



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

César Menezes Vieira

*Modelo contínuo para distribuição e fluxo
de partículas em meios superamortecidos*

Fortaleza

2013

César Menezes Vieira

*Modelo contínuo para distribuição e fluxo
de partículas em meios superamortecidos*

Dissertação de Mestrado submetida à Co-
ordenação do Curso de Pós-Graduação em
Física, da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. André Auto Moreira

Fortaleza

2013

César Menezes Vieira

*Modelo contínuo para distribuição e fluxo
de partículas em meios superamortecidos*

Dissertação de Mestrado submetida à Co-
ordenação do Curso de Pós-Graduação em
Física, da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Mestre em Física

Aprovada em 09/08/2013

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. André Auto Moreira (Orientador)
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. José Soares de Andrade Jr.
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas
Gerais

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Setorial de Física

A000p

Vieira, César Menezes.

Modelo contínuo para distribuição e fluxo de partículas em meios superamortecidos / César Menezes Vieira. – 2013.

53 p.;il.

Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Centro de Ciências, Fortaleza, 2013.

Área de Concentração: Física

Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira

1. Dinâmica Molecular. 2. Coarse-graining. 3. Equação de Fokker-Planck. 4. Mecânica Estatística. I.

CDD:000.0

*Aos meus pais,
família e amigos*

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer aos meus pais e outros familiares por todo o apoio que me foi dado, especialmente durante a graduação e o mestrado. Sem esse apoio, certamente não seria possível chegar até aqui.

Ao meu orientador, professor André Auto, pelo apoio e pelas inúmeras assistências e discussões quando foram necessárias. Ao professor Humberto Carmona, que foi bastante prestativo quando precisei de sua ajuda durante este período. Ao George Frederick, com quem tive oportunidade de discutir sobre o trabalho. Aos professores José Soares e Allbens Atman por participarem da banca examinadora. E a todos os outros professores do departamento com quem tive oportunidade de aprofundar meus conhecimentos.

Gostaria também de agradecer aos amigos e colegas do departamento de Física, especialmente os do Laboratório de Sistemas Complexos (LSC) e os do Grupo de Teoria da Matéria Condensada (GTMC), com quem tive a oportunidade de aprender muitas coisas. Além disso, eles sempre proporcionam ótimas discussões, sejam elas de caráter acadêmico ou não.

Aos demais amigos, pelos vários momentos de descontração.

À minha querida namorada, pelo carinho, apoio e compreensão nos momentos em que precisei estar ausente.

E ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Resumo

Sistemas estocásticos são sistemas que apresentam essencialmente um elemento imprevisível, proveniente do acaso. Alguns exemplos desse tipo de sistema são o movimento aleatório de partículas imersas em um fluido e distribuições de velocidade de um fluido em escoamentos turbulentos. A equação de Fokker-Planck é um formalismo para descrever a evolução de sistemas estocásticos em geral, sendo também eficiente quando a contribuição estocástica é irrelevante, resultando em um sistema determinístico. Pode ser aplicada tanto a sistemas que estão próximos do estado de equilíbrio quanto a sistemas fora do equilíbrio. No intuito de modelar partículas imersas em um meio, estudamos o movimento de partículas que interagem com forças repulsivas e de curto alcance. Estudamos esse sistema no regime superamortecido e à temperatura nula, isto é, sem levar em conta efeitos térmicos, utilizando dois potenciais de interação distintos. Por meio da equação de Fokker-Planck, foi desenvolvido em trabalhos anteriores um modelo que descreve o comportamento macroscópico do sistema a partir de uma equação contínua, em regimes estacionários e não-estacionários. Segundo o modelo, a densidade de energia potencial de interação (u_p) é proporcional ao quadrado da densidade de partículas, $u_p = a\rho^2$, onde a é uma constante que depende do potencial de interação. Neste trabalho, tentamos aperfeiçoar este modelo, fazendo uma modificação neste na construção de a , passando a ser uma função da densidade, $a(\rho)$, isto é, considerando a possibilidade de outras formas de não-linearidade. Nossos resultados sugerem que, sob certas circunstâncias, em especial para o potencial de Yukawa, o modelo que propomos consegue prever bem os resultados de simulação de dinâmica molecular. Para este mesmo potencial, vimos que a dependência da densidade de energia potencial de interação (u_p) com a densidade de partículas (ρ) nem sempre é quadrática. Por outro lado, para o segundo potencial estudado, que permite transições estruturais com a variação de densidade, a simplicidade do modelo não foi suficiente para prever o perfil de densidade.

Palavras-chave: Dinâmica Molecular. Coarse-graining. Equação de Fokker-Planck. Mecânica Estatística.

Abstract

Stochastic systems typically present an element of randomness (*e.g.* the random motion of particles inside a overdamped fluid, velocity distributions into turbulent flow, etc.). The Fokker-Planck equation is a formalism useful to describe the temporal evolution of stochastic systems in general, and it is also efficient when the stochastic element is negligible, yielding a deterministic system. It can be applied both to systems far from equilibrium and systems which are close to a state of equilibrium. In order to model particles inside a medium, we study the motion of particles which interact with each other through short-range repulsive potentials. Using the Fokker-Planck equation, a model has been previously developed in order to explain both stationary and non-stationary behaviour of the system. According to the model, the interaction energy density (u_p) is proportional to the square of the density of particles, $u_p = a\rho^2$, where a is a constant which depends on the way the particles interact with each other. In this work we try to improve this model through a change in the construction of a , which is a function of ρ , $a(\rho)$, *i.e.*, we account the possibility of other forms of non-linearity. Our results suggest that, under certain circumstances, specially for the Yukawa potential, the model we propose can predict the results of computational simulation. For the same potential, we see that the density of energy due to the interacting potential does not necessarily show a quadratic dependence on the particle density, ρ . On the other hand, for the second potential analysed, which allows structural transitions with respect to density, this simplified model was not enough to predict the density profile.

Keywords: Molecular Dynamics. Coarse-graining. Fokker-Planck equation. Statistical Mechanics.

Lista de Figuras

1	Ilustração da implementação das condições de contorno periódicas. . . .	p. 18
2	(a) Ilustração da reta tangente utilizada na aproximação do método de Euler; (b) Curva aproximada da solução com quatro passos do método de Euler.	p. 21
3	(a) Gráfico da energia de interação média por partícula em função da densidade; (b) Gráfico de a em função de ρ	p. 33
4	Gráfico de U_p em função de ρ em escala logarítmica para o potencial de Yukawa.	p. 34
5	Perfis de densidade para três valores distintos de N mantendo-se a constante de confinamento (k) fixa.	p. 35
6	Perfis de densidade para três valores distintos de N mantendo-se ρ_0 constante.	p. 36
7	Comparação entre o perfil de densidade das figuras 5 e 6 ($N = 5000$) e a curva de densidade de energia potencial total (linha sólida).	p. 37
8	Comparação entre a energia potencial de interação média por partícula e o quadrado da densidade em função da posição multiplicada por um fator σ para o caso de $N = 5000$ utilizando o potencial de Yukawa. . .	p. 38
9	Comparação entre a densidade de energia potencial de interação e o produto da densidade pela energia de interação média por partícula para o caso de $N = 5000$ utilizando o potencial de Yukawa.	p. 39
10	Comparação entre a energia potencial de interação média por partícula e a densidade em função da posição multiplicada por um fator σ para o caso de $N = 9000$ e $k = 0.2$ utilizando o potencial de Yukawa.	p. 40
11	(a) Representação do potencial $U_{\alpha\beta}$ em função de r com os parâmetros $\alpha = 1.2$, $\beta = 1.0$ e $r_c = 1.0$; (b) Representação de $U_{\alpha\beta}(r)$ em escala logarítmica.	p. 42

12	Menor valor de energia por partícula em função da densidade para cada uma das três redes analisadas, utilizando $\alpha = 1.2$, $\beta = 1$ e $r_c = 1$ (S : rede quadrada; T : rede triangular; H : rede hexagonal).	p. 43
13	Configurações finais obtidas para quatro valores distintos de densidade.	p. 45
14	Gráfico de a em função de ρ para o potencial $U_{\alpha\beta}$, obtido através da equação $a(\rho) = \frac{U_p}{\rho} + \frac{\partial U_p}{\partial \rho}$	p. 46
15	Comparação entre o perfil de densidade ($N = 10000$, $k = 2.10^{-3}$) e a curva de densidade de energia potencial total (linha sólida).	p. 47
16	Configuração final de $N = 10000$ partículas, com $k = 2.10^{-3}$	p. 48
17	Comparação entre a energia potencial de interação média por partícula e a densidade em função da posição multiplicada por um fator σ para o potencial $U_{\alpha\beta}$	p. 49

Sumário

1	Introdução	p. 12
2	Métodos Numéricos	p. 15
2.1	Dinâmica Molecular	p. 15
2.1.1	Condições de contorno periódicas	p. 16
2.1.2	Método de <i>cell-list</i>	p. 18
2.1.3	Integrando as equações do movimento	p. 19
2.1.3.1	O método de Euler	p. 21
3	Modelos	p. 23
3.1	Modelo discreto	p. 23
3.2	A equação de Fokker-Planck	p. 24
3.3	Modelo contínuo	p. 26
3.4	Modificação do modelo contínuo	p. 29
3.4.1	Cálculo de $\rho(x)$ no estado estacionário	p. 30
4	Resultados	p. 32
4.1	Potencial de Yukawa	p. 32
4.1.1	Perfil de densidade	p. 34
4.1.1.1	Baixas densidades	p. 34
4.1.1.2	Altas densidades	p. 40
4.2	Potencial $U_{\alpha\beta}$	p. 42
4.2.1	Perfil de densidade	p. 46

5 Conclusão	p. 50
Apêndice A - <i>Kernel Density Estimation</i>	p. 51
Referências	p. 52

1 Introdução

A nível macroscópico, o estado de um sistema pode ser descrito por vários parâmetros, tais como número de partículas, volume, densidade, energia interna, temperatura, dentre outros, denominados por *variáveis macroscópicas*. Embora existam muitas variáveis desse tipo, muitas delas não podem ser ajustadas independentemente. Para ver isso, basta lembrarmos, por exemplo, da equação de estado de um gás ideal; se soubermos o número de mols, o volume ocupado por ele e sua temperatura, a pressão estará determinada. Dessa forma, os estados são geralmente descritos através de três variáveis macroscópicas independentes, e um conjunto de três variáveis fixas define um *ensemble*, um conjunto de configurações de estados possíveis que têm em comum os mesmos valores de suas variáveis macroscópicas [1]. Além das três variáveis especificadas em um dado ensemble, as demais não são fixas, porém flutuam em torno de um valor médio que, se for uma constante, indica que o sistema está em equilíbrio.

Dentre os ensembles mais comuns, podemos destacar o microcanônico (N , V e U fixos), o canônico (N , V e T fixos) e o grande canônico (μ , V e T fixos), onde N é o número de partículas, V é o volume, U é a energia interna, T é a temperatura e μ é o potencial químico. Imaginemos um conjunto de várias moléculas diatômicas que oscilem em um movimento harmônico simples e que se encontrem em caixas de volumes fixos de modo que não haja qualquer interação entre as moléculas [1]. Temos, portanto, um ensemble microcanônico. Na medida em que elas oscilam, ocorrem eventualmente trocas de energia potencial em energia cinética e vice-versa, de modo que a temperatura não é um parâmetro fixo, desde que as moléculas não estejam todas em fase, isto é, assumindo que elas comecem a vibrar em tempos aleatórios. Entretanto a temperatura média de todo o sistema em um instante de tempo qualquer tenderá a ser próxima da média temporal da temperatura de uma molécula qualquer na medida em que esta evolui no tempo, desde que o tempo seja suficientemente longo [2]. Quando isso é válido, dizemos que o sistema é ergódico, e dessa forma isto pode ser visto como uma conexão entre uma descrição microscópica e uma descrição macroscópica do sistema, uma vez que podemos avaliar o comportamento

médio global de uma propriedade física nos concentrando apenas na evolução temporal da propriedade de uma única amostra que compõe o ensemble. Matematicamente, podemos expressar a ergodicidade na forma

$$\langle A_i \rangle_t = \langle A \rangle_N, \quad (1.1)$$

onde A é uma propriedade física qualquer, $\langle A \rangle_N$ indica a média feita sobre todas as N partículas do sistema e $\langle A_i \rangle_t$ indica a média temporal da propriedade sobre a i -ésima partícula. E embora tenhamos feito uma discussão sobre ergodicidade, não podemos garantir que o sistema que desejamos estudar neste trabalho seja ergódico.

De forma geral, a mecânica estatística proporciona uma conexão entre descrições macroscópicas e microscópicas. Incorporando conceitos de teoria de probabilidades à Física, ela acaba gerando, para sistemas suficientemente grandes, resultados compatíveis com a termodinâmica. Essa abordagem foi introduzida por Maxwell, Boltzmann e Gibbs [3]. Boltzmann propôs uma forma específica para a entropia em termos das probabilidades de configurações microscópicas. Para um macroestado de um dado sistema definido por três parâmetros (N , V e U , por exemplo) [2], podemos determinar o número de todos os possíveis microestados acessíveis ao sistema, representado por $\Omega(N, V, U)$. A partir deste número, que é originado de uma abordagem microscópica, a entropia do sistema é dada por

$$S = -k \sum_{i=1}^{\Omega} p_i \ln p_i, \quad (1.2)$$

onde k é a constante de Boltzmann ($k > 0$) e p_i é a probabilidade de ocorrência do i -ésimo microestado, sendo $\sum_i p_i = 1$. Com isso, podemos ver claramente que $S \geq 0$ [3]. Para o caso onde todas as probabilidades são iguais ($p_i = 1/\Omega$), temos

$$S(N, V, U) = k \ln \Omega(N, V, U), \quad (1.3)$$

Essa equação, conhecida por equação da entropia de Boltzmann, estabelece uma relação entre quantidades macroscópicas e microscópicas.

Similarmente, a equação de Fokker-Planck, discutida com mais detalhes no capítulo 3, é comumente utilizada [4, 5, 6, 7] no sentido de também estabelecer uma conexão semelhante, na medida em que deixamos de analisar características individuais de cada partícula do sistema para examinarmos propriedades médias do mesmo.

No sentido de também estabelecer uma ligação entre essas duas descrições, iremos explorar, neste trabalho, a equação de Fokker-Planck, de modo a relacionar a equação

do movimento superamortecido de um conjunto de partículas, que descreve o sistema de forma discreta, a uma descrição contínua proveniente da equação de Fokker-Planck.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: no capítulo 2, discutimos algumas ferramentas computacionais importantes para a realização deste trabalho, dando destaque para o método de dinâmica molecular; no capítulo 3, descrevemos dois modelos, um discreto e outro contínuo, ambos utilizados na abordagem do problema, posteriormente fizemos uma modificação neste. Na descrição do modelo contínuo, utilizamos a equação de Fokker-Planck, também discutida neste capítulo; no capítulo 4, apresentamos e discutimos os resultados obtidos neste trabalho e, por fim, no capítulo 5, extraímos algumas conclusões e perspectivas futuras.

2 Métodos Numéricos

Dada a impossibilidade de obtenção de uma solução analítica para um problema geral de um conjunto de muitos corpos, uma solução numérica é imprescindível. Na medida em que os computadores ficam cada vez mais sofisticados, os métodos computacionais permitem soluções numéricas de problemas cada vez mais complicados.

