado estacionário. Nossos resultados mostram que esses padrões dependem substancialmente da porosidade do sistema e, para sistemas com porosidade entre 0.69 e 0.75, ocorre a formação de estruturas onde as partículas tendem a se alinhar formando linhas diagonais com ângulos característicos em torno de 60° .

Os resultados obtidos para sistemas com atrito mínimo entre as partículas apresentam a formação de padrões totalmente distintos dos anteriores, onde canais podem ser

observados por onde o fluido escoia preferencialmente levando consigo grãos presentes nas paredes dos canais. No entanto, embora o regime atingido não seja estacionário, o meio granular apresentam uma dinâmica interessante que consiste na tentativa de se formarem canais que normalmente não conseguem se fixar no espaço até a formação de um canal largo que não pode mais ser destruído. Esses padrões são consistentes com estruturas macroscópicas observadas na natureza. O movimento contínuo destes canais sugere que, para redes maiores, seja talvez possível obter inúmeros canais em diferentes regiões, o que pode levar a formação de novos tipos de estruturas.

Usando ambos modelos, obtivemos resultados tanto qualitativos como quantitativos. Alguns dos padrões obtidos com o primeiro modelo correspondem a resultados já obtidos experimentalmente e são semelhantes a muitos padrões obtidos com o modelo de *DLA*. Com o segundo modelo, não obtivemos nenhum padrão microscópico, mas estruturas a nível macroscópico que se assemelham a canais. Uma análise quantitativa mostra que as configurações obtidas com ambos modelos apresentam a permeabilidade variando com a porosidade através de uma relação do lei de potência. Os resultados distintos obtidos com ambos modelos sugere que a forma de interação entre as partículas é fundamental no comportamento coletivo do sistema granular e no tipo de padrão formado, os quais podem ser diferenciados quando analisamos o expoente obtido através da dependência da permeabilidade com a porosidade.

Estudos anteriores (38, 39, 46) já mostraram que o tamanho e a forma das partículas influenciam drasticamente a propagação do fluido e a distribuição de *stress* no sistema. Além disso, foi mostrado experimentalmente que a geometria dos padrões também deve depender das propriedades do escoamento através do meio poroso (103, 104), ou seja, se os mecanismos inerciais do transporte de momento desempenham um papel importante ou não na dinâmica de formação de padrões. Neste trabalho, consideramos somente escoamento laminar. Variando o expoente da velocidade na lei de arrasto, por exemplo, poderíamos reproduzir aspectos de um escoamento em regime turbulento e, conseqüentemente, aumentar a complexidade no movimento das partículas. Isso poderia revelar uma variedade de novos padrões. A maneira como a distribuição da forma e do tama-

nho dos grãos, bem como as características do escoamento podem afetar os padrões são questões naturais serem analisadas.

Em alguns trabalhos recentes (48, 50, 105), muitos padrões foram observados em experimentos envolvendo avalanches, onde um dos parâmetros mais importantes é a profundidade do substrato. Embora o sistema que estudamos esteja relacionado com processos de erosão-sedimentação, esses resultados sugerem que uma variedade de diferentes padrões também pode ser obtida ao simular tais sistemas em redes tridimensionais. Uma aproximação simples de um sistema tridimensional seria considerar que, dependendo da força que age sobre uma partícula, esta não iria parar ao alcançar outra partícula (ou continuar a se mover no mesmo plano), mas poderia saltar para cima desta. Com essa possibilidade, a dinâmica das partículas é alterada, já que a velocidade destas passa a depender também da altura dos seus centros de massa.

Para concluir, podemos finalmente dizer que alguns dos padrões e dos ângulos preferenciais para o alinhamento das partículas que obtivemos através de simulações são semelhantes aos obtidos experimentalmente em (1). Motivados por esse trabalho experimental, desenvolvemos um modelo simples que descreve a interação entre meio granular e fluido, onde consideramos que pode haver atrito ou não entre as partículas. Os resultados qualitativos obtidos, os quais incluem padrões com dendritos e formação de largos canais, sugerem que diversos tipos de padrões podem ser obtidos dependendo do atrito existente entre as partículas.

