

## 2

# Da Descrição Microscópica de SG à Hidrodinâmica

Neste capítulo pretendemos expor de maneira sucinta uma rota para chegarmos às equações hidrodinâmicas, partindo de um ponto de vista quase microscópico. Não estamos, no entanto, nos propondo a mostrar rigorosamente todos os detalhes algébricos com todas as suas complicações, mas mostrar os principais passos e equações com suas respectivas interpretações físicas. Descrições mais detalhadas são encontradas nas referências citadas na seqüência.

### 2.1 O Problema Mecânico Estatístico

Explicar o comportamento macroscópico de um sistema em termos da dinâmica microscópica das partículas que o compõem constitui o principal objetivo da mecânica estatística. Os sistemas constituídos de muitas partículas podem ser estudados em vários níveis de detalhamento, dependendo de quais informações estamos interessados em obter. Por exemplo, ao estudarmos um gás podemos descrevê-lo ao nível hidrodinâmico, se estamos interessados em descrever os processos de fluxo das quantidades conservadas. Se estamos interessados em informações mais detalhadas, tais como de funções distribuição, coeficientes de transportes, etc, devemos estudá-lo ao nível de teorias cinéticas, as quais têm por base a equação de Boltzmann (que tem sua versão adaptada ao estudo de sistemas granulares<sup>11</sup>). Além disso, se estamos interessados em processos em uma escala ainda menor, tais como os processos que ocorrem durante os encontros entre duas moléculas, então teremos que estudar as equações de movimento ao nível microscópico, neste caso as equações básicas devem ser as equações de Hamilton ou a equação de Liouville (que lhe é equivalente) para sistemas clássicos, ou a equação de Schrödinger, no caso quântico.

O mecanismo pelo qual passamos das equações microscópicas para as equações cinéticas e por sua vez às equações hidrodinâmicas constitui uma tarefa da mecânica estatística de não equilíbrio.

A seguir faremos uma breve descrição da dinâmica das colisões entre os grãos. Embora não seja propriamente este o caminho por nós seguido, acreditamos que isto será útil para esclarecer melhor a questão da inelasticidade do sistema, como ela influencia na dinâmica do mesmo e a

dificuldade de tratarmos o problema desse ponto de vista.

## 2.2 A dinâmica das Colisões

Devido à grande irregularidade, quanto à forma e tamanho dos grãos que compõem um SG, que trazem consigo grandes complicações para estudos teóricos, é comum fazermos simplificações a fim de facilitar uma formulação microscópica. No modelo que utilizaremos considera-se um sistema constituído de grãos perfeitamente polidos e idênticos. Embora essas simplificações pareçam exageradas, ainda assim conseguiremos extrair muitas informações físicas importantes.

Do ponto de vista microscópico, ao nível da dinâmica das colisões entre os grãos, o que temos são colisões inelásticas. Consideremos dois grãos  $i$  e  $j$ , de massa  $m_i = m_j = m$ , idênticos, com velocidades iniciais (antes da colisão)  $\mathbf{v}_i$  e  $\mathbf{v}_j$  e velocidades finais (depois da colisão)  $\mathbf{v}'_i$  e  $\mathbf{v}'_j$  respectivamente<sup>a</sup>, como mostra a figura (2.1).

Como  $\Delta t_{col} \ll 1$ , o momento linear se conserva. Portanto,

$$\mathbf{v}'_i + \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_i + \mathbf{v}_j. \quad (2.1)$$

Escrevamos a velocidade relativa entre os dois grãos em componentes perpendicular e paralela, relativamente ao vetor unitário  $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ , definido por:

$$\hat{\mathbf{n}}_{ij} \equiv \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}, \quad (2.2)$$

que está na direção da reta que une os centros de massa dos grãos em consideração, no instante da colisão veja fig. (2.2):

$$\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)_{\parallel} + (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)_{\perp}, \quad (2.3)$$

onde as componentes são dadas por:

$$(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)_{\parallel} = [\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)] \hat{\mathbf{n}}_{ij} \quad (2.4)$$

e

$$(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)_{\perp} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j - [\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)] \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (2.5)$$

---

<sup>a</sup>É importante destacar que mesmo se não tivéssemos dito quais foram as velocidades iniciais e finais dos grãos, poderíamos inferi-las da figura (2.1) ao fazermos a inversão temporal, lembrando que numa colisão inelástica as velocidades pós colisionais tendem a ficar paralelas, e o inverso jamais será visto. Isto nos remete a um fato muito peculiar para os sistemas dissipativos que os faz, mais uma vez, diferir dos sistemas usuais. Enquanto que nos sistemas elásticos, no nível da dinâmica das colisões os processos são reversíveis e a irreversibilidade só aparece como um efeito coletivo, no nível macrosópico, aqui o sistema já apresenta irreversibilidade no nível da dinâmica das colisões.

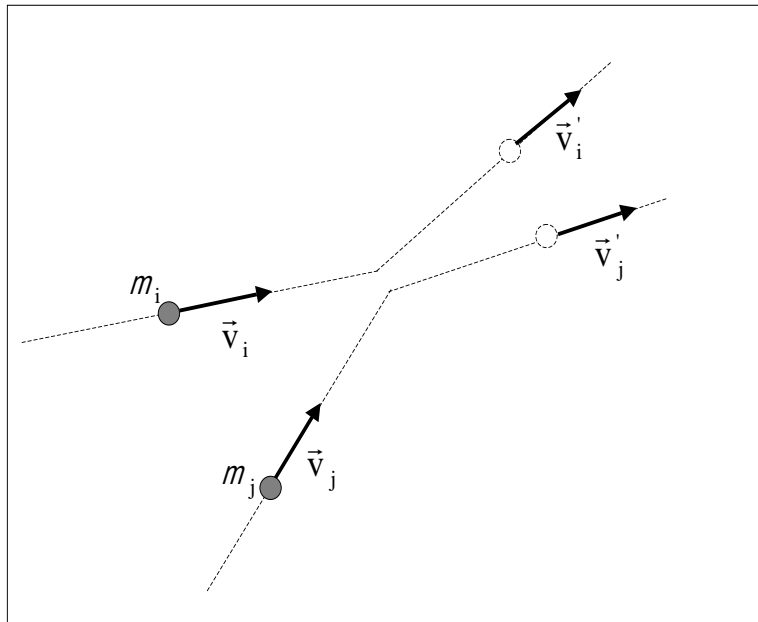


Figura 2.1: Representação esquemática de uma colisão entre dois grãos.

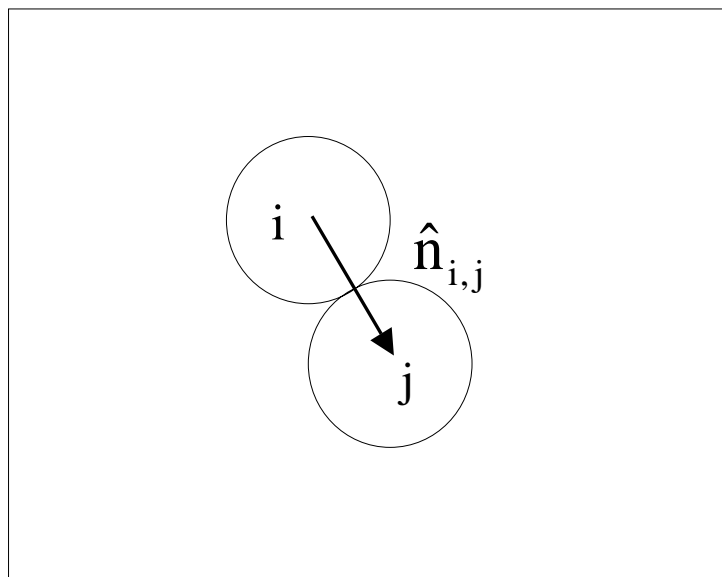


Figura 2.2: Representação esquemática de dois grãos no instante da colisão.

