

Efeito Casimir em Sistemas Granulares

Letícia Oliveira Aquino¹

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG

Allbens Atman P. Faria²

Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG e Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Sistemas Complexos, INCT-SC

Thiago G. Mattos³

Departamento de Física e Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG

Resumo. Os materiais granulares apresentam propriedades físicas interessantes e incomuns, que abrem a possibilidade para aplicações tecnológicas. Neste artigo, foi feito um estudo por meio de simulações computacionais em sistemas granulares bidimensionais, investigando a relação entre o *packing fraction* do sistema granular e a interação entre dois grãos intrusos, fenômeno análogo ao Efeito Casimir. O método utilizado para as simulações em duas dimensões é o de Dinâmica Molecular. A base da Dinâmica Molecular é a integração numérica das equações de movimento da mecânica clássica. Os resultados mostraram que a interação entre os grãos intrusos depende de uma compactação (*packing fraction*) do sistema, com um valor característico para a distância entre os intrusos para cada *packing fraction* considerado.

Palavras-chave. Material Granular, Efeito Casimir, Intrusos, Dinâmica Molecular.

1 Introdução

Os materiais granulares têm sido extensivamente estudados devido ao fato de possuírem propriedades únicas que os diferem de outros materiais [10]. Por exemplo, podem fluir comportando-se como um fluido, ou também podem suportar peso como um sólido [13]. Algumas propriedades de dinâmicas envolvendo esses materiais incluem a formação de padrões [21], avalanches [18], segregação [12], transições de fase [3], engarramento [13], empacotamento [14], auto-organização [16], dentre outros. Os materiais granulares podem ser de diferentes formas e dimensões: brita, carvão, areia, arroz e café são alguns exemplos de materiais granulares encontrados em nosso dia a dia [10]. Esse estado discreto da matéria é utilizado em aplicações industriais, como na produção de cimento, fertilizantes, alimentos e produtos farmacêuticos [2]. Compreender o comportamento dos materiais granulares é relevante para diversas aplicações industriais, pois podem acometer a produtividade e a qualidade de seus processos [14]. Como resultado, inúmeros grupos de pesquisas dedicados ao trabalho em materiais granulares surgiram em todo o mundo na última década [10]. Apesar de sua importância em muitas áreas da ciência e tecnologia, a maioria dos aspectos da física dos sistemas granulares permanece obscura [15] [3].

Em 1948, Hendrik Casimir previu a existência de uma força de atração entre duas placas metálicas paralelas separadas por uma certa distância no vácuo [5]. Este efeito, conhecido como efeito

¹eng.leticia@live.com

²atman@cefetmg.br

³tgmatos@cefetmg.br

Casimir, é decorrente do formalismo quântico da teoria do eletromagnetismo. Em 1978, Fisher e de Gennes demonstraram que tal efeito também surge a partir do confinamento de flutuações em sistemas termodinâmicos [11].

Precursor na aplicação do efeito Casimir em um sistema granular, o trabalho de Cattuto *et. al* promoveu simulações numéricas com grãos intrusos imóveis, indicando que pode haver uma interação repulsiva de longo alcance entre esses grãos intrusos imersos em sistemas de pequenas partículas [6]. Não obstante, experimentos em sistemas granulares com avalanches foram realizados a partir de empilhamentos de grãos de arroz. Ademais, utilizou-se duas placas paralelas sujeitas a avalanches durante o fluxo desses grãos. Sendo assim, após experimentos e simulações, constatou-se a existência de um efeito semelhante ao de Casimir entre essas placas [9].

A técnica mais utilizada para simular materiais granulares é a Dinâmica Molecular [17]. Desse modo, neste trabalho desenvolvemos códigos baseados no método de Dinâmica Molecular para o estudo por meio de simulações computacionais em sistemas granulares bidimensionais, investigando a relação entre o valor do *packing fraction* do sistema granular e a interação entre dois grãos intrusos, fenômeno análogo ao Efeito Casimir. Essa abordagem é original ao considerarmos a geometria de dois intrusos e paredes analisando do ponto de vista do Efeito Casimir. Esse tipo de geometria já foi estudada, todavia a explicação para interação entre os intrusos não há pacificação na literatura. Sendo assim, exploramos o Efeito Casimir como uma possível solução para o sistema, pois existem explicações baseadas em argumentos mecânicos, que não foram suficientes para elucidar completamente a dinâmica do sistema. Inicialmente, foram desenvolvidos três códigos, o primeiro para preparação da amostra composta por 3200 grãos e dois grãos intrusos em uma caixa retangular. O segundo algoritmo realiza o aumento do valor do *packing fraction* do sistema granular, e por fim, o terceiro código inicia a movimentação dos intrusos ao longo da caixa.

