

## 2 Sistema Granular com Alimentação de energia externa

Neste capítulo se estudará o comportamento dinâmico que deve seguir um sistema que recebe energia externa. Devido à dificuldade em o fazer se tomará como modelo uma simulação muito usada para a análise numérica de tais sistemas, o modelo democrático. Neste modelo se assume que o momento de cada partícula se incrementa em um vetor aleatório a cada instante de tempo de maneira independente à evolução do sistema devido às interações entre os próprios grãos.

Usaremos o Hamiltoniano escrito por Schofield e Oppenheim a partir do qual estudaram o comportamento hidrodinâmico dos Sistemas Granulares livres<sup>1</sup>. Seguindo então esse modelo temos que o sistema granular é constituído por  $N$  grãos esféricos idênticos e não rugosos de massa  $m$  os quais por sua vez se compõem de  $M$  átomos cada um de massa  $\mu$ , onde o número  $M \gg 1$ . Os grãos são suficientemente grandes de maneira a se poder considerar os efeitos quânticos desprezíveis. A força que atua sobre as partículas é radial e ao longo do eixo de colisão entre as partículas.

### 2.1 Formulação Canônica

Para poder fazer uma descrição via a formulação canônica definimos dos tipos de coordenadas. O primeiro grupo, constituído de as posições e os momentos dos centros de massa dos grãos, definido abaixo:

$$\mathbf{r}^N \equiv \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\} \quad \text{e} \quad \mathbf{p}^N \equiv \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N\},$$

representará as chamadas variáveis externas do sistema. O sub-índice  $j = 1, \dots, N$  representa a cada grão do sistema enquanto que o super-índice  $N$  representa o conjunto destas variáveis. Com esta notação pode-se escrever

$$\mathbf{r}^N \cdot \mathbf{r}^N = \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \quad \text{e} \quad \mathbf{p}^N \cdot \mathbf{p}^N = \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i.$$

O segundo grupo, constituído pelos graus de liberdade microscópicos, ou seja,

as coordenadas atômicas  $\xi^{NM}$  e os momentos atômicos  $\pi^{NM}$  associados a cada átomo de cada grão:

$$\xi^{NM} = \{\xi_{ij}\}, \quad \text{e} \quad \pi^{NM} = \{\pi_{ij}\}$$

onde  $i = 1, \dots, N$  e  $j = 1, \dots, M$ , representa as chamadas variáveis internas do sistema. Os sub-índices  $i$  correspondem ao grão respectivo e os sub-índices  $j$  correspondem a cada átomo dentro do grão. Com esta notação pode-se fazer

$$\xi^{NM} \cdot \xi^{NM} = \sum_{ij}^{N,M} \xi_{ij} \cdot \xi_{ij} \quad \text{e} \quad \pi^{NM} \cdot \pi^{NM} = \sum_{ij}^{N,M} \pi_{ij} \cdot \pi_{ij}$$

As posições e os momentos internos de cada grão se medem em relação ao seu centro de massa, por este motivo estas variáveis satisfazem

$$\sum_{j=1}^M \pi_{ij} = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^M \xi_{ij} = 0$$

Pode-se simplificar a notação agrupando os dois conjuntos de coordenadas como:

$$\chi_I \equiv \{\xi^{MN}, \pi^{MN}\} \quad \text{e} \quad \chi_T \equiv \{\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N\}.$$

Assim, o Hamiltoniano completo pode ser decomposto como

$$\mathcal{H}(\chi_T, \chi_I) \equiv \mathcal{H}_t(\chi_T) + \mathcal{H}_i(\chi_I) + \phi(\chi_T, \chi_I), \quad (2.1)$$

onde os termos acima estão na seqüência:

O Hamiltoniano Granular:

$$\mathcal{H}_t(\chi_T) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}^N) \equiv \frac{\mathbf{p}^{N^2}}{2m} + U(\mathbf{r}^N). \quad (2.2)$$

O Hamiltoniano interno:

$$\mathcal{H}_i(\chi_I) = \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^M \frac{\pi_{il}^2}{2\mu} + V(\xi^{NM}) \equiv \frac{\pi^{N^2}}{2\mu} + V(\xi^N). \quad (2.3)$$

O termo de interação e acoplamento:

$$\phi(\chi_T, \chi_I) = \sum_{i,j=1}^N \sum_{l,m=1}^M \phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, |\xi_{jm} - \xi_{il}|) \equiv \phi(\mathbf{r}^N, \xi^N). \quad (2.4)$$