Define-se o coeficiente de restituição radial  $r$  como:

$$(\mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j)_{\parallel} = -r(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)_{\parallel}, \quad (2.6)$$

desse modo podemos escrever:

$$(\mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j) = -(1+r)[\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)]\hat{\mathbf{n}}_{ij} + (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j). \quad (2.7)$$

A componente perpendicular permanece inalterada:

$$(\mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j)_{\perp} = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)_{\perp}. \quad (2.8)$$

Utilizando a equação (2.1, 2.41 e 2.42) podemos escrever as velocidades finais das partículas em termos das iniciais e do coeficiente de restituição:

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - \frac{(1+r)}{2}[\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)]\hat{\mathbf{n}}_{ij} \quad (2.9)$$

e

$$\mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + \frac{(1+r)}{2}[\hat{\mathbf{n}}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)]\hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (2.10)$$

A perda de energia por colisão é, portanto, a variação da energia cinética devida à colisão, dada por:

$$\Delta E = -\frac{1}{4}m[(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}]^2(1-r^2). \quad (2.11)$$

É importante destacar que o coeficiente de restituição, em geral, depende da velocidade relativa pré-colisional<sup>12-15</sup>.

A dependência do coeficiente de restituição com a velocidade relativa dos grãos, numa primeira aproximação é da forma  $r = 1 - \alpha v_{rel}^{1/5}$  (ver ref. 13), correspondendo a fricção do tipo viscoelástica para colisões quase estáticas. Neste modelo a relaxação de energia via fônons acontece em uma escala de tempo rápida em comparação com o tempo de colisão<sup>16,17</sup>. Nos modelos usuais de sistemas granulares o coeficiente de restituição é considerado como uma constante.

A descrição de um sistema com um grande número de partículas, diretamente em termos de quantidades vetoriais, como as velocidades das partículas, é muito complicada. Além disso, a dependência das velocidades pré-colisionais nos coeficientes de restituição é bastante complexa, e, portanto, introduz ainda mais dificuldades. É, portanto, necessário desenvolver modelos de potenciais que contenham as informações sobre as interações entre as partículas. Assim devemos lançar mão do formalismo canônico para descrever o sistema.

### 2.3 Formulação Canônica

Uma formulação microscópica, no formalismo canônico, deve constituir de um Hamiltoniano que leva em conta todos os graus de liberdade do sistema. Definamos as notações  $\mathbf{r}^N \equiv \{\mathbf{r}_i\}$  e  $\mathbf{p}^N \equiv \{\mathbf{p}_i\}$  ( $i = 1, \dots, N$ ), para as coordenadas de posição e momentos lineares dos grãos respectivamente e  $\xi^N \equiv \{\xi_i\}$  e  $\pi^N \equiv \{\pi_i\}$  são as coordenadas de posição e momentos lineares (atômicos) internos aos grãos.

Um tal Hamiltoniano é composto de um termo  $\mathcal{H}_T$ , que depende apenas das coordenadas granulares,  $\mathbf{r}^N$  e  $\mathbf{p}^N$ , um termo  $\mathcal{H}_I$ , que depende apenas das coordenadas internas  $\xi^N$  e  $\pi^N$  e um termo de acoplamento entre esses graus de liberdade  $\phi(\mathbf{r}^N, \xi^N)$ .

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_T(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) + \mathcal{H}_I(\xi^N, \pi^N) + \phi(\mathbf{r}^N, \xi^N), \quad (2.12)$$

onde:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_T(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) &= \frac{\mathbf{p}^N \cdot \mathbf{p}^N}{2m} + U(\mathbf{r}^N), \\ \mathcal{H}_I(\xi^N, \pi^N) &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\pi_i \pi_i}{2\mu} + V(\xi_i) \right), \\ \phi(\mathbf{r}^N, \xi^N) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \phi(r_{i,j}, \xi_i, \xi_j). \end{aligned}$$

Onde  $\mathbf{p}^N \cdot \mathbf{p}^N \equiv \sum_{i=1}^N p_i^2$  denota o produto escalar.

No nível de teorias cinéticas, estamos geralmente interessados na evolução da função distribuição total  $\rho(X_T, X_I, t)$  do sistema, onde  $\rho(X_T, X_I, t)dX_T dX_I$  é a probabilidade de encontrar o sistema num estado em que suas coordenadas estejam dentro do hipervolume ( $dX_T dX_I$ ), centrado no ponto  $(X_T, X_I)$ , no instante  $t$ , onde  $X_T \equiv (\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$  e  $X_I \equiv (\pi^N, \xi^N)$ . A evolução temporal de  $\rho$  é dada pelo parêntese de Poisson

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} \quad (2.13)$$

que na forma de operador se escreve

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \hat{L}\rho, \quad (2.14)$$

onde  $\hat{L}$  é o operador de Liouville. Este operador é dado por:

$$\hat{L} = \hat{L}_T + \hat{L}_I + \hat{L}_\phi, \quad (2.15)$$

onde  $\hat{L}_T$ ,  $\hat{L}_I$  e  $\hat{L}_\phi$  são os operadores de Liouville associados aos graus de liberdade translacionais, internos, e ao termo de acoplamento, respectivamente. Estes são dados por:

$$\hat{L}_T = -\frac{\mathbf{p}^N}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}^N} + \nabla_{\mathbf{r}^N} U(\mathbf{r}^N) \cdot \nabla_{\mathbf{p}^N}, \quad (2.16)$$

$$\hat{L}_I = -\frac{\pi^N}{\mu} \cdot \nabla_{\xi^N} + \nabla_{\xi^N} V(\xi^N) \cdot \nabla_{\pi^N}, \quad (2.17)$$

$$\hat{L}_\phi = \nabla_{\mathbf{r}^N} \phi \cdot \nabla_{\mathbf{p}^N} + \nabla_{\xi^N} \phi \cdot \nabla_{\pi^N}. \quad (2.18)$$

Resolver a equação de Liouville (2.14) levando em conta todos esses graus de liberdade torna-se é impossível, devido ao grande número de partículas envolvidas. No entanto, estamos interessados apenas na dinâmica dos graus de liberdade translacionais, ou seja, queremos encontrar uma função de distribuição de probabilidades reduzida  $W(X_T, t)$ , apenas para os graus de liberdade externos, dada por:

$$W(X_T, t) = \int dX_I \rho(X_T, X_I, t). \quad (2.19)$$

O fato de que os graus de liberdade internos serem muito mais rápidos do que os externos, e portanto terem um tempo de relaxação muito menor que estes últimos, permite-nos considerá-los como estando sempre no equilíbrio, a uma temperatura  $T$ . É como se o sistema fosse constituídos apenas pelos graus granulares de liberdade e estivesse em contato com um banho térmico, sendo os graus de liberdade do banho térmico os próprios graus internos. Analogamente ao que é feito na eliminação dos graus de liberdade do banho térmico para o caso de uma partícula browniana<sup>18</sup>, utilizando as técnicas de operadores de projeção, Schofield e Oppenheim<sup>2</sup> eliminaram os graus de liberdade internos, para um sistema granular diluído, obtendo uma equação de Fokker-Planck para a evolução temporal<sup>b</sup> de  $W$ :

