

O Método da Função Característica Empírica
Aplicado à Dinâmica Molecular de Gases
Granulares

Antony Marco Mota Polito
Orientador: Annibal Dias de Figueiredo Neto
Instituto de Física, Universidade de Brasília, Brasília, Distrito Federal

Abril, 2006

Conteúdo

Resumo	vii
Abstract	ix
Agradecimentos	xi
Apresentação	xiii
1 Sistemas Granulares: uma Introdução	1
1.1 Gases Granulares	3
1.2 Colapso Inelástico	5
1.3 Formação de Microestruturas e “Clusters”	5
1.4 Fluxos e Padrões no Campo de Velocidades	7
1.5 Métodos Experimentais	7
1.6 Métodos Computacionais	8
2 Teoria Cinética de Gases Granulares	11
2.1 A Equação de Enskog-Boltzmann	13
2.2 Estado de Esfriamento Homogêneo (HCS)	15
2.3 Dinâmica do HCS	19
2.4 Estado Estacionário de Não-Equilíbrio (NESS)	26
2.5 Caudas de Alta Energia	27
2.6 Hidrodinâmica e Estabilidade	31
2.6.1 Hidrodinâmica Granular	32
2.6.2 Estabilidade Linear	37
3 Dinâmica Molecular	41
3.1 O Método “Event Driven”	41
3.2 Condições de Contorno	43
3.3 Condições de Contorno Periódicas	44
3.4 Condições de Contorno Reflexivas	45

4	O Método da Função Característica Empírica	47
4.1	Variáveis Aleatórias e Função de Distribuição	48
4.2	Função Característica e Função W de Lévy	50
4.3	Função Característica Empírica	55
5	Medidas de Funções de Distribuição	57
5.1	Simulação	57
5.2	Caracterização dos Estados Assintóticos	60
5.2.1	Estados estacionários	61
5.2.2	A influência das condições de contorno	61
5.2.3	A influência do livre caminho médio	69
5.2.4	A influência do número de partículas	76
5.3	Limite Termodinâmico	82
5.4	Estabilidade	94
6	Medida e Cálculo dos Coeficientes de Sonine	105
6.1	O Segundo Coeficiente da Expansão de Sonine	106
6.2	Demais Coeficientes da Expansão de Sonine	111
6.3	Cálculo Analítico dos Coeficientes	113
6.3.1	Truncagem em ordem $O(\lambda^3)$	115
6.3.2	Truncagens em ordem $O(\lambda^4)$ e $O(\lambda^5)$	118
6.4	Convergência da Expansão em Polinômios de Sonine	123
6.5	Novo Esquema de Truncagem da Expansão de Sonine	126
6.6	Caudas de Alta Energia	133
7	Conclusões e Perspectivas	139
A	Cálculo das Integrais Colisionais μ_p	145
B	Integrais Colisionais γ_l	149

À Nádía

Filosofia, Leis e Medicina,
Teologia até, com pena o digo,
Tudo, tudo estudei com vivo empenho!
E eis-me aqui agora, pobre tolo,
Tão sábio como dantes! É verdade
Que sou mestre, doutor, e há já dez anos
Que discípulos levo, a meu talante,
À esquerda, à direita, ao sul ou norte,
Mas conheço que nada nós sabemos!
Rói-me isto o coração! Sinto-me acima
De mestres e de padres e de escribas;
Não me assolam dúvidas nem escrúpulos,
Nem do demônio ou do inferno tenho medo
Mas também nunca tenho hora alegre!
Nem chego a imaginar que haja ciência
Em que deveras creia, nem que saiba
Coisa alguma ensinar que aos homens sirva,
E convertê-los possa ou melhorá-los.

Goethe, Fausto.

Resumo

Neste trabalho, nós estudamos a dinâmica dissipativa de sistemas de esferas rígidas e lisas, com coeficiente de restituição constante e com baixo número de partículas, no Regime de Esfriamento Homogêneo. Nós nos concentramos na obtenção da função de distribuição de velocidades por meio de simulações em Dinâmica Molecular. O principal objetivo é apresentar uma metodologia baseada na aplicação da técnica da Função Característica Empírica e da chamada função W , introduzida por Lévy para medir a distância de distribuições para uma Gaussiana. Nós usamos esta metodologia para (i) caracterizar estados assintóticos estacionários independentemente das condições iniciais; (ii) estudar a múltipla dependência desses estados estacionários no número de partículas, livre caminho médio, coeficiente de restituição e condições de contorno; (iii) discutir a existência de um estado limite no limite termodinâmico; (iv) estudar o problema da convergência da expansão polinomial de Sonine no regime de alta inelasticidade; (v) propor um novo método de truncagem para resolver a dinâmica dos coeficientes de Sonine e (vi) medir as caudas de alta energia superpopuladas. Além disso, nós investigamos em que medida os resultados teóricos relacionados à equação de Boltzmann inelástica podem ser reproduzidos.

Abstract

In this work we study the dissipative dynamics of systems of smooth hard spheres with a constant restitution coefficient and small number of particles in the Homogeneous Cooling Regime. We focus on the velocity distribution from simulations in the Molecular Dynamics approach. The main goal is to present a methodology based on the application of the Empiric Characteristic Function technique and the so-called W function, introduced by Lévy to measure the distance of distributions from the Gaussian. We use this methodology to (i) characterize asymptotic stationary states independently of initial conditions; (ii) to study the multiple dependence of these stationary states on the number of particles, mean free path, restitution coefficient and boundary conditions; (iii) to discuss the existence of a limit state in the thermodynamic limit; (iv) to study the problem of the convergence of the Sonine polynomial expansion at the highly dissipative regime; (v) to propose a new truncation scheme to solve the dynamics of the Sonine coefficients and (vi) measure the overpopulated high energy tails. Moreover, we investigate in what sense the theoretical results related to the inelastic Boltzmann equation can be reproduced.

Agradecimentos

À minha família, porque são os meus.

À todos os meus colegas de curso, principalmente aos que já foram embora - já que eu resolvi ficar mais um pouco -, por todas as discussões úteis e, principalmente, pelas inúteis.

Aos meus amigos Angelo Marconi Maniero e Olavo Leopoldino da Silva Filho, por terem me ajudado a resolver todos os pepinos imagináveis do “objeto diabólico”.

Aos meus colaboradores e amigos Tarcísio Marciano da Rocha Filho e Frederico Vasconcelos Prudente, entre outras coisas, pela colaboração, é claro.

Ao meu amigo e co-orientador, Luís Silva da Costa. Além de todos esses longos anos de companheirismo, principal responsável pela parte de programação neste trabalho, juntamente com o Fred e o Marciano.

Ao meu amigo e orientador, Annibal, o “Ticho Brahe” das análises estatísticas. Ainda que eu esteja a quilômetros de me considerar um “Kepler”, juntos conseguimos colocar esta tese em órbita.

À FINATEC, pelo custeio de minha participação no “IX Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena” onde parte deste trabalho foi apresentada.

Apresentação

As propriedades estatísticas de sistemas granulares em geral - e de gases granulares, em particular -, têm sido objeto de intensa investigação nas últimas duas décadas. Vários importantes resultados analíticos e simulacionais foram obtidos em problemas relacionados com assuntos tão diversos quanto funções de distribuição não-Gaussianas, formação de estruturas, modelos colisionais, regimes de evolução, coeficientes de transporte, estabilidade hidrodinâmica e caudas de alta energia [1, 6] (Capítulos 1 e 2). Dentre os diversos assuntos considerados, uma parte expressiva do interesse dos autores está dirigida para o estudo de gases granulares no chamado regime de esfriamento homogêneo. Este será o regime de evolução abordado neste trabalho (Capítulo 2, Seções 1 a 3).

O modelo matemático mais simples para investigação desse tipo de sistemas é o de esferas rígidas e lisas, que interagem por meio de colisões instantâneas, mediadas por um coeficiente de restituição constante (Capítulo 2, introdução). A abordagem teórica para o tratamento destes modelos baseia-se em equações cinéticas para a evolução da função de distribuição de uma partícula com dimensão finita, tais como a equação de Enskog-Boltzmann (Capítulo 2, Seção 1). A equação de Enskog-Boltzmann geral é extremamente difícil de ser resolvida. Na situação de esfriamento livre homogêneo, entretanto, em que o sistema permanece espacialmente uniforme, espera-se que as soluções sejam dadas por funções de distribuição mais simples. De fato, o chamado Estado de Esfriamento Homogêneo - “Homogeneous Cooling State” (HCS) - admite uma solução escalada pela velocidade térmica do sistema, a qual se supõe alcançar um regime estacionário após um breve período de relaxação (Capítulo 2, Seção 3).

Esse estado estacionário provê um estado de referência local a partir do qual uma descrição hidrodinâmica torna-se possível (Capítulo 6, Seção 6). Embora a princípio tenha-se assumido que a forma funcional geral para a solução escalada estacionária fosse Gaussiana, resultados teóricos e simulações computacionais têm demonstrado que o formato Gaussiano é, no máximo, uma aproximação para sistemas com baixa inelasticidade. À medida que a inelasticidade aumenta, a aproximação Gaussiana deixa de ser válida, em particular nas regiões de altas velocidades, as chamadas caudas de alta energia (Capítulo 2, Seção 5).

Em geral, os desvios com relação à distribuição Gaussiana podem ser escritos em termos de uma expansão em polinômios de Sonine (Capítulo 2, Seção 3). Esforços têm sido envidados para calcular os coeficientes desta expansão por meio de procedimentos de truncagem (Capítulo 2, Seção 3), bem como para obtê-los

como função dos momentos estatísticos por meio de simulações computacionais (Capítulo 6). Ainda assim, pode-se dizer que a função de distribuição exata para o modelo permanece desconhecida.

Neste trabalho, nossa motivação inicial será a investigação das propriedades das distribuições de velocidade para gases granulares constituídos por um baixo número de partículas. As distribuições assintóticas para esses sistemas diferem substancialmente daquelas obtidas no limite termodinâmico, quando o número de partículas N tende ao infinito, o que por si só justifica sua investigação detalhada.

Duas são as abordagens simulacionais correntemente utilizadas na literatura para o cálculo de funções de distribuição: Método Direto de Monte Carlo (DSMC) e Dinâmica Molecular (MD) (Capítulo 1, Seção 6). Ambas as abordagens têm fornecido resultados compatíveis com os preditos pela teoria em regimes de baixa inelasticidade. Entretanto, um certo número de problemas permanece aberto, tais como a convergência da expansão em polinômios de Sonine, em regimes de alta inelasticidade (Capítulo 6, Seção 4), e a obtenção dos valores corretos para os coeficientes das exponenciais que caracterizam as caudas de alta energia (Capítulo 6, Seção 6). Aqui, nós utilizaremos uma abordagem simulacional baseada em Dinâmica Molecular, do tipo “event driven” (Capítulo 3, Seção 1). Como condições de contorno para o sistema, usaremos contornos reflexivos e periódicos (Capítulo 3, Seções 2 a 4), e observaremos os diferentes resultados fornecidos (Capítulo 5, Seção 2).

A determinação das funções de distribuição de velocidades em sistemas com baixo número de partículas apresenta algumas dificuldades técnicas. O tratamento estatístico dos dados geralmente é realizado com base em métodos de contagem direta (histogramas) ou algum tipo de ajuste, como o chamado “Kernel estimator technique” (Capítulo 4, Seção 3). Para obter distribuições precisas, essas metodologias necessitam de amostragens numericamente significativas. Esse problema torna-se bastante significativo em intervalos de velocidade muito maiores que a velocidade térmica, onde os desvios para a Gaussiana são mais pronunciados.

O núcleo metodológico deste trabalho consiste em empregar uma técnica que permita, entre outras coisas, transpor essa dificuldade. Para tanto, nós introduzimos o método da *Função Característica Empírica* (Capítulo 4, Seção 3) para medir distribuições. Para caracterizar de modo preciso os afastamentos dessas distribuições com relação à Gaussiana, baseamo-nos no resultado que estabelece que qualquer função característica de uma distribuição com desvio padrão finito pode ser escrita em termos de uma função universal W , conforme introduzido por Paul Lévy (Capítulo 4, Seção 2). Esta função pode ser obtida diretamente dos dados de simulação, independentemente do conhecimento dos momentos estatísticos da distribuição ou dos momentos da expansão de Sonine, mesmo que estes não sejam finitos. A função W caracteriza, assim, de modo único e preciso a distribuição.

A organização geral deste trabalho é a seguinte. No Capítulo 1, fazemos uma pequena introdução à física de sistemas granulares, de modo que uma visão bastante geral dessa área de pesquisa possa ser obtida. O Capítulo 2 é

todo dedicado à apresentação dos principais resultados da Teoria Cinética de Gases Granulares. Para leitores já habituados ao assunto, sugerimos que saltem o capítulo, com a provável exceção da Seção 3, onde discutimos as técnicas associadas à dinâmica do HCS. Também neste capítulo apresentamos uma discussão mais ou menos detalhada da hidrodinâmica de sistemas granulares (Seção 6). Para nós, o resultado fundamental associado encontra-se na Subseção 6.2, onde se obtém os critérios teóricos para a estabilidade do HCS.

O Capítulo 3 é uma apresentação sucinta do método de Dinâmica Molecular. Nele apresentamos esquematicamente o algoritmo implementado e discutimos a questão crucial que envolve as condições de contorno utilizadas.

O Capítulo 4 é um pouco mais técnico, e nele procuramos apresentar os elementos matemáticos envolvidos nas definições de função de distribuição e função característica. As informações deste capítulo serão utilizadas nos capítulos seguintes, sempre associadas ao seu uso como ferramentas de análise estatística dos dados provenientes das simulações. Em particular, é na Seção 2 que introduzimos a definição da função W de Lévy. Na seção 3, apresentamos o importante conceito de Função Característica Empírica.

O Capítulo 5 é dedicado à aplicação das ferramentas previamente definidas para medida e caracterização das distribuições assintóticas do HCS. É nesse capítulo e no próximo que nossas contribuições originais são apresentadas. Uma vez obtidos os dados de simulação, a primeira questão a ser abordada refere-se à convergência de distribuições iniciais gerais para estados estacionários bem definidos. As distribuições assintóticas para sistemas com número finito de partículas diferem substancialmente daquelas obtidas no limite termodinâmico, quando $N \rightarrow \infty$. Utilizaremos a metodologia da função W para demonstrar a existência dessas diferentes distribuições assintóticas estacionárias não-Gaussianas para cada uma das condições fixadas, a saber: (i) número de partículas N , (ii) regime de densidade, caracterizado pelo livre caminho médio do sistema, e (iii) condição de contorno escolhida (reflexiva ou periódica). Como a obtenção da função W é independente da expansão da distribuição em termos de seus momentos, a convergência para um estado assintótico estacionário será obtida para a função de distribuição total. Com esses resultados, procuraremos fornecer evidências que sustentem uma conjectura similar à formulada por Ernst e Brito (Subseção 2.1), segundo a qual as soluções da equação de Boltzmann dissipativa convergem, para condições iniciais gerais, para uma solução escalada estacionária com caudas de alta energia superpopuladas, sugerindo a existência de uma bacia de atração global para o sistema, a despeito da inexistência de um teorema H . O poder da função W para descrever os diferentes estados assintóticos poderá ser avaliado quando se considera as correspondentes funções características ou, equivalentemente, as próprias funções de distribuição. Com base nelas, não é possível distinguir entre os diferentes estados assintóticos associados a cada valor de N . A função W , por outro lado, permite a quebra desta degenerescência e a verificação nítida da existência destes estados.

A Seção 3 do Capítulo 5 aborda o comportamento dos diversos sistemas no chamado limite termodinâmico, ou seja, no limite em que $N \rightarrow \infty$, mantido constante o livre caminho médio do sistema. É nesse limite que se espera que

as descrições teóricas baseadas em equações cinéticas sejam válidas. Uma vez que não se conhece a solução exata da equação de Boltzmann para sistemas inelásticos, espera-se que qualquer solução tentativa (“ansatz”), em qualquer regime de inelasticidade, seja consistente com os resultados provenientes das simulações. Nesse sentido, pode-se usar a função W como um critério de extrema sensibilidade para testar diferentes soluções tentativas. Nesse trabalho, nós utilizaremos a função W para caracterizar o processo de convergência das distribuições assintóticas com número finito de partículas em direção a um único estado assintótico, o qual espera-se que seja independente de N , do livre caminho médio e das condições de contorno implementadas. Como consequência deste estudo, procuraremos fazer uma análise comparativa associada ao uso de diferentes condições de contorno. O que procuraremos demonstrar com base em simulações, e caracterizar com base no uso da função W , é que as condições de contorno impostas não só dirigem o sistema para distribuições assintóticas diferentes, como também apresentam desempenhos diferentes no processo de alcance do limite termodinâmico.

Na Seção 4 do Capítulo 5, ficará clara a importância da manutenção da estabilidade do HCS para alcançar precisão estatística com base nas médias efetuadas ao longo do tempo de cada trajetória evoluída.

O Capítulo 6 é dedicado à medida e cálculo dos coeficientes da expansão polinomial de Sonine. Uma vez que estamos estudando sistemas com baixo número de partículas e seu comportamento no limite termodinâmico, julgamos de interesse responder às seguintes perguntas: (i) Os valores teoricamente calculados para os coeficientes a_2 , a_3 , etc. da expansão de Sonine, obtidos em aproximação linear como função da inelasticidade (Capítulo 2, Seção 3), apresentam-se como bons resultados para sistemas com baixo número de partículas? (ii) Se esse é o caso, em que condições isso acontece? (iii) Se não é o caso, é possível mostrar que, no limite termodinâmico, esses resultados tornam-se válidos? Por meio de simulações diretas, iremos obter os valores dos coeficientes de Sonine e realizaremos as comparações necessárias que possibilitarão a resposta destas perguntas. Com isso, poderemos julgar em que medida os procedimentos de truncagem utilizados para obtenção teórica desses coeficientes são válidos, ou seja, fornecem respostas corretas quando comparadas com as simulações.

Na Seção 4 do Capítulo 6 tratamos do problema associado à expansão da função de distribuição em polinômios de Sonine. Forneceremos evidências de que a expansão é convergente para todo o intervalo de inelasticidades. Para isso, uma vez mais lançaremos mão da função W de Lévy.

Na Seção 5, apresentamos um novo esquema de truncagem para o sistema infinito de equações dinâmicas que regem a evolução dos coeficientes de Sonine. Mostramos em que medida esse novo esquema de truncagem resolve os problemas inerentes ao esquema tradicional. Em particular, obtemos pela primeira vez uma curva para o segundo coeficiente de Sonine acurada para o intervalo de inelasticidades extremas.

Na Seção 6, discutimos uma questão de bastante interesse, relacionada às caudas de alta energia das distribuições assintóticas. Enquanto a parte central da distribuição escalada parece ser bem descrita por desvios relativamente

pouco pronunciados com relação a uma distribuição Gaussiana, principalmente em regimes de baixa inelasticidade, diferenças realmente muito significativas aparecem nas regiões assintóticas de alta velocidade. Nessas regiões, espera-se encontrar uma superpopulação de partículas de mais alta velocidade com forma funcional exponencial. Procuraremos tirar vantagem do fato de que, por meio da construção da Função Característica Empírica, cada ponto de simulação passa a guardar informação global sobre a distribuição. Desse modo, a técnica pode ser utilizada para medir com maior acurácia as distribuições na região das caudas, onde se espera que somente um baixíssimo número de partículas esteja representado.

O Capítulo 7 apresenta nossas conclusões gerais e apresenta as perspectivas de trabalho futuro.

Por fim, nos apêndices mostramos alguns detalhes técnicos envolvidos no cálculo das integrais colisionais, de importância crucial neste trabalho.

Capítulo 1

Sistemas Granulares: uma Introdução

Por longos anos, a tradição da física da matéria condensada considerou que os estados nos quais a matéria usualmente pode ser encontrada são três: gases, líquidos e sólidos. Entretanto, também há muito tempo são conhecidos materiais que desafiam a possibilidade de inserção dentro deste quadro simplificado. À parte a questão, já em si controversa, de se estabelecer convencionalmente categorias estanques de classificação, verificou-se que seria mais relevante, do ponto de vista científico, considerar os diferentes fenômenos coletivos apresentados pelos sistemas físicos encontrados na natureza. Com base nesse conceito geral, foi possível identificar o que até hoje são conhecidos na literatura especializada como materiais granulares [1, 2].

Sistemas granulares são aglomerados suficientemente grandes de partículas discretas, mesoscópicas ou macroscópicas, cuja característica distintiva reside no modo como se processam as interações de contato entre essas partículas, ou seja, por meio de forças dissipativas e altamente repulsivas. A natureza dissipativa das interações está associada tanto às forças de fricção quanto à inelasticidade das colisões. Exemplos bastante comuns são grãos de areia ou de cereais, fragmentos de rochas, pós, terra, etc. As partículas constituintes de um sistema granular podem ou não se apresentar imersas em um fluido usual, ou seja, molecular, o qual, por sua vez, pode ser um líquido ou um gás. Assim, algumas propriedades desses sistemas podem diferir drasticamente, quer se esteja tratando de um sistema “seco” (partículas no vácuo) ou “molhado” (partículas imersas em um fluido). Entretanto, é comum desprezar o fluido intersticial quando sua interação com as partículas é suficientemente fraca. Esse é o caso, em alguns exemplos, quando o fluido intersticial é o ar.

O que torna os sistemas granulares essencialmente diferentes dos demais estados é que, na escala em que seus fenômenos coletivos peculiares se apresentam, não se pode esperar que sejam função direta da constituição molecular do material constituinte de cada grão. Como consequência, um importante resultado,

de relevante aspecto conceitual, contribui para explicar grande parte de suas propriedades típicas: o conceito ordinário de temperatura não desempenha aqui nenhum papel relevante. Em contraste com o caso dos fluidos moleculares, para sistemas granulares a escala de energia termodinâmica torna-se insignificante em favor de escalas dinâmicas, como a da energia potencial gravitacional. Dessa forma, os argumentos termodinâmicos usuais perdem sua validade. Um exemplo é a segregação de partículas de diferentes tamanhos em sistemas submetidos a vibrações ou rotações, o que aparentemente violaria o princípio do não-decrescimento da entropia. Em fluidos moleculares, o conceito de temperatura provê uma escala microscópica de velocidade, dada em função da chamada velocidade térmica. Em sistemas granulares, a única escala de velocidades possível é imposta pelos fluxos macroscópicos de partículas. Apesar disso, ainda assim é possível formular um conceito que guarda certa analogia formal com o de temperatura termodinâmica e possui ampla utilidade no estudo da dinâmica de sistemas granulares. Trata-se da chamada “temperatura granular”, definida em termos da média, tomada sobre o número total de partículas do sistema (“ensemble”), do quadrado das flutuações de velocidade das partículas em torno do campo de velocidade macroscópico em um ponto do espaço de fase [3]. Mais abaixo, voltaremos a tratar pormenorizadamente o conceito de temperatura granular.

Ainda que englobados sob uma mesma denominação, sistemas granulares em geral podem apresentar uma enorme diversidade de fenômenos. Alguns deles guardam analogias com fenômenos tipicamente associados aos sólidos, gases e líquidos, embora apresentem sempre um aspecto peculiar ou surpreendente, como a violação de alguma lei termodinâmica ou hidrodinâmica usual. Há situações em que podem ser tratados como um sólido, como nas pilhas de areia em repouso, embora evidentemente não possuam qualquer traço de estrutura cristalina. Se vista como um fluido em equilíbrio, entretanto, uma pilha de grãos em um silo de armazenamento não satisfaz a uma relação linear entre pressão e altura do reservatório, como seria de se esperar no caso de fluidos moleculares. Por outro lado, uma pilha de grãos sobre um plano de inclinação variável pode apresentar o fenômeno das avalanches, em que o escoamento das partículas remete ao comportamento usual de fluidos fora do equilíbrio. Entretanto, ao contrário dos fluxos de fluidos moleculares, para pequenas inclinações do plano o escoamento acontece apenas nas camadas superficiais da pilha, enquanto as partículas das camadas mais internas tendem a permanecer em repouso [1, 2].

Outro problema típico de sistemas granulares é o de empacotamento [4]. No processo de preenchimento de um recipiente com grãos de uma determinada dimensão, verifica-se que as frações volumétricas de ocupação ao final do processo podem variar substancialmente, a depender do modo como o preenchimento foi realizado. Por meio de forças de fricção estática, formações de cadeias lineares de partículas podem manter o sistema em uma configuração metaestável. Uma vez que flutuações térmicas são irrelevantes, somente forças externas, como vibrações, podem promover um rearranjo do sistema. Em particular, foi observado que o processo de relaxação nesses casos é logarítmico, como resultado do efeito de volumes excluídos [1].

Sistemas granulares podem escoar como fluidos e existe uma variedade de modelos teóricos para descrevê-los. É comum referir-se a estes modelos como hidrodinâmica granular, uma vez que são fundamentados em equações diferenciais parciais análogas às equações de Navier-Stokes. Como se sabe, as equações da hidrodinâmica de fluidos moleculares são construídas em um processo de tomada de média sobre escalas de tempo e comprimento que são assumidas como sendo muito maiores que as escalas microscópicas típicas e muito menores que as macroscópicas. Entretanto, uma das propriedades básicas dos sistemas granulares é a falta de separação entre essas duas escalas [3]. Isso comprometeria, em princípio, a validade de qualquer descrição hidrodinâmica para sistemas granulares. Apesar disso, uma descrição hidrodinâmica pode ser aparentemente justificada, ao menos para sistemas caracterizados pela baixa inelasticidade [3]. Verifica-se que, em inúmeros casos, configurações especiais de fluxos em gases granulares são relativamente bem descritas pelas equações da hidrodinâmica granular (ver seção abaixo).

Uma outra classe de fenômenos interessantes e bastante estudados, tanto experimental quanto teoricamente, é o da convecção e o do empilhamento induzidos por vibrações. Um recipiente de seção transversal constante e preenchido com grãos, quando agitado verticalmente sob ação da gravidade com amplitude e frequência específicas, apresenta um movimento coletivo constituído por rolos convectivos que transportam grãos próximos às paredes do recipiente para baixo e grãos do centro para cima. Esses fluxos promovem um empilhamento na parte central da superfície livre do sistema, o qual é seguido por eventuais avalanches. Recipientes de diferentes formas, bem como o atrito entre as partículas e entre estas e as paredes do recipiente, dentre outros fatores, podem influir na inversão do sentido do fluxo convectivo. Se o sistema for constituído de partículas de diferentes tamanhos, estas tendem a se separar, com as partículas maiores movendo-se para cima, independentemente de sua densidade. Daí, em sistemas granulares, a agitação não induz misturas. Em contraste com líquidos ordinários, onde o crescimento da entropia favorece um estado de mistura homogênea, nos sistemas granulares fatores dinâmicos são preponderantes e levam à separação de fases (“Brazil nut effect” [5]). Dentre os problemas parcialmente abertos e ainda hoje discutidos envolvendo esses fenômenos, pode-se destacar os seguintes: quais seriam os mecanismos que efetivamente promovem o fluxo convectivo?; qual é o papel desempenhado pelo fluido intersticial eventualmente existente? e, principalmente, qual é o mecanismo que promove a segregação de partículas? [1]. Além dos padrões convectivos apresentados pela parte central do sistema, a sua superfície livre pode ainda exibir diferentes tipos de fenômenos ondulatórios. Estes também foram abordados dentro de uma perspectiva hidrodinâmica [3].

1.1 Gases Granulares

Sistemas granulares em situações de empacotamento ou em pilhas em repouso guardam certas semelhanças com sólidos. De forma análoga, sistemas granu-

lares densos em fluxos convectivos guardam algumas semelhanças com líquidos. Por outro lado, a consideração de sistemas cada vez mais rarefeitos (fração volumétrica baixa), contidos em recipientes onde o papel da gravidade tenha sido total ou parcialmente neutralizado, conduz a sistemas que podem passar a apresentar comportamentos similares a aqueles apresentados por gases moleculares, uma vez que os grãos passam a percorrer trajetórias balísticas e a interagir por colisões aproximadamente instantâneas e binárias, em sua esmagadora maioria. Exemplos de sistemas rarefeitos desse tipo podem ser encontrados em anéis planetários, caso em que as partículas estão submetidas a uma fonte central de gravidade e, portanto, aprisionadas em um “recipiente” constituído por um poço de potencial, e também na poeira interestelar, que remete ao comportamento de um gás livre em expansão [3].

A diferença crucial entre gases ou líquidos moleculares e os sistemas granulares análogos reside na interação dissipativa entre os grãos e a conseqüente perda de energia do sistema. O destino natural de um sistema granular isolado, isto é, livre de forças externas, é, portanto, atingir o repouso, quando toda a sua energia cinética converter-se em calor pela excitação de graus internos de liberdade de cada partícula. Assim, durante sua evolução rumo ao repouso, o sistema permanece sempre fora do equilíbrio, no sentido termodinâmico, e a teoria dos gases ideais, apropriada para sistemas elásticos, perde completamente sua validade. Uma maneira de evitar o repouso do sistema é supri-lo de energia externamente. A agitação do sistema por meio de vibrações, como citado acima, é um desses modos. Essa e outras maneiras de promover a chamada “fluidização” do sistema granular deram origem ao que se convencionou chamar de “fluxos granulares rápidos”, uma denominação que, mais recentemente, cedeu lugar ao termo “gases granulares”, denominação pela qual passaremos a tratar os sistemas de interesse a partir de agora [3].

Com base nas características explicitadas, pode-se enfim apresentar uma definição estrita de gases granulares. *Gases granulares são sistemas granulares diluídos, ou seja, sistemas de muitas partículas cuja interação recíproca se dá por meio de colisões binárias, instantâneas e dissipativas, cujo livre caminho médio é muito maior que o tamanho típico de uma partícula* [6]. Esta condição implica que a duração do contato entre as partículas durante o processo de colisão é muito menor do que o tempo médio de vôo entre colisões. Como as colisões ocorrem dissipativamente, de modo que em cada colisão binária ocorre a perda de parte da energia do sistema, o sistema tende a “resfriar-se”, atingindo o repouso, a menos que uma fonte externa de energia seja suprida. A energia dissipada, por sua vez, é usada para aquecer as partículas, promover deformações plásticas e até mesmo para provocar fraturas e rupturas.

A dissipação da energia cinética em gases granulares é a responsável pela produção de uma série de efeitos interessantes e não triviais. Dentre esses efeitos, podemos citar não somente os fenômenos de colapso inelástico e de formação de aglomerados (“clusters”) e microestruturas em geral, tipicamente associados a sistemas granulares, como também os de formação de vórtices e padrões mais complexos nos fluxos associados ao campo de velocidades, estes característicos da hidrodinâmica de fluidos moleculares.

1.2 Colapso Inelástico

O fenômeno de colapso inelástico acontece quando teoricamente um número infinito de colisões se dá em um intervalo de tempo finito. Um exemplo elementar é suficiente para esclarecer o conceito. Quando uma bola cai de uma certa altura h sobre um piso rígido e plano, pode-se observar que, em decorrência de colisões inelásticas mediadas por um coeficiente de restituição α (com valor constante entre 0 e 1), a bola alcança sucessivamente alturas cada vez menores. A soma total dos tempos despendidos para que a bola alcance as alturas máximas após cada colisão é dada por $\sum_{n=1}^{\infty} \tau_0 \alpha^n$, onde τ_0 é o tempo necessário para alcançar pela primeira vez a altura máxima. Esta soma é finita, por tratar-se de uma série geométrica de razão menor que um. Um processo similar a esse pode acontecer em sistemas de gases granulares, levando à formação de cadeias lineares de partículas cuja velocidade relativa torna-se nula. O processo de colapso inelástico foi extensivamente estudado por McNamara e Young, tanto em uma [7] como em duas dimensões [8, 9].

Em simulações de Dinâmica Molecular uni- e bidimensionais, o colapso inelástico sempre representa um problema, já que a evolução do sistema como um todo pára, com exceção das teoricamente infinitas colisões entre os membros da cadeia colapsada. Uma série de artifícios engenhosos foi criada para evitar esse problema, tais como passar a considerar as colisões como elásticas quando a velocidade relativa das partículas colidentes cai abaixo de certo valor. Curiosamente, em modelos colisionais mais realísticos, o coeficiente de restituição é de fato dependente da velocidade relativa das partículas colidentes. Como consequência, o colapso inelástico é naturalmente evitado.

Apesar destas dificuldades, na maioria dos sistemas tridimensionais o colapso inelástico dificilmente acontece. Isso porque uma partícula externa ao plano definido pela cadeia colapsada eventualmente surge para promover a sua quebra. Em particular, as simulações deste trabalho são todas realizadas em três dimensões, de modo que não precisaremos nos ocupar mais do problema do colapso inelástico.

1.3 Formação de Microestruturas e “Clusters”

No contexto da teoria de gases granulares, microestruturas são inhomogeneidades espaciais na densidade de partículas que podem ocorrer em escala mesoscópica. Muito embora gases moleculares também possam apresentar ligeiras inhomogeneidades em sua densidade, as microestruturas granulares são qualitativamente bastante distintas, apresentando grande variedade nos formatos, nos processos e mecanismos de formação, e em sua evolução temporal.

Mais particularmente, “clusters” são aglomerados desse tipo, mas que apresentam alta densidade e cuja formação é peculiar à evolução inelástica de um gás granular. Entretanto, deve-se ter em mente que colapso inelástico e “clusterização” são fenômenos distintos, embora “clusters” possam vir a ser precursores de estruturas colapsadas [1, 3].

“Clusters” podem surgir em gases granulares submetidos a quaisquer condições, independentemente da presença ou não de uma fonte externa de energia que impeça o sistema de atingir o repouso. O mecanismo associado à formação de “clusters” foi intuitivamente elucidado por Goldhirsh e Zanetti [10]. Segundo esses autores, em uma região em que a densidade de partículas eventualmente aumente em decorrência de flutuações, ou seja, sem correspondente aumento da temperatura granular local, automaticamente ocorre um aumento na frequência de colisões em relação à vizinhança. Como decorrência da inelasticidade das colisões, a temperatura na região mais densa começa a decrescer em uma taxa maior do que a da vizinhança, o que contribui para que a pressão na região também caia. O gradiente de pressão resultante irá conduzir as partículas da vizinhança para a região mais densa, o que resultará em aumento ainda maior de sua densidade e maior decréscimo da pressão. Portanto, uma vez iniciada, uma flutuação na densidade de partículas promoverá a formação de um “cluster”, contanto que eventuais mecanismos hidrodinâmicos - que poderiam provocar a dispersão do aglomerado - possuam escalas temporais mais lentas que as do processo de “clusterização”.

“Clusters” não são objetos estacionários. Há uma dinâmica própria envolvida em seu crescimento e movimentação, bem como interações entre os vários “clusters” formados. Eles podem girar em virtude de fluxos rotacionais (vórtices), colidir uns com os outros e destruir-se mutuamente, com a conseqüente dispersão das partículas que os formavam. Como são objetos com temperatura granular relativamente baixa, uma vez criados eles podem persistir durante longos tempos, a menos que venham a interagir com outros “clusters”. Talvez o aspecto mais notável no processo de “clusterização”, que é também observado no colapso inelástico, é que ele em geral produz configurações de partículas em forma de longas cadeias, ao invés de aglomerados irregulares mais concentrados [1, 3]. Esses padrões de aglomeração remetem aos mapas de densidade do universo visível [10]. Nesse caso, é possível especular inclusive que o potencial gravitacional atrativo cumpre o papel de um recipiente, mantendo a densidade de partículas suficientemente alta para a formação de “clusters”. Em escalas suficientemente grandes, as estruturas criadas por repetidas colisões inelásticas podem ser responsáveis pela aglomeração observada em “gases” de partículas interestelares, levando à formação de galáxias e estruturas afins.

O fenômeno de “clusterização” pode ser compreendido como um processo de quebra da estabilidade hidrodinâmica do gás granular [11] e, de fato, simulações computacionais usando Dinâmica Molecular [10] e Método Direto de Monte Carlo [11] demonstram que o processo de esfriamento de um gás granular inicialmente homogêneo é, em geral, instável, produzindo espontaneamente “clusters” de alta densidade. Entretanto, esse é um processo totalmente dependente da dimensão do sistema considerado. Pode ser demonstrado [10, 23] que a formação de “clusters” é impossível em sistemas suficientemente pequenos, ou seja, quando as dimensões do recipiente são reduzidas quando comparadas ao livre caminho médio das partículas.

Posteriormente, iremos discutir a hidrodinâmica de gases granulares (Seção 6 do Capítulo 2) e estudaremos com um pouco mais de detalhe o assunto rela-

cionado à estabilidade. Esse tema possui relevância para o presente trabalho, uma vez que estamos interessados em garantir que os sistemas simulados no regime de esfriamento homogêneo - HCS, definido na Seção 2 do Capítulo 2 - sejam completamente estáveis. Desse modo, processos de formação e evolução de “clusters”, assim como de colapso inelástico, não precisarão ser mais abordados no que se segue.

1.4 Fluxos e Padrões no Campo de Velocidades

Quase todos os tipos de fluxos normalmente estudados na hidrodinâmica de fluidos moleculares tiveram seus análogos investigados no contexto da teoria de gases granulares. Isto inclui fluxos de Poiseuille, fluxos de Rayleigh-Taylor, convecção de Rayleigh-Benard em plataformas vertical e horizontalmente submetidas a vibração, instabilidades de Kelvin-Helmholtz, fluxos de Couette e de Taylor-Couette, ondas de superfície, fenômeno de formação de “dedos”, etc. Para um conveniente apanhado das referências relacionadas a esses tópicos, ver o já amplamente citado artigo de revisão de Goldhirsh [3].

Já tivemos a oportunidade de chamar a atenção para o fato de que a hidrodinâmica de gases granulares carece de bases sólidas para se estabelecer sem restrições, em função da inerente ausência de separação de escalas que caracteriza sistemas granulares. Entretanto, em muitos casos verifica-se um bom acordo entre teoria e experimento. Não está claro se isso se deve à validade da descrição hidrodinâmica, ao menos em escalas específicas, ou se as equações hidrodinâmicas já incluem ingredientes físicos suficientes para explicar certas classes de fenômenos. Um exemplo do que se quer dizer com ingredientes físicos suficientes é o da convecção de Rayleigh-Benard. É bem compreendido que esta convecção é dirigida pela força de gravidade, como resultado das diferenças de densidade entre elementos de fluido mais ou menos próximos à fonte de calor, em oposição ao fluxo de calor e à viscosidade. Portanto, qualquer modelo que possua estes elementos, independentemente de sua correção em princípio, deve reproduzir alguns dos efeitos observados na convecção de Rayleigh-Benard em sistemas granulares.

Em particular, nesse trabalho, não nos ocuparemos com o estudo de formação de padrões no campo de velocidades, uma vez que esse é um fenômeno tipicamente hidrodinâmico. Como ficará claro, nosso interesse principal é na distribuição de velocidades das partículas do gás granular, cujo estudo pertence primordialmente à esfera das teorias cinéticas.

1.5 Métodos Experimentais

Uma grande variedade de métodos experimentais, que vão desde os mais simples - como a contagem de grãos que caem de um plano inclinado para determinar a taxa do fluxo de partículas - até os mais sofisticados - como o uso de equipamentos e técnicas para fazer rastreamento óptico e nuclear de suas trajetórias -

têm sido empregados para testar teorias, observar e descobrir novos fenômenos na área [3]. Entre as técnicas mais recentemente incorporadas, estão os métodos de Ressonância Magnética Nuclear, o método de rastreamento de partículas por emissão de pósitrons, velocimetria de imagens e sistemas de gravação de vídeo ultra-rápidas [3]. Em muitos casos, experimentalistas são capazes de seguir os movimentos de cada uma das partículas, o que possibilita testes experimentais diretos das predições teóricas.

1.6 Métodos Computacionais

Sistemas granulares em geral, e gases granulares em particular, são notórios pelas dificuldades que impõe ao experimentador. Por esta razão, desde muito cedo foram utilizados métodos computacionais para testar previsões teóricas e simular modelos de interação [3]. Embora simulações computacionais não cheguem a substituir experimentos físicos, elas representam uma excelente solução de compromisso entre as imensas dificuldades de se realizar um experimento com sistemas granulares reais e a necessidade de se introduzir modelos bastante simplificados para tratá-los analiticamente. De fato, poucos problemas em mecânica estatística são exatamente solúveis. Isso significa que a especificação completa das propriedades microscópicas de um sistema não conduz diretamente a um conjunto de propriedades macroscópicas relevantes. Nesse aspecto, simulações computacionais desempenham um papel significativo ao fornecerem essencialmente soluções exatas para certas classes de problemas em mecânica estatística em que talvez somente métodos de aproximação muito severos poderiam gerar algum resultado. Desse modo, simulações computacionais provêm uma rota direta entre os detalhes microscópicos de um sistema (a massa das partículas, suas interações e geometrias específicas, etc.) e as quantidades macroscópicas de interesse experimental (equações de estado, coeficientes de transporte, parâmetros de ordem, etc.).

A construção de uma teoria geral para a dinâmica de sistemas granulares é uma tarefa extremamente difícil. O que o teórico tem a sua disposição são, no máximo, modelos simplificados que procuram representar algumas das características mais relevantes de sistemas reais bastante específicos, em situações também consideradas muito específicas. Ainda assim, tais modelos podem deixar muito a desejar e suas previsões podem afastar-se bastante do que de fato é observado. Dessa forma, a distância entre teoria e experimento pode ser gigantesca. Nesse sentido, simulações computacionais desempenham um papel importante ao contribuírem para diminuir essa distância, pois se intercalam entre o campo experimental e o analítico tomando de cada um aquilo que eles têm de mais vantajoso. Por um lado, simulações computacionais podem fazer as vezes de sistemas experimentais em que todas as hipóteses assumidas nos modelos teóricos simplificados são de fato satisfeitas. Além disso, computacionalmente todas as condições de contorno podem ser controladas com total precisão. Nesse sentido, simulações passam a ser o único teste direto de teorias e modelos teóricos. Por outro lado, a depender da engenhosidade do programador,

não há limites práticos para a capacidade de fazer uma simulação computacional reproduzir os aspectos qualitativos mais relevantes de experimentos intrincados. Mesmo que o seja com forte aporte fenomenológico, muitos ingredientes físicos de fenômenos observados são muito mais facilmente introduzidos e testados via simulações de computador. Cumpre, entretanto, citar que as áreas analítica, experimental e computacional não são estanques. Os métodos e resultados característicos de cada uma delas podem e são usados para promover avanços nas demais.

As abordagens computacionais canonicamente encontradas nessa área de pesquisa são duas: Métodos de Monte Carlo (MC) e Dinâmica Molecular (“Molecular Dynamics” - MD) [12, 13]. Os métodos de Monte Carlo são na verdade muito variados, mas todos eles compartilham a característica de serem fortemente baseados no uso de números aleatórios por meio do chamado algoritmo de Metropolis [13]. São utilizados para solução de problemas bastante diversos, como integração numérica de funções, por exemplo. No caso de sistemas granulares, em sua maioria são procedimentos numéricos para solucionar a equação de Boltzmann. Brey e colaboradores usaram o chamado Método Direto de Monte Carlo (“Direct Simulation Monte Carlo” - DSMC) com essa finalidade [14]. Pouco tempo depois, usaram uma versão simplificada do mesmo método para investigar as chamadas caudas de alta energia não-Gaussianas na distribuição de velocidades de um gás granular em esfriamento homogêneo [15], assunto do qual trataremos mais adiante (Seção 5 do Capítulo 2).

Bastante distintos são os métodos de Dinâmica Molecular (MD), nome originalmente utilizado para descrever processos de solução numérica das equações de movimento clássicas (equações de Newton) para um conjunto de moléculas [12, 13]. Dentre eles, o método de simulação chamado “event driven” (Seção 1 do Capítulo 3) possibilitou um grande aumento da eficiência computacional. Em razão disso, foi imediatamente aplicado aos problemas de dinâmica granular, tipicamente muito exigentes deste ponto de vista. Essa inovação permitiu que se passasse do tratamento de sistemas com um número de partículas da ordem de 10^2 para sistemas muito maiores, da ordem de, por exemplo, 10^6 [3]. A partir disso, Dinâmica Molecular passou a ser o principal instrumento para pesquisa de modelos teóricos e medidas de funções de distribuição em gases granulares [16, 17], [18]-[20].

Existem muitas diferenças entre Dinâmica Molecular e Método de Monte Carlo. Por um lado, Monte Carlo tem demanda computacional menor e, portanto, possibilita maior desempenho, permitindo simular sistemas da ordem de $10^6 - 10^7$ partículas em computadores de média capacidade. Entretanto, ele não permite estudar a dinâmica de gases granulares de forma independente da equação de Boltzmann, uma vez que ambos partem dos mesmos pressupostos. O Método de Monte Carlo supõe, como a equação de Boltzmann, a inexistência de correlações entre as velocidades pré-colisionais (“caos molecular”) e, desse modo, não provêem uma real validação da teoria cinética subjacente [21]. Simulações realizadas via Dinâmica Molecular são, por outro lado, computacionalmente muito mais exigentes, mas reproduzem a dinâmica exata do sistema. Desse modo, estão livres das suposições típicas de uma teoria estocástica, sendo uma

ferramenta muito mais adequada no estudo e verificação de teorias e modelos cinéticos.

Por este motivo, neste trabalho as simulações serão todas realizadas com Dinâmica Molecular, do tipo “event driven”, e no Capítulo 3 faremos uma descrição pormenorizada deste método.

Capítulo 2

Teoria Cinética de Gases Granulares

Os conceitos básicos segundo os quais gases granulares podem ser considerados como coleções de partículas com raio de interação curto, movendo-se balisticamente e sofrendo colisões binárias, instantâneas, fortemente repulsivas e inelásticas, foram todos formulados no artigo seminal de Haff intitulado “*Grain flow as a fluid mechanical phenomenon*” [22]. Este artigo lançou as bases para o uso dos métodos típicos da teoria cinética na área de gases granulares. Tais métodos foram desenvolvidos posteriormente para definir e calcular grandezas como temperatura granular, pressão, funções de distribuição e coeficientes de transporte nas duas décadas de pesquisa subseqüentes [23]-[28].

A formulação de uma teoria matemática para gases granulares envolve a definição de modelos colisionais adequados. Esses modelos, em larga medida, são idealizações mais ou menos razoáveis sobre como deve ser a forma das partículas e como devem ser reguladas a perda de energia e a troca de momentos linear e angular nos choques entre elas. Claramente, não há esperança de que qualquer gás granular real possa ser precisamente descrito com base em tais simplificações. Contudo, o importante não é tanto uma precisão quantitativa absoluta, mas sim a capacidade do modelo de reproduzir qualitativamente fenômenos tipicamente associados a esse tipo de sistemas.

Os modelos colisionais mais básicos são aqueles que assumem partículas de formato esférico, lisas e inelásticas, as quais seguem trajetórias livres (com a possível exceção da interação com um campo externo, como a gravidade) até que uma colisão ocorra. Sendo lisas, não existe troca de momento angular entre as partículas durante o choque, mas tão somente de momento linear. No quesito inelasticidade, podem ser rígidas ou macias. No modelo envolvendo esferas macias, as partículas interagem através de uma repulsão elástica muito forte. A perda de energia se dá durante o contato, em um tempo finito, mas bastante curto, por meio de uma força friccional proporcional à velocidade relativa das partículas [29, 30]. No modelo de esferas rígidas, a perda de energia é instantânea

e regulada por um coeficiente de restituição normal α , assumindo valores entre 0 e 1. O decréscimo da velocidade relativa das partículas ocorre somente na direção radial. No caso de $\alpha = 0$, tem-se uma colisão totalmente inelástica, onde as partículas se unem em uma só, enquanto para $\alpha = 1$, tem-se o caso da colisão elástica. Na situação mais simplificada, o coeficiente de restituição normal é assumido ser constante [8, 10, 27, 29]. Entretanto, considerações físicas e resultados experimentais mostram que, em geral, o coeficiente de restituição é função da velocidade relativa das partículas, como no caso do chamado modelo viscoelástico [31].

A dinâmica e a cinemática de esferas macias têm sido largamente discutidas na literatura, mas uma teoria cinética para a função de distribuição de uma partícula não é bem desenvolvida para esse modelo. Já no caso de esferas rígidas, um bom corpo de teoria, baseado fundamentalmente na equação de Enskog-Boltzmann, já se encontra à disposição [23, 17, 24, 26, 27, 29].