A formulação de uma teoria cinética para o sistema requer a definição de uma função distribuição total  $\rho(\chi_T, \chi_I, t)$  do sistema e a descrição de sua evolução temporal.  $\rho(\chi_T, \chi_I, t) dx_T dx_I$  é a probabilidade de encontrar o sistema num estado em que suas coordenadas estejam dentro do hipervolume  $(dx_T dx_I)$ , centrado no ponto  $(\chi_T, \chi_I)$ , no instante  $t$ . De acordo com o teorema de Liouville a densidade de probabilidade de um sistema livre evolui temporalmente de maneira que a sua derivada total se cancele:

$$\frac{d\rho}{dt} = 0.$$

Como  $\rho$  depende das variáveis  $\{\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, \xi^{NM}, \pi^{NM}\}$  ao calcular a derivada total de  $\rho$  e a igualar a zero encontramos, de acordo com o Hamiltoniano definido acima, a seguinte expressão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \hat{L}\rho, \quad (2.5)$$

onde  $\hat{L}$ , chamado o operador de Liouville, compõe-se dos seguintes termos

$$\hat{L} = \hat{L}_I + \hat{L}_T + \hat{L}_\phi,$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{L}_T &= -\frac{p^N}{m} \cdot \nabla_{r^N} + \nabla_{r^N} U \cdot \nabla_{p^N}, & \hat{L}_I &= -\frac{\pi^N}{\mu} \cdot \nabla_{\xi^N} + \nabla_{\xi^N} V \cdot \nabla_{\pi^N} \\ \text{e} \quad \hat{L}_\phi &= \nabla_{r^N} \phi \cdot \nabla_{p^N} + \nabla_{\xi^N} \phi \cdot \nabla_{\pi^N}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Na seção seguinte vamos estender esta equação ao caso em que o sistema recebe energia externa.

## 2.2 Alimentação de energia - modelo democrático

A equação de Liouville descreve a evolução temporal de um sistema que evolui livremente. Nesta seção procuramos uma equação alternativa à de Liouville que descreva a evolução temporal da função densidade de estados de acordo ao modelo democrático. Neste modelo assumimos que a energia que se dá ao sistema é recebida por cada uma das partículas instantaneamente de maneira que o momento das partículas se vê incrementado em um vetor aleatório  $\zeta^N$ , a cada vez que a energia é dada ao sistema:

$$p^N \rightarrow p^N + \zeta^N, \quad (2.7)$$

onde

$$\zeta^N = \{\zeta_1, \dots, \zeta_i, \dots, \zeta_N\} \quad (2.8)$$

representa o conjunto de vetores em que os momentos das partículas se incrementam. Esta entrega de energia se repetirá a cada intervalo de tempo  $\tau_0$ , lapso que levaremos a zero ( $\tau_0 \rightarrow 0$ ) para fazer com que o processo seja contínuo. Suporemos também que cada um dos vetores  $\zeta_i$  se orienta com a mesma probabilidade em todas as direções no espaço. Por isso

$$\langle \zeta_i \rangle = 0 \quad \text{ou} \quad \langle \zeta_i^x \rangle = \langle \zeta_i^y \rangle = \langle \zeta_i^z \rangle = 0, \quad i=1, \dots, N, \quad (2.9)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  representa a média da distribuição no espaço destes vetores. Devemos notar também que não haverá correlação entre os vetores  $\zeta_i$  e seus componentes  $\zeta_i^\alpha$  onde  $\alpha = x, y, z$ . Com as considerações feitas passa-se a descrever a evolução temporal da função densidade de estados.

Seja em um instante de tempo  $t$  a função distribuição de probabilidade  $\rho(r^N, p^N, \chi_I, t)$ , a qual chamaremos  $\rho_-(t)$  de maneira que

$$\rho_-(t) \equiv \rho(r^N, p^N, \chi_I, t), \quad (2.10)$$

após transcorrido um tempo  $\tau_0$  como o sistema evolui livremente, de acordo com a equação de Liouville, a função  $\rho(r^N, p^N, \chi_I, t + \tau_0)$  se relacionará formalmente com a função  $\rho_-(t) \equiv \rho(r^N, p^N, \chi_I, t)$  pela equação

$$\rho(r^N, p^N, \chi_I, t + \tau_0) = e^{\tau_0 L} \rho(r^N, p^N, \chi_I, t). \quad (2.11)$$