Referências Bibliográficas

- 1 DAERR, A. et al. Erosion patterns in a sediment layer. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 65201, 2003.
- 2 AGUIAR, C. E.; RUBINI, G. A aerodinâmica da bola de futebol. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 26, p. 297, 2004.
- 3 SMITH, G. E. Newton's study of fluid mechanics. *International Journal of Engineering Science*, v. 36, p. 1377, 1998.
- 4 TANEDA, S. Studies on wake vortices (iii). experimental investigation of the wake behind a sphere at low reynolds number. *Rep. Res. Inst. Appl. Mech., Kyushu Univ.*, v. 4, p. 99, 1956.
- 5 MAIONCHI, D. O. et al. Model for erosion-deposition patterns. *Phys. Rev. E*, v. 77, p. 061402, 2008.
- 6 BALL, P. *The Self-Made Tapestry: Pattern Formation in Nature*. [S.l.]: Oxford University Press, 1998.
- 7 COUDER, Y. et al. A constitutive property of the local organization of leaf venation networks. *Eur. Phys. Jou. B*, v. 28, p. 135, 2002.
- 8 MURRAY, J. D. *Mathematical Biology*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1989.
- 9 AGUIAR, M. A. M. de et al. Robustness of spontaneous pattern formation in spatially distributed genetic populations. *Braz. Jou. Phys.*, v. 33, p. 514, 2003.
- 10 MAIONCHI, D. O.; REIS, S. F.; AGUIAR, M. A. M. Chaos and pattern formation in a spatial tritrophic food chain. *Ecological Modelling*, v. 191, p. 291, 2006.
- 11 ALMEIDA, M. P.; ANDRADE-JR., J. S.; HERRMANN, H. J. Aeolian transport layer. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 018001, 2006.
- 12 ALMEIDA, M. P.; ANDRADE-JR., J. S.; HERRMANN, H. J. Aeolian transport of sand. *Europ. Phys. J. E*, v. 22, p. 195, 2007.
- 13 ALMEIDA, M. P. et al. Giant saltation on mars. *submitted to Nature Geoscience*.

- 14 HERRMANN, H. J. et al. Transport of particles in fluids. *Physica A*, v. 372, p. 374, 2006.
- 15 HERRMANN, H. J.; ANDRADE-JR., J. S.; ARAÚJO, A. D. Particles in fluids. *Computer Physics Communications*, v. 177, p. 158, 2007.
- 16 HERRMANN, H. J.; SAUERMAN, G.; SCHWÄMMLE, V. The morphology of dunes. *Physica A*, v. 358, p. 30, 2005.
- 17 LEE, J. H. et al. Modelling formation and evolution of transverse dune fields in one dimension. *Int.J.Mod.Phys.C*, v. 16, p. 1879, 2005.
- 18 HERRMANN, H. J.; SAUERMAN, G. The shape of dunes. *Physica A*, v. 283, p. 24, 2000.
- 19 DURÁN, O.; HERRMANN, H. J. Vegetation against dune mobility. *Phys. Rev. Lett.*, v. 97, p. 188001, 2006.
- 20 PARTELI, E. J. R.; DURÁN, O.; HERRMANN, H. J. The minimal size of a barchan dune. *Phys. Rev. E*, v. 75, p. 013011, 2007.
- 21 DURÁN, O.; SCHWÄMMLE, V.; HERRMANN, H. J. *Barchan dune's size distribution induced by collisions*. Preprint for Geophys. Res. Lett.
- 22 JAGLA, E. A. Maturation of crack patterns. *Phys. Rev. E*, v. 69, p. 056212, 2004.
- 23 LEUNG, K.; NÉDA, Z. Pattern formation and selection in quasi-static fracture. *Phys. Rev. Lett.*, v. 85, p. 662, 2000.
- 24 ARARIPE, L. E. et al. Plurality voting: the statistical laws of democracy in brazil. *condmat/0603271*, 2006.
- 25 COSTA-FILHO, R. N.; KOSTERLITZ, J. M.; GRANATO, E. Pattern selection in a phase field model for directional solidification. *Physica A*, v. 354, p. 333, 2005.
- 26 HARRISON, C. et al. Dynamics of pattern coarsening in a two-dimensional smectic system. *Phys. Rev. E*, v. 66, p. 011706, 2002.
- 27 SAXENA, A. et al. Computer simulation of martensitic textures. *Computational Materials Science*, v. 10, p. 16, 1998.
- 28 KARTHA, S. et al. Disorder-driven pretransitional tweed pattern in martensitic transformations. *Phys. Rev. B*, v. 52, p. 803, 1995.
- 29 KARTHA, S. et al. Spin-glass nature of tweed precursors in martensitic transformations. *Phys. Rev. Lett.*, v. 67, p. 3630, 1991.