Um passo adiante na sofisticação dos modelos colisionais é a inclusão de forças de fricção associadas ao escorregamento relativo das partículas, o que conduz à consideração da rotação e da troca de momentos angulares entre elas, bem como à introdução de um segundo coeficiente, associado à rugosidade, chamado de coeficiente de restituição tangencial, para modelar as dissipações neste caso [24, 32, 33]. De forma similar ao caso do coeficiente α , associado à inelasticidade, também o coeficiente de rugosidade é por vezes assumido constante. Entretanto, sabe-se que, de fato, possui uma dependência múltipla com relação ao coeficiente de atrito entre as superfícies deslizantes, bem como com relação a ambas as componentes, normal e tangencial, da velocidade relativa entre as partículas.

Por fim, pode-se também relaxar a exigência de partículas com formato esférico e tratar partículas com formatos mais complicados, tais como bastões [34, 35]. A consideração de modelos colisionais cada vez mais sofisticados coloca dificuldades gradativamente maiores, tanto do ponto de vista matemático quanto do simulacional. Entretanto, permitem a descrição e a descoberta de fenômenos presumivelmente mais realísticos. Apesar disso, por sorte o modelo colisional mais simples que pode ser considerado, ou seja, o das esferas rígidas, lisas e com coeficiente de restituição normal α constante, já apresenta todas as características mais importantes que distinguem os gases granulares dos fluidos moleculares. Por esse motivo, ao longo deste trabalho, este será o único modelo colisional adotado.

Portanto, para efeito da descrição que se segue, passamos a considerar o problema mecânico da troca de velocidades entre esferas rígidas em uma colisão binária como sendo dado de acordo com a expressão:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^* &= \mathbf{v}_i - \frac{1 + \alpha}{2}(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \\ \mathbf{v}_j^* &= \mathbf{v}_j + \frac{1 + \alpha}{2}(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij},\end{aligned}\tag{2.1}$$

onde \mathbf{v}_i^* e \mathbf{v}_j^* são as velocidades das partículas imediatamente após uma colisão,

\mathbf{v}_i e \mathbf{v}_j são suas velocidades pré-colisionais, $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ é a sua velocidade relativa e

$$\mathbf{e}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.2)$$

é o vetor unitário ao longo do eixo que une os centros das partículas i e j , com \mathbf{r}_i o vetor posição da i -ésima partícula. Como fica claro, somente a mudança da velocidade relativa ao longo da direção radial de uma colisão é considerada para o decréscimo da energia do sistema:

$$\Delta E = -\frac{1}{4}(1 - \alpha^2)(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})^2. \quad (2.3)$$

2.1 A Equação de Enskog-Boltzmann

Seja um sistema tridimensional composto por N partículas esféricas, rígidas e lisas, de diâmetro a e massa m , interagindo por meio de colisões instantâneas com coeficiente de restituição normal constante α , conforme a equação 2.1. Devemos considerar a evolução temporal da função de distribuição para N partículas $\rho_N(\mathbf{x}, t)$, com $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$, onde $x_i = \{r_i, v_i\}$ representa um ponto no espaço de fase. Para sistemas Hamiltonianos, a evolução temporal é dada pela equação de Liouville, que descreve o fluxo incompressível da distribuição no espaço de fase. No caso de sistemas dissipativos, por outro lado, os volumes no espaço de fase contraem-se ao longo do fluxo.

Para desenvolver a mecânica estatística fora do equilíbrio deste sistema, é necessário identificar o gerador da dinâmica no espaço de fase. Uma vez que as velocidades mudam instantaneamente, a força associada à aceleração de cada partícula passa a ser singular, e uma formulação um pouco diferente tem que ser feita neste caso. Além disso, para partículas rígidas com dimensão finita, a dinâmica é indefinida para uma parte do espaço de fase que permanece fisicamente inacessível, correspondente aos pontos onde as esferas se interpenetram. Não entraremos nos detalhes da dedução neste caso, que pode ser encontrada em [26]. Aqui, nos limitaremos a estabelecer como ponto de partida da descrição cinética a chamada pseudo-equação de Liouville para sistemas livres de forças externas:

$$\partial_t \rho_N + \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \rho_N = \sum_{i < j} \bar{T}_{ij} \rho_N, \quad (2.4)$$

com \bar{T}_{ij} o operador de colisão para duas partículas:

$$\begin{aligned} \bar{T}_{ij} \rho_N &= a^2 \int d\mathbf{e}_{ij} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}) \Theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}) \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \delta(\mathbf{r}_{ij} - a\mathbf{e}_{ij}) \rho_N(\mathbf{r}_k, \mathbf{v}_k^{**}) - \delta(\mathbf{r}_{ij} + a\mathbf{e}_{ij}) \rho_N(\mathbf{r}_k, \mathbf{v}_k) \right\}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

que representa as interações entre as esferas rígidas e podem ser consideradas “pseudo-forças” entre os pares de partículas [29]. Daí o nome pseudo-equação de Liouville.

Em colisões diretas, a velocidade relativa inicial \mathbf{v}_{ij} resulta na velocidade pós-colisional dada por 2.1 ou, equivalentemente, $\mathbf{v}_{ij}^* \cdot \mathbf{e}_{ij} = -\alpha(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij})$. O termo positivo na equação 2.5, chamado termo de ganho, entretanto, descreve colisões inversas. As velocidades representadas por \mathbf{v}_k^{**} referem-se às velocidades pré-colisionais na chamada colisão inversa, que resultam em \mathbf{v}_k como velocidades pós-colisionais com $\mathbf{v}_{ij}^{**} \cdot \mathbf{e}_{ij} = -(1/\alpha)(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij})$. $\Theta(x)$ é a função de Heaviside, que garante que a integração seja realizada respeitando a condição $\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} > 0$, já que somente partículas que efetivamente se aproximam umas das outras devem ser levadas em consideração para o cômputo da taxa de colisão. $\delta(x)$ é a função delta de Dirac, e garante que a colisão entre as partículas se dá com seus centros separados por uma distância a .

Uma representação equivalente da evolução temporal do sistema pode ser dada em termos das funções de distribuição reduzidas para s partículas, com $s < N$ [36]. O procedimento usual de integração sobre uma parte do espaço de fase conduz à hierarquia BBGKY para as funções de distribuição reduzidas [36]. A primeira equação da hierarquia pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1 + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \rho_1 = a^2 \int d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \times \\ \times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \rho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1^{**}, \mathbf{r}_1 - a\mathbf{e}_{12}, \mathbf{v}_2^{**}, t) - \rho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1 + a\mathbf{e}_{12}, \mathbf{v}_2, t) \right\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Esta equação contém a função de distribuição de pares de partículas ρ_2 .

Para obter uma equação fechada para a função de distribuição de uma partícula ρ_1 , uma relação que expresse ρ_2 em função de ρ_1 deve ser fornecida. O método básico para isso é implementar a suposição de “caos molecular” de Boltzmann - também chamada aproximação de campo médio - requerendo que as velocidades de duas partículas imediatamente antes de uma colisão sejam descorrelacionadas ou, o que é equivalente, que a função de distribuição de pares possa ser fatorada da seguinte forma:

$$\rho_2 = \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) \rho_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t). \quad (2.7)$$

Para que essa suposição seja satisfeita, é suficiente que nenhuma partícula colida mais do que uma vez com qualquer outra partícula durante a evolução temporal de ρ_1 , embora isso não seja estritamente necessário. Em qualquer caso, é evidente que essa suposição só é válida no limite de gases diluídos. Quando a densidade aumenta, a suposição de “caos molecular” é violada.

A equação de Boltzmann é obtida da equação 2.6, substituindo a equação 2.7 e desprezando a separação espacial entre as partículas colidentes, uma vez que se assumiu o limite de baixas densidades:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1 + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \rho_1 &= a^2 \int d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1^{**}, t) \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2^{**}, t) - \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t) \right\} \equiv a^2 I(\rho_1, \rho_1). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Doravante faremos uma simplificação notacional e a função de distribuição de uma partícula será representada apenas por $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Existe uma diferença digna de nota entre a equação 2.8 e a equação de Boltzmann para o caso elástico, a saber, a ocorrência do fator $1/\alpha^2$ no termo de ganho. Um fator $1/\alpha$ vem do Jacobiano $d\mathbf{v}_1^{**} d\mathbf{v}_2^{**} = (1/\alpha) d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2$. O outro fator $1/\alpha$ vem da própria lei de troca de velocidades $\mathbf{v}_{ij}^{**} \cdot \mathbf{e}_{ij} = -(1/\alpha)(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij})$.

A chamada equação de Enskog-Boltzmann resulta de uma extensão semi-fenomenológica da equação de Boltzmann para o caso de fluidos densos. Ela é obtida alterando a prescrição básica do “caos molecular”:

$$\rho_2 = \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + n) \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t), \quad (2.9)$$

de modo a incluir a função de correlação de pares de partículas no contato, $\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + n) = \frac{(2-\eta)}{2(1-\eta)^3}$ [37]. Nessa expressão, η é a fração volumétrica $\eta = \frac{\pi n a^3}{6}$. Esta versão estendida do “caos molecular” ainda desconsidera as possíveis correlações nas velocidades, mas permite considerar correlações estáticas de curtíssimo alcance, causadas por efeitos devidos ao tamanho finito das partículas e, conseqüentemente, do volume excluído.

2.2 Estado de Esfriamento Homogêneo (HCS)

Em termos gerais, a evolução temporal de um sistema granular é essencialmente caracterizada por sua perda contínua de energia. No limite $t \rightarrow \infty$, as partículas tendem a atingir velocidade nula e o sistema atinge o repouso. Portanto, a função de distribuição de velocidade tende a estreitar-se em torno de uma função delta de Dirac. A situação física mais simples que pode ser considerada para a evolução de um gás granular é representada por um gás bastante diluído, inicialmente distribuído de forma homogênea no espaço, em processo de esfriamento livre, ou seja, na ausência de forças externas. Se for possível que, durante sua evolução, o sistema permaneça espacialmente homogêneo, então estaremos diante do regime de evolução conhecido por Estado de Esfriamento Homogêneo - “Homogeneous Cooling State” (HCS). Nesse estado, a função de distribuição passa a depender exclusivamente das velocidades.

A dinâmica da distribuição de velocidades para o sistema no HCS é dada pela equação de Enskog-Boltzmann homogênea:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{v}_1, t) = & \chi a^2 \int d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \\ & \times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \rho(\mathbf{v}_1^{**}, t) \rho(\mathbf{v}_2^{**}, t) - \rho(\mathbf{v}_1, t) \rho(\mathbf{v}_2, t) \right\} \equiv \chi a^2 I(\rho, \rho). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Note que, no caso espacialmente homogêneo, a única diferença entre a equação de Boltzmann para sistemas diluídos e a de Enskog-Boltzmann para sistemas densos é a presença do fator χ , que cumpre o papel de aumentar a frequência de colisões em sistemas densos, em virtude de efeitos devidos ao volume excluído.

Para referência posterior, nós iremos também escrever a equação para a evolução temporal da média de uma função g : $\langle g \rangle = \frac{1}{n} \int d\mathbf{v} g(\mathbf{v}) \rho(\mathbf{v}, t)$, onde $n = \int d\mathbf{v} \rho(\mathbf{v}, t)$ é a densidade de partículas, ou seja, o número de partículas por unidade de volume. Da equação acima, segue-se [27]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle g \rangle = & \frac{\chi a^2}{2n} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \\ & \times \rho(\mathbf{v}_1, t) \rho(\mathbf{v}_2, t) \Delta[g(\mathbf{v}_1) + g(\mathbf{v}_2)], \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde $\Delta g(\mathbf{v}_i) = g(\mathbf{v}_i^*) - g(\mathbf{v}_i)$. Esta fórmula é de grande utilidade nas deduções a seguir.

Para sistemas de esferas rígidas, Goldshtein e Shapiro [24] mostraram que a equação 2.10 admite uma solução isotrópica que descreve o HCS, escalada pela “velocidade térmica” $v_0(t)$ do sistema, da seguinte forma:

$$\rho(\mathbf{v}, t) = \frac{n}{v_0^3(t)} \tilde{\rho} \left(\frac{v}{v_0(t)} \right) \equiv \frac{n}{v_0^3(t)} \tilde{\rho}(c(t)). \quad (2.12)$$

Nesta expressão, foi introduzida a distribuição reduzida $\tilde{\rho}(c(t))$. A dependência temporal desta função se dá implicitamente, através da dependência temporal da velocidade reescalada $c(t) = \frac{v}{v_0(t)}$. Nessa nova escala, a distribuição é explicitamente independente do tempo, de modo que só descreve o regime estacionário do HCS, após todos os regimes transientes terem desaparecido. Dito de outra forma, isso quer dizer que, no regime estacionário, a dependência temporal da função de distribuição se dá exclusivamente através de $v_0(t)$, ou de uma nova quantidade, a partir de agora denominada *Temperatura Granular*, definida como a média no ensemble da energia cinética das partículas:

$$\frac{3n}{2} T(t) \equiv \int d\mathbf{v} \frac{m}{2} v^2 \rho(\mathbf{v}, t). \quad (2.13)$$

Por definição, a relação entre a velocidade térmica e a temperatura granular é dada por:

$$T(t) \equiv \frac{m}{2} v_0^2(t). \quad (2.14)$$

Quando a distribuição de velocidades $\rho(\mathbf{v}, t)$ é Gaussiana, a velocidade térmica definida de acordo com a equação 2.14 possui o significado de velocidade mais provável do ensemble. No caso geral de sistemas inelásticos, onde a distribuição exata não é conhecida, esse significado não pode mais ser mantido.

Em resumo, a forma funcional dada pela equação 2.12 representa o estado estacionário assintótico do HCS alcançado pelo sistema após um curto período transiente. A teoria de estabilidade hidrodinâmica prediz que o sistema permanecerá neste estado se certas condições associadas à inexistência de flutuações instáveis nas densidades de posição e de velocidade forem satisfeitas (ver Seção 6 deste capítulo).

No nosso contexto, será mais vantajoso considerar o formato geral, dado na equação 2.12, explicitamente dependente do tempo [17, 31]:

$$\rho(\mathbf{v}, t) = \frac{n}{v_0^3(t)} \tilde{\rho}\left(\frac{\mathbf{v}}{v_0(t)}, t\right) \equiv \frac{n}{v_0^3(t)} \tilde{\rho}(\mathbf{c}(t), t). \quad (2.15)$$

Para obter a evolução temporal da temperatura, basta multiplicar a equação 2.12 por $g = \frac{m}{2} v_1^2$ e integrar sobre v_1 . Usando a equação 2.11, obtém-se:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{\mu_2}{3} m \chi n a^2 v_0^3(t) \equiv -2\gamma \omega_0 T(t). \quad (2.16)$$

Nesta equação, ω_0 é a chamada frequência de colisão de Enskog. A frequência de Enskog é definida como a frequência média de colisões para esferas rígidas elásticas ou, equivalentemente, o inverso do tempo médio de colisão em sistemas elásticos τ_c . Ela pode ser calculada como a média, tomada sobre distribuições de Maxwell-Boltzmann $\phi(c) = \pi^{-3/2} \exp(-c^2)$, do termo de perda da equação de Enskog-Boltzmann 2.10:

$$\omega_0 = n v_0 \chi a^2 \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \phi(c_1) \phi(c_2) \quad (2.17)$$

A equação 2.17 pode ser integrada diretamente, fornecendo a expressão conhecida para a frequência de Enskog:

$$\omega_0 = \frac{S_3}{\sqrt{2\pi}} \chi n a^2 v_0, \quad (2.18)$$

onde $S_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ é a área da superfície de uma esfera unitária em d dimensões. Para $d = 3$, temos $S_3 = 4\pi$. É evidente que, para sistemas elásticos, a frequência de Enskog é constante.

Na equação 2.16, o fator γ é explicitamente definido como $\gamma \equiv \frac{\sqrt{2\pi}}{3S_3} \mu_2$ [27]. A constante μ_2 é a integral colisional cuja expressão geral é dada por [27]:

$$\mu_p \equiv - \int d\mathbf{c}_1 c_1^p \tilde{I}(\tilde{\rho}, \tilde{\rho}), \quad (2.19)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\tilde{\rho}, \tilde{\rho}) &\equiv \int d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \\ &\times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1^*, t) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2^*, t) - \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1, t) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2, t) \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Ao contrário do caso dos sistemas elásticos, a frequência média de colisões ω em um fluido granular é uma quantidade obviamente dependente do tempo, através da velocidade térmica v_0 . Por esse motivo, é mais natural medir o tempo por meio do número médio $\tau(t)$ de colisões que uma partícula sofre em um tempo t , dado através da frequência de colisões $\omega(t)$ por:

$$\tau(t) = \int_0^t dt' \omega(t') \Leftrightarrow \omega(t) = \frac{d}{dt} \tau(t). \quad (2.21)$$

Podemos calcular $\omega(t)$ de forma análoga à descrita na equação 2.17, mas como uma média sobre a distribuição escalada $\tilde{\rho}(\mathbf{c}_1)$, tal que

$$\omega(t) \equiv \frac{d}{dt} \tau(t) = \omega_0 \gamma_\tau, \quad (2.22)$$

com:

$$\gamma_\tau = \frac{\sqrt{2\pi}}{S_3} \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1, t) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2, t). \quad (2.23)$$

Eventualmente, o sistema atinge o patamar de evolução estacionário, após um tempo $t > t^*$ ($\tau > \tau^*$), de modo que a distribuição escalada torna-se independente do tempo. Desse modo, as integrais colisionais γ e γ_τ também passam a ser constantes independentes do tempo, denotadas por γ^* e γ_τ^* . Portanto, as equações 2.16 e 2.22 passam a ser escritas como:

$$\frac{dT}{dt} = -2\gamma^* \omega_0(T) T, \quad (2.24)$$

$$\frac{d}{dt} \tau(t) = \omega_0(T) \gamma_\tau^*, \quad (2.25)$$

cujas soluções analíticas são:

$$\begin{aligned} T &= \frac{T(t^*)}{[1 + \gamma^* \omega_0(T(t^*))(t - t^*)]^2} = \\ &= T(t^*) \exp\left(\frac{-2\gamma^*}{\gamma_\tau^* (\tau - \tau^*)}\right), \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\tau(t) - \tau^* = \frac{\gamma_\tau^*}{\gamma^*} \ln [1 + \gamma^* \omega_0(T(t^*))(t - t^*)]. \quad (2.27)$$

A equação 2.27 fornece uma relação entre o tempo colisional τ e o tempo real t . A equação 2.26 fornece um dos resultados mais notáveis da teoria cinética de gases granulares, a famosa *Lei de Haff* [22], que estabelece o decaimento algébrico da temperatura granular no tempo real - ou exponencial, no tempo colisional -, para o estado estacionário de um gás em regime de esfriamento homogêneo.

2.3 Dinâmica do HCS

Podemos começar a consideração da dinâmica da função de distribuição para o HCS, bem como a identificação de seus estados estacionários. A substituição do “ansatz” dado pela equação 2.15 na equação de Enskog-Boltzmann 2.10 fornece a seguinte equação integral para a forma escalada $\tilde{\rho}(\mathbf{c}(t), t)$ [31]:

$$\frac{\mu_2}{3} \left(3 + \mathbf{c}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}_1} \right) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1(t), t) + \frac{\sqrt{8\pi}}{\omega_0(t)} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1(t), t) \equiv \tilde{I}(\tilde{\rho}, \tilde{\rho}). \quad (2.28)$$

A equação 2.28 é extremamente complicada e, para resolvê-la, ao menos aproximadamente, faz-se necessário assumir algumas hipóteses. Em particular, é razoável esperar que, no limite de baixa inelasticidade, a solução deva aproximar-se da solução da equação de Boltzmann para sistemas elásticos, ou seja, a solução procurada deve ser suficientemente próxima da distribuição Gaussiana $\phi(c)$. Uma aproximação sistemática da função escalada $\tilde{\rho}(\mathbf{c}(t), t)$ pode ser encontrada expandindo-a por um conjunto completo de polinômios de Sonine [24, 27]:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{c}(t), t) = \phi(c) \left\{ 1 + \sum_{p=1}^{\infty} a_p(t) S_p(c^2) \right\}, \quad (2.29)$$

onde $S_i(x)$ é o i -ésimo polinômio de Sonine. Os quatro primeiros polinômios em três dimensões são dados por:

$$\begin{aligned} S_0(x) &= 1, \\ S_1(x) &= \frac{3}{2} - x, \\ S_2(x) &= \frac{15}{8} - \frac{5}{2}x + \frac{1}{2}x^2, \\ S_3(x) &= \frac{35}{16} - \frac{35}{8}x + \frac{7}{4}x^2 - \frac{1}{6}x^3. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Polinômios de Sonine são a denominação pela qual são conhecidos, em teoria cinética, os polinômios de Laguerre modificados: $S_p(c^2) \equiv L_p^h(c^2)$, onde $h =$

$d/2 - 1$, em d dimensões. Sua expressão geral em três dimensões é dada pela seguinte fórmula:

$$S_n(x) = \sum_{l=0}^n \left\{ (-1)^l \frac{(n+1/2)! x^l}{(n-l)! (1/2+l)! l!} \right\}. \quad (2.31)$$

Como um conjunto completo de funções, os polinômios de Sonine satisfazem a condições de ortogonalidade, dadas por

$$\int d\mathbf{c} \phi(c) S_p(c^2) S_p(c^2) = \delta_{pp} N_p, \quad (2.32)$$

o que permite escrever os coeficientes a_p como uma combinação finita de momentos da variável c , para cada tempo t :

$$a_p(t) = \frac{1}{N_p} \int d\mathbf{c} S_p(c^2) \tilde{\rho}(c(t), t), \quad (2.33)$$

com $N_p = \frac{2\pi}{\pi^{3/2}} \frac{(p+1/2)!}{p!}$ constantes de normalização. Em particular, pode-se verificar que, da condição de normalização $n = \int d\mathbf{v} \rho(\mathbf{v}, t)$, o coeficiente de ordem 0 é $a_0 = 1$, e que, a partir da definição 2.13 para a temperatura, o coeficiente de ordem 1 é sempre nulo: $a_1 = 0$. A expressão 2.33 mostra que os coeficientes da expansão em polinômios de Sonine são de fato combinações lineares finitas dos momentos da distribuição reduzida do sistema. Considerações semelhantes conduzem à expressão do segundo coeficiente a_2 , proporcional ao quarto momento da forma escalada:

$$a_2 = \frac{4}{15} \langle c^4 \rangle - 1, \quad (2.34)$$

onde $\langle c^p \rangle \equiv \int c^p \tilde{\rho}(\mathbf{c}(t), t) d\mathbf{c}$. A expressão 2.34 é de extrema utilidade para calcular a_2 a partir de dados de simulação, se o segundo e o quarto momentos da distribuição puderem ser obtidos com suficiente precisão.

Multiplicando ambos os lados da equação 2.28 por c_1^q e integrando sobre \mathbf{c}_1 , obtêm-se:

$$\frac{\mu_2}{3} q \langle c^q \rangle - \frac{\sqrt{8\pi}}{\omega_0(t)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d}{dt} a_k(t) \nu_{kq} = \mu_q, \quad (2.35)$$

onde usamos a equação 2.19 e omitimos o sub-índice em c . Nessa expressão, $\nu_{kq} \equiv \int d\mathbf{c} S_k(c^2) c^q \phi(c)$. O conjunto das equações 2.35 fornece um sistema infinito, mas fechado, para os coeficientes a_k , uma vez que os momentos μ_q também são expressos em termos desses coeficientes.

O conjunto das equações 2.35, acrescido da equação 2.16, constitui a descrição completa da dinâmica da distribuição de velocidades do HCS, em termos da dependência temporal dos coeficientes da expansão polinomial de Sonine, também chamados momentos de Sonine. Em particular, o cálculo das integrais colisionais μ_q é um processo elaborado, mas bem definido quando a expansão

2.29 é truncada em alguma ordem finita [31]. No Apêndice A, apresentamos o procedimento geral de cálculo destas integrais colisionais. Um ponto importante a ser notado é que a evolução temporal dos coeficientes de Sonine é acoplada à dinâmica da temperatura, através do fator $\omega_0(t)$. Da mesma forma, a dinâmica da temperatura é acoplada à dinâmica dos coeficientes (ver equação 2.16).

Pelo exposto acima, o sistema infinito de equações diferenciais só pode ser resolvido por meio de um expediente de truncagem da expansão 2.29. Entretanto, a suposição tácita é de que qualquer solução aproximada obtida só fará sentido se todos os termos desprezados forem suficientemente pequenos quando comparados com os remanescentes. Uma vez que, para regimes de baixa inelasticidade, espera-se que a distribuição seja próxima da Gaussiana, então $a_2 \ll 1 = a_0$. Generalizando-se esta desigualdade, pode-se assumir que $a_{l+1} \ll a_l$, para todo l . Esta é a hipótese de trabalho conjecturada por Huthmann e colaboradores [17]. Esses autores propuseram um esquema de truncagem em que se assume que a_l é da ordem de λ^l , onde λ é um parâmetro pequeno o suficiente para que faça sentido uma aproximação de ordem $O(\lambda^l)$, na qual todos os termos maiores que λ^l , em todas as equações acima consideradas, possam ser convenientemente desprezados. Isto torna o sistema finito e permite sua solução analítica ou numérica.

Vamos mostrar o procedimento de truncagem em ordem $O(\lambda^2)$. Escolhendo $q = 4$ na equação 2.35, obtém-se:

$$\dot{a}_2(t) = \frac{2}{3} \frac{\omega_0(t)}{\sqrt{2\pi}} \mu_2 (1 + a_2) - \frac{2}{15} \frac{\omega_0(t)}{\sqrt{2\pi}} \mu_4. \quad (2.36)$$

As integrais colisionais μ_2 e μ_4 são explicitamente dadas pela equação 2.19, com a expansão 2.29 truncada em $p = 2$:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{c}(t), t) = \phi(c) \{1 + a_2(t) S_2(c^2)\}. \quad (2.37)$$

Assim

$$\begin{aligned} \mu_q = & -\frac{1}{2} \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \phi(c_1) \phi(c_2) \\ & \times \{1 + a_2(t) [S_2(c_1^2) + S_2(c_2^2)] + a_2^2(t) S_2(c_1^2) S_2(c_2^2)\} \\ & \times \Delta(c_1^q + c_2^q), \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde $\Delta g(\mathbf{v}_i) = g(\mathbf{v}_i^*) - g(\mathbf{v}_i)$ (ver o Apêndice A para se ter um panorama do cálculo de $\Delta(c_1^q + c_2^q)$, μ_2 e μ_4).

A equação 2.36 pode ser resolvida numericamente para cada valor do coeficiente de restituição α . Pode-se fazer uma simplificação adicional, assimilando o termo $\omega_0(t)$, e introduzindo uma nova variável independente $d\tilde{\tau} = \omega_0(t) dt$. Essa simplificação não é realmente necessária, mas desse modo a evolução de a_2 passa a ser dada aproximadamente em função do número médio de colisões por partícula τ (definido pela equação 2.21) e a dinâmica dos coeficientes se desacopla da dinâmica da temperatura. Pode-se mostrar que o erro associado

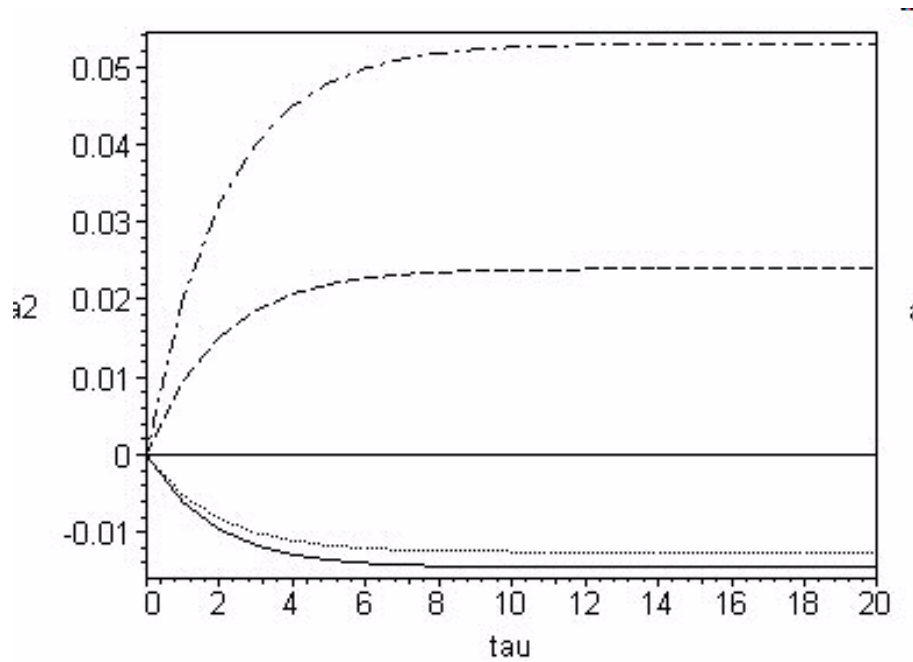


Figura 2.1: Evolução de a_2 em função do número de colisões por partícula. As curvas correspondem a $\alpha = 0,9$ (contínua), $\alpha = 0,8$ (pontilhada), $\alpha = 0,6$ (tracejada) e $\alpha = 0,5$ (ponto e traço).

a se aproximar τ por $\tilde{\tau}$ é pequeno para o limite de baixa inelasticidade [17]. Entretanto, mesmo para o regime de altas inelasticidades, este erro é irrelevante para a discussão que se seguirá, uma vez que estamos interessados nos valores estacionários dos coeficientes, ou seja, nos pontos fixos do sistema dinâmico dado pelo conjunto das equações 2.35, e não na descrição da dinâmica da fase transiente. Por esse motivo, no que se seguirá usaremos indistintamente τ no lugar de $\tilde{\tau}$, para não sobrecarregar a notação.

Para efeito de ilustração, apresentamos, na figura 2.1, o resultado das soluções numéricas da equação 2.36, para os coeficientes de restituição $\alpha = 0,9; 0,8; 0,6$ e $0,5$. Para estes exemplos, impusemos $a_2(0) = 0$ como condição inicial.

Observa-se em todos os casos uma rápida fase transiente, que dura no máximo 10 colisões por partícula, seguida de uma fase assintótica estacionária. O valor estacionário do coeficiente a_2 , ou seja, o ponto fixo do sistema, pode ser facilmente calculado, fazendo $\dot{a}_2(t) = 0$ no lado esquerdo da equação 2.36. A expressão analítica completa de a_2 em função de α é longa e complicada. No limite de baixas inelasticidades, lembremos que se assumiu que $a_2 \ll 1$. Portanto, uma aproximação linear, que despreze todas as potências de a_2 maiores que um, deve prover uma expressão analítica válida nesta aproximação. Esta

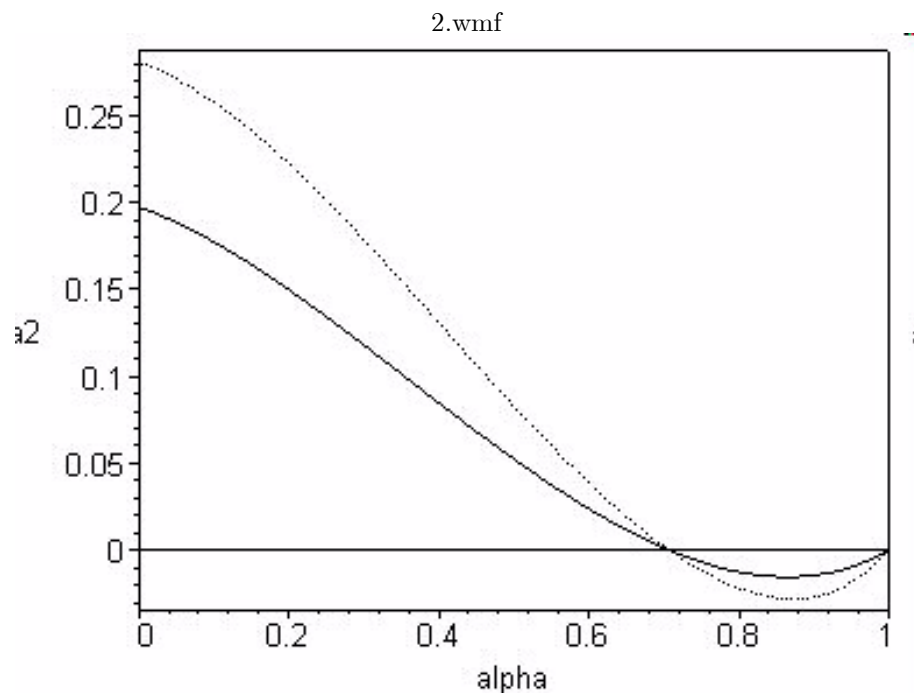


Figura 2.2: Coeficiente a_2 , calculado em aproximação linear, em função do coeficiente de restituição α , para $d = 2$ (linha pontilhada) e $d = 3$ (linha contínua).

expressão foi calculada pela primeira vez por Goldshtein e Shapiro [24], mas continha um erro que foi corrigido posteriormente por van Noije e Ernst [27]. A expressão correta é:

$$a_2(\alpha) = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9+24d+8\alpha d-41\alpha+30(1-\alpha)\alpha^2}. \quad (2.39)$$

Os gráficos desta função são apresentados na figura 2.2, para $d = 3$ e $d = 2$.

As curvas apresentadas na figura 2.2 mostram que, para valores de α acima de 0,6, o valor do segundo coeficiente da expansão de Sonine permanece pequeno. Entretanto, fora deste intervalo, seu valor cresce o suficiente para colocar em dúvida a consistência do processo de truncagem. Somente medições diretas do coeficiente, via simulação, podem confirmar se as curvas teóricas mostradas na figura 2.2 ainda preservam algum significado físico para valores de $\alpha < 0,6$. Na Seção 1 do Capítulo 6, serão apresentadas medidas diretas do coeficiente a_2 e verificaremos a correção dessa curva.

A relação 2.39 mostrou-se surpreendentemente acurada quando comparada com os valores obtidos para o coeficiente a_2 em simulações computacionais com

o uso da expressão 2.34. Usando DSMC, com $d = 3$, Brey e colaboradores [14] foram capazes de demonstrar um excelente acordo entre a equação 2.39 e a equação 2.34 para o intervalo $0,7 < \alpha < 1,0$. Da mesma forma, Huthmann e colaboradores [17] usaram MD com $d = 2$ para verificar a correção de seu esquema de truncagem em ordem $O(\lambda^2)$ e obtiveram um bom acordo no intervalo $0,4 < \alpha < 1,0$. Até agora, poucas simulações usando MD foram realizadas para testar a correção da fórmula 2.39, mesmo para sistemas quase-elásticos. Nenhuma simulação MD foi realizada para testar as previsões teóricas para o intervalo de inelasticidades extremas ($\alpha \leq 0,3$).

Em geral, a literatura recente [17, 29] têm apontado grandes dificuldades para obter precisão estatística em MD na medida dos momentos da distribuição para o HCS. Tanto no que concerne ao cálculo dos momentos da distribuição, quanto às condições gerais de simulação, a ausência de bons resultados tem deixado abertas algumas questões concernentes à validade da expansão em polinômios de Sonine [17], à validade de qualquer procedimento de truncagem na distribuição e até mesmo à validade de uma descrição cinética via equação de Enskog-Boltzmann para sistemas submetidos a condições de alta inelasticidade [18, 38]. No Capítulo 6, mostraremos como é possível suprir parte dessas deficiências.

Voltando ao procedimento de truncagem, pode-se mostrar que o sistema 2.35 pode ser reescrito em forma escalonada [17] como:

$$\dot{a}_l(t) = \omega_0(t)\gamma_l + 2l\gamma\omega_0(t)(a_l - a_{l-1}), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \infty, \quad (2.40)$$

com

$$\gamma_l = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2\pi}}{S_3} \frac{1}{\binom{l+\alpha}{l}} \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \times \quad (2.41)$$

$$\times \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2) \Delta (S_l(c_1^2) + S_l(c_2^2)), \quad (2.42)$$

onde γ e γ_l são combinações lineares dos μ_q (ver equação 2.38 e Apêndice B, onde são apresentadas as expressões de γ e γ_l em função dos μ_q).

O procedimento de truncagem levado à ordem $O(\lambda^3)$ fornece o seguinte sistema de equações para os coeficientes, já com o fator $\omega_0(t)$ absorvido:

$$\frac{d}{d\tau} a_2(t) = \gamma_2 + 4\gamma a_2 \quad (2.43)$$

$$\frac{d}{d\tau} a_3(t) = \gamma_3 + 6\gamma(a_3 - a_2)$$

A solução deste sistema em duas dimensões, levada a cabo por Huthmann e colaboradores [17], mostra que, se for válida a conjectura de que $a_{l+1} \ll a_l$ para todo l , é de se esperar que, para o intervalo $0,6 < \alpha < 1,0$, tanto as correções de ordem $O(\lambda^3)$ no valor de a_2 , quanto o próprio valor do coeficiente a_3 sejam pequenos (figura 4 da referência [17]). Contudo, nesse trabalho eles não apresentaram resultados de simulação para os coeficientes de ordem mais alta que 2

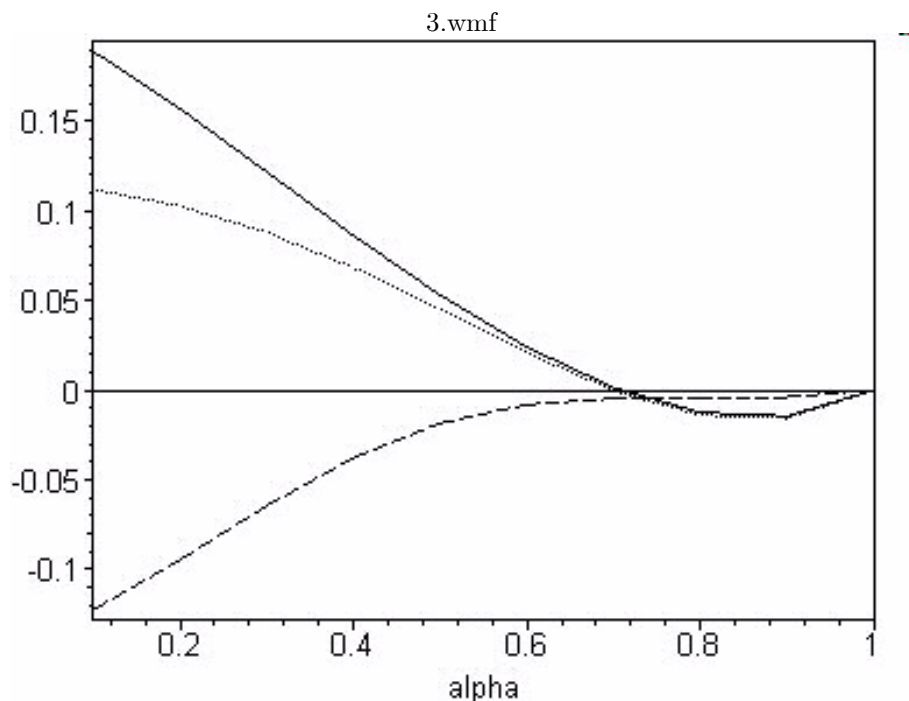


Figura 2.3: Coeficientes a_2 (linha pontilhada) e a_3 (linha tracejada) em ordem 3 e a_2 (linha contínua) em ordem 2, em função do coeficiente de restituição.

pois, segundo os próprios autores, não foram capazes de obtê-los com suficiente precisão. Desse modo, eles não demonstraram que o esquema de truncagem era válido ao se considerar ordens superiores, ou seja, não apresentaram evidências de simulação suficientes de que o procedimento de truncagem converge. Da mesma forma, eles não foram capazes de obter precisão suficiente na medida de a_2 para distinguir entre os diversos valores calculados em diferentes ordens de truncagem. Resultados de simulação em MD que permitam julgar a validade destes resultados serão apresentados no Capítulo 6.

As curvas apresentadas em [17] são para sistemas em duas dimensões. Na figura 2.3, mostramos as curvas correspondentes às soluções do sistema 2.43 para os coeficientes de Sonine a_2 e a_3 , no intervalo $0, 1 \leq \alpha \leq 1, 0$, juntamente com a curva de a_2 , calculada em ordem $O(\lambda^2)$.

Claramente, a conjectura sobre a qual se justificaria o processo de truncagem passa a ser inválida a partir de $\alpha < 0,6$, uma vez que os valores absolutos de a_3 passam a ser da mesma ordem de grandeza dos valores absolutos de a_2 . Não se pode mais sequer garantir a consistência do procedimento, de modo que a curva no intervalo $\alpha < 0,6$ não é mais confiável. Da mesma forma, a figura 2.3 permite observar que o valor do coeficiente a_2 varia substancialmente da ordem

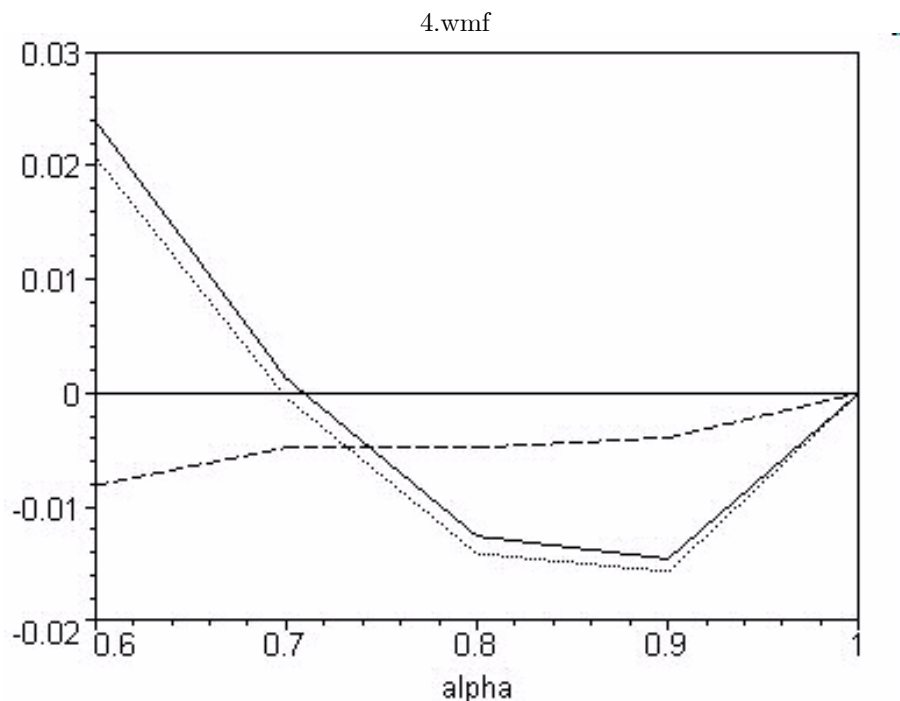


Figura 2.4: Detalhe da figura 2.3 para o intervalo $0,6 < \alpha < 1,0$.

$O(\lambda^2)$ para a ordem $O(\lambda^3)$, também a partir de $\alpha < 0,6$. Esse comportamento não é compatível com um processo aproximativo, em que se espera correções pequenas de ordem para ordem.

Na figura 2.4, reproduzimos a figura 2.3 restrita ao intervalo $0,6 < \alpha < 1,0$. Nesse intervalo, a maioria dos valores de α são compatíveis com a condição $|a_2| > |a_3|$. Apesar disso, os valores absolutos de a_3 não chegam a ser desprezíveis em relação aos valores absolutos de a_2 . Além do mais, a região situada no intervalo $0,7 < \alpha < 0,8$, onde as curvas de a_2 e a_3 se cruzam é evidentemente uma região onde a conjectura de Huthmann é totalmente inválida.

Podemos levar adiante o procedimento de truncagem em ordens superiores. A utilidade dessa discussão, entretanto, é pequena sem resultados de simulação que permitam testar a validade da truncagem da expansão e da convergência do processo aproximativo. Em vista disso, adiaremos esse assunto até o Capítulo 6.

2.4 Estado Estacionário de Não-Equilíbrio (NESS)

Como dissemos acima, o Estado de Esfriamento Homogêneo (HCS) é caracterizado pela perda definitiva da energia cinética das partículas, de modo que seu

destino final é o repouso. Um modo de impedir um sistema granular de atingir o repouso é supri-lo de energia externamente. O sistema pode ser uniformemente “aquecido” por meio de um mecanismo de reposição estocástico representado por um termo do tipo difusão de Fokker-Planck. Esse termo é o responsável pela mudança na função de distribuição por meio de um mecanismo que promove pequenos impulsos estocásticos nas partículas [29]. Desse modo, no caso espacialmente homogêneo, a equação 2.10 é substituída por:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{v}_1, t) = \chi I(\rho, \rho) + \frac{\xi_0^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} \right)^2 \rho(\mathbf{v}_1, t), \quad (2.44)$$

com $\xi_i(t)$ um ruído branco Gaussiano com média zero e autocorrelação:

$$\langle \xi_{i\alpha}(t)\xi_{j\beta}(t') \rangle = \xi_0^2 \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'), \quad (2.45)$$

onde os índices gregos representam componentes cartesianas do vetor, os índices latinos são os rótulos que identificam as partículas e os parênteses $\langle \rangle$ significam a média sobre o ensemble. O coeficiente de difusão ξ_0^2 no espaço de velocidades é proporcional à taxa de provimento de energia por unidade de massa $\frac{3\xi_a^2}{2}$. De um modo similar ao caso do HCS, pode-se derivar a equação para a evolução da temperatura associada à equação 2.44:

$$\frac{dT(t)}{dt} = m\xi_0^2 - 2\gamma\omega_0 T(t). \quad (2.46)$$

Pode-se procurar por uma solução estacionária de 2.44, onde a taxa de aquecimento contrabalance de modo exato a dissipação devido às colisões e, assim, a temperatura se torne constante. Esse regime de evolução estacionário é conhecido na literatura como NESS (“Non-equilibrium Stationary State”) e, juntamente com o HCS, constituem os modelos básicos para a compreensão da maioria dos fenômenos associados à teoria cinética de gases granulares.

O NESS também admite uma solução escalada para a função de distribuição reduzida, embora nesse caso tanto a velocidade térmica quanto a temperatura sejam independentes do tempo. A distribuição reduzida pode novamente ser expandida em polinômios de Sonine e uma estimativa em aproximação linear para o segundo coeficiente da expansão a_2 também foi obtido por van Noije e Ernst [27]:

$$a_2(\alpha) = \frac{16(1 - \alpha)(1 - 2\alpha^2)}{73 + 56d - 24\alpha d - 105\alpha + 30(1 - \alpha)\alpha^2}. \quad (2.47)$$

2.5 Caudas de Alta Energia

Uma das características mais distintivas dos gases granulares, quando comparados aos seus análogos elásticos, reside na forma funcional de suas funções de distribuição. Os valores não nulos (ainda que pequenos, no limite de baixas inelasticidades) dos coeficientes da expansão de Sonine mostram que distribuições

Gaussianas não podem ser mais do que uma primeira aproximação para a descrição estatística de sistemas dissipativos. O interesse teórico (analítico e simulacional), bem como experimental, da maioria dos pesquisadores nessa área passou a incidir sobre as peculiaridades dos desvios esperados e observados das distribuições dos sistemas dissipativos com relação à distribuição Gaussiana, tipicamente associada à estatística de sistemas conservativos.

Os desvios do formato funcional da distribuição reduzida do HCS com relação à forma Gaussiana foram estudados de diferentes maneiras ao longo dos últimos anos. Como vimos nas seções precedentes, Goldshtein e Shapiro [24] calcularam pela primeira vez o valor do quarto momento da distribuição associada ao HCS e encontraram uma pequena correção com relação aos valores Gaussianos. Em seguida, van Noije e Ernst [27] corrigiram esse valor, de modo a fornecer uma sólida evidência da não-Gaussianidade associada ao HCS. Contudo, uma evidência mais direta e qualitativamente relevante foi dada pela primeira vez por Esipov e Pöschel [23]. Eles procuraram realizar uma estimativa do comportamento assintótico da distribuição no limite de altas velocidades, as chamadas “caudas de alta energia” (“High Energy Tails”), e descobriram que o decaimento da distribuição era tipicamente exponencial (ou, como também são conhecidas, “Stretched Gaussians”- “Gaussianas esticadas”). Isso significa que, tipicamente, um gás granular apresenta uma fração maior de partículas rápidas quando comparado ao gás elástico. Esse fenômeno também é conhecido como “superpopulação das caudas da distribuição”.

