



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

DAVID OLIVEIRA DE FIGUEIREDO

**DINÂMICA DE COLISÃO DE MULTIPARTÍCULAS: SIMULANDO A
HIDRODINÂMICA DE FLUIDOS COMPLEXOS ATRAVÉS DE UMA
APROXIMAÇÃO DE PARTÍCULAS**

**FORTALEZA
2014**

DAVID OLIVEIRA DE FIGUEIREDO

**DINÂMICA DE COLISÃO DE MULTIPARTÍCULAS: SIMULANDO A
HIDRODINÂMICA DE FLUIDOS COMPLEXOS ATRAVÉS DE UMA
APROXIMAÇÃO DE PARTÍCULAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira.

FORTALEZA

2014

DAVID OLIVEIRA DE FIGUEIREDO

**DINÂMICA DE COLISÃO DE MULTIPARTÍCULAS: SIMULANDO A
HIDRODINÂMICA DE FLUIDOS COMPLEXOS ATRAVÉS DE UMA
APROXIMAÇÃO DE PARTÍCULAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 22/01/2014.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Fabrício Queiróz Potiguar
Universidade Federal da Pará (UFPA)

Aos meus pais, Marcelo e Flora.
Ao meu irmão, Mateus.

Agradecimentos

- Agradeço primeiramente a Deus e aos meus pais: Marcelo Nasaré de Figueiredo e Flora Maria Mendes Oliveira, pelo total apoio, amor e confiança ao longo da minha vida. Seu incentivo com relação a difícil carreira de físico possui valor inestimável para mim. Agradeço também especialmente ao meu irmão Mateus Oliveira de Figueiredo, pela grande amizade e companhia em vários momentos importantes.
- Ao professor Wandemberg pela orientação e confiança depositada em minha pessoa. Suas considerações e sugestões em nossas conversas foram de extrema importância no desenvolvimento deste trabalho.
- Agradeço aos colegas de sala e de disciplinas ao longo desses dois anos, em especial aos amigos Ancelmo Pinheiro, Bruno Gondim, Diego Frota, Jorge “Capuan” e Jorge Luiz pelas várias discussões, sessões de estudo e resoluções de diversas listas de exercício, além do grande companheirismo e amizade adquiridos.
- Ao professor Felipe Munarin pelo auxílio e clarificações quanto aos métodos numéricos.
- Aos professores Ascânio Dias Araújo e Fabrício Queiróz Potiguar por comparecerem à banca de avaliação desta dissertação.
- A todo o corpo docente do departamento de Física da Universidade Federal do Ceará.
- A todos os meus familiares e amigos.

“Great Scott!”
(Dr. Emmett L. “Doc” Brown)

Resumo

Técnicas de simulação com uma abordagem fundamentada na dinâmica de partículas são uma alternativa interessante na descrição do comportamento de fluidos complexos. Nesses sistemas, fenômenos ocorrem tipicamente na escala de tamanho mesoscópica (nanômetros a micrometros), onde as energias são da ordem da energia térmica $k_B T$. Em diversos fenômenos o detalhe microscópico da interação entre os constituintes do sistema é de fundamental importância para a descrição correta dos processos físicos associados, de modo que uma aproximação do tipo "coarse-graining", usada em uma descrição contínua baseada na equação de Navier-Stokes, não é adequada. É neste contexto que o método aqui apresentado se faz importante. Introduzido por Malevanets e Kapral em 1999, a dinâmica de rotação estocástica (stochastic rotation dynamics) ou dinâmica de colisão de multipartículas (multiparticle collision dynamics), é um método de simulação para fluidos mesoscópicos que basicamente consiste em alternar etapas de fluxo (streaming) e colisões num ensemble de partículas pontuais. As colisões são realizadas agrupando as partículas em células, nas quais há conservação de massa, momento linear e energia, além de satisfazer as equações hidrodinâmicas e levar em conta as flutuações térmicas do sistema. Neste trabalho temos como objetivo a apresentação da dinâmica de colisão de multipartículas, através de uma discussão sobre seus detalhes, particularidades e como é feita a implementação em simulações numéricas. Além disso, apresentamos como exemplo alguns resultados clássicos da hidrodinâmica, obtidos a partir do método abordado neste trabalho.

Palavras-chave: Física estatística. Hidrodinâmica. Métodos numéricos.

Abstract

Simulation techniques with a strategy based on particle dynamics are an interesting alternative approach in describing the behavior of complex fluids. In these systems, phenomena occur typically in the range of mesoscopic size (nanometers to micrometers), where the energies are of the order of the thermal energy $k_B T$. In many phenomena the microscopic detail of the interaction between the constituents of the system is crucial for the correct description of the physical processes associated, so that a "coarse-graining" approximation, used in a continuous description based on the Navier-Stokes is not appropriate. It is in this context that the method presented here becomes important. Introduced by Malevanets and Kapral in 1999, the stochastic rotation dynamics, or multiparticle collision dynamics, is a simulation method for mesoscopic fluids; which basically consists of alternating streaming and collisions steps in an ensemble of point particles. The collisions are performed by grouping the particles into cells, in which there is conservation of mass, momentum and energy, in addition to meeting the hydrodynamic equations and taking into account the thermal fluctuations of the system. In this work we aim at presenting the multiparticle collision dynamics, through a discussion of its details, features and how the implementation is done in numerical simulations. Moreover, we present some classical hydrodynamics results, obtained from the method presented in this work.

Keywords: Statistical physics. Hydrodynamics. Numerical methods.

Sumário

1	Introdução	14
1.1	Considerações gerais	14
1.2	Resumo dos métodos existentes	16
1.2.1	Lattice Gas Automata (LGA)	16
1.2.2	Lattice Boltzmann (LB)	18
1.2.3	Dissipative Particle Dynamics (DPD)	21
1.2.4	Dinâmica de Colisão de Multipartículas (DCMP)	22
2	Aspectos Teóricos e Métodos Numéricos	23
2.1	Conceitos de mecânica estatística	23
2.1.1	Espaço de fase	23
2.1.2	<i>Ensemble</i>	24
2.1.3	Teorema da equipartição	25
2.2	Rotações	27
2.2.1	Rotacões em duas dimensões	27
2.2.2	Rotações em três dimensões (quatérnions)	28
2.2.2.1	Definição de quatérnion	29
2.2.2.2	Adição e multiplicação	29
2.2.2.3	Complexo conjugado, norma e inverso	30
2.2.2.4	Operador de rotação	31
2.3	Métodos numéricos	34
2.3.1	Algoritmo de Euler	34
2.3.1.1	Equações de primeira ordem	34
2.3.1.2	Derivada numérica	35
2.3.1.3	Erro na derivação numérica	36
2.3.2	Método de células e listas (<i>linked list</i>)	36
2.3.2.1	Células	36
2.3.2.2	Listas	37
3	Dinâmica de colisão de multipartículas	39
3.1	Descrição do modelo	39
3.2	Dinâmica	40
3.2.1	<i>Streaming</i>	40

3.2.2	Colisão	40
3.2.2.1	Rotação aleatória	41
3.2.2.2	Conservação da energia e momento	43
3.2.3	<i>Random shift</i> (ajuste aleatório)	45
3.2.4	DCMP com Termostato de Andersen	47
3.2.4.1	O termostato de Andersen	47
3.2.4.2	DCMP-TA	48
3.2.4.3	Comparações entre o DCMP-TA e a DRE	48
3.3	Condições de contorno	49
3.3.1	Condições periódicas de contorno	49
3.3.2	Implementação de paredes	50
3.3.2.1	<i>Slip Boundary Conditions</i> (SBC)	50
3.3.2.2	<i>No-slip Boundary Conditions</i> (NSBC)	51
3.3.2.3	Partículas virtuais	52
3.4	Termostatos	53
3.4.1	Termostato global	54
3.4.2	Termostato celular	55
4	Simulações e resultados	56
4.1	Unidades	56
4.2	Análise das leis de conservação	56
4.2.1	Conservação da energia e momento	57
4.2.2	Distribuições de velocidade	57
4.3	Aplicações com o fluido de Poiseuille	60
4.3.1	Fluido de Poiseuille	60
4.3.2	Escoamento forçado	62
4.3.3	Fluido de Poiseuille na presença de um campo externo	64
4.3.4	Análise da viscosidade	67
4.3.5	Fluido de Poiseuille com gradiente de temperatura	69
4.4	Escoamento com obstáculos	71
5	Conclusões e perspectivas	74
	Referências	76

Lista de Figuras

1	A dinâmica mesoscópica cria o elo entre a escala microscópica e macroscópica. . . .	15
2	Rede quadrada para o modelo HPP. As setas a, b, c e d representam os vetores de rede \mathbf{c}_i . As partículas permutam entre as sub-redes pretas (pontos pretos) e brancas (círculos brancos) como num tabuleiro de xadrez.	16
3	HPP: colisão e propagação. Círculos preenchidos representam células ocupadas e círculos brancos representam células vazias. a) Parte da rede antes da colisão: há apenas uma configuração possível de colisão (duas partículas em células opostas no mesmo sítio; ver sítio em destaque). b) Depois da colisão: a configuração das células no sítio da esquerda foi alterada. c) Depois da propagação: todas as partículas se deslocaram de acordo com suas ligações com os vizinhos mais próximos.	17
4	HPP: colisão. a) Única configuração em que a colisão ocorre: duas partículas de um mesmo sítio encontram-se em células opostas enquanto as duas células restantes estão vazias. Após a colisão as células anteriormente vazias encontram-se ocupadas e vice-versa. b) O mesmo que a) porém mostrando os respectivos vetores de momento. Ambos os vetores são rotacionados de 90° . Massa e momento são conservados. . . .	18
5	Representação das velocidades \mathbf{c}_i no LB para dois tipos de redes. Uma possível direção é a permanência no mesmo sítio (\mathbf{c}_0).	19
6	Representação do processo de <i>streaming</i> numa rede D2Q9.	20
7	Representação gráfica da rotação em duas dimensões.	27
8	Representação de um vetor \mathbf{v} no \mathbb{R}^3 como um quatérnio imaginário no \mathbb{R}^4	32
9	Disposição no plano dos vetores \mathbf{n} , \mathbf{n}_\perp e $L_q(\mathbf{n})$	34
10	Sistema bidimensional dividido em células.	37
11	Ilustração do processo de construção das listas: são mostrados os elementos dos vetores <i>head</i> e <i>next</i>	37
12	Trajetória de uma partícula arbitrária. Suas posições e velocidades evoluem em intervalos de tempo Δt	39
13	<i>Streaming</i>	40
14	Divisão do sistema em células de lado a	41
15	Diagrama da rotação aleatória em duas dimensões.	42
16	Disposição dos vetores envolvidos no processo de colisão.	43

17	Análise do deslocamento de duas partículas durante um passo de tempo para três referenciais. a) Deslocamento das partículas para um sistema em repouso $\mathbf{U} = 0$. b) Deslocamento para um sistema em movimento onde $\mathbf{U} = (a/\Delta t)\mathbf{j}$. Apesar do deslocamento ser diferente de a), as partículas terminam seus movimentos numa mesma célula, o que corresponde a um mesmo processo de colisão. c) Deslocamento das partículas para um sistema onde $\mathbf{U} = (a/2\Delta t)\mathbf{j}$. As partículas terminam os movimentos em células distintas, ocasionando outro processo de colisão em relação aos anteriores.	46
18	Ilustração indicando como as partículas mudam de célula em um <i>random shift</i> .	46
19	Ilustração das condições periódicas de contorno em duas dimensões. a) são criadas cópias do sistemas original (caixa hachurada). b) Uma partícula que deixe a caixa de simulação é substituída por uma imagem correspondente.	49
20	Alteração do vetor velocidade da partícula durante uma colisão na parede. As setas coloridas representam as componentes tangenciais da velocidade antes (setas vermelhas) e depois (setas azuis) da colisão.	51
21	<i>Random shift</i> na presença de paredes que definem um canal ao longo do eixo y .	52
22	Representação de partículas virtuais (amarelas) para um sistema onde $\langle n \rangle = 5$.	53
23	Análise das leis de conservação do momento linear e energia na DCMP. a), b), c) Conservação das componentes do momento linear total do sistema. Os gráficos para as componentes P_x , P_y e P_z são indistinguíveis. d) Conservação da energia cinética por partícula em unidades de $3k_B T/2$.	58
24	Distribuições de velocidades para as componentes de \mathbf{v} . As curvas sólidas correspondem a funções da forma da eq. (4.3).	59
25	Distribuição de velocidades para $v = \mathbf{v} $. A curva sólida foi obtida a partir de uma função da forma daquela dada na eq. (4.4).	59
26	Diagrama para o fluxo num canal. A largura do canal é mostrada exagerada em relação ao comprimento. As pressões p_1 e p_2 são constantes ($p_1 > p_2$).	60
27	Diagrama mostrando a tensão viscosa gerada pela variação da velocidade $\mathbf{v} = v(y)\hat{\mathbf{i}}$. As setas vermelhas representam as forças que atuam nos planos AB e CD .	61
28	Diagrama para o escoamento forçado: na região I as velocidades obedecem o perfil parabólico de Poiseuille durante toda a simulação.	63
29	Perfil parabólico de velocidades obtido com escoamento forçado para dois valores de v_{max} (0,004 e 0,005).	64
30	Perfis de velocidade para diferentes termostatos.	65
31	Perfis de densidade de partículas e energia cinética para os termostatos analisados. a) Gráfico do número de partículas por célula n_c relativo à densidade média $\langle n \rangle$. b) Perfil da energia cinética por partícula em unidades de $3k_B T/2$.	66
32	Perfis de velocidade para diferentes valores da razão $\rho / \langle n \rangle$.	67

33	Viscosidade μ como função do passo de tempo Δt . A curva pontilhada foi obtida a partir de ajuste da forma da eq. (4.28). Os coeficientes A e B , quando comparados aos valores téóricos esperados [eqs. (4.25) e (4.26)], apresentaram erros numéricos de 0,077% e 1,29%, respectivamente.	68
34	Perfil de velocidades para um canal com gradiente de temperatura $dT/dy = (T_2 - T_1)/L$.	70
35	Perfil de energia cinética por partícula em unidades de $3k_B T/2$. Para $T_2 = 5T_1$ e $T_2 = 10T_1$, o comportamento do perfil é aproximadamente linear.	70
36	Gráfico do número de partículas por célula n_c relativo à densidade média $\langle n \rangle$ para todos os valores de T_2 . Para cada valor de T_2 são fornecidos os coeficientes A e B dos ajustes obtidos a partir de uma função da forma da eq. (4.32).	71
37	Diagrama do sistema utilizado na simulação: na região I as velocidades obedecem o perfil parabólico de Poiseuille durante toda a simulação.	72
38	Campos vetoriais das velocidades para o estado estacionário de um escoamento ao redor de um obstáculo ($N_R \sim 30$). É mostrada apenas a região em torno dos obstáculos. O fluido escoava de baixo para cima.	73

Lista de Abreviaturas e Siglas

BB	Bounce-Back
DCMP	Dinâmica de Colisão de Multipartículas
DCMP-TA	Dinâmica de Colisão de Multipartículas com Termostato de Andersen
DM	Dinâmica Molecular
DPD	Dissipative Particle Dynamics
DRE	Dinâmica de Rotação Estocástica
LB	Lattice Boltzmann
LBE	Lattice Boltzmann Equation
LGA	Lattice Gas Automata
NSBC	No-slip Boundary Conditions
SBC	Slip Boundary Conditions

1 Introdução

1.1 Considerações gerais

Desde a primeira metade do século XIX, o estudo das propriedades dos fluidos tem como base o trabalho de Navier¹ e Stokes [2]. A equação diferencial de Navier-Stokes, representa uma descrição contínua e macroscópica das propriedades do fluido, além de assegurar a conservação local e global da energia e momento. Para uma descrição completa do fluido, também é necessário utilizar a equação da continuidade (conservação da massa) e a equação do calor (conservação da energia). Entretanto, por geralmente tratarem-se de equações diferenciais parciais acopladas, apenas em alguns casos essas equações podem ser resolvidas analiticamente, e, apesar de existirem métodos numéricos bem estabelecidos (diferenças finitas, elementos finitos, métodos espectrais), existem casos onde estes métodos não podem ser aplicados. Isto pode ser devido a não continuidade do sistema, dificuldades de convergência numérica ou mesmo a ausência de flutuações térmicas [3]. Exemplos de tais limitações aparecem em problemas nos quais as propriedades microscópicas dos componentes do fluido são relevantes para o comportamento geral do mesmo.

De um outro ponto de vista, métodos de simulação computacional como a dinâmica molecular (DM), baseiam-se numa descrição microscópica dos fluidos. Técnicas desse tipo reproduziriam exatamente as propriedades dinâmicas e de equilíbrio para fluidos complexos, se um poder computacional ilimitado pudesse ser atingido. Entretanto, essa abordagem é, em geral, impraticável. Como exemplo, para simular com todos os detalhes sistemas coloidais (suspensões de partículas sólidas formadas por um grande número de átomos), seria necessário resolver um grande número de equações de movimento ($\sim 10^{23}$ incluindo o fluido na descrição) devido ao enorme número de graus de liberdade do sistema, o que está aquém da atual capacidade computacional.

Pelo exposto até aqui, é evidente a necessidade de uma descrição de fluidos que possa representar as características positivas de ambas as abordagens anteriormente comentadas. A importância desta descrição pode ser associada aos chamados fluidos complexos (ou *soft matter*). Em geral, são sistemas compostos por entidades que apresentem tamanho característico bem maior que aquele de moléculas simples, numa escala espacial que varia de algumas dezenas de nanômetros (*nm*) a algumas centenas de micrometros (μm). Esta é a chamada escala mesoscópica e envolve sistemas importantes tanto do ponto de vista científico como tec-

¹A contribuição de Claude Navier para a dinâmica dos fluidos foi publicada num artigo da Academia de Ciências de Paris, em 1822. Apesar de desenvolverem trabalhos independentes, Navier e Stokes obtiveram o mesmo conjunto de equações, conhecidas como equações de Navier-Stokes [1].

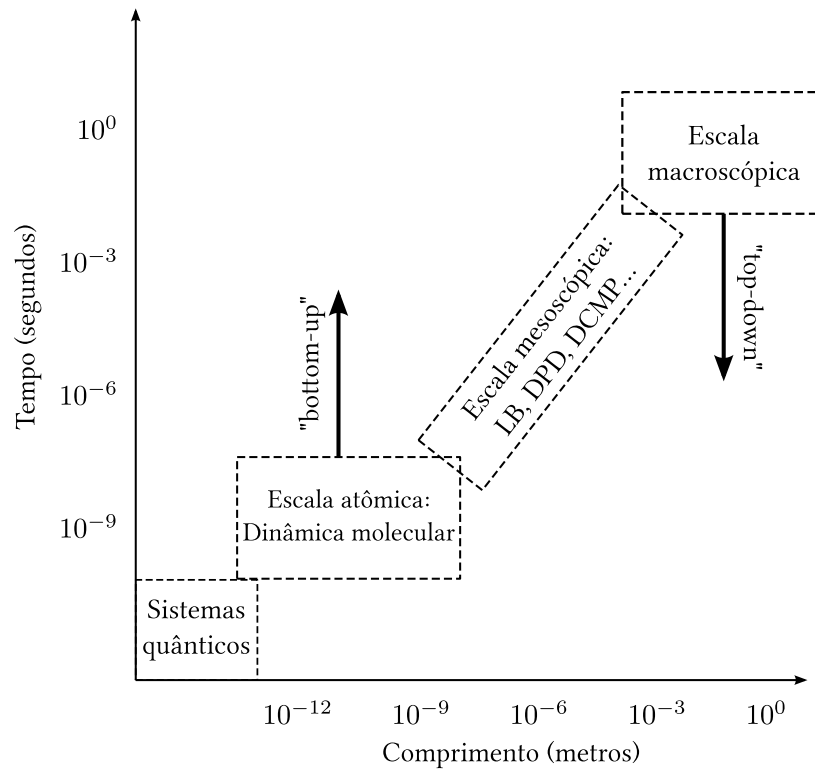


Figura 1: A dinâmica mesoscópica cria o elo entre a escala microscópica e macroscópica.

nológico, tais como colóides e polímeros. A dificuldade teórica na descrição macroscópica de tais sistemas ocorre principalmente pelas interações entre seus constituintes (interações soluto-soluto e soluto-solvente).

Devido a importância de escalas de tamanho intermediárias (Fig. 1) para a compreensão de fenômenos macroscópicos e o crescente aumento do poder computacional, vários métodos de simulação para sistemas mesoscópicos ($nm - \mu m$) têm sido desenvolvidos nos últimos anos. Métodos estes que utilizam tanto a abordagem “*top-down*”, que consiste na discretização das equações contínuas, quanto a abordagem “*bottom-up*”, na qual utilizam-se descrições granulares (*coarse-grained*) onde a física microscópica é fortemente simplificada mas efeitos relevantes ainda são levados em conta [3].

Este capítulo têm como objetivo servir de introdução aos métodos numéricos de hidrodinâmica mesoscópica. Serão descritos, em linhas gerais, alguns dos métodos de simulação mais utilizados e conhecidos: *Lattice Gas Automata* (LGA), *Lattice Boltzmann* (LB), e *Dissipative Particle Dynamics* (DPD). Seus detalhes e implementações fogem ao escopo deste trabalho, sendo suas menções apenas com o intuito de mostrar a evolução histórica das técnicas, abrindo caminho para o real foco deste trabalho: a Dinâmica de Colisão de Múltiplas Partículas (DCMP), a qual será abordada com detalhes nos capítulos seguintes.

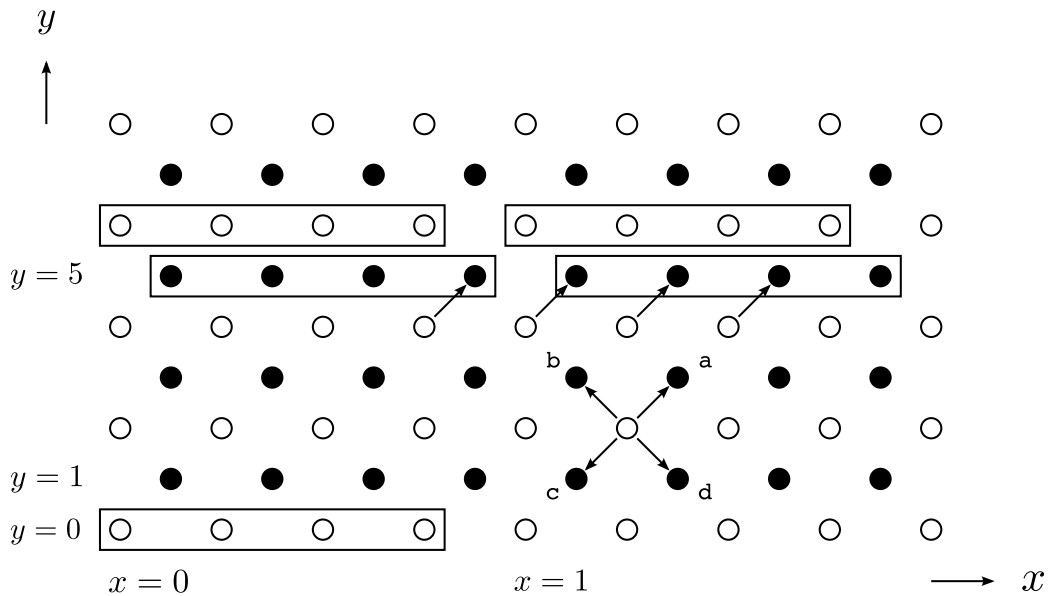


Figura 2: Rede quadrada para o modelo HPP. As setas a, b, c e d representam os vetores de rede \mathbf{c}_i . As partículas permutam entre as sub-redes pretas (pontos pretos) e brancas (círculos brancos) como num tabuleiro de xadrez.

1.2 Resumo dos métodos existentes

1.2.1 Lattice Gas Automata (LGA)

Numa simulação de LGA [3] a representação macroscópica é substituída por um conjunto de partículas que se deslocam de um sítio para outro numa rede regular fixa. Durante cada passo de tempo as partículas se movem na rede de acordo com seu vetor momento \mathbf{p}_i e colidem se duas delas ocuparem o mesmo sítio. As regras de colisão são tais que o número de partículas, momento e energia são conservados.