- 30 YEON, D. et al. A phase field model for phase transformation in an elastically stressed binary alloy. *Modelling Simul. Mat. Sci. Eng.*, v. 13, p. 299, 2004.
- 31 ROY, A. et al. A simulation study of nucleation in a phase-field model with non-local interactions. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 2610, 1998.
- 32 BISHOP, A. R. et al. Elasticity-driven nanoscale texturing in complex electronic materials. *Europhys. Lett.*, v. 63, p. 289, 2003.
- 33 CURNOE, S. H.; JACOBS, A. E. Statics and dynamics of domain patterns in hexagonal-orthorhombic ferroelastics. *Phys. Rev. B*, v. 63, p. 094110, 2001.
- 34 SHENOY, S. R. et al. Martensitic textures: Multiscale consequences of elastic compatibility. *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 12537, 1999.
- 35 BEHRINGER, R.; JAEGER, H.; NAGEL, S. Introduction to the focus issue on granular materials. *Chaos*, v. 9, p. 509, 1999.
- 36 JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R.; BEHRINGER, R. P. Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, v. 68, p. 1259, 1996.
- 37 HARTLEY, R. R.; BEHRINGER, R. P. Logarithmic rate dependence of force networks in sheared granular materials. *Nature (London)*, v. 421, p. 928, 2003.
- 38 GENG, J. et al. Footprints in sand: The response of a granular material to local perturbations. *Rev. Lett.*, v. 87, p. 35506, 2001.
- 39 REYDELLET, G.; CLEMÉNT, E. Green's function probe of a static granular piling. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 3308, 2001.
- 40 GENG, J. et al. Memory in two-dimensional heap experiments. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 60301, 2001.
- 41 SILVA, M. D.; RAJCHENBACH, J. Stress transmission through a model system of cohesionless elastic grains. *Nature (London)*, v. 406, p. 708, 2000.
- 42 VEJE, C. T.; HOWELL, D. W.; BEHRINGER, R. P. Kinematics of a 2d granular couette experiment at the transition to shearing. *Phys. Rev. E*, v. 59, p. 739, 1999.
- 43 HOWELL, D.; BEHRINGER, R. P. Stress fluctuations in a 2d granular couette experiment: a continuous transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, p. 5241, 1999.
- 44 MUETH, D. M.; JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. Force distribution in a granular medium. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 3164, 1998.

- 45 MILLER, B.; O'HERN, C.; BEHRINGER, R. P. Stress fluctuations for continuously sheared granular materials. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 3110, 1996.
- 46 BAXTER, G. W. et al. Patter formation in flowing sand. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 2825, 1989.
- 47 POULIQUEN, O. Scaling laws in granular flows down rough inclined planes. *Physics of Fluids*, v. 11, p. 542, 1999.
- 48 ARANSON, I. S.; MALLOGGI, F.; CLEMENT, E. Transverse instability of avalanches in granular flows down an incline. *Phys. Rev. E*, v. 73, p. 050302(R), 2006.
- 49 POULIQUEN, O.; VALLANCE, J. W. Segregation induced instabilities of granular fronts. *Chaos*, v. 9, p. 621, 1999.
- 50 BORZSONYI, T.; HALSEY, T. C.; ECKE, R. E. Two scenarios for avalanche dynamics in inclined granular layers. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 208001, 2005.
- 51 FORTERRE, Y.; POULIQUEN, O. Long-surface-wave instability in dense granular flows. *J. Fluid Mech.*, v. 486, p. 21, 2003.
- 52 POULIQUEN, O. Velocity correlations in dense granular flows. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, p. 248001, 2004.
- 53 MIDI, G. D. R. On dense granular flows. *Euro Phys. J. E*, v. 14, p. 341, 2004.
- 54 POULIQUEN, O.; DELOUR, J.; SAVAGE, S. B. Fingering in granular flows. *Letters to Nature*, v. 386, p. 816, 1997.
- 55 GIACOMETTI, A.; MARITAN, A.; BANAVAR, J. R. Continuum model for river networks. *Phys. Rev. Lett.*, v. 75, p. 577, 1994.
- 56 SINCLAIR, K.; BALL, R. C. Mechanism for global optimization of river networks from local erosion rules. *Phys. Rev. Lett.*, v. 76, p. 3360, 1996.
- 57 DODDS, P. S.; ROTHMAN, D. H. Scaling, universality and geomorphology. *Annu. Rev. Earth Planet Sci.*, v. 28, p. 571, 2000.
- 58 SEYBOLD, H.; ANDRADE-JR., J. S.; HERRMANN, H. J. Modeling river delta formation. *PNAS*, v. 104, p. 16804, 2007.
- 59 GOLDENBERG, C.; GOLDBIRSCH, I. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 84302, 2002.
- 60 KROY, K.; SAUERMAN, G.; HERRMANN, H. J. Minimal model for sand dunes. *Phys. Rev. Lett.*, v. 88, p. 51, 2002.

- 61 HERRMANN, H. J. Statistical models for granular materials. *Physica A*, v. 263, p. 51, 1999.
- 62 KENKRE, V. M. et al. Nonlocal approach to the analysis of the stress distribution in granular systems. i. theoretical framework. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 5841, 1998.
- 63 CLAUDIN, P. et al. Model of stress fluctuations in granular media. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 4441, 1998.
- 64 SOCOLAR, J. E. S. Average stresses and force fluctuations in noncohesive granular materials. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 3204, 1998.
- 65 COPPERSMITH, S. N. et al. Model for force fluctuations in bead packs. *Phys. Rev. E*, v. 53, p. 4673, 1996.
- 66 ERTAS, D.; HALSEY, T. C. Granular gravitational collapse and chute flow. *Europh. Lett.*, v. 60, p. 931, 2002.
- 67 DELAUNAY, B. Sur la sphère vide. *Izvestia Akademii Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskikh i Estestvennykh Nauk*, v. 7, p. 793, 1934.
- 68 VORONOI, G. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, v. 133, p. 97, 1907.
- 69 FLUENT (trademark of FLUENT Inc.) Programa CFD utilizado neste trabalho. Disponível em: <<http://www.fluent.com>>.
- 70 DULLIEN, F. A. L. *Porous Media-Fluid Transport and Pore Structure*. [S.l.]: Academic Press, 1992.
- 71 SOO, S. L. *Multiphase Fluid Dynamics*. [S.l.]: Science Press and Gower Technical, Hong Kong, 1990.
- 72 BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Fluid Dynamics*. [S.l.]: Science Press and Gower Technical, Hong Kong, 1990.
- 73 SUTERA, S.; SKALAK, R. The history of poiseuille's law. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 25, p. 1, 1993.
- 74 REYNOLDS, O. *An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels*. [S.l.]: Philosophical Transactions of the Royal Society, 1883.