A derivação apresentada por Esipov e Pöschel é baseada em argumentos heurísticos e segue as seguintes linhas gerais. Se uma partícula do sistema envolvida numa colisão binária, digamos a partícula 1, é uma partícula de alta velocidade, ou seja, com $c_1 \gg 1$, as contribuições mais relevantes para a integral colisional $\tilde{I}(\tilde{\rho}, \tilde{\rho})$ (equação 2.20) vêm das colisões onde a partícula 2 se situa tipicamente no centro da distribuição, o chamado intervalo térmico. Dessa forma, \mathbf{c}_{12} pode ser convenientemente substituído por \mathbf{c}_1 na dinâmica colisional dada pela equação 2.1, a qual passa a ser escrita como:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1^{**} &= \mathbf{c}_1 - \frac{1 + \alpha^{-1}}{2} (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_1) \mathbf{e}_{ij}, \\ \mathbf{c}_2^{**} &= \mathbf{c}_2 + \frac{1 + \alpha^{-1}}{2} (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_1) \mathbf{e}_{ij}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Vamos supor que o termo de ganho \tilde{I}_g da integral colisional possa ser desprezado com relação ao termo de perda \tilde{I}_l , suposição que será testada ao fim da dedução. A integral colisional reduz-se, então, a $\tilde{I}_l \approx -\beta_1 c_1 \tilde{\rho}(c_1)$, onde $\beta_1 = \frac{\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(\frac{1}{2}(d+1))}$, e fez-se uso da propriedade de normalização da função de distribuição. β_n são as integrais angulares dadas por:

$$\begin{aligned}\beta_n &\equiv \int d\mathbf{e}_{12} (\widehat{\mathbf{c}}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12})^n \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) = \\ &= \pi^{(d-1)/2} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(n+1))}{\Gamma(\frac{1}{2}(n+d))},\end{aligned}\quad (2.49)$$

com $\widehat{\mathbf{c}}_{12} = \mathbf{c}_{12}/|\mathbf{c}_{12}|$ vetor unitário. Com isso, a forma independente do tempo da equação 2.28 torna-se:

$$\frac{\mu_2}{3} \left(3 + c \frac{\partial}{\partial c} \right) \tilde{\rho}(c) = -\beta_1 c \tilde{\rho}(c). \quad (2.50)$$

Como $c \gg 1$, o primeiro termo do lado esquerdo da equação pode ser desprezado e a solução assintótica para grandes velocidades se escreve como:

$$\tilde{\rho}(c) \sim A \exp\left(-\frac{3\beta_1}{\mu_2} c\right), \quad (2.51)$$

com A uma constante de integração indeterminada. Essa solução corresponde a uma cauda da distribuição que apresenta uma superpopulação de partículas, quando comparado com o decaimento Gaussiano. Evidentemente, quanto maior o grau de inelasticidade, mais afastadas da Gaussiana as caudas são e mais superpopuladas as caudas se apresentam. De maneira análoga ao caso da função de distribuição completa, o valor do coeficiente da exponencial $B = \frac{3\beta_1}{\mu_2}$ só pode ser estimado via procedimento de truncagem, uma vez que μ_2 é uma constante que depende da própria distribuição desconhecida. O cálculo de μ_2 , com a expansão de Sonine truncada em ordem $O(\lambda^2)$, fornece:

$$\mu_2 = \frac{1}{2}(1 - \alpha^2) \frac{S_d}{\sqrt{2\pi}} \left\{ 1 + \frac{3}{16} a_2 \right\}. \quad (2.52)$$

Daí:

$$B^{-1}(\alpha) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(d+1))}{\sqrt{2}\Gamma(\frac{d}{2})} (1 - \alpha^2) \left\{ 1 + \frac{3}{16} a_2 \right\}, \quad (2.53)$$

com a_2 dado pela equação 2.39.

Agora pode-se mostrar que a suposição assumida acima sobre a dominância do termo de perda sobre o termo de ganho é justificada. Se $|\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_1| \gg 1$, como tipicamente é o caso, \mathbf{c}_2 na equação 2.48 pode ser desprezado e então tem-se:

$$\begin{aligned}c_1^{**} &= c_1 \sqrt{1 - \frac{1}{4}(1 + \alpha^{-1})(3 - \alpha^{-1})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \widehat{\mathbf{c}}_1)^2}, \\ c_2^{**} &= \frac{1 + \alpha^{-1}}{2} c_1 |\mathbf{e}_{ij} \cdot \widehat{\mathbf{c}}_1| \gg 1,\end{aligned}\quad (2.54)$$

onde $\widehat{\mathbf{c}}_1$ é um vetor unitário. Para demonstrar que $\tilde{\rho}(c) \sim \exp\left(-\frac{3\beta_1}{\mu_2} c\right)$ é uma solução consistente quando $c_1 \gg 1$, comparamos o fator $\tilde{\rho}(c_1^{**})\tilde{\rho}(c_2^{**})$ em \tilde{I}_g com $\tilde{\rho}(c_1)\tilde{\rho}(c_2)$ em \tilde{I}_l :

$$\frac{\tilde{\rho}(c_1^{**})\tilde{\rho}(c_2^{**})}{\tilde{\rho}(c_1)\tilde{\rho}(c_2)} \sim \exp\left(-\frac{3\beta_1}{\mu_2}[c_1^{**} + c_2^{**} - c_1]\right) \quad (2.55)$$

onde desprezamos c_2 . Da equação 2.54, vemos que o expoente de 2.55 é proporcional a c_1 e é estritamente negativo para $\alpha < 1$, exceto para colisões tangenciais, onde se anula. Isto acontece dentro de um estreito intervalo J próximo de $\theta = 1/2$, onde $|\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_1| = c_1 \cos \theta \sim O(1)$, com θ o ângulo de incidência do choque da partícula rápida. Fora deste intervalo o fator na equação 2.55 anula-se exponencialmente. Dentro do intervalo, a contribuição para o termo de ganho pode ser estimada como $\int_J d\theta c_1 \cos \theta \tilde{\rho}(c_1) \simeq \tilde{\rho}(c_1)/c_1$. Conseqüentemente, $\tilde{I}_g/\tilde{I}_l \sim 1/c_1^2$ para c_1 grande. Portanto, a suposição é de fato válida.

A forma funcional da cauda de alta energia para o sistema randomicamente aquecido (NESS) pode ser obtida por um procedimento muito similar ao exposto acima. O resultado é diferente do caso do HCS:

$$\tilde{\rho}(c) \sim A \exp\left(-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{6\beta_1}{\mu_2}}c^{3/2}\right) \quad (2.56)$$

Ainda assim, uma vez mais trata-se de uma cauda superpopulada em relação à Gaussiana.

Brey e colaboradores [15], usando DSMC, foram os primeiros autores que verificaram a existência das caudas exponenciais no HCS e verificaram a correção aproximada dos expoentes dados na equação 2.53. Ainda assim, o valor mais alto de α para o qual eles conseguiram obter uma indicação relevante de comportamento exponencial foi $\alpha = 0,7$. Isso era de se esperar, uma vez que o decaimento exponencial é muito tênue quando o grau de inelasticidade é pequeno. Huthmann e colaboradores [17] foram os primeiros a usar simulações MD para verificar a existência de caudas de alta energia superpopuladas associadas ao HCS. Os resultados obtidos apontaram para a existência de caudas exponenciais, mas os resultados não chegaram a ser suficientemente acurados para medir os expoentes com a mesma precisão obtida com DSMC. Apesar disso, como vimos, DSMC não representa um teste real da teoria cinética, embora possa servir para testar a validade das aproximações.

A dificuldade associada à medição das caudas exponenciais usando simulações em MD reside na baixíssima representatividade estatística das caudas, quando considerado o número total de partículas do sistema ou mesmo da parte central da distribuição. Nas simulações implementadas por Huthmann e colaboradores, foram usadas 250.000 partículas. A partir de $c \approx 3,5$, entretanto, o número de partículas que se espera que estejam descritas na região de altas velocidades não passa de 2 ou 3. Não é de surpreender, portanto, que a medição das caudas exponenciais seja uma tarefa tão difícil.

Evidências simulacionais da existência das caudas de alta energia superpopuladas também foram obtidas para o NESS [29], mas também nesse caso a precisão esteve muito longe de ser suficiente para fazer comparações quantitativas. Evidências experimentais da existência de caudas superpopuladas foram obtidas no caso de gases granulares submetidos a vibrações.

2.6 Hidrodinâmica e Estabilidade

Os chamados fluxos rápidos em sistemas granulares são freqüentemente descritos no nível macroscópico pelas equações da dinâmica dos fluidos, convenientemente modificadas para incluir os efeitos provenientes das interações dissipativas entre as partículas. Estas equações são muitas vezes construídas fenomenologicamente, em analogia com as equações dos gases elásticos, a despeito da violação do princípio básico de separação das escalas espaço-temporais, condição necessária para seu estabelecimento. Em razão disso, seus limites de validade são amplamente desconhecidos, devendo ser estabelecidos, na maioria da vezes, *a posteriori* e, em geral, caso a caso.

A justificativa para uma descrição hidrodinâmica, a forma das equações de transporte correspondentes, as expressões explícitas para os coeficientes de transporte que nelas aparecem, tudo isso requer uma derivação detalhada a partir de uma base microscópica mais fundamental. Derivações das equações hidrodinâmicas baseadas na equação de Boltzmann e em outras equações cinéticas foram de fato obtidas, inicialmente limitadas a sistemas quase elásticos [24], tendo sido em seguida estendidas a todo intervalo de variação do coeficiente de restituição α [28, 25]. Isso possibilitou a obtenção dos coeficientes de transporte como função do coeficiente de restituição, em particular no caso do modelo de esferas rígidas [39].

Em sistemas elásticos (conservativos), a evolução de um sistema rumo a um estado assintótico de equilíbrio é caracterizada por um estágio cinético de relaxação rápida da função de distribuição no espaço de velocidades para um estado localmente homogêneo de equilíbrio, seguido por um estágio hidrodinâmico de lenta evolução rumo a um estado de equilíbrio global. A escala de tempo característica do estágio cinético é o tempo médio entre colisões (“mean free time”). Contudo, quando se trata de sistemas inelásticos, onde a perda de energia é contínua, não é mais possível falar em evolução rumo a um estado de equilíbrio - excetuando-se, é claro, o caso trivial do repouso completo - simplesmente porque estes sistemas estão sempre fora do equilíbrio. Ainda assim, é possível conceber a existência de estados assintóticos estacionários escalados que desempenham um papel análogo ao estado de equilíbrio. No caso do esfriamento livre, tem-se o HCS e a relaxação na escala cinética acontece rumo ao HCS local. No caso de sistemas com reposição de energia, a evolução é mais parecida com o caso elástico e a relaxação acontece rumo ao NESS local. Como veremos abaixo, estes estados desempenham um papel análogo ao estado de equilíbrio local representado pela distribuição de Maxwell-Boltzmann, uma vez que provêem um estado de referência local a partir do qual torna-se possível a construção da hidrodinâmica fundada em bases microscópicas [28, 25].

Os estágios subseqüentes de evolução envolvem fenômenos de transporte e outros tipicamente pertencentes a uma escala hidrodinâmica. Dentre estes fenômenos os mais interessantes do ponto de vista da física de sistemas granulares são os relacionados à quebra da estabilidade dos regimes homogêneos e isotrópicos e a conseqüente formação de “clusters” e padrões nos campos de velocidade como, por exemplo, vórtices [30]. Neste trabalho, o interesse pelos problemas

específicos da hidrodinâmica granular encontra-se justamente na determinação das condições sob as quais pode-se garantir a estabilidade dos regimes homogêneos, mais especificamente do HCS.

Seja fenomenologicamente ou com base em primeiros princípios, todas as teorias desenvolvidas chegaram basicamente ao mesmo conjunto de equações, similar ao das equações de Navier-Stokes. A principal diferença entre essas equações e seus análogos inelásticos reside na presença de um termo descrevendo a dissipação da energia cinética macroscópica na equação correspondente à evolução da temperatura granular. Estas equações de movimento foram utilizadas para analisar a estabilidade linear dos gases granulares, com objetivo de elucidar os fenômenos de formação de estruturas citados acima [28, 25].

2.6.1 Hidrodinâmica Granular

Como no caso dos gases e líquidos moleculares, pode-se definir campos macroscópicos locais para gases granulares, tais como a temperatura granular T , a velocidade \mathbf{u} e a densidade de partículas n . Esses campos são definidos de maneira usual como médias sobre a função de distribuição de uma partícula $\rho(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$:

$$n(\mathbf{r}, t) \equiv \int d\mathbf{v} \rho(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t), \quad (2.57)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \rho(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t), \quad (2.58)$$

$$T(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{2}{3n(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m V^2 \rho(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t). \quad (2.59)$$

onde $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ é a velocidade de cada partícula relativa ao campo de velocidades local. Não é claro *a priori* se esse conjunto padrão de campos hidrodinâmicos é suficiente ou mesmo adequado para uma descrição dos gases granulares. Além disso, o fato de não haver conservação da energia coloca em dúvida a adequação da temperatura granular como um campo apropriado [3].

O ponto de partida para a construção das equações hidrodinâmicas é o estabelecimento das equações de conservação. Para isso, reescrevemos a equação de Boltzmann dada na equação 2.10 de uma forma mais geral e concisa:

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = I[\rho, \rho]. \quad (2.60)$$

De utilidade agora é a consideração dos chamados invariantes colisionais. Tomando-se novamente a equação 2.11, reescrita para os propósitos presentes, temos:

$$\frac{d}{dt} \langle g(\mathbf{v}_1) \rangle \equiv \int d\mathbf{v}_1 g(\mathbf{v}_1) I[\rho, \rho]. \quad (2.61)$$

Definimos invariantes colisionais como sendo aquelas funções $g(\mathbf{v}_1)$ que satisfazem a $\frac{d}{dt} \langle g(\mathbf{v}_1) \rangle = 0$ ou seja:

$$\int d\mathbf{v}_1 g(\mathbf{v}_1) I[\rho, \rho] = 0. \quad (2.62)$$

Pode-se demonstrar que, no caso elástico, o invariante colisional mais geral é uma combinação linear de apenas cinco funções independentes: 1, $\mathbf{v} \equiv (v_x, v_y, v_z)$ e v^2 [36]. Obviamente, no caso inelástico, v^2 não pode mais ser um invariante, já que, em cada colisão, a energia cinética das partículas decresce. Portanto, no caso inelástico, temos:

$$\int d\mathbf{v}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ m\mathbf{v} \\ \frac{mv^2}{2} \end{pmatrix} I[\rho, \rho] = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ -(1 - \alpha^2)\omega[\rho, \rho] \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

tal que

$$\omega[\rho, \rho] = \frac{m\pi a^2}{16} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|^3 \rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t), \quad (2.64)$$

onde usamos a equação 2.3.

Tomando os momentos da equação 2.60 com relação a 1, \mathbf{v} e v^2 e usando as equações 2.57-2.59, 2.63 e 2.64, obtém-se:

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)n + n\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.65)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)u_i + (mn)^{-1}\nabla_j P_{ij} = 0, \quad (2.66)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla)T + \frac{2}{3n}(P_{ij}\nabla_j u_i + \nabla \cdot \mathbf{q}) + T\zeta = 0, \quad (2.67)$$

onde foram introduzidos a taxa de esfriamento:

$$\zeta[\rho] = (1 - \alpha^2)\frac{2}{3nT}\omega[\rho, \rho], \quad (2.68)$$

o tensor de pressão \mathbf{P} e o fluxo de calor \mathbf{q} , dados por:

$$P_{ij} = \int d\mathbf{v} m V_i V_j \rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.69)$$

$$\mathbf{q} = \int d\mathbf{v} \frac{m}{2} V^2 \mathbf{V} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.70)$$

As equações 2.65-2.67 são as equações de conservação para um fluido granular. A rigor, a última delas não deveria propriamente ser chamada de equação de conservação, já que possui o termo de dissipação ζ . Aliás, este é o único termo que torna as equações acima peculiares à hidrodinâmica granular, sendo todo o restante formalmente idêntico ao caso de fluidos moleculares. Das equações

acima, fica explícito que, uma vez conhecida uma solução da equação de Boltzmann 2.60, as quantidades \mathbf{P} , \mathbf{q} e ζ podem ser obtidas e as equações 2.65-2.67 tornam-se um conjunto fechado de equações para os campos T , \mathbf{u} e n .

Encontrar essa solução não é, porém, uma tarefa fácil. No caso elástico, o passo definitivo para se chegar às equações da hidrodinâmica clássica sem ter que solucionar a equação de Boltzmann consiste em propor leis fenomenológicas que determinem a dependência funcional de \mathbf{P} e \mathbf{q} em termos dos campos e permitam o fechamento do sistema. Estas famosas leis são duas: a lei de Fourier, que introduz o coeficiente de transporte denominado condutividade térmica, e a lei de Newton, que introduz os coeficientes de viscosidade [36]. Evidentemente, esse procedimento submete as equações hidrodinâmicas à necessidade de uma justificação posterior.

Contudo, há um modo de obter as equações da hidrodinâmica a partir de primeiros princípios e, como corolário, determinar o seu regime de validade, bem como a expressão microscópica explícita dos coeficientes de transporte em termos de médias sobre a função de distribuição. As equações de conservação tornam-se um conjunto fechado de equações hidrodinâmicas para os campos T , \mathbf{u} e n somente quando as quantidades \mathbf{P} e \mathbf{q} - e ζ , no caso granular - são expressas como funcionais desses campos. Entretanto, \mathbf{P} , \mathbf{q} e ζ são definidos explicitamente como funcionais de $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Assim, o único modo de fechar consistentemente o conjunto de equações hidrodinâmicas é encontrar soluções da equação de Boltzmann 2.60 de modo que a dependência espaço-temporal de $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ seja toda fornecida através dos campos hidrodinâmicos T , \mathbf{u} e n , ou seja:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \rho[\mathbf{v}; T, \mathbf{u}, n]. \quad (2.71)$$

Tais soluções existem e são chamadas de soluções “normais”. Um modo prático de obtê-las quando apenas pequenos gradientes espaciais são relevantes é dado pelo método de Chapman-Enskog [36]. Por meio desse procedimento, pode-se concluir que a validade das equações da hidrodinâmica clássica está restrita ao conjunto dos fenômenos observados em escalas espaço-temporais macroscópicas, ou seja, onde os campos só variam significativamente de modo lento no tempo e no espaço. Daí a denominação “regime hidrodinâmico”, empregada acima para descrever fenômenos de transporte.

A dependência funcional dada pela equação 2.71 pode ser reescrita localmente no espaço e no tempo assumindo-se uma expansão dos campos em seus gradientes, uma vez que se esteja tratando com estados que apresentem pequenas variações espaciais. Neste caso, a função de distribuição pode ser representada por uma série expandida em termos de um fator de escala ε associado a cada operador gradiente:

$$\rho = \rho^{(0)} + \varepsilon\rho^{(1)} + \varepsilon^2\rho^{(2)} + \dots \quad (2.72)$$

O uso desta expansão nas equações de conservação conduz a um processo iterativo que constitui o cerne do método de Chapman-Enskog. O primeiro passo do processo, correspondente à ordem zero nos gradientes espaciais, aproxima ρ por

$\rho^{(0)}$ - posteriormente identificado, no caso elástico, como sendo a distribuição de Maxwell-Boltzmann local - e conduz às equações de Euler para o fluido sem viscosidade. O passo de ordem dois, de primeira ordem nos gradientes, conduz às equações de Navier-Stokes para o fluido viscoso e o passo de ordem três conduz às equações de Burnett.

Este método foi empregado consistentemente por Brey e colaboradores [28] para solucionar a equação de Boltzmann no caso inelástico. O ponto crucial na derivação - e o mais interessante do ponto de vista conceitual - consiste na identificação do estado de referência em torno do qual a expansão é realizada. O estado de referência $\rho^{(0)}$ empregado, no caso do gás granular livre, é o HCS, discutido detalhadamente nas seções acima. O estatuto do HCS não é igual ao do estado de equilíbrio local do gás elástico, representado pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. A conservação da energia, em combinação com o teorema H de Boltzmann, garantem que a distribuição Maxwelliana de velocidades é alcançada no limite $t \rightarrow \infty$, quando o sistema evolui rumo ao equilíbrio, e que esse é um estado estável sob flutuações nos campos [36]. Nem a conservação da energia, nem o teorema H valem no caso de sistemas inelásticos [30]. De fato, veremos que o HCS é, em geral, instável sob perturbações nos campos hidrodinâmicos. Mas há condições em que o HCS apresenta estabilidade, e são essas condições que interessam para o presente trabalho.

Não entraremos nos detalhes da derivação realizada por Brey e colaboradores, que é bastante longa e detalhada. Aqui, o interesse principal reside nas expressões obtidas para os coeficientes de transporte em função do coeficiente de restituição normal α associado ao sistema de esferas rígidas e lisas. As expressões obtidas em ordem zero (Euler) nos gradientes para os fluxos, dados pelas equações 2.68-2.70, são:

$$P_{ij}^{(0)} = nT\delta_{ij}, \quad (2.73)$$

$$\mathbf{q}^{(0)} = 0, \quad (2.74)$$

$$\zeta^{(0)} = \zeta^* \frac{nT}{\eta_0}, \quad (2.75)$$

onde $\eta_0 = \frac{5(mT)^{1/2}}{16a^2\pi^{1/2}}$ e ζ^* é um fator de proporcionalidade dado em aproximação na equação 2.82 abaixo.

As expressões obtidas em primeira ordem (Navier-Stokes) nos gradientes para os fluxos, são:

$$P_{ij}^{(1)} = -\eta(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3}\delta_{ij}\nabla \cdot \mathbf{u}), \quad (2.76)$$

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\kappa\nabla T - \mu\nabla n, \quad (2.77)$$

$$\zeta^{(1)} = 0, \quad (2.78)$$

onde η é o coeficiente de viscosidade de cisalhamento (“shear viscosity”), κ é o coeficiente de condutividade térmica e μ é um coeficiente de transporte sem análogo elástico, e que é não nulo somente quando $\alpha < 1$. Os coeficientes de transporte que aparecem nas equações acima são dados explicitamente por:

$$\eta^*(\alpha) \equiv \frac{\eta(\alpha)}{\eta_0} = \left[\nu_\eta^*(\alpha) - \frac{1}{2}\zeta^*(\alpha) \right]^{-1}, \quad (2.79)$$

$$\kappa^*(\alpha) \equiv \frac{\kappa(\alpha)}{\kappa_0} = \frac{2}{3} [\nu_\kappa^*(\alpha) - 2\zeta^*(\alpha)]^{-1} [1 + c^*(\alpha)], \quad (2.80)$$

$$\mu^*(\alpha) \equiv \frac{n\mu(\alpha)}{T\kappa_0} = 2\zeta^*(\alpha) \left[\kappa^*(\alpha) + \frac{1}{3} \frac{c^*(\alpha)}{\zeta^*(\alpha)} \right] [2\nu_\mu^*(\alpha) - 3\zeta^*(\alpha)]^{-1}. \quad (2.81)$$

Aqui, novamente temos $\eta_0 = \frac{5(mT)^{1/2}}{16a^2\pi^{1/2}}$. η_0 e $\kappa_0 = \frac{15\eta_0}{4m}$ são os respectivos valores dos coeficientes de transporte para um gás molecular. As funções adimensionais do coeficiente de restituição α , introduzidas nas equações 2.75 e 2.79-2.81, são dadas pelas seguintes expressões:

$$\zeta^*(\alpha) = \frac{5}{12}(1 - \alpha^2) \left[1 + \frac{3}{32}c^*(\alpha) \right], \quad (2.82)$$

$$\nu_\eta^*(\alpha) = \left[1 - \frac{1}{4}(1 - \alpha)^2 \right] \left[1 - \frac{1}{64}c^*(\alpha) \right], \quad (2.83)$$

$$\nu_\kappa^*(\alpha) = \nu_\mu^*(\alpha) = \frac{1}{3}(1 + \alpha) \left[1 + \frac{33}{16}(1 - \alpha) + \frac{19 - 3\alpha}{1024}c^*(\alpha) \right]. \quad (2.84)$$

Por fim, a função $c^*(\alpha)$ é o valor associado ao desvio do quarto momento da distribuição $\rho^{(0)}$ com relação ao correspondente valor da distribuição Gaussiana. Assumindo a expansão de $\rho^{(0)}$ em polinômios de Sonine em torno da Gaussiana, conforme dado pela equação 2.29, truncando-se a expansão em ordem $O(\lambda^2)$ e fazendo uso da aproximação linear, chega-se a uma expressão analítica relativamente simples para $c^*(\alpha)$ que é, obviamente, idêntica a $a_2(\alpha)$, como dado pela expressão 2.47. Para $d = 3$:

$$c^*(\alpha) \simeq a_2(\alpha) = \frac{32(1 - \alpha)(1 - 2\alpha^2)}{81 - 17\alpha + 30(1 - \alpha)\alpha^2} \quad (2.85)$$

Conforme fica explícito da equação 2.78, não existe contribuição de primeira ordem nos gradientes para a taxa de esfriamento $\zeta[\rho]$. A contribuição de ordem zero, entretanto, é não-nula e é dada pela equação 2.75. As equações hidrodinâmicas 2.65-2.67 dependem, em geral, dos gradientes do tensor de pressão e do fluxo de calor, bem como do tensor de pressão multiplicado por um gradiente. Daí, o cálculo de ρ em primeira ordem nos gradientes resulta em contribuições de segunda ordem nas equações hidrodinâmicas. Como $\zeta[\rho]$ aparece nas equações

sem gradientes adicionais, por questão de consistência é necessário incluir as contribuições de segunda ordem (Burnett) de $\zeta[\rho]$. A forma completa de $\zeta^{(2)}$ é bastante complicada mas, para o estudo de estabilidade linear que se segue, é suficiente considerar as contribuições lineares dos gradientes nas diversas ordens:

$$\zeta^{(2)} = \zeta_1 \nabla^2 T + \zeta_2 \nabla^2 n. \quad (2.86)$$

2.6.2 Estabilidade Linear

Os resultados obtidos para o tensor de pressão, fluxo de calor em ordens zero e um nos gradientes, bem como para a taxa de esfriamento em ordens zero, um e dois, provêm as equações constitutivas necessárias para converter as equações de conservação em um conjunto de equações hidrodinâmicas para os campos T , \mathbf{u} e n . Nesse ponto, é interessante investigar a descrição hidrodinâmica para estados próximos do HCS. Para isso, define-se pequenas perturbações dos campos hidrodinâmicos a partir de seus valores no HCS:

$$n(\mathbf{r}, t) = n_H + \delta n(\mathbf{r}, t); \quad \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \delta \mathbf{u}(\mathbf{r}, t); \quad T(\mathbf{r}, t) = T_H + \delta T(\mathbf{r}, t); \quad (2.87)$$

onde notamos que, a partir da equação 2.58, $\mathbf{u}_H(\mathbf{r}, t) \equiv 0$, uma vez que o HCS é um estado isotrópico. A linearização das equações hidrodinâmicas em torno do HCS leva a equações diferenciais parciais com coeficientes que são independentes da variável espacial, mas dependentes do tempo, uma vez que o estado de referência é de resfriamento. Esta dependência temporal pode ser eliminada por meio de uma mudança nas variáveis de tempo e espaço e de uma reescala nos campos hidrodinâmicos. Define-se [28]:

$$\mathbf{l} = \frac{\nu_H(t)}{\sqrt{2}} v_0(t)^{-1} \mathbf{r}; \quad \tau(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \nu_H(t'); \quad (2.88)$$

onde $\nu_H(t) = \frac{n T_H}{\eta_0(T_H)}$ é uma frequência de choques característica, proporcional à frequência de Enskog ω_0 , e $v_0(t)$ é a velocidade térmica, previamente definida. Pode-se notar que a nova escala de comprimento é independente do tempo e é proporcional ao inverso do livre caminho médio de $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2\pi} n a^2}$, ou seja, $\mathbf{l} = \frac{8}{5\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\lambda} \mathbf{r}$.

Os campos hidrodinâmicos reescalados são:

$$\varphi(\mathbf{l}, \tau) = \frac{\delta n(\mathbf{l}, t)}{n}; \quad \mathbf{w}(\mathbf{l}, \tau) = \frac{\delta \mathbf{u}(\mathbf{l}, t)}{\nu_H(t)}; \quad \theta(\mathbf{l}, \tau) = \frac{\delta T(\mathbf{l}, t)}{T_H(t)}. \quad (2.89)$$

É conveniente tratar com a transformada de Fourier dos campos reescalados:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\tau) = \int d\mathbf{l} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}) \varphi(\mathbf{l}, \tau) \quad (2.90)$$

e assim sucessivamente. Introdz-se também as componentes longitudinal e transversal do campo de velocidades relativo ao vetor de onda \mathbf{k} , $w_{\mathbf{k}\parallel}$ e $w_{\mathbf{k}\perp}$,

respectivamente. Com todas essas redefinições, o conjunto de equações hidrodinâmicas se escreve, por fim, como:

$$\partial_\tau \varphi_{\mathbf{k}} + i\mathbf{k}w_{\mathbf{k}\parallel} = 0, \quad (2.91)$$

$$\left(\partial_\tau - \zeta^* + \frac{2}{3}\eta^*k^2 \right) w_{\mathbf{k}\parallel} + i\mathbf{k}\theta_{\mathbf{k}} + i\mathbf{k}\varphi_{\mathbf{k}} = 0, \quad (2.92)$$

$$\left(\partial_\tau - \zeta^* + \frac{1}{2}\eta^*k^2 \right) w_{\mathbf{k}\perp} = 0, \quad (2.93)$$

$$\left(\partial_\tau + \zeta^* + \frac{5}{4}(\kappa^* - \zeta_1^*)k^2 \right) \theta_{\mathbf{k}} + \left(2\zeta^* + \frac{5}{4}(\mu^* - \zeta_2^*)k^2 \right) \varphi_{\mathbf{k}} + \frac{2}{3}i\mathbf{k}w_{\mathbf{k}\parallel} = 0, \quad (2.94)$$

onde foram introduzidos os coeficientes de transporte de Burnett reduzidos $\zeta_1^* = \frac{3nT}{2\kappa_0}\zeta_1$ e $\zeta_2^* = \frac{3n^2}{2\kappa_0}\zeta_2$.

Para identificar os modos lineares e as relações de dispersão associadas ao conjunto de equações acima, deve-se procurar por soluções da forma:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\tau) = \hat{\varphi}(\mathbf{k}) \exp(s\tau), \quad (2.95)$$

e soluções similares para $w_{\mathbf{k}}$ e $\theta_{\mathbf{k}}$. A equação 2.93 é desacoplada das demais e pode ser integrada imediatamente, fornecendo:

$$w_{\mathbf{k}\perp}(\tau) = w_{\mathbf{k}\perp}(0) \exp(s_\perp \tau), \quad (2.96)$$

onde

$$s_\perp = \zeta^* - \frac{1}{2}\eta^*k^2 \quad (2.97)$$

é o autovalor associado, com dois modos de cisalhamento (“shear modes”) degenerados. Os três demais autovalores associados aos automodos correspondentes a $w_{\mathbf{k}\parallel}$, $\theta_{\mathbf{k}}$ e $\varphi_{\mathbf{k}}$ são obtidos a partir das demais equações e são soluções da seguinte equação algébrica:

$$\begin{aligned} s^3 + \frac{5}{4} \left(\kappa^* + \frac{8}{15}\eta^* - \zeta_1^* \right) k^2 s^2 + \left\{ \frac{5}{6}k^4\eta(\kappa^* - \zeta_1^*) + \right. \\ \left. + \frac{1}{3}k^2 \left[5 + 2\eta^*\zeta^* - \frac{15}{4}\zeta^*(\kappa^* - \zeta_1^*) \right] - \zeta^{*2} \right\} s + \\ \left. + \left[\frac{5}{4}(\kappa^* - \zeta_1^* - \mu^* + \zeta_2^*)k^2 - \zeta^* \right] k^2 = 0. \end{aligned} \quad (2.98)$$

As equações 2.97 e 2.98 constituem as relações de dispersão para os autovalores e a partir delas pode-se verificar a estabilidade linear das flutuações em torno do HCS. Com exceção dos modos de cisalhamento, que correspondem às

flutuações da componente transversal do campo de velocidades, todos os demais são combinações lineares das flutuações em todos os demais campos, incluída a componente perpendicular do campo de velocidades. A equação 2.98 pode ser diretamente solucionada para cada valor de α , o coeficiente de restituição, e k . Entretanto, para nós é suficiente considerar a equação 2.97, uma vez que os modos de cisalhamento são preponderantes para investigação da instabilidade do HCS.

O espectro de autovalores mostra que as flutuações com relação ao HCS têm vários modos instáveis, com uma taxa de crescimento exponencial $\exp(s_{\perp} \tau)$, se o tempo é medido através do número médio de colisões τ . Os modos instáveis são os modos de cisalhamento de comprimento de onda longo, onde $k < k_{\perp}^c$, e o chamado modo de aquecimento (“heat mode”) de comprimento de onda longo, onde $k < k_H^c < k_{\perp}^c$. Os números de onda críticos k_{\perp}^c e k_H^c são os valores a partir dos quais o modo em particular se torna estável, ou seja, o autovalor s associado ao modo se torna negativo e quaisquer flutuações decaem exponencialmente. Assim, tais valores são dados diretamente pelas equações 2.97 e 2.98 acima:

$$k_{\perp}^c = \left(\frac{2\zeta^*}{\eta^*} \right)^{1/2}; \quad k_H^c = \left[\frac{4\zeta^*}{5(\kappa^* - \zeta_1^* - \mu^* + \zeta_2^*)} \right]^{1/2}. \quad (2.99)$$

Os demais modos, chamados de “sound modes”, são estáveis para todos os comprimentos de onda [40].

É a dinâmica desses modos ditos lentos que determina a evolução temporal das flutuações correspondentes a comprimentos de ondas longos. Em particular, isso está de acordo com o regime de validade das equações da hidrodinâmica granular, já que não se pode esperar, pela exigência de separação de escalas, que flutuações com comprimento de onda curtos tenham quaisquer relevância do ponto de vista macroscópico. Nos estágios iniciais da evolução, flutuações espontâneas com relação ao HCS ocorrem em todos os comprimentos de onda. Somente aqueles com k menor que k_H^c ou k_{\perp}^c irão crescer exponencialmente.

O modo de crescimento mais rápido é sempre aquele associado ao menor comprimento de onda. Isso pode ser visto através das relações de dispersão [40]. Em sistemas de dimensão finita, o menor número de onda permitido dependerá das condições de contorno impostas ao sistema. Para sistemas submetidos a condições periódicas, este valor é $q_m = \frac{2\pi}{D}$, onde $q_m = \frac{\nu_H(t)}{\sqrt{2}v_0(t)} k_m$ e D são, respectivamente, o número de onda e o tamanho do sistema dado em unidades de comprimento usuais, ou seja, não-reduzidas pela equação 2.88. Para sistemas submetidos a condições reflexivas, o valor é a metade, $q_m = \frac{\pi}{D}$. Se $k_m < k_H^c$, então tanto modos instáveis de cisalhamento como de aquecimento podem ser excitados. Se $k_H^c < k_m < k_{\perp}^c$, então só modos de cisalhamento podem ser excitados. Se $k_m > k_{\perp}^c$, então todos os modos passam a ser estáveis. Pode-se estimar os tempos para o início das instabilidades pelo critério:

$$s_{\mu} \tau_{\mu} \simeq 1 \quad (\mu = \perp, H), \quad (2.100)$$

que implica que a amplitude da flutuação cresceu por um fator de e acima de seu nível inicial. Na medida em que as flutuações permaneçam pequenas e, portanto, possam ser descritas pelas equações linearizadas, o modo de cisalhamento, responsável pela formação de vórtices, permanece desacoplado das flutuações de densidade e temperatura, e o tempo inicial para a formação de estruturas de vórtice é o tempo τ_{\perp} . As flutuações de densidade e temperatura, entretanto, acoplam-se ao modo de aquecimento, responsável pela formação de “clusters”, e o tempo inicial para observar inhomogeneidades espaciais será da ordem de τ_H .

Podemos agora enunciar o resultado mais importante desta seção. Pelo que vimos acima, os critérios para estabilidade linear global de um sistema granular passam a ser os seguintes: se o sistema for submetido a condições de contorno periódicas, então $\frac{\lambda}{D} > \frac{4}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}}k_{\perp}^c$; se o sistema for submetido a condições reflexivas, então $\frac{\lambda}{D} > \frac{8}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}}k_{\perp}^c$. Isso significa que a estabilidade linear global do HCS é função exclusiva de $\frac{\lambda}{D}$, o livre caminho médio do sistema devidamente normalizado pela dimensão do sistema. Estes resultados são importantes para o nosso trabalho, uma vez que procuramos realizar simulações de sistemas que se encontrem dentro das regiões de estabilidade, ou seja, de forma a garantir que o HCS se preserve ao longo de todo o tempo de simulação.

Como corolário importante, pode-se concluir que, se fixarmos o número total de partículas e a dimensão de cada partícula, a estabilidade do sistema passa a depender exclusivamente do seu tamanho. Nesse sentido, se a dimensão de um sistema for suficientemente pequena, não existe modo de instabilidades se formarem e ele não pode desenvolver “clusters” ou vórtices, *independentemente do número de partículas ser bastante elevado*. Este resultado foi parcialmente observado por McNamara e Young [9] em um trabalho onde eles se dedicaram a classificar os diferentes regimes de evolução de um sistema granular. Eles denominaram o regime estável de “estado cinético”. Entretanto, nesse trabalho eles não chegaram a notar que a estabilidade podia ser garantida para um número qualquer de partículas. Como veremos no capítulo 5, os estados estudados por nós correspondem essencialmente a esses “estados cinéticos” de McNamara e Young.

Capítulo 3

Dinâmica Molecular

Conforme foi adiantado na Seção 6 do Capítulo 1, o núcleo deste trabalho consiste no estudo de simulações computacionais de sistemas de esferas rígidas e lisas interagindo por meio de colisões inelásticas instantâneas. Dentre as duas grandes técnicas comumente adotadas, faremos uso exclusivo do método de Dinâmica Molecular (MD), uma vez que somente ele é capaz de produzir resultados fundados na dinâmica real do sistema.

O método de Dinâmica Molecular foi delineado pela primeira vez para um sistema de esferas rígidas por Alder e Wainwright [12]. No caso originalmente estudado, as partículas movem-se com velocidade constante entre colisões perfeitamente elásticas e é possível resolver o problema dinâmico sem quaisquer aproximações, dentro dos limites impostos pela precisão da máquina. Foi necessário algum tempo até que uma tentativa bem sucedida de resolver as equações de movimento para sistemas munidos de potenciais de longo alcance aparecesse [13]. Nesse caso, um procedimento aproximado, realizado passo a passo no tempo, é necessário, uma vez que as forças mudam continuamente à medida que as partículas se movem.

3.1 O Método “Event Driven”

A dinâmica molecular de partículas que interagem somente no contato entre elas deve ser resolvida de um modo qualitativamente diferente do caso de partículas que interagem por potenciais de longo alcance. Da mesma forma, o caso de esferas rígidas também difere substancialmente do caso de esferas macias, onde o contato se realiza por um tempo finito e onde essencialmente um potencial de interação, ainda que seja de curto alcance, também deve ser considerado. Para esferas rígidas, sempre que a distância entre os centros de duas partículas for igual ao seu diâmetro, então uma colisão ocorre. Isso significa que suas velocidades irão mudar descontinuamente, de um modo específico que dependerá do modelo colisional adotado. Portanto, os objetivos primários de um programa de simulação são calcular o intervalo de tempo para uma colisão, prever qual o

par de partículas que irá se chocar e prever quais são os parâmetros de impacto, tudo isso em ordem cronológica.

Ao contrário do caso de sistemas que interagem via potencial, em que se adota um procedimento de cálculo passo a passo no tempo de simulação, o caso de esferas rígidas envolve um procedimento de cálculo colisão a colisão - também chamado de “dirigido por eventos” (“event driven”) -, em que, uma vez realizada uma colisão, procura-se pela próxima a ser realizada. O esquema geral pode ser resumido da seguinte forma:

1. localizar a próxima colisão a ser realizada.
2. mover as partículas em linha reta até que uma colisão ocorra.
3. implementar a dinâmica colisional para o par colidente (como dado pela equação 2.1, por exemplo).
4. calcular as propriedades de interesse, sejam microscópicas (posição e velocidade) ou macroscópicas (médias).
5. retornar ao passo 1.

Assim, o programa tem essencialmente duas tarefas a realizar: o cálculo dos tempos de colisão e a implementação da dinâmica colisional.

A localização da próxima colisão envolve o cálculo dos intervalos de tempo necessários para que todas as possíveis colisões entre pares de partículas ocorram, e isso requer a solução de uma equação quadrática. Essa é a parte mais dispendiosa do programa. Considere-se duas esferas, i e j , de diâmetro a , cujas posições no tempo t são \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j , e cujas velocidades são \mathbf{v}_i e \mathbf{v}_j . Se essas partículas irão colidir no tempo $t + t_{ij}$ então a seguinte equação deverá ser satisfeita:

$$|\mathbf{r}_{ij}(t + t_{ij})| = |\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{v}_{ij}t_{ij}| = a, \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ e $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$. Se se define $b_{ij} = \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}$, então esta equação se torna:

$$v_{ij}^2 t_{ij}^2 + 2b_{ij}t_{ij} + r_{ij}^2 - a^2 = 0, \quad (3.2)$$

que é uma equação quadrática em t_{ij} . Se $b_{ij} > 0$, então as partículas estão se afastando uma da outra e não haverá colisão. Se $b_{ij} < 0$, pode acontecer ainda que $b_{ij}^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - a^2) < 0$, caso em que a equação 3.2 tem raízes complexas e novamente não haverá colisão. Em qualquer outro caso (assumindo-se que as esferas não se encontram em intersecção), duas raízes positivas aparecem, de modo que a menor dentre elas deve corresponder ao tempo de impacto:

$$t_{ij} = \frac{-b_{ij} - (b_{ij}^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - a^2))^{1/2}}{v_{ij}^2}. \quad (3.3)$$

O cálculo de t_{ij} para todos os pares de partículas e a escolha do par correspondente ao menor tempo resume o primeiro passo do programa. Em seguida,

todas as partículas são movidas em linha reta pelo tempo t_{ij} . Nesse ponto, o programa está pronto para a realização da segunda tarefa, que é a colisão propriamente dita, ou seja, uma atualização dos valores das velocidades das partículas colidentes de acordo com a equação 2.1.

3.2 Condições de Contorno

Embora não tenha sido relacionada acima entre os passos a serem executados pelo programa, há uma preocupação essencial a ser levada em consideração e que se refere às condições de contorno a que o sistema simulado será submetido. Esse é um ponto de particular interesse para nós, uma vez que constatamos em que medida uma condição de contorno específica pode influenciar na distribuição de velocidades do sistema.

Em geral, no que se refere à teoria cinética de sistemas de muitas partículas, o interesse pelas condições de contorno é minimizado em função do fato de se considerar situações em que elementos de volume macroscópicos típicos encontram-se suficientemente afastados de quaisquer fronteiras. Ou, equivalentemente, encontram-se sempre circundados por outros elementos de volume típicos com os quais eventualmente trocam partículas, mas que não representam soluções de continuidade na função de distribuição de velocidades ou de posição. Essa situação corresponde a um modelo em que o sistema possui volume e número de partículas infinitos, mas densidade de partículas, ou seja, número de partículas por unidade de volume, finita. Claramente, é uma situação ideal que não é possível de ser reproduzida, nem experimental, nem computacionalmente.

No que concerne à investigação das soluções da equação de Boltzmann, a consideração de condições de contorno não é somente interessante do ponto de vista matemático mas, em muitos casos, obrigatória para que propriedades físicas sejam corretamente obtidas [41]. Se se quer descrever uma situação onde um gás flui através de um corpo sólido ou está confinado em um volume cujas fronteiras são formadas por paredes sólidas, deve-se especificar a função de distribuição nas fronteiras do sistema, antes de resolver a equação cinética pertinente. Tais condições de contorno devem ser capazes de descrever a interação das partículas do gás com as paredes do recipiente. É a partir desta interação que se torna possível, por exemplo, obter a origem das forças de arrasto exercidas pelos gás nas paredes do recipiente ou a taxa de transferência de calor entre o gás e as paredes. Para se chegar à descrição correta das condições de contorno é necessário obter informações de outras áreas da física além da teoria cinética propriamente dita, como por exemplo, a física do estado sólido. As dificuldades associadas a uma investigação teórica nesse campo são fruto do desconhecimento da estrutura das superfícies e das interações entre as partículas do gás e da parede sólida. Em gases moleculares, por exemplo, quando uma partícula colide com a parede do recipiente ela é adsorvida e pode ligar-se quimicamente, dissociar-se, ionizar-se ou mesmo deslocar moléculas da superfície. Além disso, fatores como a limpeza e a temperatura da superfície desempenham papéis cruciais.

3.3 Condições de Contorno Periódicas

Uma maneira de evitar as complicações advindas de se ter que considerar os efeitos da interação com as paredes é mimetizar as propriedades do sistema ideal infinito. Isso se consegue pela imposição das chamadas condições de contorno periódicas. Uma vez definida uma caixa cúbica de lado D , é possível reproduzi-la em todo o espaço tridimensional de modo a formar uma rede infinita. No decurso da simulação, à medida que uma partícula se move na caixa original, todas as suas imagens replicadas periodicamente nas caixas adjacentes se movem de modo idêntico. Daí, quando uma partícula deixa a caixa original, uma de suas imagens irá entrar pela face oposta. Portanto, não existem paredes nos limites da caixa cúbica original. A densidade de partículas no interior da caixa original, assim como no sistema como um todo, é conservada.

É importante observar se as propriedades de um sistema periódico infinito e o sistema macroscópico que ele representa são de fato as mesmas. No caso de potenciais de longo alcance entre as partículas, é de se esperar haver uma substancial interação entre a partícula e suas próprias imagens nas caixas vizinhas. Com isso, a simetria da rede acaba por ser imposta a um sistema que, de fato, deveria ser isotrópico. Entretanto, até mesmo no caso de potenciais de curto alcance, condições periódicas podem induzir anisotropias, principalmente em sistemas pequenos com relação ao número total de partículas [13]. O uso de condições periódicas também impede a ocorrência de flutuações de longo comprimento de onda, uma vez que, para um cubo de lado D , a periodicidade irá suprimir quaisquer ondas de densidade de comprimento de onda maior que D .

No caso particular de simulações de sistemas granulares, Henrique e colaboradores [42], ao estudar propriedades difusivas de gases granulares em duas dimensões, demonstraram que o uso de condições periódicas modifica a dinâmica geral das partículas e introduz importantes correlações no tempo. Como consequência, o coeficiente de difusão calculado com o uso de condições periódicas torna-se fortemente dependente da dimensão do sistema. Um resultado adicional, também encontrado por eles, é o de que o sistema, inicialmente preparado para ser isotrópico e ter momento angular total nulo torna-se, com o decorrer da evolução, anisotrópico e não conserva o momento angular total. O sistema como um todo começa, então, a girar. A explicação para isso é relativamente simples. A distância entre duas partículas quaisquer do sistema não é conservada por transformações de rotação. Isso acontece porque uma rotação por um ângulo fixo pode fazer uma das partículas sair por um lado da caixa e aparecer em outro e portanto a distância entre esta e a outra partícula necessariamente vai mudar. Essa quebra de simetria se traduz por ausência de conservação da quantidade associada, ou seja, o momento angular. Pelo mesmo motivo, podemos ver que condições periódicas preservam o momento linear total do sistema.

Efeitos relacionados ao uso de condições periódicas também foram observados por Orza e colaboradores [40]. Em um estudo analítico e simulacional sobre a presença de correlações de longo alcance e difusão de vórtices em fluxos granulares, estes autores observaram que, em sistemas caracterizados por alta inelasticidade e tamanho D grande o suficiente, de modo que todos os modos

hidrodinâmicos instáveis possam ser excitados, o diâmetro médio dos vórtices formados não cresce indefinidamente. Quando esse diâmetro médio atinge a ordem de grandeza de D , as condições periódicas forçam uma transição para um estado inhomogêneo de escoamento quase-laminar de partículas entre paredes opostas da caixa (“shearing state”). Esta transição é causada pela fusão de vórtices de mesmo sentido. Este fenômeno já havia sido observado por McNamara e Young [9].

As conclusões gerais do trabalho de Orza e colaboradores, citado acima, são as seguintes. Em qualquer sistema granular de esferas rígidas, existe um certo número de escalas de comprimento intrínsecas: o livre caminho médio, a dimensão média de vórtices, o comprimento de onda de estabilidade, etc. Se qualquer uma dessas escalas de comprimento tornar-se da ordem da dimensão do sistema, os efeitos das paredes dominam o comportamento geral do sistema. Nesse caso, a modelagem das interações entre as paredes e as partículas pode ser necessária. No caso de uso de condições periódicas, as escalas de comprimento intrínsecas devem ser bem menores do que a dimensão do sistema, para evitar que a sua dinâmica seja totalmente controlada pelas condições de contorno que, em última instância, são completamente artificiais. Caso contrário, os estados finais podem ser meros artefatos dessas condições de contorno não-físicas. Talvez, modelos mais realísticos de colisões entre as partículas e as paredes do sistema sejam necessários para compreender os estados assintóticos em geometrias finitas.