Simulações computacionais nos fornecem um caminho entre os detalhes microscópicos de um sistema (massa dos corpos, interação entre partículas etc) e propriedades macroscópicas de interesse experimental (energia do sistema, coeficientes de transporte, temperatura, entre outras) [8]. Provavelmente o primeiro trabalho de simulação computacional foi realizado por Nicholas Metropolis e colaboradores, em 1953, lançando as bases do que hoje é conhecido como o método de Monte Carlo. Neste capítulo, discutimos sobre o método de Dinâmica Molecular, a ferramenta computacional mais relevante para o nosso trabalho.

2.1 Dinâmica Molecular

O problema de muitos corpos, originado na tentativa de descrever a dinâmica de um sistema planetário, é analiticamente insolúvel para três ou mais corpos. A técnica de Dinâmica Molecular consiste basicamente em resolver as equações do movimento para cada partícula que compõe o sistema, em qualquer escala de tamanho, em princípio. Ela permite que realizemos um experimento, ainda que virtual, que se assemelhe a um experimento físico real. Além disso, simular sistemas sob condições extremas, como valores elevados de temperatura e pressão, por exemplo, pode ser um experimento muito mais fácil e seguro de ser preparado do que um experimento real. Da mesma forma que em um experimento, preparamos uma amostra, e a ela conectamos um instrumento de medida, de modo a realizar a medida ao longo do tempo. Nas simulações de dinâmica molecular, acontece algo semelhante: ao passo em que resolvemos as equações do movimento e o sistema evolui, podemos calcular propriedades do sistema que nos interessam até que o

sistema entre em um estado de equilíbrio e possamos extrair alguma informação final sobre o mesmo. É importante comentar também que em uma simulação computacional tem-se uma informação completa sobre todo o sistema, enquanto que a informação que se obtém durante um experimento é parcial. Por outro lado, esta informação da simulação é compatível com um modelo que tenta explicar um determinado fenômeno da natureza, enquanto que um experimento é compatível com a própria natureza do fenômeno.

O primeiro trabalho utilizando o método de dinâmica molecular, realizado por Berni Alder e Thomas Wainwright, foi publicado em 1957 [9]. Eles estudaram a distribuição de moléculas em um líquido, considerando um modelo no qual as moléculas são representadas por esferas rígidas. A simulação foi realizada no computador mais rápido da época, um IBM-704, permitindo a simulação do movimento de 32 e 108 moléculas, com tempo de simulação de 10 até 30 horas [10], o que rendeu a Alder a medalha Boltzmann, em 2001, pela invenção do método. Hoje em dia, devido aos grandes avanços tecnológicos, simulações de dinâmica molecular podem ser feitas em computadores relativamente simples, embora haja um método que demande mais trabalho computacional, como é o caso da dinâmica molecular de primeiros princípios, também chamada de *ab initio* [11, 12]. Neste caso, interações interatômicas são levadas em conta, permitindo que ligações químicas se formem ou se rompam, necessitando, portanto, de uma abordagem bem mais apurada do problema, fazendo-se o uso da mecânica quântica.

Diferentemente da forma Newtoniana, com a qual abordamos o método neste trabalho, também é possível utilizar os formalismos de Lagrange e de Hamilton para descrever o sistema. Adicionalmente, embora seja um método a priori determinístico, uma vez que permite que possamos especificar as velocidades e posições das partículas em qualquer instante de tempo, a dinâmica molecular também permite que simulemos um sistema em contato térmico com um reservatório, de modo que sua temperatura seja constante e envolva, portanto, forças estocásticas.

2.1.1 Condições de contorno periódicas

Em simulações de dinâmica molecular, normalmente colocamos partículas dentro de uma região de simulação e deixamos o sistema evoluir com o tempo. Em sistemas finitos, da ordem de 10^3 partículas, por exemplo, uma parcela significativa das partículas se encontrará nas bordas do sistema, o que pode produzir efeitos indesejáveis. Assim, na medida em que é aumentado o número de partículas, o percentual de partículas presentes na borda se torna cada vez menos significativo, de forma que os resultados ficam cada vez

mais realistas. Entretanto, o custo computacional aumenta com o aumento do número de partículas, o que resulta em um tempo de simulação maior. E não existe uma resposta definitiva para a questão do quão grande deve ser um sistema relativamente pequeno de forma que ele reproduza resultados similares a um sistema infinito [13].

Para resolver esse problema, implementamos as condições de contorno periódicas a partir de um sistema com um número reduzido de partículas de forma que estas não sejam influenciadas pelas bordas do sistema. Essas condições são facilmente implementadas repetindo-se a célula de simulação, representada pela célula central da figura 1, em todas as direções do sistema. No caso representado na figura, se uma partícula atravessa a região de simulação, ela reentrará imediatamente na região através da aresta oposta da célula sem mudança na direção ou na intensidade da velocidade. Esse procedimento é realizado ao deslocarmos a partícula, durante a integração das equações do movimento, que será explicado posteriormente. Além disso, existe ainda uma outra característica da implementação das condições de contorno periódicas, que é a convenção da mínima imagem, realizada durante o cálculo de interação de curto alcance¹ entre as partículas, e descrita a seguir: quando o módulo de uma certa componente da distância entre duas partículas é superior à metade do comprimento da célula de simulação na mesma direção, a interação entre essas partículas é contada como se uma das partículas estivesse a uma distância reduzida de L , onde L é o comprimento da aresta da célula de simulação na direção associada à componente. Em outras palavras, uma partícula interage com uma outra partícula ou com a sua imagem, dependendo de qual for a menor distância. Adicionalmente, em potenciais de curto alcance, que interessam ao nosso trabalho, normalmente existe uma distância além da qual não há interação entre as partículas, chamada de raio de corte (r_c), utilizada convenientemente de forma a evitar cálculos de interação que não contribuem de forma relevante. Portanto, para que a convenção da mínima imagem seja implementada corretamente, é necessário que r_c seja no máximo igual à metade do comprimento da célula, pois, em caso contrário, uma dada partícula poderia interagir com outra e com a sua respectiva imagem, o que seria incoerente com uma situação real.

Entretanto, em alguns casos, como em alguns sistemas biológicos [14], o alcance das interações é muito grande e o uso de algoritmos que levam em conta um raio de corte levam a erros significantes, além de comportamentos artificiais em uma simulação [15, 16, 17], sendo recomendada a utilização do método da soma de Ewald [18].

¹Interações de curto alcance são interações cujo decaimento com a distância r é mais acentuado que r^{-D} , sendo D a dimensionalidade do sistema.

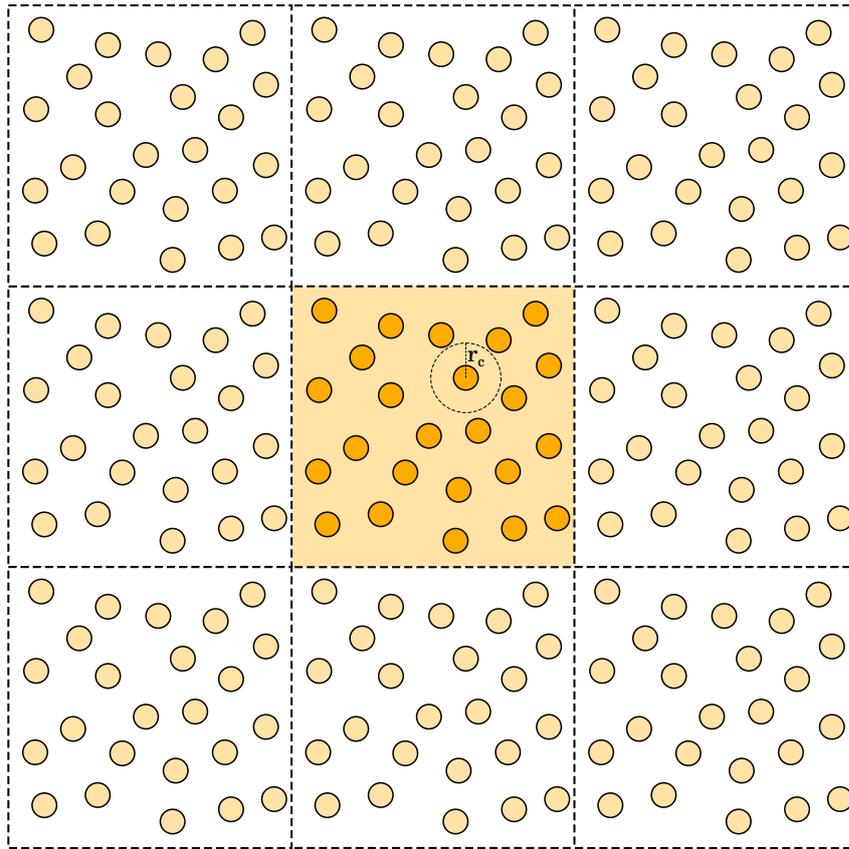


Figura 1: Ilustração da implementação das condições de contorno periódicas.

2.1.2 Método de *cell-list*

O método de *cell-list* (também chamado em inglês de *cell linked-lists method*) é muito utilizado em simulações de dinâmica molecular e Monte Carlo para aumentar a eficiência do programa, de forma a acelerar os cálculos de interação entre as partículas. A ideia principal do método é dividir a região de simulação onde se encontram N partículas em $M \times M'$ diversas células menores, com arestas maiores a r_c , de forma que uma partícula que se encontre em uma dada célula só interaja com as partículas que se encontrem na mesma célula e nas células vizinhas. Portanto, em um problema bidimensional, existem aproximadamente $N_c = N/MM'$ partículas em cada célula, e cada partícula interage com as partículas que se encontram nas 9 células mais próximas, incluindo a célula em que ela se encontra. Utilizando esse método em duas dimensões, precisamos examinar apenas $9NN_c$ pares de partículas (ou a metade desse número se usarmos a terceira lei de Newton a nosso favor), em contraste com $\frac{1}{2}N(N-1)$ pares utilizando o método convencional com ajuda da terceira lei [8], aumentando consideravelmente a vantagem da utilização do método à medida que aumentamos o número total de células (MM') para um dado número de partículas. A seguir apresentamos a ideia básica do algoritmo para a implementação

do método.

```

para (todos os pares de células vizinhas,  $C_i$  e  $C_j$ ) faça
  para (todas as partículas  $i$  pertencentes a  $C_i$ ) faça
    para (todas as partículas  $j$  pertencentes a  $C_j$ ) faça
       $r^2 \leftarrow \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2$ 
      se  $r^2 \leq r_c^2$  então
        Calcula a interação entre  $i$  e  $j$ 
        Armazena a força que  $i$  e  $j$  experimentam
      fim se
    fim para
  fim para
fim para

```

Como foi mencionado anteriormente, as partículas de uma dada célula interagem somente com as partículas contidas na mesma célula e nas células vizinhas e para que isso seja realizado, é necessário sabermos quais partículas estão em uma determinada célula. Para solucionar esse problema, utilizamos dois vetores, sendo um com a mesma dimensão do número total de células para guardar o número da primeira partícula que entrou em uma dada célula, e outro com a mesma dimensão do número total de partículas, que nos dá a informação sobre para qual partícula uma dada partícula aponta. Essa construção é feita de modo que, a partir do conhecimento de qual partícula entrou primeiro em determinada célula, podemos combinar os dois vetores de forma que saibamos todas as partículas que entraram naquela célula, conhecendo assim, quais partículas devem ser levadas em consideração e evitando que se perca tempo computacional com partículas que tenham contribuição irrelevante para as forças que desejamos calcular. Para mais detalhes, veja o capítulo 5 da referência [8] e o capítulo 3 da referência [13].

No caso de simulações de Monte Carlo, a seleção da partícula que a ser movida é dada verificando-se uma célula e suas vizinhas, e não o sistema como um todo [8]. O método de *cell-list* tem sido usado com sucesso considerável em simulações de problemas que exigem um número elevado de partículas, tais como em simulações de plasmas, galáxias e cristais iônicos [8].

2.1.3 Integrando as equações do movimento

Para o caso superamortecido, o termo de segunda ordem da segunda lei de Newton é desprezado, como será visto no próximo capítulo e, portanto, a equação a ser integrada é de primeira ordem, o que torna o processo mais simples. Para resolvê-la, utilizamos o método de Euler, que é o método mais simples para a resolução de problemas de valor

inicial descritos por equações diferenciais de primeira ordem.

Para calcular as forças que atuam em uma determinada partícula, utilizamos a equação do movimento superamortecido, que será apresentada na seção 3.1 do próximo capítulo. No nosso problema, existem duas forças que atuam em uma dada partícula: a força de interação devido às outras partículas e a força de confinamento, que tende a concentrar todas as partículas no centro da célula de simulação. Dessa maneira, dada uma configuração de partículas em um instante de tempo t , calculamos a força que cada partícula sofre, e armazenamos em um vetor cuja dimensão é igual ao número de partículas. Em seguida, de posse desta informação, calculamos o deslocamento que cada partícula terá no instante de tempo posterior utilizando o método de Euler, que será explicado na próxima seção.

Para o caso onde não há superamortecimento, tem-se que levar em conta o termo de derivada segunda e resolver a equação de Newton propriamente dita. Neste caso, é mais recomendável a utilização de métodos mais sofisticados, como o método de Gear de ordem superior em Δt utilizando o algoritmo *predictor-corrector*, *Velocity-Verlet*, dentre outros [13, 19].

