
Uglješa Milić

Numeričke simulacije slobodnog hlađenja 1D granularnog gasa

U radu je pomoću numeričke simulacije molekularno-dinamičkog tipa izučavan zakon hlađenja granularnog gasa u jednoj dimenziji. Primenjen je event-driven algoritam na model granularnog sistema sa konstantnim koeficijentom neelastičnosti. Reprodukovan je Hafov zakon hlađenja. Analiziran je nastanak nestabilnosti tokom hlađenja homogenog granularnog gasa, sa posebnim osvrtom na dinamiku obrazovanja klastera. Pokazano je obrazovanje bimodalnih funkcija raspodele brzina tokom hlađenja granularnog gasa.

Uvod

Pod granularnim materijalima podrazumevamo ansamble velikog broja makroskopskih objekata. Smatra se da ti objekti, granule, interaguju tokom sudara ili prilikom trajnijih međusobnih kontakata. Osnovna karakteristika granularnih materijala je volumioznost granula. To znači da same granule zauzimaju veliki deo zapremine sistema, što bitno utiče na kinetiku procesa unutar granularnog sistema.

Materijali sa kojima čovek najviše manipuliše tokom ostvarivanja raznih tehnoloških procesa su fluidi, odnosno voda; na drugom mestu nalaze se granularni materijali. Većina prehrambenih proizvoda u nekoj fazi svoje proizvodnje nalazi se u obliku zrnastog materijala. Manipulacija granularnim materijalima prilikom dobijanja metala, legura, keramika, stakala, plastičnih materijala i betona je nezaobilazan tehnološki proces. Većina osnovnih produkata farmaceutske i kozmetičke industrije je u obliku zrnastog materijala. Iz prethodnog je jasno da dublje razumevanje ponašanja granularnih materijala može da doprinese ogromnim uštedama tokom raznih tehnoloških procesa. Takođe, za razumevanje većine geoloških procesa bitno je pravilno shvatanje ponašanje zrnastih sistema. To nam može omogućiti pravilniju predikciju pojave lavina, odrona, zemljotresa i vulkana.

*Uglješa Milić (1988),
Smederevo, Save
Nemanjića 5/22,
učenik 3. razreda
Gimnazije u
Smederevu*

*MENTOR:
dr Slobodan Vrhovac,
Institut za fiziku
Zemun*

Stoga je neophodno da fizičari veliko iskustvo koje ljudi imaju u manipulisanju granularnim materijalima potkrepe adekvatnim fizičkim teorijama. Samo tako možemo biti u stanju da vršimo tačne predikcije u susretu sa pojavama u kojima učestvuju granularni materijali.

U ovom radu je simuliran granularni gas u jednoj dimenziji. Pod granularnim gasom podrazumevamo granularni sistem male gustine. Pokazano je kako ukupna energija sistema zavisi od sudara među granulama i samoorganizovanje granula u klaster. Na kraju je prikazano kako se distribucija brzina granula menja kroz vreme.

Model

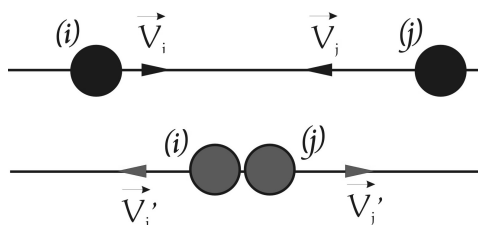
Za simulaciju jednodimenzionalnog granularnog gasa korišćen je tzv. *event-driven* algoritam. Na pravoj liniji dužine L postavljeno je n identičnih granula, jedinične mase, sa slučajnim položajima. Svakoj granuli dodeljena je brzina po uniformnoj raspodeli iz intervala od $-v_{max}$ do $+v_{max}$. Nakon toga se za svake dve susedne granule izračunava njihovo moguće vreme sudara. Kada se pronade najkraće vreme (t_{min}) svaka granula se pomeri za $v_i \cdot t_{min}$. Ako su u sudaru učestvovali i -ta i j -ta granula (slika 1), njihove brzine će nakon sudara iznositi

$$v_i' = \frac{1 - \alpha}{2} \cdot v_i + \frac{1 + \alpha}{2} \cdot v_j$$

$$v_j' = \frac{1 + \alpha}{2} \cdot v_i + \frac{1 - \alpha}{2} \cdot v_j$$

gde su v_i i v_j brzine pre sudara, v_i' i v_j' brzine posle sudara, a α koeficijent normalne restitucije. Ovaj koeficijent nam određuje koliko su sudari među granulama elastični.