3.4 Condições de Contorno Reflexivas

Como dissemos acima, condições de contorno periódicas são introduzidas com o explícito objetivo de mimetizar sistemas infinitos e, assim, eliminar a necessidade de se considerar interações das partículas com as paredes do sistema. Entretanto, isso só pode ser conseguido a custo de uma série de problemas. Ainda assim, a esmagadora maioria das simulações em sistemas granulares é realizada com o uso desse tipo de contorno.

A alternativa mais simples é o uso de condições de contorno reflexivas, em que as velocidades das partículas são simplesmente refletidas elasticamente nas paredes do sistema. Henrique e colaboradores [42] usaram condições de contorno reflexivas para obter coeficientes de difusão independentes do tamanho da caixa, o que é uma indicação de que elas não devem introduzir correlações relevantes no sistema.

Condições de contorno reflexivas não são totalmente livres de problemas. Dessas, o mais evidente aparece em sistemas constituídos por um número pequeno de partículas e com dimensão reduzida o suficiente para que uma fração significativa das partículas esteja próxima às paredes e sofra seus efeitos. Em particular, a temperatura granular do sistema tende a ser maior próximo às paredes, o que promove a formação de gradientes que tendem a induzir a formação de “clusters” próximos ao centro da caixa. De modo alternativo ao caso dos contornos periódicos, condições de contorno reflexivas tendem a conservar o momento angular total médio, mas não o momento linear. Voltaremos a falar

mais do uso de contornos reflexivos no Capítulo 5, onde eles serão usados e onde poderemos fazer uma comparação com os contornos periódicos.

Além dessas, outras condições de contorno também podem ser usadas, inclusive com o emprego de geometrias não convencionais. Esipov e Pöschel [23], por exemplo, usaram um recipiente circular com paredes a uma temperatura finita, de modo que, quando uma partícula colidia com as bordas, sofria um espalhamento angular mediado por uma distribuição Maxwelliana com temperatura igual a das paredes. Não nos ocuparemos de nenhuma outra condição de contorno que não as reflexivas e periódicas. Da mesma forma, a geometria dos recipientes será mantida cúbica.

Capítulo 4

O Método da Função Característica Empírica

O objetivo de se implementar a evolução temporal de um sistema de partículas granulares é obter um certo conjunto de propriedades macroscópicas de interesse. Isso é representado pelo passo 4 do procedimento apresentado na Seção 1 do Capítulo 3. De modo direto, obtém-se o conjunto das posições e velocidades das partículas do sistema após este ter evoluído por um tempo t . Em seguida, pode-se passar ao cálculo de propriedades médias do sistema, como seu centro de massa, sua velocidade média global, sua energia cinética média global, etc., que são simples médias aritméticas, tomadas sobre o número total de partículas, de suas posições, velocidades, energias cinéticas, etc. O sistema simulado via MD é, obviamente, um sistema determinístico, o que significa que o valor dessas quantidades é previsível com precisão absoluta - ao menos em princípio, se ignorarmos as imprecisões introduzidas pela máquina - como função exclusiva de suas posições e velocidades iniciais. Para que as quantidades médias acima tenham valor do ponto de vista de uma mecânica estatística - e a função de distribuição de uma partícula seja corretamente calculada - o requisito claro a ser cumprido é que o número de partículas do sistema seja suficientemente grande. A determinação de funções de distribuição de velocidades em sistemas com baixo número de partículas apresenta, portanto, uma dificuldade técnica.

O tratamento estatístico dos dados de simulação geralmente é realizado com base em métodos de contagem direta (histogramas) ou algum procedimento de estimativa, como o chamado “kernel estimator technique”, que procura construir a distribuição de probabilidade por meio de uma soma de funções normalizadas e suficientemente concentradas, em geral Gaussianas [17]. Para obter distribuições precisas, essas metodologias necessitam de amostragens numericamente significativas. No caso das distribuições de velocidade de sistemas granulares, esse problema torna-se bastante significativo quando se estuda intervalos de velocidade muito maiores que a velocidade térmica, uma vez que se espera encontrar aí grandes divergências entre a função de distribuição exata e uma aproximação

Gaussiana, devido ao fenômeno de superpopulação das caudas. Além disso, o número de elementos da amostra na região das caudas é significativamente menor, o que novamente põe dificuldades para se obter uma boa estatística.

O núcleo deste trabalho consiste em empregar uma metodologia alternativa que permita, entre outras coisas, tratar essa dificuldade. Para tanto, nós introduzimos o método da Função Característica Empírica (FCE) [43, 44, 45], o qual passamos a expor.

4.1 Variáveis Aleatórias e Função de Distribuição

Seja uma variável aleatória X . Tecnicamente, a função de distribuição [46, 47] da variável aleatória X é a função definida por:

$$F(x) = P(X \leq x), \quad (4.1)$$

onde $P(X \leq x)$ designa a probabilidade de que a variável aleatória X assumira valores menores que x , onde $-\infty < x < \infty$. Pode-se demonstrar que uma função de distribuição possui as seguintes propriedades: (i) é não-decrescente, (ii) é contínua à direita, (iii) $F(-\infty) = 0$ e (iv) $F(\infty) = 1$. É possível demonstrar também que qualquer função que satisfaça a essas propriedades é uma função de distribuição de alguma variável aleatória.

Uma variável aleatória pode ser discreta ou contínua. A variável aleatória X é absolutamente contínua se existe uma função $\rho(x) \geq 0$ tal que

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \rho(t) dt. \quad (4.2)$$

Nesse caso, dizemos que $\rho(x)$ é a função densidade de probabilidade de X . Uma função $\rho(x) \geq 0$ é densidade de alguma variável aleatória se, e somente se, $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(t) dt = 1$. Pela definição, X só possui uma densidade se $F(x)$ é contínua e derivável por partes, o que nem sempre é o caso. Devemos aqui atentar para uma possibilidade de confusão terminológica. Como ficará explícito pelo que se seguirá, vínhamos até aqui usando o termo função de distribuição para designar o que tecnicamente é a densidade associada a função de distribuição. Contudo, esse é o costume da literatura e continuaremos usando a expressão indistintamente, pois ficará claro que em todas as aplicações tratar-se-á da densidade e não da distribuição em si.

A média de X (ou esperança, ou valor esperado) é definida por:

$$EX = \int x dF(x), \quad (4.3)$$

onde a integral é compreendida como sendo do tipo Riemann-Stieltjes. Se X tem densidade, então:

$$EX = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx, \quad (4.4)$$

e a média assume sua forma usual como uma integral de Riemann de uma densidade de probabilidade, ou seja, o limite de uma média ponderada onde os pesos são dados por uma função contínua. Há uma explicação intuitiva para essa definição, baseada na interpretação de probabilidade como limite de frequências relativas. Tomando o caso discreto por facilidade, interpretemos X como um característico numérico do resultado de um experimento aleatório repetido, digamos, N vezes, de forma independente. Nesses N experimentos, se N é grande, as observações tomarão o valor x_i com frequência relativa de aproximadamente $p(x_i) \leq 1$. Ou seja, x_i aparecerá mais ou menos $Np(x_i)$ vezes nas N observações. Portanto, o valor médio observado nos N ensaios, ou seja, a média aritmética dos N valores observados, será aproximadamente igual a $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j \cdot Np(x_j) = \sum_{j=1}^N x_j \cdot p(x_j)$. Este valor será o limite quando $N \rightarrow \infty$, isto é, o valor médio obtido em N ensaios convergirá para EX quando $N \rightarrow \infty$. Esta é a chamada Lei dos Grandes Números, de importância capital em qualquer teoria estatística. A extensão desta interpretação para o caso contínuo é imediata.

O valor de $E(X-b)^k$ é chamado k -ésimo momento de X em torno de b , para b real e k inteiro não-negativo. Se $b = 0$, então EX^k é chamado simplesmente de k -ésimo momento de X . Se a média existe, então o k -ésimo momento em torno da média $E(X - EX)^k$ se chama k -ésimo momento central de X . É claro que o primeiro momento é igual a média e seu momento central é nulo. O segundo momento central é chamado de variância de X : $\text{Var}(X) = EX^2 - (EX)^2$. A raiz quadrada positiva da variância é chamada de desvio-padrão σ_X . Pode-se mostrar que, se o k -ésimo momento é finito, então todos os momentos de ordem menor do que k também são finitos.

Se X e Y são variáveis aleatórias independentes, então $E(XY) = EX \cdot EY$. O inverso não é necessariamente verdadeiro. A diferença entre os valores de $E(XY)$ e $EX \cdot EY$ é a covariância entre X e Y . Se a covariância entre duas variáveis aleatórias é nula, diz-se que elas são linearmente não-correlacionadas. Desse modo, independência implica ausência de correlação linear.

Será útil oportunamente fazer uso do conceito de variável aleatória reduzida e centralizada, \bar{X} , dada por:

$$\bar{X} = \frac{X - EX}{\sigma_X}, \quad (4.5)$$

também chamada de padronização de X , pois expressa o valor de X em unidades de desvio-padrão. A variável aleatória padronizada sempre possui média nula e variância um.

Dada uma densidade de probabilidade $\rho_X(x)$, associada à variável aleatória X , a densidade associada à variável aleatória $Y = bX + c$, $\rho_Y(y)$, é dada por:

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{b} \rho_X\left(\frac{y - c}{b}\right). \quad (4.6)$$

Desse modo, a densidade $\rho_{\bar{X}}(\bar{x})$ associada à variável reduzida \bar{X} é dada por:

$$\rho_{\bar{X}}(\bar{x}) = \sigma_X \rho_X(\sigma_X \bar{x} + EX). \quad (4.7)$$

Como exemplo, se tomarmos a densidade da distribuição Gaussiana:

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp - \left(\frac{(y - \mu)^2}{2\sigma^2} \right), \quad (4.8)$$

então, sua distribuição reduzida, também chamada “normal” é

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{x^2}{2} \right). \quad (4.9)$$

4.2 Função Característica e Função W de Lévy

A distribuição associada a uma variável aleatória X pode ser igualmente determinada por $F(x)$ ou pela sua densidade $\rho(x)$, no caso absolutamente contínuo. Há, entretanto, uma terceira possibilidade: a função característica $\psi(z)$ de X , uma função complexa de argumento real definida pela seguinte média:

$$\psi(z) = E \exp(izX) \equiv E \cos(zX) + iE \sin(zX) \equiv \int \exp(izx) dF(x). \quad (4.10)$$

Claramente, somente no caso de X possuir densidade a função característica torna-se a usual transformada de Fourier da densidade de probabilidade:

$$\psi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) \exp(izx) dx. \quad (4.11)$$

Portanto, mesmo que uma densidade não esteja definida, ainda assim é possível definir a função característica de uma distribuição. Pode-se provar que a função característica possui as seguintes propriedades:

1. Ela é limitada por um: $|\psi(z)| \leq 1$;
2. Ela assume o valor um no ponto zero: $\psi(0) = 1$;
3. Seu complexo conjugado satisfaz a $\overline{\psi(z)} = \psi(-z)$;
4. Se X e Y são independentes, então a função característica da soma das variáveis $X + Y$ é igual ao produto das funções características de cada uma delas.
5. Uma variável aleatória X tem distribuição simétrica em torno de zero se, e somente se, sua função característica $\psi(z)$ é real para todo z .
6. Se $Y = aX + b$, então $\psi_Y(z) = \exp(izb)\psi_X(az)$. Como corolário, a função característica associada à uma variável reduzida e centralizada \bar{X} é dada por $\psi_{\bar{X}}(z) \equiv \bar{\psi}_X(z) = \exp(iz\frac{EX}{\sigma_X})\psi_X(\frac{z}{\sigma_X}) \equiv \psi_X(\frac{z}{\sigma_X})$.
7. Se $E|X|^n < \infty$, então $\psi_X(z)$ possui n derivadas contínuas e

$$\psi_X^{(k)}(z) = \int (ix)^k \exp(izx) dF(x); \quad k = 1, 2, 3, \dots, n \quad (4.12)$$

Em particular, $\psi_X^{(k)}(0) = \frac{d^k}{dz^k} \psi_X(z) \Big|_{z=0} = i^k EX^k$, de modo que a função característica é uma espécie de função geradora de momentos estatísticos.

O conceito de função característica é de bastante utilidade em teoria de probabilidade pura. Particularmente, com ela propriedades - como a de convergência em distribuição - e alguns teoremas de extrema relevância podem ser demonstrados com maior facilidade. Esse é o caso, por exemplo, do Teorema do Limite Central, o mais importante dos teoremas em teoria de probabilidade, com aplicações em física de caráter fundamental. O Teorema do Limite Central possui versões variadas, cada uma delas com maior ou menor grau de generalidade [46, 47].

O matemático francês Paul Lévy apresentou uma versão do Teorema do Limite Central em que ele se utiliza de uma função, denotada por nós como função W , que será utilizada como ferramenta central neste trabalho. Lévy demonstrou, no trabalho intitulado “*Sur la loi de Gauss*” [48], que, para qualquer variável aleatória com desvio-padrão finito, a função característica associada à sua variável reduzida e centralizada pode ser escrita como

$$\bar{\psi}(z) = \exp\left(-\frac{z^2}{2}(1+W(z))\right) \quad (4.13)$$

onde a função $W(z) = W_R(z) + iW_I(z)$, doravante chamada função W de Lévy, é uma função complexa e contínua em um intervalo real aberto $-\epsilon < z < \epsilon$, tal que $W_R(z)$ é uma função par, $W_I(z)$ é uma função ímpar e $W(0) = 0$. A distribuição Gaussiana é caracterizada por $W(z) = 0$ para todo z .

A função $W(z)$ pode ser calculada a partir da função característica $\bar{\psi}(z)$ pelas fórmulas:

$$W_R(z) = -\frac{z^2 + 2 \ln\left(\sqrt{\bar{\psi}_R(z)^2 + \bar{\psi}_I(z)^2}\right)}{z^2} \quad (4.14)$$

$$W_I(z) = \frac{1}{z^2} \arctan\left(\frac{\bar{\psi}_I(z)}{\sqrt{\bar{\psi}_R(z)^2 + \bar{\psi}_I(z)^2}}, \frac{\bar{\psi}_R(z)}{\sqrt{\bar{\psi}_R(z)^2 + \bar{\psi}_I(z)^2}}\right) \quad (4.15)$$

onde a função $\arctan(y, x)$ computa o valor principal do argumento θ do número complexo $x + iy \equiv r(\cos \theta + i \sin \theta)$, ou seja, de modo que $-\pi < \theta \leq \pi$.

As propriedades 6 e 7 permitem escrever a expansão da função característica reduzida $\bar{\psi}(z)$ em uma série de Taylor:

$$\bar{\psi}(z) = 1 + i^2 \frac{1}{2} z^2 + i^3 \frac{\nu_3}{3!} z^3 + i^4 \frac{\nu_4}{3!} z^4 + O(z^5), \quad (4.16)$$

onde lembramos que a variável reduzida e centralizada tem média nula e variância um. Os ν_k 's são simplesmente os momentos estatísticos de ordem mais alta da variável reduzida \bar{x} , escritos explicitamente como:

$$\nu_k = \frac{E(x - Ex)^k}{\sigma^k}; \quad k = 3, 4, 5, \dots \quad (4.17)$$

Isso significa que as funções $W_R(z)$ e $W_I(z)$ também podem ser expandidas:

$$W_R(z) = K_2 z^2 + K_4 z^4 + K_6 z^6 + K_8 z^8 + O(z^{10}), \quad (4.18)$$

$$W_I(z) = K_1 z + K_3 z^3 + K_5 z^5 + K_7 z^7 + O(z^9), \quad (4.19)$$

onde a relação entre os K_i e ν_i pode ser calculada de maneira direta:

$$\begin{aligned} K_1 &= -\frac{1}{3}\nu_3, & K_2 &= \frac{1}{4} - \frac{1}{12}\nu_4, & K_3 &= -\frac{1}{6}\nu_3 + \frac{1}{60}\nu_5, \\ K_4 &= \frac{1}{12} - \frac{1}{24}\nu_4 + \frac{1}{360}\nu_6, \text{ etc.} \end{aligned} \quad (4.20)$$

A função W de Lévy foi recentemente usada por Annibal Figueiredo e colaboradores [49] para analisar o processo de convergência de soma de variáveis aleatórias em séries temporais estocásticas. Neste trabalho, ela será usada para medir distribuições assintóticas e caracterizar de modo preciso seus afastamentos com relação a uma distribuição Gaussiana. Como veremos, a função W pode ser obtida diretamente dos dados de simulação, independentemente do conhecimento dos momentos estatísticos da distribuição ou dos momentos da expansão de Sonine, mesmo que estes não sejam finitos. A função W caracteriza, assim, de modo único e preciso uma distribuição.

Vamos ilustrar o uso da função W com um exemplo. Consideremos duas distribuições reduzidas analíticas $\rho(x)$ bastante próximas uma da outra e que dificilmente poderiam ser distingüidas visualmente, mesmo em um gráfico monolog, como dado na figura 4.1.

Elas são distribuições artificialmente construídas como tendo uma parte central Gaussiana e uma cauda de alta velocidade exponencial - como se espera encontrar em gases granulares no HCS - tais que elas sejam contínuas e diferenciáveis nos pontos de conexão $x = 3,00$ e $x = 3,05$:

$$\begin{aligned} \rho_1(x) &= 0,399 \exp(-0,501x^2), & \text{se } x < 3,05, \\ \rho_1(x) &= 42,414 \exp(-3,059x), & \text{se } x > 3,05, \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} \rho_2(x) &= 0,399 \exp(-0,502x^2), & \text{se } x < 3,00, \\ \rho_2(x) &= 36,544 \exp(-3,011x), & \text{se } x > 3,00. \end{aligned} \quad (4.22)$$

As funções W correspondentes podem ser obtidas numericamente a partir das equações 4.21 e 4.22 calculando-se a função característica a partir da equação 4.11 e usando, por fim, a equação 4.14. O resultado é dado na figura 4.2. A diferença entre as distribuições torna-se agora evidente.

5.eps 5.eps

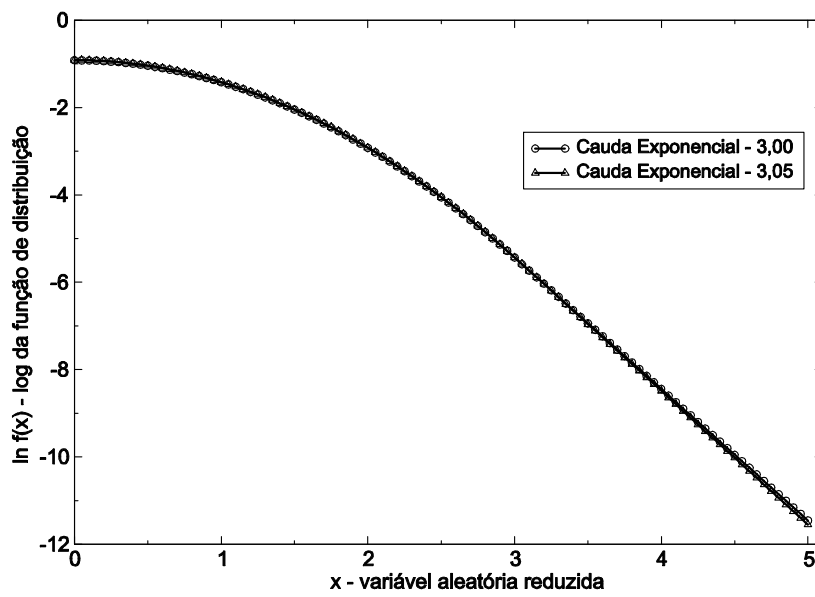


Figura 4.1: Duas distribuições reduzidas $\rho(x)$ que possuem parte central Gaussiana e cauda de alta energia exponencial, a partir dos pontos $x = 3,00$ e $x = 3,05$.

6.eps 6.eps

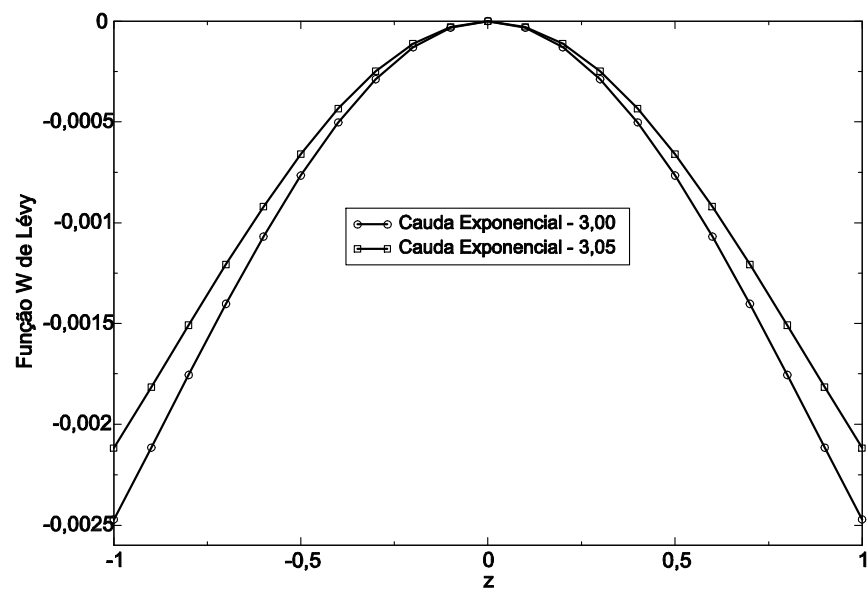


Figura 4.2: Funções W correspondentes às distribuições dadas na figura 4.1.

4.3 Função Característica Empírica

No tratamento de dados estatísticos empiricamente obtidos, associados a uma variável aleatória X qualquer, em geral não é possível conhecer *a priori* nenhuma expressão teórica para quaisquer das já citadas formas usadas para descrever a sua distribuição. Por esse motivo, é interessante encontrar métodos para estimar a distribuição com base exclusivamente nos dados empíricos. Para a função de distribuição $F(x)$, a estimativa mais elementar é dada pela chamada Função de Distribuição Empírica $F_N(x) = N(x)/N$, onde $N(x)$ é a quantidade de vezes que X assume o valor $X_j \leq x$, com $1 \leq j \leq N$, com N representando o número total de elementos da amostra estatística coletada.

No que concerne ao objeto de interesse principal do ponto de vista da física, não restam dúvidas que a função densidade de probabilidade é, num primeiro momento, o mais interessante de ser estimado, uma vez que ela pode ser colocada em relação direta com a função de distribuição de uma partícula das teorias cinéticas. Uma estimativa da densidade de probabilidade $\rho_N(x)$ associada a uma amostra empírica de N elementos pode ser, por exemplo [45]:

$$\rho_N(x) = \frac{F_N(x+h) - F_N(x-h)}{2h}, \quad (4.23)$$

onde h é um número positivo adequadamente escolhido. Pode-se ver que h deve ser escolhido como uma função de N que tenda a 0 quando $N \rightarrow \infty$. No lugar de estudar exclusivamente a estimativa acima, pode-se passar a estudar uma classe mais geral de estimativas dada por:

$$\rho_N(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{h} K\left(\frac{x-y}{h}\right) dF_N(y) = \frac{1}{Nh} \sum_{j=1}^n K\left(\frac{x-X_j}{h}\right), \quad (4.24)$$

onde a função $K(y)$ é dada por:

$$\begin{aligned} K(y) &= \frac{1}{2}, & \text{se } |y| \leq 1, \\ K(y) &= 0, & \text{se } |y| > 1. \end{aligned} \quad (4.25)$$

É fácil verificar que a definição 4.24 reduz-se à equação 4.23, com a função $K(y)$ dada acima. Entretanto, a estimativa dada por 4.24 é essencialmente uma média ponderada sobre a função de distribuição da amostra, com $K(y)$ uma função peso. Isso abre a possibilidade de escolher outras funções peso e conduz ao problema de estudar as propriedades estatísticas de estimativas da forma 4.24, com $K(y)$ e $h(N)$ adequadamente escolhidos para satisfazerem condições suficientes que garantam a convergência da estimativa $\rho_N(x)$ para uma densidade $\rho(x)$ [45]. Esta é a base teórica para aplicação das chamadas “kernel estimator techniques”. Qualquer função normalizada e mais ou menos fortemente concentrada pode ser usada como “kernel”. Em particular, pode-se escolher a função $K(y)$ como uma Gaussiana, por exemplo [45, 17].

Uma alternativa para estudar distribuições empíricas de uma variável aleatória é lançar mão do conceito de função característica. Coerentemente com as definições dadas nas equações 4.3 e 4.10, e com a definição de Função de Distribuição Empírica, dada acima, pode-se definir a chamada *Função Característica Empírica (FCE)*, ou seja, a média, na amostra empírica, da variável aleatória $\exp(izX)$:

$$\begin{aligned}\psi_N(z) &= \int \exp(izx) dF_N(x) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \exp(izX_j) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos(zX_j) + \frac{i}{N} \sum_{j=1}^N \sin(zX_j).\end{aligned}\tag{4.26}$$

Pode-se mostrar [43] que a FCE converge, sob algumas restrições gerais, para a função característica $\psi(z)$ da distribuição, quando $N \rightarrow \infty$. Esse resultado fornece uma nova ferramenta para a estimativa de densidades de distribuição, uma vez que, obtida a FCE, basta calcular a transformada de Fourier inversa para obter a densidade estimada.

A função característica irá mostrar-se uma ferramenta bastante útil na obtenção de informação de amostras estatísticas. Pela sua própria natureza matemática, ela possui, em cada ponto, informação global sobre a distribuição do sistema. Com base nessa propriedade, é esperado que ela permita o cômputo da função de distribuição do HCS com mais alto grau de precisão que os métodos tradicionais, principalmente no caso em que os sistemas possuam número de partículas muito baixo, caso em que uma boa estatística pode ficar comprometida. Da mesma forma, esperamos que seu uso seja valioso nos pontos em que a densidade de partículas é naturalmente baixa, independentemente do número de partículas total ser grande, como na região das caudas da distribuição.

Capítulo 5

Medidas de Funções de Distribuição

5.1 Simulação

Nas simulações implementadas neste trabalho, serão considerados sistemas tridimensionais compostos por N partículas esféricas de diâmetro a e massa unitária m . O recipiente será uma caixa cúbica de volume V também unitário. Assim, a dimensão linear D do sistema será sempre fixa e igual a um. Quanto à dinâmica colisional, limitaremos nossas investigações ao modelo de esferas rígidas e lisas, interagindo por meio de colisões instantâneas com coeficiente de restituição normal constante α . A troca de suas velocidades se dá de acordo com a equação 2.1:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^* &= \mathbf{v}_i - \frac{1 + \alpha}{2}(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \\ \mathbf{v}_j^* &= \mathbf{v}_j + \frac{1 + \alpha}{2}(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}.\end{aligned}$$

O sistema tipicamente simulado por nós possuirá número de partículas que não excederá a ordem de 10^4 , embora em sua maioria eles estejam situados na faixa de 10^2 a 10^3 . Essas ordens de grandeza não são ditadas por razões exclusivas de capacidade computacional. De fato, é parte do nosso interesse investigar propriedades estatísticas de sistemas com baixo número de partículas. Como veremos, sistemas constituídos por um número finito de partículas possuem propriedades estatísticas intrinsecamente diferentes daquelas esperadas no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$.

Não é usual fazer simulações de gases granulares em sistemas tridimensionais. Na maioria da literatura os sistemas utilizados são bidimensionais. Em sistemas tridimensionais, entretanto, o problema do colapso inelástico não aparece (ver Seção 2 do Capítulo 1).

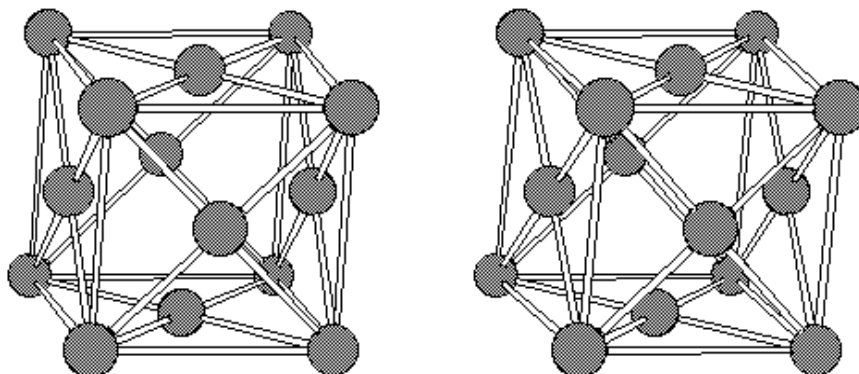


Figura 5.1: Exemplo da rede FCC, usada para dispor as esferas no início da simulação

Simulações MD com sistemas tridimensionais e constituídos por um baixo número de partículas em regime de esfriamento homogêneo, embora minoritárias, já foram objeto de interesse anterior, como pode ser visto nos trabalhos de Lutsko [50], Macnamara e Young [9] e outros. Entretanto, o foco desses e de outros trabalhos estava voltado para a determinação de propriedades como coeficientes de estrutura para fluidos, função de distribuição de pares de partículas em contato e determinação de regimes para formação de inhomogeneidades. Desse modo, um estudo sistemático e completo das propriedades de sistemas caracterizados pelo número pequeno de partículas ainda está por ser feito e, em particular, o estudo das funções de distribuição de velocidades assintóticas em diferentes regimes de evolução e diferentes modelos colisionais.

Para iniciar a evolução do sistema, é preciso posicionar as esferas dentro da caixa. O modo como essa disposição inicial é feita é arbitrário. O importante é que as esferas sejam distribuídas o mais homoganeamente possível. Desse modo, assumiremos a caixa como sendo subdividida em células formando uma rede do tipo FCC (“Face Centered Cubic”) (ver figura 5.1).

Segundo essa disposição, uma partícula é colocada em cada vértice e em cada centro de face do cubo. Uma rede FCC é a disposição de células que permite colocar o maior número de esferas de diâmetro fixo dentro de uma caixa cúbica de volume fixo. A relação entre o número total de células N_c , em cada direção do espaço, e o número total de esferas dispostas nesse tipo de rede é dada por $N = 4(N_c)^3$.

Queremos escolher a distribuição inicial de velocidades dentro de uma classe bastante ampla de distribuições não-Gaussianas isotrópicas, ou seja, cuja dependência ocorra somente no módulo da velocidade. Para isso, escolhemos como distribuições iniciais as chamadas distribuições de Lévy truncadas [49], correspondentes a um tipo especial de distribuições de Cauchy:

$$\rho(v) = \frac{1}{2 \arctan(L)} \frac{1}{1+v^2}, \quad \text{se } -L \leq v \leq L, \quad (5.1)$$

$$\rho(v) = 0, \quad \text{se } v < -L \text{ ou } v > L,$$

onde L é o parâmetro de truncagem da distribuição e que a define dentro da classe. Qualquer outra distribuição inicial para as velocidades poderia ser escolhida, inclusive uma Gaussiana, que claramente não faz parte da classe definida acima.

Quanto às condições de contorno, adotaremos alternativamente ora contornos periódicos, ora contornos reflexivos.

Cada sistema simulado será caracterizado por uma condição de contorno específica e por mais três parâmetros:

1. o número de partículas N ;
2. o coeficiente de restituição α e
3. o parâmetro $\delta = Na^2$ (ou, equivalentemente, o diâmetro da partícula, a).

Como veremos, esses quatro fatores, em princípio independentemente, conduzem o sistema para distribuições de velocidade assintóticas totalmente diferentes. O parâmetro $\delta = Na^2$ é evidentemente relacionado com o livre caminho médio, dado por $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\chi na^2} = \frac{2v_0}{\sqrt{\pi}\omega}$, onde v_0 é a velocidade térmica do sistema, χ é a função de distribuição de pares de partículas no contato, n é a densidade de partículas e ω é a frequência colisional, ou seja, o inverso do tempo médio de colisão, τ_c .

De fato, para definir sistemas em regimes de baixa densidade, faz-se necessário apenas um limite inferior para λ , denotado por λ_0 , o que se obtém notando-se que a frequência colisional pode ser aproximada pelo valor de Enskog ω_0 , ou seja, o inverso do valor inicial do tempo médio de colisão $\tau_c(0)$, dado pela equação 2.18. Para $d = 3$, temos que $\omega_0 = 2\sqrt{2}\pi\chi na^2 v_0$. No regime de baixas densidades, onde trabalharemos, pode-se assumir $\chi = 1$. Assim, pode-se escrever $\lambda_0 = 1/\sqrt{2}\pi na^2$. Das definições $n = N/V$ e da imposição $V = D^3 \equiv 1$, para o volume da caixa, obtém-se $\lambda_0 = 1/\sqrt{2}\pi Na^2$. Portanto, fixar o valor de $\delta = Na^2$ é equivalente a fixar um limite inferior para o parâmetro de livre caminho médio.

Como vimos na Subseção 6.2 do Capítulo 2, o parâmetro que define os limites de estabilidade do sistema é exatamente o livre caminho médio. Isto significa que a existência de estados estacionários depende do valor do parâmetro δ , o qual deve ser escolhido convenientemente abaixo de um certo valor crítico. Ainda assim, a razão de escolher $\delta = Na^2$ como parâmetro para definir um sistema não se resume à sua relação com o livre caminho médio e com a estabilidade do sistema. Como veremos abaixo, é ele que define o chamado limite de Boltzmann-Grad, condição necessária para a validade rigorosa da equação de Boltzmann [41].

Quanto às dimensões das grandezas de interesse, por força das definições e convenções previamente estabelecidas, todos os comprimentos serão medidos em

unidades da dimensão da caixa D . Em particular, o tamanho da partícula e o livre caminho médio são sempre normalizados à dimensão da caixa e, portanto, são adimensionais. Isso faz $\delta = Na^2$ automaticamente adimensional.

5.2 Caracterização dos Estados Assintóticos

Passemos agora, às aplicações. Vamos considerar como variável aleatória uma das componentes do vetor velocidade \mathbf{v} , por exemplo, v_x . A distribuição de velocidades é dada por $\rho(\mathbf{v}, t) \equiv \rho(v_x, v_y, v_z, t)$. Lembremos que ela não é a rigor uma distribuição de probabilidade, pois $n = \int d\mathbf{v}\rho(\mathbf{v}, t)$, ou seja, ela não é normalizada. Portanto, em todas as considerações envolvendo média sobre o ensemble, devemos dividir por n para obter uma distribuição de probabilidade correta. A distribuição de velocidades associada à variável v_x é:

$$g(v_x, t) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \rho(v_x, v_y, v_z, t). \quad (5.2)$$

Para obter a variável reduzida associada a v_x , devemos calcular a média e o desvio-padrão com o uso da equação acima. Por isotropia, é fácil ver que a média de v_x é nula: $\langle v_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv_x v_x g(v_x, t) = 0$. A variância é calculada como:

$$\langle v_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv_x v_x^2 g(v_x, t) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{v} v_x^2 \rho(\mathbf{v}, t) \quad (5.3)$$

e, com o uso da definição de temperatura granular, dada pela equação 2.13, obtemos o desvio-padrão $\sigma = \sqrt{\langle v_x^2 \rangle} = \frac{v_0}{\sqrt{2}}$. Portanto, a variável reduzida associada a v_x é:

$$c_x = \frac{\sqrt{2}v_x}{v_0} \quad (5.4)$$

Nota-se que a variável reduzida não corresponde exatamente à variável escalada comumente usada na teoria cinética de gases granulares $\mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{v_0}$, mas é proporcional a ela.

Consideremos agora a função característica empírica (equação 4.26) associada à variável reduzida:

$$\psi(z, \tau) = \langle \exp(izc_x) \rangle_{\tau} \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \exp(izc_x(\tau)) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \cos(zc_x(\tau)) \quad (5.5)$$

onde a média é calculada em um tempo τ correspondente ao número médio de colisões por partícula. Como estamos supondo uma distribuição simétrica de velocidades, a função característica empírica só deverá ter parte real e é par. A função W compartilha essas mesmas propriedades e é dada por (equação 4.14):

$$W(z, \tau) = -\frac{z^2 + 2\ln(\psi(z, \tau))}{z^2} \quad (5.6)$$

O ponto crucial do ponto de vista estatístico é o seguinte. Escolher um único sistema, definindo N , α e δ , fazê-lo evoluir a partir de uma condição inicial dada (ou seja, implementar uma trajetória) e medir a função W no tempo específico τ , seguramente não produzirá nenhum resultado confiável, a menos que N seja muito grande. Em nosso caso, em que N é certamente pequeno desse ponto de vista, isso significa um problema a ser resolvido. Para suprir essa deficiência, deve-se fazer a estatística com base não somente em uma única trajetória, mas sim em um conjunto suficientemente grande delas. Evidentemente, as trajetórias devem ser escolhidas de modo a diferirem somente muito ligeiramente em sua condição inicial. Como vimos, a distribuição espacial das partículas é sempre fixa. No momento de implementar a condição inicial na distribuição de velocidades, usa-se um gerador de números aleatórios e uma rotina específica (ver Apêndice G da ref. [13]) para produzir uma distribuição não-uniforme segundo a forma funcional dada na equação 5.1. Com diferentes sementes para o gerador aleatório, ligeiramente distintas condições iniciais são produzidas.

5.2.1 Estados estacionários

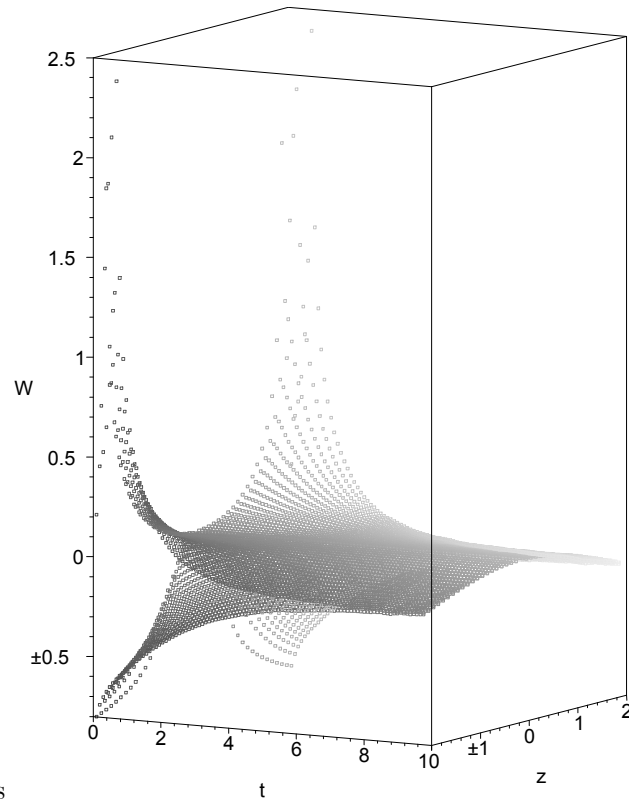
Posta a metodologia, a primeira questão a ser abordada refere-se à existência de estados assintóticos estacionários para o HCS. Nas figuras 5.2 e 5.3, nós mostramos a evolução temporal de $W(z, \tau)$ para duas condições iniciais distintas, correspondentes à escolha de $L = 0, 1$ e $L = 40, 0$ na equação 5.1. O sistema é definido pelo seguinte conjunto de parâmetros: $N = 256$, $\alpha = 0, 1$ e $\delta = 0, 7$, onde implementamos condições de contorno periódicas e reflexivas. As curvas são o resultado da média sobre 1000 trajetórias, no intervalo $0 < \tau < 10$.

As figuras 5.2 e 5.3 mostram que, embora as condições iniciais na distribuição de velocidades sejam muito distintas, ambas convergem para a mesma distribuição, apresentando um estado transiente muito breve, que não dura mais do que 10 colisões por partícula, em média. As figuras 5.4 e 5.5 mostram o trecho de evolução correspondente ao intervalo $10 < \tau < 30$. Depois de passado o período transiente, o estado atingido é estacionário por um tempo indeterminado.

As figuras 5.2, 5.3, 5.4 e 5.5 mostram a existência de estados assintóticos estacionários independentes da condição inicial para um sistema que é um caso extremo: inelasticidade bastante elevada e número de partículas extremamente baixo. Como veremos, isso é função exclusiva da escolha que fizemos do valor do parâmetro δ . Além disso, os estados estacionários são não-Gaussianos, como fica claro pelo não anulamento da função W ao longo do tempo.

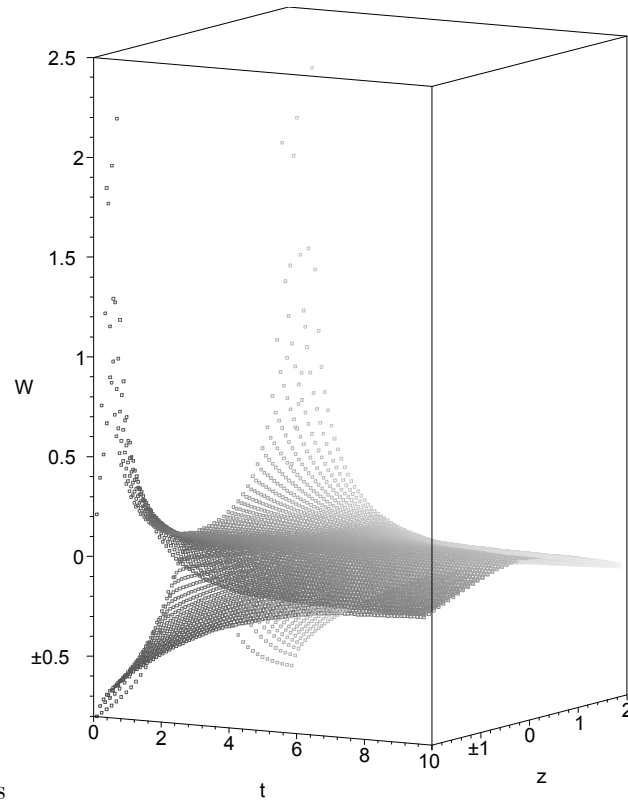
5.2.2 A influência das condições de contorno

Tomemos o mesmo sistema, caracterizado pelo conjunto de parâmetros: $N = 256$, $\alpha = 0, 1$ e $\delta = 0, 7$. Ambas as condições de contorno serão assumidas:



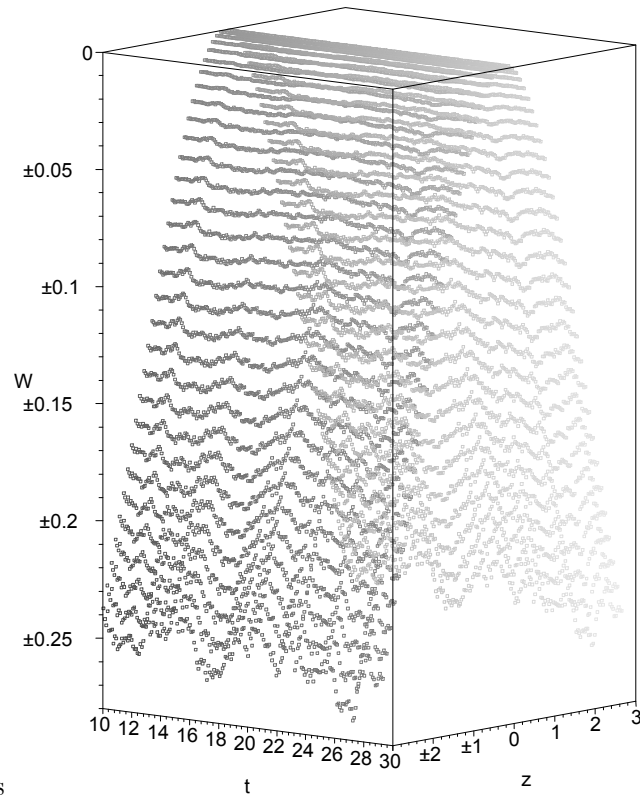
7.eps 7.eps

Figura 5.2: Evolução temporal de $W(z, \tau)$ no período transiente. Condições iniciais: $L = 0, 1$ e $L = 40, 0$. Parâmetros do sistema: $N = 256$, $\alpha = 0, 1$ e $\delta = 0, 7$, condições de contorno reflexivas.



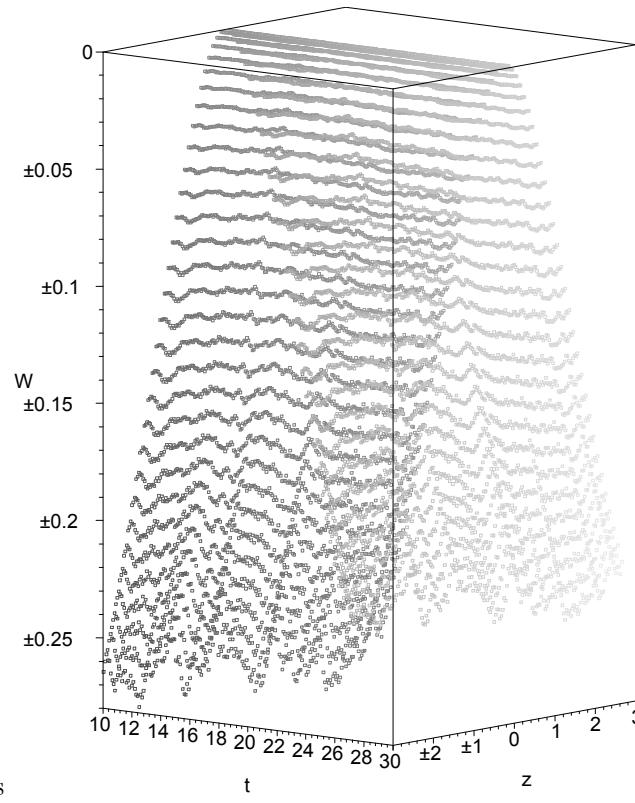
7b.eps 7b.eps

Figura 5.3: Evolução temporal de $W(z, \tau)$ no período transiente. Condições iniciais: $L = 0, 1$ e $L = 40, 0$. Parâmetros do sistema: $N = 256$, $\alpha = 0, 1$ e $\delta = 0, 7$, condições de contorno periódicas.



8a.eps 8a.eps

Figura 5.4: Evolução temporal de $W(z, \tau)$ no período estacionário. Condição inicial: $L = 0, 1$. Parâmetros do sistema: $N = 256$, $\alpha = 0, 1$ e $\delta = 0, 7$, condições de contorno reflexivas.



8d.eps 8d.eps

Figura 5.5: Evolução temporal de $W(z, \tau)$ no período estacionário. Condição inicial: $L = 40$. Parâmetros do sistema: $N = 256$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, condições de contorno periódicas.

9.eps 9.eps

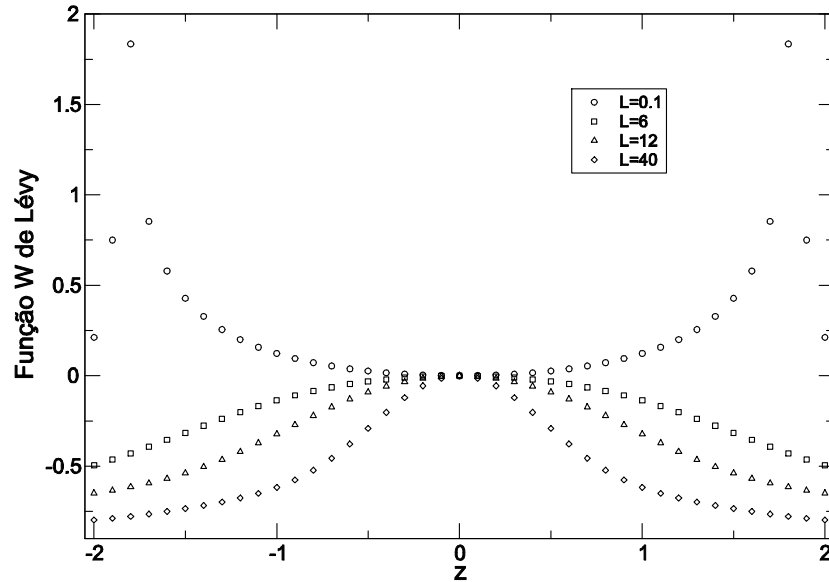


Figura 5.6: Funções $W(z, 0)$ correspondentes a quatro condições iniciais ($L = 0, 1$, $L = 6$, $L = 12$, $L = 40$).

ora periódicas, ora reflexivas. Vamos escolher um conjunto de quatro condições iniciais $L = 0, 1$, $L = 6$, $L = 12$, $L = 40$.