O primeiro modelo e também o mais simples de LGA [4], conhecido como HPP em homenagem as iniciais de seus criadores, foi proposto em 1973 por Hardy, de Pazzis e Pomeau. Nele, a rede é quadrada e vetores \mathbf{c}_i ($i = 1, 2, 3, 4$) são designados para cada sítio da rede. Esses vetores são denominados vetores de rede ou velocidades de rede e conectam cada sítio aos seus vizinhos mais próximos (Fig. 2). Mais precisamente, os vetores velocidades de rede são dados pelo quociente entre os vetores de rede e o passo de tempo Δt , o qual sempre é atribuído o valor 1. Logo, ambos possuem o mesmo valor numérico, porém dimensões diferentes. O significado dos \mathbf{c}_i é o seguinte: em cada sítio da rede há quatro células, cada uma delas associada a uma componente de \mathbf{c}_i que aponta para o vizinho mais próximo (Fig. 3).

A evolução do sistema é determinística e alterna entre colisões locais \mathbf{C} (apenas partículas no mesmo sítio colidem entre si) e etapas de propagação \mathbf{S} ao longo de ligações com os vizinhos mais próximos. Logo, o operador de evolução \mathbf{U} é definido como uma composição

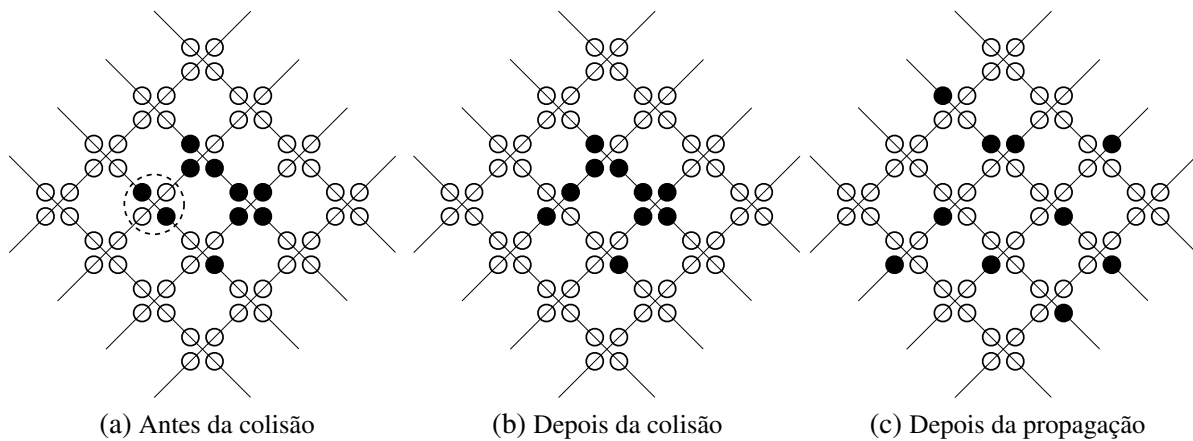


Figura 3: HPP: colisão e propagação. Círculos preenchidos representam células ocupadas e círculos brancos representam células vazias. a) Parte da rede antes da colisão: há apenas uma configuração possível de colisão (duas partículas em células opostas no mesmo sítio; ver sítio em destaque). b) Depois da colisão: a configuração das células no sítio da esquerda foi alterada. c) Depois da propagação: todas as partículas se deslocaram de acordo com suas ligações com os vizinhos mais próximos.

entre as duas etapas:

$$\mathbf{U} = \mathbf{S} \circ \mathbf{C}. \quad (1.1)$$

Cada uma das partículas possui um momento $m\mathbf{c}_i$ associado. A colisão deve conservar massa e momento enquanto altera a ocupação de cada uma das células. Para o modelo HPP há apenas uma configuração possível de colisão: quando duas partículas entram num sítio em direções opostas e as outras duas células encontram-se desocupadas. Na colisão, ambas as partículas são rotacionadas 90° (Fig. 4). Qualquer outro tipo de configuração permanece inalterado durante o passo de colisão. É importante ressaltar também que duas aplicações sucessivas do operador de colisão \mathbf{C} retorna a configuração de uma célula ao seu estado inicial (Fig. 4):

$$\mathbf{C}^2 = \mathbf{I}, \quad (1.2)$$

onde \mathbf{I} é o operador identidade.

Em cada passo de tempo as partículas são permutadas entre sub-redes consistindo de pontos com índices pares (sub-redes “brancas”) e sub-redes com pontos de índices ímpares (sub-redes “pretas”). Logo, existem dois tipos de população (desacopladas) entre as partículas da rede [4].

O modelo HPP não obedece as equações hidrodinâmicas no limite macroscópico. Porém, com uma simetria da rede adequada (utilizando uma rede triangular) [5], esse problema pode ser contornado. Comparando com uma descrição puramente microscópica, o número de operações elementares por partícula, em cada passo de tempo, é menor para o LGA do que para a DM, como consequência da discretização. Além disso, os intervalos de tempo numa

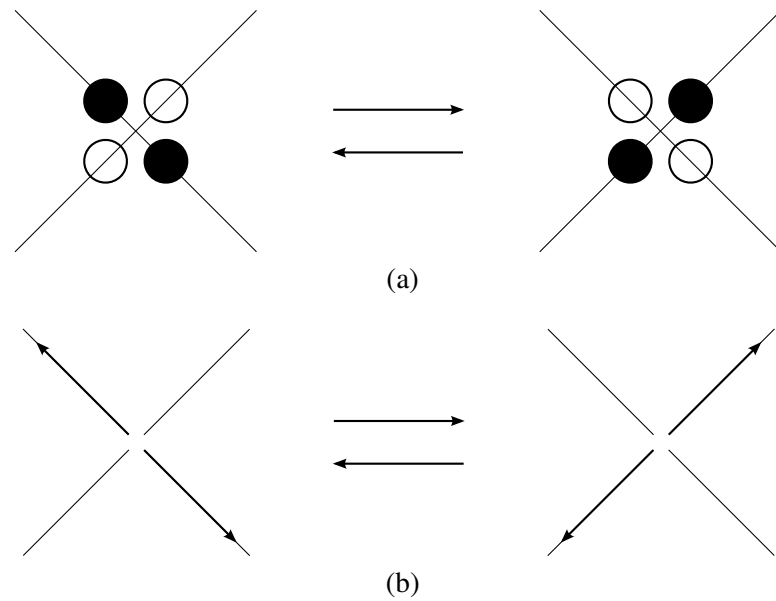


Figura 4: HPP: colisão. a) Única configuração em que a colisão ocorre: duas partículas de um mesmo sítio encontram-se em células opostas enquanto as duas células restantes estão vazias. Após a colisão as células anteriormente vazias encontram-se ocupadas e vice-versa. b) O mesmo que a) porém mostrando os respectivos vetores de momento. Ambos os vetores são rotacionados de 90° . Massa e momento são conservados.

simulação de LGA são maiores por ordens de magnitude: num único passo de tempo de LGA, a alteração entre as posições relativas das partículas é comparável ao livre caminho médio das mesmas, enquanto na DM, para uma mudança correspondente são necessários centenas de passos de tempo [3]. Como exemplos de sistemas com fluidos complexos onde foram obtidos resultados satisfatórios com simulações de LGA, temos as suspensões coloidais [6] e os polímeros [7].

Entretanto, problemas em aspectos fundamentais são apresentados por este método: ausência de isotropia e invariância de Galileu são ambas violadas pela rede e para grandes flutuações de densidade. A anisotropia no comportamento do fluido pode ser eliminada escolhendo-se uma rede com simetria rotacional suficiente. As consequências da falta da invariância de Galileu, tais como termos adicionais sem correspondência física, podem ser resolvidas reescalando-se as velocidades. Mas, esses problemas aparecem de forma muito mais severa em sistemas mais complexos (por exemplo, misturas de fluidos), tornando o modelo bastante confuso [3]. A atrativa simplicidade inicial é perdida e o progresso torna-se difícil.

1.2.2 Lattice Boltzmann (LB)

O LB foi inicialmente derivado do LGA de maneira empírica [8] com o objetivo de contornar dois dos seus maiores problemas: o ruído intrínseco e valores limitados dos coeficientes de transporte. O principal propósito é o de incorporar a natureza física dos fluidos de um

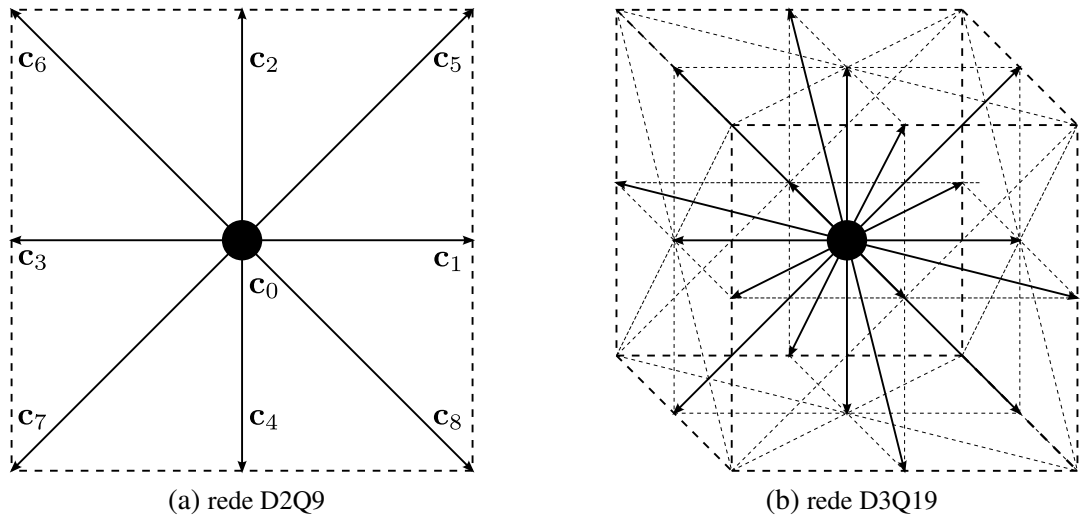


Figura 5: Representação das velocidades \mathbf{c}_i no LB para dois tipos de redes. Uma possível direção é a permanência no mesmo sítio (\mathbf{c}_0).

ponto de vista mais estatístico.

Esse método é originário da equação de transporte de Boltzmann [9], uma equação fundamental da teoria cinética dos gases que descreve o movimento e interação de aglomerados (populações) de partículas no espaço de fase. Em sua forma padrão:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = \int \int \sigma(\Omega) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| \cdot [f(\mathbf{v}') \cdot f(\mathbf{v}'_1) - f(\mathbf{v}) \cdot f(\mathbf{v}_1)] d\Omega d\mathbf{v}_1, \quad (1.3)$$

onde $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ é a função de densidade de probabilidade de encontrar uma partícula com vetor posição \mathbf{x} e velocidade \mathbf{v} no espaço de fase e \mathbf{F} é a força externa que atua nas partículas de massa m . O lado direito da equação (1.3), conhecido como integral de colisão de Boltzmann, representa as colisões entre as partículas, enquanto o lado esquerdo representa a advecção da equação diferencial parcial no espaço de fase. Os símbolos $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$ representam as possíveis velocidades após as colisões e σ é secção de choque da colisão. O balanço total é obtido após a integração sobre todo o ângulo sólido Ω e sobre todas as velocidades \mathbf{v}_1 .

No método LB, o modelo é baseado numa forma discretizada da equação de transporte de Boltzmann, e o procedimento para a discretização consiste de poucos passos. Primeiramente, a equação é discretizada no tempo e no espaço. Adicionalmente, similar ao LGA, o espaço de velocidades é limitado a um número finito de velocidades \mathbf{c}_i ($i = 1, \dots, M$). A convenção utilizada é denotar diferentes funções de distribuição f_i ($i = 1, \dots, M$) para um certo ponto \mathbf{x}_k : $f(t, \mathbf{x}_k, \mathbf{c}_i) \rightarrow f_i(t, \mathbf{x}_k)$. As velocidades acessíveis são aquelas nas quais as partículas se movem exatamente para os sítios vizinhos da rede num passo de tempo. Em duas dimensões, o espaço das velocidades é geralmente limitado em nove direções (D2Q9), e em três dimensões é limitado a 15 (D3Q15), 19 (D3Q19) ou 27 (D3Q27) vetores. O conjunto de velocidades possíveis possui simetria suficiente para garantir a conservação da massa, momento e fluxo de momento.

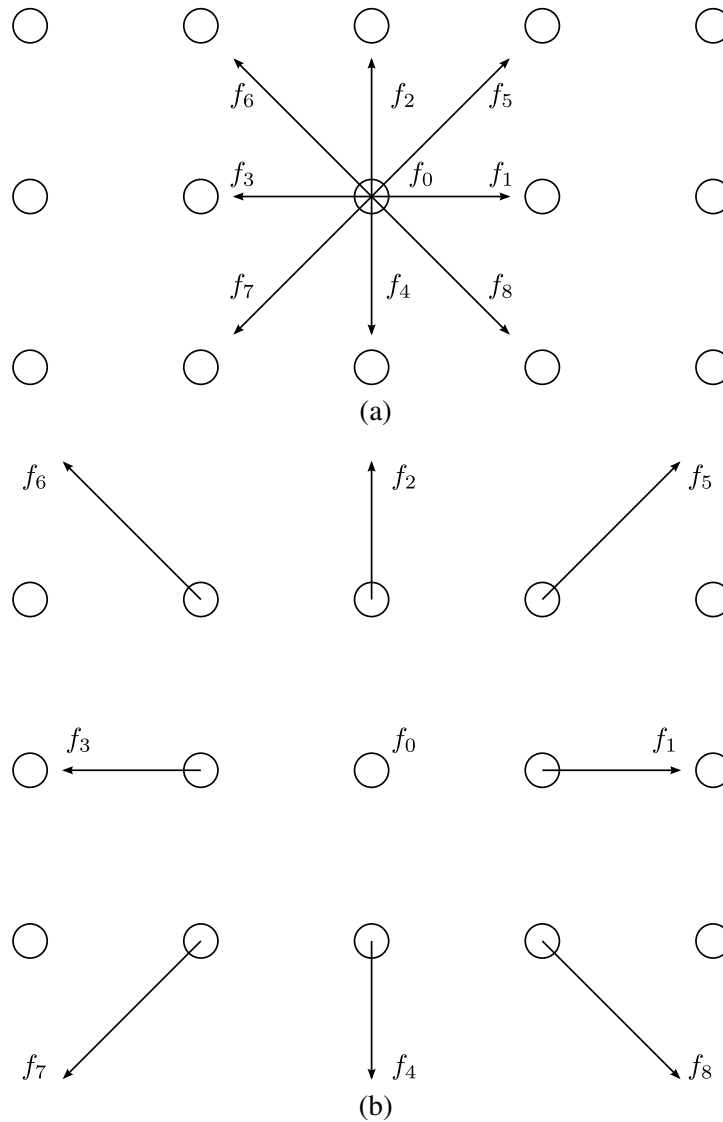


Figura 6: Representação do processo de *streaming* numa rede D2Q9.

A forma discretizada da equação de Boltzmann, conhecida como *Lattice Boltzmann Equation* (LBE), exprime que a relação entre a distribuição de partículas num sítio \mathbf{x} e a distribuição no sítio vizinho na direção em que as partículas se deslocam ($\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t$) no instante de tempo posterior possui a seguinte forma:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega(f), \quad (1.4)$$

onde Ω é o operador de colisão. A LBE pode ser vista como processo de dois estágios: primeiramente todas as distribuições são deslocadas para seus respectivos vizinhos (propagação, *streaming*, Fig. 6). Em seguida, são atualizadas de acordo com as seguintes regras de colisão:

$$f_i^{\text{pré-colisão}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t), \quad (1.5)$$

$$f_i^{\text{pós-colisão}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{\text{pré-colisão}}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) + \Omega(f). \quad (1.6)$$

O LB constitui-se num método mais eficiente que o seu precursor LGA, sendo amplamente mais utilizado. Mostrou-se especialmente útil no estudo de fluxos em geometrias complexas (por exemplo, meios porosos), dinâmica de suspensões coloidais e também em sistemas com vários componentes. O modelo, todavia, sofre de alguns problemas intrínsecos [3]. Um deles sendo o fato de a conservação da energia não ser plenamente satisfeita no atual modelo LG, fazendo com que ele seja geralmente restrito à aplicações isotérmicas (entretanto, existem generalizações recentes do modelo [10] que incluem a conservação da energia). Outro problema é a ausência de flutuações térmicas, o que em alguns casos pode tornar-se uma vantagem pois essas flutuações sempre são uma fonte de inexatidão. Porém, em alguns problemas físicos flutuações térmicas são essenciais para a descrição correta do sistema (por exemplo, movimento Browniano).

1.2.3 Dissipative Particle Dynamics (DPD)

Originalmente, o modelo DPD foi introduzido [11] como uma tentativa de "libertar" o LGA de uma rede regular mas que ainda fosse capaz de capturar efeitos hidrodinâmicos em escalas espacial e temporal muito maiores que aquelas atingidas com métodos de DM. O estado do fluido é descrito por N partículas com posições e velocidades contínuas. De maneira similar à dinâmica molecular (DM), a evolução temporal das partículas é obtida através da integração das equações de Newton.

A ideia primordial da DPD é considerar interações suaves (*soft*) e finitas numa simulação padrão de MD. Grandes escalas de tempo e espaço podem ser atingidas, capacitando assim a reprodução de fenômenos hidrodinâmicos relacionados a processos nas escalas mesoscópicas. Além disso, as interações entre as partículas possuem contribuições dissipativas \mathbf{F}_{ij}^D e estocásticas \mathbf{F}_{ij}^E , cujas amplitudes são regidas pelo teorema da flutuação-dissipação, representado pela equação (1.9), assim como um termo conservativo de interação fraca \mathbf{F}_{ij}^C . Assim, temos:

$$\mathbf{F}_i^{DPD} = \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^E + \mathbf{F}_{ij}^C, \quad (1.7)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma_{DPD} \omega_{DPD}(r_{ij}) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (1.8)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^E = \sqrt{2\gamma_{DPD} k_b T \omega_{DPD}(r_{ij})} \chi_{ij} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^C = a_{ij} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c} \right), \quad (1.10)$$

onde r_{ij} é a distância entre a partícula, $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ o versor que aponta de j para i , γ_{DPD} é o coeficiente de fricção e r_c é o raio de corte da interação. $\chi_{ij} = \chi_{ji}$ é um número aleatório simétrico com

média zero e variância 1. A variável ω_{DPD} é uma função denominada função peso e dada por:

$$\omega_{DPD}(r_{ij}) = \begin{cases} 1 - r_{ij}, & \text{se } r_{ij} \leq r_c, \\ 0, & \text{se } r_{ij} > r_c. \end{cases} \quad (1.11)$$

A razão das interações dissipativas e estocásticas entre as partículas deve ser entendida pelo fato de que cada partícula no método DPD corresponde não apenas a uma só molécula, mas sim um grupo delas. Ou seja, um partícula de DPD corresponde ao centro de massa de uma porção mesoscópica do fluido, grande o suficiente para ser um subsistema termodinâmico, mas ainda sujeito a flutuações térmicas [3]. A técnica foi desenvolvida de maneira que o número de partículas e o momento total são conservados, além do comportamento macroscópico ser hidrodinâmico.

Todavia, esse método possui desvantagens comparado ao DCMP. Como exemplo, sua dinâmica não é bem definida para passos de tempo Δt muito pequenos, ao contrário da DCMP, no qual o passo de tempo pode ser arbitrário [12]. Além disso, como veremos, a interação entre as partículas possuem uma forma bem mais simples no método DCMP.

1.2.4 Dinâmica de Colisão de Multipartículas (DCMP)

Essa técnica de simulação mesoscópica foi introduzida em 1999 [13] e constitui o tema central deste trabalho. Sua menção aqui é apenas informativa. Nos capítulos seguintes, a técnica será descrita em detalhes: seus princípios, aspectos teóricos, implementação numérica, simulações e resultados.

2 Aspectos Teóricos e Métodos Numéricos

Neste capítulo, serão abordados os aspectos teóricos e numéricos essenciais para a compreensão do método DCMP, com o objetivo de embasar o conhecimento necessário para o entendimento não apenas do método em si, mas também das simulações e resultados que serão apresentados nos capítulos seguintes. A abordagem teórica está ligada à mecânica analítica e mecânica estatística de equilíbrio, sendo interessante rever alguns conceitos básicos desses assuntos. Na parte numérica, são necessários os conceitos de rotações em duas e três dimensões, além do algoritmo de Euler e do método de células e listas, esses últimos utilizados para otimizar o tempo de processamento no cálculo de interações entre as partículas.

2.1 Conceitos de mecânica estatística

2.1.1 Espaço de fase

Trata-se de um espaço $2n$ dimensional (n são os graus de liberdade do sistema) que tem como eixos as coordenadas generalizadas q_i e os momentos canônicos p_i ($i = 1, \dots, n$). Um ponto no espaço de fase, ou seja, uma $2n$ -upla da forma $(q, p) \equiv (q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$, determina o estado de um sistema, isto é, sua configuração (posições das partículas) e a taxa temporal desta configuração (velocidades das partículas) num dado instante [14].

Cada ponto do espaço de fase representa uma solução das equações de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.1)$$

As equações de Hamilton formam um conjunto de $2n$ equações diferenciais de primeira ordem, e, dadas as condições iniciais $(q_0, p_0) \equiv (q_1(t_0), \dots, q_n(t_0), p_1(t_0), \dots, p_n(t_0))$, um teorema de existência e unicidade garante que existe apenas uma única solução $(q(t), p(t))$ para as equações de Hamilton. Assim, por cada ponto do espaço de fase passa uma única trajetória dinâmica $(q(t), p(t))$, e duas trajetórias distintas nunca se tocam.

Na mecânica estatística, especificar o conjunto $(q(t), p(t))$ num determinado instante significa especificar o microestado no qual o sistema se encontra. Logo, os pontos do espaço de fase representam os diversos microestados acessíveis ao sistema.

2.1.2 Ensemble

O *ensemble*, ou conjunto estatístico [15], é um conjunto de um número \aleph muito grande de cópias mentais do sistema, do ponto de vista macroscópico. Por exemplo, seja um sistema termodinâmico isolado, fechado e de volume fixo. Os valores dados das variáveis termodinâmicas macroscópicas U (energia interna), V (volume) e N (número de partículas) são vínculos externos e suficientes para determinar o estado termodinâmico do sistema. Embora todos os membros do *ensemble* sejam idênticos do ponto de vista macroscópico, ou seja, possuem os mesmos valores U, V e N , eles não são iguais do ponto de vista microscópico. Em geral, há um grande número de microestados (pontos do espaço de fase $(q(t), p(t))$) correspondentes a um dado estado termodinâmico ou macroestado do sistema. Em qualquer instante, num *ensemble* construído por replicação de um dado sistema termodinâmico sob certos vínculos, os membros do *ensemble* encontram-se distribuídos pelos diferentes microestados acessíveis [15]. O conceito de *ensemble* é fundamental na relação entre média temporal e média de *ensemble*.

Suponha que desejamos determinar experimentalmente o valor de alguma propriedade A de um sistema. Em geral, as propriedades de um sistema dependem apenas da posição e momento das partículas que o constituem. Assim, podemos escrever o valor de A como $A = A(q_1(t), \dots, q_n(t), p_1(t), \dots, p_n(t))$. Obviamente, o valor instantâneo de A varia ao decorrer do tempo como resultado das interações entre as partículas. O valor final obtido experimentalmente é uma média sobre os valores de A medidos ao longo de um certo intervalo de tempo, chamada *média temporal*. Quanto maior o tempo que passamos medindo o valor de A e calculando suas médias, mais a média experimental se aproxima do valor médio real de A [16]. No caso em que o tempo total das várias medidas realizadas τ for exageradamente grande:

$$\bar{A} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t=0}^{\tau} A(q_1(t), \dots, q_n(t), p_1(t), \dots, p_n(t)) dt. \quad (2.2)$$

Na mecânica estatística de equilíbrio, utiliza-se a *hipótese ergódica*, a qual afirma que o valor da média temporal (2.2) pode ser obtido por uma média no espaço de fase, calculada sobre todos os membros do *ensemble*, a *média de ensemble*:

$$\langle A \rangle = \int A(q, p) \rho(q, p) dq dp, \quad (2.3)$$

onde $\rho(q, p)$ é a *densidade de probabilidade* do *ensemble* e representa a probabilidade de encontrar um estado com coordenadas $\{q_i\}$ e momentos canônicos $\{p_i\}$. Na equação (2.2) o tempo total τ é grande o suficiente para que a trajetória do sistema físico no espaço de fase visite todos os pontos de *ensemble*, justificando portanto a equivalência entre \bar{A} e $\langle A \rangle$. Um fato interessante pois mostra a equivalência entre dois procedimentos completamente diferentes.