$$\begin{aligned} \dot{W}(X_T, t) = & \left[ \left( -\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} (U + \omega(\mathbf{r})) \cdot \nabla_{\mathbf{p}_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_j \sum_{j \neq k} \gamma_{jk} \hat{\mathbf{r}}_{jk} \hat{\mathbf{r}}_{jk} \right. \\ & \left. : (\nabla_{\mathbf{p}_j} - \nabla_{\mathbf{p}_k}) \left( (\nabla_{\mathbf{p}_j} - \nabla_{\mathbf{p}_k}) + \beta \frac{\mathbf{p}_j - \mathbf{p}_k}{m} \right) \right] W. \end{aligned} \quad (2.20)$$

acima,  $\beta = 1/k_B T$ , sendo  $T$  a temperatura dos graus internos de liberdade, que é considerada aproximadamente constante,  $\omega(\mathbf{r})$  é um potencial médio que traz consigo as informações das interações durante as colisões, e

$$\gamma_{jk} = \int_0^\infty d\tau \int dX_I \tilde{\rho}(\widehat{\nabla_{\mathbf{r}_{jk}} \phi_{jk}}) e^{(L_I + \nabla_{\xi^N} \phi \cdot \nabla_{\pi^N})\tau} (\widehat{\nabla_{\mathbf{r}_{jk}} \phi_{jk}}), \quad (2.21)$$

sendo  $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}(X_I, t)$  a função distribuição condicional para os graus internos<sup>2</sup>. Os termos no integrando acima acentuado com  $(\widehat{\quad})$  são definidos como:

$$\widehat{A} = A - \langle A \rangle$$

<sup>b</sup>Mais recentemente, Proleon e Morgado<sup>19</sup> generalizaram esta forma para o caso de um estado estacionário em presença de um mecanismo de injeção de energia.

com

$$\langle A \rangle \equiv \int dX_I \tilde{\rho} A.$$

Embora a equação (2.20) seja razoavelmente complicada, podemos facilmente identificar seus termos: o primeiro termo é um termo de fluxo no espaço das coordenadas, o segundo é um termo de fluxo no espaço de momento e o último termo é um termo dissipativo devido à transferência de energia para os graus de liberdade internos. É claro que  $\gamma_{jk}$  é um coeficiente de transporte dissipativo, que gerará o coeficiente de restituição dependente da velocidade relativa.

A equação de Fokker-Planck (eq. 2.20) nos dá a evolução temporal para a distribuição de probabilidade granular. Precisamos integrá-la nas variáveis  $X_{n+1} \dots X_N$ , a fim de obter a evolução temporal para as distribuições  $f^{(n)}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, t)$ . Isto é feito via hierarquia<sup>20</sup> BBGKY.

Definamos a distribuição reduzida por:

$$f^{(n)}(t) = \frac{N!}{(N-n)!} \int dX_{n+1} \dots dX_N W(X_T, t) \quad (2.22)$$

A forma explícita das primeiras duas equações para os  $f^{(n)}$  na hierarquia são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f^{(1)} + \frac{1}{m} \mathbf{p}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f^{(1)} + \mathbf{X}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{p}_1} f^{(1)} = & - \int dX_2 \mathbf{F}_{12} \cdot \nabla_{\mathbf{p}_1} f^{(2)} \\ & + \int dX_2 \gamma_{12} \hat{\mathbf{r}}_{12} \hat{\mathbf{r}}_{12} : \left[ \nabla_{\mathbf{p}_1} \left( \nabla_{\mathbf{p}_1} + \frac{\beta}{m} (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \right) f^{(2)} \right] \end{aligned} \quad (2.23)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f^{(2)} + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^2 \mathbf{p}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} f^{(2)} + \sum_{i=1}^2 \mathbf{X}_i \cdot \nabla_{\mathbf{p}_i} f^{(2)} + \mathbf{F}_{12} \cdot (\nabla_{\mathbf{p}_1} - \nabla_{\mathbf{p}_2}) f^{(2)} \\ - \gamma_{12} \hat{\mathbf{r}}_{12} \hat{\mathbf{r}}_{12} : \left[ (\nabla_{\mathbf{p}_1} - \nabla_{\mathbf{p}_2}) \left( \nabla_{\mathbf{p}_1} - \nabla_{\mathbf{p}_2} + \frac{\beta}{m} (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \right) f^{(2)} \right] \\ = - \sum_{j=1}^2 \int dX_3 \mathbf{F}_{j3} \nabla_{\mathbf{p}_j} f^{(3)} + \sum_{j=1}^2 \int dX_3 \gamma_{j3} \hat{\mathbf{r}}_{j3} \hat{\mathbf{r}}_{j3} \\ : \left[ \nabla_{\mathbf{p}_j} \left( \nabla_{\mathbf{p}_j} + \frac{\beta}{m} (\mathbf{p}_j - \mathbf{p}_3) \right) f^{(3)} \right], \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde  $\mathbf{X}_i \equiv -\nabla_{\mathbf{r}_i} U_{ext}$  e  $\mathbf{F}_{im} = -\nabla_{\mathbf{r}_i} \sum_{m \neq i} (\omega_{im} + \tilde{u}_{im})$ . As equações da hierarquia são um conjunto de equações acopladas, que, em princípio, precisamos saber toda a hierarquia, no entanto, métodos de expansão em escalas de tempo permite desacoplá-las<sup>21,22</sup>, obtendo as escalas de tempo em que os fenômenos ocorrem (veja nas referências citadas anteriormente). O objetivo é derivar a partir das equações da hierarquia as equações hidrodinâmicas do sistema.

## 2.4 Hidrodinâmica

Uma vez encontrada a hierarquia para as as funções de distribuição, definem-se as variáveis hidrodinâmicas macroscópicas que descreverão o sistema:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (2.25)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{mn} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (2.26)$$

$$T_g(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{3nm} \int d\mathbf{p} (\mathbf{p} - m\mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (2.27)$$

onde  $f \equiv f^{(1)}$  é a distribuição à uma partícula,  $n \equiv n(\mathbf{r}, t)$  é a densidade em número de partículas,  $T_g$  a temperatura granular e  $\mathbf{u}$  é o fluxo<sup>c</sup>.

As equações às quais essas variáveis obedecem são as equações de Navier-Stokes modificadas<sup>22,23</sup>:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (n\mathbf{u}) \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{mn} \nabla (nT_g) + \frac{1}{nm} \nabla \cdot \left[ \eta \left( \nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right] - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} n \frac{\partial T_g}{\partial t} = & -n\mathbf{u} \cdot \nabla T_g + \frac{2}{3} \nabla \cdot (\lambda_T \nabla T_g) - \frac{2}{3} n T_g \nabla \cdot \mathbf{u} + \eta \left( \nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^\dagger \right) : \nabla \mathbf{u} \\ & - \frac{2}{3} \eta (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - D(T_g), \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde  $\eta$  e  $\lambda_T$  são os coeficientes de fricção (viscosidade) e de transporte de energia (condutividade térmica) respectivamente, que são funções da posição e da temperatura<sup>23</sup>. O termo  $D(T_g)$  dado por:

$$D(T_g) = -Dk' n^2 T_g^{8/5}, \quad (2.31)$$

onde  $k'$  é uma constante que depende das propriedades materiais dos grãos, é devido à inelasticidade das colisões granulares. O expoente  $8/5$  da equação acima leva em conta a dependência do coeficiente de restituição na velocidade relativa entre dois grãos. Esse expoente tem valor  $3/2$  para o caso do coeficiente de restituição ser constante, que caracteriza a lei de Haff (eq. 1.1), (veja ref. 21,22).

