

3

O Estado de Resfriamento Homogêneo e a Formação de Aglomerados

Neste capítulo trataremos mais detalhadamente da teoria de dois importantes fenômenos que acontecem peculiarmente, em um gás de grãos devido à inerente inelasticidade das colisões: o fato do sistema não atingir um estado estacionário, e o surgimento de grandes inhomogeneidades espaciais.

3.1 Lei de Haff

Para uma pequena dissipação $\delta \ll 1$ (equação 2.70) podemos resolver a equação para evolução da temperatura no estado homogêneo (2.66), usando uma aproximação em ζ (2.89) até a ordem de δ ,

$$\frac{d}{dt}T_g(t) \approx -2n\sigma g_2(\sigma)T_g(t)\sqrt{\frac{\pi T_g(t)}{m}}\left[\frac{T_g(t)}{T_0}\right]^{1/10} (2^{1/10})(1,294)\delta. \quad (3.1)$$

Podemos reescrever a relação acima como:

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{2T_g(t)}{T_0}\right] = -\frac{C\delta}{\tau_c(0)}\left[\frac{T_g(t)}{T_0}\right]^{8/5}, \quad (3.2)$$

com¹⁴ $C = 1,303$ e onde τ_c é o tempo médio de colisão, dado por:

$$\tau_c(t) = \left(\sqrt{2\pi}n\sigma g_2(\sigma)\sqrt{\frac{2T_g(t)}{m}}\right)^{-1} \quad (3.3)$$

Resolvendo esta equação obtemos a conhecida lei de Haff:

$$T_g(t) = T_0\left(1 + \frac{t}{\tau_0}\right)^{-5/3} \quad (3.4)$$

onde introduzimos o tempo característico

$$\tau_0 = \frac{5}{3}\frac{\tau_c(0)}{C\delta} \quad (3.5)$$

No limite de tempos longos $t \gg \tau_0$ temos que a temperatura granular decai como uma lei de potência $T_g(t) \sim t^{-5/3}$. Portanto o sistema não chega a um estado estacionário. Contudo a tendência das velocidades em

^aobserve que este limite é atingido mais rapidamente quanto maior for a dissipação, uma vez que $\tau_0 \sim (1/\delta)$

um sistema granular é se tornarem correlacionadas, levando ao aparecimento de modos dinâmicos coletivos (vórtices) e instabilidades de alta densidade (aglomerados), que por sua vez, tornam a equação de Boltzmann inválida, uma vez que esta se apóia na hipótese de caos molecular. A Lei de Haff então deixa de descrever o comportamento do decaimento da energia cinética média do sistema.

3.2 Formação de Aglomerados

Um gás de partículas que colidem elasticamente tende para um estado estacionário, homogeneamente distribuído no espaço. Como já visto, para um gás de grãos a inelasticidade das colisões faz com que o sistema perca constantemente energia de acordo com uma lei de potência, e portanto não chegue a um estado estacionário. Enquanto o sistema se resfria, aparecem instabilidades que fazem com que o sistema não se mantenha homogêneo. Formam-se regiões de alta densidade de partículas (aglomerados) menos energéticas (baixa velocidade), circundadas por regiões de baixa densidade e partículas mais velozes (gás).

Uma explicação cinética para tal fenômeno é que uma partícula com baixa velocidade ao adentrar uma região de densidade um pouco mais alta sofre mais colisões, conseqüentemente perde mais energia e não tem velocidade suficiente para escapar desta região, aumentando a densidade local, assim mais e mais partículas vão sendo aprisionadas nesta região, aumentando ainda mais sua densidade, de maneira que até mesmo partículas mais energéticas possam ser capturadas. Se considerarmos um modelo de colisão para o qual o coeficiente de restituição é constante, podemos esperar que, uma vez iniciado, este processo continua até que todas as partículas se aglomerem em torno de uma mesma região como pode ser visto na simulação em dinâmica molecular da figura (3.1).