Koeficijent α može uzeti vrednosti iz intervala $(0,1]$ (slučaj kada je $\alpha = 1$ odgovara apsolutno elastičnim sudarima).



Slika 1.
Grafički prikaz položaja i brzina granula koje učestvuju u sudaru

Figure 1.
Illustrated model of positions and velocities of grains that participated in the collision

Ukoliko dođe do sudara na granicama sistema (analogno udaru granule o zid) onda se brzina granule koja je učestvovala u sudaru menja po formuli

$$v' = \alpha \cdot v$$

gde su v' i v brzine granula posle i pre sudara.

Gubitak kinetičke energije pri svakom sudaru odgovoran je za pojavu raznih fenomena u granularnom gasu. Kako se enrgija sistema gubi samo kroz sudare, uvedena je nova vremenska skala τ koja predstavlja broj sudara po granuli i izračunava se kao $2N / n$ gde je N ukupan broj sudara u sistemu a n broj granula.

Kolizioni model koji je korišćen predstvalja jedan od najjednostavnijih modela kojima se opisuju granularni materijali. On u sebi sadrži njihovu osnovnu karakteristiku – neelastičnost granula. Razne generalizacije ovog modela su moguće. Na primer, koeficijent normalne restitucije ne mora da bude konstantan, već može zavisi od relativne brzine čestica. Moguće je uvesti i rotacione stepene slobode (spin) granula, a samim tim i površinsko trenje. Za fenomene kojima ćemo se baviti u ovom radu dovoljno je uvođenje jednostavnog zakona koji definiše disipaciju energije. Numeričkim proračunima proverićemo važenje Hafovog zakona hlađenja. Nakon toga izučićemo pojavu nestabilnosti u homogenom granularnom gasu koji se hladi. Na kraju, proverićemo predikcije kinetičke teorije vezane za jednodimenzionalnu funkciju raspodele brzina u uslovima homogenog stanja tokom procesa hlađenja.

Slobodno hlađenje gasa

Temperatura granularnog gasa ustvari predstavlja zbir kinetičkih energija svih granula. Usled smanjenja brzine granula koje su učestvovala u sudaru, temperatura gasa na početku monotono opada i tada se sistem nalazi u homogenom stanju hlađenja. Prema Hafovom (Haff) zakonu hlađenja temperatura T tada zavisi od τ kao:

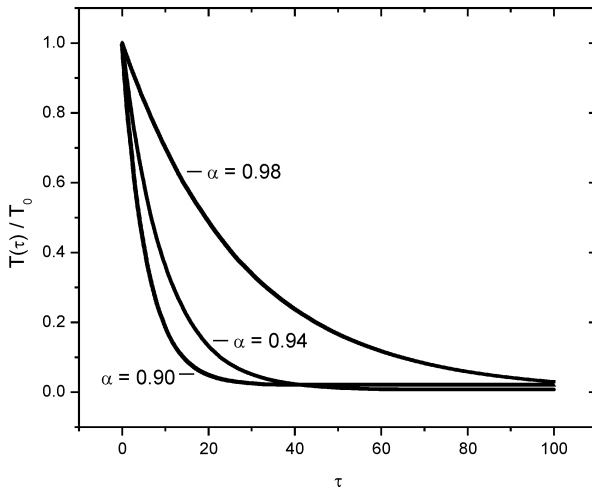
$$T(\tau) = T_0 \cdot e^{-2\gamma\tau} \quad (1)$$

gde je T_0 početna temperature sistema a γ koeficijent koji zavisi od α kao:

$$\gamma = \frac{1 - \alpha^2}{2d} \quad (2)$$

gde d predstvalja dimenziju sistema, u ovom slučaju $d = 1$ (slika 2).

Nakon homogenog hlađenja, sistem stupa u nehomogeno stanje (slika 3). Tada prestaje važenje Hafovog zakona. Ta nehomogenost se ogleda u gustini sistema koja više nije ravnomerna već se izdvajaju oblasti povećane gustine tj. klasteri.

