

Os Antigos Gregos e os Modernos Computadores

As simulações computacionais tornam-se mais realistas ao incluir antigos conceitos em seus modelos. Mais uma lição da moderna ciência: uma boa ideia não morre nunca; uma grande ideia torna-se cada vez mais viva!

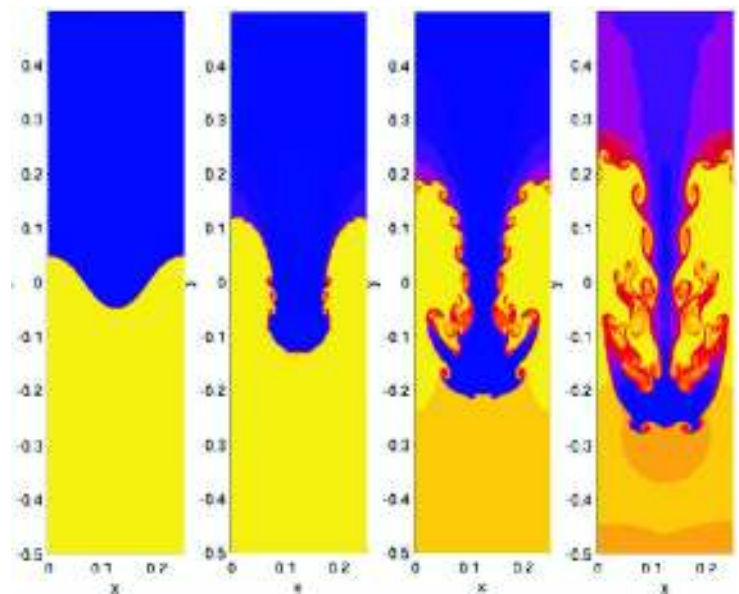
Dizem-nos sempre para ler “os mestres”, mas até quando devemos recuar na leitura dos clássicos raramente é explicado. Além do mais, ler os mestres para quê? O que pode ser encontrado nos textos antigos que não está melhor explicado nos livros recentes?

Kai Kadau e colaboradores [1] nos Estados Unidos e em França voltaram às ideias de Demócrito (460 AC-370AC) para explicar um fenómeno conhecido como “instabilidade de Rayleigh-Taylor”. Isto ocorre quando um líquido mais denso flutua sobre um mais leve (como, por exemplo, um óleo denso sobre água). Durante algum tempo esta configuração instável é mantida, mas repentinamente, sob efeito da gravidade, a linha de separação é rompida e o fluido de cima cai.

Como se dá esta queda é o assunto de Kadau. Tradicionalmente este fenómeno é estudado com as equações de Navier-Stokes, pedras fundamentais de toda a dinâmica de fluidos. No entanto, a configuração consistindo de um líquido sobre outro, mesmo sendo o de cima mais denso, é uma situação de equilíbrio. Portanto, manter-se-á indefinidamente. Para que haja ruptura é necessário gerar artificialmente algum tipo de instabilidade. Isto é feito considerando uma configuração inicial que não é dada por uma linha de separação plana, mas que consiste de pequenas oscilações aleatórias (inicialmente imperceptíveis) em torno de um plano.

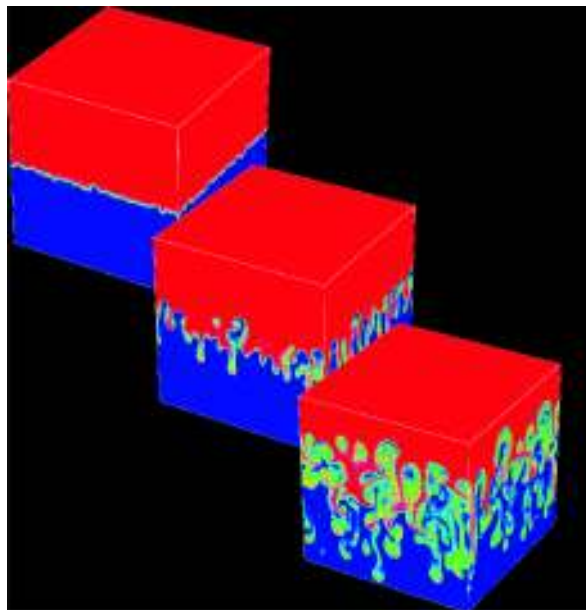
Como o equilíbrio é instável estas pequenas perturbações tendem a crescer e o equilíbrio é rompido.