Porém, para o modelo que estamos tratando (coeficiente de restituição dependente da velocidade relativa entre os grãos), temos que $r \rightarrow 1$ quando $v \rightarrow 0$. Ou seja o sistema se torna mais elástico a medida que se resfria. Logo podemos esperar que nas regiões de mais alta densidade, nas quais os grãos são mais lentos, que o gás seja mais elástico. Portanto estas aglomerações tendem a se dissolver completamente, fazendo com que o sistema volte a ser homogêneo¹⁴. Logo, poderia se concluir que a formação de aglomerados é apenas um fenômeno transiente. Porém esta conclusão não é necessariamente correta, uma vez que o gás só se torna perfeitamente elástico no limite $g = 0$ quando todas as partículas estão em repouso. Para entender este ponto precisamos estudar mais detalhadamente a evolução no tempo do sistema.

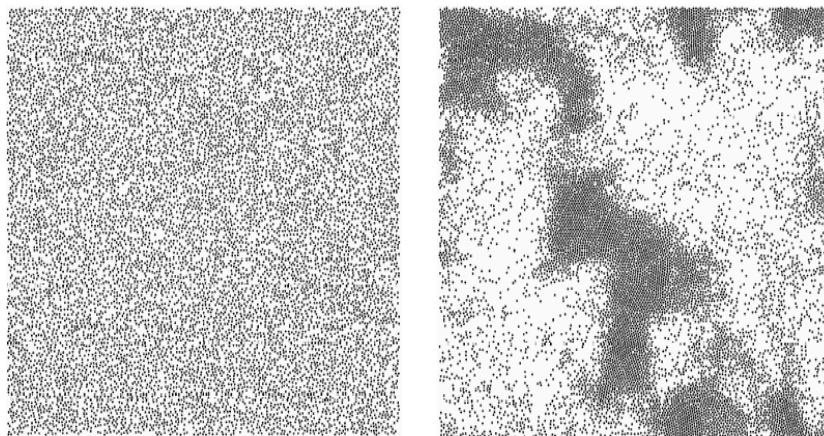


Figura 3.1: Sistema com 11 000 partículas em uma caixa com condições de contorno periódicas, alimentação de energia e coeficiente de restituição constante $r = 0,97$. A esquerda vemos a configuração inicial com as partículas homogeneamente distribuídas. A direita temos o sistema no estado estacionário, onde vemos as aglomerações de partículas. (Hans J. Herrmann, S. Luding and R. Caferio, *Physica A* **295** (2001) 93-100).

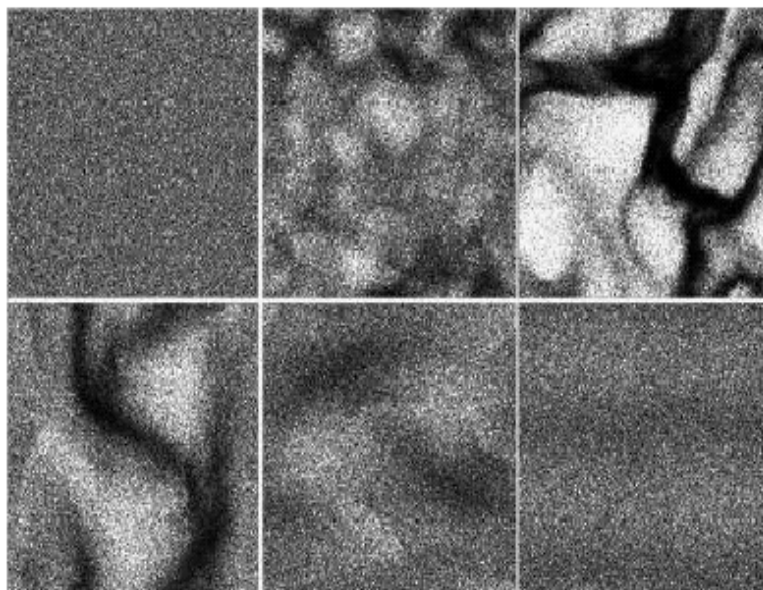


Figura 3.2: Dinâmica molecular com 10^5 partículas viscoelásticas. Aglomerações surgem como estruturas transitentes. As fotos são para 0, 200, 800, 7.500, 20.000, e 70.000 colisões por partícula (T. Pöschel, N. V. Brilliantov, C. Salueña, T. Schwager, cond-mat/0312616 -2003).