Se o número de partículas, o volume e a temperatura do sistema forem constantes,

teremos um *ensemble canônico*, onde a distribuição de probabilidade é dada pela distribuição de Boltzmann:

$$\rho(q, p) = \frac{\exp[-H(q, p)/k_B T]}{Z}. \quad (2.4)$$

Na equação (2.4), $H(q, p)$ é o Hamiltoniano, Z é a função de partição, k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura.

A função de partição Z , possui um papel fundamental no *ensemble* canônico, pois, se conhecida, a média de qualquer propriedade a priori pode ser calculada de acordo com a (2.3). Em sua forma mais simples [17], para um sistema com níveis discretos de energia, ela possui a forma

$$Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T}. \quad (2.5)$$

2.1.3 Teorema da equipartição

O teorema da equipartição é um resultado geral da mecânica clássica, com importante aplicação em mecânica estatística. Ele nos fornece uma relação entre as coordenadas e momentos generalizados com a temperatura do sistema, e, numericamente, esse fato será empregado na definição de temperatura do método DCMP. A demonstração será feita do ponto de vista da mecânica estatística.

Considere-se um sistema em contato com um reservatório de temperatura e especificado classicamente pela $2n$ -upla $(q, p) \equiv (q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$, e cujo Hamiltoniano é $H(q, p)$. Da mecânica clássica [14], o Hamiltoniano está intimamente relacionado com a energia do sistema, e, neste caso, representa a energia do mesmo no microestado em questão. A probabilidade [15, 17] que o sistema se encontre num dado microestado é, portanto, dada pela expressão (2.4). A função de partição [15], no caso de um sistema clássico, é

$$Z = \int \dots \int e^{-\beta H(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)} dq_1 \dots dq_n dp_1 \dots dp_n. \quad (2.6)$$

Onde $\beta = 1/k_B T$. Suponhamos, que o Hamiltoniano contenha um termo que é quadrático numa das n coordenadas ou momentos $q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n$. Designemos essa coordenada ou momento por ξ e escrevamos o Hamiltoniano na seguinte forma:

$$H(q, p) = A\xi^2 + H', \quad (2.7)$$

onde A e H' não dependem de ξ , mas podem depender de qualquer das outras coordenadas ou momentos. Substituindo (2.7) em (2.4) e (2.6), vem que:

$$\rho = \frac{e^{-\beta A \xi^2}}{\int e^{-\beta A \xi^2} d\xi} \cdot \left[\frac{e^{-\beta H'}}{\int e^{-\beta H'} \prod_{i \neq \xi} dq_i dp_i} \right]. \quad (2.8)$$

Calculando o valor médio de $A\xi^2$ pela eq. (2.3), temos:

$$\begin{aligned}\langle A\xi^2 \rangle &= \int A\xi^2 \rho(q, p) \prod_i dq_i dp_i \\ &= \frac{\int A\xi^2 e^{-\beta A\xi^2} d\xi}{\int e^{-\beta A\xi^2} d\xi} \cdot \left[\frac{\int e^{-\beta H'} \prod_{i \neq \xi} dq_i dp_i}{\int e^{-\beta H'} \prod_{i \neq \xi} dq_i dp_i} \right] \\ &= \frac{\int A\xi^2 e^{-\beta A\xi^2} d\xi}{\int e^{-\beta A\xi^2} d\xi}.\end{aligned}$$

Sendo $\frac{\partial}{\partial \beta} (e^{-\beta A\xi^2}) = -A\xi^2 e^{-\beta A\xi^2}$, temos

$$\begin{aligned}&= \frac{-\int \frac{\partial}{\partial \beta} (e^{-\beta A\xi^2}) d\xi}{\int e^{-\beta A\xi^2} d\xi} \\ &= \frac{-\frac{\partial}{\partial \beta} \int e^{-\beta A\xi^2} d\xi}{\int e^{-\beta A\xi^2} d\xi} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \left(\int e^{-\beta A\xi^2} d\xi \right) \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \sqrt{\frac{\pi}{\beta A}} \right] \\ &= -\sqrt{\frac{\beta A}{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{A}} \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta^{-1/2}) \\ &= \beta^{1/2} \cdot \frac{\beta^{-3/2}}{2} \\ &= \frac{1}{2\beta} \\ \langle A\xi^2 \rangle &= \frac{k_B T}{2},\end{aligned}\tag{2.9}$$

como queríamos demonstrar. Notemos que o resultado é independente de A . No caso mais comum, $A = m/2$ e ξ é uma das componentes da velocidade \mathbf{v} de uma partícula do sistema. Daí vem que:

$$\left\langle \frac{mv_x^2}{2} \right\rangle = \left\langle \frac{mv_y^2}{2} \right\rangle = \left\langle \frac{mv_z^2}{2} \right\rangle = \frac{k_B T}{2}.\tag{2.10}$$

Logo, a energia cinética média de uma partícula seria:

$$\begin{aligned}\langle E_c \rangle &= \langle mv_x^2/2 \rangle + \langle mv_y^2/2 \rangle + \langle mv_z^2/2 \rangle \\ &= \frac{3k_B T}{2}.\end{aligned}\tag{2.11}$$

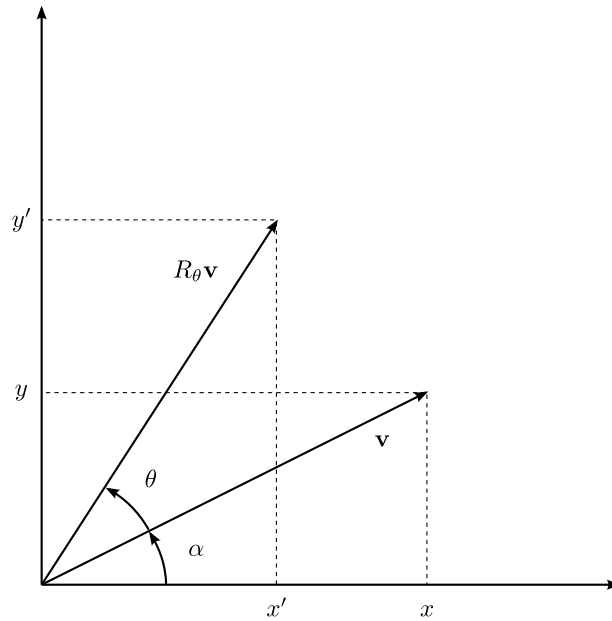


Figura 7: Representação gráfica da rotação em duas dimensões.

2.2 Rotações

Rotações possuem um papel fundamental no método DCMP, tanto que o algoritmo mais conhecido e utilizado de DCMP é chamado de *dinâmica de rotação estocástica* (DRE). Nos próximos tópicos desta seção, serão descritos os formalismos teóricos para rotações em duas e três dimensões, onde, nesta última, veremos o interessante método dos quatérnions para rotações.

2.2.1 Rotacões em duas dimensões

A rotação em duas dimensões no plano de um ângulo θ em torno da origem do sistema de coordenadas, determinado pela base canônica tradicional $\{\mathbf{i} = (1, 0), \mathbf{j} = (0, 1)\}$, é uma transformação linear [18] $R_\theta : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ que a cada vetor $\mathbf{v} = (x, y)$ faz correspondente o vetor $R_\theta \mathbf{v} = (x', y')$ (Fig. 7).

Sendo $\|R_\theta \mathbf{v}\| = \|\mathbf{v}\| = r$, $x' = r \cos(\theta + \alpha)$ e $y' = r \sin(\theta + \alpha)$, temos:

$$x' = r \cos \theta \cos \alpha - r \sin \theta \sin \alpha, \quad (2.12)$$

$$y' = r \sin \theta \cos \alpha + r \cos \theta \sin \alpha, \quad (2.13)$$

$$x = r \cos \alpha, \quad (2.14)$$

$$y = r \sin \alpha. \quad (2.15)$$

Substituindo (2.14) e (2.15) em (2.12) e (2.13), temos:

$$x' = x \cos \theta - y \operatorname{sen} \theta, \quad (2.16)$$

$$y' = x \operatorname{sen} \theta + y \cos \theta, \quad (2.17)$$

ou, na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\operatorname{sen} \theta \\ \operatorname{sen} \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}. \quad (2.18)$$

Assim, o operador de rotação R_θ possui a forma explícita:

$$R_\theta = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\operatorname{sen} \theta \\ \operatorname{sen} \theta & \cos \theta \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Antes de encerrar este tópico, registremos o fato de que a matriz de rotação (2.13) não é somente uma coleção de quatro números arbitrários. Os coeficientes da matriz são independentes e possuem as seguintes propriedades.

- As colunas de R_θ são *mutuamente ortogonais*, isto é

$$\cos \theta \operatorname{sen} \theta + (-\operatorname{sen} \theta) \cos \theta = -1.$$

- As colunas de R_θ têm módulo 1, isto é

$$\begin{aligned} \cos^2 \theta + \operatorname{sen}^2 \theta &= 1, \\ (-\operatorname{sen} \theta)^2 + \cos^2 \theta &= 1. \end{aligned}$$

- As linhas de R_θ também são ortogonais duas a duas e possuem módulo 1.

As matrizes (não só em duas dimensões) que satisfazem as três propriedades são chamadas de *ortogonais*. As matrizes que representam rotações de sistemas cartesianos ortogonais no espaço são ortogonais e possuem seu determinante igual a 1 [19].

2.2.2 Rotações em três dimensões (quatérnions)

Da mesma maneira que no caso bidimensional, a abordagem matricial também pode ser aplicada para três dimensões. Em resumo [14], uma rotação geral envolveria a aplicação de três operadores: R_ϕ , R_θ e R_ψ , onde os ângulos ϕ , θ e ψ são os ângulos de Euler.

Porém, um método mais elegante e de mais fácil implementação, é o dos quatérnions. Um quatérnion é uma 4-upla, cuja representação é mais concisa do que uma matriz de rotação. Além disso, seu significado geométrico é visualizado mais facilmente e sua álgebra

simplifica de maneira significativa a composição de rotações (rotações sucessivas).

2.2.2.1 Definição de quatérnion

Um quatérnion q é definido como a soma de um escalar q_0 e um vetor $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$:

$$q = q_0 + \mathbf{q} = q_0 + q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}. \quad (2.20)$$

onde $\mathbf{i} = (1, 0, 0)$, $\mathbf{j} = (0, 1, 0)$ e $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$ são os membros da base canônica do \mathbb{R}^3 .

2.2.2.2 Adição e multiplicação

A adição de dois quatérnions é efetuada componente a componente. Mais especificamente, consideremos o quatérnion q acima, equação (2.20) e outro quatérnion

$$p = p_0 + p_1\mathbf{i} + p_2\mathbf{j} + p_3\mathbf{k}. \quad (2.21)$$

Dáí vem que

$$p + q = (p_0 + q_0) + (p_1 + q_1)\mathbf{i} + (p_2 + q_2)\mathbf{j} + (p_3 + q_3)\mathbf{k}. \quad (2.22)$$

Para cada quatérnion q existe um quatérnion $-q$ com componentes $-q_i$, $i = 0, 1, 2, 3$.

O produto entre dois quatérnions satisfaz as seguintes relações:

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = \mathbf{ijk} = -1, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{ij} = \mathbf{k} = -\mathbf{ji}, \quad (2.24)$$

$$\mathbf{jk} = \mathbf{i} = -\mathbf{kj}, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{ki} = \mathbf{j} = -\mathbf{ik}. \quad (2.26)$$

Vale ressaltar que as relações (2.24), (2.25) e (2.26) decorrem todas de (2.23), sendo mais conhecidas como *relações de Hamilton*. Como exemplo, provemos então a (2.24):

$$\mathbf{ijk} = -1,$$

$$\mathbf{ijk}^2 = -\mathbf{k},$$

$$\mathbf{ij}(-1) = -\mathbf{k},$$

$$\mathbf{ij} = \mathbf{k}.$$

É possível fazer uma analogia do produto entre os quatérnions \mathbf{i} , \mathbf{j} e \mathbf{k} com o produto vetorial usual do \mathbb{R}^3 . A diferença, no caso dos quatérnions, é que o produto de um deles por ele mesmo (por exemplo, \mathbf{i}^2) é sempre -1 , enquanto no produto vetorial ($\mathbf{i} \times \mathbf{i}$) seria zero.

Munidos das relações acima, é possível agora definir o produto entre dois quatérnions arbitrários p e q . Assim:

$$\begin{aligned} pq &= (p_0 + p_1\mathbf{i} + p_2\mathbf{j} + p_3\mathbf{k})(q_0 + \mathbf{q} = q_0 + q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}) \\ &= p_0q_0 - (p_1q_1 + p_2q_2 + p_3q_3) + p_0(q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}) + q_0(p_1\mathbf{i} + p_2\mathbf{j} + p_3\mathbf{k}) \\ &\quad + (p_2q_3 - p_3q_2)\mathbf{i} + (p_3q_1 - p_1q_3)\mathbf{j} + (p_1q_2 - p_2q_1)\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

A equação (2.27) pode ser simplificada se utilizarmos as expressões para o produto escalar e produto vetorial entre \mathbf{p} e \mathbf{q}

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = p_1q_1 + p_2q_2 + p_3q_3, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{p} \times \mathbf{q} = (p_2q_3 - p_3q_2)\mathbf{i} + (p_3q_1 - p_1q_3)\mathbf{j} + (p_1q_2 - p_2q_1)\mathbf{k}. \quad (2.29)$$

Substituindo as expressões (2.28) e (2.29) na (2.27), temos:

$$pq = p_0q_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + p_0\mathbf{q} + q_0\mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{q}. \quad (2.30)$$

2.2.2.3 Complexo conjugado, norma e inverso

Seja $q = q_0 + \mathbf{q}$ um quatérnion. O *complexo conjugado* de q , denominado q^* , é definido como:

$$q^* = q_0 - \mathbf{q} = q_0 - q_1\mathbf{i} - q_2\mathbf{j} - q_3\mathbf{k}. \quad (2.31)$$

Da definição acima, temos

$$\begin{aligned} (q^*)^* &= q_0 - (-\mathbf{q}) = q, \\ q + q^* &= 2q_0, \\ q^*q &= (q_0 - \mathbf{q})(q_0 + \mathbf{q}) \\ &= q_0q_0 - (-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q} + q_0\mathbf{q} + (-\mathbf{q})q_0 + (-\mathbf{q}) \times \mathbf{q} \\ &= q_0^2 + \mathbf{q} \cdot \mathbf{q} \\ &= q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 \\ &= qq^*. \end{aligned}$$

Dados dois quatérnions p e q , pode-se verificar facilmente que

$$(pq)^* = q^*p^*. \quad (2.32)$$

A *norma* de um quatérnion q , denotada por $|q|$, é o escalar $|q| = \sqrt{q^*q}$. Um quatérnion é dito *unitário* se a sua norma é 1. A norma do produto entre dois quatérnions p e q é o

produto de suas normas individuais, pois

$$\begin{aligned}
 |pq|^2 &= (pq)(pq)^* \\
 &= pqq^*p^* \\
 &= p|q|^2p^* \\
 &= pp^*|q|^2 \\
 &= |p|^2|q|^2.
 \end{aligned}$$

O *inverso* de um quatérnion q é definido como

$$q^{-1} = \frac{q^*}{|q|^2}. \quad (2.33)$$

Pode-se verificar por aplicação direta de (2.33) que $q^{-1}q = qq^{-1} = 1$. No caso de q ser unitário, o inverso é seu próprio complexo conjugado q^* .

2.2.2.4 Operador de rotação

Veremos agora como um quatérnion, que pertence ao \mathbb{R}^4 , opera num vetor do \mathbb{R}^3 . Primeiramente, interpretamos um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$ como um *quatérnion puro*, cuja parte real é zero (Fig. 8). Tomando um quatérnion unitário $q = q_0 + \mathbf{q}$, temos que $q_0^2 + \|\mathbf{q}\|^2 = 1$. Logo, deve existir um ângulo θ de maneira que

$$\begin{aligned}
 \cos^2 \theta &= q_0^2, \\
 \sin^2 \theta &= \|\mathbf{q}\|^2.
 \end{aligned}$$

Considerando a solução para o seno onde $\sin \theta = \|\mathbf{q}\|$, existe apenas um $\theta \in [0, \pi]$ tal que $\cos \theta = q_0$. Podemos agora escrever q em termos do ângulo θ e do vetor unitário $\mathbf{u} = \mathbf{q}/\|\mathbf{q}\|$:

$$q = \cos \theta + \mathbf{u} \sin \theta. \quad (2.34)$$

Utilizando o quatérnion unitário q , definimos sobre os vetores do \mathbb{R}^3 o operador de rotação $L_q(\mathbf{v})$:

$$L_q(\mathbf{v}) = qvq^* \quad (2.35)$$

onde $v = 0 + \mathbf{v}$ é o quatérnion puro correspondente ao vetor \mathbf{v} . Pela (2.30), temos:

$$L_q(\mathbf{v}) = q(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q} + q_0\mathbf{v} - \mathbf{v} \times \mathbf{q})$$

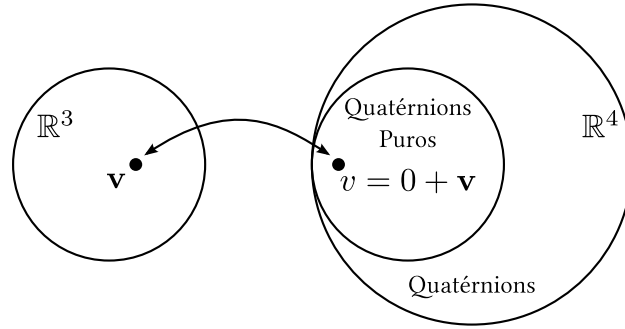


Figura 8: Representação de um vetor \mathbf{v} no \mathbb{R}^3 como um quatérnio imaginário no \mathbb{R}^4 .

$$\begin{aligned}
 &= q_0(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}) - \mathbf{q} \cdot (q_0 \mathbf{v} - \mathbf{v} \times \mathbf{q}) + q_0(q_0 \mathbf{v} - \mathbf{v} \times \mathbf{q}) \\
 &\quad + \mathbf{q}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}) + \mathbf{q} \times (q_0 \mathbf{v} - \mathbf{v} \times \mathbf{q}) \\
 &= q_0^2 \mathbf{v} - q_0(\mathbf{v} \times \mathbf{q}) + \mathbf{q}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}) + q_0(\mathbf{q} \times \mathbf{v}) - \mathbf{q} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{q}) \\
 &= q_0^2 \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{q})\mathbf{q} + 2q_0(\mathbf{q} \times \mathbf{v}) - \mathbf{q} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{q}).
 \end{aligned}$$

Utilizando a identidade vetorial $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ para o último termo da equação acima:

$$L_q(\mathbf{v}) = (q_0^2 - \|\mathbf{q}\|^2)\mathbf{v} + 2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{v})\mathbf{q} + 2q_0(\mathbf{q} \times \mathbf{v}). \quad (2.36)$$

Podemos fazer duas observações. Primeiramente, o operador de rotação (2.36) não altera o módulo do vetor \mathbf{v} :

$$\begin{aligned}
 \|L_q(\mathbf{v})\| &= \|qvq^*\| \\
 &= \|q\| \cdot \|v\| \cdot \|q^*\| \\
 &= \|v\| \\
 &= \|\mathbf{v}\|.
 \end{aligned}$$

Além disso, se \mathbf{v} for paralelo a \mathbf{q} , sua direção é invariante sob uma aplicação de L_q . Para provar esta afirmação, tomemos $\mathbf{v} = k\mathbf{q}$ e substituimos na (2.36), assim

$$\begin{aligned}
 L_q(k\mathbf{q}) &= q(k\mathbf{q})q^* \\
 &= (q_0^2 - \|\mathbf{q}\|^2)(k\mathbf{q}) + 2(\mathbf{q} \cdot k\mathbf{q})\mathbf{q} + 2q_0(\mathbf{q} \times k\mathbf{q}) \\
 &= k(q_0^2 + \|\mathbf{q}\|^2)\mathbf{q} \\
 &= k\mathbf{q}.
 \end{aligned}$$

As considerações acima sugerem que o operador L_q atua como uma rotação em torno de \mathbf{q} . O teorema a seguir confirma este fato.

Teorema. Para qualquer quatérnio unitário

$$q = q_0 + \mathbf{q} = \cos \frac{\theta}{2} + \mathbf{u} \operatorname{sen} \frac{\theta}{2}, \quad (2.37)$$

e para qualquer vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$, a ação do operador

$$L_q(\mathbf{v}) = q\mathbf{v}q^* \quad (2.38)$$

em \mathbf{v} é equivalente a uma rotação do vetor de um ângulo θ em torno de \mathbf{u} .

Demonstração. Seja um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$. Vamos escrevê-lo como $\mathbf{v} = \mathbf{a} + \mathbf{n}$, onde \mathbf{a} é a componente na direção do vetor \mathbf{q} e \mathbf{n} é a componente normal a \mathbf{q} . Sendo o operador L_q linear, temos

$$\begin{aligned} L_q(\mathbf{a} + \mathbf{n}) &= L_q(\mathbf{a}) + L_q(\mathbf{n}) \\ &= \mathbf{a} + L_q(\mathbf{n}), \end{aligned}$$

onde utilizamos o fato de \mathbf{a} ser invariante sob L_q . Analisando agora o efeito de L_q sobre a componente ortogonal \mathbf{n} , temos

$$\begin{aligned} L_q(\mathbf{n}) &= (q_0^2 - \|\mathbf{q}\|^2)\mathbf{n} + 2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})\mathbf{q} + 2q_0(\mathbf{q} \times \mathbf{n}) \\ &= (q_0^2 - \|\mathbf{q}\|^2)\mathbf{n} + 2q_0(\mathbf{q} \times \mathbf{n}) \\ &= (q_0^2 - \|\mathbf{q}\|^2)\mathbf{n} + 2q_0 \|\mathbf{q}\| (\mathbf{u} \times \mathbf{n}), \end{aligned}$$

no último passo foi utilizada a relação $\mathbf{u} = \mathbf{q}/\|\mathbf{q}\|$ (versor na direção de \mathbf{q}). Fazendo $\mathbf{n}_\perp = \mathbf{u} \times \mathbf{n}$, a última equação fica da seguinte forma

$$L_q(\mathbf{n}) = (q_0^2 - \|\mathbf{q}\|^2)\mathbf{n} + 2q_0 \|\mathbf{q}\| \mathbf{n}_\perp. \quad (2.39)$$

Note que \mathbf{n}_\perp e \mathbf{n} possuem o mesmo módulo:

$$\|\mathbf{n}_\perp\| = \|\mathbf{n} \times \mathbf{u}\| = \|\mathbf{n}\| \|\mathbf{u}\| \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} = \|\mathbf{n}\|. \quad (2.40)$$

Finalmente, utilizando (2.37), reescrevemos (2.39) na forma

$$\begin{aligned} L_q(\mathbf{n}) &= \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right) \mathbf{n} + \left(2 \cos \frac{\theta}{2} \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \right) \mathbf{n}_\perp \\ &= \cos \theta \cdot \mathbf{n} + \operatorname{sen} \theta \cdot \mathbf{n}_\perp. \end{aligned}$$

Logo, o vetor resultante é uma rotação de \mathbf{n} de um ângulo θ no plano definido por \mathbf{n} e \mathbf{n}_\perp . Além disso, é claramente ortogonal ao eixo de rotação \mathbf{q} (Fig. 9). \square

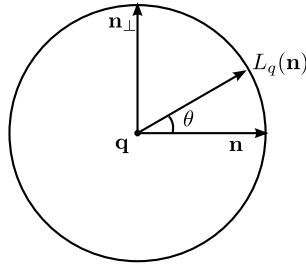


Figura 9: Disposição no plano dos vetores \mathbf{n} , \mathbf{n}_\perp e $L_q(\mathbf{n})$.

Podemos substituir o quatérnio unitário (2.37) em (2.36) para obter o vetor $L_q(\mathbf{v})$ rotacionado em termos de \mathbf{v} , \mathbf{u} e θ :

$$\begin{aligned} L_q(\mathbf{v}) &= \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \mathbf{v} + 2 \left(\mathbf{u} \sin \frac{\theta}{2} \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{u} \sin \frac{\theta}{2} + 2 \cos \frac{\theta}{2} \left(\mathbf{u} \sin \frac{\theta}{2} \times \mathbf{v} \right) \\ &= \cos \theta \cdot \mathbf{v} + (1 - \cos \theta) (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{u} + \sin \theta \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Sendo a equação acima a que será implementada nas simulações do método DCMP.