- 75 ROTT, N. Note on the history of the reynolds number. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 22, p. 1, 1990.
- 76 BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1967.
- 77 BODIE, W. M. *The Lockheed P-38 Lightning*. [S.l.]: Widewing Publications, 2001.
- 78 CHANSON, H. *The Hydraulics of Open Channel Flow: An Introduction. Physical Modelling of Hydraulics*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 1999.
- 79 MANEGOLD, V. E. über kapillarsysteme. *Kolloid-Z*, v. 80, p. 253, 1937.
- 80 DARCY, H. *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. [S.l.]: Dalmont, Paris, 1856.
- 81 ZI-RANG, Y. et al. *Numerical simulation of oil migration-accumulation of multilayer and its application*. [S.l.]: Springer Verlag, 2006.
- 82 ZI-RANG, Y. et al. *Numerical method and application for three-dimensional nonlinear system of dynamics of fluids in porous media*. [S.l.]: Springer Verlag, 2006.
- 83 LAKATOS, I. *Proofs and Refutations*. [S.l.]: Cambridge Technology Press, 1976.
- 84 RAPAPORT, D. C. *The art of molecular dynamics simulation*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995.
- 85 ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. *Computer Simulation of Liquids*. [S.l.]: Oxford University Press, 1987.
- 86 BERNE, B. J.; THIRUMALAI, D. On the simulation of quantum systems: Path integral methods. *Ann. Rev. Phys. Chem.*, v. 37, p. 401, 1986.
- 87 REMLER, D. K.; MADDEN, P. A. Molecular dynamics without effective potentials via the car-parrinello approach. *Mol. Phys.*, v. 70, p. 921, 1990.
- 88 DOOLEN, G. D. *Lattice Gas Methods for PDEs*. [S.l.]: North-Holland, Amsterdam, 1991.
- 89 ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard sphere system. *J. Chem. Phys.*, v. 27, p. 1208, 1957.
- 90 GIBSON, J. B. et al. Dynamics of radiation damage. *Phys. Rev.*, v. 120, p. 1229, 1960.

- 91 RAHMAN, A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Phys. Rev.*, v. 136, p. A405, 1964.
- 92 RONCHETTI, M.; JACUCCI, G. *Simulation Approach to Solids*, Kluwer. [S.l.]: Dordrecht, 1990.
- 93 BUTCHER, J. C. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*. [S.l.]: Wiley-Interscience, 1987.
- 94 ALLEN, M.; TILDESLEY, D. *Computer Simulation of Liquids*. [S.l.]: Clarendon Press, New York, 1987.
- 95 FRENKEL, D.; SMIT, B. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. [S.l.]: Academic Press, San Diego, 2002.
- 96 SCHLICK, T. *Molecular Modeling and Simulation*. [S.l.]: Springer, Berlin, 2002.
- 97 JOHNSEN, O. et al. Pattern formation during central air injection into granular materials confined in a circular hele-shaw cell. *Phys. Rev. E*, v. 74, p. 011301, 2006.
- 98 MCNAMARA, S.; FLEKKOY, E. G.; MALOY, K. J. Grains and gas flow: Molecular dynamics with hydrodynamic interactions. *Phys. Rev. E*, v. 61, p. 4054, 2000.
- 99 FORTUNA, A. de O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. [S.l.]: edusp, 2000.
- 100 FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. [S.l.]: Springer Verlag, 2002.
- 101 SAHIMI, M. *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*. [S.l.]: VCH Weinheim, 1995.
- 102 GOULD, H.; TOBOCHNIK, J.; WOLFGANG, C. *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems (Taschenbuch)*. [S.l.]: Addison Wesley Pub Co Inc, 2006.
- 103 ANDRADE-JR., J. S. et al. Percolation disorder in viscous and nonviscous flow through porous media. *Phys. Rev. E*, v. 51, p. 5725, 1995.
- 104 ANDRADE-JR., J. S. et al. Inertial effects on fluid flow through disordered porous media. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, p. 5249, 1999.
- 105 MALLOGGI, F. et al. Erosion waves: Transverse instabilities and fingering. *Europh. Lett.*, v. 75, p. 825, 2006.