2.1.3.1 O método de Euler

Seja $y(x)$ uma solução que desejamos encontrar, mostrada na figura 2a. O método de Euler baseia-se em aproximar o gráfico de $y(x)$ por uma sequência de retas tangentes (L_0, L_1, \dots, L_N) aos pontos x_0, x_1, \dots, x_N , como mostra a figura 2b, de modo que a função procurada se dá pela concatenação das várias retas tangentes [20]. Na figura 2a, podemos ver detalhadamente uma das retas tangentes utilizadas na descrição do método. Como ilustrado na figura 2a, o ponto $(x_i, y(x_i))$ é um ponto do gráfico $y = y(x)$, e os

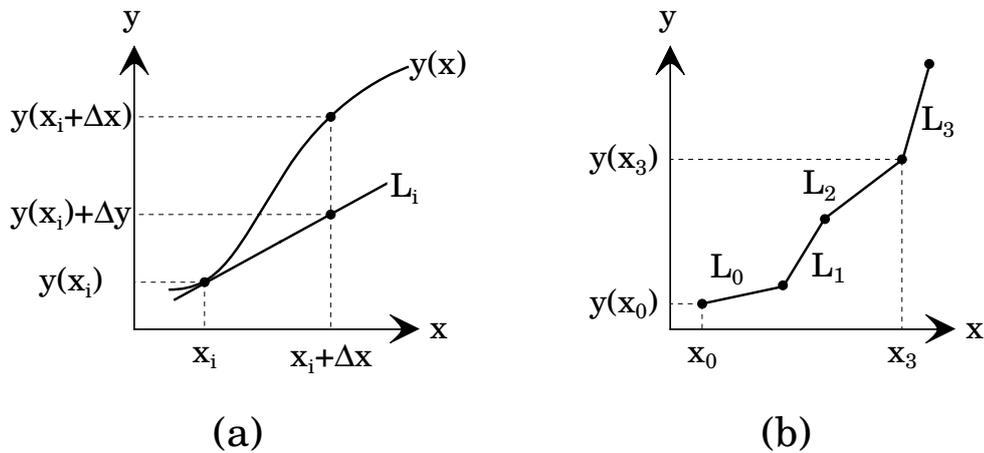


Figura 2: (a) Ilustração da reta tangente utilizada na aproximação do método de Euler; (b) Curva aproximada da solução com quatro passos do método de Euler.

outros pontos na sua vizinhança podem ser aproximados pelos pontos correspondentes da tangente L_i , que passa pelo ponto $(x_i, y(x_i))$. Dessa forma, tomando Δx como uma certa distância ao longo do eixo x , conforme a figura, podemos aproximar $y(x_i + \Delta x)$ na forma

$$y(x_i + \Delta x) \approx y(x_i) + \Delta y, \quad (2.1)$$

que naturalmente se torna cada vez mais precisa quanto menor for o valor de Δx . Por outro lado, se definirmos $f(x, y)$ como sendo a derivada de $y(x)$ com respeito a x , podemos aproximar a inclinação da curva no ponto $(x_i, y(x_i))$ pela derivada de y nesse ponto, isto é,

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = f(x_i, y(x_i)), \quad (2.2)$$

Substituindo na equação (2.1), temos que

$$y(x_i + \Delta x) \approx y(x_i) + \Delta x f(x_i, y(x_i)), \quad (2.3)$$

ou, alternativamente,

$$f(x_i, y(x_i)) \approx \frac{y(x_i + \Delta x) - y(x_i)}{\Delta x}. \quad (2.4)$$

Assim, de forma geral, no método de Euler a derivada parcial de uma função $g(u, t)$ com respeito a t , por exemplo, é escrita como

$$\frac{\partial g(u, t)}{\partial t} \approx \frac{g(u, t + \Delta t) - g(u, t)}{\Delta t}. \quad (2.5)$$

Dessa forma, comparando a função g com a função posição de uma dada partícula, podemos encontrar, a partir de sua velocidade instantânea ($\dot{g}(t)$), o deslocamento executado por ela entre dois instantes consecutivos, t e $t + \Delta t$. A velocidade, por sua vez, é proporcional à força com que a partícula percebe as outras ao seu redor, e à força externa, como veremos no próximo capítulo. Portanto, depois de calculada a força que uma dada partícula i sofre, calculamos o seu deslocamento utilizando o que foi discutido acima, isto é,

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t. \quad (2.6)$$

A seguir apresentamos a ideia básica do algoritmo para a implementação do método de Euler, realizado após efetuarmos o cálculo das forças.

para (todas as partículas, i) **faça**
 atualiza a posição de i segundo a equação (2.6)
 aplica as condições de contorno
fim para

3 Modelos

Neste capítulo, apresentamos duas formas diferentes de analisar o sistema físico que desejamos estudar, e as relacionamos de forma que uma possa dar uma contribuição à outra. Na primeira abordagem, tratamos o sistema de forma discreta, isto é, estudamos o movimento de cada partícula constituinte do sistema, baseando-se na segunda lei de Newton. Na segunda, tratamos o sistema de forma contínua, ou seja, estudamos o sistema sem nos preocuparmos com a dinâmica individual de cada partícula, mas com um comportamento médio de todo o sistema, baseando-se na equação diferencial de Fokker-Planck, que descreve a evolução temporal da densidade média de partículas do sistema. Devido à sua importância para este trabalho, discutimos brevemente a equação de Fokker-Planck antes da discussão sobre o modelo contínuo. Ao fim da discussão sobre este, apresentamos uma modificação neste modelo de forma a eliminar a necessidade de um ajuste.

3.1 Modelo discreto

No sentido de descrever o comportamento de nosso sistema físico, uma das formas através da qual podemos representá-lo é por um conjunto de partículas pontuais que interagem entre si através de uma força conservativa \mathbf{F}^{pp} , que naturalmente é derivada de um dado potencial de interação que, no caso, é de natureza repulsiva e de curto alcance. Podemos, ainda, introduzir uma força oriunda de um agente externo, \mathbf{F}^{ext} , que tem a mesma forma para todas as partículas que compõem o sistema. Além disso, como as partículas movem-se em um meio dissipativo, é necessário levar em conta a força em que o meio atua sobre elas, que é proporcional à velocidade das mesmas. Dessa forma, a segunda lei de Newton para uma dada partícula i que tem $\mathbf{r}_i(t)$ como um vetor que a localiza em um instante de tempo t pode ser expressa na forma

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i^{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^{pp} - \gamma \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \quad (3.1)$$

onde m_i é a massa da partícula i , N é o número total de partículas e γ é a viscosidade efetiva do meio. Essa equação também é chamada de equação de Langevin livre de ruídos térmicos. Dividindo ambos os lados da equação anterior por γ , obtemos

$$\frac{m_i}{\gamma} \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{1}{\gamma} \left(\mathbf{F}_i^{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^{pp} \right) - \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}. \quad (3.2)$$

Observe que o fator m_i/γ tem unidade de tempo, sendo chamado de tempo de relaxação (τ). No caso de vórtices em supercondutores [21, 22], por exemplo, quando a massa do vórtice é muito menor do que a massa do elétron, o valor de τ é menor que $10^{-12} s$ e, sendo esta contribuição inercial irrelevante frente aos outros termos da equação do movimento, temos um movimento superamortecido. Sendo então o movimento superamortecido, o lado esquerdo da equação anterior se anula, o que nos leva à seguinte expressão:

$$\mathbf{v}_i \equiv \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{1}{\gamma} \left(\mathbf{F}_i^{ext} + \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^{pp} \right). \quad (3.3)$$

De posse dessa equação, podemos prever a velocidade que cada partícula terá em um dado instante de tempo t , determinando o deslocamento que ela sofrerá entre t e $t + \Delta t$ através do método de Euler, onde Δt é o intervalo de tempo entre dois instantes de tempo consecutivos.

3.2 A equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck descreve a evolução de sistemas estocásticos. Ela descreve, por exemplo, movimentos erráticos de pequenas partículas imersas em fluidos (movimento browniano), distribuições de velocidade de um fluido em escoamentos turbulentos, entre outros, e pode ser aplicada a sistemas que estão próximos ao estado estacionário de equilíbrio térmico e a sistemas que se apresentam em um estado longe do equilíbrio [23].

A fim de discutirmos a equação de Fokker-Planck, consideremos uma partícula Browniana imersa em um reservatório térmico. Nessa situação, há um termo de força responsável pelo amortecimento com que o meio freia a partícula, e um termo de força flutuante que é proporcional à temperatura do meio, também chamado de ruído térmico. Portanto, a equação de Langevin, que descreve a evolução temporal de uma variável de estado $q(t)$ da partícula assume a forma

$$\frac{dq(t)}{dt} = -\zeta q(t) + \sqrt{\Gamma} \theta(t), \quad (3.4)$$

onde ζ é a constante de amortecimento, $\theta(t)$ descreve o ruído térmico, e Γ corresponde à amplitude desse ruído. Sendo $P(x, t)$ a densidade de probabilidade de encontrarmos a partícula numa posição x em um instante de tempo t , a evolução temporal de $P(x, t)$ é governada pela equação de Fokker-Planck em sua forma linear:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\zeta \frac{\partial}{\partial x} [f(x)P(x, t)] + \Gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (3.5)$$

onde a amplitude Γ depende da massa da partícula, da viscosidade do meio e da temperatura do reservatório, e $f(x)$ é um termo que relaciona a natureza da força que atua na partícula [24]. A equação de Fokker-Planck pode ser facilmente vista como uma equação de continuidade na forma

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (3.6)$$

sendo a corrente $J(x, t)$ dada por $J(x, t) \equiv \zeta x P(x, t) - \Gamma \frac{\partial P(x, t)}{\partial x}$. Integrando a equação acima na variável x , no intervalo de $x = a$ até $x = b$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b P(x, t) dx = - \int_a^b \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} dx = J(a, t) - J(b, t). \quad (3.7)$$

Supondo que esse intervalo compreenda toda a região de interesse onde a distribuição P pode ter valores diferentes de zero, podemos usar a conservação da probabilidade total, isto é, que a integral do lado esquerdo da equação acima é igual a 1. Dessa forma, podemos concluir que $J(a, t) = J(b, t)$. Para o caso estacionário, se não há fluxo de partículas nas bordas, a corrente é nula em todo o sistema.

Em sistemas de muitos corpos, uma descrição completa necessita que consideremos as interações entre todas as partículas que o compõem. Frequentemente, tais sistemas podem ser descritos com boa aproximação pela evolução de uma só partícula, substituindo apropriadamente a força que ela sofre devido às outras partículas em termos de uma força média com que as outras exercem sobre a mesma, que é chamada de força de campo médio. Um exemplo muito conhecido desse tipo de aproximação é a inserção do termo $-\gamma \mathbf{v}$ na segunda lei de Newton como sendo responsável pela descrição da força com que as pequenas partículas de um fluido exercem sobre uma partícula maior que está imersa no mesmo (equação de Langevin). Assim como na teoria de campo médio, podemos descrever sistemas de muitos corpos em termos de equações de Fokker-Planck através da evolução temporal da densidade de probabilidades P . De forma a levar em conta interações entre partículas [23], devemos considerar a equação de Fokker-Planck na seguinte forma

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial r_i} [D_i(\mathbf{r}, t, P)P(\mathbf{r}, t)] + \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial r_i \partial r_j} [D_{ij}(\mathbf{r}, t, P)P(\mathbf{r}, t)], \quad (3.8)$$

que é uma forma não-linear. Os termos D_i e D_{ij} são chamados de coeficientes de *drift* e difusão, respectivamente.

3.3 Modelo contínuo

Diferentemente do modelo discreto, o modelo contínuo não se concentra em descrever o comportamento exato de cada partícula, mas em descrever a evolução temporal da densidade média do sistema, representada por $\rho(\mathbf{r}, t)$. Com o intuito de construir uma equação contínua com o auxílio da equação de Fokker-Planck, obtida anteriormente por Zapperi, Moreira e Andrade [4], é conveniente definirmos $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ como sendo a densidade de probabilidade de que encontremos as partículas $1, 2, \dots, N$ em posições $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ em um determinado instante de tempo t . A partir de P , podemos escrever sua evolução temporal a partir da equação de Fokker-Planck, eq. (3.5):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_i^N \nabla_i \cdot (-\mathbf{v}_i P), \quad (3.9)$$

onde o termo proporcional à derivada segunda em P , geralmente considerado em trabalhos semelhantes [4, 6, 5] para levar em conta a temperatura do sistema, está ausente por não termos introduzido ruído térmico ao nosso sistema ($\Gamma = 0$).

Definindo a densidade média $\rho(\mathbf{r}, t)$ do sistema como

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \left\langle \sum_i^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\rangle = \int d^{2N} r' P \sum_i^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (3.10)$$

podemos obter a expressão para a derivada parcial da densidade média:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int d^{2N} r' \frac{\partial P}{\partial t} \sum_i^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (3.11)$$

Substituindo a expressão encontrada na equação (3.9), encontramos

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int d^{2N} r' \sum_i^N \nabla'_i \cdot (-\mathbf{v}'_i P) \sum_m^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_m), \quad (3.12)$$

onde \mathbf{v}'_i , dado pela equação (3.3), tem uma contribuição devido à força externa e à interação entre as partículas. Utilizando as propriedades da delta de Dirac nas derivadas parciais, obtemos

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \sum_i^N \int d^{2N} r' \mathbf{v}'_i P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (3.13)$$

Substituindo \mathbf{v}'_i pela expressão encontrada na equação (3.3), encontramos

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \sum_i^N \frac{1}{\gamma} \left[\int d^{2N} r' \mathbf{F}_i^{ext} P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) + \int d^{2N} r' \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^{pp} P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) \right]. \quad (3.14)$$

Similarmente à equação da continuidade, podemos também definir uma corrente \mathbf{j}_{ext} ,

$$\mathbf{j}_{ext} \equiv \sum_i^N \frac{1}{\gamma} \int d^{2N} r' \mathbf{F}_i^{ext} P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (3.15)$$

relacionada à contribuição da força externa, e uma corrente \mathbf{j}_p ,

$$\mathbf{j}_p \equiv \sum_i^N \frac{1}{\gamma} \int d^{2N} r' \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}^{pp} P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (3.16)$$

relacionada à contribuição da interação entre as partículas, de forma que a equação possa ser expressa na forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{j}_{ext} + \mathbf{j}_p). \quad (3.17)$$

Para o termo referente à força externa, podemos utilizar a definição de $\rho(\mathbf{r}, t)$ e reescrever \mathbf{j}_{ext} como sendo

$$\mathbf{j}_{ext} = \frac{\rho}{\gamma} \mathbf{F}^{ext}. \quad (3.18)$$

De modo a tentar tornar a expressão de \mathbf{j}_p mais simples, vamos reescrevê-la na forma

$$\mathbf{j}_p = \frac{1}{\gamma} \sum_i^N \int d^{2N} r' \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_p(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j) P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (3.19)$$

onde o termo \mathbf{F}_p representa a força de interação entre duas partículas situadas em \mathbf{r}'_i e \mathbf{r}'_j . Na presença da delta de Dirac [25], $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i)$, pode-se escrever \mathbf{j}_p como

$$\mathbf{j}_p = \frac{1}{\gamma} \sum_i^N \int d^{2N} r' \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j) P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i). \quad (3.20)$$

Escrevendo \mathbf{r}'_j em termos de uma delta de Dirac, isto é,

$$\mathbf{r}'_j = \int d^{2N} r'' \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'_j), \quad (3.21)$$

podemos ainda reescrever o termo $\mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j)$ como

$$\mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_j) = \int d^{2N} r'' \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'_j). \quad (3.22)$$

Substituindo na expressão da corrente, eq. (3.20), obtemos

$$\mathbf{j}_p = \frac{1}{\gamma} \int d^{2N} r'' \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \int d^{2N} r' \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'_j) P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (3.23)$$

que pode se tornar mais compacta se definirmos

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t) \equiv \int d^{2N} r' \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'_j) P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i), \quad (3.24)$$

obtendo a expressão para a corrente devido à interação entre as partículas na forma

$$\mathbf{j}_p = \frac{1}{\gamma} \int d^{2N} r'' \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t). \quad (3.25)$$

Supondo que o termo $\rho^{(2)}$ pode ser escrito como $\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t) = \rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}'', t)$, a expressão anterior se torna

$$\mathbf{j}_p \approx \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\gamma} \int d^{2N} r'' \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \rho(\mathbf{r}'', t). \quad (3.26)$$

Sabendo que força de interação entre as partículas é de curto alcance, indo rapidamente a zero para distâncias maiores do que o raio de corte, podemos esperar também que a densidade varie lentamente dentro do raio de interação da força (r_c). Portanto, podemos expandir a função $\rho(\mathbf{r}'', t)$ em torno de $\mathbf{r}'' = \mathbf{r}$ e considerar os termos até primeira ordem. É importante salientar que tal aproximação de primeira ordem restringe a descrição para forças de interação que sejam de curto alcance, necessitando considerar ordens superiores no caso de forças de maior alcance. Expandindo e substituindo na integral, obtemos

$$\mathbf{j}_p \approx \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\gamma} \int d^{2N} r'' \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') [\rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \rho(\mathbf{r}, t) \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r})]. \quad (3.27)$$

Devido à simetria radial de \mathbf{F}_p , o primeiro termo da integral é nulo, assim como as contribuições perpendiculares a $\nabla \rho$. Deste modo, podemos escrever [25, 26, 27]

$$\mathbf{j}_p \approx -\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\gamma} \nabla \rho(\mathbf{r}, t) \int d^{2N} r'' \frac{1}{2} \mathbf{F}_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r}) = -\frac{a}{\gamma} \rho \nabla \rho, \quad (3.28)$$

onde o parâmetro a é definido como sendo o resultado da integral que aparece na equação acima.