2 Metodologia

Os experimentos numéricos são realizados em sistemas granulares bidimensionais formados de grãos (discos). O método utilizado para as simulações em duas dimensões é a Dinâmica Molecular [1]. A base da Dinâmica Molecular é a integração numérica das equações de movimento da mecânica clássica. Neste trabalho, a técnica utilizada para fazer essa integração é o método de *Runge-Kutta* de 4ª ordem [19] através da técnica *Gear Predictor-Corrector* de 3ª ordem [15]. Esse método mantém a previsão da posição, corrigindo a velocidade e aceleração no passo de tempo seguinte. As Equações 1, 2 e 3 demonstram a utilização dos coeficientes para a correção das variáveis no tempo,

$$\vec{r}^c(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + c_0 \Delta \vec{a}(t + \Delta t) \quad (1)$$

$$\vec{v}^c(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + c_1 \Delta \vec{a}(t + \Delta t) \quad (2)$$

$$\vec{a}^c(t + \Delta t) = \vec{a}(t) + c_2 \Delta \vec{a}(t + \Delta t) \quad (3)$$

em que o índice *c* representa a quantidade corrigida.

Para Allen [20] o passo a passo geral de uma simulação de Dinâmica Molecular, baseada em um algoritmo *Predictor-Corrector*, pode ser resumido da seguinte forma: a) prever as posições, velocidades, acelerações, no tempo $t + \Delta t$, usando os valores atuais dessas grandezas; b) avaliar as forças e, portanto, as acelerações das novas posições; c) corrigir as posições previstas, velocidades, acelerações, usando as novas acelerações.

A fim de registrar os eventos que ocorrem durante as colisões entre os grãos, é importante selecionar um intervalo de tempo (Δt) que seja significativamente inferior à duração do contato

mais curto. Isso garante a captura adequada dos fenômenos que ocorrem nessa escala. Sendo assim, a Equação 4 representa o período característico de oscilação do contato normal entre os grãos, em que $1/Q$ representa o fator de segurança, m_{ij} a massa do menor grão e k_n a constante elástica do material. Para as simulações, escolhemos $Q = 100$, pois quanto maior o valor de Q menor o passo de tempo, maior a precisão da simulação. Contudo, o custo computacional também será maior.

$$\Delta t \equiv \frac{1}{Q} \sqrt{\frac{m_{ij, \min}}{k_n}} \quad (4)$$

A interação entre os grãos é implementada utilizando o modelo reológico de Kelvin-Voigt o qual se baseia na força de contração como uma mola na direção tangencial e outra na direção normal para simular o contato mecânico entre dois grãos [8].

Nosso sistema é composto de N grãos depositados em uma caixa retangular com condições periódicas de contorno na vertical. Além dos pequenos grãos, os intrusos, dois grandes discos rígidos e inelásticos, experimentam um deslocamento na vertical imposto, além disso são separados a uma distância inicial. As simulações foram desenvolvidas e separadas em três etapas: preparação, compactação e a intrusão. Para a primeira etapa, preparação, construímos a caixa com os grãos e os intrusos. Os códigos elaborados para esse trabalho foram implementados em linguagem C utilizando os parâmetros descritos na Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros do sistema.

Número de grãos	Raio (Mín/Máx)	Const. de mola normal e tang.
3200	0.3 e 0.5	1000 e 750
Coef. atrito efetivo	Quantidade de intrusos	Raio dos intrusos
0.5	2	2

A Tabela 1 mostra os parâmetros adimensionais segundo descrito por Atman *et al.* [4].

Para a preparação da amostra de grãos, o primeiro algoritmo funciona da seguinte maneira: inicialmente definimos a altura (H) e largura (L) da caixa na qual os grãos serão acomodados. Posteriormente definimos os raios mínimo e máximo dos grãos. Em seguida, estabelecemos a quantidade de intrusos e os raios. Os intrusos são colocados de forma que fiquem estacionados sobre os grãos no topo da caixa conforme a Figura 1 ilustra. Os intrusos são dois grãos com raio quatro vezes maior que o maior grão livre do sistema, entretanto possuem a mesma rigidez.