As equações (2.28) e (2.29) expressam a conservação da massa e do momento e a equação (2.30) é uma equação de continuidade para a energia com um termo dissipativo (último) que funciona como um sorvedouro de energia, devido à inelasticidade do sistema. Como já temos mencionado faremos doravante a aproximação  $T_g \gg k_B T$ .

A fim de estudar o comportamento temporal da temperatura granular, consideremos um sistema homogêneo. Neste caso a equação (2.30) torna-se:

---

<sup>c</sup> $n$  e  $\mathbf{u}$  são conservados mas  $T_g$  não é, devido à inelasticidade do sistema.



$$\frac{dT_{g0}}{dt} = -Dk'n_0T_{g0}^{8/5}, \quad (2.32)$$

e por uma simples integração obteremos:

$$T_{g0}(t) = T_{g0}(0) \left(1 + \frac{t}{\tau}\right)^{-5/3}. \quad (2.33)$$

Esta é a lei de Haff, mencionada anteriormente, onde

$$\tau = \left(\frac{3}{5}Dk'n_0T_{g0}(0)^{3/5}\right)^{-1} \quad (2.34)$$

é um tempo característico do sistema. Expandindo a eq. (2.33) para  $t \gg \tau$  até a primeira ordem temos:

$$T_{g0}(t) = \frac{t^{-5/3}}{\left(\frac{3}{5}Dk'n_0\right)^{5/3}} - \frac{3}{5} \frac{T_{g0}(0)^{-5/3}t^{-8/3}}{\left(\frac{3}{5}Dk'n_0\right)^{5/3}}. \quad (2.35)$$

O primeiro termo,  $\sim t^{-5/3}$ , é um termo irreversível, enquanto que o segundo é um termo de memória que depende da temperatura inicial mas que decresce rapidamente. Para o caso do coeficiente de restituição constante a lei de Haff é dada por  $T_g \sim t^{-2}$ . É esse decaimento na energia do sistema que causa o chamado colapso inelástico. A seguir mostraremos um simples modelo que descreve o comportamento temporal de um gás granular rumo ao colapso inelástico.

## 2.5 Modelo Simples de Gás Granular

Um resultado<sup>24</sup> surpreendente pode ser obtido por um simples modelo de gás granular submetido à condição de contorno móvel tipo pistão. Consideremos dois sistemas granulares idênticos, confinados um em cada lado de um cilindro retangular de comprimento  $2L$  e área  $A$ . Os dois sistemas são separados por um pistão massivo e móvel. Cada sistema contém  $N_0$  grãos (veja fig. 2.3). Suponhamos que o sistema seja sempre uniforme. Os grãos colidem inelasticamente com o pistão e com as paredes do cilindro. Supondo, ainda, que o atrito do pistão com as paredes do cilindro faça com que a velocidade do cilindro seja proporcional à diferença de pressão entre os dois lados da caixa temos:

$$\frac{dx}{dt} = -\zeta(p_1 - p_2) = -\eta(n_1T_1 - n_2T_2), \quad (2.36)$$

onde  $x$  é a posição do pistão,  $n_1$  e  $n_2$  são as densidades granulares e  $T_1$  e  $T_2$  são as temperaturas granulares. As pressões  $p_{1,2}$  são proporcionais<sup>23</sup> a  $n_{1,2}T_{1,2}$ . As densidades são:

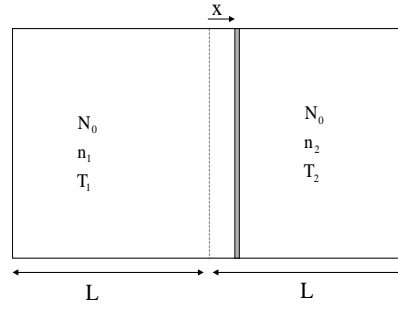


Figura 2.3: Gás granular separado em duas partes por um pistão massivo móvel.

$$n_1 \propto \frac{1}{L+x}, \quad (2.37)$$

$$n_2 \propto \frac{1}{L-x}. \quad (2.38)$$

O trabalho realizado pelo pistão em cada lado da caixa é:

$$dW_1 = -p_1 A dx, \quad (2.39)$$

$$dW_2 = p_2 A dx. \quad (2.40)$$

A redução na energia total do sistema devida à inelasticidade das colisões é proporcional a  $nT^{\frac{8}{5}}$ . Podemos então escrever as expressões para as variações da energia total ( $E_{1,2} = N_0 T_{1,2}$ ) de cada lado da caixa:

$$\frac{dT_1}{dt} = -\frac{3}{2} \frac{T_1}{L+x} \frac{dx}{dt} - \gamma \frac{T_1^{\frac{8}{5}}}{L+x}, \quad (2.41)$$

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{3}{2} \frac{T_2}{L-x} \frac{dx}{dt} - \gamma \frac{T_2^{\frac{8}{5}}}{L-x}. \quad (2.42)$$

A expressão para a velocidade do pistão será dada por:

$$\frac{dx}{dt} = -\beta \left[ \frac{T_2}{L-x} - \frac{T_1}{L+x} \right]. \quad (2.43)$$

As eqs (2.41-2.43) são as equações fundamentais para este modelo. Os parâmetros  $\gamma$  e  $\beta$  são as taxas de dissipação e mobilidade respectivamente.

### 2.5.1 Solução Analítica

Utilizaremos o método de escala para estudar as eqs (2.41-2.43) para  $t$  grande ou próximo ao colapso. As condições iniciais são  $T_1(t=0) > T_2(t=0)$ . Isto fará com que o sistema 2 seja comprimido. As duas possibilidades são: o pistão se desloca até uma distância finita da parede à direita e pára em algum lugar na região  $0 \leq x \leq L$  devido ao atrito, a outra é o pistão

comprimir todo o gás à direita (aglomeração). Esses comportamentos serão definidos pelo valor de  $\beta$ . No primeiro caso  $\beta$  pequeno e no segundo caso  $\beta$  grande.

*Solução sem aglomeração:  $x_{final} < L$*

Neste caso  $x_{final} < L$ . Suponhamos que para ( $t \rightarrow \infty$ ) as variáveis tenham os seguintes comportamentos:

$$x = x_{final} - At^{-q_1}, \quad (2.44)$$

$$T_1 = Bt^{-q_2}, \quad (2.45)$$

$$T_2 = Ct^{-q_3}, \quad (2.46)$$

onde os expoentes  $q_1, q_2, q_3 > 0$  e as amplitudes  $B, C > 0$ . Substituindo estas últimas na eqs.(2.41-2.43) temos:

$$Aq_1 t^{-q_1-1} = -\beta \left[ \frac{Ct^{-q_3}}{L - x_{final}} - \frac{Bt^{-q_2}}{L + x_{final}} \right], \quad (2.47)$$

$$-Bq_2 t^{-q_2-1} = -\frac{3}{2} \frac{ABq_1}{L + x_{final}} t^{-q_2-q_1-1} - \frac{\gamma B^{\frac{8}{5}}}{L + x_{final}} t^{-\frac{8}{5}q_2}, \quad (2.48)$$

$$-Cq_3 t^{-q_3-1} = +\frac{3}{2} \frac{ACq_1}{L - x_{final}} t^{-q_3-q_1-1} - \frac{\gamma C^{\frac{8}{5}}}{L - x_{final}} t^{-\frac{8}{5}q_3}. \quad (2.49)$$