A figura 5.6 mostra as funções $W(z, 0)$ correspondentes a estas condições iniciais, sendo cada uma delas o resultado da média sobre 1000 sementes aleatórias:

A figura 5.7 é um exemplo do segundo artifício de melhoramento da qualidade estatística empregado nesse trabalho. Uma vez garantido que o estado assintótico permanece estacionário por um tempo indeterminado, podemos tirar vantagem disso implementando uma segunda média, desta vez ao longo do tempo de simulação.

Assim, a figura 5.7 mostra as funções $W(z)$ correspondentes aos estados assintóticos do sistema definido acima, com as condições iniciais mostradas na figura 5.6. As curvas são o resultado de duas médias tomadas sobre o conjunto das 1000 trajetórias e sobre o intervalo de tempo $10 < \tau < 30$.

A figura 5.7 mostra um resultado surpreendente. Se, por um lado, todas as trajetórias convergiram para estados assintóticos estacionários não-Gaussianos independentes das condições iniciais, por outro, *as diferentes condições de con-*

10.eps 10.eps

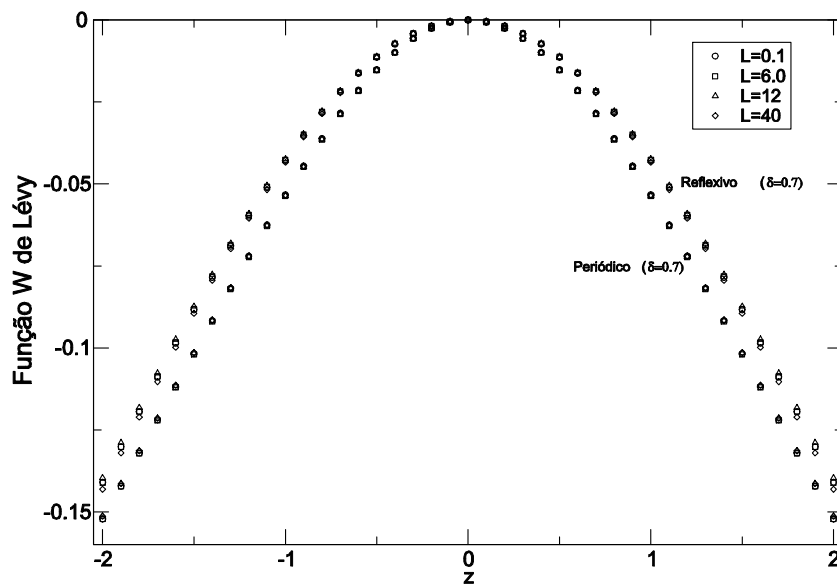


Figura 5.7: Funções $W(z)$ assintóticas do sistema definido pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, evoluído a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6.

torno utilizadas conduziram o mesmo sistema para diferentes distribuições assintóticas.

O conjunto de resultados ilustrados pelas figuras 5.2 a 5.7 permite fazer alguns comentários. Primeiramente, é importante notar que os resultados obtidos por nós são completamente independentes da expansão da distribuição em polinômios de Sonine e dos momentos estatísticos do sistema.

Em segundo lugar, estes resultados sugerem fortemente a propriedade de atratividade global do sistema para um estado assintótico bem definido, a despeito da inexistência de um teorema H para sistemas dissipativos. Este estado é propriamente denominado HCS. Veremos adiante que ele permanece homogêneo espacialmente também por um tempo indeterminado, ou seja, é completamente estável. Isso constitui uma evidência em favor de uma conjectura similar àquela formulada por Ernst e Brito [51], primeiramente aventada no âmbito do tratamento de modelos de Maxwell dissipativos (modelos de Maxwell são um modelo colisional bastante abstrato, onde se assume que a frequência colisional é independente da energia cinética do par colidente). De acordo com esta conjectura, a equação de Boltzmann dissipativa possuiria, independentemente do modelo colisional adotado, soluções em forma escalada para a distribuição de velocidades que descreveriam rotas rumo a estados assintóticos estacionários únicos. Tais estados estacionários seriam sempre caracterizados por possuírem caudas de alta energia superpopulada, e serem totalmente independentes das condições iniciais. A conjectura de Ernst-Brito é uma conjectura de primeiros princípios, com status similar ao do Teorema H , no sentido de que é uma asserção a respeito das soluções analíticas da equação de Boltzmann e, portanto, exige uma demonstração formal. Simulações computacionais, como as nossas, só podem corroborar a conjectura e fortalecê-la, mas não podem prová-la. Veremos adiante que os sistemas simulados por nós também apresentam caudas de alta energia.

Em terceiro lugar, a dependência das simulações nas condições de contorno parece, pelo contrário, invalidar a conjectura. Entretanto, precisamos lembrar em que sentido os estados aqui observados são de fato soluções da equação de Boltzmann, no contexto da conjectura apresentada. É o que faremos quando discutirmos mais abaixo o conceito de limite termodinâmico. Por outro lado, essa dependência nas condições de contorno parece estar em pleno acordo com as alegações de Henrique e colaboradores [42] e de Orza e colaboradores [40], conforme discutimos na Seção 3 do Capítulo 3. O sistema caracterizado por $\delta = 0,7$ possui livre caminho médio $\lambda_0 \simeq 0,32$. Isso significa aproximadamente $1/3$ do tamanho da caixa. Embora seja um valor abaixo do valor crítico preconizado pelas investigações teóricas desses autores, é alto o suficiente para que, no caso de condições periódicas, por exemplo, já seja de se esperar influências espúrias (não-físicas). Entretanto, não está claro, até esse momento, o quanto dessas influências se deveria a tais efeitos espúrios e o quanto seria uma consequência legítima de se submeter as soluções da equação de Boltzmann geral a condições de contorno específicas (ver Seção 2 do Capítulo 3).

Em quarto lugar, a figura 5.7 constitui o primeiro exemplo da utilidade da função W para descrever com precisão afastamentos da distribuição com relação

à distribuição Gaussiana. Quando se visualiza os diferentes estados assintóticos por meio das funções de distribuição, ou mesmo das próprias funções características, não é muito fácil distinguir entre os diferentes estados assintóticos associados a cada uma das condições de contorno. A função W , por outro lado, permite a quebra da degenerescência aparente e a verificação nítida da existência destes estados.

5.2.3 A influência do livre caminho médio

Como na seção precedente, tomemos agora dois sistemas, caracterizados pelo seguinte conjunto de parâmetros: (i) $N = 256$, $\alpha = 0, 1$, $\delta = 0, 7$ e (ii) $N = 256$, $\alpha = 0, 1$, $\delta = 1, 0$. Os sistemas só diferem no valor do parâmetro δ . Novamente, para cada sistema, ambas as condições de contorno, reflexivas e periódicas, são utilizadas. O conjunto das condições iniciais é o mesmo da seção precedente, conforme figura 5.6.

As figuras 5.8 e 5.9 mostram as funções $W(z)$ correspondentes aos estados assintóticos dos dois sistemas, a primeira delas em condições de contorno reflexivas, e a segunda em condições de contorno periódicas. As curvas são o resultado de duas médias tomadas sobre um conjunto de 1000 trajetórias e sobre o intervalo de tempo $10 < \tau < 30$.

Uma vez mais, observa-se um comportamento inusitado. Todas as trajetórias convergiram para estados assintóticos estacionários não-Gaussianos independentes das condições iniciais, como esperado, mas agora, para cada escolha de contorno, *as diferentes escolhas do parâmetro δ , associado ao livre caminho médio do sistema, conduziram o mesmo sistema para diferentes distribuições assintóticas.*

A influência do livre caminho médio e das condições de contorno na definição de diferentes distribuições assintóticas é observada em todo o intervalo de definição do coeficiente de restituição α . Nas figuras 5.10 a 5.13, são mostradas, na seqüência, as funções $W(z)$ correspondentes aos estados assintóticos de quatro sistemas, cada um deles simulado em condições de contorno reflexivas e periódicas: (i) $N = 256$, $\alpha = 0, 5$, $\delta = 0, 7$; (ii) $N = 256$, $\alpha = 0, 5$, $\delta = 1, 0$; (iii) $N = 256$, $\alpha = 0, 9$, $\delta = 0, 7$; (iv) $N = 256$, $\alpha = 0, 9$, $\delta = 1, 0$. Novamente, as curvas são o resultado de duas médias tomadas sobre um conjunto de 1000 trajetórias e sobre o intervalo de tempo $10 < \tau < 30$.

A influência do valor do parâmetro δ na determinação de diferentes estados assintóticos associados a sistemas com número finito de partículas é, sem dúvida, o resultado mais interessante. Sabe-se que o livre caminho médio deve ser mantido suficientemente alto para que o sistema permaneça estável. Isso é previsto dentro do âmbito da teoria de estabilidade linear, por exemplo (ver Subseção 6.2 do Capítulo 2). Mas o que mostramos aqui é que a influência do parâmetro δ vai além da questão da estabilidade. De fato, ele define classes distintas de sistemas estáveis, cada um deles associados a uma distribuição de velocidades específica.

Não está claro em que exata medida isso é um efeito relacionado à própria condição de contorno imposta. Ainda que fixado um determinado tipo de con-

11.eps 11.eps

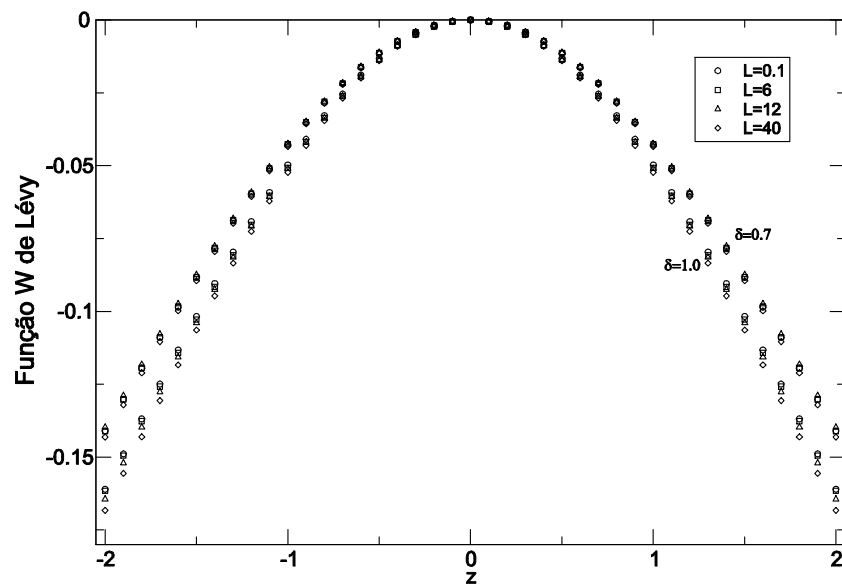


Figura 5.8: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0, 1$, $\delta = 0, 7$ e $\delta = 1, 0$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos reflexivos.

12.eps 12.eps

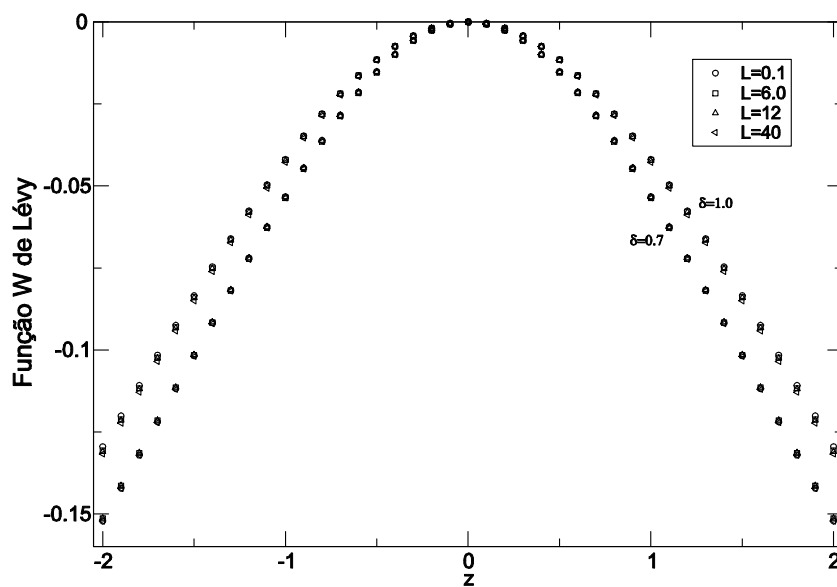


Figura 5.9: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0, 1$, $\delta = 0, 7$ e $\delta = 1, 0$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos periódicos.

13.eps 13.eps

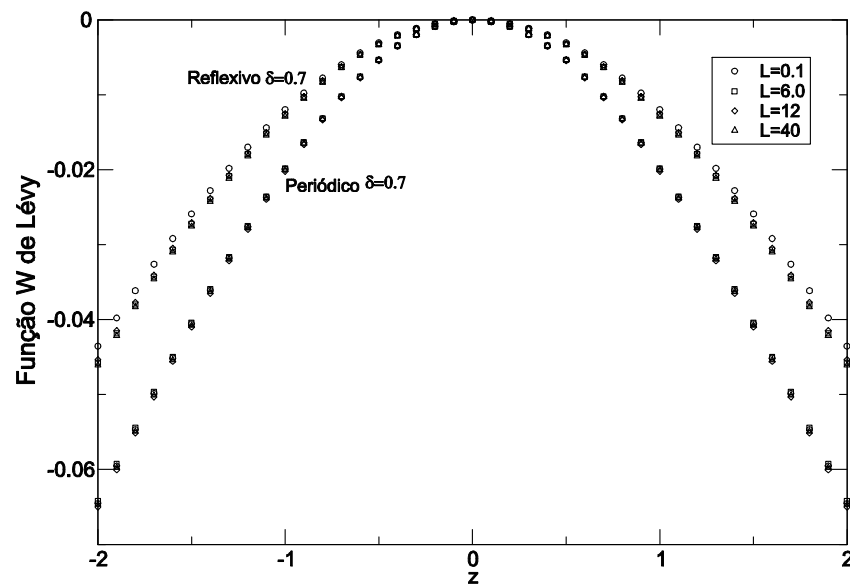


Figura 5.10: Funções $W(z)$ assintóticas do sistema definido pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,5$ e $\delta = 0,7$, evoluído a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6.

14.eps 14.eps

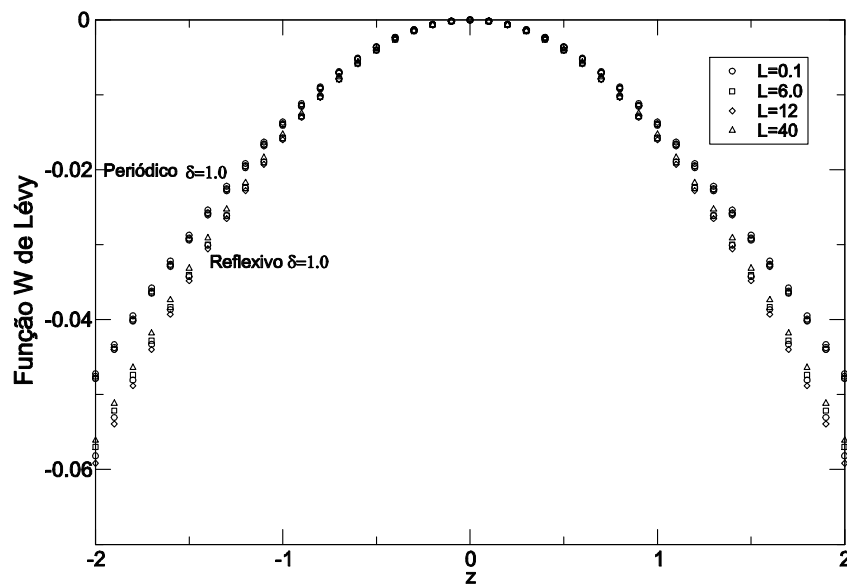


Figura 5.11: Funções $W(z)$ assintóticas do sistema definido pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,5$ e $\delta = 1,0$, evoluído a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6.

15.eps 15.eps

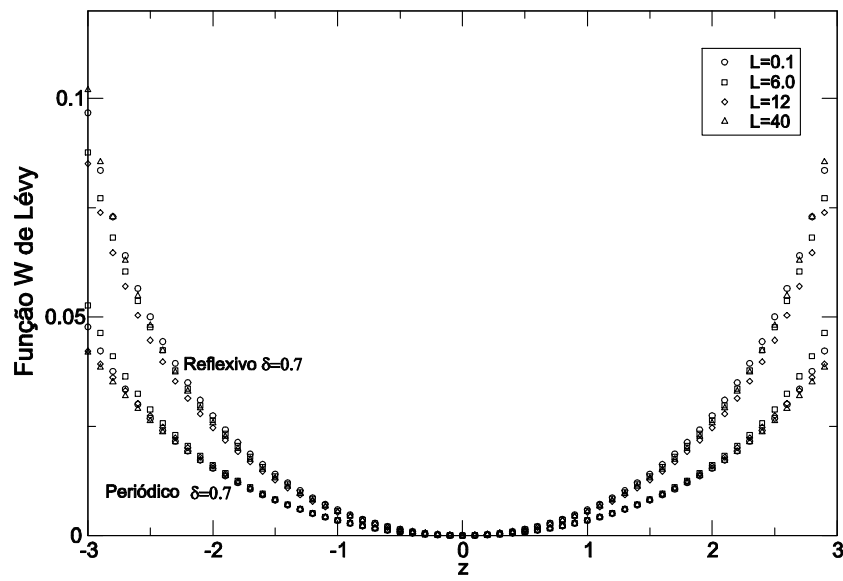


Figura 5.12: Funções $W(z)$ assintóticas do sistema definido pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,9$ e $\delta = 0,7$, evoluído a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6.

16.eps 16.eps

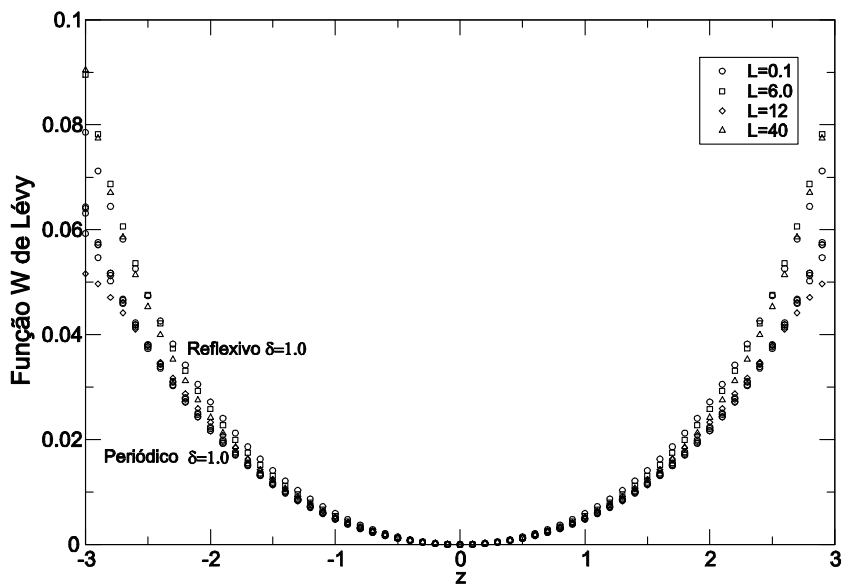


Figura 5.13: Funções $W(z)$ assintóticas do sistema definido pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,9$ e $\delta = 1,0$, evoluído a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6.

torno, sistemas preparados em diferentes regimes de densidade podem comportar-se muito diferentemente. O efeito parece ser maior à medida que o sistema torna-se ainda mais diluído. Contudo, certamente é um efeito relacionado ao número finito de partículas, como ficará explícito abaixo, quando tratarmos do limite termodinâmico.

Até onde sabemos, o fenômeno de dependência do livre caminho médio não tem sido objeto de suficiente atenção na literatura especializada, particularmente àquela relacionada ao estudo de simulações. Como exceção, temos os trabalhos citados na Seção 2 do Capítulo 3. Mesmo assim, nesses trabalhos os autores não chegam a fazer menção explícita ao papel desempenhado pelo número finito de partículas, o qual verificamos ser de grande importância.

5.2.4 A influência do número de partículas

Os resultados apresentados até aqui mostraram a dependência direta dos estados assintóticos do sistema com relação ao parâmetro δ e às condições de contorno impostas. Contudo, em todas as figuras mostradas até então, o número de partículas constituintes do sistema permaneceu fixo, com $N = 256$. Veremos agora que, *se considerarmos sistemas com diferentes números de partículas N , novamente se obtêm diferentes distribuições assintóticas, ainda que todos os demais fatores permaneçam inalterados.*

Para observar esse efeito, apresentamos na figura 5.14 o resultado do cômputo das funções $W(z)$ para diferentes valores de N . Nosso primeiro exemplo mostra as funções $W(z)$ para três sistemas, com $N = 256$, $N = 1372$ e $N = 6912$. Em todos eles, fixamos $\delta = 0, 7$, $\alpha = 0, 1$ e condições de contorno reflexivas.

As curvas são o resultado de duas médias tomadas sobre o conjunto de trajetórias e sobre o intervalo de tempo $10 < \tau < 30$. Como seria de se esperar, o número de trajetórias necessário para obter uma mesma qualidade estatística é aproximadamente inversamente proporcional a N . Para $N = 256$, foram computadas 1000 trajetórias; para $N = 1372$, 200 trajetórias e, para $N = 6912$, apenas 40 trajetórias foram necessárias.

A figura 5.15 mostra as funções $W(z)$ para os mesmos sistemas, desta vez com $\delta = 1, 0$.

Nas figuras 5.16 a 5.18, mostramos as funções $W(z)$ para sistemas submetidos a condições periódicas, com $N = 256$, $N = 2916$ e $N = 55296$ e com $\delta = 0, 7$, $\delta = 1, 0$ e $\delta = 1, 4$. Para todos os sistemas, $\alpha = 0, 1$.

Como podemos ver, enquanto nos sistemas submetidos a condições reflexivas o efeito devido ao número finito de partículas é claramente perceptível, no caso de sistemas submetidos a condições periódicas este efeito é bem menos evidente. Este e outros aspectos do papel desempenhado pelo número finito de partículas ficará mais esclarecido com a discussão da seção que se segue.

17.eps 17.eps

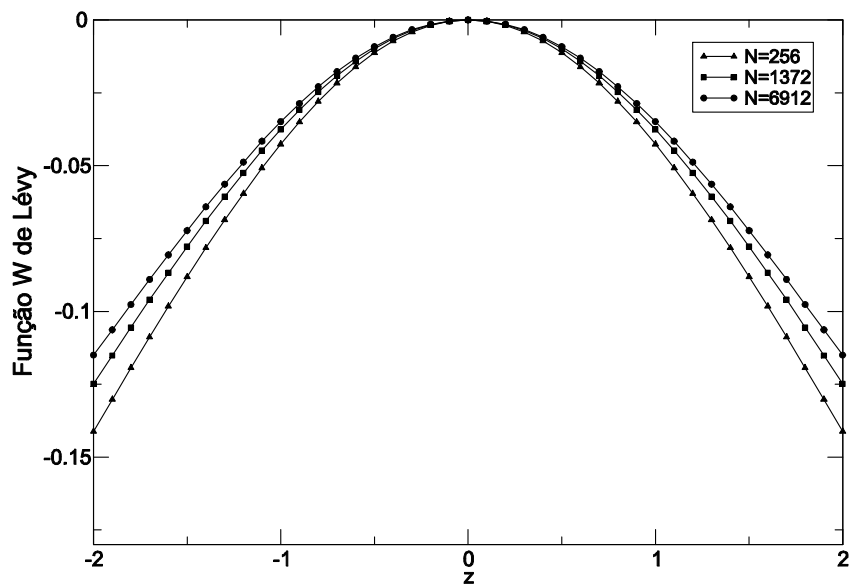


Figura 5.14: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $N = 1372$, $N = 6912$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos reflexivos.

18.eps 18.eps

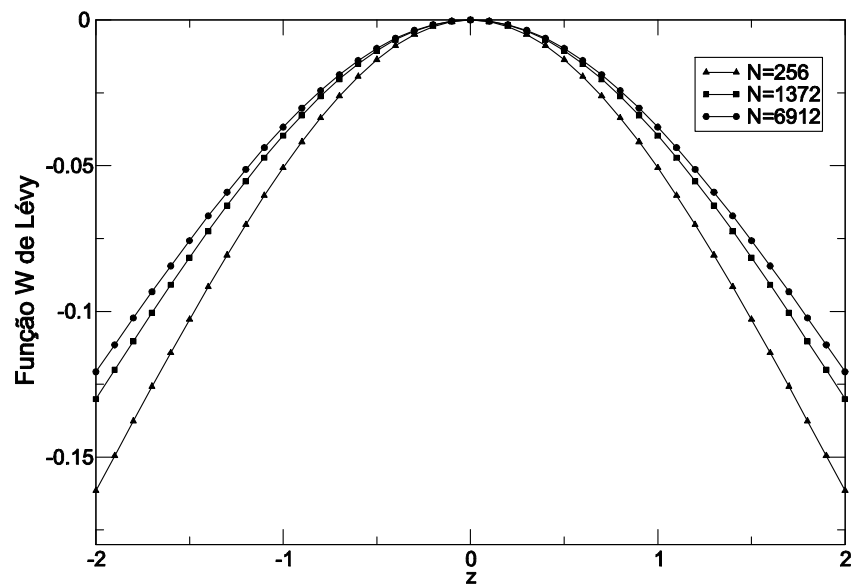


Figura 5.15: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $N = 1372$, $N = 6912$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,0$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos reflexivos.

19.eps 19.eps

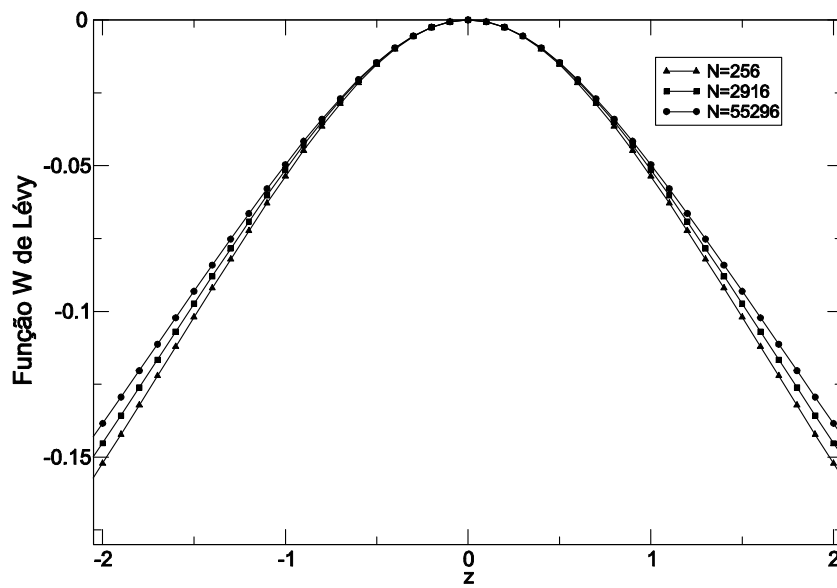


Figura 5.16: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $N = 2916$, $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos periódicos.

20.eps 20.eps

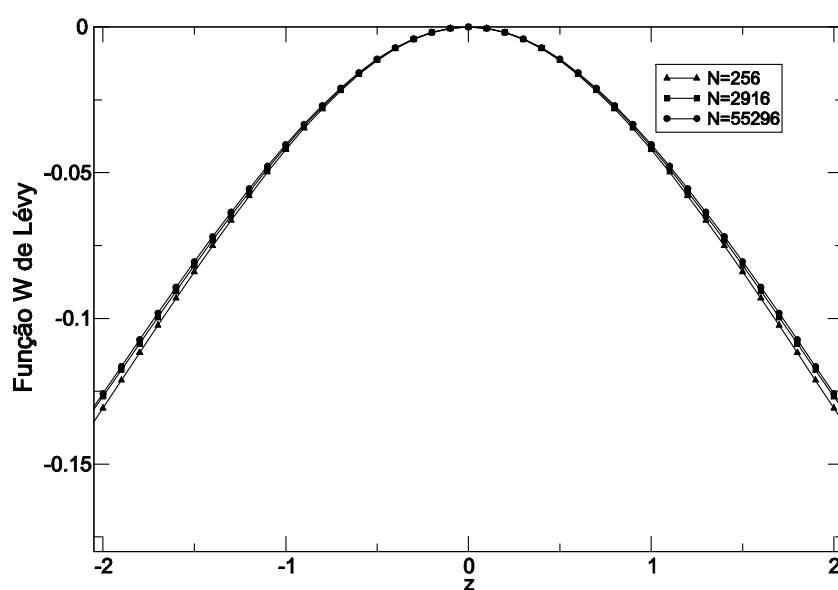


Figura 5.17: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $N = 2916$, $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,0$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos periódicos.

21.eps 21.eps

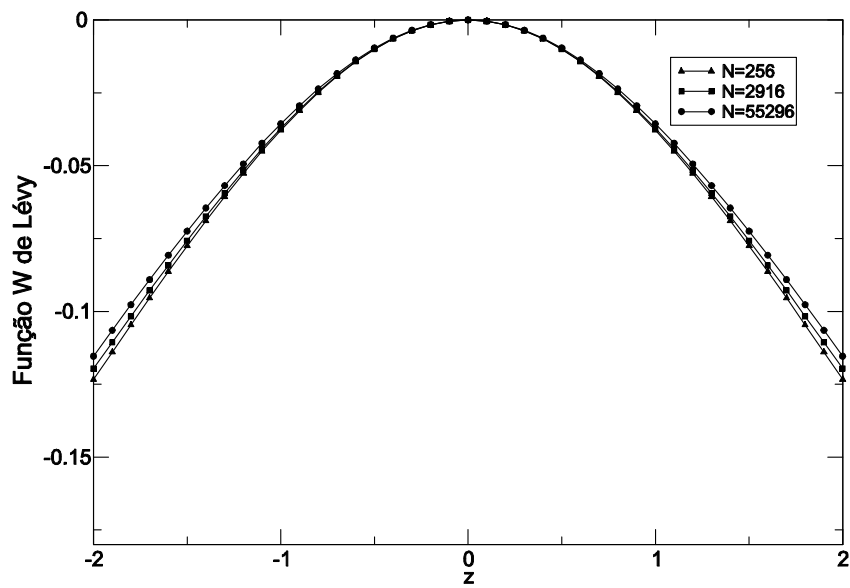


Figura 5.18: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $N = 2916$, $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,4$, evoluídos a partir das condições iniciais mostradas na figura 5.6, com contornos periódicos.

5.3 Limite Termodinâmico

A utilização da função W na medida de distribuições estatísticas demonstrou que as distribuições de velocidade assintóticas, quando obtidas via simulação computacional, apresentam forte dependência em quatro fatores, identificados como sendo o coeficiente de restituição α , o parâmetro δ (relacionado ao livre caminho médio), o número de partículas N e as condições de contorno. Todos esses fatores demonstraram, por sua vez, ser mutuamente independentes, ao menos em princípio.

Na medida em que nossos “experimentos de computador” possam ser considerados caminhos corretos e confiáveis de se obter soluções da equação de Boltzmann homogênea, eles parecem apontar para a existência de uma multiplicidade de soluções, cada uma delas associada a uma combinação específica dos fatores acima relacionados.

Tal situação é francamente contrária à que se esperaria deduzir de uma teoria matemática geral. Teoremas de existência e, principalmente, de unicidade, desempenham um papel central na teoria das equações diferenciais parciais. Problemas de valor inicial (problema de Cauchy) e de valor de contorno bem definidos são de importância capital para a interpretação física e para aplicações práticas das equações correspondentes. No caso da equação de Boltzmann elástica, por um problema de valor inicial bem definido entende-se a construção de uma solução não-negativa única, com conservação de energia e satisfazendo o Teorema H , a partir de uma condição inicial positiva com energia e entropia finitas. Entretanto, para condições iniciais gerais, saber se uma solução bem comportada pode ser construída globalmente no tempo é um problema difícil e até agora não plenamente resolvido [41]. Ainda assim, resultados rigorosos sobre a existência - e, em algumas situações, unicidade - de soluções para o problema de Cauchy já são conhecidas para uma grande variedade de casos. Em particular, no caso espacialmente homogêneo, existência, unicidade, comportamento assintótico, etc foram suficientemente bem estabelecidos. Da mesma forma, existência local e unicidade foram mostradas na presença de condições de contorno variadas, incluídas as reflexivas, e existência global e unicidade foram demonstradas para um gás diluído sem fronteiras no \mathbf{R}^3 [41]. Ainda assim, todo esse corpo de teoremas foi estabelecido para o caso de sistemas elásticos. O problema de existência e unicidade é ainda mais complicado no caso inelástico, onde ainda poucos resultados rigorosos encontram-se disponíveis [52].

Não é nosso objetivo discutir aqui teoremas de existência e unicidade - em nenhum nível - para a equação de Boltzmann aplicada a sistemas granulares. Entretanto, vale lembrar um aspecto adicional da questão. Tendo-se em mente que a equação de Boltzmann é a rigor uma abstração da realidade, e que se espera que seja válida somente em regimes ideais, teoremas de existência para ela são, no mínimo, o primeiro passo para se verificar a validade do modelo matemático que está sob investigação. O passo seguinte é a verificação de que o modelo é adequado também dentro do âmbito experimental, onde, por exemplo, o requisito de unicidade deve ser testado. Os “experimentos computacionais” devem poder satisfazer a critérios semelhantes.

Na situação presente, é importante estabelecer em que regime se espera que a equação de Boltzmann seja de fato uma teoria válida e possa descrever, pelo menos, resultados de simulações. Antes de mais nada, condições que permitam a validade da hipótese de “caos molecular” devem estar plenamente satisfeitas. Para isso, deve-se garantir que o sistema seja diluído o suficiente para que seu livre caminho médio seja muito superior ao alcance das forças entre as partículas. Isso permite que duas partículas que estejam prestes a colidir estejam a uma distância conveniente para que a correlação entre suas velocidades seja praticamente nula. Essa condição é necessária, mas não é suficiente. Em vista de sua natureza essencialmente estatística - em parte em virtude da própria imposição do “caos molecular” - não se espera que a equação de Boltzmann seja realmente válida fora do limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e $V \rightarrow \infty$. Para que o sistema permaneça diluído no limite termodinâmico, entretanto, o livre caminho médio $\lambda_0 = 1/\sqrt{2\pi}Na^2$ (ver Seção 1 deste Capítulo) deve ser mantido essencialmente constante, o que implica que $\delta = Na^2$ deva ser mantido constante quando $N \rightarrow \infty$. Isso significa que o diâmetro da partícula a deve diminuir. Essa última conclusão é obviamente consequência do tamanho da caixa permanecer fixo e não ser possível implementar o limite $V \rightarrow \infty$.

A razão de escolhermos o parâmetro $\delta = Na^2$ para classificar sistemas foi antes de tudo de caráter prático, já que escolhemos fixar o tamanho da caixa e variar a dimensão da partícula. Porém, a manutenção da quantidade Na^2 constante ao longo do limite $N \rightarrow \infty$ nada mais é do que uma forma alternativa de limite termodinâmico, conhecida na literatura pela denominação de limite de Boltzmann-Grad [41]. Daqui em diante, passaremos a usar exclusivamente o termo limite termodinâmico.

Nas figuras 5.14 e 5.15 já se pode observar o efeito do aumento sistemático do número de partículas. Essas figuras sugerem um processo de convergência das distribuições rumo a um estado assintótico não-Gaussiano único. Isto pode ser concluído a partir da observação de que, à medida que N aumenta, a distância relativa entre duas distribuições sucessivas diminui gradualmente, apontando para existência de um limite. O parâmetro δ desempenha um duplo papel nesses exemplos. Primeiramente, a escolha de um valor fixo de δ determina um estado assintótico que pode estar mais próximo ou mais distante do estado limite, principalmente quando o valor de N é pequeno. Em segundo lugar, e conseqüentemente, esta escolha influencia a rapidez da convergência rumo ao estado limite. Nós verificamos que, para condições reflexivas, um valor em torno de $\delta \simeq 0,7$ é o que proporciona a convergência mais rápida.

As figuras 5.19 a 5.21, entretanto, mostram que a influência do parâmetro δ torna-se irrelevante no limite termodinâmico, uma vez que distribuições caracterizadas por diferentes valores de δ convergem para o mesmo estado. Nessas figuras, são mostradas as funções $W(z)$ para diferentes sistemas caracterizados pela combinação dos seguintes parâmetros: $N = 256$, $N = 1372$ e $N = 6912$; $\delta = 0,7$ e $\delta = 1,0$. O coeficiente de restituição para todos eles é fixo, $\alpha = 0,1$, e as condições de contorno são sempre reflexivas. Como antes, todas as curvas são obtidas por uma dupla média sobre o conjunto de trajetórias e sobre o intervalo de tempo $10 < \tau < 30$.

22.eps 22.eps

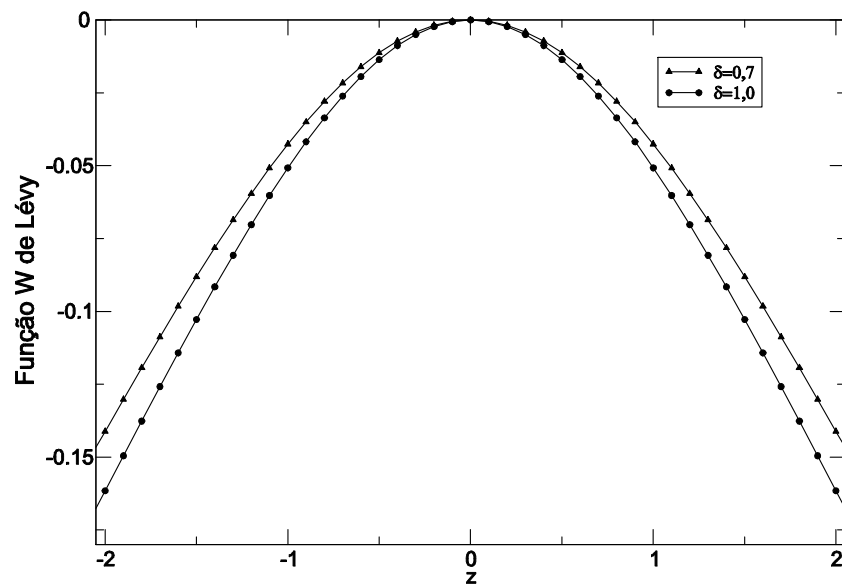


Figura 5.19: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,1$, $\delta = 0,7$ e $\delta = 1,0$, com contornos reflexivos.

23.eps 23.eps

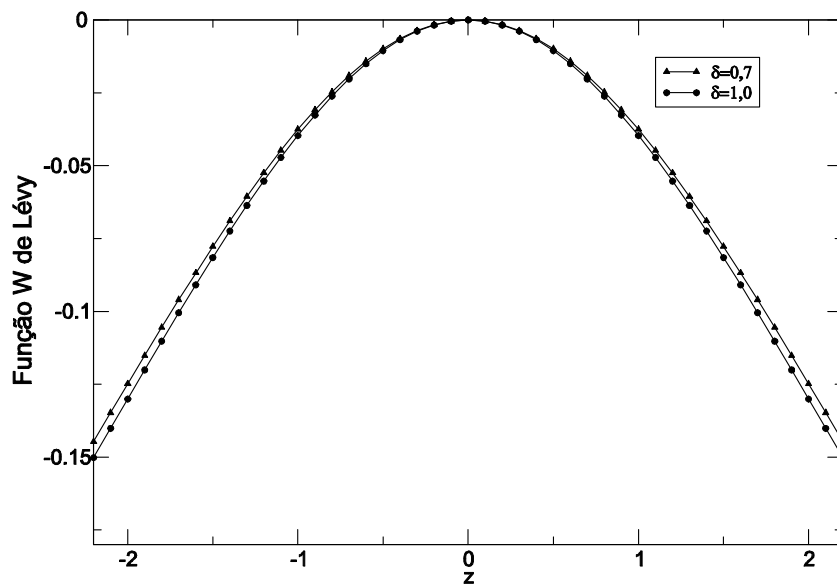


Figura 5.20: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 1372$, $\alpha = 0,1$, $\delta = 0,7$ e $\delta = 1,0$, com contornos reflexivos.

24.eps 24.eps

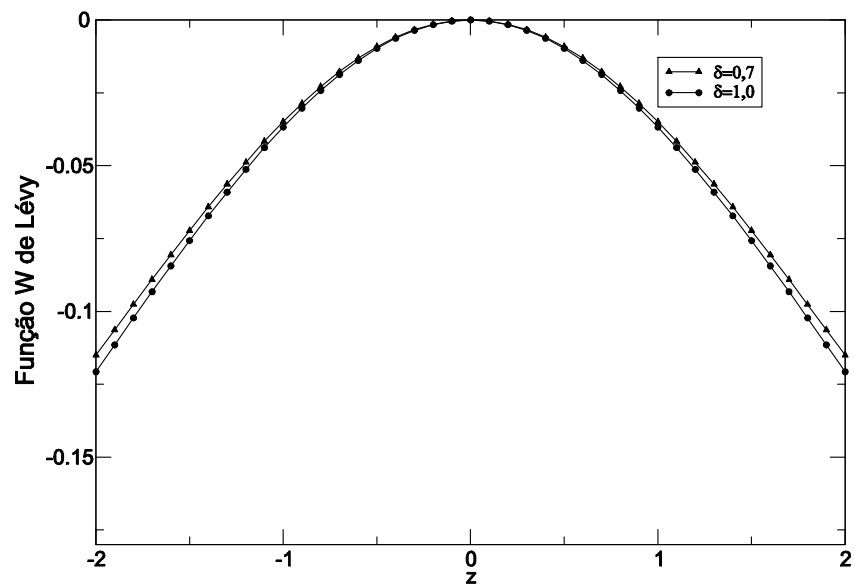


Figura 5.21: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 6912$, $\alpha = 0,1$, $\delta = 0,7$ e $\delta = 1,0$, com contornos reflexivos.

A convergência observada com condições reflexivas é relativamente rápida. Por exemplo, para $\delta = 0,7$, o limite termodinâmico é alcançado, na prática, com $N = 2916$. A partir deste número, não há mais variação significativa entre os estados sucessivos. Para outras escolhas de δ , o número de partículas necessário para alcançar o limite deve aumentar. Isto estabelece em cada caso, na prática, um limiar para a validade de uma descrição cinética correta.

Como conclusão geral, os exemplos mostrados permitem afirmar que *todas as distribuições assintóticas de sistemas submetidos a condições de contorno reflexivas convergem rumo a um único estado no limite termodinâmico, que independe de fatores como livre caminho médio e número de partículas, permanecendo dependente exclusivamente do coeficiente de restituição α* , como haveria de se esperar.

Conclusões tão diretas não podem ser alcançadas no caso de condições de contorno periódicas. Nas figuras 5.16 a 5.18 é possível observar um processo de mudança nas distribuições assintóticas conforme N aumenta, mas dificilmente pode-se garantir que haja aí um processo de convergência. No mínimo, podemos afirmar que ele, se existir, é muito mais lento que o do caso reflexivo. As figuras 5.22 a 5.24 permitem observar novamente que, se o processo de convergência existir, ele é extremamente lento. Podemos ver que a influência do parâmetro δ ainda se faz sentir com um número tão elevado como $N = 55296$, pelo menos quando comparado ao caso reflexivo.

Apesar destes resultados pouco conclusivos, ainda assim *nós conjecturamos que um estado limite não-Gaussiano existe para sistemas submetidos a condições de contorno periódicas, e que este estado é o mesmo que o alcançado em condições reflexivas, ou seja, o estado limite é independente da escolha das condições de contorno*. Uma possível fundamentação dessa conjectura surge de uma consideração mais detalhada das figuras 5.16 a 5.18. Apesar de as sucessivas distribuições não estarem progressivamente mais próximas umas das outras, pelo menos de modo evidente, elas estão sempre progressivamente mais próximas de uma distribuição Gaussiana. Uma vez que o espaço funcional disponível para as sucessivas distribuições correspondentes a um número de partículas também progressivamente maior é compacto, e que não é de se esperar que distribuições correspondentes a sistemas granulares sejam Gaussianas exatas, então é razoável esperar que exista uma distribuição limite situada entre quaisquer distribuições com N finito e a distribuição Gaussiana.

Podemos comparar a influência de cada tipo de contorno por meio das figuras 5.25 e 5.26. A figura 5.25 mostra as funções W correspondentes a $N = 256$ e diferentes escolhas do parâmetro δ , para ambas as condições de contorno. Para um número tão baixo de partículas, cada combinação de valor de δ e condição de contorno resulta em uma distribuição assintótica bastante distinta das demais. Por outro lado, a figura 5.26 mostra as funções W correspondentes aos sistemas com os maiores valores de N por nós simulados, para cada condição de contorno. Ela mostra a tendência geral de convergência das diferentes distribuições assintóticas para o mesmo estado limite.

Baseados na conjectura acima exposta, pode-se verificar que a propriedade de convergência rápida demonstrada pelas condições de contorno reflexivas pode ser

25.eps 25.eps

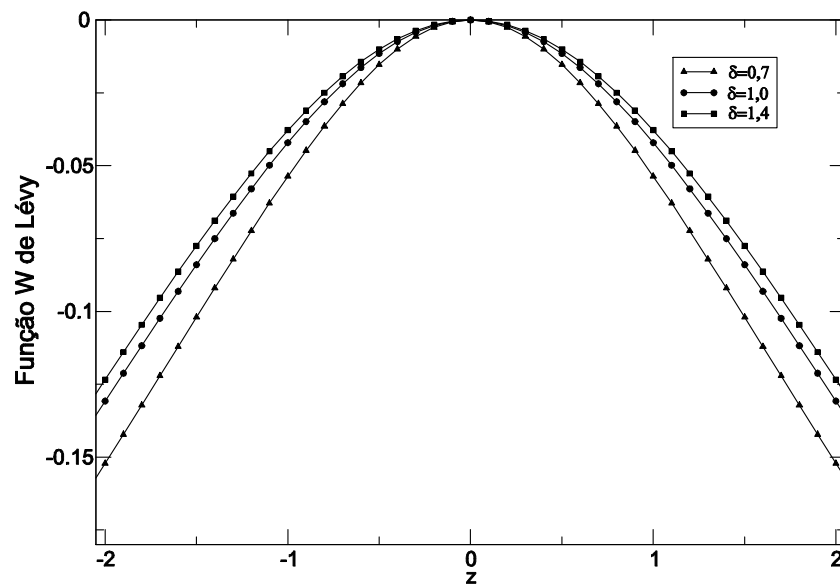


Figura 5.22: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 256$, $\alpha = 0,1$, $\delta = 0,7$, $\delta = 1,0$ e $\delta = 1,4$, com contornos periódicos.

26.eps 26.eps

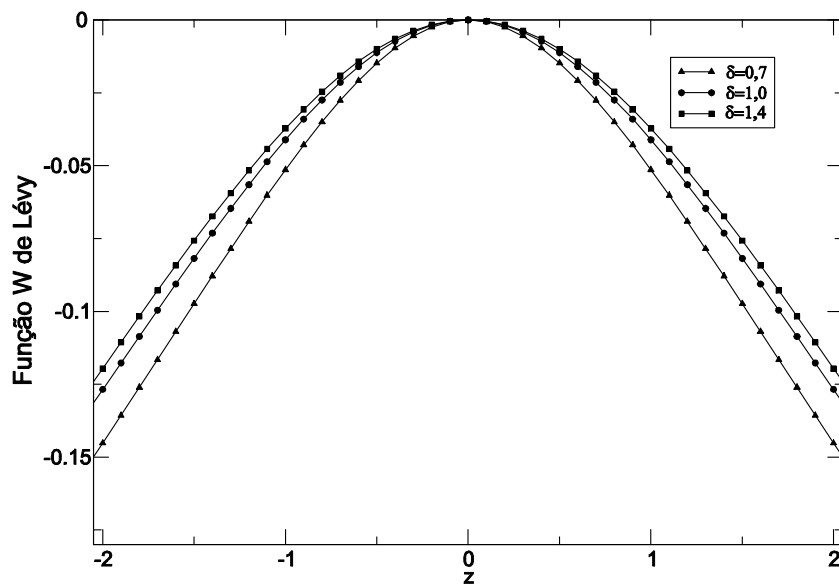


Figura 5.23: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 2916$, $\alpha = 0,1$, $\delta = 0,7$, $\delta = 1,0$ e $\delta = 1,4$, com contornos periódicos

27.eps 27.eps

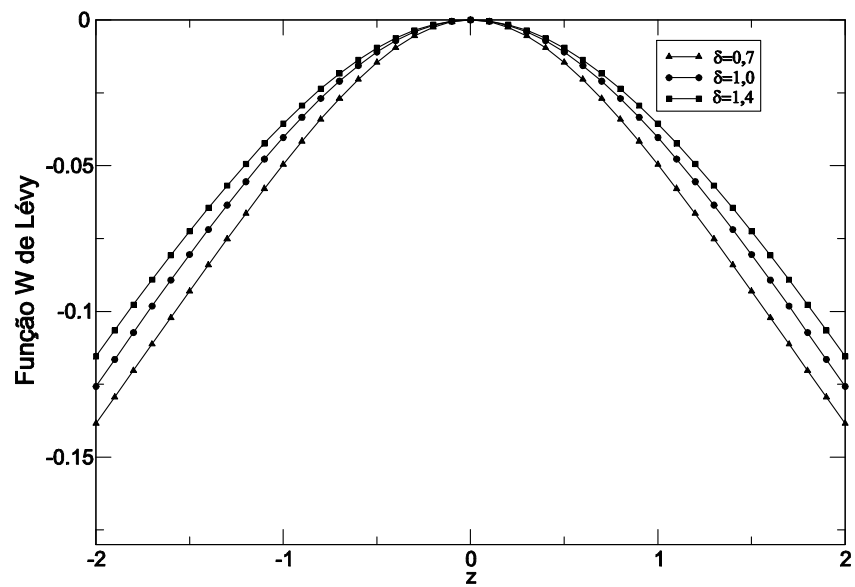


Figura 5.24: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas definidos pelos parâmetros $N = 55296$, $\alpha = 0,1$, $\delta = 0,7$, $\delta = 1,0$ e $\delta = 1,4$, com contornos periódicos.