Aqui entram as ideias de Demócrito: ele foi o primeiro pensador a introduzir a ideia de átomo, ou seja, de que a matéria é feita de partes mínimas, indivisíveis, que contêm todas as propriedades macroscópicas que observamos. É claro que as suas ideias são muito distintas da ideia moderna de átomo,



Instabilidade de Rayleigh-Taylor gerada por simulações computacionais usando modelos contínuos.

<http://math.lanl.gov/Research/Highlights/amrmhd.shtml>



Resultados obtidos por Kai Kadau para a instabilidade de Rayleigh-Taylor usando modelos atômicos. Cortesia de Kai Kadau <http://www.thp.uni-duisburg.de/~kai/index.html>.

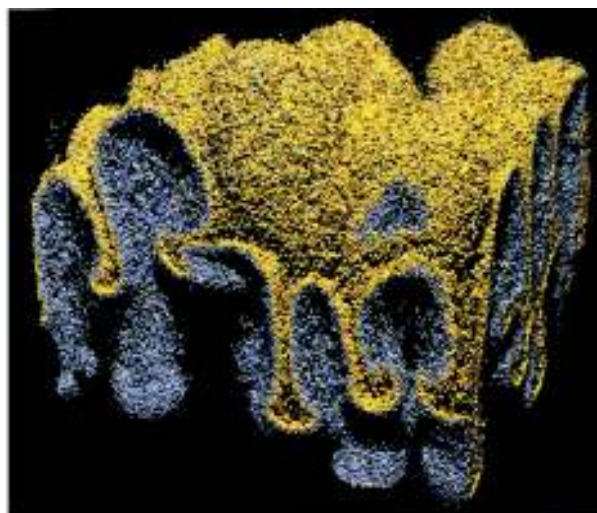
mas foi nesta fonte que Kadau e os seus colaboradores reconheceram a origem de suas ideias. Afinal, se existem átomos, as equações de Navier-Stokes só podem ser, na melhor das hipóteses, uma aproximação da real dinâmica do que se passa no fluido. E esta aproximação é tal que as flutuações (que são absolutamente naturais quando pensamos na matéria constituída por átomos) são automaticamente suprimidas. Portanto, lembrando que os fluidos são na verdade montes de pequenas partículas (e que a matéria não é contínua, o que é frequentemente esquecido por quem já há tanto tempo trabalha em “dinâmica do contínuo”), as flutuações artificiais que têm que ser incluídas nas equações de Navier-Stokes para explicar a instabilidade de Rayleigh-Taylor não são necessárias.

E o que fizeram exactamente os autores do artigo? Escreveram um modelo para um número tão grande de partículas que foi necessário usar o maior sistema computacional ora existente: o Blue Gene/L, no Laboratório Nacional de Los Alamos. Com isto, fizeram uma detalhada e realista descrição de como o fluido mais pesado rompe a tensão superficial que o mantinha a flutuar sobre o mais leve, e como estes começam a interpenetrar-se um no outro.

Mais explicitamente, nas simulações baseadas em mecânica do contínuo, as pequenas perturbações iniciais tendem a aumentar mais em certos comprimentos de ondas específicos, formando assim alguns “dedos” de um fluido penetrando no outro. A distância de penetração cresce com o quadrado do tempo, sendo que o coeficiente de proporção entre estes dois valores é aproximadamente metade do valor experimental.

Já nas simulações baseadas em átomos, o seu movimento aleatório fornece perturbações permanentes, de tal forma que todos os comprimentos de onda (e não apenas alguns) são continuamente excitados. O resultado é uma evolução bastante distinta onde, em dado momento, as pontas dos “dedos” se soltam e formam bolhas do líquido mais pesado que avançam sobre o mais leve. Apesar de o tamanho previsto pelo modelo para estas bolhas ser de 4 a 6 vezes maior do que o que se verifica experimentalmente, o padrão geral de comportamento é muito mais realista do que o obtido através de dinâmica de fluidos, mostrando como a velha ideia de “átomo” ainda está a ser absorvida. **M**

[1] - Kadau, K., Rosenblatt, C., Barber, J. L., Germann, T. C., Huang, Z., Carlès, P., Alder, B. J. (2007). The importance of fluctuations in fluid mixing. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(19), 7741-7745.



Detalhe da interface entre dois fluidos no início da ruptura da instabilidade de Rayleigh-Taylor.