Estamos interessados em estudar a formação de aglomerados, sob uma visão macroscópica. Goldhirsch e Zanetti¹⁷, descrevem este comportamento como resultado de instabilidades ao nível da hidrodinâmica: a medida que o número de colisões por partícula aumenta nas regiões de mais alta densidade, mais energia é perdida nesta região, provocando uma queda na temperatura granular local. A diminuição da temperatura granular, por sua vez, gera uma diminuição de pressão, e esta região de baixa pressão atrai mais massa das regiões de alta pressão. Para demonstrar que uma região de alta densidade realmente possui uma baixa pressão, eles fizeram uma análise de instabilidades das equações hidrodinâmicas no espaço de Fourier usando um comprimento de onda grande comparado ao livre caminho médio. Contudo eles adotaram um coeficiente de restituição constante.

Faremos então a análise de instabilidades linear nas equações hidrodinâmicas que obtemos para $r(g)$, para verificar se suas instabilidades persistem com o tempo ou se são apenas transitentes.

3.3 Análise de Instabilidades

Vários autores têm mostrado que, numa escala conveniente, as equações hidrodinâmicas apresentam instabilidades lineares,¹⁷⁻¹⁹ e que muitos fenômenos interessantes observados podem estar relacionados a essas instabilidades, tais como vorticidade e até mesmo a formação de aglomerados, nosso foco principal¹⁴.

Faremos uma análise do sistema próximo do estado de resfriamento homogêneo, com densidade n_h , temperatura $T_h(t)$ e fluxo de velocidade nulo.

$$T(\mathbf{r}, t) = T_h(t) + \delta T(\mathbf{r}, t) \quad (3.6)$$

$$n(\mathbf{r}, t) = n_h + \delta n(\mathbf{r}, t) \quad (3.7)$$

$$\mathbf{u} = \delta \mathbf{u} \quad (3.8)$$

As flutuações lineares são pequenas de tal modo que:

$$\theta \equiv \frac{\delta T(\mathbf{r}, t)}{T_h(t)} \ll 1 \quad \rho \equiv \frac{\delta n(\mathbf{r}, t)}{n_h} \ll 1 \quad |\mathbf{w}| \equiv \frac{|\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|}{v_g(t)} \ll 1 \quad (3.9)$$

As equações de Navier-Stokes linearizadas serão escritas então

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = -\nabla \cdot n_h \delta \mathbf{u}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{m} \nabla \delta T - \frac{1}{mn_h} T_h \nabla n + \frac{\eta}{mn_h} \left[\nabla^2 \delta \mathbf{u} + \frac{1}{3} \nabla \nabla \cdot \delta \mathbf{u} \right], \quad (3.11)$$

$$n_h \frac{\partial \delta T}{\partial t} = \delta n \frac{dT_h}{dt} - \left(\lambda \nabla^2 \delta T + \mu \nabla^2 \delta n \right) - T_h \nabla \cdot \delta \mathbf{u} - \zeta \delta T. \quad (3.12)$$

Usaremos escalas de tempo e espaço adimensionais medidas respectivamente em unidades de $\tau_c(t)/2$ e $l_c/2$, onde

$$l_c^{-1} = \sqrt{2\pi n \sigma g_2(\sigma)} \quad (3.13)$$

é o livre caminho médio^b. Nesta nova escala temos que:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{2}{\tau_c(t)} \frac{\partial}{\partial t^*} \quad (3.14)$$

$$\nabla = \frac{2}{l_c} \nabla^* \quad (3.15)$$

Quanto aos coeficientes η, κ, μ e ζ , dados pelas equações (2.98), (2.96) e (2.97) respectivamente, manteremo-los somente até a ordem de $\delta'(t)$, e os escreveremos em termos da nova escala:

^b $l_c = \tau_c(t) v_g(t)$

$$\eta = \frac{1}{2\sigma} \sqrt{\frac{mT_h}{\pi}} = \frac{1}{2} mn_h l_c v_g(t), \quad (3.16)$$

$$\kappa = \frac{2}{\sigma} \sqrt{\frac{T_h}{m\pi}} = 2n_h l_c v_g(t), \quad (3.17)$$

$$\mu = \tilde{\mu}_1 \delta \frac{\kappa T_h}{n_h} = \tilde{\mu}_1 \delta 2T_h l_c v_g(t), \quad (3.18)$$

$$\zeta = 8 \sqrt{\frac{2T_h}{m}} (\sqrt{2\pi} n \sigma g_2(\sigma)) q_0 \delta = 8q_0 \delta \frac{v_g(t)}{l_c}. \quad (3.19)$$