- 106 ARIS, R. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. [S.l.]: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1962.
- 107 TRUESDELL, C. A.; NOLL, W. *The Nonlinear Field Theories of Mechanics*. [S.l.]: Springer, 1992.
- 108 HUNTLEY, H. E. *Dimensional Analysis*. [S.l.]: Dover. LOC 67-17978, 1967.
- 109 STREETER, V. L. *Fluid Dynamics*. [S.l.]: McGraw-Hill, New York, 1948.
- 110 STANLEY, H. E. et al. Dynamic mechanisms of disorderly growth: Recent approaches to understanding diffusion limited aggregation. *Physica A*, v. 168, p. 23, 1990.
- 111 STANLEY, H. E. et al. Diffusion limited aggregation: A paradigm of disorderly cluster growth. *Physica A*, v. 205, p. 254, 1994.
- 112 WITTEN, T. A.; SANDER, L. M. Diffusion-limited aggregation. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, p. 1400, 1981.
- 113 WITTEN, T. A.; SANDER, L. M. Diffusion-limited aggregation: A kinetic critical phenomenon. *Phys. Rev. B*, v. 27, p. 5686, 1983.
- 114 BARABASI, A. L.; STANLEY, H. E. *Fractal Concepts in Surface Growth*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995.
- 115 NIEMEYER, L.; PIETRONERO, L.; WIESMANN, H. J. Fractal dimension of dielectric breakdown. *Phys. Rev. Lett.*, v. 52, p. 1033, 1984.

APÊNDICE A – Equação constitutiva para um fluido Newtoniano

A relação entre o stress e a deformação num contínuo é chamada de *equação constitutiva*. Vamos considerar uma equação que relaciona o stress a taxa de strain num fluido de forma linear (72). Num fluido em repouso, o tensor de stress é isotrópico e é da forma

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij}, \quad (\text{A.1})$$

onde p é a pressão termodinâmica relacionada a ρ e T por uma equação de estado.

Mas fluidos que se movem apresentam componentes de stress adicionais devido a viscosidade. Os termos diagonais de τ se tornam diferentes e aparecem stresses shear. Assim o stress passa a ser

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + \sigma_{ij}. \quad (\text{A.2})$$

A parte não isotrópica σ , chamada de *tensor de stress deviatoric* está relacionada aos gradientes de velocidade $\partial u_i / \partial x_j$. Se considerarmos o tensor de strain

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (\text{A.3})$$

então vamos assumir uma relação linear do tipo $\sigma_{ij} = K_{ijmn}e_{mn}$, onde K_{ijmn} é um tensor de ordem quatro. Essa equação significa que cada componente de stress está linearmente relacionada às nove componentes de e_{ij} .

Vamos assumir que o meio é isotrópico e o tensor de stress é simétrico. Num meio isotrópico, a relação stress-strain é independente da rotação do sistema de coordenadas;

isso só é possível se K_{ijmn} é um tensor isotrópico. Todos os tensores isotrópicos de ordem par podem ser construídos como o produto de δ_{ij} (106). No caso do nosso tensor

$$K_{ijmn} = \lambda \delta_{ij} \delta_{mn} + \mu \delta_{im} \delta_{jn} + \gamma \delta_{in} \delta_{jm}, \quad (\text{A.4})$$

onde λ , μ e γ são escalares. Como σ_{ij} é um tensor simétrico, então K_{ijmn} também deve ser simétrico em i e j . Isso só é válido se $\gamma = \mu$. Assim a equação constitutiva fica

$$\sigma_{ij} = 2\mu e_{ij} + \lambda e_{mn} \delta_{ij}. \quad (\text{A.5})$$

O tensor de stress completo fica então

$$\tau_{ij} = -p \delta_{ij} + 2\mu e_{ij} + \lambda e_{mn} \delta_{ij}. \quad (\text{A.6})$$

Se tomarmos $i = j$ e somarmos sobre i temos

$$\tau_{ii} = -3p + (2\mu + 3\lambda) e_{mm}, \quad (\text{A.7})$$

onde $e_{mn} = \nabla \cdot \vec{u}$. Assim, podemos determinar a pressão p

$$p = -\frac{1}{3} \tau_{ii} + \left(\frac{2}{3} \mu + \lambda \right) \nabla \cdot \vec{u}. \quad (\text{A.8})$$

Para a maioria das aplicações, a consideração de Stokes (107)

$$\lambda + \frac{2}{3} \mu = 0 \quad (\text{A.9})$$

é razoável. Com isso, chegamos a seguinte equação constitutiva

$$\tau_{ij} = - \left(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{u} \right) \delta_{ij} + 2\mu e_{ij}. \quad (\text{A.10})$$

Essa relação linear entre τ e e é consistente com a definição de Newton do coeficiente de viscosidade num fluxo paralelo simples $u(y)$, para o qual essa equação mostra um stress shear $\tau = \mu(du/dy)$. Consequentemente, um fluido que obedece tal equação é chamado de *fluido Newtoniano*.