28.eps 28.eps

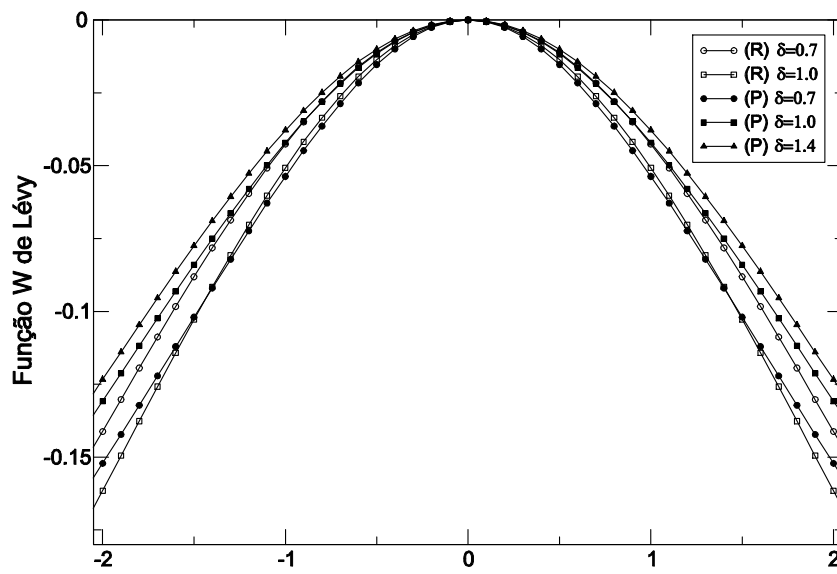


Figura 5.25: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas com $N = 256$ e $\alpha = 0, 1$, correspondentes aos valores $\delta = 0,7$, $\delta = 1,0$ e $\delta = 1,4$, cada um deles com contornos periódicos e reflexivos.

29.eps 29.eps

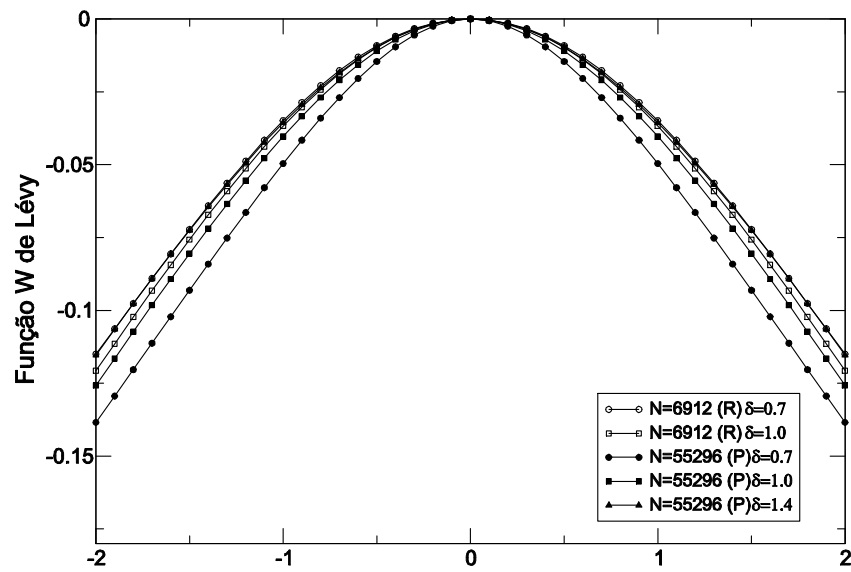


Figura 5.26: Funções $W(z)$ assintóticas dos sistemas com $N = 6912$, $\alpha = 0, 1$, correspondentes aos valores $\delta = 0, 7$ e $\delta = 1, 0$ e com contornos reflexivos; e com $N = 55296$, $\alpha = 0, 1$, correspondentes aos valores $\delta = 0, 7$, $\delta = 1, 0$ e $\delta = 1, 4$ e com contornos periódicos. Note-se o colapso das distribuições correspondentes a $N = 6912$, com contornos reflexivos, e $N = 55.296$, com contornos periódicos.

	N	ϕ	n	λ_0	δ
Nakanishi [18]	250000	0,196	0,25	$0,9 \times 10^{-3}$	250,00
Orza et al [40]	20000	0,240	0,31	$2,85 \times 10^{-3}$	79,97
Huthmann et al [17]	50000	0,050	0,06	$3,98 \times 10^{-3}$	56,55
McNamara et al [9]	1024	0,250	0,31	$1,24 \times 10^{-2}$	18,10
Nosso trabalho [53]	256	0,019	256	$3,21 \times 10^{-1}$	0,70

Tabela 5.1: Quadro comparativo dos valores tipicamente usados em simulações

usada para indicar qual seria o melhor valor do parâmetro δ para implementar o processo de convergência no caso de contornos periódicos. Assim, uma inspeção direta da figura 5.26 nos convence de que um valor em torno de $\delta \simeq 1,4$ é a melhor escolha para o parâmetro δ de modo a alcançarmos mais rapidamente, e com maior grau de confiabilidade, o estado limite conjecturado no caso de condições periódicas. Esse valor desempenha o papel análogo ao de $\delta \simeq 0,7$, no caso reflexivo. De fato, nesta figura, vemos o colapso completo das distribuições correspondentes a $N = 6912$ e $\delta = 0,7$, para condições reflexivas, e a $N = 55296$ e $\delta = 1,4$, para condições periódicas.

Podemos, por fim, passar às conclusões gerais. A consideração do efeito associado ao número finito de partículas e a eliminação deste efeito via limite termodinâmico, aponta para um problema alternativo entre os dois tipos de condições de contorno estudados. Enquanto contornos reflexivos são menos sujeitos à variação do parâmetro δ , e mais sujeitos à variação de N , o contrário acontece com contornos periódicos. Entretanto, a convergência com $N \rightarrow \infty$ para contornos reflexivos é rápida, e para contornos periódicos é extremamente lenta. Por isso, não se pode garantir que todas as simulações realizadas correntemente na literatura sejam plenamente compatíveis com soluções da equação de Boltzmann sem contornos. Lembremos que, na prática, quase todos os autores usam condições de contorno periódicas. Para efeito de comparação, listamos, na tabela 5.1, os valores característicos das simulações desenvolvidas por quatro autores, juntamente com um exemplo nosso. Na tabela, ϕ é a fração volumétrica e n é a densidade de partículas. Essa tabela mostra que os valores do parâmetro δ adotados pelos autores citados são pelo menos uma ordem de grandeza acima dos nossos (nos casos comparados, fizemos a correção $\delta = Na$, já que em todos eles as simulações são bidimensionais). Para esses valores, não temos nenhuma garantia de que o número de partículas utilizado é suficiente para se afirmar que o limite termodinâmico tenha sido alcançado.

Simulações com um número pequeno de partículas, em condições reflexivas, podem ser usadas para calibrar simulações com um número bem maior de partículas, em condições periódicas. Além do aspecto puramente teórico, também computacionalmente existem vantagens neste procedimento, já que se sabe que condições periódicas exigem menos tempo computacional do que condições reflexivas.

É possível que a peculiaridade apresentada pelos contornos reflexivos possa estar relacionada com um efeito de mistura, similar ao caso dos bilhares de

	$N = 256$	$\phi \simeq 0,01916$		$N = 256$	$\phi \simeq 0,03372$
	$N = 1372$	$\phi \simeq 0,00828$		$N = 1372$	$\phi \simeq 0,01413$
$\delta = 0,7$	$N = 2916$	$\phi \simeq 0,00568$	$\delta = 1,0$	$N = 2916$	$\phi \simeq 0,00629$
	$N = 6912$	$\phi \simeq 0,00369$		$N = 6912$	$\phi \simeq 0,00970$
	$N = 55296$	$\phi \simeq 0,00130$		$N = 55296$	$\phi \simeq 0,00223$
		$N = 256$		$N = 256$	$\phi \simeq 0,05421$
$\delta = 1,4$		$N = 2916$		$N = 2916$	$\phi \simeq 0,01606$
		$N = 55296$		$N = 55296$	$\phi \simeq 0,00369$

Tabela 5.2: Valores das frações volumétricas

Sinaí. Ao que nos parece, paredes reflexivas podem contribuir eficientemente para destruir correlações, permitindo que o limite termodinâmico seja alcançado mais rápido.

É interessante, por fim, fazer um comentário sobre o uso de frações volumétricas como grandezas significativas em simulações. Na tabela 5.2, apresentamos uma relação de todas as frações volumétricas dos sistemas simulados neste trabalho, o que é também de interesse intuitivo. Em geral, na literatura, costuma-se usar o valor da fração volumétrica para classificar sistemas com relação ao seu grau de diluição. Pela discussão acima, pode-se ver que isso é intrinsecamente pouco significativo. Em sistemas tridimensionais, $\phi = \frac{n\pi a^3}{6}$, ou seja, a fração volumétrica é função do cubo do tamanho da partícula. O parâmetro δ varia em razão do seu quadrado. Portanto, no limite termodinâmico apresentado acima, a fração volumétrica não permanece constante, mas diminui, como fica explícito na tabela 5.2. Como consequência, mesmo sistemas com um número de partículas muito grande e aparentemente baixa fração volumétrica, como alguns exemplos dados na tabela 5.1, podem ser ainda “concentrados”, no sentido apresentado.

5.4 Estabilidade

A precisão alcançada no cálculo da função W foi fundamental para o estabelecimento dos resultados até agora. Por sua vez, manter a estabilidade dos sistemas simulados é uma peça metodológica importante para alcançar uma boa precisão. Como foi visto na Subseção 6.2 do Capítulo 2, a quantidade que define os limites de estabilidade do HCS é o livre caminho médio, o que significa que a existência de estados estacionários está condicionada aos valores do parâmetro δ , os quais devem ser escolhidos convenientemente abaixo de um certo valor crítico, para cada valor do coeficiente de restituição. Os valores utilizados até agora cumprem esse requisito. Vamos dar um exemplo, com $\alpha = 0,5$. Para esse valor do coeficiente de restituição, o valor de k_{\perp}^c , calculado por meio da equação 2.99, é dado por:

$$k_{\perp}^c \simeq 0,7008. \quad (5.7)$$

Para esse valor, o limiar de estabilidade para o livre caminho médio, em condições de contorno periódicas, é dado por

$$\lambda_0 = \frac{4}{5\sqrt{2}\pi^{3/2}} k_{\perp}^c \simeq 0,0712, \quad (5.8)$$

o que fornece

$$\delta_{per}^c = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\lambda_0} \simeq 3,16. \quad (5.9)$$

O valor limiar para condições reflexivas, como vimos, é a metade

$$\delta_{ref}^c \simeq 1,58. \quad (5.10)$$

É esperado que esses valores sejam válidos no limite termodinâmico, mas não que o sejam exatamente para o caso de sistemas finitos. Isso é confirmado pelas simulações. Quanto menor é o número de partículas, menor é o valor crítico δ^c para o qual o HCS torna-se instável. Com N crescente, o valor crítico também cresce, no que parece ser uma convergência assintótica para os valores teóricos calculados pela teoria de estabilidade linear acima ilustrados. Logo, pode-se concluir que o aumento do número de partículas do sistema contribui para aumentar sua estabilidade.

Para ilustrar essas observações, é mais conveniente apresentar aqui o resultado de algumas simulações onde, ao invés de medir a distribuição completa por meio da função W , mede-se somente os seus momentos segundo e quarto. Com estes momentos, pode-se calcular o segundo coeficiente da expansão de Sonine (equação 2.29) da distribuição escalada. Devemos partir da equação 2.34, que reproduzimos aqui:

$$1 + a_2 = \frac{4}{15} \langle c^4 \rangle, \quad (5.11)$$

ou da equação equivalente:

$$1 + a_2 = \frac{3}{5} \frac{\langle v^4 \rangle}{\langle v^2 \rangle^2}, \quad (5.12)$$

obtida pela substituição de $\langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} v_0^2$ na equação 5.11, uma vez que a velocidade térmica se relaciona com a temperatura e, desse modo, com o segundo momento da distribuição, por $T = \frac{m}{2} v_0^2$.

A figura 5.27 é o nosso primeiro exemplo de medida direta do coeficiente a_2 , por meio da expressão 5.12. A obtenção analítica e simulacional de a_2 e dos demais coeficientes da expansão de Sonine será objeto de estudo pormenorizado no próximo capítulo. Aqui, nos limitamos a mostrar a evolução temporal de a_2 para alguns sistemas de 256 partículas e com coeficiente de restituição $\alpha = 0,5$, mas com valores do parâmetro δ bastante variados, em condições de contorno

30.eps 30.eps

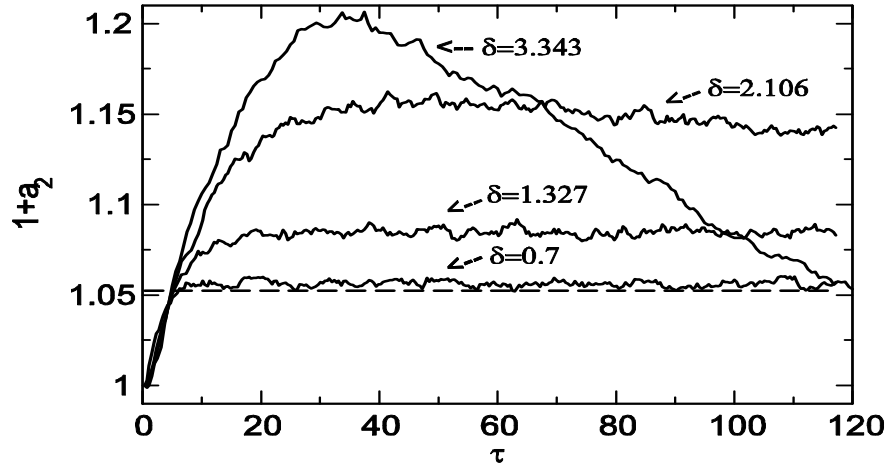


Figura 5.27: Evolução temporal do coeficiente de Sonine $1+a_2$. Simulações com $N = 256$, $\alpha = 0,5$ e diferentes valores do parâmetro δ , com contornos reflexivos. A linha tracejada corresponde ao valor teórico em aproximação linear dado pela equação 2.39.

reflexivas. A condição inicial padrão para a distribuição de velocidades no caso do estudo da evolução temporal dos coeficientes de Sonine será sempre uma distribuição Gaussiana. Por essa razão, ao ponto inicial é associado $a_2(0) = 0$. É fácil observar que, para algum valor situado entre $1,327 < \delta < 2,106$, o sistema deixa de possuir uma distribuição estacionária, em concordância geral com a estimativa teórica dada pela equação 5.10.

A linha tracejada representa o valor teórico do coeficiente em aproximação linear, como expresso na equação 2.39. O valor $\delta = 0,7$ define um sistema cuja distribuição se aproxima muito da previsão teórica, pelo menos com relação ao coeficiente a_2 . Já um valor como $\delta = 1,327$, apesar de ainda definir um sistema estável, afasta-se sensivelmente da teoria. Voltaremos a esse ponto no próximo capítulo. Quanto maior o valor de δ , mais rapidamente o HCS originalmente imposto é abandonado em favor de um regime inhomogêneo.

A figura 5.28 ilustra qual seria o comportamento de sistemas instáveis no limite termodinâmico. Nessa figura mostramos a evolução temporal de a_2 para sistemas reflexivos, com $\delta = 3,343$ e $\alpha = 0,5$, para diferentes números de partículas.

Com o aumento do número de partículas, há uma tendência aproximada

31.eps 31.eps

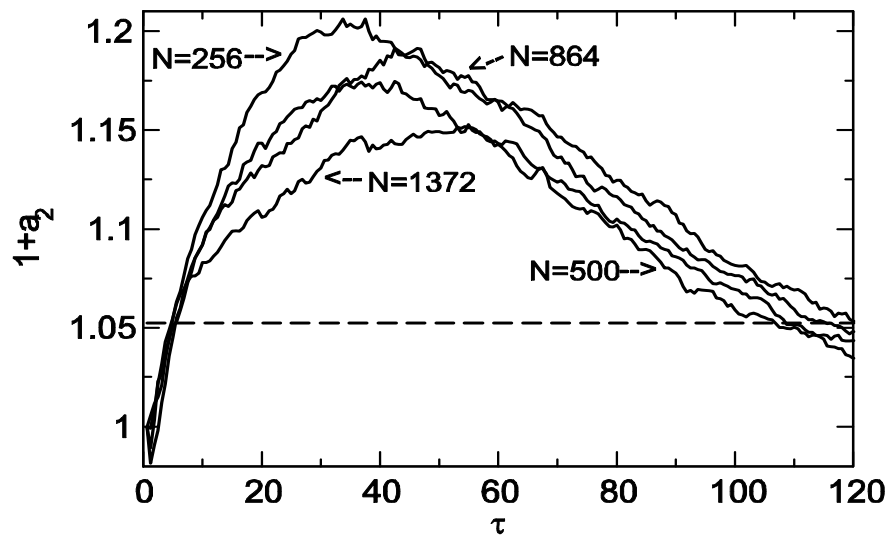


Figura 5.28: Evolução temporal do coeficiente de Sonine $1 + a_2$. Simulações com $\delta = 3,343$, $\alpha = 0,5$ e diferentes valores de N , com contornos reflexivos. A linha tracejada corresponde ao valor teórico em aproximação linear dado pela equação 2.39.

de que os picos das curvas se tornem menores, apesar da inversão observada entre $N = 500$ e $N = 864$. Os picos correspondem aos valores presumíveis de a_2 no HCS, para cada sistema, se o HCS fosse estável. Isso ficará mais bem fundamentado no capítulo seguinte. O comportamento geral demonstrado por sistemas instáveis é, portanto, uma rápida relaxação para um HCS instável, seguida de uma quebra da estabilidade para formação de vórtices e conseqüente quebra do HCS. Se esperado tempo suficiente, haverá formação de “clusters”.

Nosso interesse, porém, são os regimes estáveis, tanto no que diz respeito à distribuição de velocidades, quanto à homogeneidade espacial. Por isso, um dos objetivos de maior importância alcançados neste trabalho refere-se à descoberta de valores de densidades - ou seja, valores do parâmetro δ - que permitem testar previsões teóricas para o HCS estável, o mais confiavelmente possível, tendo em conta e mostrando como eliminar influências de condições circunstanciais, como os contornos e o número de partículas.

Por esse motivo, é importante provar que os sistemas simulados nas seções precedentes permanecem de fato espacialmente homogêneos. Para isso vamos tirar vantagem uma vez mais da função W como ferramenta para medir distribuições de forma precisa. Nas figuras 5.29 a 5.32, nós mostramos a evolução temporal e o estado assintótico da função W associada à *distribuição das posições* das partículas correspondentes a dois sistemas definidos pelo seguinte conjunto de parâmetros: (i) $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,0$, em condições de contorno periódicas e; (ii) $N = 6912$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, em condições de contorno reflexivas.

As funções W simuladas são comparadas com a função W analítica correspondente à distribuição reduzida de uma variável aleatória espacialmente uniforme, dada por:

$$W(z) = -\frac{1}{z^2} \ln \left(\frac{1}{3} \left(\frac{\sin(\sqrt{3}z)}{z} \right)^2 \right) - 1. \quad (5.13)$$

A concordância entre a função proveniente da simulação e a analítica é completa. Mesmo para os casos mais extremos tratados por nós, como os mostrados nessas figuras, fica provado que os sistemas permanecem espacialmente homogêneos por tempo indeterminado.

Como ilustração, as figuras 5.33 e 5.34 mostram tomadas instantâneas da posição das partículas dentro da caixa, ao final do tempo de simulação, para os sistemas com $N = 55296$ e $N = 6912$.

32.eps 32.eps

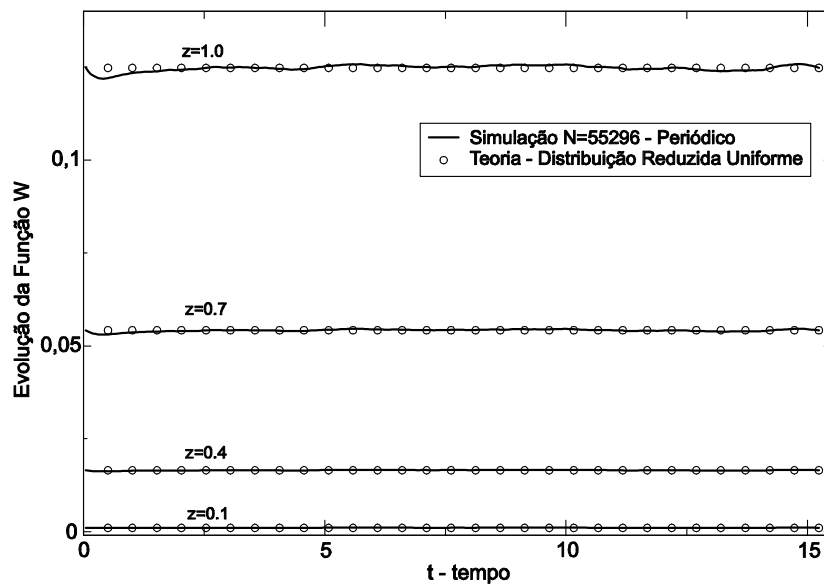


Figura 5.29: Evolução temporal de alguns valores da função $W(z)$ associada à distribuição de posições do sistema com $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,0$, em condições periódicas.

33.eps 33.eps

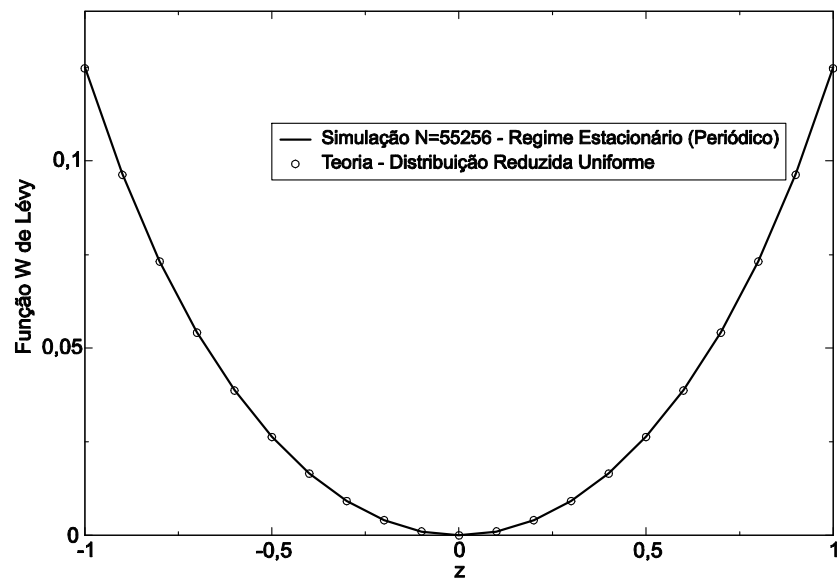


Figura 5.30: Estado assintótico da função $W(z)$ associada à distribuição de posições do sistema com $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,0$, em condições periódicas.

34.eps 34.eps

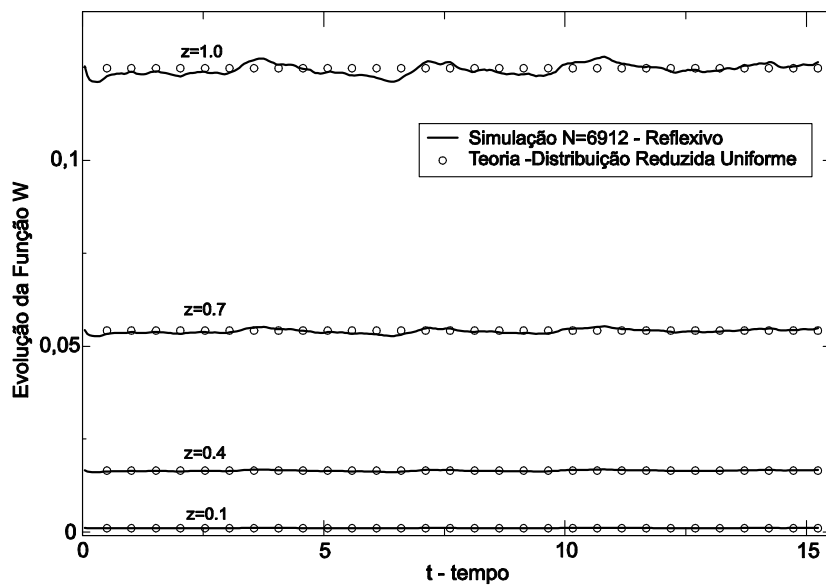


Figura 5.31: Evolução temporal de alguns valores da função $W(z)$ associada à distribuição de posições do sistema com $N = 6912$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, em condições reflexivas.

35.eps 35.eps

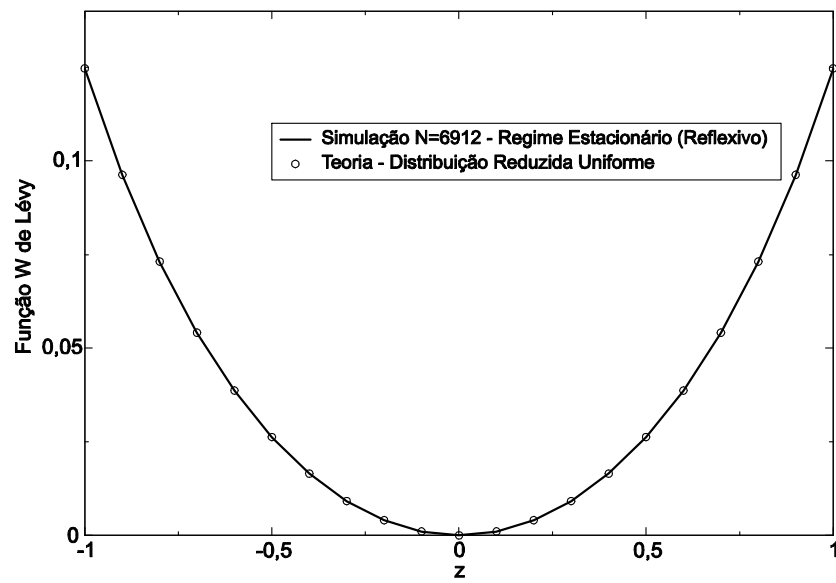
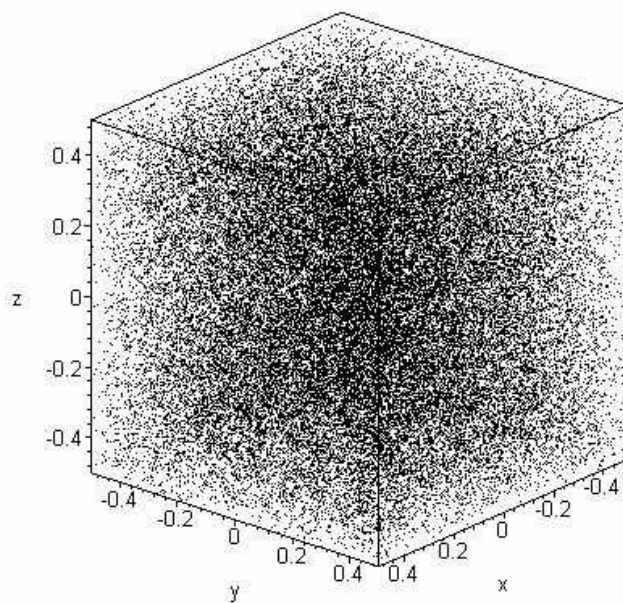
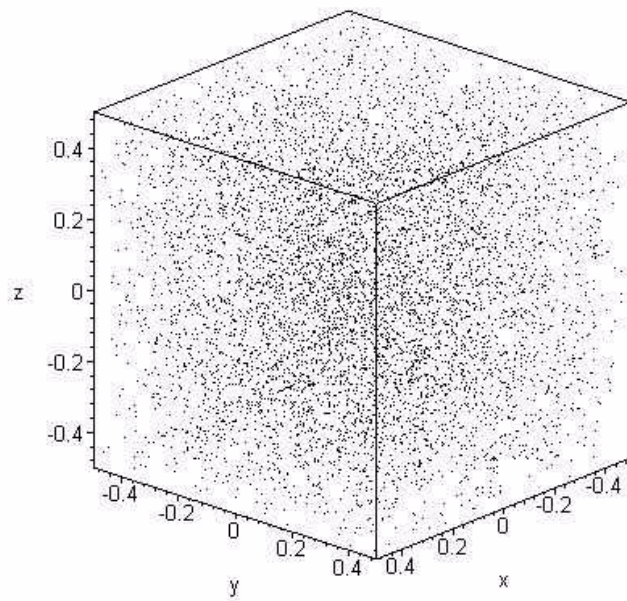


Figura 5.32: Estado assintótico da função $W(z)$ associada à distribuição de posições do sistema com $N = 6912$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, em condições reflexivas.



36.jpg

Figura 5.33: Tomada instantânea da posição das partículas ao final do tempo de simulação. Sistema com $N = 55296$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,0$, em condições periódicas.



37.jpg

Figura 5.34: Tomada instantânea da posição das partículas ao final do tempo de simulação. Sistema com $N = 6912$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 0,7$, em condições reflexivas.

Capítulo 6

Medida e Cálculo dos Coeficientes de Sonine

O capítulo precedente foi em sua maioria dedicado à medida e estudo de propriedades das distribuições de velocidades provenientes de simulações, mais particularmente das funções W de Lévy univocamente associadas a elas. Neste capítulo, nos dedicaremos prioritariamente ao estudo analítico e simulacional da evolução temporal dos coeficientes da expansão de Sonine rumo a seus estados estacionários. Assumimos que todas as questões com respeito à estabilidade do HCS estejam definitivamente resolvidas, em consonância com a última seção do capítulo precedente. Isso permite concentrar-nos na questão de seus valores estacionários, alcançados logo após o período transiente que caracteriza os primeiros estágios de evolução, sempre da ordem de 10 colisões por partícula. Como condição inicial na distribuição de velocidades, passaremos a assumir sempre uma distribuição Gaussiana, o que significa que os valores de todos os coeficientes no tempo $\tau = 0$ são nulos.

A metodologia geral de simulação detalhada na Seção 1 do Capítulo 5 será novamente empregada. Agora, passaremos a nos preocupar com a medida dos momentos estatísticos associados à distribuição de velocidades. Veremos que essa metodologia geral, associada à identificação dos melhores regimes de densidade por meio da escolha criteriosa do valor do parâmetro δ , nos permitirá alcançar alguns excelentes resultados do ponto de vista da precisão das medidas estatísticas efetuadas, em simulações com baixíssimo número de partículas.

No que concerne ao estudo analítico das soluções da equação de Boltzmann (equação 2.10), vimos na Seção 3 do Capítulo 2 como a função de distribuição escalada do HCS pode ser expandida em torno da Gaussiana por um conjunto completo de polinômios de Sonine, conforme equação 2.29. Para sistemas pouco inelásticos, é razoável supor que a distribuição será muito próxima da Gaussiana. Portanto, uma boa aproximação para a distribuição escalada seria obtida ao se truncar a expansão no segundo coeficiente, a_2 . Esse fato justifica o interesse prioritário no cálculo e medida precisa dos valores de a_2 .

6.1 O Segundo Coeficiente da Expansão de Sonine

Nosso ponto de partida será o cômputo do coeficiente a_2 a partir do segundo e do quarto momentos da distribuição de velocidades (equação 5.12):

$$1 + a_2 = \frac{3}{5} \frac{\langle v^4 \rangle}{\langle v^2 \rangle^2} \quad (6.1)$$

e, uma vez evoluído um conjunto suficiente de trajetórias, efetuamos uma dupla média sobre todas elas e sobre o intervalo de simulação.

A média sobre o intervalo de simulação é fundamental para a qualidade estatística. Daí a importância da manutenção da estabilidade. A figura 6.1 mostra o resultado desse procedimento de medida para sistemas com $\delta = 0,7$, $\alpha = 0,5$ e com número de partículas variado, todos submetidos a contornos reflexivos.

O resultado do aumento gradativo do número de partículas é um processo de convergência para o valor estacionário do coeficiente que se espera ser válido no limite termodinâmico. Seu valor obtido analiticamente, por truncagem em ordem $O(\lambda^2)$ e em aproximação linear, é dado pela equação 2.39, que fornece $1 + a_2 = 1,05246$. Conclui-se que o valor computado em simulação com apenas 864 partículas já está em excelente concordância com a predição teórica mais elementar.

A figura 6.2 mostra o resultado da evolução temporal de a_2 para sistemas com $\delta = 0,7$, $N = 256$ e com coeficientes de restituição variando entre $0,5 < \alpha < 1,0$, todos submetidos a contornos reflexivos.

A figura 6.3 apresenta os gráficos dos valores simulados do coeficiente a_2 em função do coeficiente de restituição α , para sistemas com diferentes números de partículas. Em todas as simulações, $\delta = 0,7$, $N = 256$ e os contornos são reflexivos.

Novamente, a qualidade da curva construída com apenas 864 partículas já é excelente, no intervalo de coeficientes de restituição $0,5 < \alpha < 1,0$.

Não temos notícia de simulações usando MD onde uma precisão desta ordem tenha sido alcançada com um número de partículas tão baixo. Como discutimos previamente na Seção 3 do Capítulo 2, a literatura recente [17, 29] tem apontado grandes dificuldades para obter precisão estatística, através do uso de MD, na medida dos momentos da distribuição, em particular para o HCS. Brey e colaboradores [14] conseguiram excelentes resultados, mas com uso de DSMC. Apesar do bom acordo entre teoria e simulação obtido por Huthmann e colaboradores [17] usando MD, a curva de a_2 em função dos coeficientes de restituição obtida por eles não possui o mesmo grau de precisão nem de acurácia que a nossa, ainda que, no caso deles, 50.000 partículas tenham sido utilizadas. A razão disso agora é clara. Primeiramente, como pode ser visto na tabela 5.1, a fração volumétrica usada por eles corresponde a um valor do parâmetro $\delta = 56,55$. Para esse valor, o HCS é necessariamente instável e poucos pontos de simulação podem ser coletados, tornando a estatística necessariamente menos precisa. Em

38.eps 38.eps

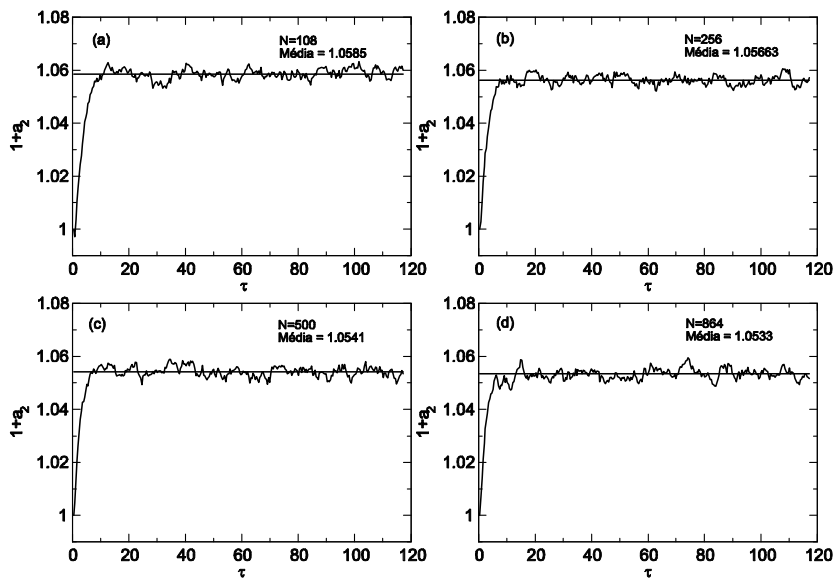


Figura 6.1: Evolução temporal do coeficiente de Sonine $1 + a_2$ para sistemas com $N = 108$ (2500 trajetórias), $N = 256$ (1000 trajetórias), $N = 500$ (500 trajetórias), $N = 864$ (300 trajetórias); $\delta = 0,7$; $\alpha = 0,5$ e contornos reflexivos. A linha reta é a média sobre o intervalo $20 < \tau < 120$.

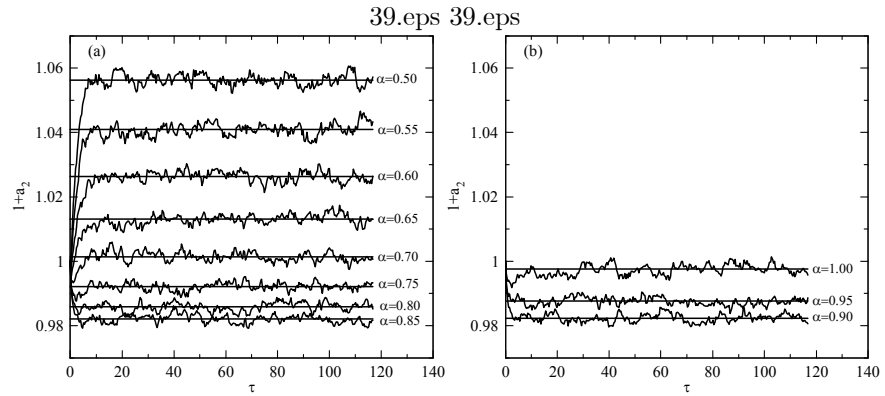


Figura 6.2: Evolução temporal do coeficiente de Sonine $1 + a_2$ para sistemas com $N = 256$ (1000 trajetórias), $\delta = 0,7$ e contornos reflexivos. A linha reta é a média sobre o intervalo $20 < \tau < 120$.

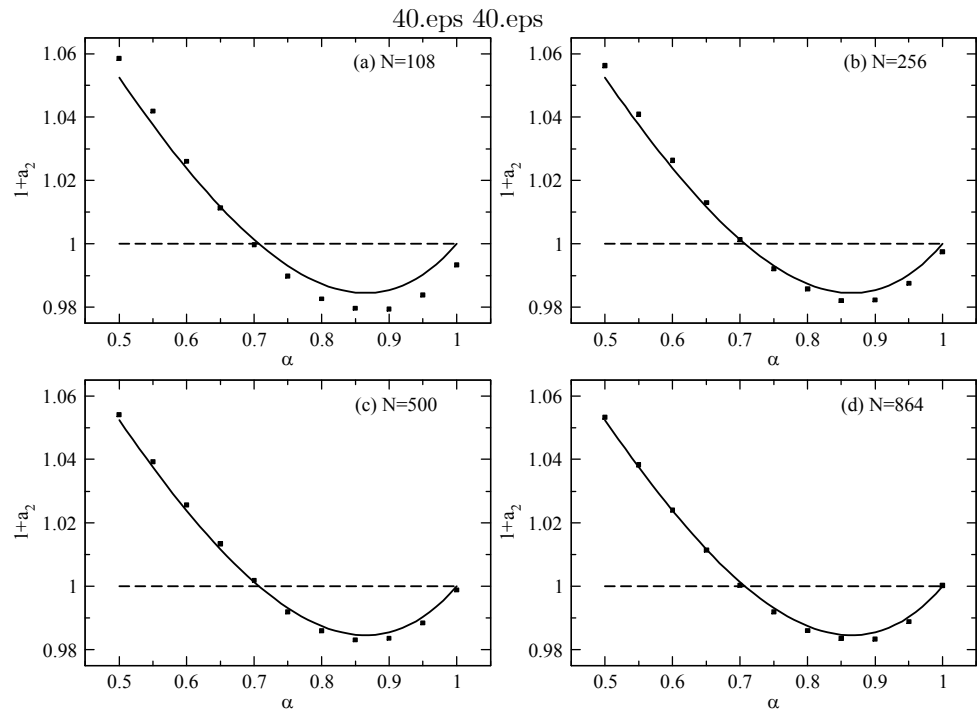


Figura 6.3: Valores do coeficiente $1 + a_2$ em função do coeficiente de restituição α , para sistemas com diferentes números de partículas. A curva contínua corresponde à equação 2.39 e a figura 2.2 para $d = 3$. A barra de erros associada aos pontos de simulação é da ordem da dimensão do símbolo.

41.eps 41.eps

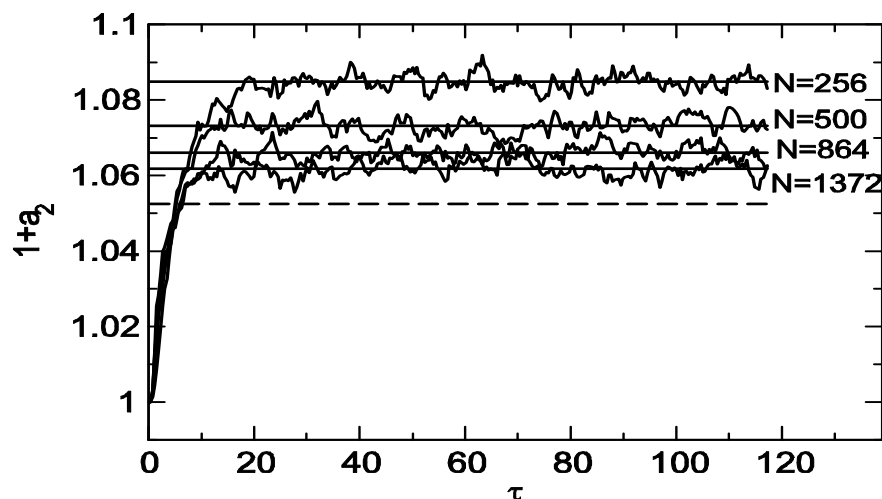


Figura 6.4: Evolução temporal do coeficiente de Sonine $1 + a_2$ para sistemas com número crescente de partículas, $\delta = 1,327$; $\alpha = 0,5$ e contornos reflexivos. As linhas retas são a média sobre o intervalo $20 < \tau < 120$. A linha tracejada corresponde ao valor teórico dado na equação 2.39.

segundo lugar, eles usam contornos periódicos. Como vimos na discussão da Seção 3 do Capítulo 5, não se pode ter garantia de que o limite termodinâmico tenha sido alcançado com esse número de partículas, pois o valor $\delta = 56,55$ é novamente demasiado elevado. Assim, a distribuição medida pode ser pouco acurada, podendo estar ainda consideravelmente afastada da distribuição limite.

O uso de contornos reflexivos e do valor $\delta = 0,7$, que vimos ser o mais adequado para efetuar simulações com esse tipo de contorno, permite, portanto, obter resultados melhores, com um número extremamente menos elevado de partículas. Isso significa, por exemplo, menos tempo computacional. Entretanto, se tivéssemos escolhido valores do parâmetro δ muito diferentes, os resultados, com um número de partículas tão pequeno, seriam de fato muito ruins. Como exemplo, podemos ver a figura 6.4, onde todos os sistemas simulados possuem $\delta = 1,327$. O processo de convergência é óbvio, mas começa bem afastado do estado limite.

O conjunto das figuras 6.1 a 6.3 é uma evidência de que o valor de a_2 , ainda que calculado analiticamente somente em aproximação linear, pode sim ser uma boa descrição para sistemas com número pequeno de partículas, ao menos no

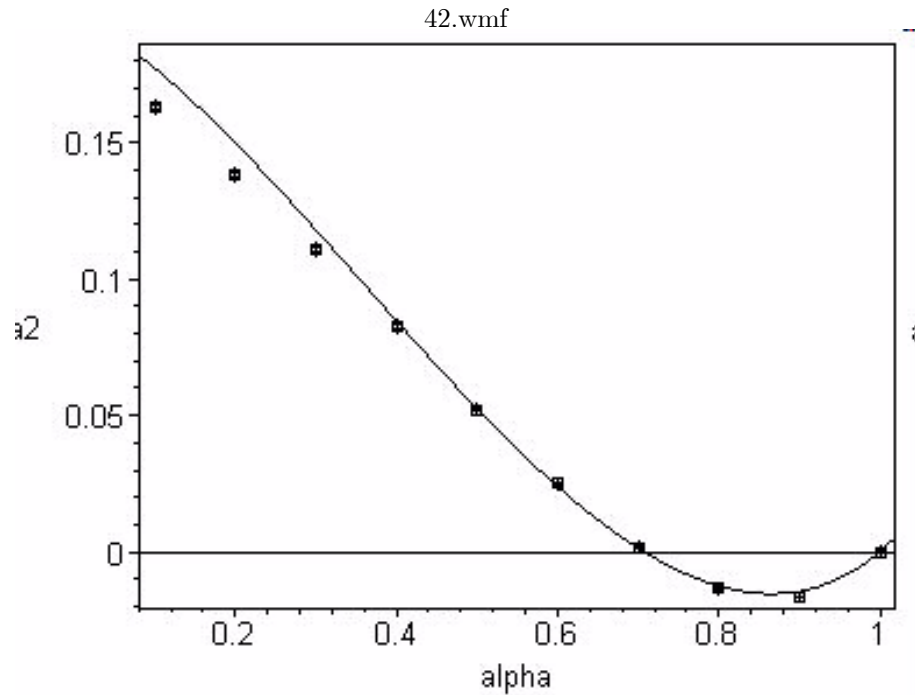


Figura 6.5: Segundo coeficiente de Sonine a_2 em função do coeficiente de restituição α . Os pontos correspondem aos valores obtidos em simulação com $N = 1372$, $\delta = 0,7$ e contornos reflexivos. As barras de erro são da ordem do tamanho do símbolo utilizado. A curva contínua é a aproximação linear dada pela equação 2.39.

intervalo de baixa inelasticidade. Mas a condição necessária para isso é que o valor do parâmetro δ seja fixado em torno de $\delta \simeq 0,7$, para sistemas com contornos reflexivos, e $\delta \simeq 1,4$, para sistemas com contornos periódicos. Isso é coerente com os resultados da Seção 3 do Capítulo 5. Por outro lado, uma vez implementado o limite termodinâmico, espera-se que o valor de δ não seja mais relevante e que a previsão teórica, no regime de baixas inelasticidades, seja relativamente bem satisfeita.

Para encerrar esta seção, apresentamos, na figura 6.5, o gráfico do coeficiente a_2 em função do coeficiente de restituição no intervalo $0,1 < \alpha < 1,0$. Para construir esta curva, usamos sistemas com $N = 1372$, $\delta = 0,7$, em condições reflexivas. Para atingir essa precisão, fizemos uma dupla média sobre um conjunto de 689 trajetórias e sobre o intervalo $20 < \tau < 120$. Juntamente, colocamos a curva correspondente à aproximação linear, dada pela equação 2.39.

Até onde sabemos, essa é a primeira vez que uma curva suficientemente precisa em MD mostra que, para sistemas altamente inelásticos no HCS, a

aproximação linear de a_2 (equação 2.39) obtida por van Noije e Ernst [27] se afasta dos dados simulacionais.

Da mesma forma, a precisão dos dados é suficiente para estabelecer definitivamente que, para sistemas de inelasticidade moderada a baixa ($\alpha > 0,4$), a curva obtida por van Noije e Ernst é surpreendentemente acurada. Passemos a discutir mais pormenorizadamente essas questões.