Em termos dessas novas variáveis as equações (3.10), (3.11) e (3.12) tomam a forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t^*} = -\nabla^* \cdot \mathbf{w}, \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t^*} = 2q_0 \delta'(t^*) \mathbf{w} + \nabla^{*2} \mathbf{w} + \nabla^* (\nabla^* \cdot \mathbf{w}) - \frac{1}{2} \nabla^* \theta - \nabla^* \rho, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t^*} = - \left(\frac{12}{5} q_0 \delta'(t^*) + 4 \nabla^{*2} \right) \theta - (q_0 + (2)^{1/10} \tilde{\mu}_1 \nabla^{*2}) 4 \delta'(t^*) \rho - \nabla^* \cdot \mathbf{w}, \quad (3.22)$$

onde

$$\delta'(t^*) = \delta \left(1 + \frac{2}{5} q_0 \delta t^* \right)^{-1}. \quad (3.23)$$

Aqui vemos uma crucial diferença entre um modelo que considera o coeficiente de restituição constante²⁰ e o modelo para o qual ele depende da velocidade. Para o primeiro caso o lado direito das equações acima não depende do tempo, e portanto, para alguns valores dos parâmetros, as flutuações podem persistir indefinidamente.

Escrevamos as equações linearizadas no espaço de Fourier. Para tanto definamos a transformada de Fourier e sua inversa para uma função genérica como segue:

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int g(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (3.24)$$

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int \tilde{g}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}. \quad (3.25)$$

E as derivadas tornam-se:

$$\begin{aligned} \nabla &\rightarrow i\mathbf{k}, \\ \nabla^2 &\rightarrow -k^2. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Assim no espaço de Fourier temos:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t^*} = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_k, \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}_k}{\partial t^*} = 2q_0 \delta'(t^*) \mathbf{w}_k - (k^2 \mathbf{w}_k + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_k) \mathbf{k}) - \frac{1}{2} i\mathbf{k} (\theta_k + \rho_k), \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial t^*} = - \left(\frac{12}{5} q_0 \beta \delta'(t^*) + 4k^2 \right) \theta_k - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_k - (q_0 + 2^{1/10} \tilde{\mu}_1 k^2) 4 \delta'(t^*) \rho_k. \quad (3.29)$$

Podemos decompor \mathbf{w} em duas componentes de forma que uma delas se desacople das demais variáveis. Isso pode ser feito escrevendo-se

$$\mathbf{w}_k = \mathbf{w}_{k\perp} + \mathbf{w}_{k\parallel}, \quad (3.30)$$

onde $\mathbf{w}_{k\parallel}$ e $\mathbf{w}_{k\perp}$ são as componentes paralela e perpendicular ao vetor de onda \mathbf{k} , respectivamente. Esta decomposição permite-nos escrever finalmente:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t^*} = -ikw_{k\parallel}, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial t^*} = -\left(\frac{12}{5}q_0\delta'(t^*) + 4k^2\right)\theta_k - (q_0 + 2^{1/10}\tilde{\mu}_1k^2)4\delta'(t^*)\rho_k - ikw_{k\parallel}, \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial w_{k\parallel}}{\partial t^*} = -\frac{1}{2}ik(\theta_k + \rho_k + (2q_0\delta'(t^*) - 2k^2)w_{k\parallel}), \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial w_{k\perp}}{\partial t^*} = (2q_0\delta'(t^*) - k^2)w_{k\perp}. \quad (3.34)$$

Observemos que o modo $w_{k\perp}$ está agora completamente desacoplado das outras variáveis e pode ser integrado separadamente, dando:

$$w_{k\perp}(t^*) = w_{k\perp}(0) \left(1 + \frac{2}{5}q_0\delta t^*\right)^5 e^{-k^2 t^*}, \quad (3.35)$$

onde $w_{k\perp}(0)$ é amplitude inicial.

Analizando a função acima vemos que há um valor crítico de $k^* = \sqrt{2q_0}\delta$ o qual separa o seu comportamento em dois regimes distintos: se $k \geq k^*$ a função sempre decai, enquanto que para $k < k^*$ ela inicialmente cresce até um valor máximo

$$w_{k\perp}^{max} = w_{k\perp}(0) \left[\frac{2q_0\delta}{ek^2}\right]^5 \exp\left(\frac{5k^2}{2q_0\delta}\right), \quad (3.36)$$

no tempo crítico,

$$\tau^* = \frac{5}{k^2} - \frac{5}{2q_0\delta}, \quad (3.37)$$

e então decai completamente.