2.3 Métodos numéricos

2.3.1 Algoritmo de Euler

No capítulo seguinte, veremos que uma das etapas fundamentais do método DCMP é aquela na qual as partículas do fluido se propagam sem levar em consideração as colisões entre elas (*streaming*). Nesta etapa, as partículas se propagam segundo o algoritmo de Euler. A seguir, apresentaremos os princípios desse algoritmo numérico.

2.3.1.1 Equações de primeira ordem

Seja t uma variável real definida no intervalo $[0, t_{max}]$. Inicialmente, apresentamos como se resolve numericamente uma equação diferencial de primeira ordem,

$$\frac{dx}{dt} \equiv \dot{x} = f(x, t), \quad (2.42)$$

com a condição inicial $x(0) = x_1$.

2.3.1.2 Derivada numérica

O primeiro passo no procedimento numérico para se obter uma solução de (2.42) consiste em discretizar a variável contínua t , ou seja, substituí-la por um conjunto discreto crescente [20]

$$t_1 = 0, t_2 = t_1 + \Delta t, t_3 = t_2 + \Delta t, \dots, t_n = t_{max}.$$

A solução da eq. (2.42) será um conjunto discreto

$$x_1, x_2, \dots, x_n. \quad (2.43)$$

Usando a notação acima e o símbolo \dot{x} para indicar a derivada numérica em relação a t , introduzimos então a *derivada numérica à esquerda*

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{t \rightarrow t_j^-} \equiv \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t}, \quad (2.44)$$

e a *derivada à direita*

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{t \rightarrow t_j^+} \equiv \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t}. \quad (2.45)$$

Calculando a média aritmética das eqs. (2.44) e (2.45) obtém-se a forma centrada

$$\begin{aligned} \dot{x}_j &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{dx}{dt}\right)_{t \rightarrow t_j^-} + \left(\frac{dx}{dt}\right)_{t \rightarrow t_j^+} \right] \\ &= \frac{x_{j+1} - x_{j-1}}{2\Delta t}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Usando a forma dada na eq. (2.45), escrevemos a eq. (2.42) como

$$x_{j+1} = x_j + f(x_j, t_j)\Delta t \quad (2.47)$$

e, por recorrência se obtém todo o conjunto x_j a partir de x_1 (onde supõe-se que $f(x_j, t_j)$ é uma função conhecida). Este método de solução numérica de equações diferenciais de primeira ordem se chama *método de Euler* [20].

Alternativamente, usando a forma dada na eq. (2.46), escrevemos a eq. (2.42) como

$$x_{j+1} = x_{j-1} + 2f(x_j, t_j)\Delta t. \quad (2.48)$$

Essa forma é um pouco mais complicada de usar porque para calcular x_2 necessitamos do valor de x_0 , que não está definido; e para calcular x_3 precisamos de x_1 (condição inicial dada) e x_2 , que não foi calculado. É possível contornar este problema usando a eq. (2.47) apenas para calcular x_2 , e a partir de x_3 usar a eq. (2.48).

2.3.1.3 Erro na derivação numérica

Vamos reescrever a eq. (2.45) na forma

$$x(t_j + \Delta t) = x(t_j) + \dot{x}(t_j)\Delta t. \quad (2.49)$$

Para que a (2.49) se torne mais exata é necessário acrescentar mais termos da série de Taylor, ou seja,

$$x(t_j + \Delta t) = x(t_j) + \dot{x}(t_j)\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{x}(t_j)(\Delta t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (2.50)$$

O símbolo $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ indica que o erro dessa equação, por não incluir os termos subsequentes da série, é da ordem de $(\Delta t)^3$. Assim, o erro da eq. (2.49) é $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Como esse erro ocorre no ponto t_j , onde se está fazendo a derivação, ele se chama "erro local". Ao integrar-se uma equação com n pontos t_j , diz-se que o "erro global" é $n = t_{max}/\Delta t$ vezes a ordem do erro local [20]. No caso da eq. (2.49), o erro global é $\mathcal{O}(\Delta t)$.

O método de Euler apresentado pela eq. (2.49), é dito um método de *primeira ordem* porque o erro local é de *segunda ordem* em Δt .

2.3.2 Método de células e listas (*linked list*)

Assim como o método de Euler é essencial para o passo de *streaming*, o método de células e listas é fundamental para a etapa de colisão da DCMP. Basicamente, o sistema é dividido em células, e para cada uma é criada uma lista de quais partículas estão localizadas naquela célula particular. Nos tópicos seguintes, descrevemos com mais detalhes de como é feita a implementação do método.

2.3.2.1 Células

Inicialmente, o sistema é dividido em pequenas células cúbicas de aresta a . O valor de a é geralmente tomado igual a 1, ou seja, a é a unidade de comprimento. Logo, para uma caixa de simulação de dimensões (L_x, L_y, L_z) , teremos $n_x = L_x$ células na direção x , $n_y = L_y$ células na direção y e $n_z = L_z$ células na direção z , num total de $n_x n_y n_z$ células.

Podemos identificar cada célula através de um vetor $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$ ($1 \leq c_x \leq L_x, 1 \leq c_y \leq L_y, 1 \leq c_z \leq L_z$), e um índice c (Fig. 10),

$$c = (c_x - 1)n_y n_z + (c_y - 1)n_z + c_z, \quad (2.51)$$

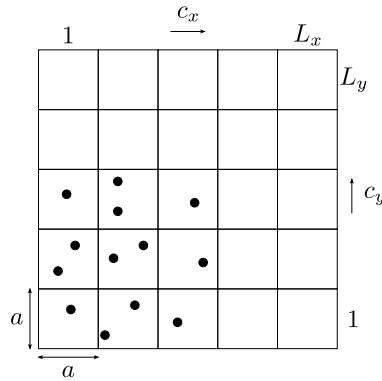


Figura 10: Sistema bidimensional dividido em células.

onde

$$c_x = \left\lfloor \frac{x}{a} \right\rfloor, \quad c_y = \left\lfloor \frac{y}{a} \right\rfloor, \quad c_z = \left\lfloor \frac{z}{a} \right\rfloor.$$

Nas equações acima, x , y e z seriam as coordenadas de uma partícula arbitrária e $\lfloor x \rfloor$ é uma função que retorna o valor do menor inteiro maior ou igual a x .

2.3.2.2 Listas

As partículas pertencentes à uma célula são organizados através de listas, assim, cada célula possui sua própria lista. As listas são criadas por meio de dois vetores (Fig. 11):

- *head*: vetor inteiro cuja dimensão é igual ao número de células existentes. O valor $head[i]$ corresponde ao primeiro elemento da lista da i -ésima célula, ou seja, é o cabeçalho da célula.
- *next*: vetor inteiro de dimensão igual ao número de partículas do programa. O valor $next[i]$ corresponde à partícula para qual a i -ésima partícula aponta. No caso do último elemento da lista, então seu valor será uma constante E (em nosso caso, $E = -1$), indicando o término da lista.

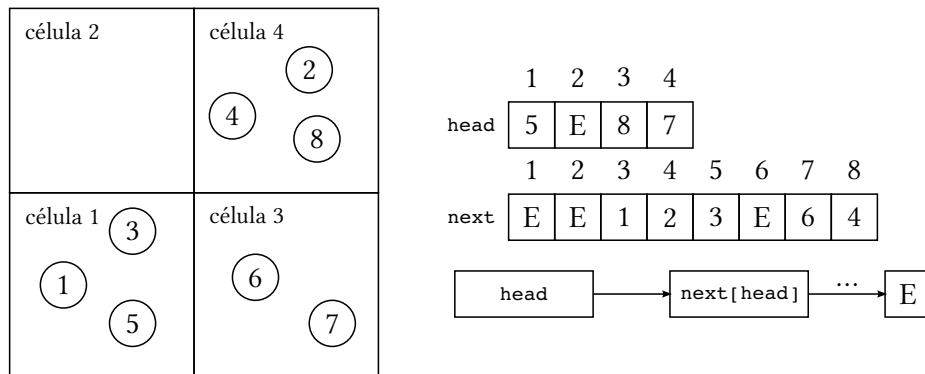


Figura 11: Ilustração do processo de construção das listas: são mostrados os elementos dos vetores *head* e *next*.

Da Fig. 11, podemos observar que a lista de cada célula se inicia com a partícula de maior índice, ou seja, o head de cada célula é a sua partícula de maior numeração. As listas são preenchidas começando a partir do último elemento (o de menor índice) até o primeiro (head da célula), em ordem crescente de numeração. A ligação entre os elementos da lista fornecida pelo vetor next, construído concomitantemente com a lista de partículas.

O algoritmo a seguir mostra o procedimento básico para a construção das células e listas:

Entrada: número de células (N_{cel}), número de partículas (N_{part}), cabeçalhos (head), ponteiros (next)

início

/*Reinicie os cabeçalhos, head*/

para ($c \leftarrow 1$ a N_{cel}) **faça**

head[c] \leftarrow E;

$c \leftarrow c + 1$;

fim

/*Laço sobre todas as partículas*/

para ($i \leftarrow 1$ a N_{part}) **faça**

/*Descubra os índices c_x, c_y, c_z para a i -ésima partícula*/

$c_x \leftarrow [x_i/a]$;

$c_y \leftarrow [y_i/a]$;

$c_z \leftarrow [z_i/a]$;

/*Através das componentes c_x, c_y, c_z , calcule o índice c da célula a qual a partícula pertence*/

$c \leftarrow (c_x - 1)n_y n_z + (c_y - 1)n_z + c_z$;

/*Aponte para o ocupante anterior da célula (ou E se for o primeiro)*/

next[i] \leftarrow head[c];

/*A partícula assume o cabeçalho da célula*/

head[c] $\leftarrow i$;

$i \leftarrow i + 1$;

fim

fim

3 Dinâmica de colisão de multipartículas

Neste capítulo, tratamos com maiores detalhes o método da dinâmica de colisão de multipartículas (DCMP). Inicialmente, será abordado o primeiro modelo [13] de DCMP, a *dinâmica de rotação estocástica* (DRE), na qual o processo de colisão é dado por rotações aleatórias das velocidades das partículas. Apesar de ser o primeiro modelo, ele ainda é o método de DCMP mais utilizado. O segundo método abordado [12, 21, 22], difere no fato de que existe um termostato embutido no seu algoritmo, sendo útil em situações onde a temperatura do sistema deve ser mantida constante. Além disso, é feita uma pequena análise qualitativa comparando os dois métodos. Por fim, serão discutidos os termostatos utilizados neste trabalho.

3.1 Descrição do modelo

Numa simulação de DRE, o fluido é modelado de maneira granular por N partículas pontuais numa caixa de simulação de dimensão linear L . O sistema (caixa) é dividido em células quadradas de lado a , o que corresponde a uma média de

$$\langle n \rangle = N \left(\frac{a}{L} \right)^d \quad (3.1)$$

partículas por célula (d é a dimensão espacial do sistema). Cada partícula é caracterizada por sua posição \mathbf{r}_i e velocidade \mathbf{v}_i ($i = 1, \dots, N$), que evoluem segundo elementos discretos de tempo Δt (Fig. 12). As massas m_i das partículas podem ser distintas, porém, geralmente são tomadas sendo igual a 1 (unidade de massa) [3].

O método DRE é composto de duas etapas principais, realizadas a cada passo de tempo. A primeira etapa é a de *streaming* (propagação), na qual as posições das partículas são atualizadas no tempo. Nesta etapa, são aplicadas as condições de contorno e quaisquer forças adicionais (por exemplo, forças externas). A segunda é a etapa de colisão, onde as partículas colidem entre si, como descrito mais adiante na seção 3.2.2.

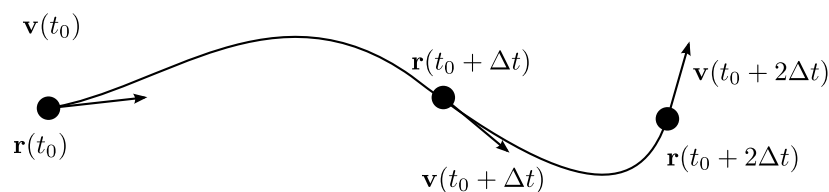
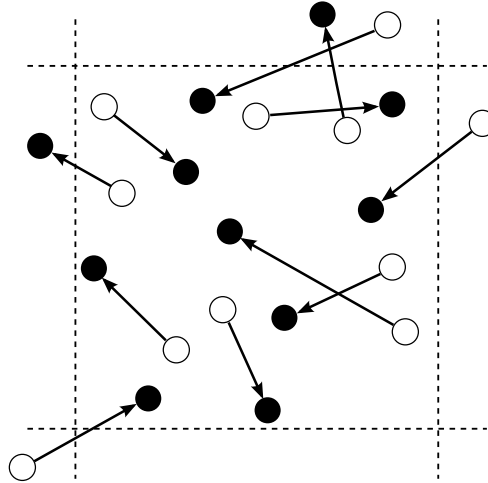


Figura 12: Trajetória de uma partícula arbitrária. Suas posições e velocidades evoluem em intervalos de tempo Δt .

Figura 13: *Streaming*.

3.2 Dinâmica

3.2.1 *Streaming*

O *streaming* é uma das etapas que constituem o cerne da simulação de DRE. Como mencionado anteriormente, as posições das partículas evoluem um passo de tempo Δt (Fig. 13). Em sua forma mais simples, a propagação é feita através do método de Euler (2.47),

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t. \quad (3.2)$$

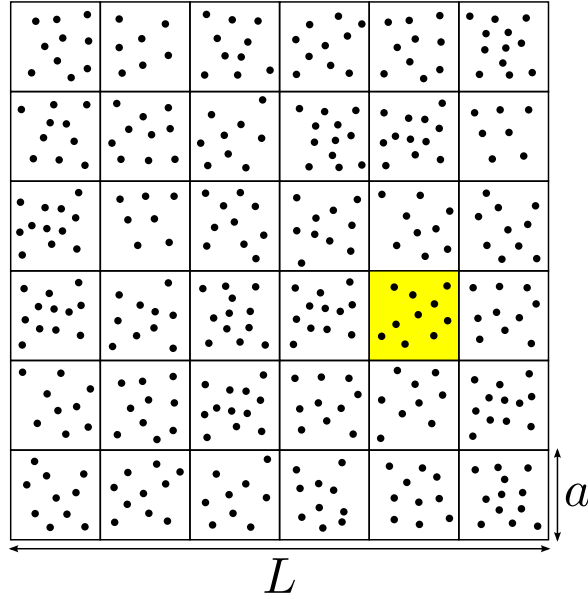
Durante o passo de *streaming*, dependendo do caso, forças adicionais podem ser aplicadas às partículas. Logo, suas velocidades também devem ser atualizadas de acordo. Por exemplo, se o sistema estiver sujeito a um campo gravitacional externo \mathbf{g} [21, 23], um termo de aceleração deve ser levado em conta nos incrementos das posições e velocidades:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{g}\Delta t^2, \quad (3.3)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \mathbf{g}\Delta t. \quad (3.4)$$

3.2.2 Colisão

Juntamente com o passo de *streaming*, a colisão também é uma etapa fundamental de uma simulação de DRE. Inicialmente, o sistema é dividido em células de lado a (Fig. 14). Cria-se assim uma grade de células, e é aqui que o método de células e listas apresentado no capítulo anterior (seção 2.3.2) se faz importante. Na prática [12], as distâncias são medidas em unidades de a , o que corresponde em fazer $a = 1$. O número médio de partículas por célula, $\langle n \rangle$, geralmente é escolhido entre 3 e 20.

Figura 14: Divisão do sistema em células de lado a .

3.2.2.1 Rotação aleatória

Após a criação das listas, ou seja, quando forem conhecidas as partículas que pertencem a cada célula, as colisões são realizadas. A colisão em si, é uma rotação R_α (α é um parâmetro de entrada na simulação) das velocidades relativas das partículas em relação ao centro de massa da célula correspondente. Ou seja, para a i -ésima partícula contida na c -ésima célula, temos:

$$\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t) \xrightarrow{\text{rotação}} R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)], \quad (3.5)$$

onde $\mathbf{u}_c(t)$ é a velocidade do centro de massa da c -ésima célula e dada por

$$\mathbf{u}_c(t) = \frac{\sum_{i=1}^{N_c} m_i \mathbf{v}_i(t)}{\sum_{i=1}^{N_c} m_i}, \quad (3.6)$$

ou, no caso em que $m_i = 1$,

$$\mathbf{u}_c(t) = \frac{\sum_{i=1}^{N_c} \mathbf{v}_i(t)}{N_c}. \quad (3.7)$$

Em (3.6) e (3.7), N_c é o número de partículas na célula c .

Todas as partículas de uma célula estão sujeitas à mesma rotação (o operador R_α é o mesmo), entretanto, R_α varia independentemente de célula para célula. Logicamente, a forma de R_α depende se a simulação é feita em duas ou três dimensões. Em duas dimensões [12], R_α é uma rotação de $\pm\alpha$, com probabilidade $1/2$ para ambos os casos (daí o nome rotação aleatória). Ou seja, em cada passo de tempo, o ângulo de rotação para uma célula arbitrária é $+\alpha$ ou $-\alpha$

$-\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$	$-\alpha$	$+\alpha$	$+\alpha$
$+\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$	$+\alpha$
$+\alpha$	$-\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$	$-\alpha$	$-\alpha$
$-\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$	$-\alpha$	$-\alpha$	$+\alpha$
$-\alpha$	$+\alpha$	$+\alpha$	$+\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$
$-\alpha$	$+\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$	$+\alpha$	$-\alpha$

Figura 15: Diagrama da rotação aleatória em duas dimensões.

(Fig. 15). Como trata-se de uma rotação em duas dimensões, R_α é da forma (2.19). Assim:

$$R_{\pm\alpha} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \mp \text{sen} \alpha \\ \pm \text{sen} \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Em três dimensões, existem duas maneiras. No primeiro [24], um dos três eixos cartesianos (x , y ou z) é escolhido aleatoriamente como eixo de rotação e uma rotação de $\pm\alpha$ é realizada em torno desse eixo. Logo, R_α terá uma das seguintes formas:

$$R_{\pm\alpha,x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & \mp \text{sen} \alpha \\ 0 & \pm \text{sen} \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, R_{\pm\alpha,y} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \pm \text{sen} \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ \mp \text{sen} \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix},$$

$$R_{\pm\alpha,z} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \mp \text{sen} \alpha & 0 \\ \pm \text{sen} \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

O segundo procedimento [12], o qual adotaremos neste trabalho, consiste em escolher uma direção aleatória para cada célula e realizar uma rotação de α em torno de um eixo definido de acordo com essa direção. Apesar de apresentar uma dificuldade maior na implementação, este caso introduz uma menor anisotropia no sistema [3].

Para definir o eixo de rotação, um vetor unitário \mathbf{q} é gerado através de uma distribuição uniforme sobre uma superfície esférica de raio 1. Ou seja, suas componentes q_x , q_y e q_z serão [21]:

$$q_x = \cos \phi \sqrt{1 - r^2}, \quad q_y = \text{sen} \phi \sqrt{1 - r^2}, \quad q_z = r, \quad (3.9)$$

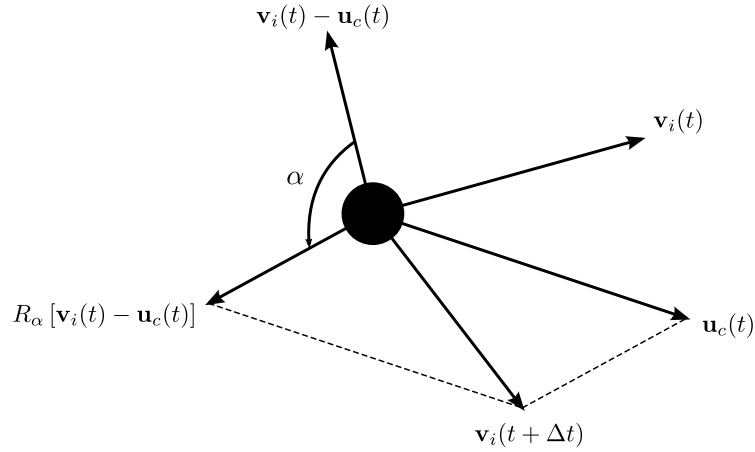


Figura 16: Disposição dos vetores envolvidos no processo de colisão.

onde $\phi = 2\pi R_1$, $r = 2R_2 - 1$. R_1 e R_2 são dois números aleatórios, não correlacionados, e sorteados de uma distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$.

Após definir o eixo \mathbf{q} segundo (3.9), utilizaremos o resultado do teorema do capítulo anterior (seção 2.2.2.4) para realizar a rotação das velocidades relativas $\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)$. Assim, devemos rotacionar as velocidades através de um operador $L_q(\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t))$. O quatérnio unitário q , de acordo com o teorema, deve ser da forma

$$q = \cos \frac{\alpha}{2} + \mathbf{q} \operatorname{sen} \frac{\alpha}{2}, \quad (3.10)$$

pois desejamos uma rotação de α na direção de \mathbf{q} . De acordo com (2.41), o vetor rotacionado $R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)]$ será:

$$\begin{aligned} R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)] = & \cos \alpha \cdot [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)] + (1 - \cos \alpha) \{ \mathbf{q} \cdot [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)] \} \mathbf{q} \\ & + \operatorname{sen} \alpha \cdot \{ \mathbf{q} \times [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)] \}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

3.2.2.2 Conservação da energia e momento

Após a rotação das velocidades relativas, chega-se a parte final do passo de colisão, na qual as velocidades das partículas são atualizadas da seguinte maneira:

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{u}_c(t) + R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}_c(t)]. \quad (3.12)$$

Isto implica que a magnitude e direção da velocidade de cada partícula são alterados no processo de colisão (16) de tal maneira, que para cada célula, o momento linear total e a energia cinética são conservados [3]. Para comprovar estas afirmações, provemos primeiramente a conservação do momento linear numa dada célula:

$$\begin{aligned}
\sum_i m_i \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \sum_i m_i \{ \mathbf{u}(t) + R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)] \} \\
&= \sum_i m_i \mathbf{u}(t) + \sum_i m_i R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)] \\
&= \left(\sum_i m_i \right) \mathbf{u}(t) + R_\alpha \left\{ \sum_i m_i [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)] \right\} \\
&= \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) + R_\alpha \left\{ \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) - \left(\sum_i m_i \right) \mathbf{u}(t) \right\} \\
&= \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) + R_\alpha \left\{ \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) - \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) \right\} \\
&= \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t).
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Para a conservação da energia, temos:

$$\begin{aligned}
\sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t + \Delta t) &= \sum_i \frac{m_i}{2} \{ \mathbf{u}(t) + R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)] \}^2 \\
&= \sum_i \frac{m_i}{2} u^2(t) + \sum_i m_i \mathbf{u}(t) \cdot R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)] \\
&\quad + \sum_i \frac{m_i}{2} \|R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]\|^2 \\
&= \left(\sum_i \frac{m_i}{2} \right) u^2(t) + \underbrace{\mathbf{u}(t) \cdot R_\alpha \sum_i m_i [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]}_{=0} \\
&\quad + \sum_i \frac{m_i}{2} \|R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]\|^2 \\
&= \left(\sum_i \frac{m_i}{2} \right) u^2(t) + \sum_i \frac{m_i}{2} \|R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]\|^2.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

O termo $\|R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]\|^2$ merece atenção especial. Se interpretarmos $R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]$ como o produto de um vetor por uma matriz, temos:

$$\|R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]\|^2 = [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]^T R_\alpha^T R_\alpha [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)],$$

como matrizes de rotação são ortogonais, $R_\alpha^T R_\alpha = 1$. Daí vem que

$$\begin{aligned}
&= [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)]^T [\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)] \\
&= \|\mathbf{v}_i(t) - \mathbf{u}(t)\|^2 \\
&= v_i^2(t) - 2\mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{u}(t) + u^2(t).
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Substituindo (3.15) em (3.14), temos

$$\begin{aligned}
\sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t + \Delta t) &= \left(\sum_i \frac{m_i}{2} \right) u^2(t) + \sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t) \\
&\quad - \sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{u}(t) + \left(\sum_i \frac{m_i}{2} \right) u^2(t) \\
&= \sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t) + \left(\sum_i m_i \right) u^2(t) - \left(\sum_i m_i \mathbf{v}_i(t) \right) \cdot \mathbf{u}(t) \\
&= \sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t) + \left(\sum_i m_i \right) u^2(t) - \left(\sum_i m_i \right) \mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{u}(t) \\
&= \sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t) + \left(\sum_i m_i \right) u^2(t) - \left(\sum_i m_i \right) u^2(t) \\
&= \sum_i \frac{m_i}{2} v_i^2(t).
\end{aligned}$$

3.2.3 *Random shift* (ajuste aleatório)

A grade de células, criada durante o processo de colisão, introduz um problema: se a grade permanecer fixa e o livre caminho médio das partículas não for grande o suficiente ($\approx a$), a invariância de Galileu é quebrada [3, 25]. Considere então dois sistemas, um sistema inercial e outro que se move com velocidade constante \mathbf{U} em relação ao primeiro. A menos que o deslocamento do sistema em movimento num passo de tempo Δt seja proporcional a um número inteiro de vezes o parâmetro de rede a , uma partícula no sistema em movimento terá posição relativa à rede de células diferente do que teria no sistema em repouso. Por causa disso, partículas participantes de um processo de colisão numa célula seriam diferentes nos dois sistemas, ocasionando um comportamento dinâmico distinto para ambos, quebrando assim a invariância de Galileu (Fig. 17).