Dessa forma, a equação descrita pelo modelo contínuo, que governa a evolução temporal da densidade média, é finalmente obtida, substituindo as correntes obtidas na equação (3.17):

$$\gamma \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho (-a \nabla \rho + \mathbf{F}^{ext})]. \quad (3.29)$$

Esse procedimento, que nos permitiu partir de uma descrição discreta do sistema e en-

contrar uma descrição contínua, com o auxílio da equação de Fokker-Planck, é chamado de aproximação do tipo *coarse-graining*, e é comumente utilizado para encontrar equações contínuas a partir de modelos superamortecidos [4, 5, 6, 28, 29]. É possível também encontrarmos a mesma equação macroscópica de uma forma alternativa, onde considera-se a continuidade da densidade, $\rho(x, t)$, que pode ser definida a partir da equação da continuidade [25].

Como visto anteriormente, a constante a aparece naturalmente na equação (3.28) como resultado de uma integral. A modificação que nos propomos a fazer é utilizar a equação que governa a evolução temporal da densidade, (3.29), mas com uma forma diferente para a , sendo uma função da densidade, de modo a fazermos uma extensão do modelo. Esta modificação será apresentada na próxima seção.

3.4 Modificação do modelo contínuo

Seja um sistema constituído de muitas partículas que interagem entre si segundo um dado potencial repulsivo. Em um estado de densidade homogênea, isto é, desconsiderando o potencial confinante, podemos esperar que a energia média de interação por partícula (U_p) dependa somente da densidade de partículas, $U_p = U_p(\rho(x))$. Utilizando U_p para escrever a densidade de energia de interação $u_p(x)$, obtemos

$$u_p(x) = U_p(\rho(x))\rho(x). \quad (3.30)$$

Tomando a densidade de força como $f_p(x)$,

$$f_p(x) = -\frac{\partial u_p(x)}{\partial x}, \quad (3.31)$$

encontramos

$$f_p(x) = -\rho \left(\frac{\partial U_p}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{U_p}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right), \quad (3.32)$$

ou seja,

$$f_p(x) = -\left(\frac{\partial U_p}{\partial \rho} + \frac{U_p}{\rho} \right) \rho \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (3.33)$$

Como vimos pela equação (3.29), a contribuição da força de interação pode ser representada por $-a\nabla\rho$. Portanto, podemos escrever que a densidade da força de interação é dada por $f_p(x) = -(a\nabla\rho)\rho$. Deste modo, podemos observar a equação (3.33) e definir $a(\rho)$ como

$$a(\rho) = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \rho} + \frac{U_p}{\rho} \right). \quad (3.34)$$

Dessa forma, para um dado potencial de interação, calculamos a energia por partícula em função da densidade ($U_p(\rho)$), obtendo a função $a(\rho)$. De posse dessa função, resolvemos numericamente a equação (3.40) para obter o perfil de densidade $\rho(x)$.

3.4.1 Cálculo de $\rho(x)$ no estado estacionário

Escrevendo a equação (3.29) para o estado estacionário, temos

$$\nabla \cdot \{ \rho [a(\rho) \nabla \rho - \mathbf{F}^{ext}] \} = 0, \quad (3.35)$$

o que nos leva a

$$a(\rho) \nabla \rho - \mathbf{F}^{ext} = 0, \quad (3.36)$$

uma vez que não há fluxo de partículas nas bordas do sistema. Como estamos interessados em estudar o movimento bidimensional de partículas no interior de um canal cuja dimensão x é muito maior que a dimensão y , e sendo a força externa na direção x , podemos utilizar um argumento de simetria para afirmar que a dependência da densidade em relação à coordenada y é próxima de zero, isto é, que $\rho(\mathbf{r}, t) \approx \rho(x, t)$. Dessa forma, a equação anterior se torna

$$a(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} = F^{ext}, \quad (3.37)$$

ou ainda

$$\int_{\rho_0}^{\rho} a(\rho') d\rho' = \int_0^x F^{ext} dx, \quad (3.38)$$

onde ρ_0 é a densidade no ponto central da célula, isto é, $\rho(x=0) = \rho_0$, e F^{ext} é dada pelo negativo do gradiente do potencial externo, U_{ext} , dado por

$$U_{ext} = \frac{k}{2} x^2, \quad (3.39)$$

sendo k uma constante. Sendo assim, a equação (3.38) se reduz a

$$\int_{\rho}^{\rho_0} a(\rho') d\rho' = \frac{k}{2} x^2. \quad (3.40)$$

É interessante observar que, se considerássemos a como uma constante, a exemplo do modelo contínuo exposto na seção anterior, veríamos um perfil de densidade $\rho(x)$ proporcional a x^2 , ou seja, teríamos um perfil parabólico para $T = 0$. Nesta situação, podemos ajustar uma parábola ao resultado numérico, determinando o valor do parâmetro a . No entanto, utilizando nossa modificação, precisamos resolver a equação (3.40) supondo uma forma para $a(\rho)$, e a partir disso, obter uma forma para $\rho(x)$.

Conforme o que foi discutido até aqui, a referência [6] mostra que para temperaturas próximas de zero o perfil de densidade assume um comportamento aproximadamente parabólico. Além disso, para valores elevados de temperatura, os autores dessa referência mostraram que o perfil torna-se tipicamente gaussiano.

4 Resultados

Neste capítulo, apresentamos e discutimos os resultados da simulação computacional juntamente com os resultados numéricos previstos de acordo com a teoria discutida no capítulo 3. Para estudar o modelo, escolhemos dois potenciais de interação, ambos de natureza repulsiva e de curto alcance, e realizamos simulações de dinâmica molecular, utilizando a equação do modelo microscópico descrito no capítulo 3. Integramos, portanto, as equações do movimento até que o sistema entre em um estado próximo de equilíbrio². A partir de cada configuração, traçamos um perfil de densidade em função da posição e comparamos com o perfil previsto pelo modelo, conforme discutimos na seção 3.4.1.

4.1 Potencial de Yukawa

O potencial do tipo Yukawa é amplamente utilizado para descrever interações repulsivas e de curto alcance, como no estudo de interação entre colóides [5, 30], na descrição de partículas de poeira em plasmas [31], dentre outros. Por essa razão, resolvemos utilizá-lo para estudar o modelo. A expressão para o potencial de Yukawa utilizada neste trabalho é dada por

$$U(r) = \frac{\varepsilon}{\lambda r} e^{-\lambda r}, \quad (4.1)$$

onde λ tem unidade de r^{-1} e valor unitário. Sabe-se que partículas sujeitas a esse potencial apresentam uma estrutura triangular em duas dimensões [31]. Dessa maneira, podemos encontrar $U_p(\rho)$ de modo a encontrar $a(\rho)$. Para calcular cada ponto do gráfico da figura 3a, construímos uma rede triangular e determinamos a energia média de interação por partícula para cada valor de densidade. A partir dessa curva, utilizando a equação (3.34), podemos encontrar a forma da função $a(\rho)$, representada na figura 3b.

²Tecnicamente, a configuração final era obtida quando a variação da energia total média do sistema era menor que 10^{-5} unidades de ε .

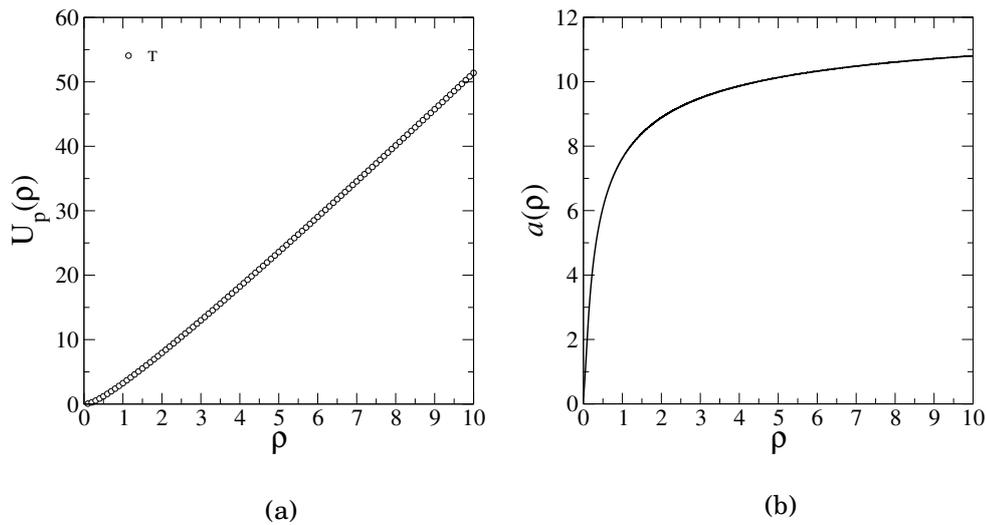


Figura 3: (a) Gráfico da energia de interação média por partícula em função da densidade. A legenda do gráfico indica que um sistema interagindo com esse potencial se estabelece em uma rede triangular; (b) Gráfico de a em função de ρ , obtido a partir da curva representada em (a), através da equação $a(\rho) = \frac{U_p}{\rho} + \frac{\partial U_p}{\partial \rho}$. Podemos observar que a função $a(\rho)$ apresenta um comportamento aproximadamente constante para valores elevados de densidade, diferentemente do que acontece na região de baixos valores de densidade.

Para melhor análise, representamos o gráfico de U_p em função de ρ em escala logarítmica, apresentado na figura 4. Juntamente com o gráfico, adicionamos funções do tipo $y(\rho) = \rho^\ell$, representadas pelas linhas tracejadas, onde o expoente ℓ é dado pelo número que se encontra acima delas. Essas funções foram adicionadas de modo a guiar os nossos olhos para a dependência da energia de interação média por partícula em função da densidade. Portanto, podemos ver um comportamento aproximadamente linear para densidades mais altas, próximas de $\rho = 10$, enquanto que para valores menores de densidade uma região de expoente próximo de 4 e outra com expoente próximo a 2. Se lembrarmos da equação (3.30), $u_p = U_p \rho$, este gráfico nos sugere que a dependência da densidade de energia de interação como função da densidade é variável; para valores altos de densidade, a dependência é de ordem 2, enquanto que para valores intermediários, da ordem de $\rho = 0.2$, por exemplo, a dependência é de ordem 3, e para valores menores ainda a ordem pode chegar a 5. Devido a essa previsão de mudança de comportamento da energia de interação média por partícula em função da densidade, decidimos estudar dois casos, sendo um na região de $\ell = 2$ e o outro na região $\ell = 1$. Para isso, dividimos a seguinte seção, que trata dos perfis de densidade, em duas partes, onde a primeira trata do caso de densidades intermediárias (caso de $\ell = 2$) e a segunda densidades elevadas (caso de $\ell = 1$).

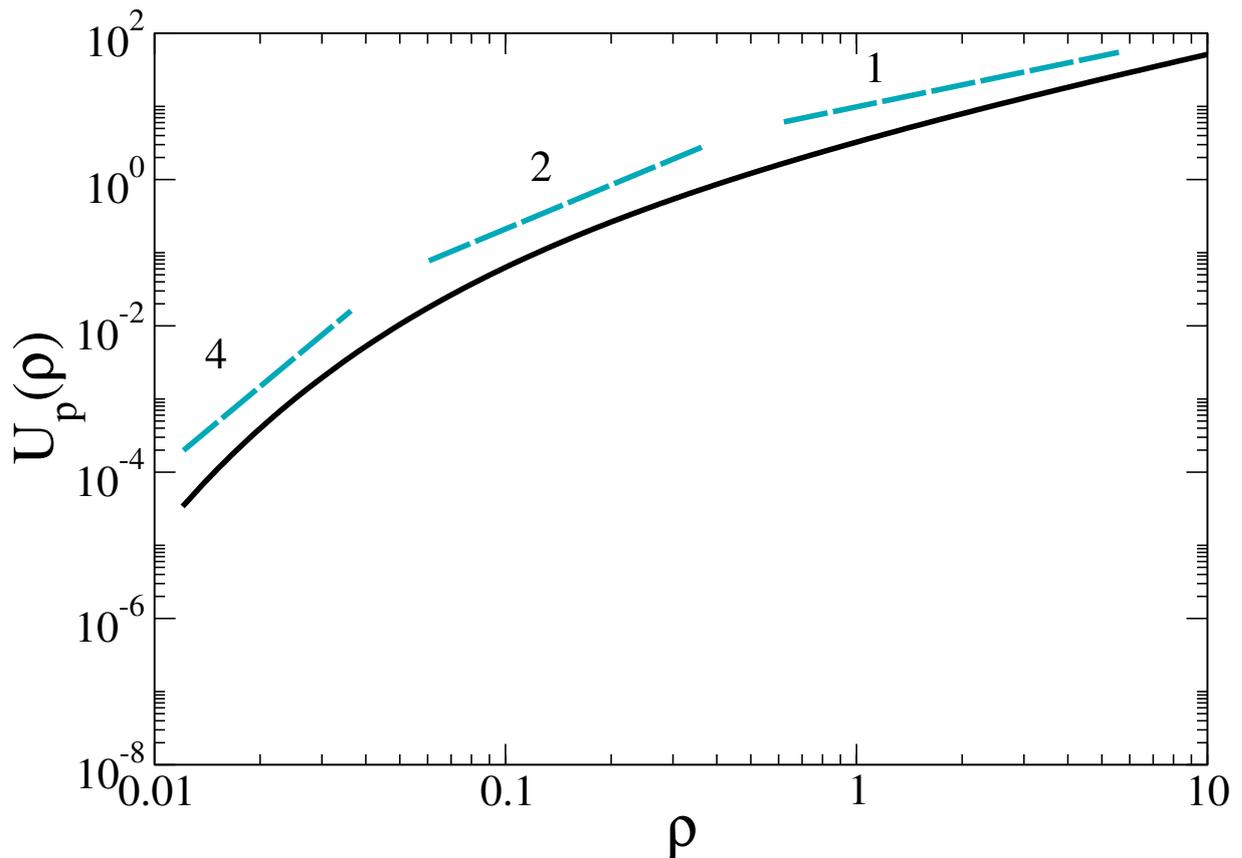


Figura 4: Gráfico de U_p em função de ρ em escala logarítmica para o potencial de Yukawa. As linhas tracejadas representam funções do tipo $y(\rho) = \rho^\ell$, onde o expoente ℓ é dado pelo número acima de cada uma delas.

4.1.1 Perfil de densidade

Nesta seção, iremos explorar o comportamento da densidade de partículas em função da posição para valores de densidade intermediários ($\ell = 2$) e altos ($\ell = 1$), segundo o que foi discutido na seção anterior.

4.1.1.1 Baixas densidades

A figura 5 apresenta perfis de densidade obtidos através de simulações de dinâmica molecular, representados pelos símbolos, e perfis obtidos através da solução da equação de Fokker-Planck, representados pelas linhas tracejadas. Podemos ver que os resultados previstos estão em concordância com as soluções obtidas pelas simulações, principalmente para os maiores valores de N . Para encontrar o perfil de densidade das simulações, realizamos algumas simulações e utilizamos um kernel Gaussiano (KDE)³.

³O método de KDE é explicado no Apêndice A.