Este modo está ligado a formação de vórtices no sistema, e como temos que $\tau^* \propto (1/k^2)$, significa que vórtices com grandes comprimentos de onda desaparecem mais rapidamente.

Para fazer uma análise do comportamento dos outros modos, escrevemo-los da seguinte forma:

$$\dot{\Psi}_k = \hat{\mathbf{M}}_k(t^*)\Psi_k, \quad \text{com} \quad \Psi_k \equiv (\rho_k, \theta_k, w_{k\parallel})^T. \quad (3.38)$$

A matriz $\hat{\mathbf{M}}_k(t^*)$ possui autovalores dependentes do tempo, diferentemente do caso de coeficiente de restituição constante. Porém, se o parâmetro de

dissipação é pequeno, elas são análogas. O valor crítico do número de onda pode ser obtido da condição $\dot{\Psi}_k = 0$ ou $\det[\hat{\mathbf{M}}_k(t^*)] = 0$, de onde temos:

$$k_c(t^*) \simeq \frac{1}{4} \left(\frac{2}{5} q_0 \delta t^* \right)^{1/2} \left(1 + \frac{2}{5} q_0 \delta t^* \right)^{-1/2}. \quad (3.39)$$

Modos com $k > k_c(0)$ sempre decaem, enquanto aqueles com $k \leq k_c(0)$ podem inicialmente crescer. Como $k_c(t^*)$ decresce com o tempo, os modos que inicialmente começam a decair após um tempo transiente, quando a condição $k > k_c(0)$ é então satisfeita.

Para uma melhor visualização do comportamento das flutuações efetuamos uma integração das equações (3.31),(3.32),(3.33) e (3.34) pelo método de Euler, na qual usamos $k = 0.2$ e $\delta = 0.03$.

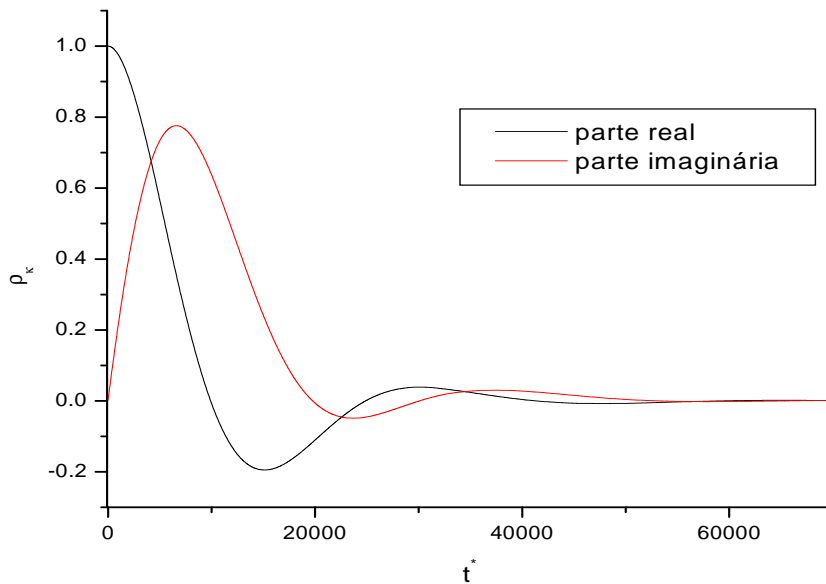


Figura 3.3: Evolução temporal típica das flutuações da densidade, obtida por integração numérica.