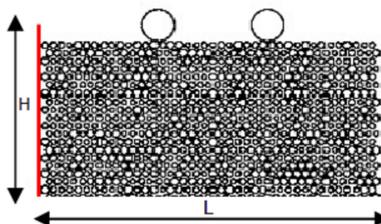


Figura 1: Amostra representativa de uma configuração construída a partir de grãos livres e intrusos no topo. Em vermelho as paredes do sistema.

Com a amostra inicial preparada, partimos para as próximas etapas das simulações. O segundo algoritmo consiste na compressão do sistema, ou seja, no aumento do valor do *packing fraction* da

amostra gerada, bem como atualiza os valores das variáveis posição, velocidade, e aceleração de cada grão. Durante a compressão, os raios dos grãos livres do sistema aumentam até que o valor da compactação desejada seja atingida. Na terceira etapa do algoritmo, os dois grãos intrusos são submetidos a um deslocamento na vertical, com velocidade constante, variando suas posições em função do tempo com liberdade de movimento na horizontal. Condições periódicas são aplicadas na direção vertical e paredes lisas confinam os grãos na direção horizontal. Medimos a distância entre os intrusos ao longo da altura da caixa e para diferentes valores iniciais de *packing fraction*. O valor do *packing fraction* é calculado pela razão entre o somatório das áreas dos grãos pela área da caixa na qual os discos estão depositados.

3 Discussão de resultados

Para os sistemas analisados com compactação entre 0,7 e 0,8, notamos que há uma cavidade que se forma atrás dos intrusos durante seu deslocamento pela caixa no meio granular, conforme a Figura 2 ilustra. É importante notar que para as amostras com compactação maior (0,84) não há formação de cavidade atrás do intrusos [7]. A espessura das linhas ligando os centros dos discos representa a intensidade da força de contato entre eles. Quanto mais espessa maior a intensidade da força.

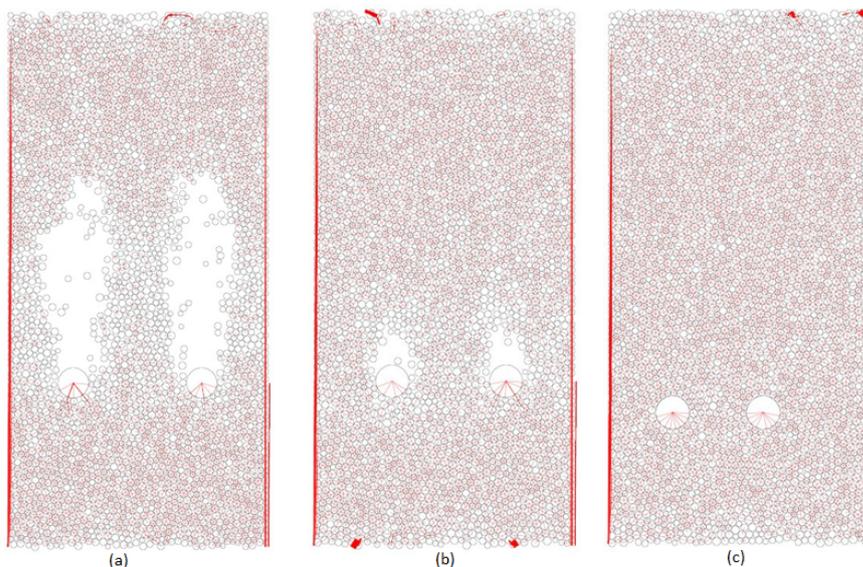


Figura 2: Evolução de uma amostra de grãos sujeitos a compressão e condição periódica de contorno na vertical obtida pela técnica de simulação de Dinâmica Molecular. A caixa contém dois grãos (intrusos) maiores que os demais grãos do meio, os quais se movem para baixo à medida que o tempo passa. Em vermelho as cadeias de força, sendo essa mais intensa em tons mais escuros de vermelho. Em (a) tem-se uma compactação (*packing fraction*) de 0,7, em (b) assume-se um valor intermediário de 0,8 e em (c) a compactação possui um valor maior de 0,84.