APÊNDICE B – A equação de Arrasto

A equação de arrasto pode ser derivada através de uma constante multiplicativa pelo método de análise dimensional. Se um fluido em movimento se encontra com um objeto, ele exerce uma força sobre esse objeto que obedece a uma lei complicada (e não completamente compreendida). Podemos considerar que, para diversas condições, as variáveis envolvidas sejam a velocidade, a densidade e a viscosidade do fluido, o tamanho do objeto (expressado em termos da sua área frontal A) e a força de arrasto. Usando o algoritmo do teorema Π de Buckingham, é possível reduzir essas cinco variáveis a dois parâmetros adimensionais: o coeficiente de arrasto e o número de Reynolds (108).

Alternativamente, pode-se também derivar os parâmetros adimensionais via manipulação direta das equações diferenciais.

Vamos expressar a força de arrasto F como parte de uma função das outras variáveis do problema:

$$f(F, u, A, \rho, \nu) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Assim, f é alguma função (ainda desconhecida) com cinco argumentos. Notamos que essa função é zero em qualquer sistema de unidades, o que nos leva a assumir que a relação descrita por f pode ser em termos somente de grupos adimensionais.

Há muitas formas de combinar os cinco argumentos de f para formar grupos adimensionais, mas o teorema Π afirma que existem dois desses grupos. Os mais apropriados são o número de Reynolds, dado por

$$Re = \frac{u\sqrt{A}}{\nu} \quad (\text{B.2})$$

e o coeficiente de arrasto, dado por

$$C_D = \frac{F}{\rho A u^2}. \quad (\text{B.3})$$

Assim, a função de cinco variáveis pode ser substituída por outra função somente dessas duas variáveis:

$$f\left(\frac{F}{\rho A u^2}, \frac{u\sqrt{A}}{\nu}\right) = 0. \quad (\text{B.4})$$

onde f é alguma função de dois argumentos. A lei original é então reduzida a uma lei que envolve somente esses dois números.

Como somente F é desconhecido na equação acima, é possível expressá-lo como

$$\frac{F}{\rho A u^2} = f\left(\frac{u\sqrt{A}}{\nu}\right) \quad (\text{B.5})$$

ou

$$F = \rho A u^2 f(Re). \quad (\text{B.6})$$

Assim, a força é simplesmente $\rho A u^2$ multiplicado por alguma função do número de Reynolds, ou seja, um sistema bem mais simples que o original com uma função de cinco argumentos.

A análise dimensional reduz um problema inicialmente complexo, que tenta determinar o comportamento da função de cinco variáveis, em uma sistema bem mais simples: a determinação do arrasto como função de uma única variável, o número de Reynolds.

Essa equação nos mostra, por exemplo, que a força de arrasto é proporcional à densidade do fluido se todas as outras variáveis forem constantes. Além disso, para se determinar o número de Reynolds empiricamente, não são necessários experimentos com grandes objetos com fluidos escoando rapidamente (como é o caso de aviões de tamanho real em túneis de vento), mas basta testar modelos com fluxos lentos e fluidos mais viscosos, porque esses dois sistemas são similares.

APÊNDICE C – A Lei de Stokes

Para determinar as forças que agem sobre objetos submersos, vamos considerar um sólido esférico ao redor da qual um fluido incompressível escoar lentamente. A esfera tem raio R e diâmetro D . O fluido tem viscosidade μ e densidade ρ e se aproxima da esfera verticalmente no sentido para baixo com velocidade uniforme v_F . Apresentamos simplesmente as expressões das distribuições do momento e da pressão e as componentes da velocidade do fluido em coordenadas esféricas (72, 109)

$$\tau_{r\theta} = \frac{3}{2} \frac{\mu v_F}{R} \left(\frac{R}{r}\right)^4 \sin \theta, \quad (\text{C.1})$$

$$p = p_0 - \rho g z - \frac{3}{2} \frac{\mu v_F}{R} \left(\frac{R}{r}\right)^2 \cos \theta, \quad (\text{C.2})$$

$$v_r = v_F \left[1 - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{r}\right)^3 \right] \cos \theta, \quad (\text{C.3})$$

$$v_\theta = -v_F \left[1 - \frac{3}{4} \left(\frac{R}{r}\right) - \frac{1}{4} \left(\frac{R}{r}\right)^3 \right] \sin \theta. \quad (\text{C.4})$$

A quantidade p_0 é a pressão no plano $z = 0$ distante da esfera; $-\rho g z$ é a contribuição da altura do fluido (efeito hidrostático) e o termo v_F resulta do fluxo ao redor da esfera. Essas equações são válidas somente para um fluxo 'creeping', que nesse sistema ocorre quando o número de Reynolds $Dv_F\rho/\mu$ é menor que 0.1.