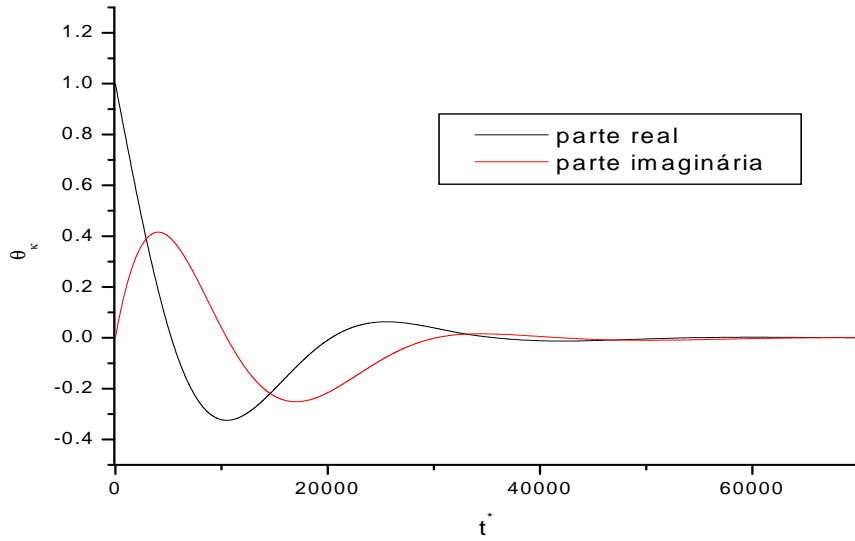


Figura 3.4: Evolução temporal de θ_k , relativo a flutuações na temperatura granular.

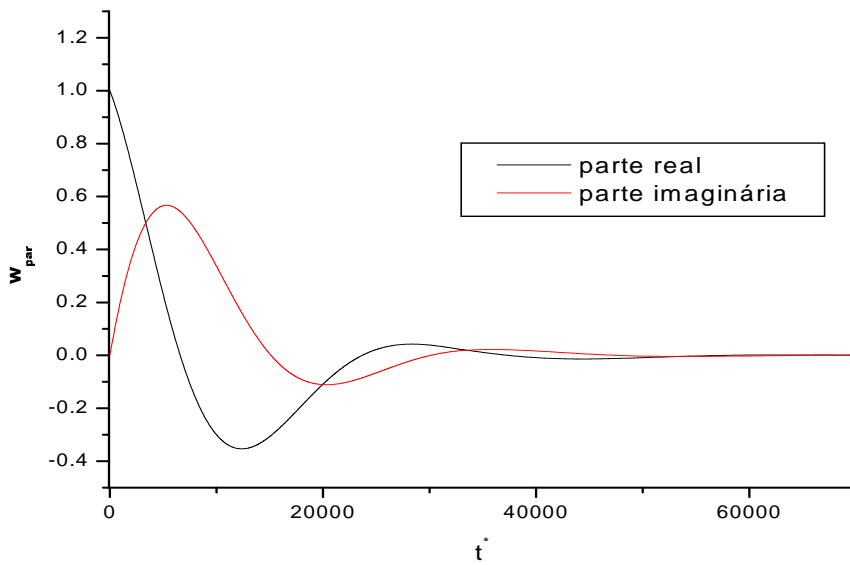


Figura 3.5: Evolução temporal das flutuações na componente paralela ao vetor de onda w_{par} .

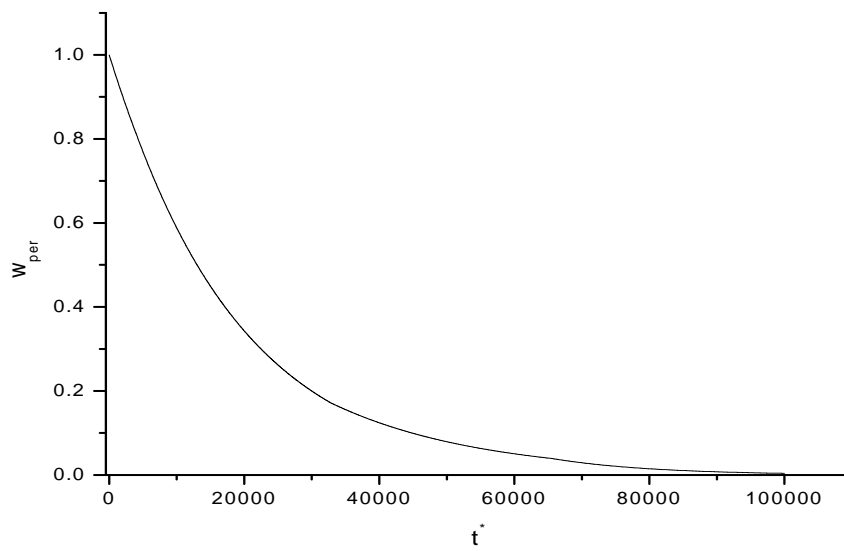


Figura 3.6: Evolução temporal das flutuações obtidas por integração numérica, da componente perpendicular ao vetor de onda k .