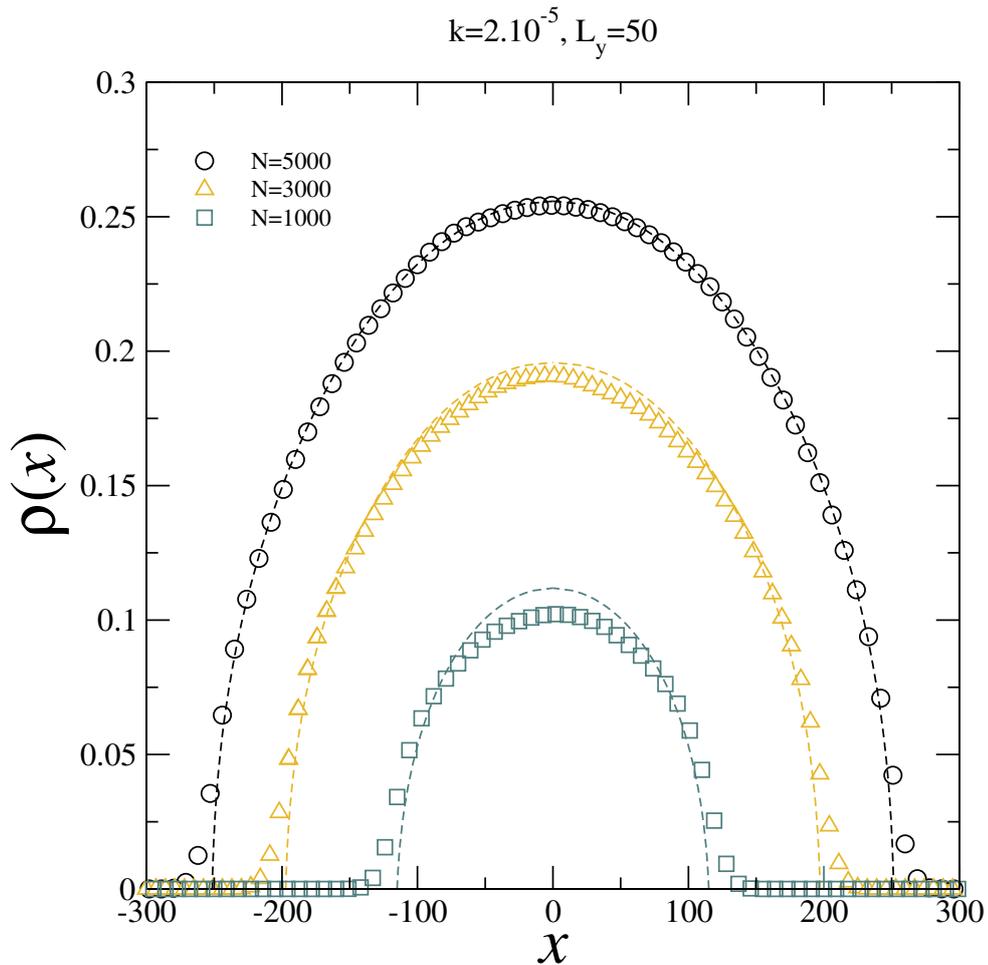


Figura 5: Perfis de densidade para três valores distintos de N mantendo-se a constante de confinamento (k) fixa. Os símbolos representam os resultados obtidos nas simulações e as linhas tracejadas representam o resultado previsto pela solução da equação de Fokker-Planck. Podemos observar que, ao manter k constante e variar N , o modelo começa a apresentar falhas nas previsões na medida em que N decresce, provavelmente porque nessas situações o gradiente da densidade, $\nabla\rho$ se torna suficientemente grande a ponto de que a suposição de que U_p dependa somente da densidade não seja válida.

A fim de melhor analisar a concordância da curva prevista com o resultado da simulação, fizemos simulações de sistemas com aproximadamente o mesmo valor de ρ_0 (lembrando que $\rho_0 = \rho(x = 0)$), isto é, aproximadamente o mesmo valor de pico no gráfico do perfil de densidade. Os resultados estão representados na figura 6. Podemos concluir que os resultados para os valores mais altos de N representam melhor o modelo. Provavelmente para sistemas com menos partículas, o gradiente de concentração ($\nabla\rho$) é grande e, nesse limite, a suposição de que a densidade de energia dependa somente de ρ não seja perfeitamente válida.

Em seguida, para um dos casos ($N = 5000$), avaliamos a densidade de energia potencial total em função da posição, e comparamos com o perfil de densidade, $\rho(x)$, re-

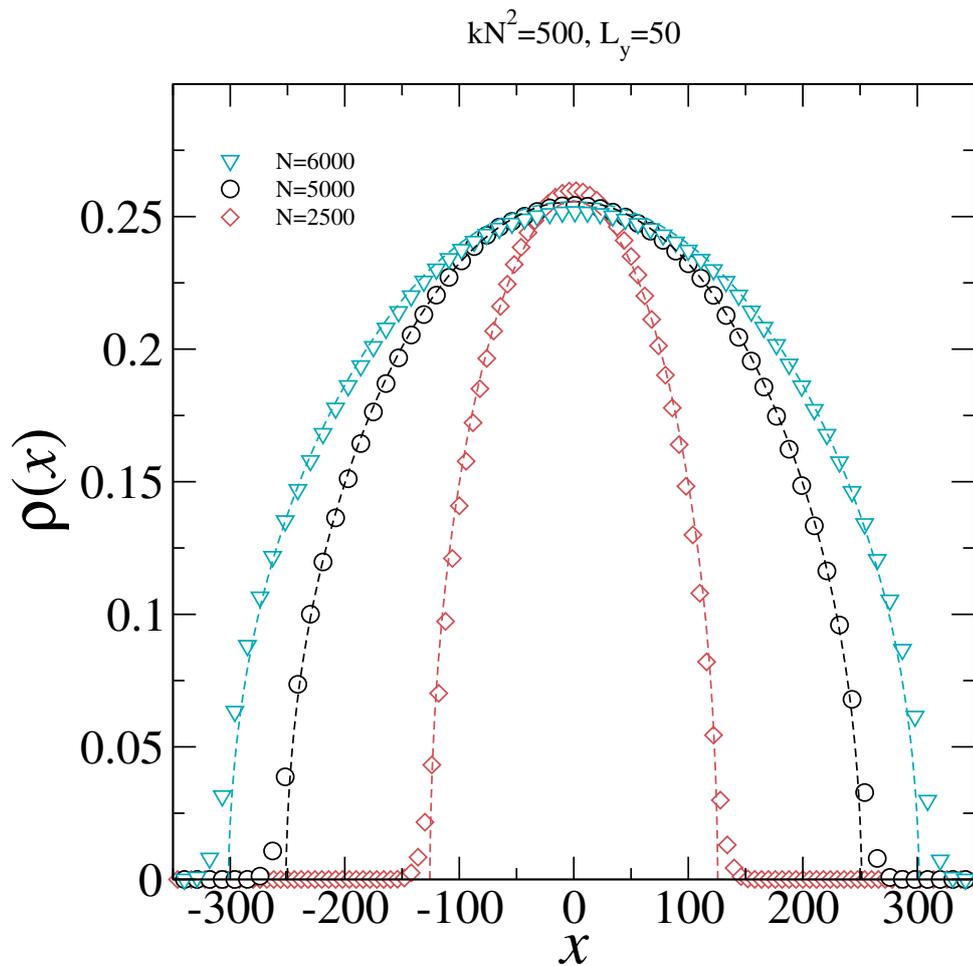


Figura 6: Perfis de densidade para três valores distintos de N mantendo-se ρ_0 constante. Os símbolos representam os resultados obtidos nas simulações e as linhas tracejadas representam o resultado previsto pela solução da equação de Fokker-Planck. Podemos observar que o modelo começa a apresentar falhas nas previsões na medida em que N decresce, provavelmente porque nessas situações o gradiente da densidade, $\nabla\rho$ se torna suficientemente grande a ponto de a suposição de que U_p dependa somente da densidade não seja válida.

presentados na figura 7. Para construir o gráfico da densidade de energia potencial total em função da posição, utilizamos novamente o método KDE, dividindo a célula de simulação em diversas caixas e calculando a energia potencial total média em cada caixa, obtendo uma curva de energia potencial total média em função da posição. Em seguida, multiplicamos os valores dos pontos de densidade pelos valores dos pontos de energia potencial total média, obtendo uma curva de densidade de energia potencial total *versus* posição, representada pela curva sólida da figura 7. Através desta figura, podemos ver que a densidade de energia permanece aproximadamente constante dentro da maior parte do intervalo compreendido pelas partículas, indicando que o estado atingido por essa configuração está próximo do equilíbrio. Os desvios que ocorrem nas extremidades deste

gráfico podem ter sido causados talvez pela dinâmica molecular que não tenha conseguido encontrar exatamente a posição final de menor energia.

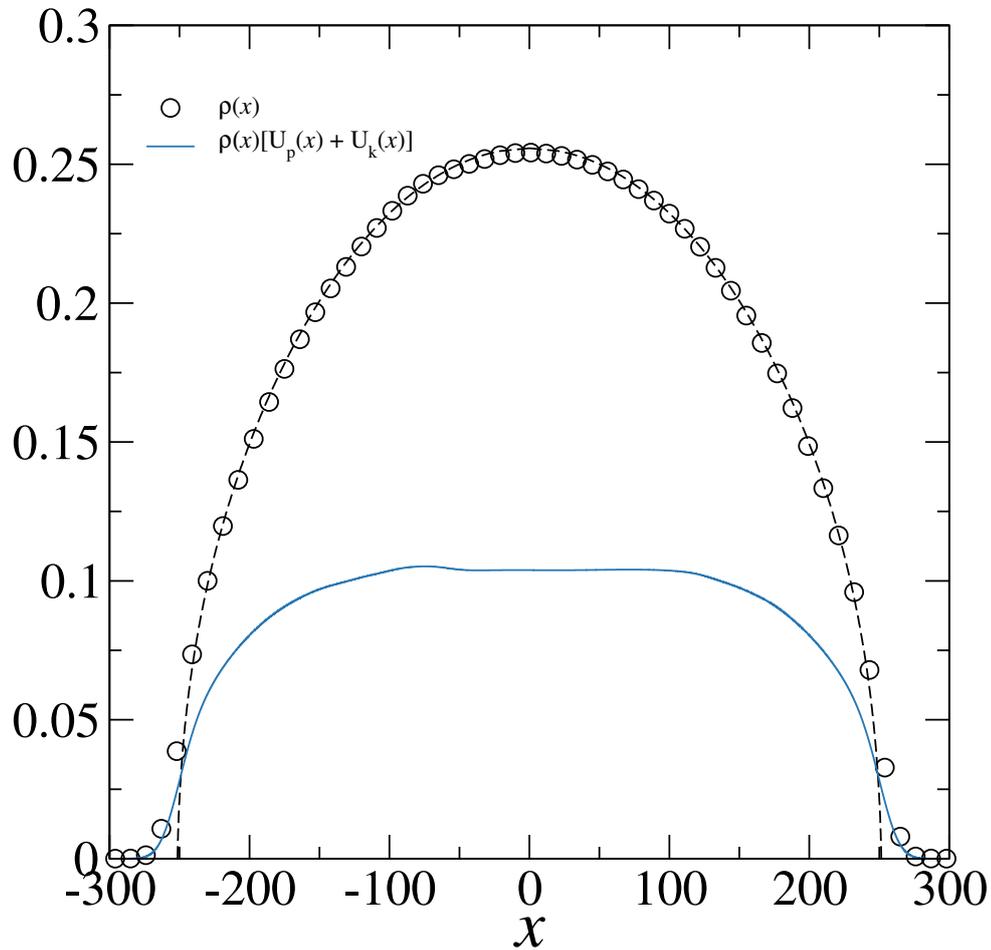


Figura 7: Comparação entre o perfil de densidade das figuras 5 e 6 ($N = 5000$) e a curva de densidade de energia potencial total (linha sólida), representada pelo produto da densidade pela energia potencial total por partícula. A curva tracejada representa a solução da equação de Fokker-Planck. Através desta figura, podemos observar que a densidade de energia permanece aproximadamente constante dentro da maior parte do intervalo compreendido pelas partículas, indicando que o estado atingido por essa configuração está próximo do equilíbrio. Os desvios que ocorrem nas extremidades deste gráfico podem ter sido causados porque talvez a dinâmica molecular não tenha conseguido encontrar exatamente a posição final de menor energia.

Em seguida, avaliamos a dependência da energia de interação média por partícula (U_p) em função da densidade na figura 8 para o mesmo caso analisado anteriormente ($N = 5000$). Note que para este caso a densidade máxima é em torno de $\rho = 0.25$. Portanto, conforme a discussão que fizemos ao apresentar a figura 4, a dependência da energia por partícula em função da densidade deve ser de ordem 2. Analisando a figura 8, vemos que a energia por partícula se adequa aproximadamente ao quadrado da densidade, conforme previmos anteriormente.

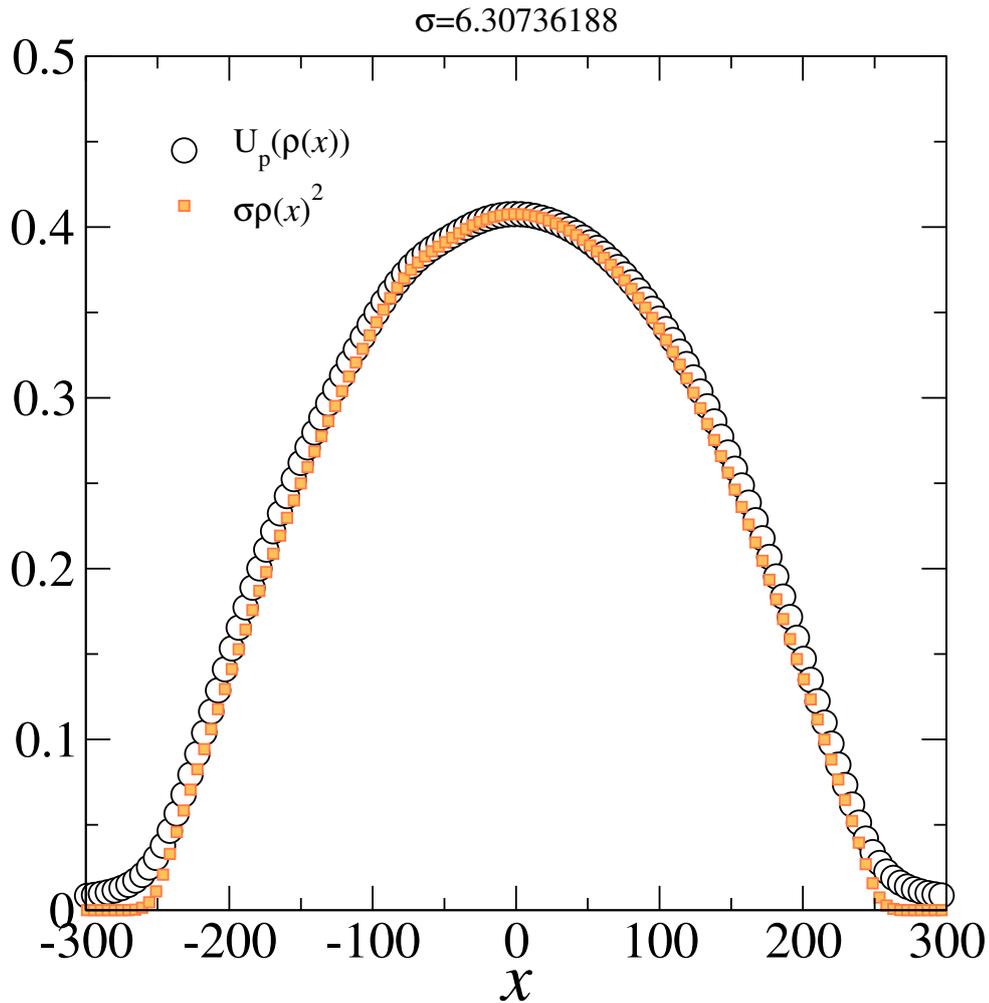


Figura 8: Comparação entre a energia potencial de interação média por partícula e o quadrado da densidade em função da posição multiplicada por um fator σ para o caso de $N = 5000$ utilizando o potencial de Yukawa. Em acordo com a previsão que fizemos anteriormente, a dependência da energia por partícula em função da densidade é de ordem 2.