Para dois intrusos em baixos valores de *packing fraction*, menores que 0,8, os intrusos estão se afastando quase linearmente com a profundidade, posteriormente, atingindo um valor de saturação. Verificamos que, enquanto existe a cavidade ocorre uma maior dissipação de energia devido a atenuação das ondas sonoras.

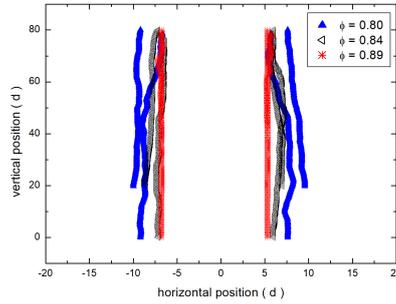


Figura 3: Gráfico da posição horizontal dos intrusos em função da posição vertical, ambos em função do diâmetro de grão.

Medimos a separação dos dois intrusos, conforme a Figura 3 ilustra. Esse gráfico demonstra uma amostra para cada valor de *packing fraction*. As linhas começam em lugares diferentes em ambos os eixos devido a condição periódica de contorno na vertical. Para compactação em 0,80, nota-se que não há aproximação dos intrusos, ou seja, não conseguimos ver influência do Efeito Casimir para esse valor de *packing fraction*.

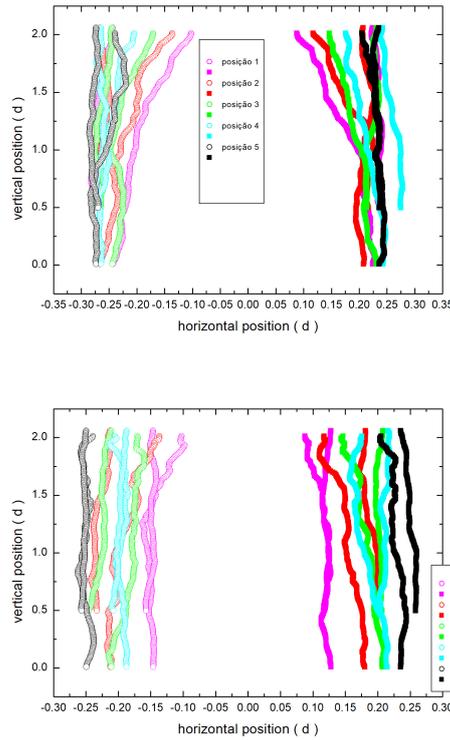


Figura 4: Gráficos da posição horizontal dos intrusos em função da posição vertical para amostras com valor de *packing fraction* iguais a 0,77 e 0,84.

Os intrusos possuem um afastamento inicial como ilustram os gráfico da Figura 4. Foram feitas simulações alterando as posições iniciais dos dois intrusos, sendo cinco diferentes posições aumentando a distância inicial entre eles. Na figura 4(a), para valor de *packing fraction* igual a 0,77, existe uma repulsão entre os intrusos que começam as simulações com posições iniciais mais próximas. Observa-se que a assimetria é induzida maioritariamente pelo outro intruso. A partir de um certo momento verificamos que esse afastamento satura em determinado valor, sendo esse valor característico para cada *packing fraction* do meio. Para as simulações com valor de *packing fraction* iguais a 0,90 os intrusos seguem sem alterações mínimas das suas posições iniciais.

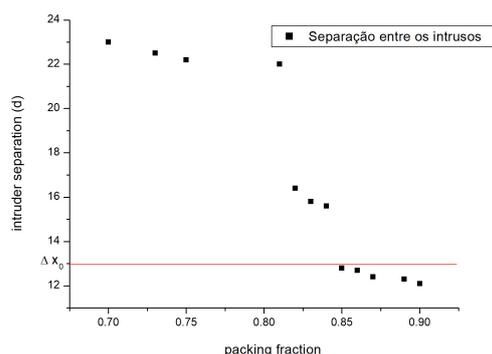


Figura 5: Evolução dos intrusos pelo caixa no sistema granular em função do *packing fraction* utilizado. Em que Δx_0 representa a separação inicial dos intrusos.