A injeção instantânea de energia, que faz com que  $p^N \rightarrow p^N + \zeta^N$ , produzirá uma função que chamaremos  $\rho_+$  de maneira que

$$\rho_+(t + \tau_0) \equiv \rho(r^N, p^N + \zeta^N, \chi_I, t + \tau_0). \quad (2.12)$$

Esta última equação se relaciona com a função distribuição de probabilidade inicial mediante a equação

$$\rho_+(t + \tau_0) \equiv e^{\zeta^N \cdot \nabla_{p^N}} e^{\tau_0 L} \rho(r^N, p^N, \chi_I, t). \quad (2.13)$$

A quantidade de energia que é entregue ao sistema no instante  $t + \tau_0$  é

$$\Delta E = \int dp^N \frac{p^N \cdot p^N}{2m} \left[ \rho(r^N, p^N + \zeta^N, \chi_I, t + \tau_0) - \rho(r^N, p^N, \chi_I, t + \tau_0) \right], \quad (2.14)$$

ou

$$\Delta E = \int dp^N \frac{p^N \cdot p^N}{2m} \left[ e^{\zeta^N \cdot \nabla_{p^N}} - 1 \right] \rho(r^N, p^N, \chi_I, t + \tau_0). \quad (2.15)$$

Expandindo a exponencial e integrando cada termo da série por partes obtemos

$$\Delta E = -\frac{\zeta^N}{m} \cdot \int dp^N p^N \rho(r^N, p^N, \chi_i, t + \tau_o) + \frac{1}{2m} \sum_i |\zeta_i|^2. \quad (2.16)$$

Usando a condição estabelecida pela equação (2.9) calculamos a média da energia ganha no processo:

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{1}{2m} \sum_i \langle |\zeta_i|^2 \rangle. \quad (2.17)$$

Esta energia média é ganha a cada lapso  $\tau_o$ . Então, com a finalidade de que a energia absorvida por unidade de tempo seja constante, impomos que

$$\frac{\langle \Delta E \rangle}{\tau_o} = \frac{1}{2m} \sum_i \frac{\langle |\zeta_i|^2 \rangle}{\tau_o} = \varsigma. \quad (2.18)$$

Onde a constante  $\varsigma$  é a taxa com que o sistema é alimentado com energia. Como não se está diferenciando as partículas umas de outras, o valor de  $\langle |\zeta_i|^2 \rangle$  deve ser igual para todo  $i$  assim como suas componentes:

$$\langle \zeta_{i\alpha}^2 \rangle = \frac{2m\varsigma}{3N} \tau_o, \quad \alpha = x, y, z \quad \text{e} \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.19)$$

Para outras ordens continuamos a dizer que

$$\langle \zeta_{i_1\alpha_1} \zeta_{i_2\alpha_2} \dots \zeta_{i_n\alpha_n} \rangle = 0 \quad n > 2. \quad (2.20)$$

Podemos então calcular agora a derivada temporal da função densidade de estados que definimos como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \lim_{\tau_o \rightarrow 0} \frac{\rho_+(t + \tau_o) - \rho_-(\tau_o)}{\tau_o}, \quad (2.21)$$

que de acordo com as equações (2.10) e (2.13) se escreve

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \lim_{\tau_o \rightarrow 0} \frac{[e^{\zeta^N \cdot \nabla_{p^N}} e^{\tau_o L} - 1] \rho}{\tau_o}, \quad (2.22)$$

onde  $\rho$  está dado pela equação (2.10). Expandindo  $e^{\zeta^N \cdot \nabla_{p^N}}$  temos que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \lim_{\tau_o \rightarrow 0} \frac{[(1 + \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} + \frac{1}{2} \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \dots) e^{\tau_o L} - 1] \rho}{\tau_o}. \quad (2.23)$$

Tomando a média em ambos membros da equação acima então devido a nossas hipóteses, equações (2.9) e (2.20), e deixando o calculo do termo de segunda ordem implícito obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \lim_{\tau_o \rightarrow 0} \frac{[(1 + \frac{1}{2} \langle \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \rangle) e^{\tau_o L} - 1] \rho}{\tau_o}. \quad (2.24)$$

Devido ao fato de não haver, por hipótese, correlação nem entre os vetores  $\zeta_i$  e nem entre as componentes  $\zeta_i^\alpha$ , o valor médio na equação acima é igual a

$$\langle \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \rangle = \left\{ \langle \zeta_{x_i}^2 \rangle \frac{\partial^2}{\partial p_{x_i}^2} + \langle \zeta_{y_i}^2 \rangle \frac{\partial^2}{\partial p_{y_i}^2} + \langle \zeta_{z_i}^2 \rangle \frac{\partial^2}{\partial p_{z_i}^2} \right\}.$$