Obtemos facilmente que  $q_2 = q_3 = 5/3$  e  $q_1 = 2/3$ . As amplitudes são dadas por:

$$A = \frac{3}{2}\beta \left( \frac{5}{3\gamma} \right)^{\frac{5}{3}} \left[ (L + x_{final})^{\frac{2}{3}} - (L - x_{final})^{\frac{2}{3}} \right], \quad (2.50)$$

$$B = \left( \frac{5(L + x_{final})}{3\gamma} \right)^{\frac{5}{3}}, \quad (2.51)$$

e

$$C = \left( \frac{5(L - x_{final})}{3\gamma} \right)^{\frac{5}{3}}. \quad (2.52)$$

Neste caso não há aglomeração e o sistema evolui no estado de resfriamento homogêneo. Podemos reescrever a eq. (2.47) como

$$\frac{dx}{dt} \approx \beta \left( \frac{5}{3\gamma} \right)^{\frac{5}{3}} \left[ (L + x_{final})^{\frac{2}{3}} - (L - x_{final})^{\frac{2}{3}} \right] t^{-\frac{5}{3}}, \quad (2.53)$$

Integrando a eq. (2.53) de  $t_0 \rightarrow \infty$  obtemos:

$$\Delta x = \frac{3}{2}\beta \left( \frac{5}{3\gamma} \right)^{\frac{5}{3}} \left[ (L + x_{final})^{\frac{2}{3}} - (L - x_{final})^{\frac{2}{3}} \right] t_0^{-\frac{2}{3}} = At_0^{-\frac{2}{3}},$$

*Solução com formação de aglomerado  $x_{final} \rightarrow L$*

Para este caso, com  $\beta$  grande temos as soluções do tipo:

$$x = L - A(t_f - t)^{q_1}, \quad (2.54)$$

$$T_1 = T_{1f} + B(t_f - t)^{q_2}, \quad (2.55)$$

$$T_2 = T_{2f} + C(t_f - t)^{q_3}, \quad (2.56)$$

onde novamente  $q_1, q_2, q_3 > 0$  e  $t_f$  é o instante do colapso.

Neste caso obtemos:

$$q_1 = q_3 = \frac{5}{2}, \quad (2.57)$$

$$q_2 = 1, \quad (2.58)$$

daí segue que

$$A = \left(\frac{4\gamma}{25}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{T_{1f}}{2L}\right)^{\frac{3}{2}}, \quad (2.59)$$

$$B = \frac{\gamma T_{1f}^{\frac{8}{5}}}{2L}, \quad (2.60)$$

$$C = \left(\frac{2\gamma T_{1f}}{25L}\right)^{\frac{5}{2}}, \quad (2.61)$$

onde  $T_{f1}$  é o único parâmetro livre e  $T_{f2} = 0$ .

Neste modelo não temos o efeito de volume excluído dos grãos, por isso o gás é completamente comprimido.

## 2.5.2 Resultados Numéricos

Para confirmar nossos resultados analíticos, integramos numericamente as eqs. (2.41-2.43), utilizando um simples método de Euler, e verificamos que os resultados concordam bem nos limites propostos.

### *$\beta$ Pequeno*

Neste caso utilizamos como valores iniciais:  $T_1(t = 0) = 14,0$ ,  $T_2(t = 0) = 1,0$ ,  $x(t = 0) = 0$ ,  $\gamma = 1,0$  and  $\beta = 0,5$ . A fig. (2.4) mostra os resultados em excelente acordo com os resultados analíticos.

### *$\beta$ grande*

Neste caso mantemos os valores iniciais anteriores com exceção de  $\beta$ , que agora assume um valor seis vezes maior,  $\beta = 3,0$ . A fig. (2.5) mostra os resultados para este caso que também estão em excelente acordo com os resultados analíticos.

Este modelo, embora simples, é capaz de mostrar um completo colapso inelástico devido a dissipação interna.

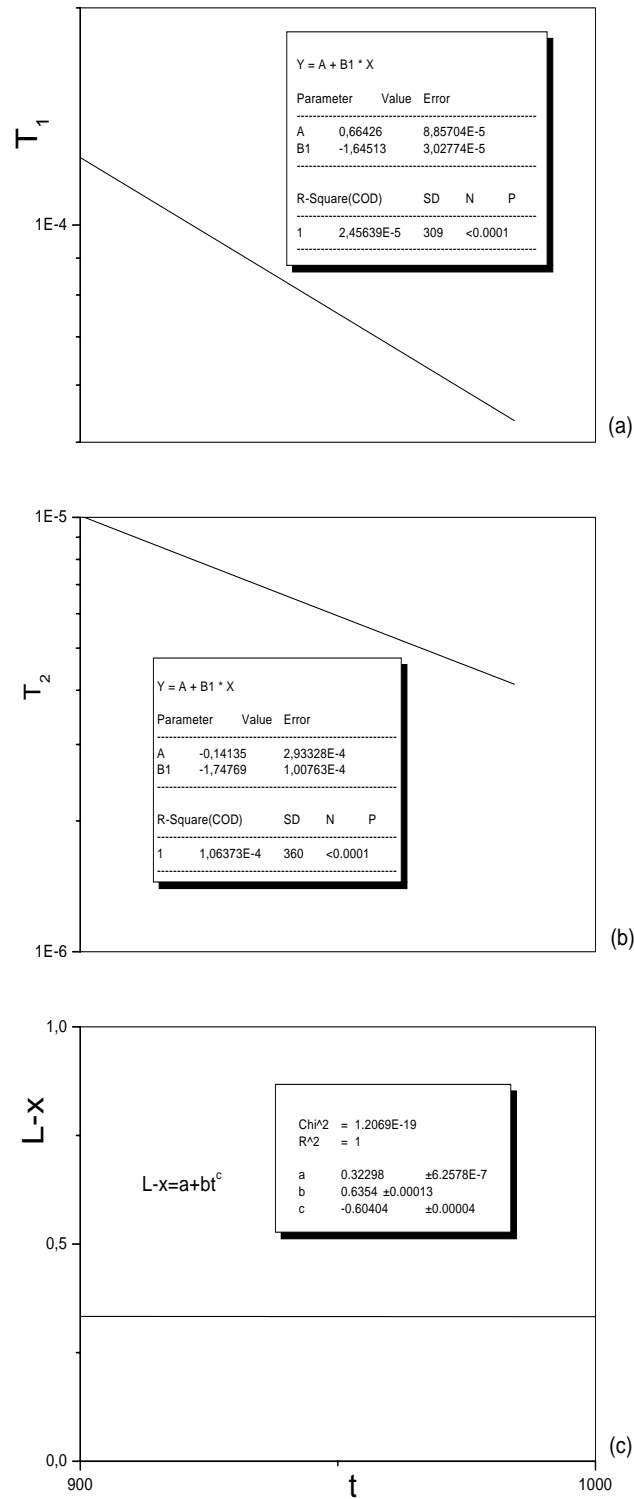


Figura 2.4: Comportamento típico sem aglomeração. ( $\gamma = 1, 0, \beta = 0, 3$ ): (a)  $T_1(t)$ ; (b)  $T_2(t)$ ; (c)  $L - x(t)$ .