Note que a distribuição de velocidade satisfaz a condição $v_r = v_\theta = 0$ na superfície da esfera. Ainda, podemos mostrar que v_z se aproxima de v_F e que a distribuição de pressão se reduz a equação hidrostática $p = p_0 - \rho g z$ longe da esfera. Assim, essas

expressões satisfazem as condições de contorno em $r = R$ e $r = \infty$.

Para determinarmos a força total exercida pelo fluido sobre a esfera, vamos calcular as forças normal e tangencial sobre a superfície da esfera.

Em cada ponto na superfície da esfera, existe uma força por unidade de área p que age perpendicularmente a superfície. A componente z dessa força é $-p \cos \theta$. Multiplicando essa força local pela unidade de área onde ela está agindo e integrando para toda superfície da esfera, obtemos a força normal resultante na direção z

$$F_n = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (-p|_{r=R} \cos \theta) R^2 \sin \theta d\theta d\phi. \quad (\text{C.5})$$

Usando a distribuição de pressão na superfície da esfera

$$p|_{r=R} = p_0 - \rho g R \cos \theta - \frac{3}{2} \frac{\mu v_F}{R} \cos \theta \quad (\text{C.6})$$

e substituindo na expressão (C.5), temos

$$F_n = \frac{4}{3} \pi R^3 \rho g + 2\pi \mu R v_F. \quad (\text{C.7})$$

O primeiro termo da força normal corresponde a força de empuxo e o segundo termo ao 'form drag'.

Em cada ponto na superfície da esfera também existe um 'shear stress' $-\tau_{r\theta}$ que age tangencialmente a superfície, ou seja, na direção θ . A componente z dessa força é $\tau_{r\theta} \sin \theta$. Multiplicando essa força local pela unidade de área onde ela está agindo e integrando para toda superfície da esfera, obtemos a força tangencial resultante na direção z

$$F_t = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\tau_{r\theta}|_{r=R} \sin \theta) R^2 \sin \theta d\theta d\phi. \quad (\text{C.8})$$

Usando a distribuição do 'shear stress' na superfície da esfera

$$\tau_{r\theta}|_{r=R} = \frac{3}{2} \frac{\mu v_F}{R} \sin \theta \quad (\text{C.9})$$

e substituindo na expressão (C.8), temos

$$F_t = 4\pi\mu Rv_F. \quad (\text{C.10})$$

Assim, a força total que o fluido exerce sobre a esfera é dada pela soma $F_n + F_t$, ou seja,

$$F = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho g + 2\pi\mu Rv_F + 4\pi\mu Rv_F = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho g + 6\pi\mu Rv_F. \quad (\text{C.11})$$

O primeiro termo dessa força representa a força de empuxo e o segundo termo resulta do movimento do fluido ao redor da esfera. Essa última força,

$$F_c = 6\pi\mu Rv_F, \quad (\text{C.12})$$

corresponde a 'Lei de Stokes'. Essa lei é útil quando estudamos o movimento de partículas coloidais sob a influência de um campo elétrico, na teoria de sedimentação e no estudo do movimento de partículas de 'aerosol'.

APÊNDICE D – DLA

O modelo mais famoso de crescimento de *clusters* (aglomerados) é o de agregação por difusão limitada (DLA, do inglês Diffusion-limited aggregation - Agregamento difusivo limitado) (110–114). Esse modelo consiste basicamente em fixar uma partícula semente no sítio no centro de uma rede e soltar aleatoriamente uma outra partícula de uma posição longe da semente. A partícula que é solta se move numa trajetória Browniana até alcançar um dos quatro vizinhos mais próximos da semente, onde ela se aloja formando um aglomerado de duas partículas. Em seguida, uma outra partícula é solta e se move da mesma maneira até se alojar em um dos seis sítios do perímetro do aglomerado de duas partículas. Esse processo é iterado repetidamente. Na Figura D.1, mostramos dois tipos de aglomerados obtidos com DLA.

Estudos anteriores demonstraram que os aglomerados DLA são objetos fractais. Apesar da simplicidade da regra de crescimento, não existe uma teoria para DLA que possa oferecer sua dimensão fractal. É a natureza não local do processo de crescimento que torna o problema extremamente difícil para ser tratado analiticamente.

A não localidade do DLA é um resultado do *sombreamento* gerado pelos ramos do aglomerado. Se uma nova partícula se difunde em direção ao aglomerado, ela pode se alojar em qualquer parte do aglomerado. No entanto, a probabilidade é maior de que ela seja capturada pelas partes externas dos braços do aglomerado do que ela penetrar nele. Assim, a taxa de crescimento num dado ponto depende da geometria inteira do aglomerado e não somente da morfologia local.