Usando agora a equação (2.19) se obtém

$$\langle \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \rangle = 2\tau_o \left\{ \frac{m\varsigma}{3N} \frac{\partial^2}{\partial p_{x_i}^2} + \frac{m\varsigma}{3N} \frac{\partial^2}{\partial p_{y_i}^2} + \frac{m\varsigma}{3N} \frac{\partial^2}{\partial p_{z_i}^2} \right\}.$$

Definindo

$$M_\varsigma = \frac{m\varsigma}{3N}, \quad (2.25)$$

obtém-se finalmente

$$\langle \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \zeta^N \cdot \nabla_{p^N} \rangle = 2\tau_o M_\varsigma \nabla_{p^N} \cdot \nabla_{p^N}. \quad (2.26)$$

Então usando esta equação (2.26) na (2.24) encontramos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \lim_{\tau_o \rightarrow 0} \left\{ \frac{e^{\tau_o L} \rho - \rho}{\tau_o} + M_\varsigma \nabla_{p^N} \cdot \nabla_{p^N} e^{\tau_o L} \rho \right\}. \quad (2.27)$$

Finalmente ao tomar o limite obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = L\rho + M_\varsigma \nabla_{p^N} \cdot \nabla_{p^N} \rho. \quad (2.28)$$

Esta será, então, a equação que governe a evolução temporal da função distribuição densidade de probabilidade para o gás granular (GG) com alimentação de energia externa no modelo democrático.

### 2.3 Alimentação de energia sem dissipação microscópica

A equação encontrada acima ainda descreve o caso mais geral que pode ser o elástico mais um termo de alimentação de energia. Uma contribuição dissipativa aparecerá quando se fizer a eliminação das variáveis rápidas do sistema. Pode-se ver agora que a equação acima pode levar a resultados não desejados quando aplicada diretamente. É fácil mostrar, integrando por partes, que

$$L^\dagger = -L.$$

Logo, se se multiplica a seguinte equação,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = L\rho + M_\varsigma \nabla_{p^N} \cdot \nabla_{p^N} \rho, \quad (2.29)$$

pela esquerda por  $\rho$  e se a integra em  $\chi_T$  e  $\chi_I$  obtém-se:

$$\int d\chi_T d\chi_I \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} = \int d\chi_T d\chi_I \rho L\rho + M_\zeta \int d\chi_T d\chi_I \rho \nabla_{\mathbf{p}^N} \cdot \nabla_{\mathbf{p}^N} \rho.$$

Em virtude da propriedade mostrada acima, o primeiro termo do lado direito cancela-se enquanto que o segundo pode ser integrado por partes:

$$\int d\chi_T d\chi_I \rho \frac{\partial \rho}{\partial t} = -M_\zeta \int d\chi_T d\chi_I \nabla_{\mathbf{p}^N} \rho \cdot \nabla_{\mathbf{p}^N} \rho.$$

Então é possível ver que uma solução da equação (2.29),  $\rho_{ss}(\chi_T, \chi_I)$ , independente do tempo seria tal que satisfizesse

$$\int d\chi_T d\chi_I \nabla_{\mathbf{p}^N} \rho_{ss} \cdot \nabla_{\mathbf{p}^N} \rho_{ss} = 0.$$

Explicitamente

$$\nabla_{\mathbf{p}^N} \rho \cdot \nabla_{\mathbf{p}^N} \rho = \sum_i \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial p_i^x} \rho \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial p_i^y} \rho \right)^2 + \left( \frac{\partial}{\partial p_i^z} \rho \right)^2 \right\}.$$

Como se trata da integração de quantidades positivas, a única possibilidade da integral acima ser zero é que cada um dos termos

$$\frac{\partial \rho_{ss}}{\partial p_i^\alpha} \quad \alpha = x, y, z$$

seja identicamente nulo. Portanto  $\rho_{ss}(r, \chi_I)$  não dependeria de  $\mathbf{p}^N$ . Este resultado deve-se a que ao alimentar de energia um sistema elástico a energia média tende a se tornar infinita. Na prática, pensaremos nos grãos como reservatórios térmicos macroscópicos que absorverão essa energia injetada. Assim o resultado acima (que se manifesta quando  $t \rightarrow \infty$ ) não será relevante e um estado estacionário com distribuição dependente de  $\mathbf{p}^N$  se desenvolverá.