Por fim, para o mesmo caso anterior ($N = 5000$), comparamos o resultado da densidade de energia de interação u_p com o produto da energia de interação média por partícula U_p pelo perfil de densidade em função da posição. Os resultados são apresentados na figura 9. Através desta figura, podemos verificar a concordância dos resultados com a equação

$$(3.30), u_p = U_p \rho.$$

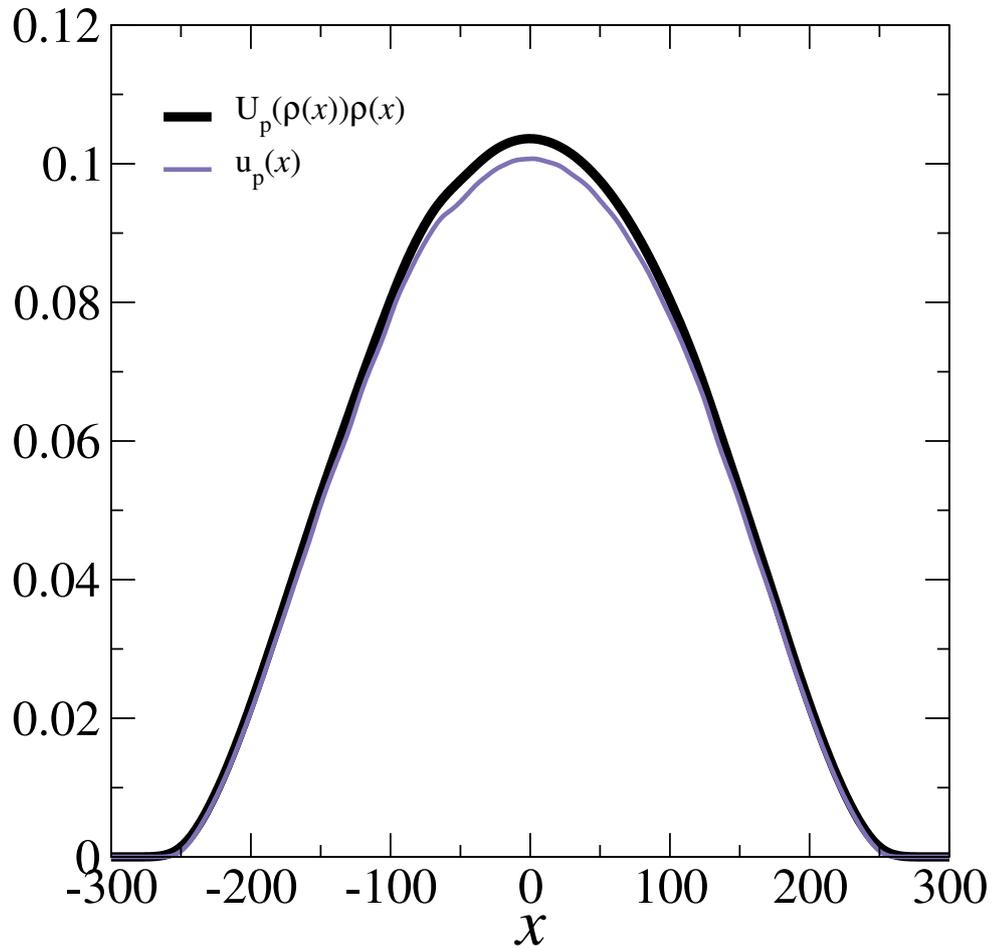


Figura 9: Comparação entre a densidade de energia potencial de interação e o produto da densidade pela energia de interação média por partícula para o caso de $N = 5000$ utilizando o potencial de Yukawa. Através desta figura, podemos verificar a concordância dos resultados com a equação (3.30), $u_p = U_p \rho$

4.1.1.2 Altas densidades

Para este caso, simulamos um sistema com $N = 9000$ partículas e $k = 0.2$ até atingir o equilíbrio, obtendo um perfil de densidade com um valor máximo de ρ próximo de 7, de modo a se enquadrar na região da figura 4 identificada com $\ell = 1$. A figura 10 compara a energia de interação média por partícula com a densidade de partículas multiplicada por um fator σ . Através desta figura, podemos verificar a concordância com o que foi previsto para a região de altas densidades na figura 4, isto é, U_p depende linearmente de ρ . Além disso, verificamos que o valor de σ é o mesmo valor do coeficiente angular da seção do gráfico de $U_p(\rho)$ nas proximidades de $\rho = 7.0$, que é aproximadamente uma reta, concordando com a equação $u_p = a(\rho)\rho^2$, mais precisamente, $U_p = a(\rho)\rho$.

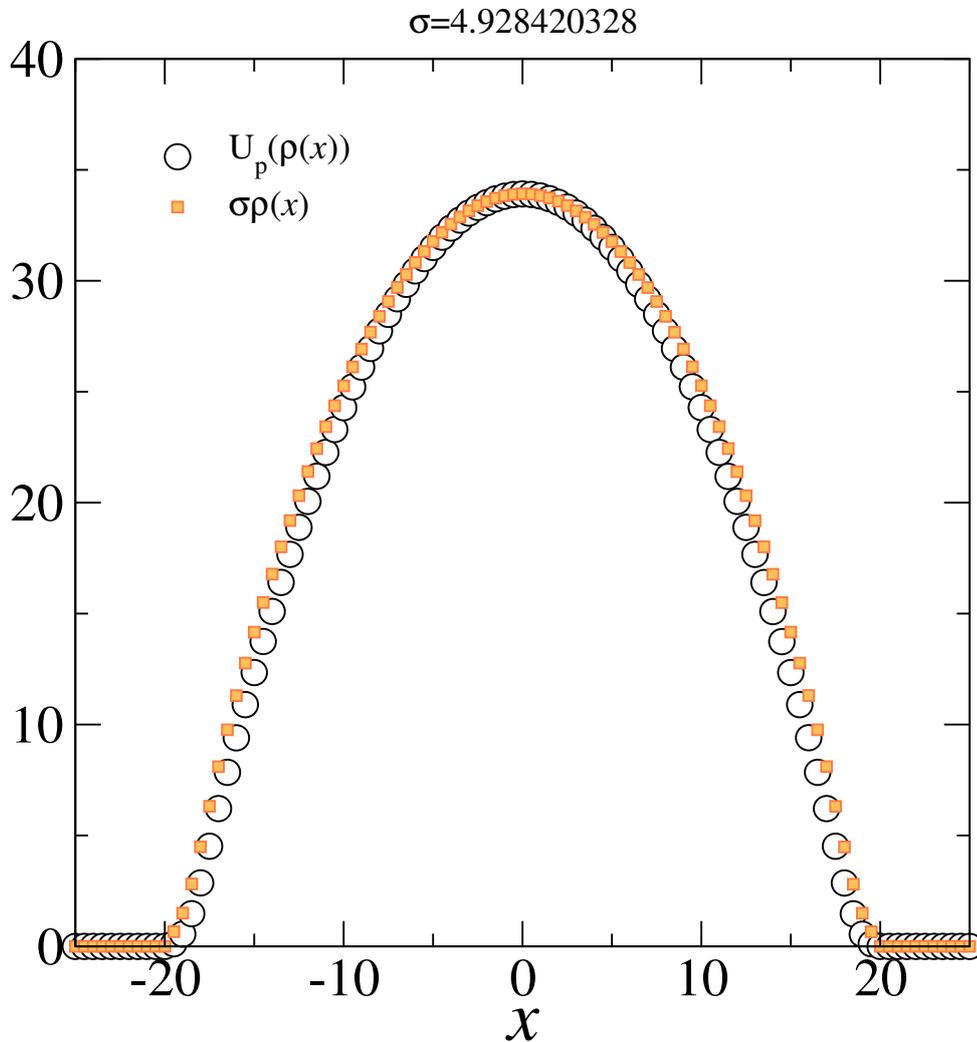


Figura 10: Comparação entre a energia potencial de interação média por partícula e a densidade em função da posição multiplicada por um fator σ para o caso de $N = 9000$ e $k = 0.2$ utilizando o potencial de Yukawa. Podemos verificar a concordância com o que foi previsto para a região de altas densidades, isto é, U_p depende linearmente de ρ .

É importante comentar também sobre a ausência da solução da equação de Fokker-Planck que prevê o perfil de densidade para o caso da figura 10. Conforme a discussão que fizemos anteriormente sobre a validade da previsão dos resultados de simulação, este caso se enquadra na situação em que o gradiente da densidade ($\nabla\rho$) é grande o suficiente para que a suposição de que a energia média de interação por partícula não dependa somente da densidade de partículas. Entretanto, como já frisamos, podemos ver que U_p é aproximadamente proporcional a ρ .

4.2 Potencial $U_{\alpha\beta}$

Com o intuito de estudar uma interação repulsiva e de curto alcance através da qual pudéssemos observar mudanças de estrutura energeticamente favoráveis ao variar a densidade, modelamos um potencial, chamado de $U_{\alpha\beta}(r)$, e dado por

$$U_{\alpha\beta}(r) = \frac{\varepsilon}{r_c^{\alpha-\beta}} \frac{(r_c - r)^\alpha}{r^\beta}, \quad (4.2)$$

onde r_c é o raio de corte do potencial, $\alpha > 1$ e $\beta > 0$. Analisando a função $U_{\alpha\beta}$, percebemos que o parâmetro β controla a divergência da função quando r se aproxima de zero, enquanto que o parâmetro α controla a forma com que a função converge para zero ao se aproximar do raio de corte: quanto maior o valor de α , mais suavemente a função converge a zero, e quanto menor, mais abrupta é a queda da função ao se aproximar de r_c , como mostra a figura 11.

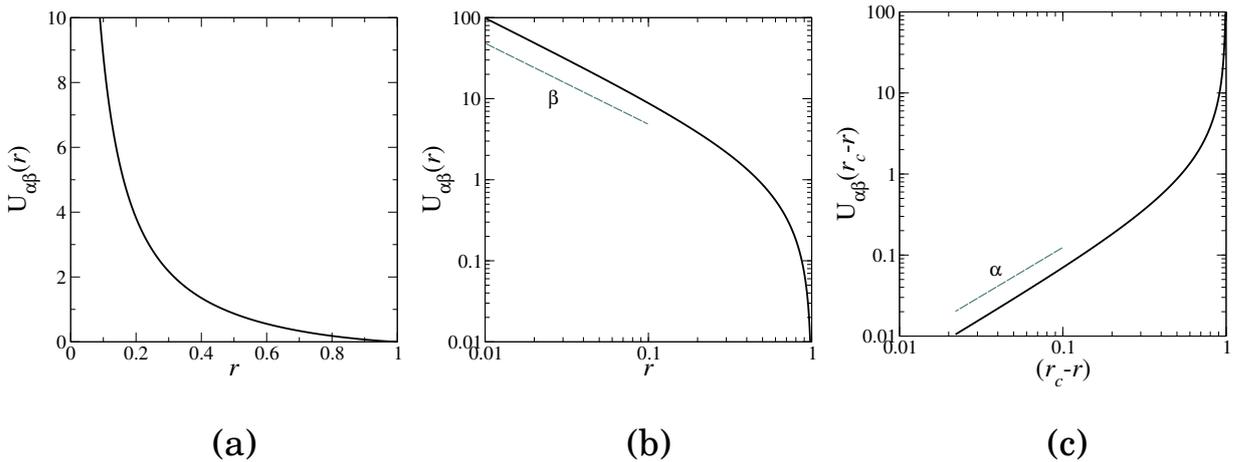


Figura 11: (a) Representação do potencial $U_{\alpha\beta}$ em função de r com os parâmetros $\alpha = 1.2$, $\beta = 1.0$ e $r_c = 1.0$; (b) Representação de $U_{\alpha\beta}(r)$ em escala logarítmica. Observamos que o parâmetro β controla a divergência da função quando r se aproxima de zero; (c) Representação de $U_{\alpha\beta}(r_c - r)$ em escala logarítmica. O parâmetro α controla a forma com que o potencial converge para zero ao se aproximar do raio de corte, r_c .

Da mesma forma que fizemos para o potencial de Yukawa, pretendemos construir um modelo onde a energia de interação média por partícula, U_p , fosse dependente apenas da densidade, $U_p = U_p(\rho)$. No entanto, diferentemente do que ocorre para o potencial de Yukawa, não podemos esperar que para este caso o mínimo de energia potencial aconteça necessariamente em uma rede triangular. Para analisar eventuais mudanças de estrutura, geramos três redes periódicas distintas, sendo uma triangular, uma quadrada e uma hexagonal, esta última em forma de um favo. Em cada uma das redes, calculamos a energia potencial média por partícula, de acordo com a equação (4.2), variando a densidade, e

comparamos as energias obtidas em cada um dos três casos, ao final excluimos os dois pontos de maior energia para cada valor de densidade. O gráfico da figura 12 apresenta a menor energia (equivalente a U_p da equação (3.30)) dentre as três redes analisadas para cada valor de densidade, e os parâmetros utilizados foram $\alpha = 1.2$, $\beta = 1$ e $r_c = 1$.

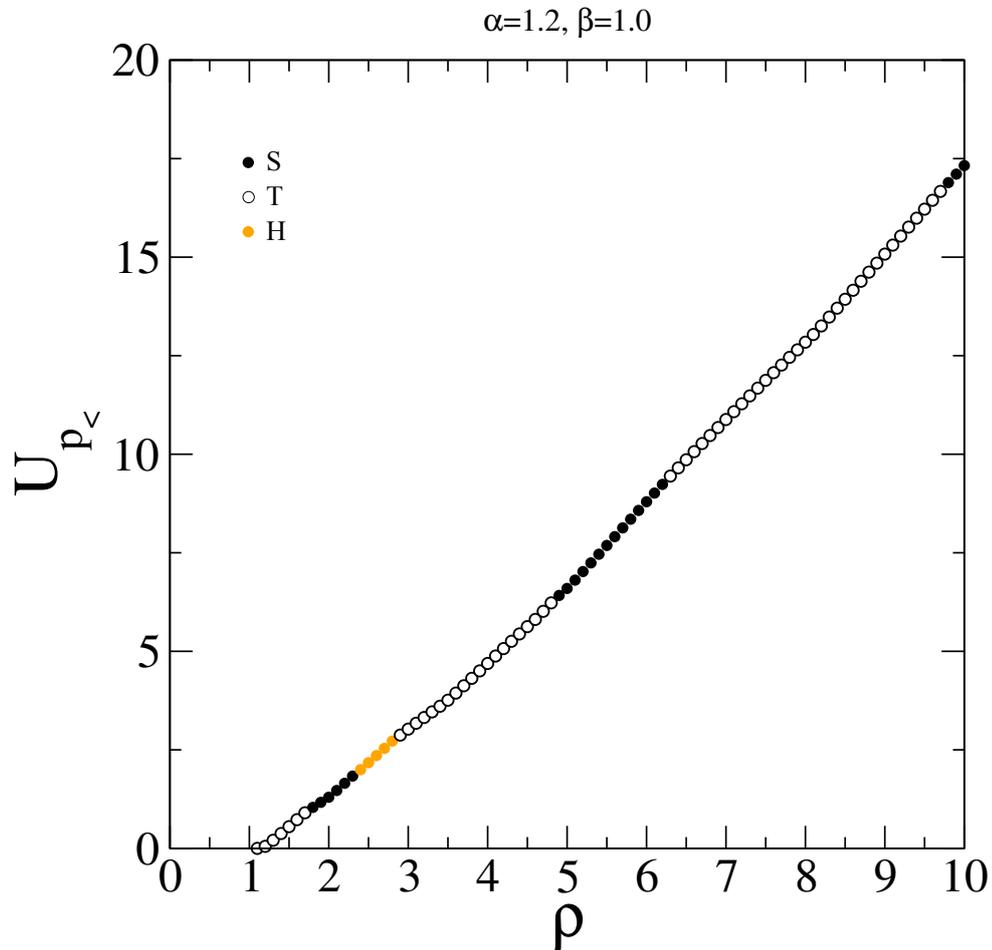


Figura 12: Menor valor de energia por partícula em função da densidade para cada uma das três redes analisadas, utilizando $\alpha = 1.2$, $\beta = 1$ e $r_c = 1$ (S : rede quadrada; T : rede triangular; H : rede hexagonal). Embora isto não garanta que tal estrutura esteja relacionada à de menor energia possível que o sistema possa se estabelecer no equilíbrio, este resultado se mostra como um indício de que uma mudança na estrutura possa eventualmente ocorrer.