Na Figura 5 podemos observar uma mudança brusca no comportamento entre os intrusos: para valores de *packing fraction* abaixo de 0,85 esses se afastam, ou seja, acima desse valor eles se aproximam. Sendo assim, essa a interação entre dois grãos intrusos um fenômeno análogo ao Efeito Casimir.

4 Considerações Finais

Verificamos a separação dos intrusos em função do *packing fraction* com relação da dependência desse fenômeno com a distância inicial entre os intrusos. Concluímos que há um valor de *packing fraction* crítico o qual separa dois comportamentos distintos para os grãos intrusos, ou seja, para valores abaixo de 0,85 os intrusos se afastam. Portanto, conclui-se que o *packing fraction* crítico separa os dois regimes de comportamento dos grãos intrusos. Esses resultados fornecem percepções importantes sobre as interações em sistemas granulares e contribuem para o entendimento de fenômenos complexos como o Efeito Casimir.

Referências

- [1] Michael P Allen e Mark R Wilson. “Computer simulation of liquid crystals”. Em: **Journal of computer-aided molecular design** 3 (1989), pp. 335–353.
- [2] Bruno Andreotti, Yoël Forterre e Olivier Pouliquen. **Granular media: between fluid and solid**. Cambridge University Press, 2013.
- [3] Tomaso Aste. **Granular and complex materials**. Vol. 8. World Scientific, 2007.

- [4] APF Atman et al. “Sensitivity of the stress response function to packing preparation”. Em: **Journal of Physics: Condensed Matter** 17.24 (2005), S2391.
- [5] Hendrick BG Casimir. “On the attraction between two perfectly conducting plates”. Em: **Proc. Kon. Ned. Akad. Wet.** Vol. 51. 1948, p. 793.
- [6] C Cattuto et al. “Fluctuation-induced Casimir forces in granular fluids”. Em: **Physical review letters** 96.17 (2006), p. 178001.
- [7] Pierre Cixous et al. “Jamming and Unjamming by Penetration of a Cylindrical Intruder inside a 2 Dimensional Dense and Disordered Granular Medium”. Em: **AIP Conference Proceedings**. Vol. 1145. 1. American Institute of Physics. 2009, pp. 539–542.
- [8] Peter A Cundall e Otto DL Strack. “A discrete numerical model for granular assemblies”. Em: **geotechnique** 29.1 (1979), pp. 47–65.
- [9] DV Denisov, YY Villanueva e RJ Wijngaarden. “Simulation of a Casimir-like effect in a granular pile with avalanches”. Em: **Physical Review E** 83.6 (2011), p. 061301.
- [10] Jacques Duran. **Sands, powders, and grains: an introduction to the physics of granular materials**. Springer Science & Business Media, 2012.
- [11] Michael E Fisher e Pierre GD Gennes. “Wall phenomena in a critical binary mixture”. Em: **Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences Serie B** 287.8 (1978), pp. 207–209.
- [12] ISAAC Goldhirsch e G Zanetti. “Clustering instability in dissipative gases”. Em: **Physical review letters** 70.11 (1993), p. 1619.
- [13] Haye Hinrichsen e Dietrich E Wolf. **The physics of granular media**. John Wiley & Sons, 2006.
- [14] Anita Mehta e Sam Edwards. **Granular physics**. Cambridge University Press, 2007.
- [15] Thorsten Pöschel e Thomas Schwager. **Computational granular dynamics: models and algorithms**. Springer Science & Business Media, 2005.
- [16] O Ramos, Ernesto Altshuler e KJ Måløy. “Avalanche prediction in a self-organized pile of beads”. Em: **Physical review letters** 102.7 (2009), p. 078701.
- [17] Dennis C Rapaport e Dennis C Rapaport Rapaport. **The art of molecular dynamics simulation**. Cambridge university press, 2004.
- [18] Pal Tegzes. **Stability, Avalanches and Flow in Dry and Wet Granular Materials**. 2002.
- [19] Colin Thornton. “Granular dynamics, contact mechanics and particle system simulations”. Em: **A DEM study. Particle Technology Series** 24 (2015).
- [20] Dominic J Tildesley e Michael P Allen. **Computer simulation of liquids**. Clarendon Oxford, 1987.
- [21] Paul B Umbanhowar, Francisco Melo e Harry L Swinney. “Periodic, aperiodic, and transient patterns in vibrated granular layers”. Em: **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications** 249.1-4 (1998), pp. 1–9.