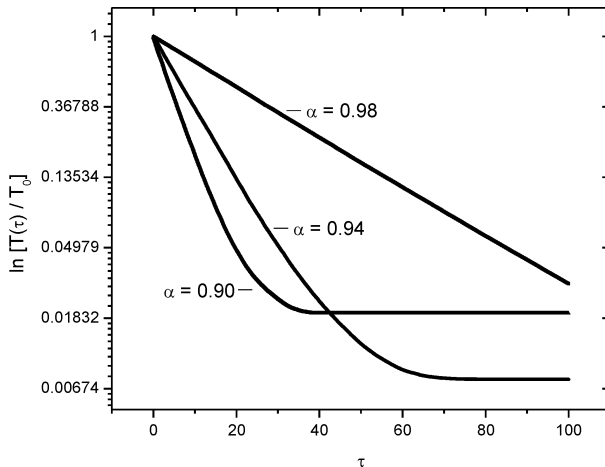


Slika 2.

Zavisnost temperature gasa od vremena za nekoliko vrednosti α

Figure 2.

Time dependence of the granular temperature, shown on a lin-lin scale for several values of α



Slika 3.

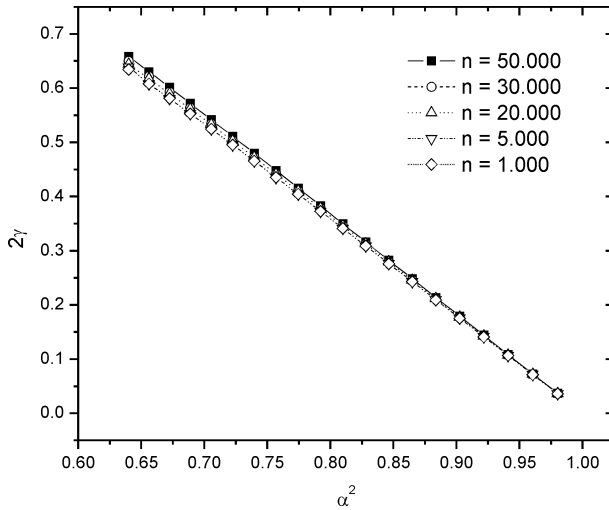
Na početku se primećuje linearno opadanje $\ln T$ od τ tj. homogeno hlađenje sistema. Što je koeficijent normalne restitucije α manji, sistem brže prelazi u nehomogenost.

Figure 3.

Time dependence of the granular temperature, shown on a lin-log scale. At the beginning the homogeneous cooling state is shown ($\ln T$ linear decrease from τ). The smaller α is, the faster the system evolves into inhomogeneity.

Sa slike 3 uočavamo prvo linearnu zavisnost $\ln T(\tau)$ (kasnije, kako sistem prelazi u nehomogenost, ta linearnost se gubi). To je vreme u kome gas homogeno evoluira i u kome važi Hafov zakon hlađenja. Taj koeficijent linearnosti, prema formuli (1), iznosi -2γ . Proveravan je zavisnost koeficijenta 2γ od $1 - \alpha^2$. Koeficijenti 2γ su određivani sa grafika zavisnosti $\ln T(\tau)$, a α je parametar prethodno zadat u simulaciji. Uočeno je da su koeficijenti linearnosti k na graficima zavisnosti $2\gamma(\alpha^2)$ različiti za različit broj granula n , korišćen u simulaciji (slika 4). Prema jednačini (2), koeficijent linearnosti k iznosi 1, dok su ti koeficijenti dobijeni iz simulacija, nešto niži (slika 5).

Slika 5 jasno pokazuje da koeficijent linearnosti k konvergira jedinici sa porastom broja granula u simulaciji. Ograničeni računarski resursi nam

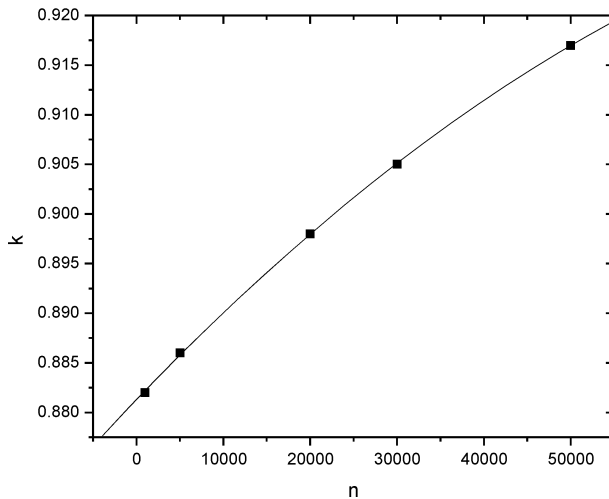


Slika 4.