Usando DLA, a probabilidade de crescimento do perímetro de um sítio é a probabi-

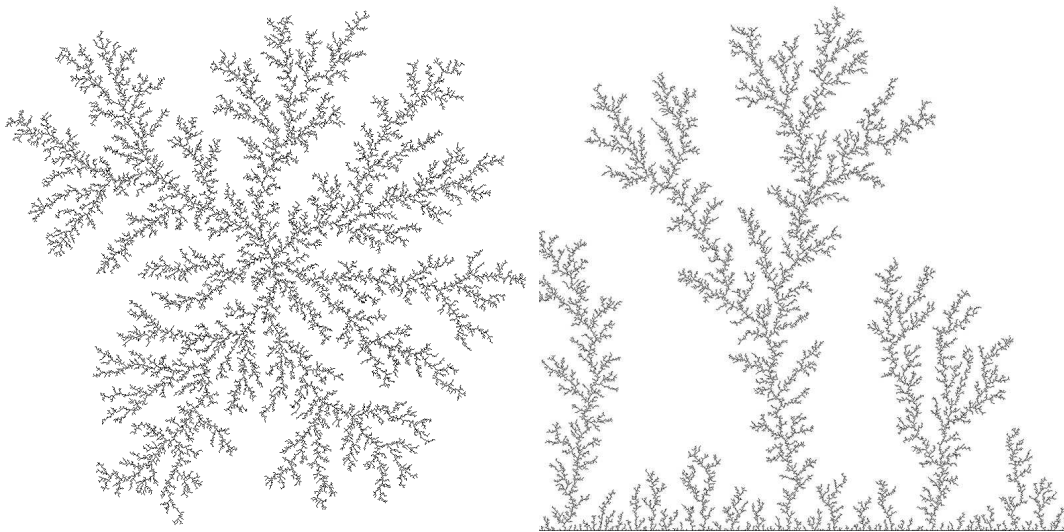


Figura D.1: Aglomerados obtidos com DLA. À direita, o aglomerado cresceu a partir de uma semente central e à esquerda a partir de uma linha de sementes.

lidade que um *random walker* visite esse sítio. Essa probabilidade u obedece a equação de difusão de estado estacionário

$$\nabla^2 u = 0, \quad (\text{D.1})$$

onde $u = 1$ no infinito e $u = 0$ nos sítios do perímetro. A probabilidade que um sítio do perímetro seja visitado é proporcional ao fluxo naquele sítio, ou seja, $p \propto \nabla u$. A velocidade de crescimento \mathbf{v}_n obedece a equação de continuidade $\nabla \cdot \mathbf{v}_n = 0$. Como $|\mathbf{v}_n p| \propto \nabla u$, recuperamos a equação D.1.

Os aglomerados DLA não crescem simplesmente por deposição das partículas, mas também pelo cálculo a todo momento do campo Laplaciano u e escolhendo uma taxa de crescimento proporcional ao gradiente local do campo (115).

O processo de agregamento que leva aos aglomerados DLA é difundido na natureza. Estruturas de ramos geradas de DLA têm sido observadas em eletrodeposição, quebra de dielétrico, crescimento de flocos de neve, dissolução química, cristalização de filme fino, fenômenos geológicos como texturas minerais e até em fenômenos biológicos como o crescimento de bactérias e o crescimento neural (114). Entretanto, em

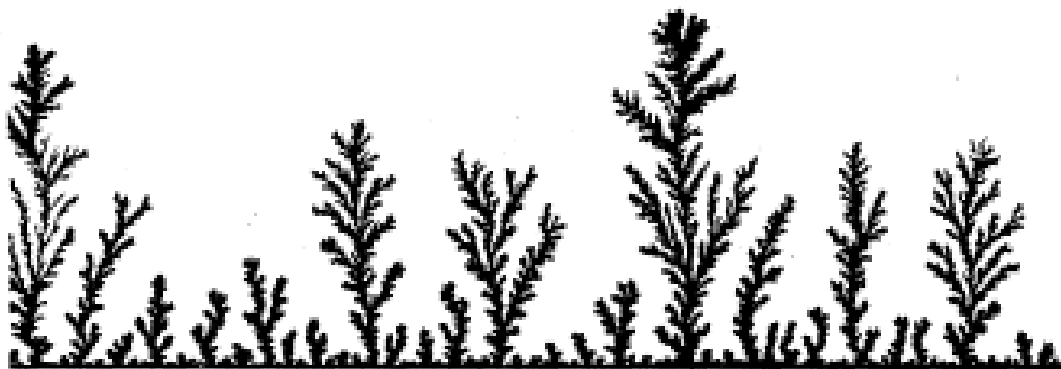


Figura D.2: Um exemplo típico de uma floresta de árvores de zinco. A floresta consiste de muitas árvores individuais de vários tamanhos que crescem no catodo de carbono linear. A fotografia mostra a visão parcial (cerca de 6cm) próximo ao centro do catodo.

todos os casos há a presença de outro campo difusivo. O papel de u , por exemplo, na eletrodeposição é o campo elétrico e no crescimento de bactérias é a concentração de nutrientes.

O aglomerado mostrado na Figura D.1 cresceu em torno de uma semente central. Entretanto, no estudo de deposição sobre superfícies, é mais apropriado uma geometria de faixas, ou seja, deposição a partir de uma linha de sementes. Os resultados desse tipo de processo de deposição podem ser visto na Figura D.2.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)