Como podemos ver na figura 12, existem algumas regiões onde uma estrutura é energeticamente mais favorável do que as duas outras. Embora isto não garanta que tal estrutura esteja relacionada à de menor energia possível que o sistema possa se estabelecer no equilíbrio, este resultado se mostra como um indício de que uma mudança na estrutura possa eventualmente ocorrer. Conforme vimos durante alguns testes, na medida em que reduzimos o parâmetro α , encontramos regiões distintas mais frequentemente. Entretanto, quanto maior α , mais facilmente conseguimos obter uma configuração de equilíbrio através de simulações, uma vez que, como mencionado anteriormente, quanto maior o valor de α mais suavemente o potencial convergirá a zero quando r tende a r_c . Por essa razão, foi preciso escolher um valor que fosse possível de simular e, ao mesmo tempo, que fosse possível encontrar configurações distintas com variação na densidade.

Para dar algum suporte ao resultado da figura 12, escolhemos alguns valores de densidade e fizemos simulações de dinâmica molecular até atingirmos o equilíbrio mecânico, e representamos as configurações finais obtidas, como se pode ver na figura 13.

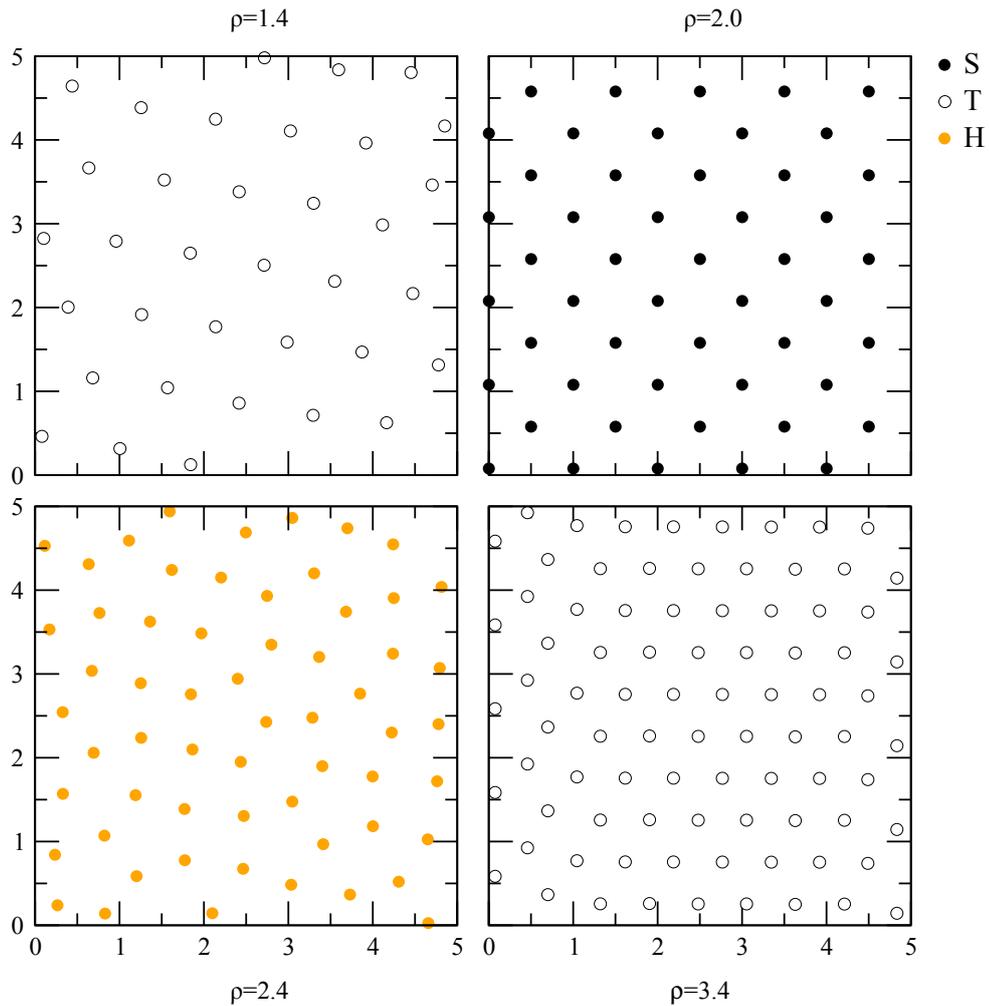


Figura 13: Configurações finais obtidas para quatro valores distintos de densidade. As regiões de densidade relativas às estruturas triangular e quadrada parecem se adequar perfeitamente com a figura 12, o que não ocorre com a região supostamente identificada como hexagonal, onde se pode ver algum grau de organização em estruturas pentagonais, mas não muito além disso.

Conforme podemos observar, as regiões de densidade relativas às estruturas triangular e quadrada parecem se adequar perfeitamente com a figura 12, o que não ocorre com a região supostamente identificada como hexagonal, onde se pode ver algum grau de organização em estruturas pentagonais, mas não muito além disso. Para os casos das redes triangulares e quadradas, as energias obtidas nas simulações estiveram em acordo com as energias calculadas. Para a região supostamente hexagonal, entretanto, a energia obtida na simulação foi em torno de 1,4% menor, inviabilizando a formação de uma estrutura hexagonal.

A exemplo do que fizemos para o caso do potencial de Yukawa, encontramos também a forma de $a(\rho)$ para o potencial $U_{\alpha\beta}$, representada na figura 14, a partir da curva encontrada na figura 12.

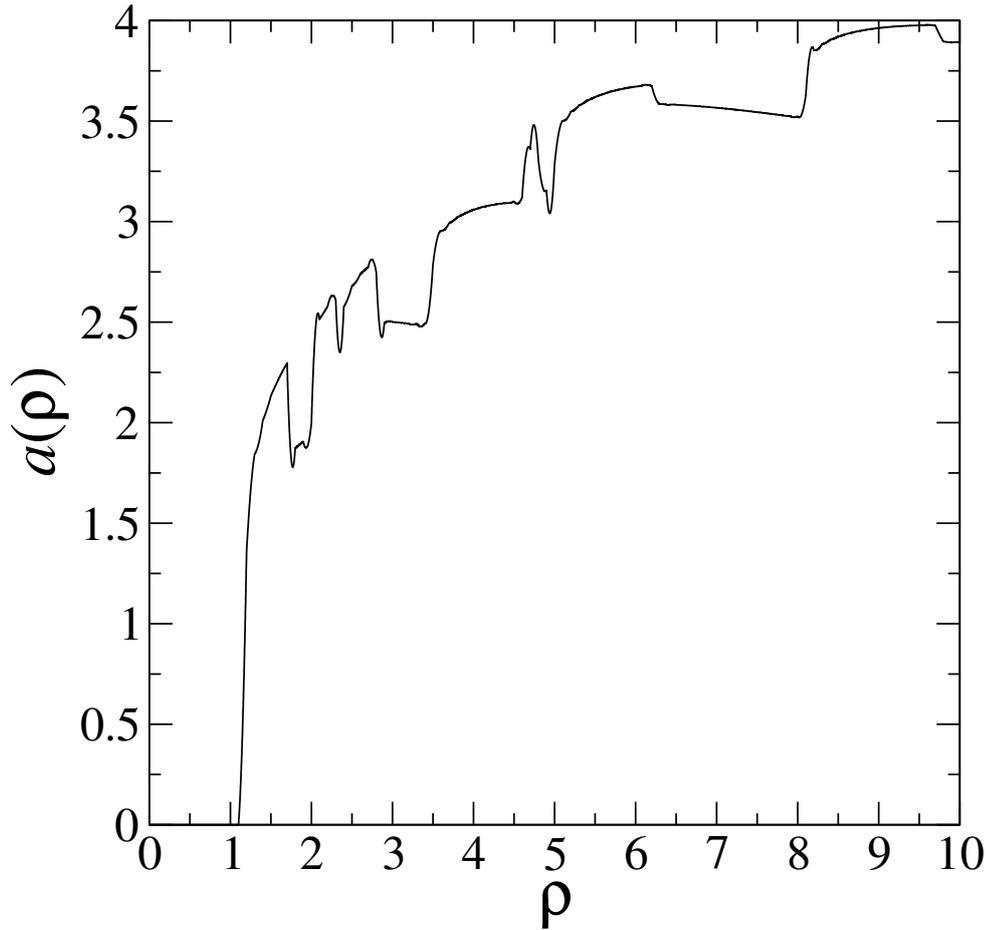


Figura 14: Gráfico de a em função de ρ para o potencial $U_{\alpha\beta}$, obtido através da equação $a(\rho) = \frac{U_p}{\rho} + \frac{\partial U_p}{\partial \rho}$. Antecipadamente, podemos prever que, dado o comportamento tortuoso de $a(\rho)$, não podemos esperar que a energia potencial por partícula tenha uma dependência bem definida com a densidade.

4.2.1 Perfil de densidade

Para o potencial $U_{\alpha\beta}$, o perfil de densidade obtido apresentou uma discrepância em relação ao obtido através do nosso modelo, a destacar pela sua forma, que contém uma série de nós ao longo da curva, o que não é visto pelo perfil mais suave previsto pelo modelo, como podemos observar na figura 15. Similarmente ao que foi feito para o caso do potencial de Yukawa, também encontramos a curva de densidade de energia em função da posição, representada pela linha sólida no gráfico da figura 15. Podemos observar um comportamento aproximadamente constante nas proximidades de $x = 0$, mas diferentemente do que ocorreu com o potencial de Yukawa, a densidade de energia total não estabeleceu-se constante ao longo da maior parte da região de simulação.

A figura 16 apresenta a configuração final de 10000 partículas, juntamente com a curva de pontos de densidade da figura 15. Nesta figura, cada círculo representa uma partícula

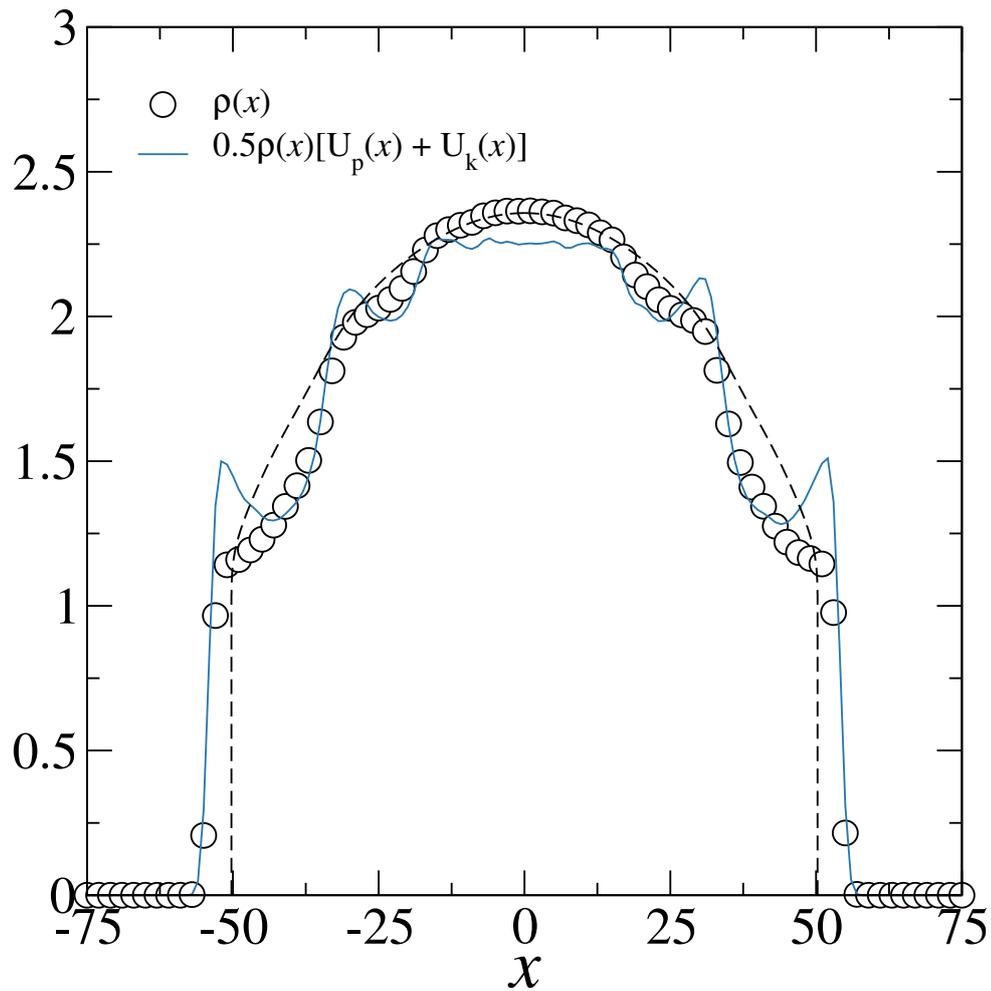


Figura 15: Comparação entre o perfil de densidade ($N = 10000$, $k = 2.10^{-3}$) e a curva de densidade de energia potencial total (linha sólida), representada pelo produto da densidade pela energia potencial por partícula. Esta curva foi dividida por um fator 2 para melhor visualização. A curva tracejada representa a solução da equação de Fokker-Planck. Como podemos observar, o perfil de densidade obtido apresentou uma discrepância em relação ao obtido através do modelo, a destacar pela sua forma, que contém uma série de nós ao longo da curva, o que não é visto pelo perfil mais suave previsto pelo modelo. Além disso, podemos observar um comportamento aproximadamente constante nas proximidades de $x = 0$ mas, diferentemente do que ocorreu com o potencial de Yukawa, a densidade de energia total não estabeleceu-se constante ao longo da maior parte da região de simulação.

e as cores de seus respectivos preenchimentos nos servem para discriminar o número de primeiros vizinhos que cada partícula tem, e os eixos x e y da configuração final estão na mesma escala. Note que as figuras do início desta seção concordam com a figura 16, que apresenta três domínios, formados por uma rede triangular nas extremidades, uma rede quadrada nas regiões intermediárias e região menor que apresenta uma configuração mais desorganizada, muitas vezes formada por vários pentágonos, ao centro, a exemplo do que ocorre na figura 13.