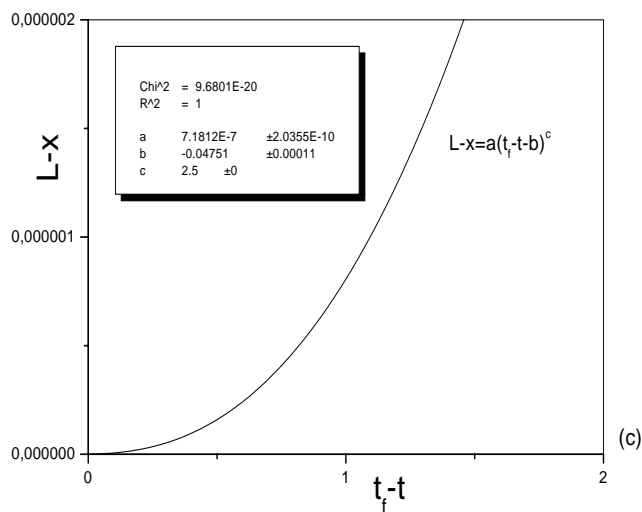
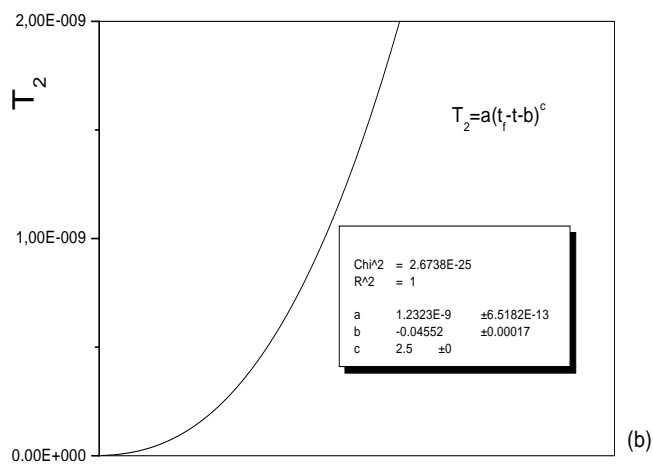
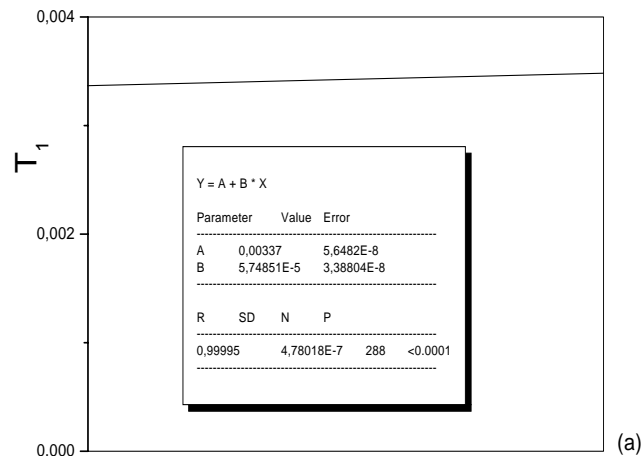


Figura 2.5: Comportamento típico com aglomeração. ( $\gamma = 1, 0, \beta = 3, 0$ ): (a)  $T_1(t)$ ; (b)  $T_2(t)$ ; (c)  $L - x(t)$ .

## 2.6 Análise de Instabilidades

Vários autores têm mostrado que, numa escala conveniente, as equações hidrodinâmicas apresentam instabilidades lineares,<sup>22,25,26</sup> e que muitos fenômenos interessantes observados podem estar relacionados a essas instabilidades. Embora o modelo de gás granular com o qual estamos trabalhando difere dos modelos usualmente estudados<sup>d</sup>, também observaremos instabilidades. A novidade é que no nosso caso as instabilidades aparecerão apenas como um fenômeno transiente. A fim de analisar estas instabilidades procederemos da maneira usual. Definamos um estado homogêneo, (HS), descrito pelas variáveis  $T_g = T_0(t)$ ,  $n = n_0$  e  $\mathbf{u} = 0$ , a partir do qual definiremos as flutuações

$$T_g = T_0(t) + \delta T_g(t) \quad (2.62)$$

$$n = n_0 + \delta n(t) \quad (2.63)$$

$$\mathbf{u} = \delta \mathbf{u} \quad (2.64)$$

As equações de Navier-Stockes linearizadas serão escritas então

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = -\nabla \cdot n_0 \delta \mathbf{u}, \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial \delta \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{m} \nabla \delta T_g - \frac{1}{mn_0} T_0 \nabla n + \frac{\eta}{mn_0} \left[ \nabla^2 \delta \mathbf{u} + \frac{1}{3} \nabla \nabla \cdot \delta \mathbf{u} \right], \quad (2.66)$$

$$\frac{\partial \delta T_g}{\partial t} = -2Dk'n_0T_0^{8/5} \delta n - \left[ \frac{8}{5} Dk'n_0T_0^{3/5} - \frac{2}{3} \frac{\eta}{n_0} \lambda \nabla^2 \right] \delta T_g - \frac{2}{3} T_0 \nabla \cdot \delta \mathbf{u}. \quad (2.67)$$

A fim de eliminar a dependência temporal nos coeficientes das equações linearizadas acima, Brey<sup>23</sup> propôs uma mudança de escala espaço-temporal que deixa esses coeficientes independentes do tempo nessa nova escala, para o caso de um coeficiente de restituição constante. Nessa nova escala o tempo passa a ser contado como o número médio de colisões para cada grão. No nosso caso essa mudança não elimina completamente a dependência temporal dos coeficientes, mas também não encontramos nenhuma escala na qual os coeficientes ficam constantes, o que mais tarde será justificado. Portanto, utilizaremos a mesma escala usada por Brey. Essas novas variáveis são definidas como:

$$t^* = \frac{1}{2} \int_0^t \nu_H(t') dt' \quad (2.68)$$

$$r^* = \frac{1}{2} \nu_H(t) \left( \frac{m}{T_g} \right)^{1/2} \quad (2.69)$$

<sup>d</sup>Nos modelos de sistemas granulares mais comumente estudados o coeficiente de restituição é considerado constante (independente da velocidade relativa dos grãos). Os sistemas granulares são usualmente estudados por métodos de teoria cinética<sup>27</sup>, MD<sup>28</sup>, DSMC<sup>35</sup>, etc.

$$\rho = \frac{\delta n}{n_0} \quad (2.70)$$

$$\theta = \frac{\delta T_g}{T_0} \quad (2.71)$$

$$\mathbf{w} = \left(\frac{m}{T_0}\right)^{1/2} \delta \mathbf{u}, \quad (2.72)$$

onde

$$\nu_H = \frac{16}{5} n_0 \sigma^2 \sqrt{\frac{\pi T_0}{m}} \quad (2.73)$$

é a taxa de colisão. As derivadas nessas novas variáveis serão expressas por

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\nu_H}{2} \frac{\partial}{\partial t^*} \quad (2.74)$$

$$\nabla = \frac{\nu_H}{2} \sqrt{\frac{m}{t_0}} \nabla^* \quad (2.75)$$

e pela equação (2.32) teremos:

$$\frac{dT_0(t)}{dt^*} = \frac{dT_0}{dt} \frac{dt}{dt^*} = -\frac{2Dk'n_0}{\nu(t)} T_0(t)^{8/5} = -BT_0(t)^{11/10}, \quad (2.76)$$

com

$$B = \frac{5Dk'}{4\sigma^2} \sqrt{\frac{m}{\pi}}. \quad (2.77)$$

Em termos dessas novas variáveis as equações (2.65), (2.66) e (2.67) tomam a forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t^*} = -\nabla^* \cdot \mathbf{w}, \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t^*} = \frac{1}{2} BT_0^{1/10} \mathbf{w} + a\bar{\eta} \left[ \nabla^* \cdot \mathbf{w} + \frac{1}{3} \nabla^* (\nabla^* \cdot \mathbf{w}) \right] - \nabla^* \theta - \nabla^* \rho, \quad (2.79)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t^*} = \left[ \frac{1}{5} BT_{g_0}^{1/10} + b\bar{\lambda} \nabla^{*2} \right] \theta - \frac{2}{3} \nabla^* \cdot \mathbf{w} + n_0 BT_0^{1/10} \rho. \quad (2.80)$$

Onde simplificamos a notação definindo as constantes

$$a = \frac{8}{5} \sigma^2 \sqrt{\frac{\pi}{m}} \quad (2.81)$$

$$b = \frac{16}{15} \sigma^2 \sqrt{m\pi}. \quad (2.82)$$

Além disso consideramos o fato de que para o caso de um gás<sup>26</sup>  $\lambda_T = \bar{\lambda} \sqrt{T_0}$  e  $\eta = \bar{\eta} \sqrt{T_0}$ . Toda a dependência temporal explícita restante do lado esquerdo das equações (2.78) a (2.80) está no fator  $T_0^{1/10}$ , que seria  $T_0^0 = 1$  para o caso do coeficiente de restituição constante.