Grafik zavisnosti koeficijenta 2γ od α^2 . Zavisnost je prikazana za različit broj granula koje su korišćene u simulaciji.

Figure 4.

Dependence of 2γ coefficient on α^2 is shown for different numbers of grains that are used in the simulation.



Slika 5.

Zavisnost koeficijenta linearnosti k od broja granula n . Uočava se da sa porastom broja granula u sistemu, koeficijent k takođe raste.

Figure 5.

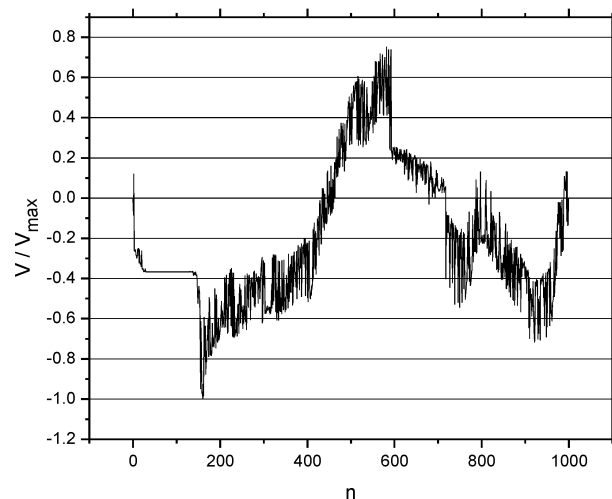
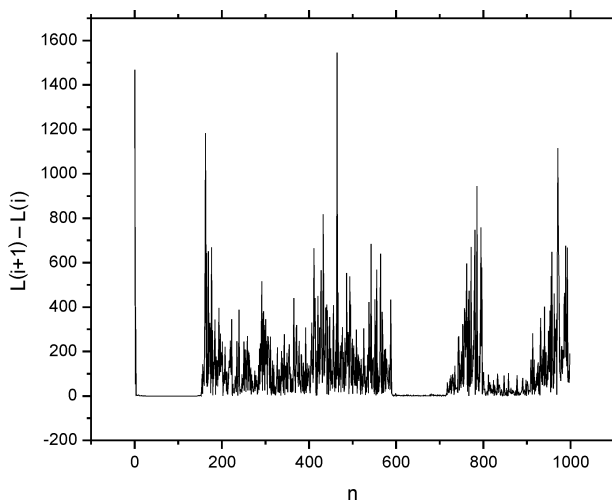
Dependence of linear coefficient k on number of grains n . With increasing number of grains in the system, the coefficient k also increases.

nisu dozvoljavali da broj čestica povećamo još za red veličine, što bi bilo dovoljno da naši rezultati i kvantitativno budu potpuno u skladu sa predikcijama kinetičke teorije. Naša simulacija jasno pokazuje da opseg važenja Hafovog zakona zavisi od neelastičnosti granula. Sa povećanjem neelastičnosti brže dolazi do pojave nehomogenosti u sistemu i do odstupanja od Hafovog zakona. Ako je neelastičnost granula veća, tada fluktuacije u polju brzine i polju gustine znatno brže narastaju. Tako neizbežne fluktuacije prvo dovode do lokalnih usmerenih tokova granula (nestabilnost u polju brzina), a nakon toga i do pojave klastera (nestabilnost u polju gustine). Pojava klastera je tema narednog poglavlja.

Obrazovanje klastera

Nakon što sistem pređe iz stanja homogenog hlađenja u stanje nehomogenosti javljaju se fenomeni klasterisanja granula. Usled hlađenja sistema, granule se kreću sve sporije da bi se na kraju organizovale u klaster, oblasti u kojima je povećana gustina gasa.

Granule koje sačinjavaju jedan klaster karakterišu mala brzina i mala međusobna rastojanja. Kako su susedne granule unutar klastera veoma blizu jedna druge, koliziorna frekvencija na takvim mestima može biti velika. Posebno značajan aspekt takvog ponašanja granularnog sistema je pojava singulariteta – neelastičnog kolapsa. Do njega dolazi kada je gustina sistema dovoljno velika, tako da susedne granule u veoma kratkom vremenskom intervalu učestvuju u ogromnom broju sudara. Kako se u



Slika 6.