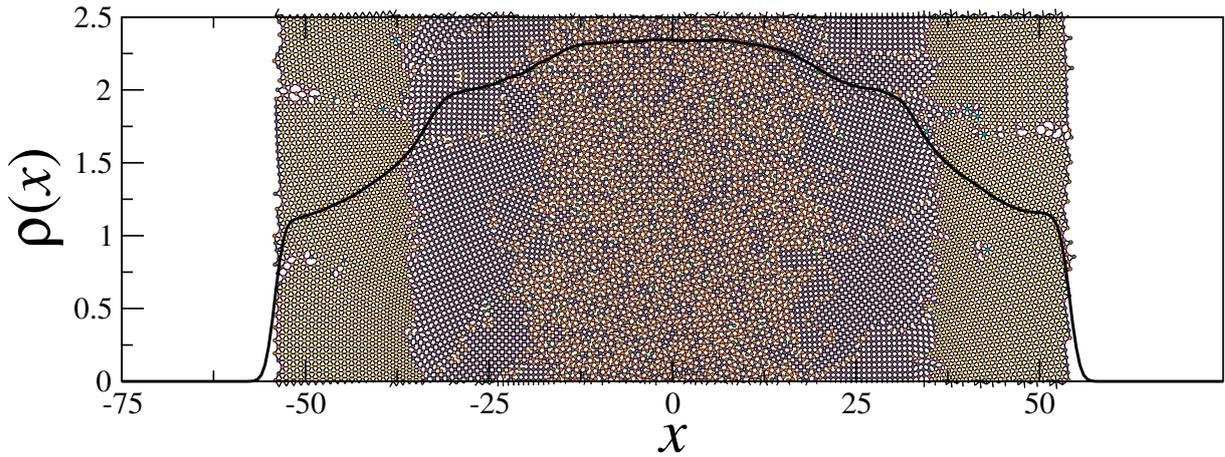


Figura 16: Configuração final de $N = 10000$ partículas, com $k = 2 \cdot 10^{-3}$. A linha sólida representa a densidade obtida a partir desta configuração. Nesta figura, cada círculo representa uma partícula e as cores de seus respectivos preenchimentos nos servem para discriminar o número de primeiros vizinhos que cada partícula tem, e os eixos x e y da configuração final estão na mesma escala. Podemos observar a presença de três domínios, formados por uma rede triangular nas extremidades, uma rede quadrada nas regiões intermediárias e região menor que apresenta uma configuração mais desorganizada, muitas vezes formada por vários pentágonos, ao centro.

É curioso perceber que, em contraste com a solução da equação de Fokker-Planck no estado estacionário e para temperatura nula, o perfil de densidade das figuras 15 e 16 não se assemelha a uma parábola. É interessante salientar ainda que o modelo contínuo foi estudado e aplicado para diversos casos, como pode ser visto nas referências [4, 5, 6], por exemplo. Entretanto, nesses casos, o potencial de interação entre as partículas não favorece mais de uma estrutura com a variação da densidade, diferentemente do potencial $U_{\alpha\beta}$, que parece assumir no mínimo três configurações distintas. Portanto, acreditamos que possivelmente o modelo seja insuficiente quando aplicado a potenciais onde transições estruturais estão presentes e que essas possam contribuir para a formação dos nós encontrados no perfil de densidade observado nas simulações de dinâmica molecular.

Por fim, comparamos a energia potencial de interação média por partícula e o perfil de densidade para este caso, apresentando os resultados na figura 17. Como já poderia ser esperado, ao observarmos a função $a(\rho)$ para este potencial, não é possível estabelecer uma boa relação entre essas duas propriedades, provavelmente devido ao comportamento tortuoso da curva $a(\rho)$ da figura 14, ainda que exista uma pequena semelhança nas proximidades de $x = 0$.

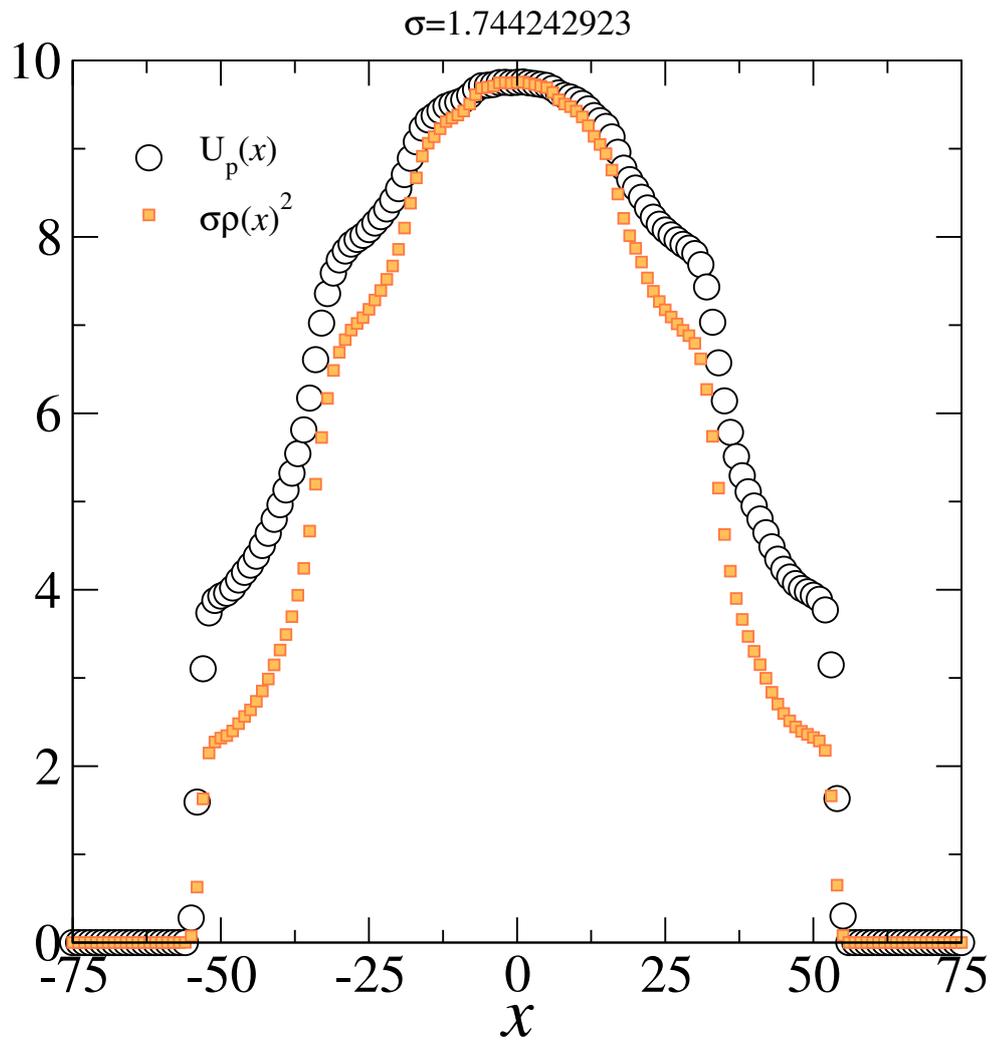


Figura 17: Comparação entre a energia potencial de interação média por partícula e a densidade em função da posição multiplicada por um fator σ para o potencial $U_{\alpha\beta}$. Como já poderia ser esperado, ao observarmos a função $a(\rho)$ para este potencial, não é possível estabelecer uma boa relação entre essas duas propriedades, provavelmente devido ao comportamento tortuoso da curva $a(\rho)$ da figura 14, ainda que exista uma pequena semelhança nas proximidades de $x = 0$.

5 Conclusão

Neste trabalho generalizamos o modelo contínuo mostrado nos trabalhos [4, 6, 5], que se propõe a descrever propriedades estáticas e dinâmicas de um sistema de partículas imersas em um meio superamortecido, interagindo segundo um determinado potencial repulsivo de curto alcance.

Essa generalização visa eliminar a necessidade de um parâmetro de ajuste para o modelo. Para testá-lo, escolhemos dois potenciais de repulsão de curto alcance: o potencial de Yukawa, comumente utilizado em diversas situações em simulações computacionais, e o potencial $U_{\alpha\beta}$, definido na seção 4.2, que possui uma característica interessante devido ao fato de permitir transições estruturais com a variação da densidade.

Nosso estudo concentrou-se principalmente em estudar a densidade em função da posição quando o sistema encontra-se no equilíbrio mecânico à temperatura nula, isto é, investigamos apenas o estado de equilíbrio mecânico.

No primeiro caso, para o potencial de Yukawa, o modelo proposto parece adequar-se bem aos resultados da simulação computacional. Além disso, vimos que a dependência da energia de interação média por partícula (U_p) com a densidade de partículas não é necessariamente linear. Observamos que, entre determinadas regiões de densidade, U_p é aproximadamente proporcional ao quadrado de ρ (baixas densidades) ou a ρ (altas densidades), como discutido na figura 4.

No segundo caso, para o potencial $U_{\alpha\beta}$, o modelo se mostrou insuficiente, possivelmente devido à presença de transições estruturais.

Como perspectivas futuras, podemos destacar o estudo de propriedades dinâmicas deste sistema, além de uma possível adaptação no modelo, de forma a obter sucesso em sistemas que apresentam transições em suas estruturas.

Apêndice A – *Kernel Density Estimation*

O método de KDE (do inglês *Kernel Density Estimation*) é um método não-paramétrico que permite que se obtenha aproximadamente a forma funcional para uma determinada densidade $F_N(x)$ a partir de um conjunto de N amostras. A ideia básica de um método não-paramétrico é a de usar dados para se inferir uma quantidade desconhecida fazendo o mínimo de suposições possíveis [32].

Suponha que se tenha um dado composto pelos pontos x_1, x_2, \dots, x_N . Para cada ponto, pode-se considerar, além da posição x , uma dada propriedade f_1, f_2, \dots, f_N . Tem-se então uma função *kernel* $K(x)$, tal que satisfaça [32]

$$\int K(x)dx = 1, \int xK(x) = 0 \quad \text{e} \quad \int x^2K(x)dx > 0. \quad (\text{A.1})$$

Dado então o kernel $K(x)$ e um número positivo h , chamado de largura de banda, a densidade $F_N(x)$ que desejamos encontrar é definida como [32]

$$F_N(x) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f_i}{h} K\left(\frac{x - x_i}{h}\right). \quad (\text{A.2})$$

No contexto deste trabalho, se desejamos calcular a densidade de partículas ($\rho(x)$), usamos $f_i = \frac{1}{L_y}$; se desejamos calcular a densidade de energia de interação ($u_p(x)$), usamos $f_i = \frac{u_i}{L_y}$, onde u_i é a energia potencial de interação da i -ésima partícula.

A forma do kernel que utilizamos neste trabalho foi o Gaussiano, dado por

$$K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{A.3})$$

Referências

- [1] SEDDON, J. M.; GALE, J. D. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. [S.l.]: The Royal Society of Chemistry, 2001.
- [2] PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. [S.l.]: Elsevier, 2008.
- [3] TSALLIS, C. Some open points in nonextensive statistical mechanics. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, v. 22, p. 1230030, 2012.
- [4] ZAPPERI, S.; MOREIRA, A.; ANDRADE, J. Flux front penetration in disordered superconductors. *Physical Review Letters*, APS, v. 86, n. 16, p. 3622–3625, 2001.
- [5] BARROZO, P. et al. Model of overdamped motion of interacting magnetic vortices through narrow superconducting channels. *Physical Review B*, v. 80, p. 104513, 2009.
- [6] ANDRADE, J. S. et al. Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles. *Physical Review Letters*, v. 105, p. 260601, 2010.
- [7] RIBEIRO, M. S.; NOBRE, F. D.; CURADO, E. M. F. Time evolution of interacting vortices under overdamped motion. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 021146, Feb 2012.
- [8] ALLEN, M.; TILDESLEY, D. *Computer Simulation of Liquids*. [S.l.]: Oxford, 1987.
- [9] ALDER, B.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard sphere system. *Journal of Chemical Physics*, v. 27, p. 1208–1209, 1957.
- [10] FOSDICK, L. D. et al. *An Introduction to High-Performance Scientific Computing*. [S.l.]: MIT, 1996.
- [11] TUCKERMAN, M. E. *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*. [S.l.]: Oxford University Press, 2010.
- [12] KRESSE, G.; HAFNER, J. *Ab initio* molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B*, v. 47.
- [13] RAPAPORT, D. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998.
- [14] TOUKMAJI, A. Y.; JR., J. A. B. Ewald summation techniques in perspective: a survey. *Computer Physics Communications*, v. 95, n. 2–3, p. 73–92, 1996.
- [15] BADER, J. S.; CHANDLER, D. Computer simulation study of the mean forces between ferrous and ferric ions in water. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 96, n. 15, p. 6423–6427, 1992.

- [16] SCHREIBER, H.; STEINHAUSER, O. Cutoff size does strongly influence molecular dynamics results on solvated polypeptides. *Biochemistry*, v. 31, n. 25, p. 5856–5860, 1992.
- [17] YORK, D. M. et al. Atomic-level accuracy in simulations of large protein crystals. v. 91, n. 18, p. 8715–8718, 1994.
- [18] SCHLICK, T. *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*. [S.l.]: Springer, 2010.
- [19] SADUS, R. J. *Molecular Simulation of Fluids: Theory, Algorithms and Object-Oriented*. [S.l.]: Elsevier, 2002.
- [20] HOWELL, K. B. *Ordinary Differential Equations: An Introduction to the Fundamentals*. [S.l.]: UAH, 2012.
- [21] SUHL, H. Inertial mass of a moving fluxoid. *Phys. Rev. Lett.*, v. 14.
- [22] VONDEL, J. Van de et al. Vortex-rectification effects in films with periodic asymmetric pinning. *Physical Review Letters*, v. 94.
- [23] FRANK, T. D. *Nonlinear Fokker-Planck Equations: Fundamentals and Applications*. [S.l.]: Springer, 2005.
- [24] SILVA, J.; LIMA, J. Quatro abordagens para o movimento browniano. *Rev. Bras. Ensino Fís.*, SBF, v. 29, n. 1, p. 25–35, 2007.
- [25] SILVA, G. F. T. da. *Termostática do Movimento Superamortecido de Partículas Interagentes*. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal do Ceará, 2013.
- [26] MOREIRA, A. A. *Relações de Escala em Redes Complexas e na Penetração de Fluxo em Supercondutores Desordenados*. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal do Ceará, 2002.
- [27] SILVA, P. B. da. *Transporte de partículas em sistemas mesoscópicos*. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal do Ceará, 2009.
- [28] BRYKSIN, V.; DOROGOVTSSEV, S. Nonlinear diffusion of magnetic flux in type-II superconductors. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, v. 104, p. 3735–3758, 1993.
- [29] BARFORD, W. Avalanches in the bean critical-state model. *Phys. Rev. B*, v. 56.
- [30] DZUBIELLA, J.; HOFFMANN, G. P.; LÖWEN, H. Lane formation in colloidal mixtures driven by an external field. *Phys. Rev. E*, v. 65, p. 021402, Jan 2002.
- [31] TOTSUJI, H.; TOTSUJI, C.; TSURUTA, K. Structure of finite two-dimensional yukawa lattices: Dust crystals. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 066402, Nov 2001.
- [32] WASSERMAN, L. *All of Nonparametric Statistics*. [S.l.]: Springer, 2006.