6.2 Demais Coeficientes da Expansão de Sonine

Os demais coeficientes da expansão de Sonine podem ser obtidos de modo inteiramente análogo ao exposto acima. Para a discussão do problema analítico, são necessárias boas medidas dos coeficientes de ordem mais alta. O cômputo do coeficiente a_3 , por exemplo, é feito a partir do segundo, quarto e sexto momentos da distribuição de velocidades, através da expressão:

$$a_3 = -2 + \frac{9}{5} \frac{\langle v^4 \rangle}{\langle v^2 \rangle^2} - \frac{9}{35} \frac{\langle v^6 \rangle}{\langle v^2 \rangle^3}. \quad (6.2)$$

Os demais coeficientes possuem expressões análogas, sempre dependentes dos momentos pares sucessivamente mais altos, bem como de todos os seus antecessores. As expressões correspondentes podem ser obtidas de modo direto.

O cálculo de coeficientes de Sonine de ordem cada vez mais alta implica erros associados também cada vez maiores. Nessa situação, vai se tornando computacionalmente impeditivo obter precisão razoável para coeficientes acima de a_3 .

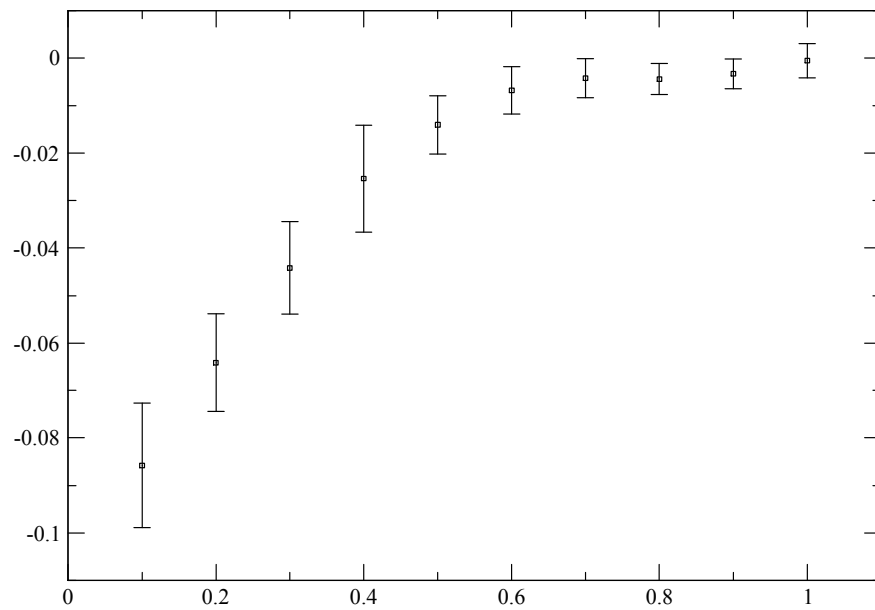
Entretanto, devemos atentar para a seguinte observação. Os erros são associados ao desvio padrão da média tomada ao longo do tempo. Apesar dos valores dos erros serem consideráveis, verificamos que isso é pouco relevante para a confiabilidade dos valores médios dos coeficientes medidos. A confiabilidade destes valores está ligada mais fortemente à sua estabilidade, que de fato é muito grande. Isso significa que o valor da média converge de forma muito mais rápida do que o do desvio padrão, o que é uma característica de processos estacionários. Portanto, seu valor altera-se muito pouco a partir de um certo número de simulações.

A tabela 6.1 sintetiza os resultados do cômputo simulacional do cinco primeiros coeficientes de Sonine. Para construir essa tabela, simulamos o mesmo sistema definido acima para o cômputo de a_2 , ou seja, com parâmetros $N = 1372$, $\delta = 0,7$, em condições reflexivas. Para obter esses valores, fizemos uma dupla média sobre um conjunto de 689 trajetórias e sobre o intervalo $20 < \tau < 120$.

As figuras 6.6 a 6.8 resumem os resultados da tabela 6.1, apresentando os erros associados a cada medida.

α	a_2	a_3	a_4	a_5
0,1	0,162838390	-0,085779285	0,156174517	-0,23202734
0,2	0,138241921	-0,064133137	0,106561019	-0,12429727
0,3	0,110985933	-0,044188217	0,061096501	-0,05201061
0,4	0,082643412	-0,025369818	0,034378279	-0,03127297
0,5	0,052244511	-0,014067258	0,012360186	-0,00846856
0,6	0,025018175	-0,006788851	0,002616939	-0,00128646
0,7	0,001576036	-0,004233738	-0,001023280	-0,00092812
0,8	-0,013539552	-0,004395604	-0,000666345	0,000418669
0,9	-0,016586063	-0,003325462	-0,000662103	-0,00017661
1,0	-0,001019562	-0,000554763	-0,000632785	-0,00067953

Tabela 6.1: Valores do coeficiente de Sonine obtidos diretamente da simulação

Figura 6.6: Coeficiente de Sonine a_3 obtido da simulação em função do coeficiente de restituição.

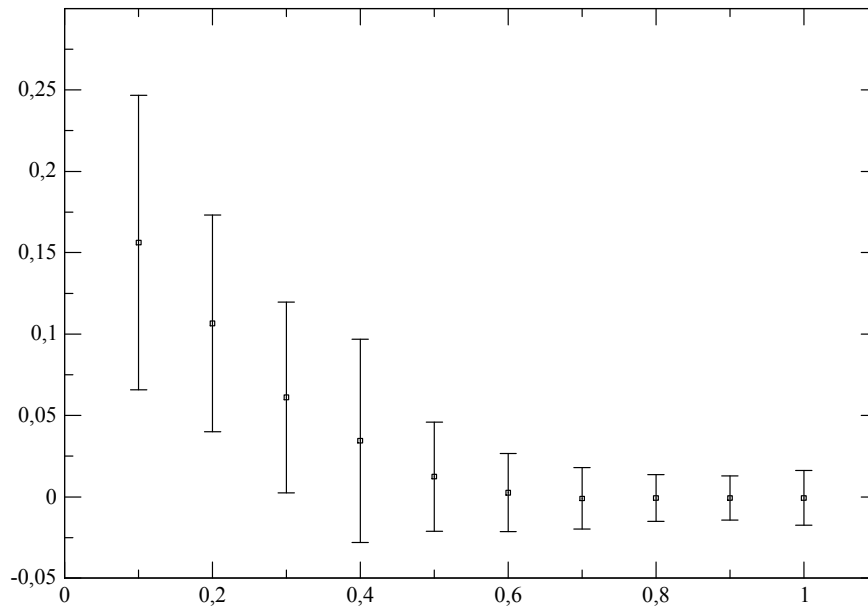


Figura 6.7: Coeficiente de Sonine a_4 obtido da simulação em função do coeficiente de restituição.

6.3 Cálculo Analítico dos Coeficientes

Uma vez estando de posse de resultados de simulação confiáveis, podemos finalmente retornar à discussão iniciada na Seção 3 do Capítulo 2. Como foi visto, a evolução temporal completa do HCS em termos da dependência temporal de seus momentos é dada pelas equações 2.16 e 2.40. Elas constituem um sistema infinito de equações diferenciais, e um procedimento de truncagem da expansão 2.29 permite chegar a um sistema finito e fechado. Para a expansão ser válida, os termos desprezados devem ser realmente pequenos quando comparados com os remanescentes. A hipótese inicial é que $a_2 \ll 1 = a_0$. Pode-se assumir mais fortemente que $a_{l+1} \ll a_l$, para todo l . Assim, se a_l é da ordem de λ^l , onde λ é um parâmetro pequeno, todos os termos de ordem maior que $O(\lambda^l)$ podem ser desprezados. Este é o procedimento, em resumo, de Huthmann e colaboradores [17]. Quando levado à ordem $O(\lambda^2)$, o procedimento fornece uma equação linear para a_2 (equação 2.36). Quando solucionados os seus pontos fixos, obtém-se o resultado mostrado na figura 6.5.

Os resultados compilados na tabela 6.1 e nas figuras 6.6 a 6.8 mostram que a conjectura de Huthmann e colaboradores deve necessariamente falhar para valores menores que $\alpha \simeq 0,5$. Por outro lado, para valores maiores que $\alpha \simeq 0,8$, a conjectura se justifica razoavelmente.

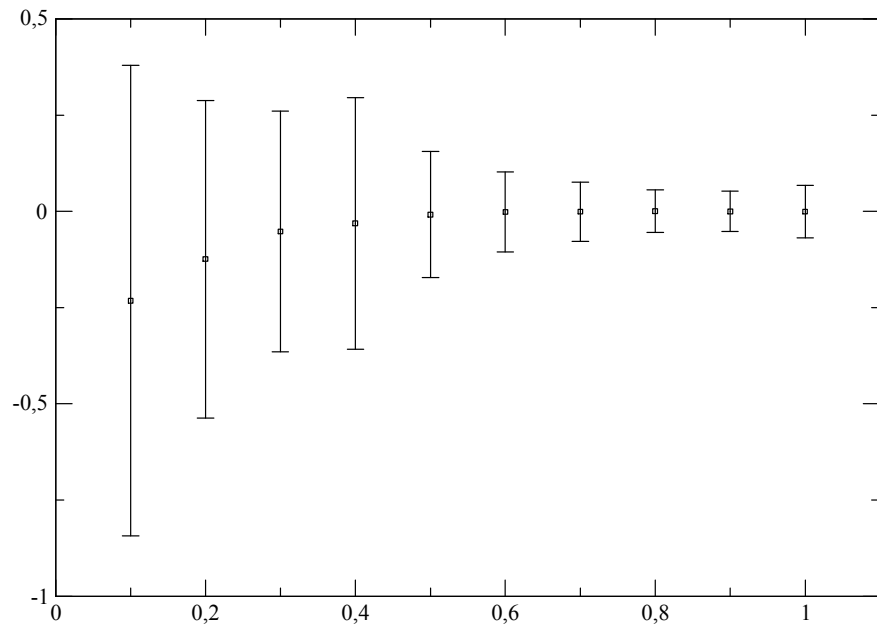


Figura 6.8: Coeficiente de Sonine a_5 obtido da simulação em função do coeficiente de restituição.

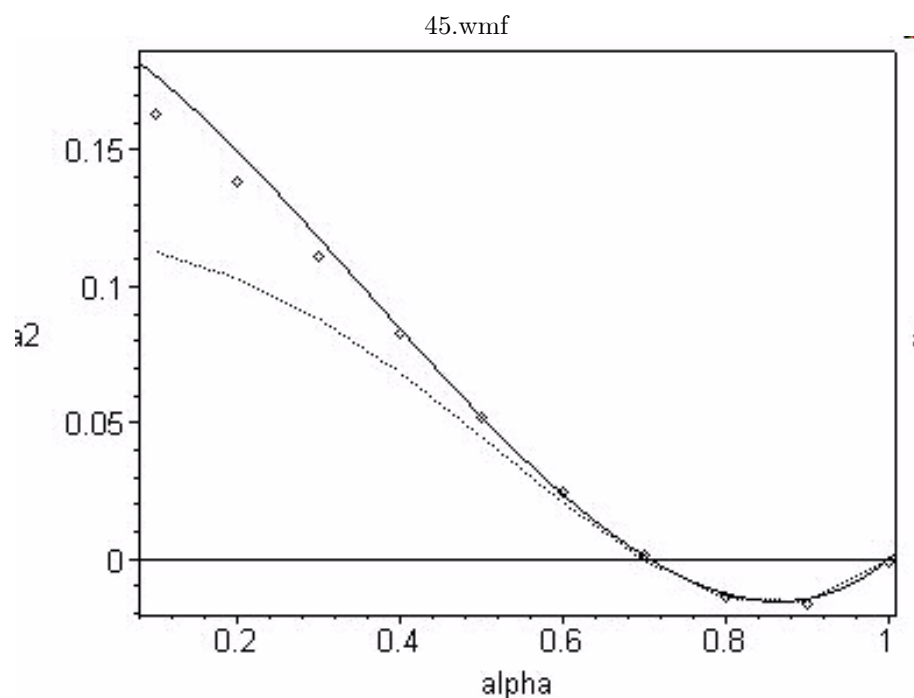


Figura 6.9: Coeficiente a_2 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^2)$ (linha contínua) e em ordem $O(\lambda^3)$ (linha pontilhada).

6.3.1 Truncagem em ordem $O(\lambda^3)$

O passo seguinte no procedimento de truncagem é a ordem $O(\lambda^3)$. Isso permite calcular o terceiro coeficiente da expansão polinomial de Sonine. As equações resultantes são ainda lineares nos coeficientes a_2 e a_3 , uma vez que a_2^2 já é de ordem $O(\lambda^4)$. O sistema resultante é dado pelas equações 2.43, que reproduzimos aqui:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} a_2(t) &= \gamma_2 + 4\gamma a_2 & (6.3) \\ \frac{d}{d\tau} a_3(t) &= \gamma_3 + 6\gamma(a_3 - a_2) \end{aligned}$$

A solução numérica desse sistema fornece as curvas mostradas nas figuras 6.9 a 6.11 para os valores estacionários dos coeficientes.

Esses resultados confirmam pela primeira vez a conjectura de Huthmann e colaboradores para valores do coeficiente de restituição maiores que $\alpha \simeq 0,8$. Nesse intervalo, a truncagem uma ordem acima contribuiu para melhorar o cálculo de a_2 e obter boa estimativa para a_3 . Para valores abaixo de $\alpha \simeq 0,5$, a truncagem em ordem $O(\lambda^3)$ falha completamente. Curiosamente, ela dá

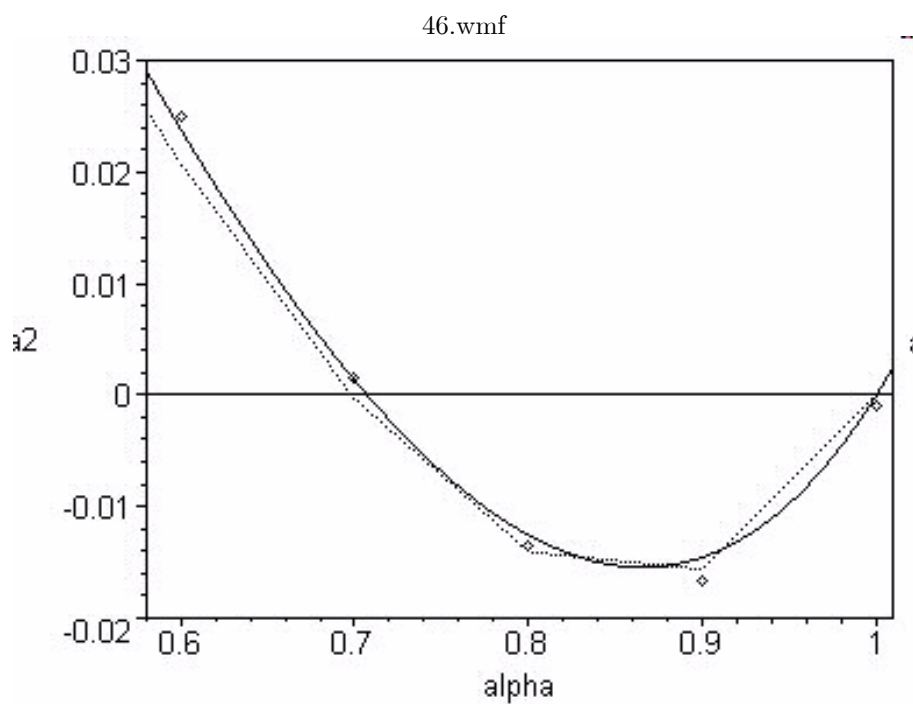


Figura 6.10: Detalhe da figura 6.9 para o intervalo $0,6 < \alpha < 1,0$.

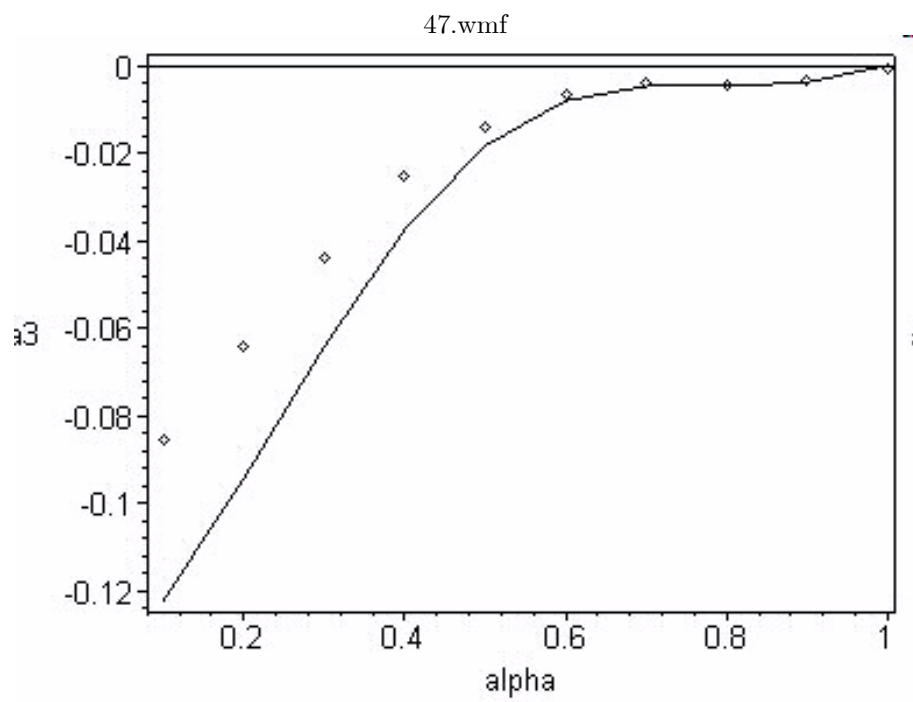


Figura 6.11: Coeficiente a_3 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^3)$ (linha contínua).

resultados piores para a_2 do que a truncagem em ordem $O(\lambda^2)$. Os valores de a_3 também passam a ser gradativamente mal-estimados.

6.3.2 Truncagens em ordem $O(\lambda^4)$ e $O(\lambda^5)$

Vamos proceder às truncagens sucessivamente em ordens $O(\lambda^4)$ e $O(\lambda^5)$, e calcular todos os coeficientes de Sonine até o quarto e, em seguida, até o quinto. As equações resultantes são agora não-lineares. Em ordem $O(\lambda^4)$, o único termo não-linear presente é a_2^2 . Em ordem $O(\lambda^5)$, os termos não-lineares são a_2^2 e $a_2 \cdot a_3$. O sistema resultante, em ordem cinco, por exemplo, é obtido das equações 2.40:

$$\begin{aligned}\dot{a}_2(t) &= \gamma_2 + 4\gamma a_2 \\ \dot{a}_3(t) &= \gamma_3 + 6\gamma(a_3 - a_2) \\ \dot{a}_4(t) &= \gamma_4 + 8\gamma(a_4 - a_3) \\ \dot{a}_5(t) &= \gamma_5 + 10\gamma(a_5 - a_4)\end{aligned}\tag{6.4}$$

A solução numérica dos sistemas em ordens $O(\lambda^4)$ e $O(\lambda^5)$ fornecem as curvas mostradas na figura 6.12 para os valores estacionários do coeficiente a_2 . Nessa figura, apresentamos juntamente as curvas previamente obtidas em ordem $O(\lambda^2)$ e $O(\lambda^3)$.

As sucessivas truncagens praticamente já não fornecem, na região de baixa inelasticidade, valores melhores do que os obtidos em ordem $O(\lambda^3)$. Na região de alta inelasticidade, porém, a ordem $O(\lambda^4)$ é um pouco melhor que a ordem $O(\lambda^3)$, e a ordem $O(\lambda^5)$ é claramente pior. Nenhuma das ordens fornece resultados tão bons quanto a ordem $O(\lambda^2)$, nessa região. Pode-se concluir que as sucessivas aproximações na expansão de Sonine não convergem para a distribuição de velocidades do HCS, para sistemas mediana ou altamente inelásticos.

A figura 6.13 mostra o resultado para os valores estacionários de a_3 , em todas as ordens até $O(\lambda^5)$.

As sucessivas truncagens não chegam a melhorar o valor do coeficiente a_3 além do erro associado à própria medida, na região de baixa inelasticidade. Na região de alta inelasticidade, o padrão observado para o coeficiente a_2 se repete: a ordem $O(\lambda^4)$ apresenta resultados bastante acurados, bem melhores que os apresentados nas ordens $O(\lambda^3)$ e $O(\lambda^5)$. Uma vez mais, esses resultados não sugerem uma clara convergência em direção à distribuição de velocidades do HCS.

A figura 6.14 mostra os resultados para o coeficiente a_4 . Na região de baixa inelasticidade, as ordens $O(\lambda^4)$ e $O(\lambda^5)$ estão ambas dentro do erro da simulação. Na região de alta inelasticidade, contudo, os resultados correspondentes à ordem $O(\lambda^4)$ são gradativamente mal estimados. Ainda assim, a curva calculada em ordem $O(\lambda^4)$ é ao menos qualitativamente compatível com a simulada, ao contrário da curva correspondente à ordem $O(\lambda^5)$.

Por fim, a figura 6.15 mostra que os resultados analíticos para o coeficiente a_5 apresentam compatibilidade qualitativa com os dados de simulação, mas também afastam-se sensivelmente dos valores medidos assim que a inelasticidade se torna mais alta.

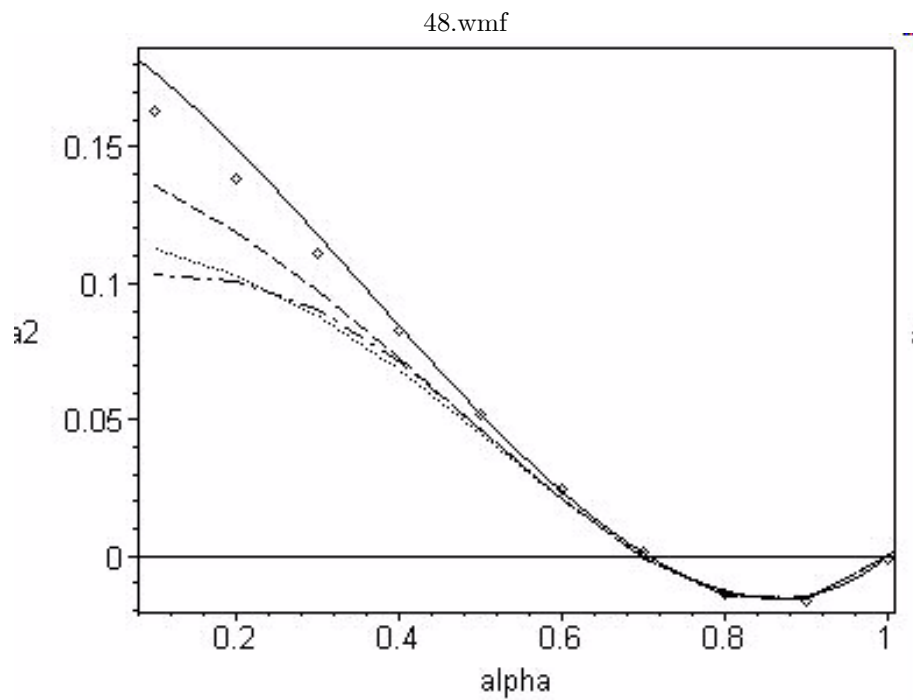


Figura 6.12: Coeficiente a_2 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^2)$ (linha contínua), em ordem $O(\lambda^3)$ (linha pontilhada), em ordem $O(\lambda^4)$ (linha tracejada) e em ordem $O(\lambda^5)$ (ponto e traço).

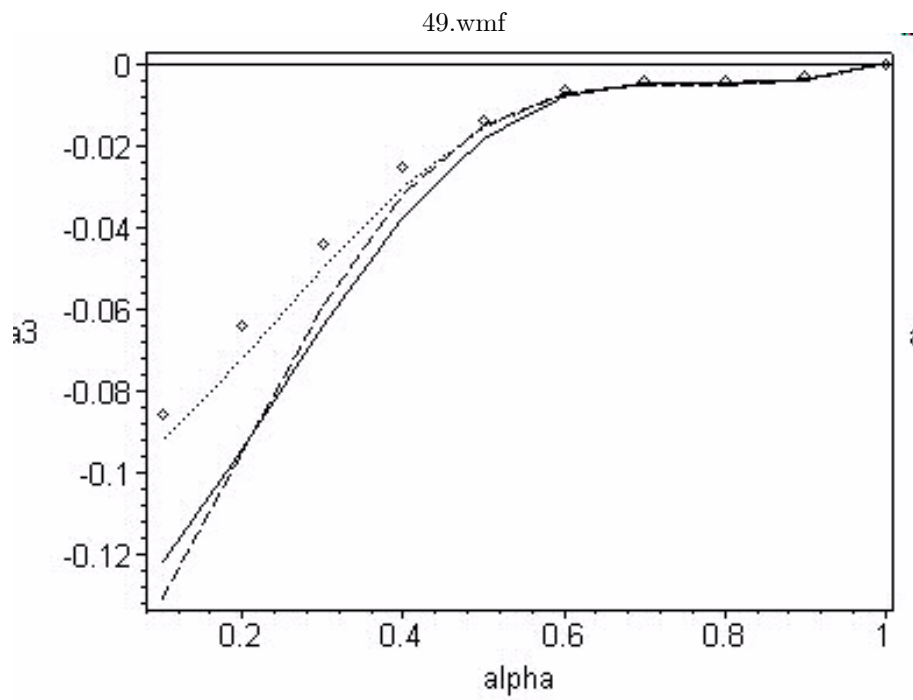


Figura 6.13: Coeficiente a_3 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^3)$ (linha contínua), em ordem $O(\lambda^4)$ (linha pontilhada) e em ordem $O(\lambda^5)$ (linha tracejada).

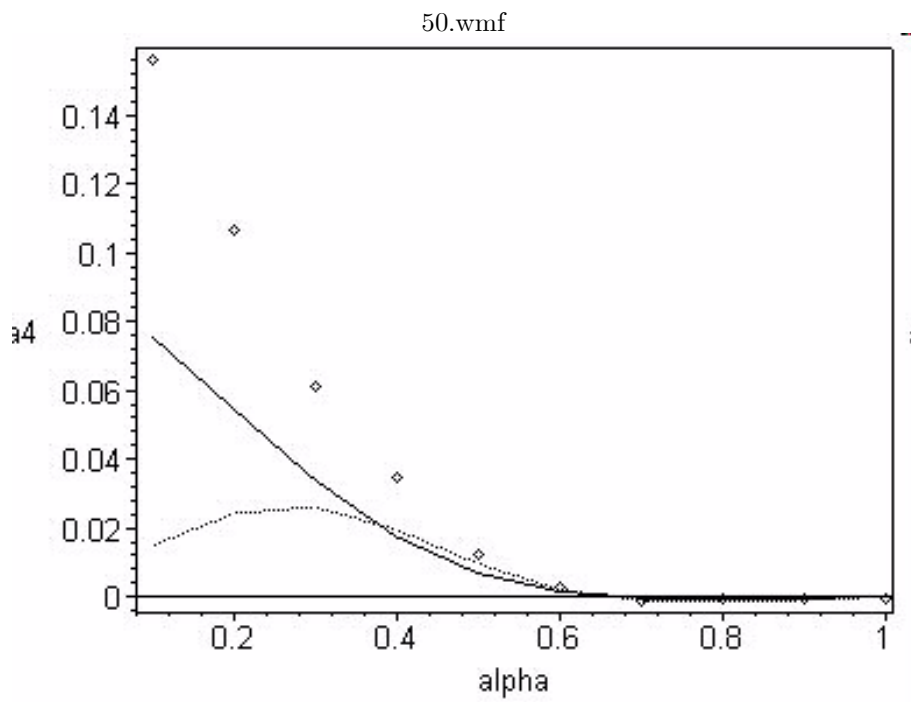


Figura 6.14: Coeficiente a_4 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^4)$ (linha contínua) e em ordem $O(\lambda^5)$ (linha pontilhada).

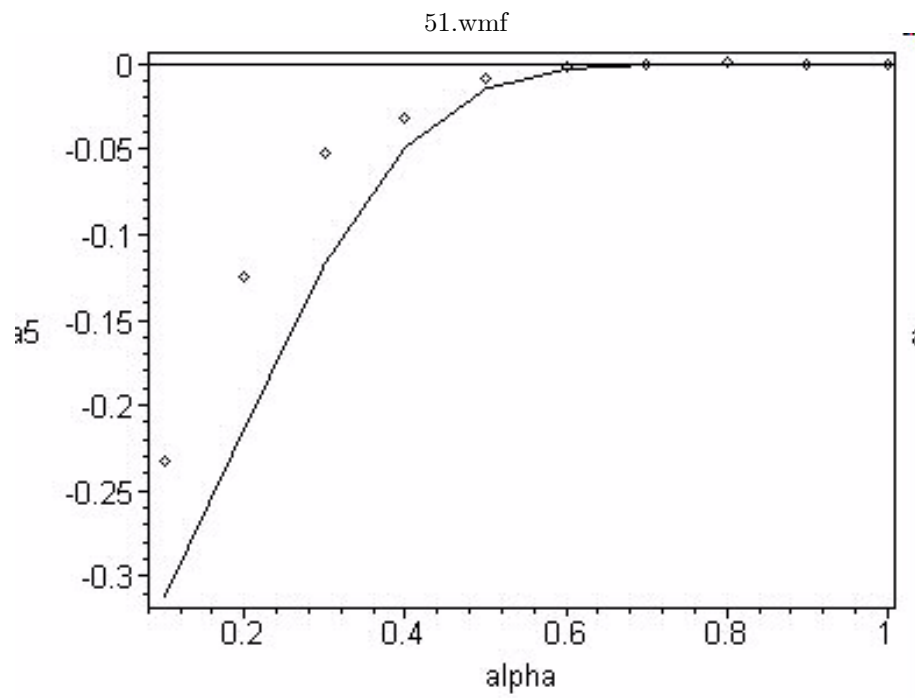


Figura 6.15: Coeficiente a_5 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^5)$ (linha contínua).

6.4 Convergência da Expansão em Polinômios de Sonine

Os resultados da seção anterior mostram que o esquema perturbativo sugerido por Huthmann e colaboradores é aceitável dentro da região de baixa inelasticidade, onde $\alpha > 0,6$. Para coeficientes de restituição mais baixos, o esquema falha porque a suposição na qual se baseia é violada. Ainda que não tenham medido os coeficientes da expansão de Sonine na precisão necessária para afirmar definitivamente esse resultado, Huthmann e colaboradores foram capazes de prevê-lo com base no comportamento inconsistente das soluções dos sistemas truncados, exatamente conforme foi detalhado acima.

Uma das explicações sugeridas pelos autores para a falha de seu esquema perturbativo era a de que, em torno de $\alpha \simeq 0,6$, ocorreria uma mudança essencial na função de distribuição. Segundo essa conjectura, a função de distribuição do sistema não seria mais descrita por pequenos desvios com relação à Gaussiana, mas poderia ser melhor aproximada por uma expansão em torno de, por exemplo, uma exponencial [17]. Essa conjectura coloca em dúvida a validade da expansão de Sonine em torno da Gaussiana, para sistemas altamente inelásticos.

Nesse ponto, veremos como a função W pode, uma vez mais, mostrar-se um instrumento poderoso para a investigação relacionada às propriedades estatísticas de um sistema. Uma vez que a função W é uma medida suficientemente acurada da distribuição total de velocidades e pode ser obtida de forma completamente independente da expansão em polinômios de Sonine, é possível utilizá-la para responder à questão formulada por Huthmann e colaboradores, ao menos em um sentido estrito. Ou seja, pelo menos na medida em que resultados de simulação forneçam boas evidências da validade de conjecturas formuladas teoricamente. Nesse sentido, vamos mostrar que há sim boas evidências de que a expansão em polinômios de Sonine em torno da distribuição Gaussiana é convergente, mesmo em regimes de alta inelasticidade.

Antes de mais nada, devemos recordar que a função $W(z)$ pode ser expandida em uma série infinita (equação 4.18) cujos coeficientes (equação 4.20) são combinações dos momentos estatísticos reduzidos (equação 4.17). Esse resultado é geral e ainda independente da expansão em polinômios de Sonine. Nosso objetivo agora é expressar a função $W(z)$ em termos dos coeficientes de Sonine. Para isso, precisamos escrever os momentos estatísticos reduzidos ν^k em função desses coeficientes. Isso requer como primeiro passo que, na definição da distribuição associada à variável v_x , dada na equação 5.2, façamos uma mudança de variável $v_i \rightarrow c_i = \frac{v_i}{v_0}$, com $i = x, y, z$. Se usarmos a fórmula 4.6, a nova distribuição se escreve como:

$$g(c_x) = \frac{v_0^3}{n} \int_{-\infty}^{\infty} dc_y \int_{-\infty}^{\infty} dc_z \rho(v_0 c_x, v_0 c_y, v_0 c_z). \quad (6.5)$$

Introduzamos a forma escalada dada pela equação 2.12, juntamente com a expansão dada na equação 2.29:

$$\rho(v_0c_x, v_0c_y, v_0c_z) = \frac{n}{v_0^3(t)}\tilde{\rho}(c) = \frac{n}{v_0^3(t)}\phi(c) \left\{ 1 + \sum_{p=1}^{\infty} a_p(t)S_p(c^2) \right\}, \quad (6.6)$$

onde $c^2 = c_x^2 + c_y^2 + c_z^2$. Substituindo 6.6 na equação 6.5, obtemos:

$$g(c_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dc_y \int_{-\infty}^{\infty} dc_z \phi(c) \left\{ 1 + \sum_{p=1}^{\infty} a_p(t)S_p(c^2) \right\}, \quad (6.7)$$

e supomos que a integração nas variáveis y e z é formalmente realizada para a expansão infinita. Na prática, devemos truncar a expansão em algum ponto, por exemplo, $p = 5$. O segundo passo requer que lembremos que essa ainda não é a distribuição associada à variável reduzida $\bar{c}_x = \frac{\sqrt{2}v_x}{v_0} \equiv \sqrt{2}c_x$, definida na Seção 2 do Capítulo 5. Por isso, devemos aplicar novamente a fórmula 4.6, o que fornece finalmente a distribuição reduzida que necessitamos:

$$\bar{g}(\bar{c}_x) = \frac{1}{\sqrt{2}}g\left(\frac{\bar{c}_x}{\sqrt{2}}\right). \quad (6.8)$$

Os momentos estatísticos reduzidos são calculados como sendo, portanto:

$$\begin{aligned} \nu_4 &= \int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}_x^4 \bar{g}(\bar{c}_x) d\bar{c}_x = 3(1 + a_2), \\ \nu_6 &= \int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}_x^6 \bar{g}(\bar{c}_x) d\bar{c}_x = 15(1 + 3a_2 - a_3), \\ \nu_8 &= \int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}_x^8 \bar{g}(\bar{c}_x) d\bar{c}_x = 105(1 + 6a_2 - 4a_3 + a_4), \\ \nu_{10} &= \int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}_x^{10} \bar{g}(\bar{c}_x) d\bar{c}_x = 945(1 + 10a_2 - 10a_3 + 5a_4 + a_5). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Se substituirmos essas expressões nas equações 4.20 e 4.18, obtemos:

$$\begin{aligned} W(z) &= -\frac{1}{4}a_2z^2 - \frac{1}{24}a_3z^4 + \\ &+ \left(-\frac{1}{64} - \frac{1}{192}a_4 - \frac{1}{32}a_2 + \frac{1}{576}(3a_2 + 3)^2\right)z^6 + \\ &+ \left(-\frac{1}{96} - \frac{1}{96}a_2 - \frac{1}{192}a_3 + \frac{1}{576}(3a_2 + 3)^2 - \right. \\ &\left. - \frac{1}{1920}a_5 - \frac{1}{8640}(3a_2 + 3)(-15a_3 + 45a_2 + 15)\right)z^8. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Isso nos dá a função W aproximada em termos dos coeficientes de Sonine até ordem $O(\lambda^5)$.

Para verificar se a expansão da distribuição em polinômios de Sonine é convergente, é suficiente comparar a função W sem aproximações, obtida diretamente da simulação, com as sucessivas aproximações da equação 6.10 obtidas

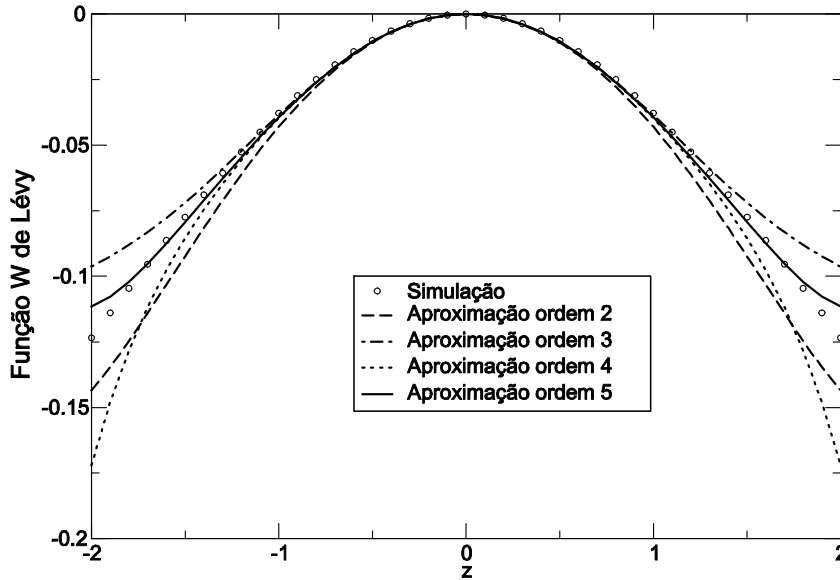


Figura 6.16: Função W completa correspondente a um sistema com $N = 256$, $\alpha = 0, 1$, $\delta = 1, 4$, simulado em condições periódicas (pontos). As linhas sólidas correspondem a sucessivas aproximações da função W dadas pela equação 6.10 até a ordem indicada, com os coeficientes de Sonine também dados pela simulação ($a_2 = 0.1737$; $a_3 = -0.1086$; $a_4 = 0.2272$; $a_5 = -0.4541$)

ao se fazer somente a_2 não-nulo, em seguida a_2 e a_3 não-nulos, etc, até a expressão completa. O resultado pode ser visto na figura 6.16, onde usamos como exemplo um sistema com $N = 256$, $\alpha = 0, 1$, $\delta = 1, 4$, simulado em condições periódicas. Os valores dos coeficientes medidos e usados para compor as aproximações sucessivas são os seguintes: $a_2 = 0.1737$; $a_3 = -0.1086$; $a_4 = 0.2272$; $a_5 = -0.4541$.

É possível observar que, à medida que coeficientes de ordem mais alta vão sendo considerados, as curvas correspondentes às funções aproximadas convergem inequivocamente para a curva da função completa, mesmo no caso de um sistema altamente inelástico, com $\alpha = 0, 1$. Isso não demonstra, mas fornece uma evidência muito forte de que a expansão em polinômios de Sonine é convergente em todo o intervalo de definição do coeficiente de restituição.

6.5 Novo Esquema de Truncagem da Expansão de Sonine

Os resultados da última seção fornecem uma idéia geral para um novo esquema de truncagem da expansão em polinômios de Sonine. O motivo pelo qual o esquema de Huthmann e colaboradores falha é o fato de que os coeficientes de ordem mais alta não se escalonam segundo seus valores absolutos quando o sistema é suficientemente inelástico. Coeficientes de ordem mais alta podem ter ordem de grandeza equivalente, ou até superior a coeficientes de ordem mais baixa.

Se, no entanto, o sistema infinito de equações para os coeficientes pudesse ser reescrito em termos de um novo conjunto de variáveis independentes, de tal modo que essas novas variáveis fossem hierarquizadas com relação a seus valores absolutos, em ordem decrescente, então não haveria motivos, em princípio, para o esquema perturbativo falhar. Essas novas variáveis são sugeridas pela seguinte observação. Na equação 6.10, os coeficientes das sucessivas potências de z são, de fato, gradativamente menores. Na verdade, quase sempre uma ordem de grandeza menores. No caso ilustrado acima, os valores dos coeficientes medidos, substituídos na equação 6.10, fornecem:

$$W(z) = -0,04342500000z^2 + 0,00452500000z^4 \quad (6.11) \\ - 0,00071190067z^6 + 0,000138261358z^8.$$

As novas variáveis poderiam ser, portanto, as combinações não-lineares dos coeficientes de Sonine que aparecem como os coeficientes K na expansão da função W :

$$y_2 = -\frac{1}{4}a_2, \\ y_3 = -\frac{1}{24}a_3, \\ y_4 = -\frac{1}{64} - \frac{1}{192}a_4 - \frac{1}{32}a_2 + \frac{1}{576}(3a_2 + 3)^2, \\ y_5 = -\frac{1}{96} - \frac{1}{96}a_2 - \frac{1}{192}a_3 + \frac{1}{576}(3a_2 + 3)^2 - \quad (6.12) \\ - \frac{1}{1920}a_5 - \frac{1}{8640}(3a_2 + 3)(-15a_3 + 45a_2 + 15),$$

e assim sucessivamente. Essa maneira de reescrever o conjunto das variáveis independentes tem a vantagem adicional de ser escalonada. A sucessiva adição de momentos estatísticos não altera a expressão do coeficiente K_i da potência anterior z^i . É importante observar que a hierarquização de valores em ordem

6.5. NOVO ESQUEMA DE TRUNCAGEM DA EXPANSÃO DE SONINE¹²⁷

decrecente é uma propriedade dos coeficientes K e não dos próprios momentos estatísticos. De fato, os momentos estatísticos comportam-se de maneira inversa, aumentando seus valores absolutos gradativamente. Daí a necessidade de levar em consideração a função W .

Na prática, é claro que não é possível reescrever o sistema infinito dado pelo conjunto das equações 2.40 com o novo conjunto de variáveis y . Por isso, é necessário escolher uma ordem arbitrária nos coeficientes de Sonine para truncar a transformação representada pelas equações 6.12. Uma vez feita esta primeira truncagem, devemos inverter essas equações. Por exemplo, em ordem 5, ou seja, mantendo todos os coeficientes de Sonine até o quinto, obtemos:

$$\begin{aligned} a_2 &= -4y_2, \\ a_3 &= -24y_3, \\ a_4 &= -192y_4 + 48y_2^2, \\ a_5 &= -1920y_5 + 960y_2y_3. \end{aligned} \tag{6.13}$$

Dessa forma, o sistema dinâmico 2.40 passa a ser escrito como:

$$\begin{aligned} -4\frac{d}{dx}y_2 &= \gamma_2 + 4\gamma(-4y_2), \\ -24\frac{d}{dx}y_3 &= \gamma_3 + 6\gamma((-24y_3) - (-4y_2)), \\ -192\frac{d}{dx}y_4 + 96y_2\frac{d}{dx}y_2 &= \gamma_4 + 8\gamma((-192y_4 + 48y_2^2) - (-24y_3)), \\ -1920\frac{d}{dx}y_5 + 960y_3\frac{d}{dx}y_2 + 960y_2\frac{d}{dx}y_3 &= \\ \gamma_5 + 10\gamma((-1920y_5 + 960y_2y_3) - (-192y_4 + 48y_2^2)), \end{aligned} \tag{6.14}$$

onde chamamos atenção para o fato de que as integrais colisionais γ e γ_i são escritas originalmente em função dos coeficientes de Sonine, mas no novo sistema 6.14 elas passam a ser escritas em conformidade com a transformação 6.13, em função das variáveis y . Além disso, não há aqui eliminação de quaisquer termos não-lineares, uma vez que não há nenhuma suposição, até esse ponto, a respeito de uma hierarquia de grandezas dos valores das variáveis independentes. Isso diferencia essa primeira truncagem daquela proposta por Huthmann e colaboradores. Como estamos interessados no cálculo dos pontos fixos do sistema, é suficiente considerar, a partir de agora, o sistema de equações algébricas em que os lados esquerdos das equações 6.14 são nulos.

Contudo, não há nenhuma vantagem adicional em se resolver o sistema de equações algébricas 6.14, em lugar do sistema original, e em seguida fazer a transformação inversa para obter o valor dos coeficientes de Sonine estacionários.

É claro que isso não diferiria em nada do procedimento de simplesmente resolver o sistema diretamente para os próprios coeficientes. E isso não forneceria resultados substancialmente diferentes daqueles já obtidos no esquema perturbativo original. Para que alguma vantagem essencial seja obtida, uma segunda truncagem é necessária. Para implementá-la, basta tirar vantagem da conjectura, suficientemente confirmada por dados de simulação, de que existe uma hierarquia bem definida entre os valores das variáveis y . Por isso, se o sistema infinito foi truncado uma primeira vez, por exemplo, em ordem 5, a segunda truncagem exige impor $y_5 = 0$. Isso conduz a um sistema algébrico para as variáveis y_2 , y_3 e y_4 . Uma vez solucionado, pode-se proceder à inversão e, desse modo, obter os coeficientes de Sonine correspondentes, ou seja, a_2 , a_3 e a_4 . Veremos agora que esse novo esquema dá resultados diferentes e, em geral, melhores que o esquema original, para sistemas mediana e altamente inelásticos.

Para manter a sistemática da apresentação, primeiramente vamos mostrar o resultado do novo esquema de truncagem em ordem 3. Isso significa que consideraremos primeiramente o conjunto das equações dinâmicas truncadas até o quarto coeficiente de Sonine a_4 (as três primeiras equações do sistema 6.14). Em seguida, fazemos a segunda truncagem impondo $y_4 = 0$ no sistema transformado, e resolvemos o sistema para y_2 e y_3 . Por fim, fazemos a transformação inversa e obtemos a estimativa analítica dos coeficientes a_2 e a_3 . Os resultados para o coeficiente a_2 são mostrados na figura 6.17.

Nessa ordem, a curva obtida no novo esquema aproximou melhor a curva da simulação do que a do esquema original, ainda que estejam ambos ainda distantes até mesmo da curva analítica obtida por Ernst e Brito (ordem $O(\lambda^2)$, no esquema original). Como haveria de se esperar, o novo esquema não fornece resultados melhores que o esquema original na região de baixa inelasticidade. Entretanto, vemos que aí ambos já apresentam uma excelente acurácia.

Na figura 6.18, apresentamos as curvas correspondentes ao coeficiente a_3 . Novamente, vemos uma melhora significativa das estimativas analíticas na região $\alpha < 0,6$.

Daremos um passo adiante e truncaremos o sistema infinito em ordem 5. Isso significa considerar o sistema 6.14 completo. A segunda truncagem impõe $y_5 = 0$. Exatamente como delineado acima, resolvemos o sistema para y_2 , y_3 e y_4 . Fazemos a transformação inversa e obtemos a estimativa analítica dos coeficientes a_2 , a_3 e a_4 . Os resultados para o coeficiente a_2 são mostrados na figura 6.19, juntamente com a curva obtida em ordem $O(\lambda^4)$, no esquema de truncagem original.

A figura 6.19 apresenta um resultado notável e inédito. A curva proveniente do novo esquema de truncagem possui uma acurácia muito superior àquelas obtidas por meio do esquema perturbativo de Huthmann e colaboradores, na região de alta inelasticidade. Além disso, pela primeira vez ao longo deste trabalho, uma curva mais acurada do que a curva calculada por Ernst e Brito foi obtida para os valores do coeficiente a_2 , ao menos para o intervalo $\alpha \leq 0,3$. Como vimos da discussão apresentada nas seções precedentes, a curva de Ernst e Brito, que em última análise nada mais é que a curva de a_2 calculada em aproximação linear pelo esquema de truncagem de Huthmann e colaboradores

6.5. NOVO ESQUEMA DE TRUNCAGEM DA EXPANSÃO DE SONINE129

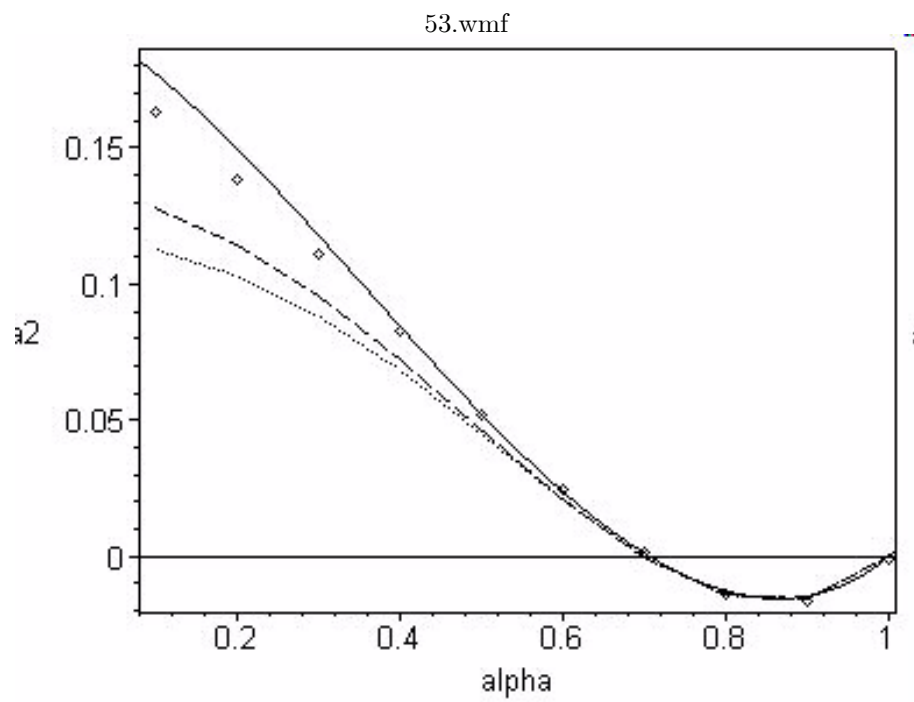


Figura 6.17: Coeficiente a_2 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^2)$ (linha contínua) e em ordem $O(\lambda^3)$ (linha pontilhada), no esquema de truncagem original. A curva tracejada é o resultado do cálculo no novo esquema.