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



$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{g}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}, \quad (2.83)$$

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (2.84)$$

e as derivadas tornam-se:

$$\begin{aligned} \nabla &\rightarrow -i\mathbf{k}, \\ \nabla^2 &\rightarrow -k^2. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Assim no espaço de Fourier temos:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t^*} = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_k, \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}_k}{\partial t^*} = \frac{1}{2} B T_0^{1/10} \mathbf{w}_k - a\bar{\eta} \left[ k^2 \mathbf{w}_k + \frac{1}{3} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_k) \mathbf{k} \right] + i\mathbf{k} \theta_k + i\mathbf{k} \rho_k, \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial t^*} = \left( \frac{1}{5} B T_{g^0}^{1/10} - b\bar{\lambda} k^2 \right) \theta_k + \frac{2}{3} i\mathbf{k} \cdot \mathbf{w}_k + n_0 B T_0^{1/10} \rho_k. \quad (2.88)$$

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

$$\mathbf{w}_k = \mathbf{w}_{k\perp} + \mathbf{w}_{k\parallel}, \quad (2.89)$$

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:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t^*} = ik w_{k\parallel}, \quad (2.90)$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial t^*} = \left( \frac{1}{5} B T_0^{1/10} - b\bar{\lambda} k^2 \right) \theta_k + \frac{2}{3} ik w_{k\parallel} + n_0 B T_0^{1/10} \rho_k, \quad (2.91)$$

$$\frac{\partial w_{k\parallel}}{\partial t^*} = \left( \frac{B}{2} T_0^{1/10} - \frac{4}{3} a\bar{\eta} k^2 \right) w_{k\parallel} + ik \theta_k + ik \rho_k, \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial w_{k\perp}}{\partial t^*} = \left( \frac{B}{2} T_0^{1/10} - a\bar{\eta} k^2 \right) w_{k\perp}. \quad (2.93)$$

Observemos que o modo  $w_{k\perp}$  está agora completamente desacoplado das outras variáveis, podendo ser integrado separadamente. A fim de fazê-lo, precisamos, primeiramente, expressar  $T_0(t)$  como  $T_0(t^*)$ , para tanto, integramos a equação (2.68), utilizando as equações (2.73) e (2.33) e obtemos:

$$t^* = \tau^* \left[ \left( 1 + \frac{t}{\tau} \right)^{1/6} - 1 \right], \quad (2.94)$$

com

$$\tau^* = \left( \frac{B}{12\tau n_o \sqrt{T_0(0)}} \right)^{-1} \quad (2.95)$$

ou

$$t = \tau \left[ \left( 1 + \frac{t^*}{\tau^*} \right)^6 - 1 \right]. \quad (2.96)$$

Substituindo esta última equação de volta na (2.33) obtemos:

$$T_0(t^*) = T_0(0) \left( 1 + \frac{t^*}{\tau^*} \right)^{-10}. \quad (2.97)$$

Agora podemos integrar a equação (2.93), obtendo finalmente

$$w_{k\perp}(t^*) = w_{k\perp}(0) \exp \left[ \xi^* \ln \left( 1 + \frac{t^*}{\tau^*} \right) - \xi^* - a\bar{\eta}k^2 t^* \right], \quad (2.98)$$

onde

$$\xi^* = \frac{1}{2} B \tau^* T_0(0)^{1/10}. \quad (2.99)$$

Se estivéssemos trabalhando com um sistema com coeficiente de restituição constante, o lado direito da eq. (2.93) não dependeria do tempo ( $T_0^{1/10} \rightarrow T_0^0$ ), e portanto teria uma solução simples:

$$w_{k\perp}(t^*) = w_{k\perp}(0) e^{s_{\perp} t^*}, \quad (2.100)$$

onde

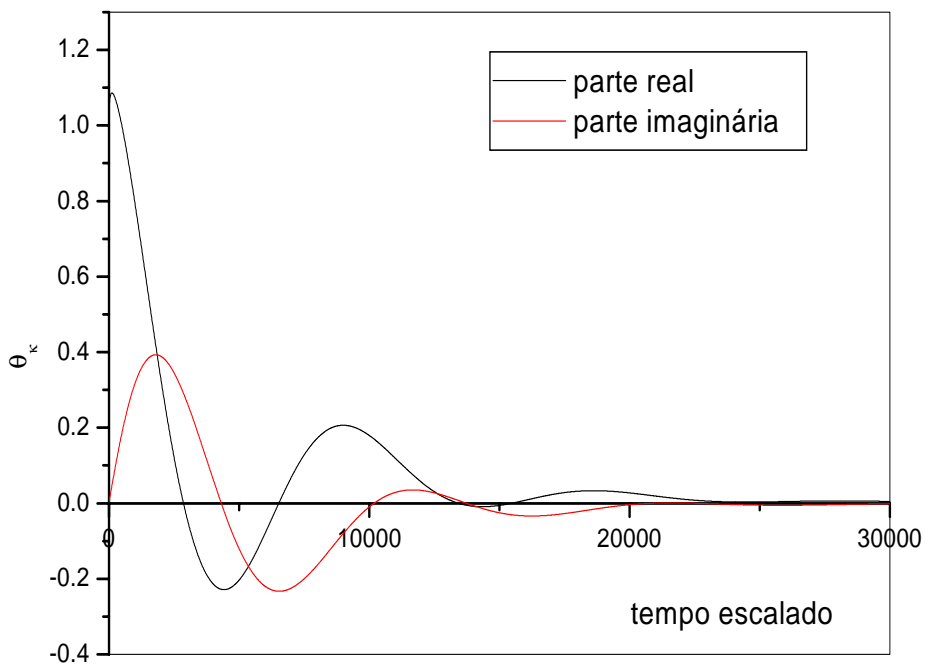
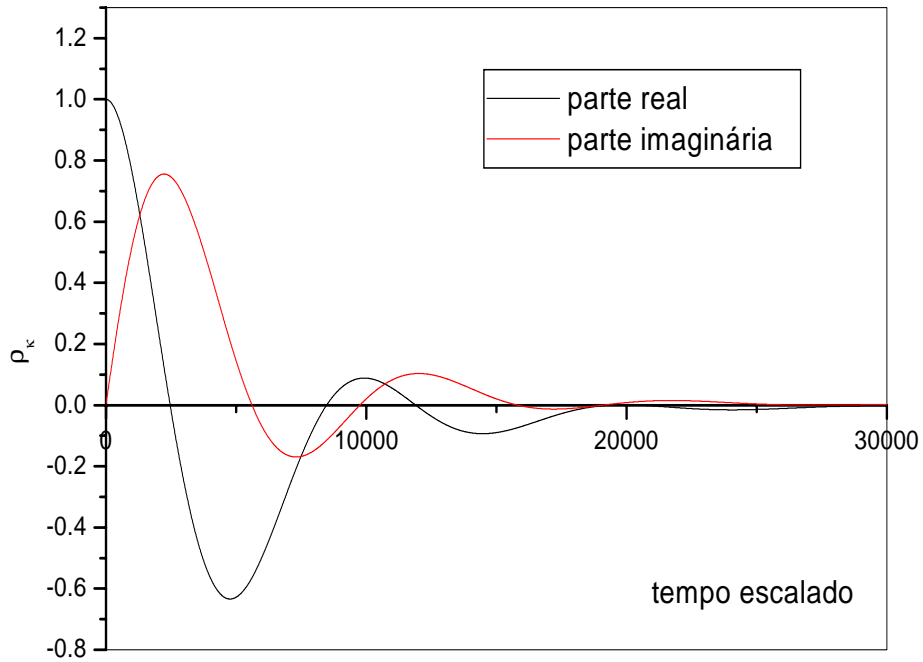
$$s_{\perp} = \frac{B}{2} - a\bar{\eta}k^2, \quad (2.101)$$