Como mencionado anteriormente, essa quebra da invariância de Galileu é negligenciável se o livre caminho médio das partículas $\lambda = \Delta t \sqrt{k_B T / m a^2}$ é da ordem de a . Neste caso, a maioria das colisões envolvem partículas que acabaram de chegar de células diferentes, e assim, não estão correlacionadas. Após a colisão, as partículas imediatamente abandonam a célula atual em direção a outras, destruindo novamente qualquer correlação entre elas.

No caso em que λ/a é pequeno, um mesmo grupo de partículas colide várias vezes numa mesma célula antes de algumas dessas partículas deixarem a célula, ou mesmo antes de outras entrarem na célula. Assim, as partículas estão fortemente correlacionadas.

A solução para esse impasse, quando λ/a é pequeno, é o *random shift* (ajuste aleatório). Basicamente, realiza-se um deslocamento rígido \mathbf{d} em toda a grade antes do passo de colisão. Após as colisões serem realizadas, move-se novamente a grade para sua posição

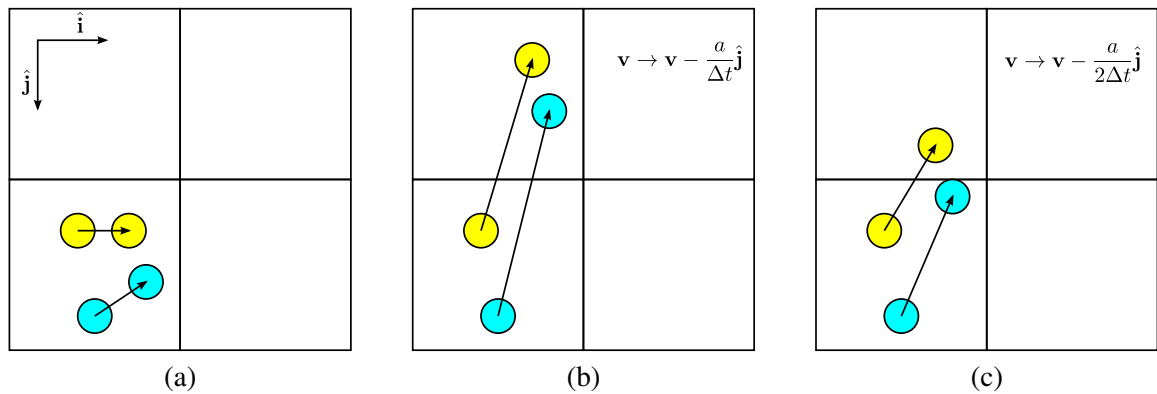


Figura 17: Análise do deslocamento de duas partículas durante um passo de tempo para três referenciais. a) Deslocamento das partículas para um sistema em repouso $\mathbf{U} = 0$. b) Deslocamento para um sistema em movimento onde $\mathbf{U} = (a/\Delta t)\hat{j}$. Apesar do deslocamento ser diferente de a), as partículas terminam seus movimentos numa mesma célula, o que corresponde a um mesmo processo de colisão. c) Deslocamento das partículas para um sistema onde $\mathbf{U} = (a/2\Delta t)\hat{j}$. As partículas terminam os movimentos em células distintas, ocasionando outro processo de colisão em relação aos anteriores.

original, ou seja, é feito um ajuste de $-\mathbf{d}$. As componentes de \mathbf{d} são números aleatórios, retirados de uma distribuição uniforme e contidas no intervalo $(0, a)$. Esse ajuste causa uma grande aleatoriedade nas posições das partículas de uma célula, pois, qualquer partícula possui igual probabilidade de estar em qualquer lugar da célula, tanto para um referencial em repouso quanto para um em movimento. Logo, a invariância de Galileu é restaurada, pois não há diferença entre os dois referenciais [25].

Na Fig. 18, a grade preta representa uma rede fixa, enquanto a grade vermelha representa uma das possíveis grades deslocadas através da aplicação de \mathbf{d} . Note que, se condições periódicas de contorno (seção 3.3.1) estivessem sendo utilizadas, a última coluna de células da direita teria de incluir as partículas localizadas na primeira coluna da esquerda, que estão “fora” da grade deslocada. Da mesma maneira, as células da primeira linha deveriam incluir as

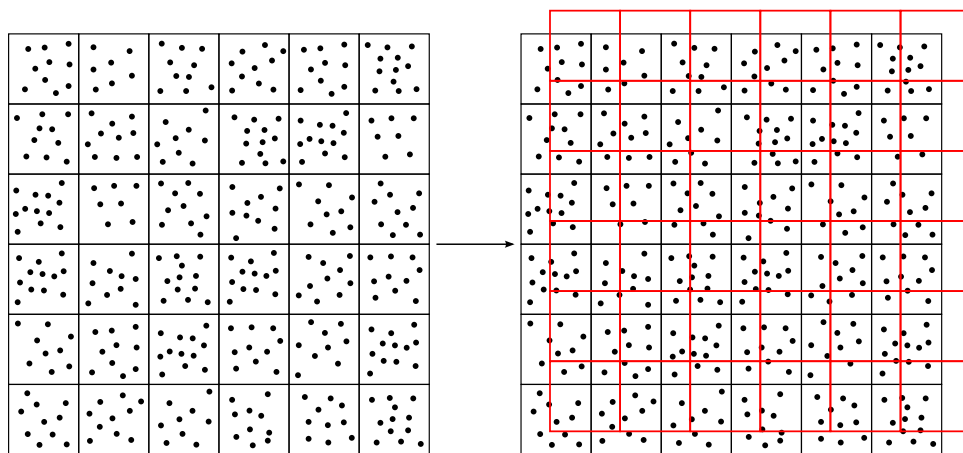


Figura 18: Ilustração indicando como as partículas mudam de célula em um *random shift*.

partículas que ficaram de fora na última linha.

3.2.4 DCMP com Termostato de Andersen

A rotação estocástica das velocidades relativas ao centro de massa (DRE) não é a única maneira de realizar colisões no método DCMP. Como vimos na seção 3.2.2, a energia é localmente conservada na DRE. Assim, para um sistema isolado e livre de influência externa, a energia permanece constante. Logo, teríamos um *ensemble* microcanônico. Nesta seção, apresentaremos um método diferente de colisão, na qual as simulações são feitas num *ensemble* canônico, no qual a temperatura do sistema permanece constante. Entretanto, primeiramente vamos expor em linhas gerais o termostato utilizado no método, proposto originalmente por Andersen [26].

3.2.4.1 O termostato de Andersen

No termostato de Andersen, o sistema no qual se deseja manter a temperatura constante é acoplado a um banho térmico (reservatório de calor) com a temperatura desejada. Esse acoplamento com o banho térmico é representado por forças estocásticas impulsivas, que atuam ocasionalmente em partículas sorteadas de maneira aleatória. As colisões estocásticas com o reservatório podem ser consideradas como passos de Monte Carlo que transportam o sistema de uma configuração de energia constante para outra. Entre as interações, o sistema evolui à energia constante de acordo com as leis de Newton do movimento. As forças estocásticas asseguram que todas as configurações de energia constante sejam visitadas, de acordo com o peso de Boltzmann $e^{-k_B T}$ [27].

A força de acoplamento com o reservatório é determinada pela frequência ν das colisões estocásticas. Se não há correlação entre duas colisões sucessivas, então, a distribuição de intervalos de tempo entre duas colisões sucessivas, $P(t; \nu)$, é do tipo Poisson [27]. Assim:

$$P(t; \nu) = \nu \exp[-\nu t], \quad (3.16)$$

onde $P(t; \nu)dt$ é a probabilidade da colisão acontecer no intervalo de tempo $[t, t + dt]$.

Uma simulação que utilize o termostato de Andersen consiste nos seguintes passos:

1. O sistema é inicializado com coordenadas $(\mathbf{r}_1(0), \dots, \mathbf{r}_N(0), \mathbf{p}_1(0), \dots, \mathbf{p}_N(0))$. Em seguida, as equações de movimento são integradas para um intervalo Δt .
2. Um certo número de partículas é selecionado para interagir (colidir) com o banho térmico. A probabilidade de uma partícula ser escolhida num passo de tempo é $\nu \Delta t$.
3. Para uma partícula selecionada, sua nova velocidade será retirada de uma distribuição de

Maxwell-Boltzmann (gaussiana) com média zero e variância T . Essa colisão não tem qualquer efeito sobre as outras partículas.

3.2.4.2 DCMP-TA

Apresentamos agora o método de DCMP utilizando o termostato de Andersen (*Dinâmica de Colisão de Multipartículas com Termostato de Andersen*, DCMP-TA). Neste caso, em vez de rotacionar as velocidades relativas ao centro de massa (DRE), novas velocidades ($\mathbf{v}_1^{ran}, \dots, \mathbf{v}_N^{ran}$) são geradas durante o passo de colisão. As componentes v_x^{ran} , v_y^{ran} e v_z^{ran} são números aleatórios sorteados de uma distribuição gaussiana, cuja média é zero e a variância é $k_B T$. A regra de colisão [12, 22], para uma célula arbitrária, será

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{u}(t) + \mathbf{v}_i^{ran} - \sum_{j=1}^{N_c} \mathbf{v}_j^{ran} / N_c, \quad (3.17)$$

onde N_c é o número de partículas da célula. Note que, comparando a eq. (3.17) com o termostato de Andersen original, no caso do DCMP-TA todas as partículas seriam escolhidas para colidirem com o reservatório num passo de tempo, como se a probabilidade de colisão $v\Delta t$ sempre tomasse o valor 1.

É importante ressaltar que é possível realizar simulações no *ensemble* canônico utilizando a DRE, porém, é necessário reescalonar as velocidades após o passo de colisão utilizando algum termostato.

3.2.4.3 Comparações entre o DCMP-TA e a DRE

Como são gerados d números aleatórios para cada partícula (componentes de \mathbf{v}^{ran}) na etapa de colisão, onde d é a dimensão espacial do sistema, a velocidade do gerador de números aleatórios é um fator limitante para o DCMP-TA. Em contraste, a DRE é quase indiferente à velocidade do gerador de números aleatórios, pois são gerados apenas $d - 1$ números por célula numa etapa de colisão. Comparações entre os dois métodos para sistemas bidimensionais mostram que uma simulação de DCMP-TA é 2 a 3 vezes mais lenta que a DCMP [12].

Outra importante diferença entre os dois métodos é a relação entre o tempo de relaxação e o número de partículas por célula: enquanto no DCMP-TA o tempo de relaxação geralmente *diminui* com o número de partículas por célula, na DRE ocorre o oposto. Um grande tempo de relaxação significa que um grande número de passos é necessário para que as propriedades do sistema atinjam seus valores assintóticos (por exemplo, os coeficientes de transporte). Como consequência [12], ao se utilizar a DRE, o número médio de partículas por célula deve estar no intervalo entre 3 – 20. Caso contrário, o tempo de relaxação não será

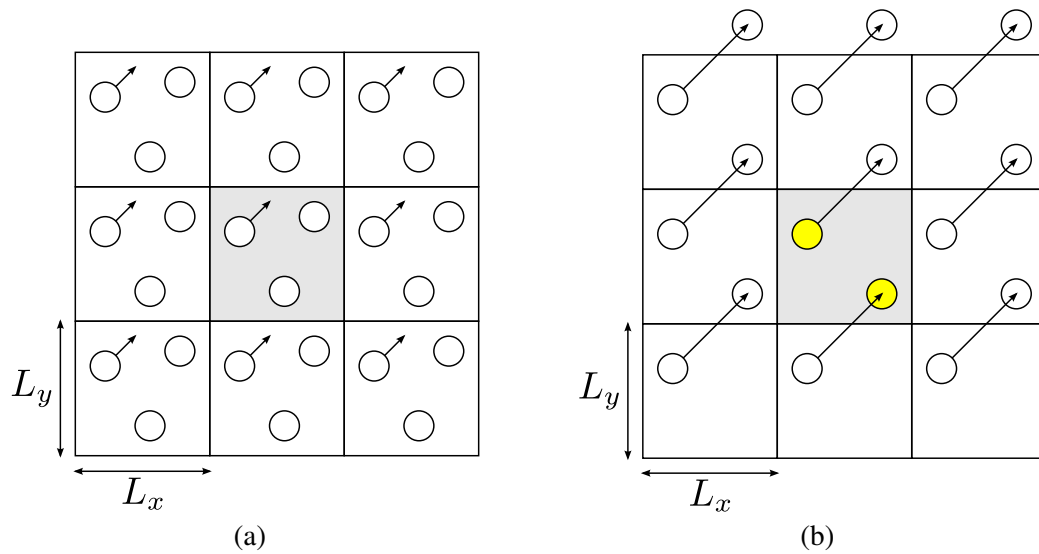


Figura 19: Ilustração das condições periódicas de contorno em duas dimensões. a) são criadas cópias do sistema original (caixa hachurada). b) Uma partícula que deixe a caixa de simulação é substituída por uma imagem correspondente.

desprezível se comparado com as escalas de tempo físicas. Tais limitações não ocorrem para o DCMP-TA, pois o tempo de relaxação é proporcional a $(\ln\langle n \rangle)^{-1}$, onde $\langle n \rangle$ é o número médio de partículas por célula.

3.3 Condições de contorno

3.3.1 Condições periódicas de contorno

Condições periódicas de contorno são necessárias quando se deseja simular um sistema não limitado por paredes ou qualquer tipo de fronteira. A introdução desse tipo de condição de contorno, é equivalente a considerar uma rede infinita, formada por cópias idênticas do sistema em estudo [28] (Fig. 19a).

As cópias do sistema funcionam como imagens do mesmo, pois, quando uma partícula do sistema se move, suas imagens correspondentes executam o mesmo movimento. Dessa maneira, uma partícula que ultrapasse os limites da caixa de simulação por uma das fronteiras, imediatamente é substituída por uma de suas imagens pela face oposta (Fig. 19b).

No método DCMP, quaisquer tipos de condições de contorno devem ser aplicadas após o passo de *streaming*, pois é durante essa etapa em que as posições das partículas são atualizadas. Qualquer que seja a condição de contorno, deve-se assegurar para todas as N partículas que:

$$0 \leq x_i < L_x, \quad 0 \leq y_i < L_y, \quad 0 \leq z_i < L_z, \quad i = (1, \dots, N).$$

Para condições periódicas de contorno, se $\mathbf{r}_i(t)$ está na caixa central e Δt é pequeno, $\mathbf{r}_i(t + \Delta t)$ está no máximo no vizinho mais próximo (se esta hipótese não for válida, haverá exceções durante a simulação). Logo, se $-L_x \leq x_i(t + \Delta t) < 2L_x$, $-L_y \leq y_i(t + \Delta t) < 2L_y$ e $-L_z \leq z_i(t + \Delta t) < 2L_z$, então, a partícula deve ser deslocada para a caixa central (o que representa sua substituição pela imagem correspondente) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} x_i &\leftarrow x_i - \Psi_{gn}\left(\frac{L_x}{2}, x_i\right) - \Psi_{gn}\left(\frac{L_x}{2}, x_i - L_x\right) \\ y_i &\leftarrow y_i - \Psi_{gn}\left(\frac{L_y}{2}, y_i\right) - \Psi_{gn}\left(\frac{L_y}{2}, y_i - L_y\right) \\ z_i &\leftarrow z_i - \Psi_{gn}\left(\frac{L_z}{2}, z_i\right) - \Psi_{gn}\left(\frac{L_z}{2}, z_i - L_z\right) \end{aligned}$$

onde

$$\Psi_{gn}\left(\frac{L_x}{2}, x_i\right) = \begin{cases} \frac{L_x}{2}, & \text{se } x > 0, \\ -\frac{L_x}{2}, & \text{se } x \leq 0. \end{cases}$$

E daí vem que

$$\begin{cases} L_x < x_i, & x_i - \frac{L_x}{2} - \frac{L_x}{2} = x_i - L_x, \\ 0 \leq x_i < L_x, & x_i - \frac{L_x}{2} + \frac{L_x}{2} = x_i, \\ x_i \leq 0, & x_i + \frac{L_x}{2} + \frac{L_x}{2} = x_i + L_x. \end{cases}$$

3.3.2 Implementação de paredes

Em várias situações, por exemplo, fluidos escoando em canais, é necessário implementar paredes como condições de contorno. Em relação ao termo parede, estamos nos referindo a qualquer objeto físico rígido. Basicamente, existem dois tipos de condições de contorno para simular uma parede ou fronteira: *stick* (rígido) e *slip* (liso). Essa classificação é referente à diferença de velocidade tangencial entre o fluido e a parede, pois em ambos os casos, a componente normal da velocidade do fluido é invertida ao se atingir a parede [3]. Vamos analisar as duas separadamente.

3.3.2.1 Slip Boundary Conditions (SBC)

Neste caso, permite-se que o fluido em contato com a parede possua velocidade tangencial com relação a ela. Permitir significa que a velocidade tangencial do fluido é levemente alterada quando uma partícula colide com a parede. No caso onde a parede, ou fronteira, é totalmente lisa (*perfect slip*), o resultado da colisão é uma reflexão especular da partícula, ou seja, sua velocidade tangencial não é alterada (Fig. 20a). Assim, para uma partícula do fluido com velocidade $\mathbf{v} = \mathbf{v}_\perp + \mathbf{v}_\parallel$, e uma parede que se mova com velocidade $\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{s\perp} + \mathbf{v}_{s\parallel}$, a velocidade

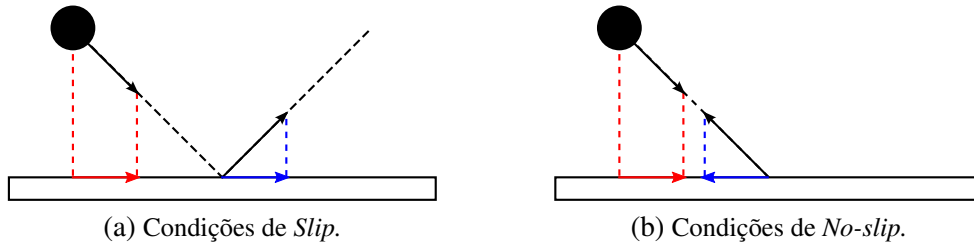


Figura 20: Alteração do vetor velocidade da partícula durante uma colisão na parede. As setas coloridas representam as componentes tangenciais da velocidade antes (setas vermelhas) e depois (setas azuis) da colisão.

relativa entre o fluido e a parede $\tilde{\mathbf{v}}$, será:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{v}} &= [\mathbf{v}_{\perp} - \mathbf{v}_{s\perp}] + [\mathbf{v}_{\parallel} - \mathbf{v}_s] \\ &= \tilde{\mathbf{v}}_{\perp} + \tilde{\mathbf{v}}_{\parallel}.\end{aligned}\quad (3.18)$$

Assim, devido a colisão, as velocidades relativas sofrerão as seguintes transformações:

$$\tilde{\mathbf{v}}_{\perp} \rightarrow -\tilde{\mathbf{v}}_{\perp}, \quad (3.19)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{\parallel} \rightarrow \tilde{\mathbf{v}}_{\parallel}, \quad (3.20)$$

onde os símbolos \perp e \parallel indicam componentes normal e tangencial das velocidades, respectivamente. Note que tanto a energia quanto o momento são conservados neste caso.

3.3.2.2 No-slip Boundary Conditions (NSBC)

Neste caso a parede é tão rígida e rugosa que há uma troca contínua de momento entre a mesma e o fluido. O procedimento padrão para obter uma parede desse tipo é chamado *Bounce-Back* (BB). No BB, quando a partícula do fluido atinge a parede, ambas componentes $\tilde{\mathbf{v}}_{\perp}$ e $\tilde{\mathbf{v}}_{\parallel}$ são invertidas (Fig. 20b), ou seja:

$$\tilde{\mathbf{v}} \rightarrow -\tilde{\mathbf{v}}. \quad (3.21)$$

Note que neste caso a energia cinética permanece conservada (pois o módulo da velocidade não se altera com a inversão do sinal), porém, o momento só é conservado na média [3, 12].

Um último comentário sobre a implementação tanto deste caso quanto do anterior (SBC) se faz necessário: para partículas que colidem com as paredes, o passo de *streaming* seria como se fosse consistido de duas partes. Na primeira, deve-se calcular quanto tempo δt a partícula levou para colidir com a parede, e depois atualizar a posição da partícula para o ponto de contato da colisão. Na segunda, as velocidades serão invertidas de acordo com o tipo de

parede, e, em seguida, se deslocarão durante o intervalo de tempo restante $\Delta t - \delta t$ de acordo com as novas velocidades.

3.3.2.3 Partículas virtuais

Para a implementação de paredes, o BB é aplicado durante a etapa de *streaming*, e, para casos onde os limites da grade de células coincidem perfeitamente com as paredes, é o suficiente. Entretanto, devido ao *random shift* (seção 3.2.3), quase sempre teremos células de fronteira ultrapassando os limites das paredes, dando origem a células parcialmente preenchidas (Fig. 21), o que fará com que o BB usual não reproduza fielmente as condições de contorno desejadas [3].

A solução [29] para este impasse consiste na seguinte ideia: durante o passo de colisão, para todas as células semipreenchidas com número de partículas *menor* que a densidade $\langle n \rangle$ (número de partículas por célula) do fluido, serão adicionadas *partículas virtuais*. A função dessas partículas virtuais, é obter o comportamento de um fluido com densidade e temperatura constantes para as células de fronteira. As velocidades das partículas virtuais são retiradas de uma distribuição de Maxwell-Boltzmann com média zero e variância $k_B T$, onde T é a temperatura do fluido. O número de partículas virtuais n_{PV} , será o suficiente para igualar o número de partículas N_c da célula à densidade $\langle n \rangle$ (Fig. 22), ou seja,

$$n_{PV} = \langle n \rangle - N_c. \quad (3.22)$$

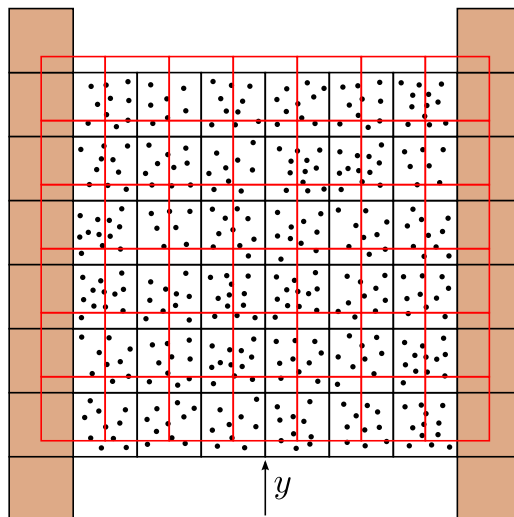


Figura 21: *Random shift* na presença de paredes que definem um canal ao longo do eixo y .