Gore su prikazana rastojanja između svake dve susedne granule. Uočavaju se dva nastala klastera i treći koji je u procesu formiranja. Na donjem grafiku su prikazane brzine svake granule u sistemu. Tamo gde se vidi obrazovanje klastera na gornjem grafiku, na donjem je praćeno brzinama koje su međusobno iste po smeru a intezitet im je približan nuli. Između tih granula nalaze se granule sa znatno većim brzinama.

Figure 6.

Snapshot of the density and velocity field. These graphs correspond to $\delta = 1000$ for a system with particle number $n = 10^3$, packing on a line of length $L = 10^4$, and restitution coefficient $\alpha = 0.9$ (above). Spaces between every two contiguous grains are shown. We can see two formed clusters and the third that is in process of formation (bellow). Velocity of each grains is shown. In places where we detected clusters on the upper graphs, on the graph below we can see velocities which are the same in direction and their intensities are close to zero. Between them, there are grains with much higher velocity.

simulaciji koriste apsolutno tvrde granule, teorijski dolazi do pojave parova čestica koje međusobno mogu da učestvuju u neograničeno mnogo sudara u konačnom intervalu vremena. Event-driven algoritam koji je korišćen u simulaciji ne može da isprati neelastični kolaps. Tačnije, pojava neelastičnog kolapsa 'zamrzava' simulaciju, odnosno onemogućava dalju propagaciju sistema u vremenu i prostoru. U našoj simulaciji nije dolazilo do neelastičnog kolapsa. Razlog za to je pre svega bio taj što nisu korišćeni mali koeficijenti normalne restitucije, odnosno jako disipativne granule.

Klasteri nastaju tako što se u jednom trenutku pojedine granule sudaraju međusobno velikom frekvencijom. Usled mnogo sudara koje pretrpljuju njihova kinetička energija ubrzano opada. Temperatura u tom delu gasa je znatno niža nego u ostatku sistema. Smanjenje temperature prouzrokuje i smanjenje pritiska zbog čega ostale slobodne granule počinju da se kreću ka tim oblastima. Tako se veliki broj granula nađe na relativno malom prostoru i nastaje klaster.

Na slici 6 prikazani su klasteri obrazovani u jednom granularnom gasu. Na osi dužine $L = 10000$ smešteno je $n = 1000$ granula i svaka je pretrpela $\tau = 2000$ sudara prosečno pri koeficijentu $\alpha = 0.90$. Na gornjem grafiku se uočava prva osobina klastera, međusobna rastojanja između granula koja čine jedan klaster su mala. Na donjem grafiku je prikazana druga osobina klastera, granule unutar klastera imaju malu brzinu dok se ostale granule slobodno kreću po ostatku sistema.

Distribucije brzina granula u gasu

U ovom paragrafu biće prikazana analiza raspodele granula po brzini tokom hlađenja granularnog gasa. Inicijalna raspodela po brzinama je uniformna. Sa slike 7 može se videti da nakon veoma kratkog vremena, odnosno malog broja sudara po granuli, sistem dolazi u stanje u kome su sve brzine podjednako distribuirane među granulama. Nakon toga, dok se sistem još uvek nalazi u homogenom stanju, počinju u sistemu da dominiraju granule sa značajnim brzinama. Te brzine odgovaraju pikovima koji se simetrično pojavljuju sa svake strane funkcije raspodele po brzinama. Tako funkcija raspodele polako prerasta u bimodalnu raspodelu, u kojoj postoje dva simetrična pika. Pojava tih pikova vezana je za pojavu nestabilnosti u polju brzina, koja prethodi pojavi klastera. Nestabilnosti u polju brzina predstavljaju odstupanja od inicijalne raspodele brzina i one mogu postojati iako je sistem još uvek homogen. Dalju evoluciju sistema prati dalja randomizacija brzina, te bimodalna raspodela prerasta u Gausovu sa veoma širokim krilima. Važno je napomenuti da je pojava bimodalne raspodele karakteristična za granularne sisteme koji nisu mnogo disipativni i modelovani su sa koeficijentom restitucije bliskim jedinici.