que tem a mesma forma obtida por Brey<sup>23</sup>.

Pela eq. (2.98) podemos observar que no limite  $t^* \rightarrow \infty$   $w_{k\perp} \rightarrow 0$ . O mesmo acontece com os demais modos<sup>30</sup>. Isso mostra a crucial diferença entre o nosso modelo e o modelo usual com  $r$  constante. A razão física dessa diferença é que, nesse caso, como o coeficiente de restituição depende da velocidade relativa entre os grãos, o sistema começa a se tornar menos inelástico a partir de um determinado tempo, devido ao decréscimo na velocidade relativa entre os grãos, o que não acontece no caso do coeficiente de restituição constante<sup>e</sup>. Esse comportamento mostra que os fenômenos associados a essas flutuações são apenas fenômenos transientes, e que o sistema deverá voltar ao estado homogêneo, a partir desse tempo transiente<sup>30</sup>.

A fim de verificar a evolução das flutuações integramos o sistema de equações (2.90-2.93). Não estamos interessados aqui em obter valores numéricos acurados, portanto, utilizaremos o método de Euler simples para integrá-las. Além disso atribuímos valores arbitrários para os parâmetros, a saber:  $k = 0,5$ ;  $\tau = B = T(0) = 10,0$ ;  $a = b = \bar{\eta} = \bar{\lambda} = 1,0$ . É fácil notar que a

<sup>e</sup>Essa é a razão pela qual não podemos encontrar uma transformação temporal que deixa os coeficientes das eqs. (2.65-2.67) constantes.



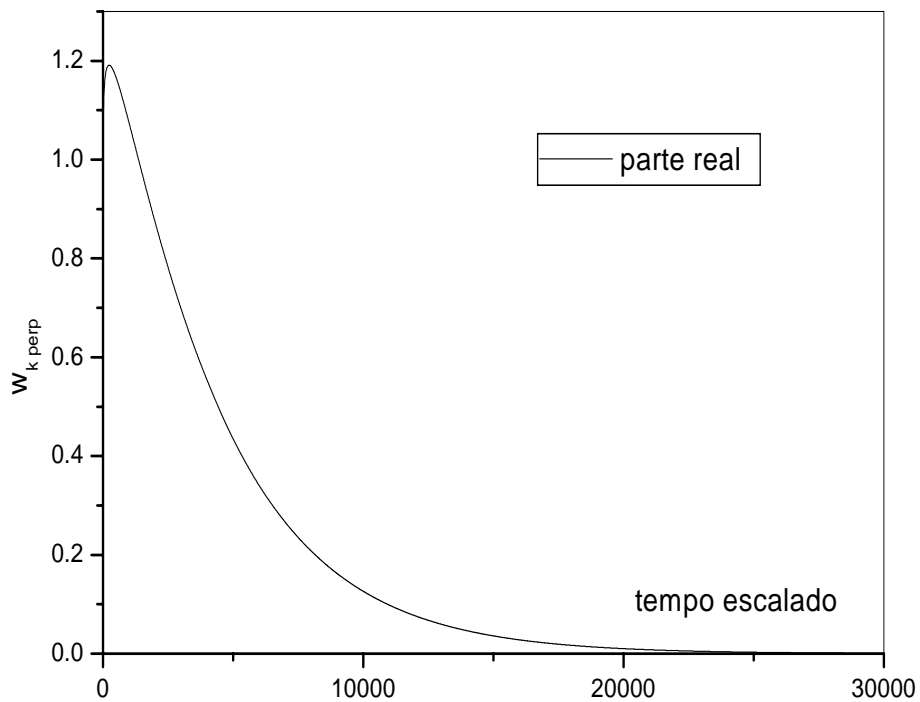
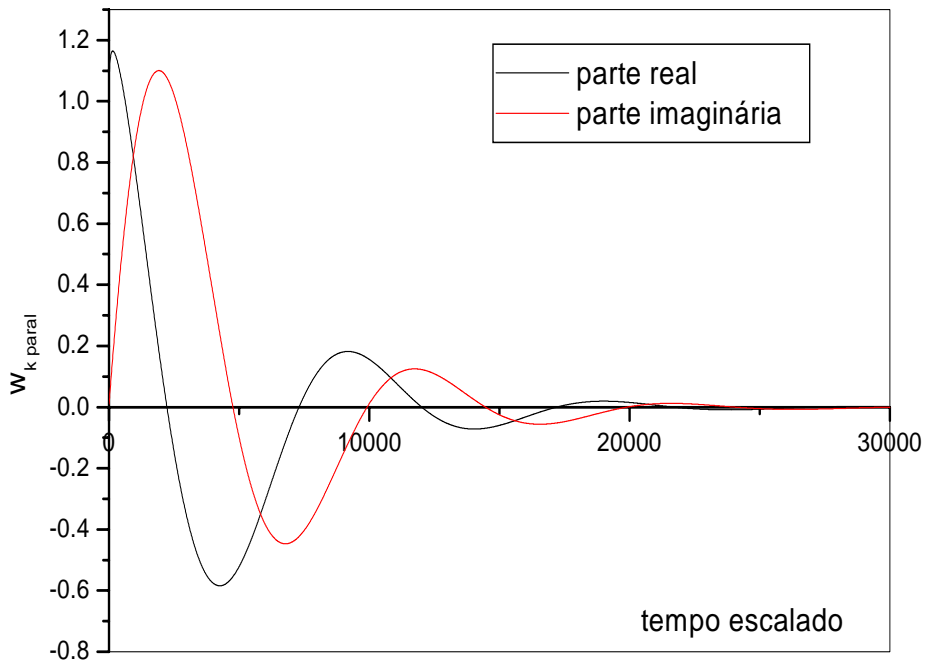


Figura 2.6: Evolução temporal das flutuações obtidas por integração numérica. Os gráficos  $\rho_k$ ,  $\theta_k$ , e os  $w_{k\text{ paraal}}$  e  $w_{k\text{ para p}}$  estão associados às flutuações na densidade, temperatura granular e velocidade, respectivamente.

persistência das flutuações no sistema depende do número de onda  $k$ , isto é, para  $k$  pequeno as flutuações persistirão por mais tempo, exceto para  $k \rightarrow 0$ , mas, neste caso, os comprimentos de ondas excederão o tamanho do sistema e as flutuações não serão mais observadas. Podemos observar pelas eq. (2.90-2.93) que as flutuações crescem até um certo tempo crítico  $t_c \propto 1/k^2$ , a partir do qual elas começam a decrescer.