Operacionalmente, as velocidades das partículas virtuais serão inseridas durante o passo de colisão [ver (3.7)], no cálculo da velocidade do centro de massa da célula \mathbf{u} . Como tratam-se de partículas inexistentes, suas velocidades não serão atualizadas, sendo sua única

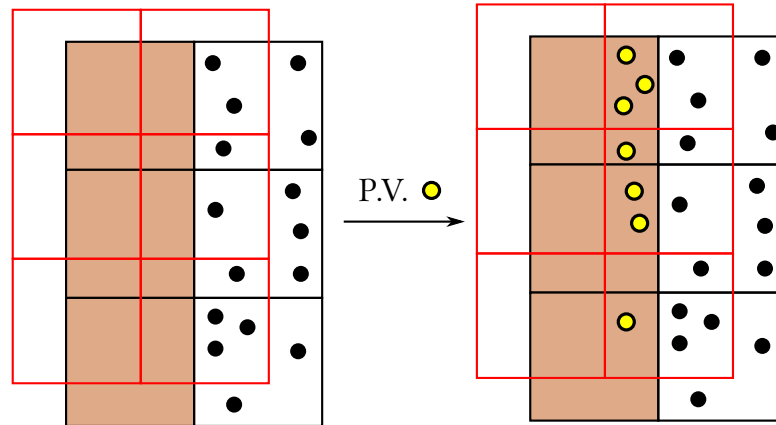


Figura 22: Representação de partículas virtuais (amarelas) para um sistema onde $\langle n \rangle = 5$.

utilidade o cálculo de \mathbf{u} . Alia-se a isso, o fato de que a soma de distribuições gaussianas ainda é uma distribuição gaussiana, cuja média é a soma das médias individuais, e a variância é soma das variâncias individuais [12, 29, 30]. Portanto, conclui-se que não é necessário sortear as velocidades das partículas virtuais. Podemos tomar apenas um único vetor aleatório \mathbf{a} , cujas componentes são retiradas de uma distribuição gaussiana de média zero (soma das médias) e variância $(\langle n \rangle - N_c) k_B T_{fluido}$ (soma das variâncias) [29]. Assim, a eq. (3.7) ficará da seguinte forma:

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{a} + \sum_{i=1}^{N_c} \mathbf{v}_i}{\langle n \rangle}. \quad (3.23)$$

No capítulo seguinte, veremos que a utilização de partículas virtuais é crucial para obter resultados corretos nas simulações de DCMP.

3.4 Termostatos

Em simulações computacionais, às vezes é necessário manter a temperatura do sistema em questão constante durante o tempo de simulação. Termostatos possuem esta finalidade, são inseridos no código do programa para reescalonar as velocidades das partículas através de um certo fator, sendo que as novas velocidades condizentes com a temperatura desejada T . Reescalona-se as velocidades pois, pelo teorema da equipartição da energia (seção 2.1.3), a energia cinética das partículas (e assim suas velocidades) está intimamente ligada com a temperatura do sistema. Entretanto, é imprescindível saber como a temperatura foi definida no código do programa, afim de que seja reescalonada de acordo e não ocorram erros numéricos e resultados inesperados.

Na DCMP, é possível utilizar termostatos explicitamente (inserindo o termostato no algoritmo), através da DRE, e implicitamente, através do DCMP-TA. Porém, como observado na seção 3.2.4.3, o DCMP-TA é consideravelmente mais lento que a DRE, logo, em certos casos

a DRE é o melhor caminho.

Nesta seção, apresentaremos os dois termostatos utilizados nas simulações deste trabalho. Antes, porém, é necessário saber como a temperatura é definida. No caso mais geral:

$$n_{GL} \cdot \frac{k_B T}{2} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i |\mathbf{v}_i|^2}{2}, \quad (3.24)$$

onde N é o número de partículas, k_B é a constante de Boltzmann, m_i a massa e \mathbf{v}_i a velocidade da i -ésima partícula, e T é a temperatura. n_{GL} é o número de graus de liberdade do sistema, e, logicamente, varia se o sistema é bidimensional ou tridimensional:

$$n_{GL} = \begin{cases} 2N, & \text{se } |\mathbf{v}_i|^2 = v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2, \\ 3N, & \text{se } |\mathbf{v}_i|^2 = v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2 + v_{i,z}^2. \end{cases} \quad (3.25)$$

O procedimento básico é encontrar um fator $\gamma = \sqrt{\frac{T_{desejada}}{T_{medida}}}$, e reescalonar as velocidades das partículas da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_i \rightarrow \gamma \cdot \mathbf{v}_i. \quad (3.26)$$

Substituindo a eq. (3.26) na eq. (3.24), temos:

$$\begin{aligned} n_{GL} \cdot \frac{k_B T}{2} &= \sum_{i=1}^N \frac{m_i \gamma^2 |\mathbf{v}_i|^2}{2} \\ &= \gamma^2 \cdot \left[\sum_{i=1}^N \frac{m_i |\mathbf{v}_i|^2}{2} \right] \\ &= \frac{T_{desejada}}{T_{medida}} \cdot \left[n_{GL} \cdot \frac{k_B T_{medida}}{2} \right] \\ &= n_{GL} \cdot \frac{k_B T_{desejada}}{2} \\ T &= T_{desejada}. \end{aligned}$$

A diferença entre os termostatos utilizados será o modo como o fator γ é calculado.

3.4.1 Termostato global

Neste caso, as velocidades serão reescaladas globalmente, ou seja, haverá apenas um fator γ_{global} para todas as partículas. A temperatura aqui é definida da seguinte maneira

[23]:

$$k_B T = \frac{1}{d(N - N_{cl})} \cdot \sum_{i=1}^N m_i |\mathbf{v}_i - \mathbf{u}^{(i)}|^2, \quad (3.27)$$

onde d é a dimensão do sistema, N é o número de partículas, N_{cl} é o número de células ocupadas (não vazias), e $\mathbf{u}^{(i)}$ é a velocidade do centro de massa da célula em que a i -ésima partícula se encontra. Note, que se feita uma comparação com a eq. (3.24), $n_{GL} = d(N - N_{cl})/2$ neste caso. Além disso, as velocidades reescaladas serão as velocidades relativas $\mathbf{v}_i - \mathbf{u}^{(i)}$. Logo, o fator γ_{global} será:

$$\gamma_{global} = \sqrt{\frac{d(N - N_{cl}) \cdot k_B T_{desejada}}{\sum_{i=1}^N m_i |\mathbf{v}_i - \mathbf{u}^{(i)}|^2}}. \quad (3.28)$$

Por escalonar todas as velocidades através de um único fator, esse termostato também é conhecido na literatura como *profile-unbiased thermostat* (termostato de perfil imparcial) [12, 23]. Apesar da fácil implementação, em algumas situações (seção 4.3.3), esse termostato não reproduz fielmente o comportamento hidrodinâmico esperado.

3.4.2 Termostato celular

Neste tipo de termostato [31] há um fator de escalonamento γ_c para cada célula. Logo, a definição de temperatura é local. Ou seja, para cada célula c , temos que [23]

$$k_B T = \frac{1}{n_{GL}} \cdot \sum_{i=1}^{N_c} \frac{m_i |\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_c|^2}{2}, \quad (3.29)$$

onde N_c é a população da c -ésima célula. O número de graus de liberdade, n_{GL} , é dado por

$$n_{GL} = \begin{cases} d(N_c - 1), & \text{se } N_c > 1, \\ 0, & \text{se } N_c \leq 1. \end{cases} \quad (3.30)$$

Note que a temperatura não é definida para células vazias ou com apenas uma partícula [32]. Logo, o fator de escala para a célula arbitrária c é:

$$\gamma_c = \begin{cases} \sqrt{\frac{d(N_c - 1) \cdot k_B T_{desejada}}{\sum_{i=1}^{N_c} m_i |\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_c|^2}}, & \text{se } N_c > 1, \\ 1, & \text{se } N_c \leq 1. \end{cases} \quad (3.31)$$

Como será mostrado no capítulo seguinte, o reescalamento celular é bem mais eficiente que o global. Isto se deve pelo fato de que as velocidades são controladas de modo suave, alterando localmente a temperatura das células, sujeito a menos erros numéricos que a alteração brusca do termostato global.

4 Simulações e resultados

Neste capítulo, são apresentados as simulações e resultados obtidos através do método DCMP. Podemos dividir os resultados obtidos em três tópicos principais: análise das leis de conservação, simulações com o fluido de Poiseuille e escoamento através de obstáculos. O primeiro tópico possui como objetivo comprovar a conservação do momento linear e energia na DCMP (seção 3.2.2.2). Nos outros dois, a intenção era reproduzir resultados da hidrodinâmica clássica, em especial, perfis e distribuições de velocidade para o fluido de Poiseuille, e campos de velocidade para o escoamento do fluido na presença de obstáculos.

4.1 Unidades

Por conveniência, todas as simulações foram feitas com as unidades de comprimento e tempo adimensionalizadas:

$$x' = \frac{x}{a}, \quad (4.1)$$

$$t' = t \sqrt{\frac{k_B T}{ma^2}}. \quad (4.2)$$

Por conveniência, escolhemos $m = 1$, $a = 1$ e $k_B T = 1$, resultando num livre caminho médio $\lambda = \Delta t \sqrt{k_B T / m} = \Delta t$. Todos os resultados obtidos são fornecidos utilizando-se estas unidades adimensionais.

4.2 Análise das leis de conservação

O resultado mais imediato e simples que se pode obter numa simulação de DCMP, é verificar as leis de conservação discutidas na seção 3.2.2.2. Assim, utilizando um sistema similar ao da Fig. 14, livre de fatores externos, analisamos a conservação da energia e momento linear ao longo da simulação, bem como as distribuições de velocidades das partículas.

O sistema utilizado foi uma caixa cúbica de aresta $L = 20$ e densidade de partículas por célula $\langle n \rangle = 10$, o que corresponde a um total de $N = \langle n \rangle L^3 = 8,0 \times 10^4$ partículas e $L^3 = 8,0 \times 10^3$ células. O ângulo de rotação α é 130° e o passo de tempo utilizado foi $\Delta t = 0,1$. Esse passo de tempo resulta em um livre caminho médio $\lambda = 0,1$, que é pequeno quando comparado ao tamanho da aresta da célula ($a = 1$). É necessário realizar o procedimento de *random shift* antes e depois do passo de colisão. Foram empregadas condições periódicas de

contorno em todas as direções (x, y, z) . A inicialização foi feita da seguinte maneira: as posições e velocidades das partículas são sorteadas aleatoriamente de uma distribuição uniforme, e, em seguida, é aplicado um termostato (celular ou global, aqui não há diferença na escolha pois a aplicação é feita apenas no início) para reescalonar as velocidades de acordo com a temperatura desejada. Além disso, o reescalonamento é feito de modo que o momento linear total seja nulo.

4.2.1 Conservação da energia e momento

Para constatar as leis de conservação, a energia cinética por partícula e as componentes do momento linear total do sistema foram mensuradas a cada 1000 passos de simulação. Os resultados apresentados na Fig. 23 indicam que o momento linear permanece com o mesmo valor inicial ($\mathbf{P} = 0\hat{\mathbf{i}} + 0\hat{\mathbf{j}} + 0\hat{\mathbf{k}}$) durante toda a simulação.

A energia cinética por partícula também permanece constante. No gráfico da Fig. 23d, ela é fornecida em unidades de $3k_B T/2$ e seu valor é muito próximo de 1, como esperado pelo teorema da equipartição da energia.

4.2.2 Distribuições de velocidade

Outras grandezas analisadas foram as distribuições para as componentes v_x , v_y e v_z das velocidades das partículas. Pode-se mostrar [13, 33], que as distribuições das componentes no equilíbrio, num sistema livre de fatores externos, são da forma de uma distribuição de Maxwell (forma gaussiana):

$$P(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \cdot \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right]. \quad (4.3)$$

Na eq. (4.3), $P(v_x)$ representa uma densidade de probabilidade, ou seja, o valor $P(v_x)dv_x$ representa a probabilidade da partícula possuir velocidade no intervalo $[v_x, v_x + dv_x]$. As equações para v_y e v_z são análogas a (4.3). Na Fig. 24 apresentamos os resultados das simulações DCMF para as três componentes da velocidade. Observa-se que o resultado numérico se compara de forma bastante satisfatória ao resultado teórico [eq. (4.3)].

Outro tipo de distribuição analisada, foi a distribuição dos módulos das velocidades $P(v)$, na qual $P(v)d^3v$ representa a probabilidade da partícula possuir velocidade cujo módulo pertence ao intervalo $[v, v + dv]$. Como nesse caso $d^3v = v^2 \sin\theta dv d\theta d\phi$ (em coordenadas esféricas), temos:

$$\int P(v)d^3v = \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi P(v)v^2 \sin\theta dv d\theta d\phi$$

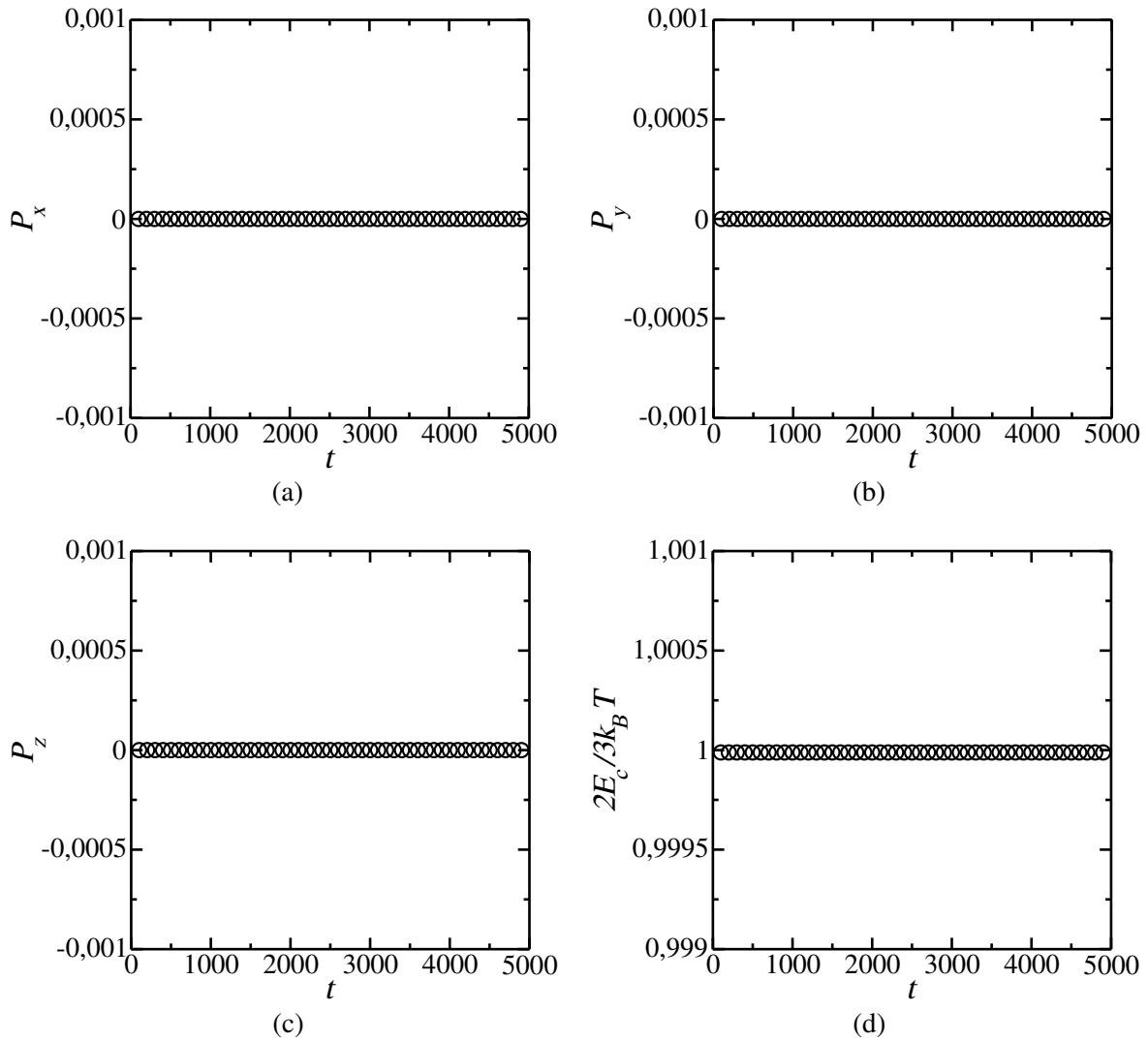


Figura 23: Análise das leis de conservação do momento linear e energia na DCMP. a), b), c) Conservação das componentes do momento linear total do sistema. Os gráficos para as componentes P_x , P_y e P_z são indistinguíveis. d) Conservação da energia cinética por partícula em unidades de $3k_B T/2$.

$$1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{+\infty} P(v)v^2 dv$$

$$1 = \int_0^{+\infty} 4\pi v^2 P(v) dv.$$

Diferentemente do caso anterior para as distribuições das componentes da velocidade, a distribuição do módulo da velocidade também é proporcional a um fator v^2 . De acordo com [15, 17], temos que:

$$P(v) = Av^2 \exp[-Bv^2]. \quad (4.4)$$

A Fig. 25 mostra o gráfico de $P(v)$ obtido através do método DCMP. Note que a forma da distribuição não é mais gaussiana, como na eq. (4.4). A curva sólida (laranja)

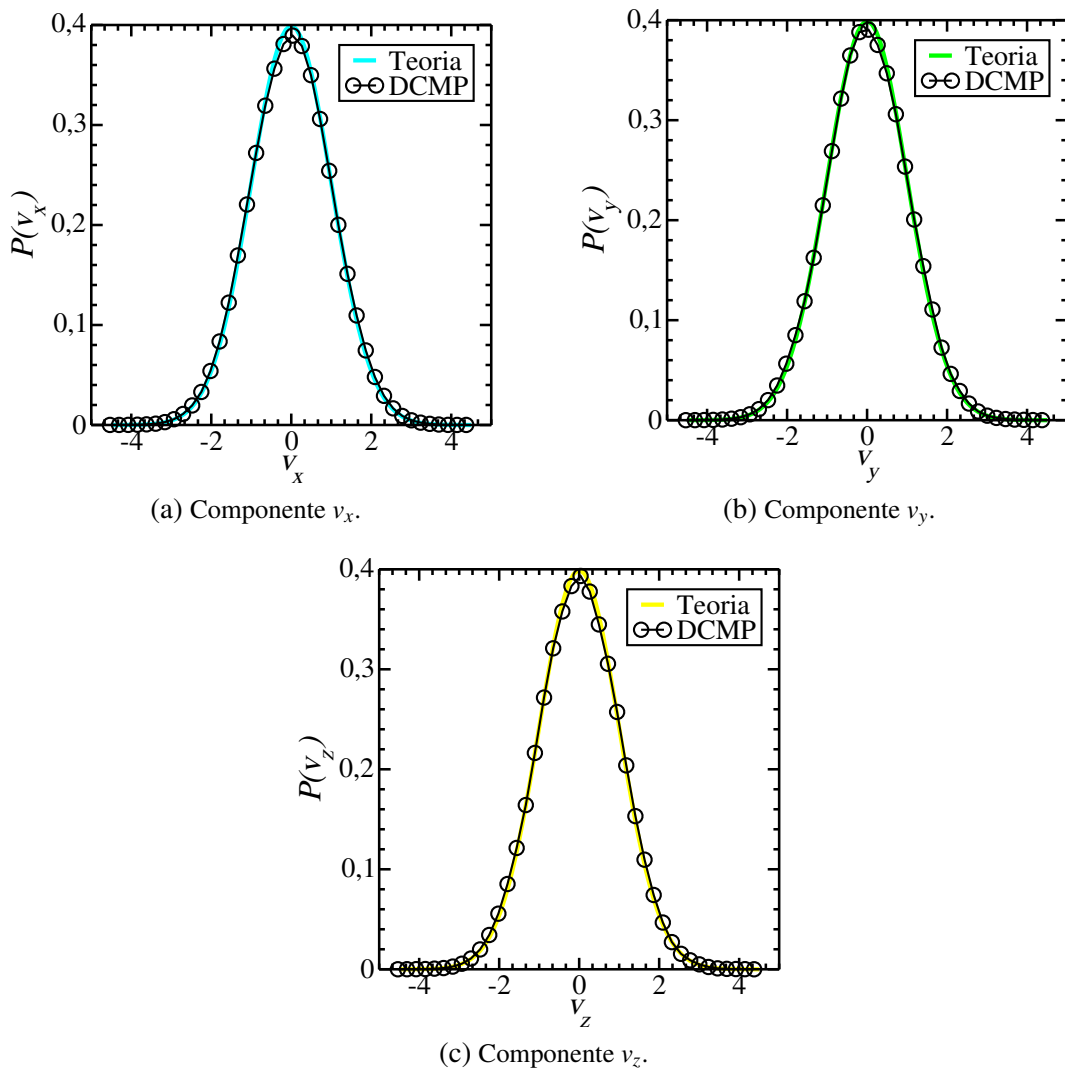


Figura 24: Distribuições de velocidades para as componentes de \mathbf{v} . As curvas sólidas correspondem a funções da forma da eq. (4.3).

representa uma função da forma da eq. (4.4) ajustada aos pontos obtidos na simulação.

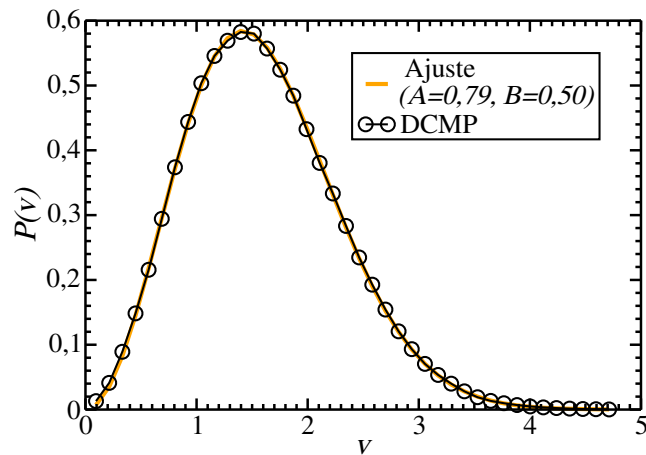


Figura 25: Distribuição de velocidades para $v = |\mathbf{v}|$. A curva sólida foi obtida a partir de uma função da forma daquela dada na eq. (4.4).

4.3 Aplicações com o fluido de Poiseuille

A segunda e principal aplicação deste trabalho, é o estudo do fluido de Poiseuille. O fluido de Poiseuille já foi amplamente analisado [12, 13, 23, 29, 30, 31], e, mostrou-se como uma das principais aplicações do método de DCMP.

Antes de apresentar os resultados obtidos, vamos recordar algumas propriedades do fluido de Poiseuille, a fim de que os resultados tornem-se mais claros.

4.3.1 Fluido de Poiseuille

Considere um fluido num canal de largura $2a$ e comprimento l (Fig. 26), de modo que l seja muito maior que a . Pressões p_1 e p_2 são mantidas constantes nos extremos do canal, sendo que $p_1 > p_2$. Como mostrado no diagrama, o eixo y possui origem no centro do canal.

Utilizando condições de contorno do tipo NSBC (seção 20b) nas paredes, observa-se que o fluido imediatamente em contato com a mesma permanece em repouso. A velocidade $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{i}}$, com a qual o fluido se move na direção x , deve ser uma função de y (nula nas paredes e finita caso contrário). A função $v(y)$ é conhecida como perfil de velocidade [34].

A ausência de outras paredes, na direção z , é apenas para considerarmos que o fluxo é bidimensional. Logo, podemos considerar que todos os processos ocorrem no plano do diagrama da Fig. 26.

Considere agora as forças agindo num pequeno elemento de fluido de lados δx , δy e δz . Nesse caso, existem dois tipos de forças, as forças oriundas do gradiente de pressão ao longo do canal e as forças de viscosidade devido ao movimento do fluido.

A expressão para as forças viscosas está relacionada com a derivada segunda da velocidade v em relação à y . Para chegar a esse fato, tomemos um resultado da hidrodinâmica clássica [34], o qual afirma que para um fluido newtoniano [34], a tensão viscosa (*viscous stress*)

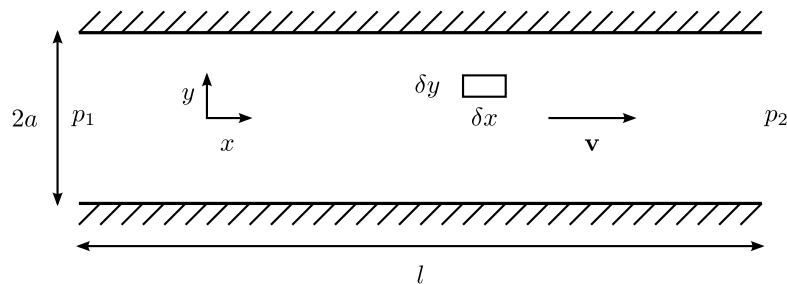


Figura 26: Diagrama para o fluxo num canal. A largura do canal é mostrada exagerada em relação ao comprimento. As pressões p_1 e p_2 são constantes ($p_1 > p_2$).