Zaključak

Ispitane su neke od karakteristika 1D granularnog gasa tokom njegovog procesa hlađenja. Pokazano je da se sistem u svom ranom procesu ponaša u skladu sa Hafovim zakonom hlađenja. Postoje mala odstupanja između teorijskih izraza i rezultata dobijenih iz simulacije. Ova odstupanja postoje zbog nemogućnosti da se u simulacijama koriste sistemi sa dovoljno velikim brojem čestica. Važno je napomenuti da dobijeni rezultati za koeficijent hlađenja γ granularnog gasa asimptotski teži teorijskim vrednostima kada broj granula teži beskonačnosti.

Prikazani rezultati pokazuju i da event-driven algoritam primenjen na model granularnog gasa sa konstantnim koeficijentom restitucije reprodukuje pojavu nestabilnosti. Klasteri se javljaju u kasnoj fazi hlađenja granularnog gasa. Osim jednostavnog registrovanja nehomogenosti u sistemu, pratili smo i dinamiku klastera. Primećeno je da se klasteri kao celine kreću u nekom od dva moguća smera malim brzinama.

Na kraju su pokazane distribucije brzina tokom procesa hlađenja gasa. Početna raspodela brzina je uniformna da bi se u stanju homogenog hlađenja formirala bimodalna distribucija. Pikovi su izraženiji što je sistem elastičniji. Na kraju, kada se sistem dovoljno ohladio i klasteri formirali, brzine granula u gasu su zastupljene po Gausovoj raspodeli.

Treba reći da se jednodimenzionalni granularni sistemi ne sreću često u prirodi. Razlog zbog kojeg je u ovom radu izabrano proučavanje ovakvih sistema je ušteda u računarskim resursima. Osim toga, kod ovakvih sistema primećuju se svi fenomeni karakteristični i za realne granularne sisteme.

Slika 7 (naspramna strana).

Distribucija brzina tokom hlađenja granularnog gasa. Parametri korišćeni u simulaciji su: $\alpha = 0.95$, $n = 3 \cdot 10^4$, $L = 3 \cdot 10^4$. Dok se sistem nalazi u stanju homogenog hlađenja grafike karakterišu dva pika koja pokazuju da najveći broj granula ima brzinu veću od nule. To je period kada sistem još nije prešao u nehomogenost. Za $\tau = 40$ pikovi se polako gube što pokazuje da se u gasu polako obrazuju klasteri. Na kraju, za $\tau = 100$, distribucija brzina granula u gasu postaje Gausova.

Figure 7 (opposite page).

Velocity distribution during the cooling of granular gas. Parameters that are used are: $\alpha = 0.95$, $n = 3 \cdot 10^4$, $L = 3 \cdot 10^4$. While the system is still in a homogeneous regime, two piques are present on the graphs which means that most of the grains have a velocity much higher than zero. It is a stage when the system still did not evolve into inhomogeneity. For $\tau = 40$ piques are slowly lost which indicates that the clusters are being formed. At the end, for $\tau = 100$, velocity distribution in the system is Gaussian.

Zahvalnost. Zahvalnost dugujem svom mentoru dr Slobodanu Vrhovcu sa Instituta za fiziku u Zemunu. Takođe se zahvaljujem Istraživačkoj stanici Petnica u okvirima čijih seminara je ovaj rad i realizovan.

Literatura

- Ahmad S.R., Puri S. 2006. *Europhys. Lett.*, 75(1):
- Baldassari A., Puglisi A., Marconi B. Kinetics models od inelastic gases. World Scientific Publishing Company
- Barrat A., Biben T., Racz Z., Trizac E., Van Wijland F. 2002. *J. Phys. A: Math.*, Gen 25
- Barrat A., Trizac E., Ernst M. H. 2005. *J. Phys. Condes. Matter*, Gen17
- Brey J. J., Ruiz-Montero M. J., Cubero D. 1996. *Phys. Rev.*, 54 (4):
- Brey J. J. Ruiz-Montero M. J. 2004. *Phys. Rev.* E69, 011305
- Nakanashi H. 2003. *Phys. Rev.* E67, 010301(R)

Uglješa Milić

Numerical Simulation of the One-dimensional Freely Evolving Granular Gas

We studied freely evolving inelastic granular gas via molecular dynamics simulation in one dimension. An event-driven algorithm is used on a model of a granular system with a constant coefficient of normal restitution. Haff's cooling law was reproduced. We analyzed unstable forms in granular gas during the homogeneous cooling state, with special attention on dynamics of the clustering instability. Forming the bimodal velocity distribution for a freely evolving granular gas was shown.