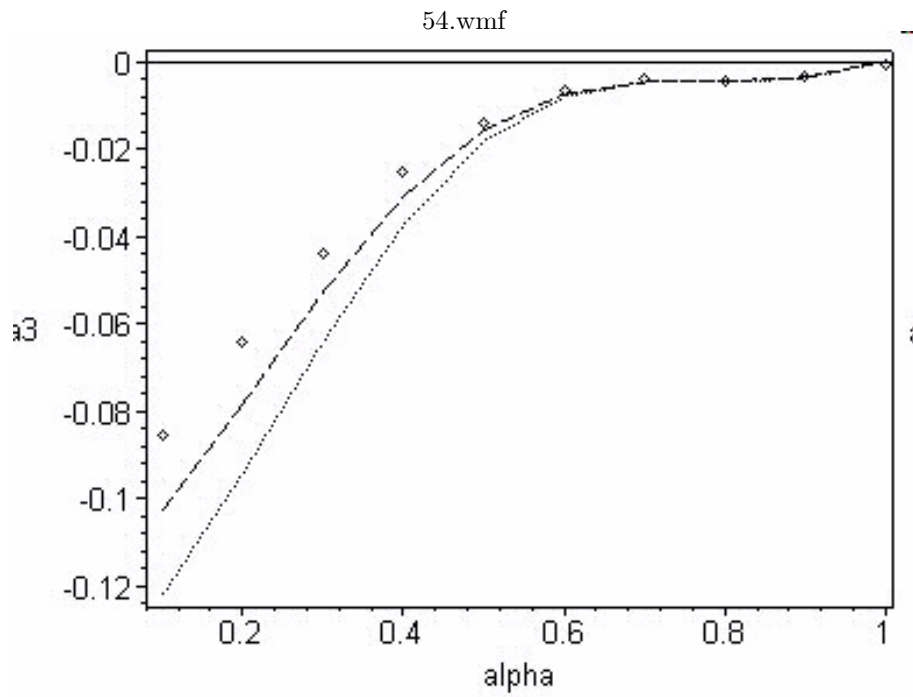


Figura 6.18: Coeficiente a_3 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^3)$ (linha pontilhada), no esquema de truncagem original. A curva tracejada é o resultado do cálculo no novo esquema..

6.5. NOVO ESQUEMA DE TRUNCAGEM DA EXPANSÃO DE SONINE131

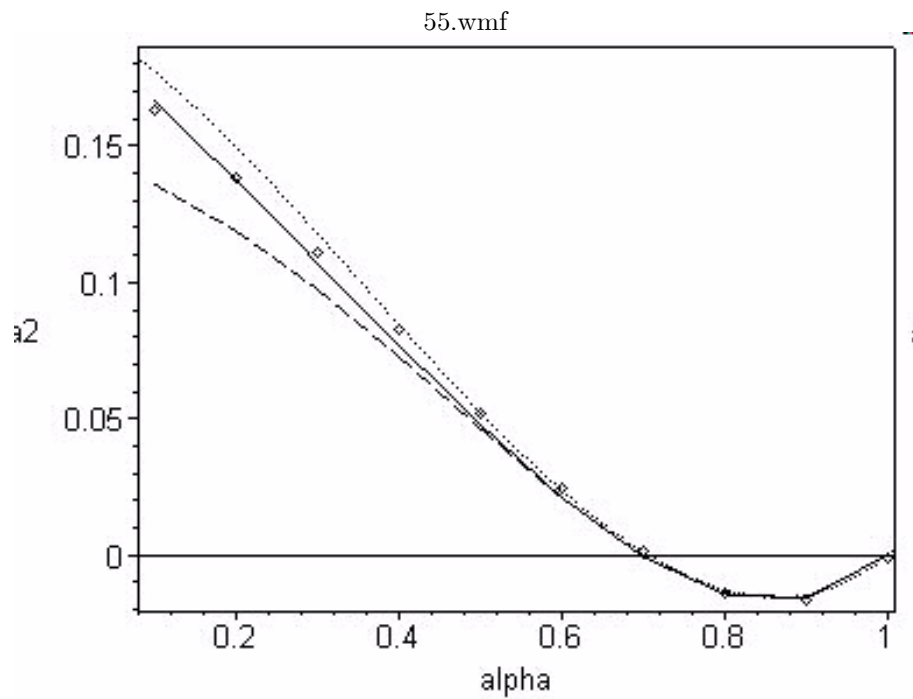


Figura 6.19: Coeficiente a_2 obtido em simulação (pontos), calculados em ordem $O(\lambda^4)$ (linha tracejada), em ordem $O(\lambda^2)$ (linha pontilhada), no esquema de truncagem original, e calculado com o novo esquema em ordem 5 (linha contínua).

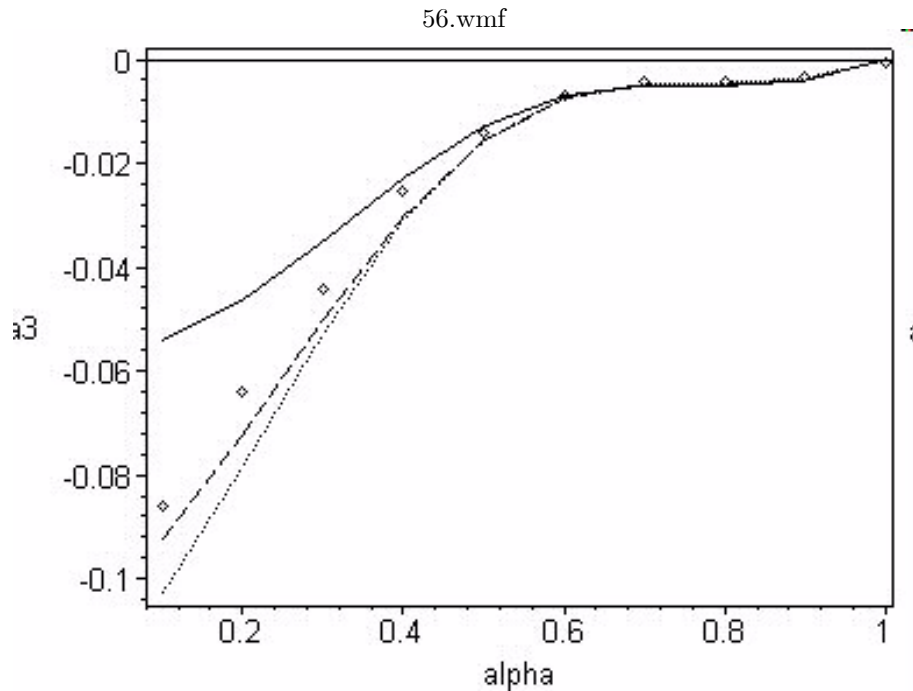


Figura 6.20: Coeficiente a_3 obtido em simulação (pontos), calculado em ordem $O(\lambda^4)$ (linha tracejada), no esquema de truncagem original, e calculado em ordens 4 (linha pontilhada) e 5 (linha sólida), no novo esquema.

em ordem $O(\lambda^2)$, apresenta uma acurácia, no intervalo de altas inelasticidades, que todas as demais ordens aproximativas não possuem. Este fato é surpreendente, mas demonstra que, mesmo quando não há uma hierarquia de grandezas bem definida entre os coeficientes, certamente o coeficiente a_2 é em geral mais relevante que todos os demais. Se atentarmos para a tabela 6.1, veremos que essa regra é verdadeira quase sempre, mas passa a ser menos respeitada exatamente para valores $\alpha \leq 0,3$. Esse é o motivo pelo qual o novo esquema de truncagem passa a ter resultados sensivelmente melhores nessa região.

Os resultados para o coeficiente a_3 são mostrados na figura 6.20, juntamente com a curva obtida em ordem $O(\lambda^4)$, no esquema de truncagem original, e em ordem 4, no novo esquema.

A figura 6.20 põe em evidência qual é a dificuldade associada ao novo esquema de truncagem. Por ela, podemos ver que a ordem seguinte não somente não melhora como também torna piores os resultados para o coeficiente a_3 . Nenhuma dessas ordens chega a ser melhor que a estimativa em ordem $O(\lambda^4)$, obtida pelo esquema de Huthmann e colaboradores.

Para uma possível explicação da falha do novo esquema, não devemos esque-

cer que ele é um processo de truncagem em dois passos. A primeira truncagem é um procedimento altamente artificial que introduz erros, necessariamente. Esse primeiro passo só é feito por motivos práticos e não teóricos, em razão da impossibilidade de se tratar com o sistema infinito. Se pudéssemos realizar a transformação para as novas variáveis hierarquizadas no sistema infinito, realizando em seguida uma única truncagem, não haveria motivos, se a conjectura sustentada por nós for válida, para que as aproximações sucessivas não fossem cada vez melhores. Portanto, achamos que, se fizermos a primeira truncagem no sistema original longe o suficiente, os erros introduzidos no cálculo dos primeiros coeficientes diminuirão gradativa e necessariamente. Isso já não é possível no esquema de Huthmann e colaboradores. Infelizmente, ainda não foi possível calcular as integrais colisionais de ordem superior a 5 na expansão em polinômios de Sonine. As exigências computacionais e o tempo de cálculo, a partir desse ponto, passam a ser muito grandes (ver Capítulo 7).

Finalmente, na figura 6.21 são mostrados os resultados para o coeficiente a_4 , juntamente com a curva obtida em ordem $O(\lambda^4)$, no esquema de truncagem original. Pode-se ver que o novo esquema fornece resultados melhores que o original.

6.6 Caudas de Alta Energia

Uma vez mais, vamos tirar vantagem do fato de termos identificado os regimes de densidade mais adequados para efetuar medições precisas dos coeficientes da expansão de Sonine e, a partir daí, estudar o comportamento das taxas de decaimento exponencial associadas às chamadas caudas de energia superpopuladas para o HCS. Se recapitularmos a Seção 5 do Capítulo 2, veremos que a solução assintótica do HCS no limite de grandes velocidades se escreve como:

$$\tilde{\rho}(c) \sim A \exp(-Bc), \quad (6.15)$$

com A uma constante de integração indeterminada. O valor do coeficiente da exponencial, calculado com a expansão em polinômios de Sonine truncada em ordem $O(\lambda^2)$, para sistemas tridimensionais, é dado por:

$$\begin{aligned} B(\alpha) &= \left\{ \frac{\Gamma(\frac{1}{2}(d+1))}{\sqrt{2}\Gamma(\frac{d}{2})} (1 - \alpha^2) \left[1 + \frac{3}{16} a_2 \right] \right\}^{-1} \\ &= \frac{3\sqrt{2}\pi}{8} \frac{-81+17\alpha-30\alpha^2+30\alpha^3}{(\alpha^2-1)(6\alpha^3-6\alpha^2+5\alpha-21)}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Nosso objetivo nesta seção é verificar a validade desta fórmula. Para isso, usamos como teste dois sistemas caracterizados pelos seguintes parâmetros: $N = 256$, $\delta = 1, 4$ e $\alpha = 0, 1$ e $0, 5$, submetidos a condições de contorno periódicas. Nas figuras 6.22 e 6.23, nós mostramos a função $\tilde{\rho}(c)$ correspondentes a estes dois sistemas. A distribuição reduzida é calculada dos dados de simulação em dois estágios: primeiramente, usa-se a equação 4.26 para calcular a função característica empírica e, em seguida, calcula-se a transformada de Fourier inversa.

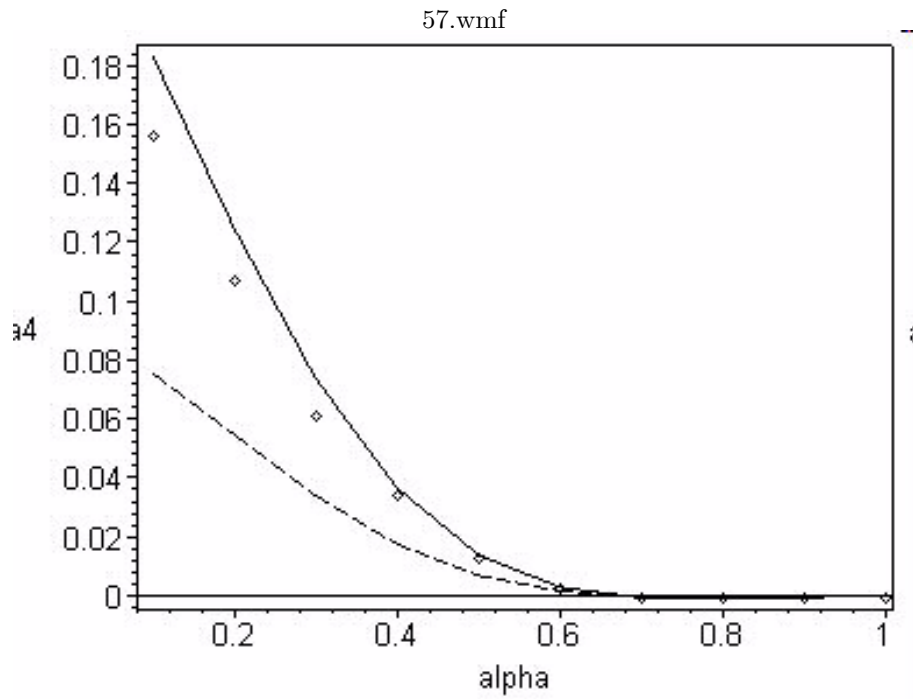


Figura 6.21: Coeficiente a_4 obtido em simulação (pontos) e calculado em ordem $O(\lambda^4)$ (linha tracejada), no esquema de truncagem original, e calculado em ordem 5 (linha sólida), no novo esquema.

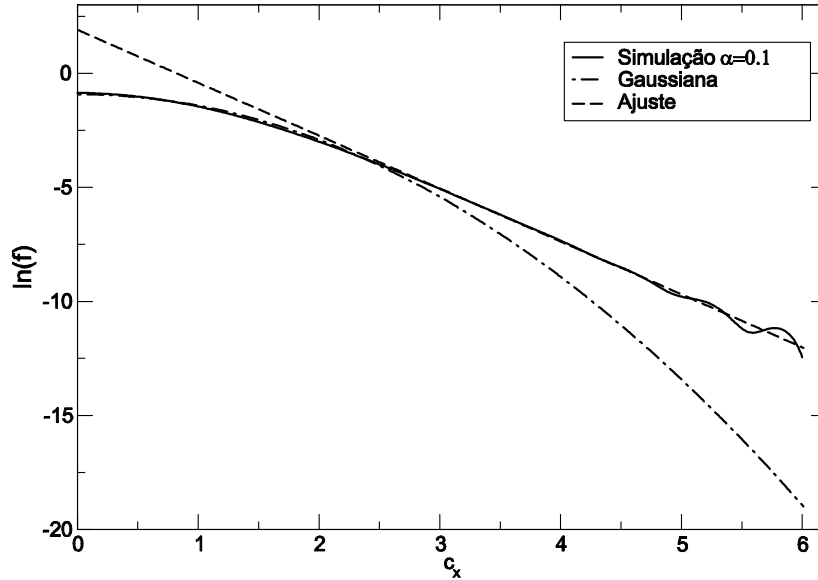


Figura 6.22: Distribuição reduzida $\tilde{\rho}(c)$ (linha contínua) em gráfico log-lin para sistema com $N = 256$, $\alpha = 0,1$ e $\delta = 1,4$, em condições de contorno periódicas. A linha em ponto e traço corresponde à distribuição Gaussiana. A linha tracejada corresponde ao melhor ajuste linear realizado no intervalo $3 < c < 6$.

Para o sistema com $\alpha = 0,1$, obtivemos $B \simeq 2,31$, e para o sistema com $\alpha = 0,5$, obtivemos $B \simeq 3,11$. Esses valores correspondem à inclinação da reta de melhor ajuste realizado no intervalo $3 < c < 6$. Os valores preditos pela equação 6.16 são, respectivamente, $B \simeq 3,67$ e $B \simeq 4,96$.

Os resultados são bastante discrepantes. A razão da discrepância não está no cálculo analítico do coeficiente a_2 . Se usarmos os valores medidos do coeficiente e não seus valores calculados, veremos que a fórmula 6.16 continua fornecendo valores bastante incorretos. Poderíamos pensar que a fórmula está incorreta e suspeitar que a aproximação analítica com base na truncagem em ordem $O(\lambda^2)$ nos polinômios de Sonine não é suficiente para fornecer os valores corretos das caudas exponenciais. Se isso fosse verdade, então o acréscimo de mais coeficientes no cálculo da integral colisional μ_2 (2.52) deveria ser suficiente para corrigir a fórmula 6.16. Entretanto, isso também não acontece.

Nossa sugestão é que, para valores do coeficiente de restituição α muito

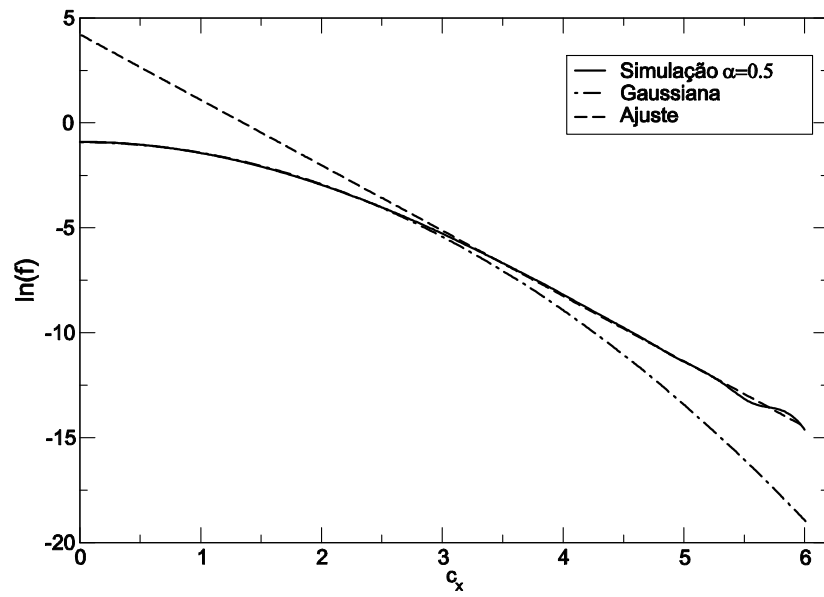


Figura 6.23: Distribuição reduzida $\tilde{\rho}(c)$ (linha contínua) em gráfico log-lin para sistema com $N = 256$, $\alpha = 0,5$ e $\delta = 1,4$, em condições de contorno periódicas. A linha em ponto e traço corresponde à distribuição Gaussiana. A linha tracejada corresponde ao melhor ajuste linear realizado no intervalo $3 < c < 6$.

baixos, a passagem da equação 2.50:

$$\frac{\mu_2}{3} \left(3 + c \frac{\partial}{\partial c} \right) \tilde{\rho}(c) = -\beta_1 c \tilde{\rho}(c) \quad (6.17)$$

para a equação 2.51:

$$\tilde{\rho}(c) \sim A \exp \left(-\frac{3\beta_1}{\mu_2} c \right) \quad (6.18)$$

não se justifica. Ela se baseia na suposição de que o termo μ_2 do lado esquerdo da equação 6.17 pode ser negligenciado quando $c \gg 1$. Entretanto, o que se pode verificar pelas figuras 6.22 e 6.23 é que, quanto maior o grau de inelasticidade, mais cedo surge a cauda exponencial. Para $\alpha = 0,5$, a cauda surge com $c \simeq 3,0$ e, para $\alpha = 0,1$, a cauda surge com $c \simeq 2,5$. Entretanto, para $\alpha = 0,1$, $\mu_2 \simeq 2,56$ e, para $\alpha = 0,5$, $\mu_2 \simeq 1,90$. Claramente, μ_2 não pode ser desprezado, nessa região.

A conclusão é que a derivação heurística apresentada por Esipov e Pöschel [23] - e que reproduzimos na Seção 5 do Capítulo 2 - só pode ser aproximadamente válida para sistemas quasi-elásticos. Se as caudas exponenciais surgem para todo o intervalo de inelasticidade considerado, o mecanismo associado a elas, nos casos mediana e altamente inelástico, deve ser diferente daquele considerado pelos autores citados.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

O objetivo central deste trabalho foi apresentar um estudo suficientemente detalhado das funções de distribuição de velocidades de gases granulares no regime de esfriamento homogêneo (HCS). Ao contrário de nos propormos a uma discussão dos aspectos exclusivamente analíticos relacionados a esse problema, optamos por imprimir-lhe um caráter essencialmente metodológico. Por esse motivo, é importante tornar explícitos os três ingredientes básicos que foram sistematicamente empregados por nós e que, tomados em conjunto, tornaram o presente estudo inédito: (i) uso de simulações computacionais; (ii) introdução de uma nova metodologia de análise estatística e (iii) utilização de sistemas com baixo número de partículas.

Obviamente, simulações computacionais são a principal ferramenta utilizada para o estudo “fenomenológico” da física de sistemas granulares e, em particular, de gases granulares. Entretanto, realizar simulações não é trivial. Uma série de dificuldades associadas à demanda computacional, à otimização de rotinas, à escolha de parâmetros, à construção de algoritmos, à implementação de modelos e à obtenção de precisão suficiente, para citar uns poucos exemplos, em geral tornam o uso de simulações uma tarefa delicada e trabalhosa. Menos trivial ainda é a tarefa de interpretar os resultados provenientes de uma simulação. Na maioria das vezes, o interesse principal incide sobre propriedades médias do sistema considerado. Por isso, é preciso prestar atenção no correto e eficiente tratamento estatístico dos dados de saída. É preciso também estar atento e ciente de que em várias situações os dados de saída podem estar indevidamente condicionados por imposições feitas sobre dados e condições de entrada.

Tendo isso tudo em vista, nos dispusemos a realizar o estudo computacional do modelo matemático de gases granulares compostos por esferas rígidas e lisas, com interações mediadas por um coeficiente de restituição normal constante. Para tanto, empregamos o método “event driven” de Dinâmica Molecular. Para implementar a análise estatística, introduzimos o método da função característica empírica. Associado a ele, introduzimos o uso de uma função criada por Lévy e denominada nesse trabalho de função W . A precisão dessa função na caracterização das distribuições foi fundamental para a obtenção dos nossos

principais resultados.

Todos os sistemas por nós simulados eram caracterizados por possuírem um número bastante reduzido de partículas. Sabe-se que esses sistemas apresentam características peculiares. Por isso, investigamos tais características associadas às suas distribuições de velocidade. Conseguir precisão estatística com poucas partículas é sempre uma tarefa complicada. Desse modo, uma primeira preocupação era manter o sistema estável para que uma média ao longo do tempo pudesse ser realizada e a deficiência estatística pudesse ser suprida. Uma vez que o HCS é em geral instável, precisamos identificar em que condições a estabilidade poderia ser alcançada. Essas condições envolvem a escolha de um valor mínimo para o livre caminho médio ou, em nossa terminologia, de um valor máximo para o parâmetro δ . Verificamos, posteriormente, que esses valores confirmam com razoável acurácia as previsões da análise de estabilidade linear com base nas equações da hidrodinâmica granular.

Nossa primeira constatação relacionada às distribuições assintóticas foi a de que os sistemas podem ser classificados em classes definidas pela conjunção de quatro fatores: o coeficiente de restituição, o número de partículas, o livre caminho médio e a condição de contorno imposta. Assim, cada combinação desses quatro fatores conduz o sistema para uma distribuição assintótica bem definida e distinta das demais. Na identificação dessas distribuições assintóticas distintas é que pudemos constatar a utilidade da função W como ferramenta estatística dotada de enorme precisão.

Essa múltipla dependência das distribuições assintóticas não pode ser compatível com uma descrição cinética única (com exceção, é claro, da dependência no coeficiente de restituição). Por esse motivo, verificamos o comportamento dos sistemas no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Fundamental para a consistência do procedimento é manter o valor de δ constante durante a implementação do limite. Constatamos que, para sistemas submetidos a condições de contorno reflexivas, a convergência para um estado limite único é relativamente rápida. Nessas condições, a distribuição assintótica do sistema passa a ser independente do valor do livre caminho médio e do número de partículas. Além disso, o parâmetro δ desempenha um papel interessante, pois, a depender de seu valor, o sistema pode estar inicialmente muito distante do estado limite. Isso significa que deve existir um valor ótimo para o livre caminho médio e que possibilita a convergência mais rápida para o estado limite. No caso de contornos reflexivos, esse valor foi identificado como sendo em torno de $\delta \simeq 0,7$.

No caso de condições de contorno periódicas, ao contrário, a convergência é extremamente lenta. Esse resultado é de grande importância, pois coloca em dúvida a validade de simulações que usam esse tipo de condições de contorno. A depender do valor utilizado para o parâmetro δ , é possível que muitas simulações realizadas correntemente na literatura estejam fornecendo distribuições ainda distantes da distribuição limite, mesmo que o número de partículas seja bastante elevado. Nesse sentido, simulações com um número pequeno de partículas, com contornos reflexivos, podem ser usadas para calibrar simulações com um número bem maior de partículas, em condições de contorno periódicas. Com base nessa idéia, por exemplo, pudemos identificar que o valor ótimo do parâmetro δ asso-

ciado a contornos periódicos situa-se em torno de $\delta \simeq 1,4$.

O sucesso da utilização do método da função característica empírica e da função W no estudo de distribuições assintóticas para o modelo de esferas rígidas abre várias perspectivas de novas aplicações. Em primeiro lugar, podemos empregar essas ferramentas de análise para caracterizar distribuições associadas a outros modelos colisionais. Em vista, temos inicialmente o modelo viscoelástico estudado por Brilliantov e Pöschel [31]. Nesse modelo, o coeficiente de restituição passa a depender da velocidade relativa das partículas, o que o torna bem mais realístico que o modelo de esferas rígidas. Já sabemos que, no caso do modelo viscoelástico, as distribuições assintóticas não são mais estacionárias. Isso colocará mais dificuldades para obtenção de qualidade estatística com sistemas de poucas partículas, mas acreditamos que o uso da função W poderá ainda assim ser de grande valia. Da mesma forma, estamos interessados em aplicar essas ferramentas no estudo de esferas rugosas [24, 32, 33] e no estudo de esferas macias e dotadas de potenciais de curto alcance.

Uma extensão direta de todos os resultados de simulação e metodológicos aqui obtidos é sua aplicação para o estudo do estado estacionário de não-equilíbrio (NESS). Além disso, queremos investigar o comportamento dos vários sistemas nos diferentes modelos e regimes de evolução quando suas condições iniciais não são mais espacialmente homogêneas. Não sabemos se nesse caso um estado assintótico estacionário homogêneo será alcançado se impusermos as mesmas condições para a estabilidade, condicionadas ao valor do parâmetro δ . Por fim, estudos realizados por Xiaobo e colaboradores [20], usando Dinâmica Molecular, parecem constatar que sistemas no HCS instáveis tendem à distribuições Gaussianas no limite ultra-assintótico (tempos extremamente longos). Queremos verificar a ocorrência deste fenômeno para sistemas com poucas partículas.

No Capítulo 6, a preocupação básica era a de caracterizar as distribuições assintóticas com base em medidas estatísticas precisas. A forma analítica da distribuição assintótica do HCS é, no entanto, um objetivo bem mais ambicioso a ser alcançado. Entretanto, pouco se pode dizer a respeito da validade de resultados analíticos se estes não estiverem suficientemente suportados por dados de observação confiáveis. No caso em questão, "dados de observação" são, obviamente, resultados de simulação. A literatura carece de bons resultados de simulação em Dinâmica Molecular para o cálculo, por exemplo, dos momentos estatísticos e dos coeficientes de Sonine da distribuição. Por esse motivo, empregamos a experiência adquirida nas medidas de distribuição através da função W para efetuar medidas dos momentos estatísticos e dos coeficientes de Sonine e, desse modo, prover elementos para fazer uma crítica dos resultados analíticos estabelecidos até então.

A literatura [17, 31] estabeleceu um método de truncagem da expansão da distribuição em polinômios de Sonine que dá resultados muito bons no intervalo de definição do coeficiente de restituição correspondente a sistemas pouco e moderadamente inelásticos ($\alpha \geq 0,6$). Entretanto, o esquema falha para sistemas altamente inelásticos. Ainda que essa falha já tivesse sido prevista pelos próprios autores, estes não dispunham dos dados de simulação que permitissem tirar tais conclusões de maneira definitiva. Nossos resultados de simulação

para os coeficientes de Sonine, até o quinto, são as medidas mais precisas realizadas até agora em Dinâmica Molecular, e permitiram confirmar todas essas expectativas.

A precisão desses resultados permitiu fazer uma boa análise qualitativa e quantitativa. Em particular, verificamos que o procedimento de truncagem introduzido por Huthmann e colaboradores não apresenta a consistência de um processo perturbativo para o regime altamente inelástico. Essa constatação havia lançado dúvidas sobre a validade de uma expansão em polinômios de Sonine em torno de uma distribuição Gaussiana, nessa região de inelasticidade. Uma vez mais, utilizamos a função W de Lévy para mostrar que essa expansão é válida, no sentido de que apresenta convergência.

O último resultado permitiu identificar um novo procedimento de truncagem, desta vez baseado em uma transformação de coordenadas no sistema de equações diferenciais infinito que gera a evolução acoplada dos coeficientes de Sonine. Neste novo procedimento, as novas variáveis independentes aparecem hierarquizadas segundo seus valores absolutos, o que dá consistência perturbativa ao processo. Com base nesse novo esquema, fomos capazes de calcular com excelente acurácia os valores do segundo coeficiente em todo o intervalo de definição do coeficiente de restituição.

Infelizmente, o novo procedimento de truncagem exige que o sistema infinito sofra truncagem inicial em uma ordem suficientemente alta. Ainda não fomos capazes de montar o sistema em ordem superior à correspondente ao quinto coeficiente de Sonine. Por essa razão, ainda não foi possível obter resultados para os terceiro e quarto coeficientes com a mesma qualidade que os obtidos para o segundo. Ainda assim, os resultados obtidos até então parecem indicar que o procedimento é essencialmente correto e pode fornecer bons resultados.

Portanto, temos um objetivo para um futuro imediato. Queremos resolver as integrais colisionais associadas à expansão de Sonine truncada em uma ordem suficientemente alta, por exemplo, a_8 . Essa é uma tarefa cuja demanda computacional será, sem dúvida, muito grande. Para isso, precisaremos contar com máquinas mais poderosas do que as que usamos até então. O motivo disso é a grande demanda por memória de processos longos e volumosos efetuados no MAPLE. Uma alternativa a ser estudada é fragmentar o processo de cálculo de modo que em cada passo a memória necessária seja bem menor. Uma vez alcançado este objetivo, esperamos que o novo esquema de truncagem introduzido por nós demonstre completamente seu sucesso como um processo perturbativo, cuja consistência seja demonstrada através da convergência das aproximações sucessivas, em todo o intervalo de inelasticidades possível.

Por fim, valemo-nos da precisão alcançada na caracterização das distribuições para estudar o comportamento das caudas exponenciais de alta energia. Em particular, concluímos que a aproximação em segunda ordem na expansão de Sonine não é suficiente para estimar corretamente os valores dos expoentes destas caudas exponenciais. Achamos que a derivação heurística apresentada por Esipov e Pöschel [23] só pode ser aproximadamente válida para sistemas quasi-elásticos. Isso significa que o mecanismo associado a elas, nos casos mediana e altamente inelástico, deve ser diferente daquele considerado pelos autores citados.

Aqui, novamente uma perspectiva de trabalho se apresenta. Iremos usar a precisão que caracteriza o uso da função W para propor um novo método de ajuste. A idéia é ajustar uma distribuição analítica constituída por centro Gaussiano e cauda exponencial à função W proveniente das simulações. Com isso, esperamos obter não somente uma estimativa mais acurada do ponto de início das caudas exponenciais, como também dos expoentes a elas associados.

Apêndice A

Cálculo das Integrais Colisionais μ_p

As integrais colisionais μ_p são definidas pela expressão:

$$\mu_p \equiv - \int d\mathbf{c}_1 c_1^p \tilde{I}(\tilde{\rho}, \tilde{\rho}), \quad (\text{A.1})$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\tilde{\rho}, \tilde{\rho}) \equiv & \int d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \\ & \times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1^{**}) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2^{**}) - \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Para calcular essas expressões, parte-se da equação de Boltzmann inelástica e homogênea:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{v}_1, t) = & a^2 \int d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \\ & \times \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \rho(\mathbf{v}_1^{**}, t) \rho(\mathbf{v}_2^{**}, t) - \rho(\mathbf{v}_1, t) \rho(\mathbf{v}_2, t) \right\} \equiv a^2 I(\rho, \rho). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Multiplicando esta equação por uma função $g(\mathbf{v}_1)$ e integrando em \mathbf{v}_1 , obtém-se:

$$\frac{d}{dt} \langle g \rangle = a^2 \int d\mathbf{v}_1 g(\mathbf{v}_1) I(\rho, \rho) \equiv \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} & \equiv \frac{a^2}{2} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \times \\ & \times \rho(\mathbf{v}_1, t) \rho(\mathbf{v}_2, t) \Delta[g(\mathbf{v}_1) + g(\mathbf{v}_2)], \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde $\Delta g(\mathbf{v}_i) = g(\mathbf{v}_i^*) - g(\mathbf{v}_i)$. Com o uso da equação A.4, fazendo $g(\mathbf{v}_i) = c_i^p$, assumindo a forma escalada para a solução dada por:

$$\rho(\mathbf{v}, t) = \frac{n}{v_0^3(t)} \tilde{\rho}(\mathbf{c}(t)) \quad (\text{A.6})$$

e a expansão em polinômios de Sonine para a distribuição reduzida:

$$\tilde{\rho}(\mathbf{c}(t)) = \phi(c) \left\{ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i S_i(c^2) \right\}, \quad (\text{A.7})$$

a integral A.1 passa a ser escrita como:

$$\begin{aligned} \mu_p &= -\frac{1}{2} \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \phi(c_1) \phi(c_2) \\ &\times \left\{ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i S_i(c_1^2) \right\} \left\{ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} a_i S_i(c_2^2) \right\} \\ &\times \Delta(c_1^p + c_2^p). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Para calcular essas integrais é necessário truncar a expansão infinita em alguma ordem. Uma vez realizada a truncagem, é conveniente introduzir as variáveis de centro de massa \mathbf{C} e velocidade relativa \mathbf{c}_{12} tais que:

$$\mathbf{c}_1 = \mathbf{C} + \frac{1}{2} \mathbf{c}_{12}, \quad \mathbf{c}_2 = \mathbf{C} - \frac{1}{2} \mathbf{c}_{12}. \quad (\text{A.9})$$

O Jacobiano dessa transformação é um e o produto $\phi(c_1)\phi(c_2)$ transforma-se como:

$$\begin{aligned} \phi(c_1)\phi(c_2) &\rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}c_{12}^2\right) \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-2C^2) \equiv \\ &\equiv \phi(\mathbf{c}_{12})\phi(\mathbf{C}). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Da mesma forma, todas as funções $S_i(c_i^2)$ e o termo $\Delta(c_1^p + c_2^p)$ devem ser reescritas nas novas variáveis. Vamos ilustrar calculando o termo $\Delta(c_1^2 + c_2^2) = c_1^{*2} + c_2^{*2} - c_1^2 - c_2^2$. Da equação 2.1, temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1^{*2} &= \mathbf{c}_1^2 - (1 + \alpha)(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})(\mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{e}_{ij}) + \frac{1}{4}(1 + \alpha)^2(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})^2, \\ \mathbf{c}_2^{*2} &= \mathbf{c}_2^2 + (1 + \alpha)(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})(\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{e}_{ij}) + \frac{1}{4}(1 + \alpha)^2(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})^2. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Portanto:

$$\Delta (c_1^2 + c_2^2) = -(1 + \alpha)(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})(\mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{e}_{ij}) + \quad (\text{A.12})$$

$$+ (1 + \alpha)(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})(\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{e}_{ij}) + \quad (\text{A.13})$$

$$+ \frac{1}{2}(1 + \alpha)^2(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})^2,$$

ou

$$\Delta (c_1^2 + c_2^2) = \left\{ -(1 + \alpha) + \frac{1}{2}(1 + \alpha)^2 \right\} (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})^2 = \quad (\text{A.14})$$

$$= -\frac{1}{2}(1 - \alpha^2)(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{c}_{12})^2. \quad (\text{A.15})$$

Uma vez realizada a mudança de variáveis, as integrais colisionais μ_p passam a ser escritas como somas de termos do tipo $A(a_i, \alpha)J_{k,l,m,n,p,q}$, onde os coeficientes A são monômios envolvendo combinações diversas dos coeficientes da expansão de Sonine a_i e do coeficiente de restituição α , e $J_{k,l,m,n,p,q}$ são as integrais básicas dadas por:

$$J_{k,l,m,n,p,q} = \int d\mathbf{c}_{12} d\mathbf{C} \int d\mathbf{e}_{12} \Theta(-\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \phi(c_{12}) \phi(C) \times \quad (\text{A.16})$$

$$\times |\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}|^{1+q} C^k c_{12}^l (\mathbf{C} \cdot \mathbf{c}_{12})^m (\mathbf{C} \cdot \mathbf{e}_{12})^n (\mathbf{c}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12})^p.$$

As integrais básicas $J_{k,l,m,n,p,q}$ podem ser calculadas analiticamente para todos os valores inteiros dos índices k, l, m, n e p . Pode-se verificar diretamente que, para o modelo colisional com coeficiente de restituição constante, $q = 0$. É possível encontrar fórmulas fechadas para essas integrais básicas para cada valor inteiro de n . Essas fórmulas para $n = 0, 1$ e 2 são fornecidas no apêndice B da referência [31] (nesse artigo, há um erro na fórmula para $n = 2$). Porém, a obtenção dessas fórmulas é geralmente um procedimento extremamente longo e tedioso. Alguns truques de integração podem ser usados para diminuir o trabalho total a ser efetuado, como os descritos nas referências [31, 36], mas eles se tornam rapidamente complicados em demasia. Nesse trabalho, precisamos de integrais básicas com $n = 0, 1, 2, 3$ e 4 , já que expandimos a distribuição até o quinto coeficiente de Sonine. Se quisermos incluir o sexto coeficiente de Sonine, precisaremos ainda de $n = 5$ e 6 , e assim sucessivamente. Diante disso, é mais prático resolver as integrais uma a uma, através do pacote de computação algébrica MAPLE.

O procedimento como um todo é bastante detalhado e possui custo computacional elevado. A cada coeficiente de Sonine incluído, o número de integrais básicas a serem calculadas aumenta aproximadamente uma ordem de grandeza. Por exemplo, o cálculo mais simples, de μ_2 expandido até o segundo coeficiente, já exige o cômputo de 60 integrais básicas. O cálculo de μ_2 expandido até o quarto coeficiente exige o cômputo de 728 integrais básicas. O cálculo de μ_6 expandido até o terceiro coeficiente exige 3426 integrais. O cômputo de μ_{10} expandido até o quinto coeficiente exige 94.162 integrais.

Apêndice B

Integrais Colisionais γ_l

Para construir o sistema de equações diferenciais 2.40:

$$\dot{a}_l(t) = \omega_0(t)\gamma_l + 2l\gamma\omega_0(t)(a_l - a_{l-1}), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \infty, \quad (\text{B.1})$$

precisa-se das integrais colisionais 2.41:

$$\gamma_l = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2\pi}}{S_3} \frac{1}{\binom{l+\alpha}{l}} \int d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2 \int d\mathbf{e}_{12} (\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{e}_{12}) \times \quad (\text{B.2})$$

$$\times \tilde{\rho}(\mathbf{c}_1) \tilde{\rho}(\mathbf{c}_2) \Delta (S_l(c_1^2) + S_l(c_2^2)). \quad (\text{B.3})$$

Da definição de μ_p (equação A.8), fica óbvio que as integrais γ_l são combinações lineares dos μ_p . Para efeito de referência, relacionamos aqui as expressões das cinco primeiras integrais:

$$\gamma_1 \equiv \gamma = \frac{\sqrt{2\pi}}{3S_3} \mu_2,$$

$$\gamma_2 = \frac{\sqrt{2\pi}}{4\pi} \frac{8}{15} \left\{ -\frac{1}{2} \mu_4 + \frac{5}{2} \mu_2 \right\},$$

$$\gamma_3 = \frac{\sqrt{2\pi}}{4\pi} \frac{16}{35} \left\{ \frac{1}{6} \mu_6 - \frac{7}{4} \mu_4 + \frac{35}{8} \mu_2 \right\},$$

$$\gamma_4 = \frac{\sqrt{2\pi}}{4\pi} \frac{128}{315} \left\{ -\frac{1}{24} \mu_8 + \frac{3}{4} \mu_6 - \frac{63}{16} \mu_4 + \frac{105}{16} \mu_2 \right\},$$

$$\gamma_5 = \frac{\sqrt{2\pi}}{4\pi} \frac{256}{693} \left\{ \frac{1}{120} \mu_{10} - \frac{11}{48} \mu_8 + \frac{33}{16} \mu_6 - \frac{231}{32} \mu_4 + \frac{1155}{128} \mu_2 \right\}. \quad (\text{B.4})$$

Bibliografia

- [1] H. M. Jaeger, S. R. Nagel & R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68** (1996) 1259.
- [2] H. M. Jaeger, S. R. Nagel & R. P. Behringer, *Physics Today* **49** (1996) 32.
- [3] I. Goldhirsch, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35** (2003) 267.
- [4] P. Richard, M. Nicodemi, R. Delannay, P. Ribière & D. Bideau, *Nature Materials* **4** (2005) 121.
- [5] P. Weiss, *Science News* **160** (2001) 309.
- [6] T. Pöschel & S. Luding (Eds.), *Granular Gases*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2001.
- [7] S. McNamara & N. R. Young, *Phys. Fluids A*, **4** (1992) 496.
- [8] S. McNamara & N. R. Young, *Phys. Rev. E*, **50** (1994) R28.
- [9] S. McNamara & N. R. Young, *Phys. Rev. E*, **53** (1996) 5089.
- [10] I. Goldhirsch & G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 1619.
- [11] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero & D. Cubero, *Phys. Rev. E*, **60** (1999) 3150.
- [12] B. J. Alder & T. E. Wainwright, *J. Chem. Phys.* **31** (1959) 459.
- [13] M. P. Allen & D. J. Tildesley, *Computer Simulations of Liquids*, 1997 (Oxford University Press, Oxford).
- [14] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero & D. Cubero, *Phys. Rev. E*, **54** (1996) 3664.
- [15] J. J. Brey, D. Cubero & M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E*, **59** (1999) 1256.
- [16] I. Goldhirsch & M-L. Tan, *Phys. Fluids* **8** (1996) 1752.
- [17] M. Huthmann, J. A. G. Orza & B. Brito, *Granular Matter* **2** (2000) 189.
- [18] H. Nakanishi, *Phys. Rev. E*, **67** (2003) 010301.

- [19] I. Pagonabarraga, E. Trizac, T. P. C. van Noije & M. H. Ernst, Phys. Rev. E, **65** (2001) 011303.
- [20] Xiaobo Nie, Eli Ben-Naim & Shiyi Chen, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 204301.
- [21] I. Goldhirsch, S. H. Noskowitz & O. Bar-Lev, “The Homogeneous Cooling State Revisited”, in *Granular Gas Dynamics*, T. Pöschel & N. Brilliantov Eds. Springer-Verlag (Berlin Heidelberg, 2003).
- [22] P. K. Haff, J. Fluid Mech. **134** (1983) 401.
- [23] S. E. Esipov & T. Pöschel, J. Stat. Phys. **86** (1997) 1385.
- [24] A. Goldshtein & M. Shapiro, J. Fluid Mech. **282** (1995) 75.
- [25] J. J. Brey, F. Moreno & J. W. Dufty, Phys. Rev. E, **54** (1996) 445.
- [26] J. J. Brey, J. W. Dufty & A. Santos, J. Stat. Phys., **87** (1997) 1051.
- [27] T. P. C. van Noije & M. H. Ernst, Granular Matter **1** (1998) 57.
- [28] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim & A. Santos, Phys. Rev. E, **58** (1998) 4638.
- [29] T. P. C. van Noije & M. H. Ernst, “Kinetic Theory of Granular Gases”, in *Granular Gases*, T. Pöschel & S. Luding Eds. Springer Verlag (Berlin Heidelberg, 2001).
- [30] M. H. Ernst & R. Brito, “Asymptotic solutions of the nonlinear Boltzmann equation for dissipative systems”, in *Granular Gas Dynamics*, T. Pöschel & N. Brilliantov Eds. Springer-Verlag (Berlin Heidelberg, 2003).
- [31] N. V. Brilliantov & T. Pöschel, Phys. Rev. E, **61** (2000) 5573.
- [32] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. M. Hertzsch & T. Pöschel, Phys. Rev. E **53** (1996) 5382.
- [33] S. Luding, M. Huthmann, S. McNamara & A. Zippelius, Phys. Rev. E **58** (1998) 3416.
- [34] T. Aspelmeier, G. Giese & A. Zippelius, Phys. Rev. E **57** (1998) 857.
- [35] M. Huthmann, T. Aspelmeier & A. Zippelius, Phys. Rev. E **60** (1999) 654.
- [36] P. Résibois and M. De Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids*, Wiley, New York, 1977.
- [37] N. F. Carnahan & K. E. Starling, J. Chem. Phys. **51** (1969) 635.
- [38] J. J. Brey & M. J. Ruiz-Montero, cond-mat/0307410 v1 (2003).

- [39] J. J. Brey & D. Cubero, “Hydrodynamic Transport Coefficients of Granular Gases”, in *Granular Gases*, T. Pöschel & S. Luding Eds. Springer Verlag (Berlin Heidelberg, 2001).
- [40] J. A. C. Orza, R. Brito, T. P. C. van Noije & M. H. Ernst, *Int. J. Mod. Phys. C* **8** (1997) 953.
- [41] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases* (1994), Eds. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [42] C. Henrique, G. Batrouni & D. Bideau, *Phys. Rev. E*, **63** (2000) 011301.
- [43] Andrey Feuerverger & Roman A. Mureika, *The Annals of Statistics*, **5** (1977) 88.
- [44] Andrey Feuerverger & Philip McDunnough, *J. R. Stat.*, **43** (1981) 20.
- [45] E. Parzen, *Ann. Math. Statist.*, **33** (1962) 1065.
- [46] B. V. Gnedenko, *The Theory of Probability* (1968), Chelsea Publishing Company, NY.
- [47] B. R. James, *Probabilidade: Um Curso em Nível Intermediário* (2002), IMPA, Rio de Janeiro.
- [48] P. Lévy, *C. R. Acad. Sc.*, **174** (1922) 1682 (em D. Dugué, *Oeuvres de Paul Lévy, vol 3, Eléments Aléatoires*, Gauthiers-Villars, Paris, 1976.).
- [49] A. Figueiredo, I. Gléria, R. Matsushita & S. da Silva, *Physica A*, **323** (2003) 601.
- [50] J. F. Lutsko, *Phys. Rev. E*, **63** (2001) 061211.
- [51] M. H. Ernst & R. Brito, *J. Stat. Phys.* **109** (2002) 407.
- [52] A. V. Bobylev & C. Cercignani, *J. Stat. Phys.* **110** (2003) 333.
- [53] A. M. M. Polito, A. Figueiredo, T. M. Rocha Filho, F. V. Prudente & L. S. Costa, ” *The Characteristic Function Method Applied to Molecular Dynamics of Inelastic Granular Gases* ”, aceito para publicação em *Physica A*.