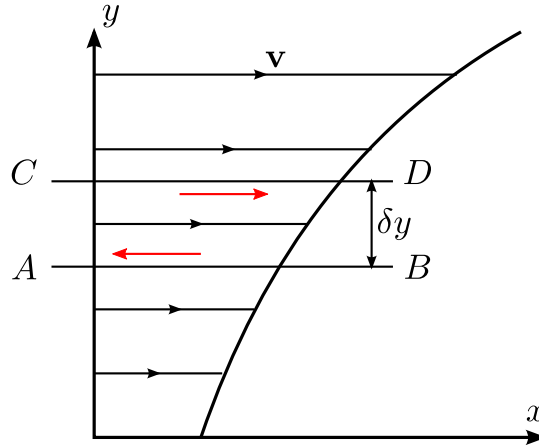


Figura 27: Diagrama mostrando a tensão viscosa gerada pela variação da velocidade $\mathbf{v} = v(y)\hat{\mathbf{i}}$. As setas vermelhas representam as forças que atuam nos planos AB e CD .

no fluido τ é dada por:

$$\tau = \mu \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (4.5)$$

onde μ é o coeficiente de viscosidade, ou viscosidade. Como τ possui dimensão de força por unidade de área, a força viscosa líquida num elemento de fluido depende da diferença das tensões nos seus lados (Fig. 27). Em nosso caso, a força viscosa por unidade de área perpendicular a direção y , é $\mu (\partial v / \partial y)_{y+\delta y}$ e $-\mu (\partial v / \partial y)_y$, atuante na direção x na região entre os planos AB e CD . Daí, vem que:

$$\begin{aligned} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_{y+\delta y} - \mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)_y \right] \delta x \delta z &= \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \delta y \right] \delta x \delta z \\ &= \mu \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \delta x \delta y \delta z. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Assim, a força viscosa por unidade de volume é $\mu \partial^2 v / \partial y^2$. Porém, como v é independente de x e z , podemos escrevê-la como $\mu d^2 v / dy^2$. Além disso, por intuição física de que a ação viscosa irá se opor ao fluxo, $d^2 v / dy^2$ é negativa.

A pressão decresce ao longo do canal, assim, há uma diferença de forças agindo nos extremos do elemento de fluido. Sendo a força na extremidade esquerda do elemento é $p_x \delta y \delta z$ (onde p_x denota o valor da pressão em x). Logo, a pressão na extremidade direita será:

$$p_{x+\delta x} \delta y \delta z = \left(p_x + \frac{\partial p}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z. \quad (4.7)$$

A força líquida será:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} \delta x \delta y \delta z. \quad (4.8)$$

Novamente, a derivada parcial pode ser substituída pela derivada total, pois a pres-

são varia apenas na direção x . Além disso, se assumirmos que no regime estacionário o perfil de velocidade não se altera ao longo do canal [34]. A pressão por unidade de volume, ou seja, o gradiente de pressão, deve ser independente de x . Assim,

$$-\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{dp}{dx} = \frac{p_1 - p_2}{l} = G. \quad (4.9)$$

Finalmente, aplicando a segunda lei de Newton para o elemento de fluido, temos:

$$\mu \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \delta x \delta y \delta z - \frac{\partial p}{\partial x} \delta x \delta y \delta z = 0, \quad (4.10)$$

ou seja,

$$\mu \frac{d^2 v}{dy^2} = -G. \quad (4.11)$$

Aplicando as condições de contorno

$$v = 0 \quad \text{em} \quad y = \pm a \quad (4.12)$$

e integrando duas vezes, obtemos o perfil $v(y)$:

$$v(y) = \frac{G}{2\mu} (a^2 - y^2). \quad (4.13)$$

Vemos então que o perfil de velocidade para o fluido de Poiseuille é parabólico. Esse resultado teórico será bastante explorado nas próximas seções.

4.3.2 Escoamento forçado

A primeira tentativa [13] de simular o fluido de Poiseuille utilizando DCMP, foi pelo método conhecido como fluxo ou escoamento forçado (*forced flow*). Porém, posteriormente [21] foi apontado que esse método possui várias falhas, como a deformação dos perfis de velocidades e um decrescimento gradual da densidade de partículas ao longo do canal. Por esses motivos, e pelo método da seção seguinte ser muito mais eficiente, o escoamento forçado não será muito explorado neste trabalho.

Basicamente, a ideia desse método é separar uma pequena parcela do canal ao longo do seu comprimento e (Fig. 28), impor que o perfil de velocidades nesta pequena parte do fluido seja o perfil parabólico de Poiseuille. Essa imposição contínua durante a simulação faz com que ao final dela o perfil de velocidades em todo o canal seja parabólico.

O método do escoamento forçado foi simulado num sistema bidimensional de dimensões $L = 50$, $H = 30$ (Fig. 28), com densidade de partículas $\langle n \rangle = 35$, $k_B T = 0,01275$, passo de tempo $\Delta t = 1$ e ângulo de rotação $\alpha = \pm 90^\circ$. O intuito de utilizar esses valores era o

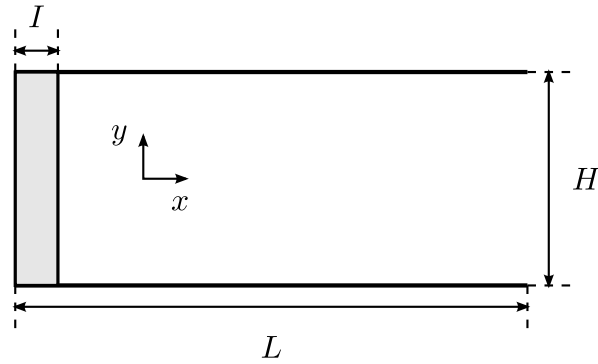


Figura 28: Diagrama para o escoamento forçado: na região I as velocidades obedecem o perfil parabólico de Poiseuille durante toda a simulação.

de reproduzir os resultados observados em [29].

O livre caminho médio das partículas nesse caso é $\lambda = \Delta t \sqrt{k_B T / m} = 0,11$. Logo, é necessário o procedimento de *random shift*. Porém, neste caso deve-se ter mais cautela, pois há presença de paredes, e, nestes casos, é necessário criar uma coluna (ou linha) adicional de células, como mostra a Fig. 21.

Para simular um longo canal, condições periódicas de contorno foram empregadas na direção x . Nas paredes, foram utilizadas NSBC (*bounce back*, BB), juntamente com o artifício das partículas virtuais (seção 3.3.2.3). A região I possui comprimento $I = 10$, e, para partículas que se encontrem nessa região, as componentes do vetor velocidade (v_x, v_y) são retiradas de distribuições gaussianas (Maxwell-Boltzmann) de variância $k_B T = 0,01275$. Porém, as médias das distribuições utilizadas para as componentes são diferentes, sendo elas [29, 30]:

$$\langle v_x \rangle = \frac{4v_{max}}{H^2}(H - y)y, \quad (4.14)$$

$$\langle v_y \rangle = 0. \quad (4.15)$$

Ou seja, a média da distribuição utilizada para sortear a componente v_x de uma partícula, é função da coordenada y da partícula. Vale ressaltar que a eq. (4.14) é da mesma forma da eq. (4.13), mas com a origem do eixo y em uma das paredes do canal e parâmetros diferentes para as constantes (v_{max} e H em vez de μ e G). O valor de v_{max} corresponde ao valor máximo do perfil parabólico de Poiseuille desejado na simulação [29].

A Fig. 29 mostra os resultados da simulação para dois valores do parâmetro v_{max} (0,004 e 0,005), juntamente com suas respectivas curvas teóricas [eq. (4.14)] esperadas. Para o caso em que $v_{max} = 0,005$, não foram utilizadas partículas virtuais (somente BB), com o objetivo de ilustrar que desse modo a velocidade não é nula nas paredes ($y = 0$ e $y = 30$). Para $v_{max} = 0,004$, utilizamos as NSBC da forma correta (BB e partículas virtuais). Observamos uma razoável concordância entre o resultado numérico e teórico; todavia, em ambos os casos é notável a distorção dos pontos de um perfil parabólico, mostrando uma certa imprecisão do

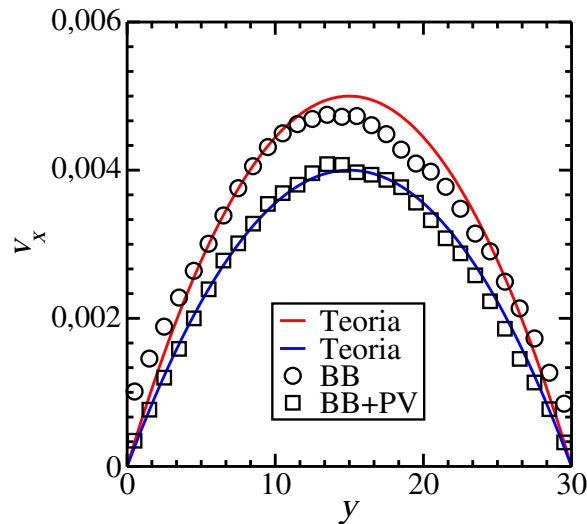


Figura 29: Perfil parabólico de velocidades obtido com escoamento forçado para dois valores de v_{max} (0,004 e 0,005).

método como mencionado anteriormente.

4.3.3 Fluido de Poiseuille na presença de um campo externo

Apresentamos nesta seção uma outra alternativa para simular o fluido de Poiseuille utilizando DCMP. Ao contrário do escoamento forçado, veremos que este método, se aplicado corretamente, produz resultados bastante satisfatórios. Isso faz com que ele seja bastante utilizado em simulações de DCMP [3, 21, 23, 31, 35].

Neste método, aplica-se um campo externo \mathbf{g} constante, o qual atua em todas as partículas. O efeito deste campo é levado em conta na etapa de *streaming*, que agora fica da seguinte maneira:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{g}\Delta t^2, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{v}_i(t) \rightarrow \mathbf{v}_i(t) + \mathbf{g}\Delta t. \quad (4.17)$$

Logo, as posições são atualizadas de acordo com o termo de aceleração \mathbf{g} . Já as velocidades, são parcialmente atualizadas, pois as partículas ainda sofrerão o processo de colisão.

Devido a atuação de \mathbf{g} , energia está sendo injetada continuamente no sistema. Entretanto, como veremos, isso causa um aumento na viscosidade do fluido. Temos então dois fatores competitivos: a presença do campo que agita o sistema, e o atrito que o mesmo campo acarreta. A solução para esse revés, é utilizar um termostato durante a simulação, mantendo a temperatura (agitação) constante e garantindo que o fluxo seja estacionário [23, 35].

Para simular o fluido de Poiseuille através de um campo externo, utilizou-se um sistema tridimensional de dimensões $20 \times 20 \times 20$, densidade de partículas por célula $\langle n \rangle = 10$,

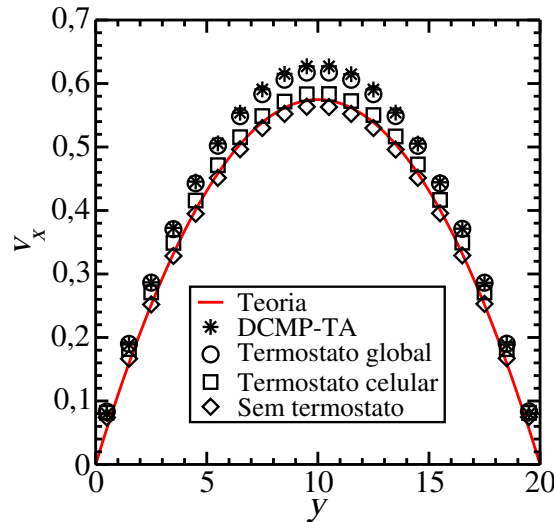


Figura 30: Perfis de velocidade para diferentes termostatos.

$k_B T = 1$ e $\Delta t = 0,1$. O ângulo de rotação foi $\alpha = 130^\circ$; e o método de rotação utilizado foi o dos quatérnions. Condições periódicas de contorno foram empregadas nas direções x e z . Nas paredes do canal (planos $y = 0$ e $y = 20$), utilizou-se condições de contorno do tipo NSBC (BB + partículas virtuais). O campo \mathbf{g} foi aplicado na direção x e possui intensidade 0,01.

O campo externo $\mathbf{g} = g\mathbf{i}$ dá origem a um gradiente de pressão no canal $G = \langle n \rangle g$ [21]. Assim, a equação do perfil parabólico será:

$$v_x(y) = \frac{\langle n \rangle g}{2\mu} (L - y)y. \quad (4.18)$$

Onde $L = 20$ é a largura do canal e μ é a viscosidade do fluido. Entretanto, também podemos escrever $v_x(y)$ em função da velocidade máxima $v_{x,max}$ e da largura do canal L , como na eq. (4.14):

$$v_x(y) = \frac{4v_{x,max}}{L^2} (L - y)y. \quad (4.19)$$

Combinando a eq. (4.18) com a eq. (4.19), temos:

$$v_{x,max} = \frac{\langle n \rangle g L^2}{8\mu}. \quad (4.20)$$

Quatro tipos de simulações foram realizadas: (i) utilizando um termostato global (seção 3.4.1); (ii) utilizando um termostato celular (seção 3.4.2); (iii) sem empregar termostato; (iv) pelo método DCMP-TA (no qual o termostato de Andersen está embutido).

Os perfis de velocidade para os diferentes tipos de termalização, juntamente com o resultado teórico esperado (4.19), são mostrados na Fig. 30. Vemos que todos exibem comportamento parabólico, como esperado. Porém, o objetivo aqui é salientar a influência da escolha do termostato no perfil de velocidade.

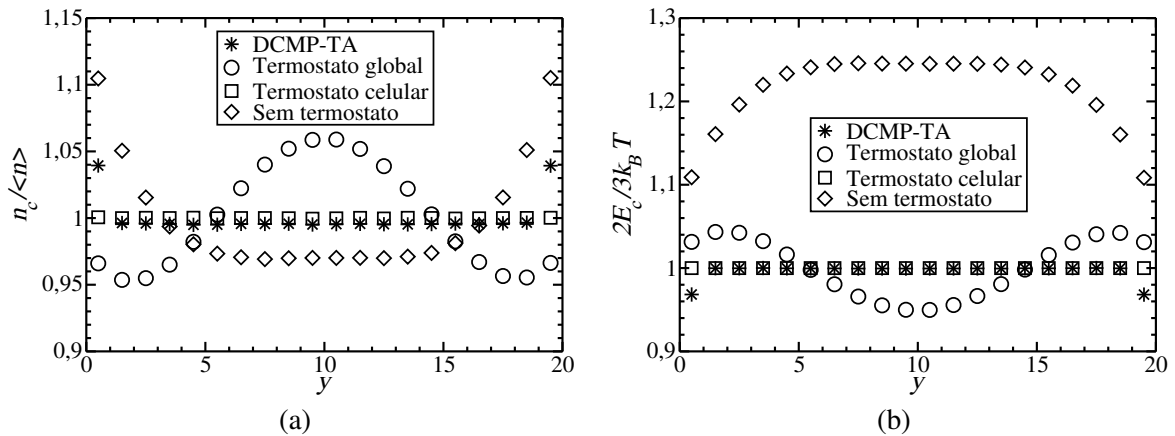


Figura 31: Perfis de densidade de partículas e energia cinética para os termostatos analisados. a) Gráfico do número de partículas por célula n_c relativo à densidade média $\langle n \rangle$. b) Perfil da energia cinética por partícula em unidades de $3k_B T/2$.

Aparentemente, um dos resultados mais satisfatórios é a simulação sem termostato, entretanto, esse método falha em reproduzir os perfis de densidade de partículas e energia cinética ao longo da largura do canal (Fig. 31). O motivo [23] é que o campo externo aumenta a energia cinética e a temperatura das partículas. Sem o termostato, o sistema é termalizado apenas pelas partículas virtuais da paredes, pois suas velocidades são derivadas de uma distribuição com a temperatura do fluido. Assim, no estado estacionário, observa-se que apenas nas paredes o comportamento da energia (temperatura) é razoavelmente próximo do esperado. Todavia, apesar das partículas virtuais garantirem as condições de contorno desejadas, também elevam ligeiramente a densidade nas paredes [29, 30]. Em geral, quanto maior a temperatura, menor é a densidade de partículas por célula (as partículas não estão muito agitadas e permanecem mais numa mesma célula), e vice-versa.

O termostato global, por utilizar somente um fator de reescalonamento γ_{global} (3.28) para todas as partículas, mantém sob controle apenas a temperatura do sistema como um todo. Isto acarreta uma não homogeneidade nos perfis de densidade e energia. Como vemos, apenas o termostato celular apresenta resultados coerentes para os três gráficos: seu perfil de velocidade é bem próximo do teórico, e ele garante perfis homogêneos para a energia cinética e densidade de partículas.

O DCMP-TA foi utilizado aqui mais como um caso ilustrativo, pois apesar dele ser o que mais se aproxima de um resultado coerente para a densidade e energia, seu perfil de velocidade é o mais distante do teórico. Além disso, o tempo de simulação observado no DCMP-TA é consideravelmente maior comparado aos outros casos.

Como na seção anterior (seção 4.3.2), analisamos a relevância da utilização de partículas virtuais. Porém, agora de uma maneira mais detalhada, através do número de partículas virtuais utilizado. Assim, definindo o parâmetro auxiliar ρ , o qual representa a densidade de

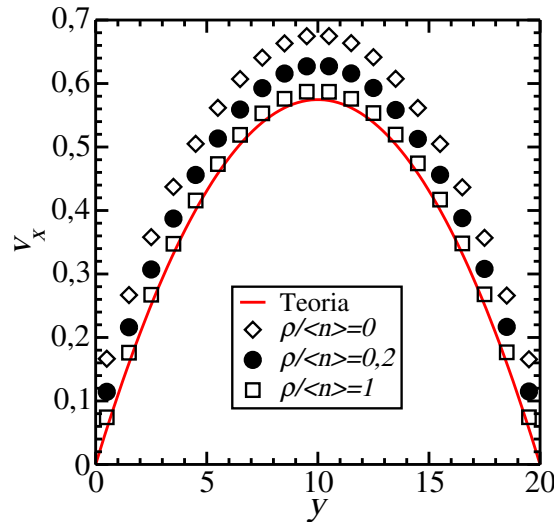


Figura 32: Perfis de velocidade para diferentes valores da razão $\rho / \langle n \rangle$.

partículas para uma célula de fronteira arbitrária, temos:

$$\rho = N_c + n_{PV}. \quad (4.21)$$

Onde N_c é o número de partículas na célula de fronteira e n_{PV} é o número de partículas virtuais. Se utilizarmos o número de partículas correto, dado pela eq. 3.22:

$$n_{PV} = \langle n \rangle - N_c. \quad (4.22)$$

Então,

$$\frac{\rho}{\langle n \rangle} = \frac{N_c + \langle n \rangle - N_c}{\langle n \rangle} = 1. \quad (4.23)$$

Assim, variando o parâmetro de partículas virtuais n_{PV} , e por conseguinte o de ρ , obtemos diferentes valores para a razão $\rho / \langle n \rangle$. A Fig. 32 mostra perfis de velocidade para três valores de $\rho / \langle n \rangle$. Vemos que a medida que $\rho / \langle n \rangle$ se aproxima do valor ideal, o perfil de velocidades fica mais próximo da curva teórica. Além disso, a diferença entre o caso ideal ($\rho / \langle n \rangle = 1$), e o caso onde não se utilizam partículas virtuais ($\rho / \langle n \rangle = 0$) é considerável, salientando mais uma vez a importância do uso de partículas virtuais para a obtenção das corretas condições de contorno.

4.3.4 Análise da viscosidade

Outro pequeno estudo que se pode fazer é a análise da viscosidade. Um modo de calcular a viscosidade através da DCMP [36], é observar quanto de momento é transportado através do fluido. O momento pode ser transmitido de duas maneiras, as quais estão relacionadas às duas etapas principais do método DCMP. Logo, a viscosidade do fluido μ é composta de

dois termos: a viscosidade cinética μ_{cin} , e a viscosidade de colisão μ_{col} . A primeira, relacionada ao passo de *streaming*, acontece devido à transferência de momento de uma célula para outra, quando uma partícula muda de célula [37]. No passo de colisão, o momento é redistribuído entre as partículas de uma mesma célula. Daí, vem que:

$$\mu = \mu_{cin} + \mu_{col}. \quad (4.24)$$

As componentes μ_{cin} e μ_{col} podem ser calculadas analiticamente [24, 38, 39]. Em três dimensões:

$$\mu_{cin} = \frac{k_B T \Delta t \langle n \rangle}{a^3} \left[\frac{5 \langle n \rangle}{(\langle n \rangle - 1)(4 - \cos \alpha - 2 \cos 2\alpha)} - \frac{1}{2} \right], \quad (4.25)$$

$$\mu_{col} = \frac{m(1 - \cos \alpha)}{18a\Delta t} [\langle n \rangle - 1]. \quad (4.26)$$

As equações acima podem ser utilizadas para verificar a precisão do método, pois, resolvendo a eq. (4.20) para μ :

$$\mu = \frac{\langle n \rangle g L^2}{8v_{x,max}}. \quad (4.27)$$

Ou seja, calculando valores numéricos de $v_{x,max}$ para vários passos de tempo Δt distintos, podemos obter valores para μ . Seguindo esse procedimento, obtemos valores numéricos para μ utilizando o mesmo sistema da seção 4.3.3. A Fig. 33 mostra os resultados da simulação (círculos pretos), assim como a expressão teórica [eq. (4.24)], representada pela curva verde. Além disso, uma função $f(\Delta t)$ foi ajustada aos valores numéricos:

$$f(\Delta t) = A\Delta t + \frac{B}{\Delta t}. \quad (4.28)$$

Onde os termos de $f(\Delta t)$ correspondem as duas componentes da viscosidade (μ_{cin} e μ_{col}). Nota-se uma concordância bastante satisfatória entre os resultados.

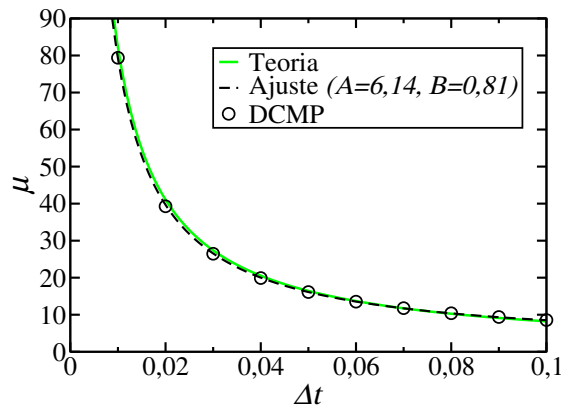


Figura 33: Viscosidade μ como função do passo de tempo Δt . A curva pontilhada foi obtida a partir de ajuste da forma da eq. (4.28). Os coeficientes A e B , quando comparados aos valores teóricos esperados [eqs. (4.25) e (4.26)], apresentaram erros numéricos de 0,077% e 1,29%, respectivamente.

4.3.5 Fluido de Poiseuille com gradiente de temperatura

Como última aplicação do método DCMP com o fluido de Poiseuille, realizamos um estudo semelhante ao da seção 4.3.3. Entretanto, a temperatura agora varia linearmente ao longo da largura do canal. Ou seja, a temperatura varia (na direção y) da seguinte forma:

$$T(y) = Ay + B. \quad (4.29)$$

Fixando as temperaturas das paredes em T_1 (plano $y = 0$) e T_2 (plano $y = L$), podemos facilmente escrever os parâmetros A e B da (4.29) em termos de T_1 , T_2 ($T_1 < T_2$) e L :

$$T(y) = \left[\frac{T_2 - T_1}{L} \right] y + T_1. \quad (4.30)$$

O sistema utilizado na simulação foi o da seção 4.3.3, com os mesmos parâmetros ($L = 20$, $\langle n \rangle = 10$, $\Delta t = 0,1$, $\alpha = 130^\circ$ e $\mathbf{g} = 0,01\mathbf{i}$). O termostato celular foi empregado para manter a temperatura de acordo com a eq. (4.30). A temperatura é controlada localmente em cada célula, utilizando como parâmetro para o termostato a temperatura média na célula. Logo, para a c -ésima célula, delimitada na direção y pelas ordenadas y_2 e y_1 ($y_2 - y_1 = a = 1$), a temperatura média será:

$$\begin{aligned} \langle T_c \rangle &= \frac{1}{a} \int_{y_1}^{y_2} \left[\left(\frac{T_2 - T_1}{L} \right) y + T_1 \right] dy \\ &= \frac{1}{a} \left[\left(\frac{T_2 - T_1}{L} \right) \frac{y^2}{2} + T_1 y \right] \Big|_{y_1}^{y_2} \\ &= \frac{1}{a} \left[\left(\frac{T_2 - T_1}{L} \right) \frac{y_2^2 - y_1^2}{2} + T_1 (y_2 - y_1) \right] \\ &= \frac{y_2 - y_1}{a} \left[\left(\frac{T_2 - T_1}{2} \right) \underbrace{\frac{y_2 + y_1}{2}}_{=\bar{y}_c} + T_1 \right] \\ &= \frac{a}{a} \left[\left(\frac{T_2 - T_1}{2} \right) \bar{y}_c + T_1 \right] \\ &= \left(\frac{T_2 - T_1}{2} \right) \bar{y}_c + T_1. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Onde \bar{y}_c é a ordenada do centro da c -ésima célula.

Tomando T_1 como 1, foram feitas simulações para os seguintes valores de T_2 : $5T_1$, $10T_1$, $30T_1$ e $50T_1$. Como mostra a Fig. 34, os perfis de velocidade se distorcem do perfil parabólico original ($T_2 = T_1$), sendo ao mesmo tempo achatados e deslocados do eixo de simetria da parábola ($y = 10$). Como a temperatura é elevada consideravelmente, a contribuição cinética da viscosidade μ_{cin} , pela (4.25), aumenta da mesma forma; pois, no caso onde $T_2 = T_1$, a contri-

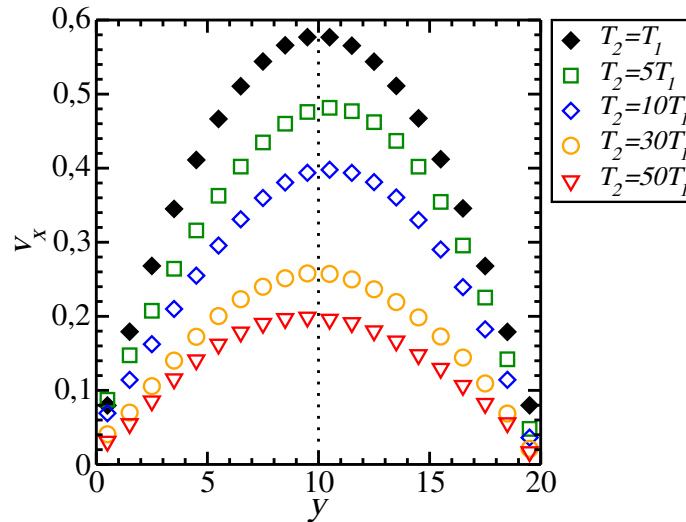


Figura 34: Perfil de velocidades para um canal com gradiente de temperatura $dT/dy = (T_2 - T_1)/L$.

buição de μ_{cin} para a viscosidade total é muito pequena, pois as partículas permanecem muito tempo numa mesma célula (livre caminho médio pequeno). Acreditamos que esse seja um dos fatores pelos quais ocorrem as distorções nos perfis de velocidade.

Entretanto, o aumento de temperatura ao mesmo tempo agita as partículas do sistema, como mostra o gráfico da Fig. 35. O perfil de energia cinética (por partícula) se modifica bastante devido ao gradiente de temperatura no canal, crescendo à medida que a temperatura aumenta, como esperado.

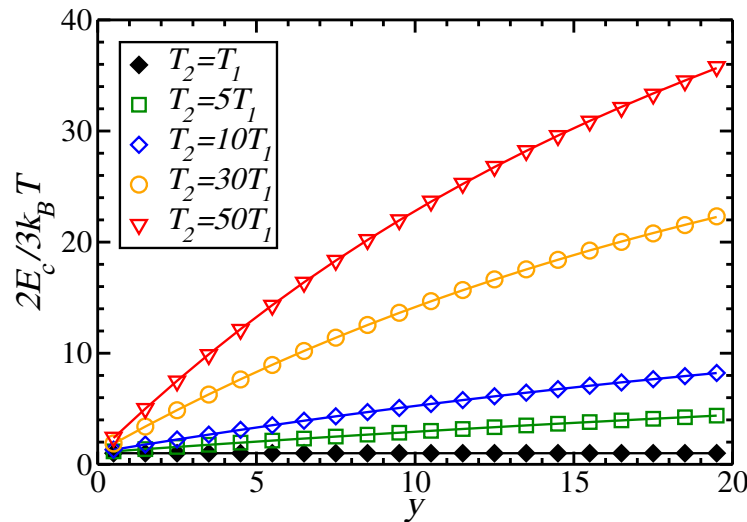


Figura 35: Perfil de energia cinética por partícula em unidades de $3k_B T/2$. Para $T_2 = 5T_1$ e $T_2 = 10T_1$, o comportamento do perfil é aproximadamente linear.

Como mencionado na seção 4.3.3, quanto maior a temperatura, menor o número de partículas por célula, pois, para uma alta temperatura as partículas mudam de célula com mais frequência. O perfil de densidade da Fig. 36 exibe esse comportamento. O interessante neste caso, é que todos os resultados numéricos para os diferentes valores de T_2 , exibem o

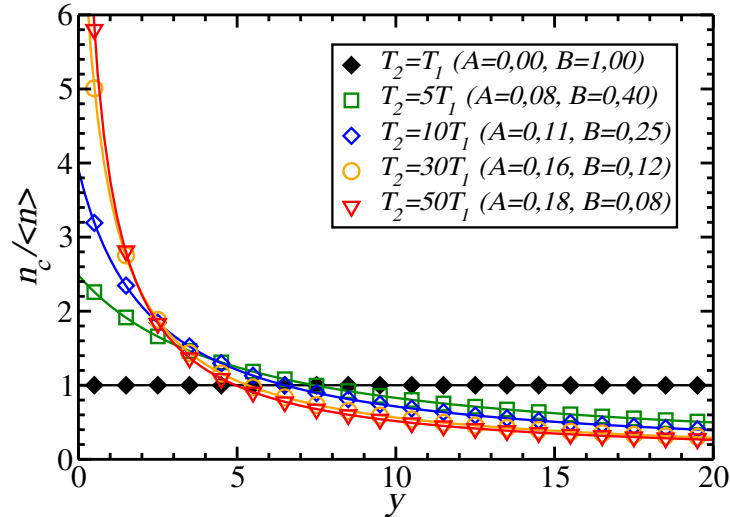


Figura 36: Gráfico do número de partículas por célula n_c relativo à densidade média $\langle n \rangle$ para todos os valores de T_2 . Para cada valor de T_2 são fornecidos os coeficientes A e B dos ajustes obtidos a partir de uma função da forma da eq. (4.32).

comportamento de uma função da forma hiperbólica:

$$\frac{n_c}{\langle n \rangle} = \frac{1}{Ay + B}. \quad (4.32)$$

As curvas contínuas mostradas na Fig. 36 representam ajustes de funções da forma da eq. (4.32) aos respectivos resultados numéricos. Acreditamos, que um estudo mais aprofundado sobre os parâmetros A e B das funções ajustadas, sejam capazes de elucidar melhor a grande coerência entre ambos os resultados.

4.4 Escoamento com obstáculos

Buscando mais uma vez resgatar resultados hidrodinâmicos clássicos através do método DCMP, analisamos o escoamento de fluidos na presença de obstáculos.

Para esta aplicação, utilizou-se um sistema semelhante ao que foi apresentado na Referência [30] (Fig. 37). O canal é bidimensional de comprimento L e altura H . Na Fig. 37, o obstáculo é representado por um quadrado de lado D , porém, simulações também foram realizadas para obstáculos na forma de um círculo de mesmo diâmetro D e para uma elipse de mesmo eixo maior D . O centro do obstáculo possui coordenadas $x = L/4$ e $y = H/2$.

A razão D/H , chamada razão de bloqueio, foi fixada em 0,125, enquanto a razão L/D foi fixada em 50 para reduzir a influência nos resultados da fronteira entre a região de afluxo I e a região de escoamento [29, 30]. Na direção x foram utilizadas condições periódicas de contorno. Nas paredes do canal e do obstáculo, foram empregadas condições de contorno do tipo NSBC (BB + partículas virtuais).

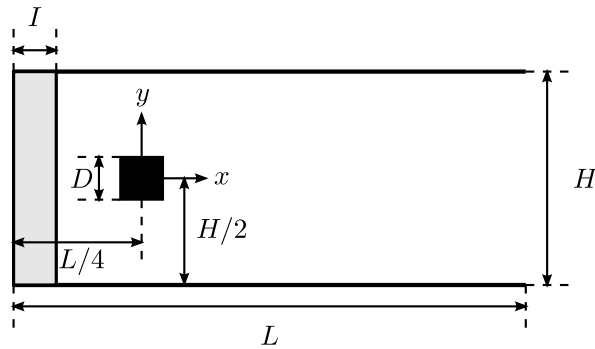


Figura 37: Diagrama do sistema utilizado na simulação: na região I as velocidades obedecem o perfil parabólico de Poiseuille durante toda a simulação.

Seguindo [30], o fluxo no canal foi mantido pelo método do escoamento forçado, ou seja, da mesma maneira que na seção 4.3.2, na região I ($x < 10$) as velocidades das partículas eram mantidas sempre retirando suas componentes (v_x, v_y) de distribuições de Maxwell-Boltzmann de variância $k_B T$; cujas médias são:

$$\langle v_x \rangle = \frac{4v_{max}}{H^2}(H-y)y, \quad (4.33)$$

$$\langle v_y \rangle = 0. \quad (4.34)$$

O objetivo das simulações era obter os campos vetoriais de velocidade nas regiões próximas ao objeto. Como parâmetro para análise dos resultados, utilizou-se uma importante quantidade da hidrodinâmica clássica, denominada número de Reynolds [34]. O número de Reynolds N_R é uma combinação de quatro fatores que determina qual o tipo de escoamento do fluido (lamelar ou turbulento). Em nosso caso [13, 29, 30]:

$$N_R = \frac{\langle n \rangle v_{max} D}{\mu}, \quad (4.35)$$

onde $\langle n \rangle$ é a densidade de partículas por célula e μ é a viscosidade.

A Fig. 38 apresenta os campos vetoriais de velocidade $\mathbf{v}(x, y) = v_x(x, y)\hat{\mathbf{i}} + v_y(x, y)\hat{\mathbf{j}}$ obtidos nas simulações. Observa-se concordância entre os resultados numéricos e teóricos. Para o número de Reynolds utilizado na simulação ($N_R \sim 30$), espera-se que na região posterior ao obstáculo ocorra a formação de correntes circulares locais, chamadas vórtices, com um grande aumento na resistência ao escoamento; o que é claramente observado na Fig. 38, pois as velocidades são bem menores nessas regiões de vórtices. Portanto, demonstra-se com estes resultados que o método DCMP é capaz de descrever propriedades relevantes de fluidos.

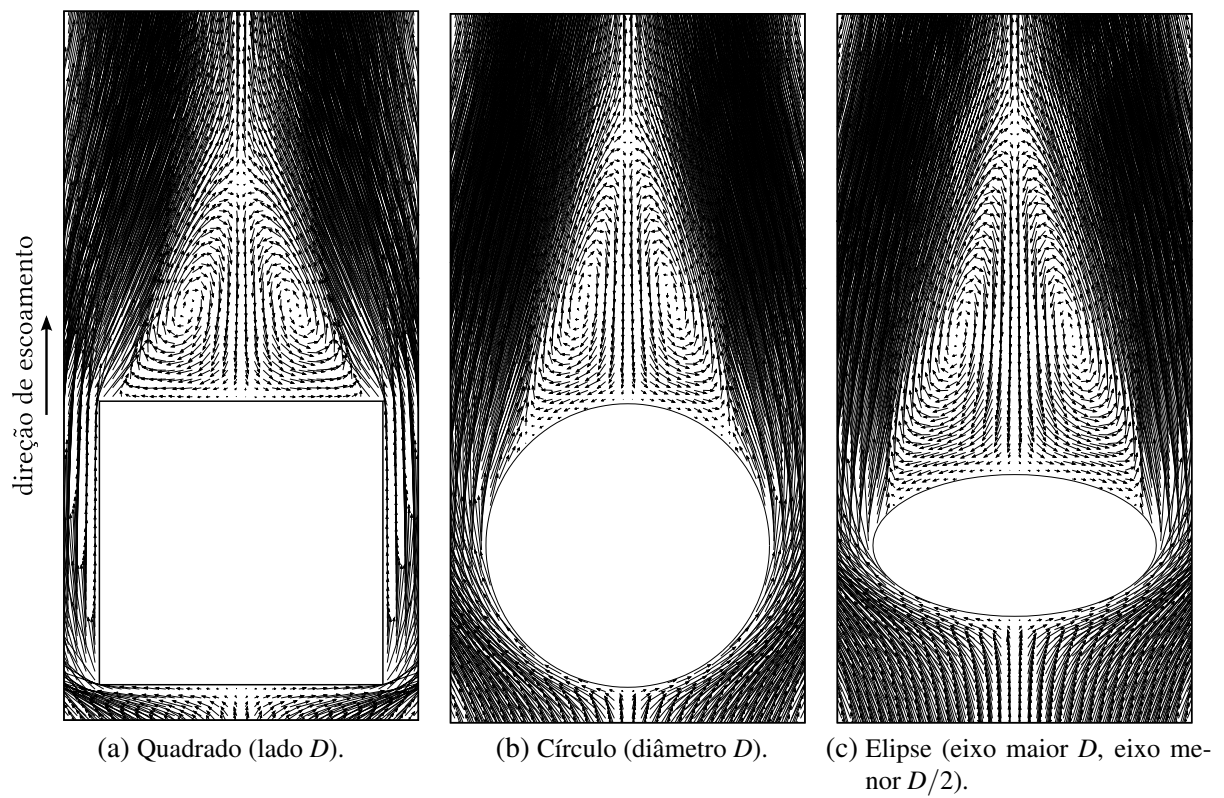


Figura 38: Campos vetoriais das velocidades para o estado estacionário de um escoamento ao redor de um obstáculo ($N_R \sim 30$). É mostrada apenas a região em torno dos obstáculos. O fluido escoa de baixo para cima.

5 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, abordamos de maneira introdutória o método da dinâmica de colisão de multipartículas (DCMP) com dois objetivos principais: apresentar o método de maneira concisa, e reproduzir resultados conhecidos da hidrodinâmica clássica através do método. Para que tal fim fosse atingido, procuramos mostrar o máximo de clareza nos detalhes, tanto os teóricos quanto os de implementação numérica.

Na introdução, ressaltamos a importância para o desenvolvimento de métodos numéricos aplicáveis a sistemas mesoscópicos, além de um pequeno resumo de alguns dos métodos mais utilizados. Nos tópicos referentes a cada um dos métodos, buscamos mostrar as qualidades e limitações de cada um, além da evolução entre eles.

O capítulo 2 tratou inicialmente de tópicos teóricos de física considerados relevantes para a DCMP. Além disso, salientamos a importância dos quatérnions para a implementação de rotações em três dimensões. O final do capítulo foi dedicado a uma breve discussão sobre o algoritmo de Euler, o qual será utilizado na implementação da etapa de *streaming*, e sobre o método de células e listas, imprescindível na etapa de colisão.

O método de DCMP só foi propriamente discutido no capítulo 3, onde fizemos uma análise de suas etapas principais (*streaming* e colisão), além de outras características igualmente importantes; como por exemplo, o procedimento de *random-shift* (ajuste aleatório), a implementação (e importância) das partículas virtuais, as condições de contorno e os tipos de termostatos utilizados nas simulações.

No capítulo 4, destinado as aplicações e resultados numéricos utilizando a DCMP, tinha como maior intuito mostrar concordância entre resultados teóricos e numéricos. Primeiramente, constatamos a conservação da energia cinética e do momento linear (seção 3.2.2.2), além da concordância das distribuições de velocidade com suas respectivas curvas teóricas. Em seguida, estudamos o fluido de Poiseuille através de duas técnicas: escoamento forçado e aplicação de um campo externo. Em relação ao escoamento forçado, observamos que o método possui uma certa imprecisão, presente nos gráficos dos perfis de velocidade. Ao contrário do fluido na presença de um campo externo, que, apesar de demonstrar variações de acordo com o termostato utilizado, fornece perfis de velocidade bem mais precisos. Com relação à análise entre termostatos, o termostato celular se apresentou como o mais correto e satisfatório, haja vista os gráficos obtidos para os perfis de energia cinética por partícula e densidade de partículas.

A simulação do fluido de Poiseuille no canal com gradiente de temperatura apresentou resultados interessantes, principalmente o perfil de densidade de partículas. O qual mostrou-se obedecer um comportamento hiperbólico ao longo do comprimento do canal.

Para o escoamento em torno de obstáculos, constatamos apenas a coerência com os resultados da hidrodinâmica clássica para um fluido sob as mesmas condições [34]. Ou seja, a formação de vórtices simétricos na região traseira do obstáculo.

Apesar do caráter introdutório deste trabalho, as aplicações feitas aqui podem ser servir de base para problemas mais complexos. Um deles, como perspectiva mais imediata, trata-se da implementação de partículas de soluto (por exemplo, colóides ou polímeros) no fluido. Neste caso, teríamos interações do tipo soluto-soluto, solvente-soluto, além da própria interação solvente-solvente. O algoritmo agora seria híbrido, mesclando a técnica da DCMP, responsável pelas interações solvente-solvente, e a dinâmica molecular, a qual descreveria as interações soluto-soluto. Quanto as interações do tipo soluto-solvente, existem diferentes abordagens, cada uma delas mais adequada ao tipo de soluto envolvido [3]. O método DCMP permite assim o estudo, do ponto de vista microscópico, da origem e dos efeitos da interação hidrodinâmica em fluidos complexos.

Adicionalmente, esperamos ter uma melhor compreensão do comportamento do fluido no canal com gradiente de temperatura, e, também, estudar diferentes tipos de escoamento (variação do número de Reynolds) na presença de obstáculos.

Referências

- [1] TOKATY, G. A. *A history and philosophy of fluid mechanics*. [S.l.]: Courier Dover Publications, 1994.
- [2] STOKES, G. G. *Mathematical and physical papers*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009.
- [3] DHONT, J. K. G. et al. Mesoscale hydrodynamics. In: *Lecture Notes from the 42nd IFF Spring-School on 'Macromolecular Systems in Soft and Living Matter'*. [S.l.]: Forschungszentrum Jülich, 2011.
- [4] WOLF-GLADROW, D. A. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction*. [S.l.]: Springer, 2000.
- [5] POMEAU, B. H. Y.; FRISCH, U. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Phys. Rev. Lett*, v. 56, n. 14, p. 1505, 1986.
- [6] LADD, A. J.; COLVIN, M. E.; FRENKEL, D. Application of lattice-gas cellular automata to the brownian motion of solids in suspension. *Physical review letters*, APS, v. 60, n. 11, p. 975, 1988.
- [7] KOELMAN, J. V. A. Cellular-automaton-based simulation of 2d polymer dynamics. *Physical review letters*, American Physical Society, v. 64, n. 16, p. 1915–1918, 1990.
- [8] MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, APS, v. 61, n. 20, p. 2332, 1988.
- [9] HE, X.; LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, APS, v. 56, n. 6, p. 6811, 1997.
- [10] PIAUD, B. et al. Energy-conserving lattice boltzmann thermal model in two dimensions. *Journal of statistical physics*, Springer, v. 121, n. 1-2, p. 119–131, 2005.
- [11] HOOGERBRUGGE, P.; KOELMAN, J. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 19, n. 3, p. 155, 1992.
- [12] GOMPPER, G. et al. Multi-particle collision dynamics: A particle-based mesoscale simulation approach to the hydrodynamics of complex fluids. In: *Advanced Computer Simulation Approaches for Soft Matter Sciences III*. [S.l.]: Springer, 2009. p. 1–87.
- [13] MALEVANETS, A.; KAPRAL, R. Mesoscopic model for solvent dynamics. *The Journal of chemical physics*, v. 110, p. 8605, 1999.

- [14] LEMOS, N. A. *Mecânica analítica*. [S.l.]: Livraria da Física, 2007.
- [15] CASQUILHO, J. P.; TEIXEIRA, P. I. C. *Introdução à Física Estatística*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2012.
- [16] LEACH, A. R. *Molecular modelling: principles and applications*. [S.l.]: Pearson Education, 2001.
- [17] REIF, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1965.
- [18] BOLDRINI, J. L. et al. *Álgebra linear*. 3. ed. [S.l.]: Harper & Row do Brasil, 1980.
- [19] BUTKOV, E. *Física Matemática*. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, 1998.
- [20] SCHERER, C. *Métodos computacionais da Física*. [S.l.]: Livraria da Física, 2005.
- [21] ALLAHYAROV, E.; GOMPPER, G. Mesoscopic solvent simulations: Multiparticle-collision dynamics of three-dimensional flows. *Physical Review E*, APS, v. 66, n. 3, p. 036702, 2002.
- [22] NOGUCHI, H.; KIKUCHI, N.; GOMPPER, G. Particle-based mesoscale hydrodynamic techniques. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 78, n. 1, p. 10005, 2007.
- [23] HUANG, C. et al. Cell-level canonical sampling by velocity scaling for multiparticle collision dynamics simulations. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 229, n. 1, p. 168–177, 2010.
- [24] TUZEL, E. et al. Transport coefficients for stochastic rotation dynamics in three dimensions. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, American Physical Society, v. 68, n. 3, p. 036701–1, 2002.
- [25] IHLE, T.; KROLL, D. Stochastic rotation dynamics. i. formalism, galilean invariance, and green-kubo relations. *Physical Review E*, APS, v. 67, n. 6, p. 066705, 2003.
- [26] ANDERSEN, H. C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *The Journal of chemical physics*, v. 72, n. 4, p. 2384, 1980.
- [27] FRENKEL, D.; SMIT, B. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. [S.l.]: Academic Press, 2002.
- [28] RAPAPORT, D. C. *The art of molecular dynamics simulation*. [S.l.]: Cambridge university press, 1995.
- [29] LAMURA, A. et al. Multi-particle collision dynamics: Flow around a circular and a square cylinder. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 56, n. 3, p. 319, 2001.
- [30] LAMURA, A.; GOMPPER, G. Numerical study of the flow around a cylinder using multiparticle collision dynamics. *The European Physical Journal E*, Springer, v. 9, n. 1, p. 477–

- 485, 2002.
- [31] NIKOUBASHMAN, A.; LIKOS, C. N. Branched polymers under shear. *Macromolecules*, v. 3, n. 43, p. 1610–1620, 2010.
- [32] PADDING, J.; LOUIS, A. Hydrodynamic interactions and brownian forces in colloidal suspensions: Coarse-graining over time and length scales. *Physical Review E*, APS, v. 74, n. 3, p. 031402, 2006.
- [33] KAPRAL, R. Multiparticle collision dynamics: simulation of complex systems on mesoscales. *Advances in Chemical Physics*, v. 140, p. 89, 2008.
- [34] TRITTON, D. J. *Physical Fluid Dynamics*. Nova Iorque: Oxford University Press, 1988.
- [35] HANOT, S.; BELUSHKIN, M.; FOFFI, G. Partial slip at fluid–solid boundaries by multiparticle collision dynamics simulations. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry, v. 9, n. 1, p. 291–296, 2013.
- [36] WHITMER, J. K.; LUIJTEN, E. Fluid–solid boundary conditions for multiparticle collision dynamics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 22, n. 10, p. 104106, 2010.
- [37] IHLE, T.; KROLL, D. Stochastic rotation dynamics: A galilean-invariant mesoscopic model for fluid flow. *Physical Review E*, v. 63, n. 2, p. 8321, 2001.
- [38] IHLE, T.; KROLL, D. Stochastic rotation dynamics. ii. transport coefficients, numerics, and long-time tails. *Physical Review E*, APS, v. 67, n. 6, p. 066706, 2003.
- [39] KIKUCHI, N. et al. Transport coefficients of a mesoscopic fluid dynamics model. *The Journal of chemical physics*, v. 119, p. 6388, 2003.