

MARCELO DOS SANTOS

**TEORIA CINÉTICA DE GASES GRANULARES
DE ESFERAS RUGOSAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Gilberto Medeiros Kremer

Curitiba
2011

Agradecimentos

- À Deus pela oportunidade de chegar até aqui.
- Aos meus pais pelo apoio e incentivo.
- Ao meu orientador Prof. Dr. Gilberto Medeiros Kremer pela orientação deste trabalho
- Ao CNPq pelo apoio financeiro.
- Aos membros da banca pelas contribuições dadas a este trabalho.

Resumo

Com o uso da equação de Boltzmann, faz-se neste trabalho, um estudo de gases granulares compostos de moléculas esféricas rugosas. Para caracterizar as colisões inelásticas, consideramos dois coeficientes de restituição, um normal α e um tangencial β , os dois são considerados constantes. Além disso, supõe-se que todas as partículas possuem a mesma massa e mesmo momento de inércia. Para fornecer uma descrição macroscópica do gás, encontra-se a função de distribuição do gás, através do método de Chapman Enskog utilizando os polinômios de Sonine. Esta função de distribuição difere da maxwelliana e é função da velocidade linear e angular das partículas. Define-se as temperaturas translacional T^{tr} e rotacional T^{rot} para o gás e a partir da primeira aproximação da função distribuição, encontra-se as taxas de resfriamento translacional ζ^{tr} e rotacional ζ^{rot} do gás. Através da resolução de um sistema de equações diferenciais acopladas, obtida a partir das equações de balanço, encontra-se os decaimentos das temperaturas em função do tempo para alguns casos de interesse, demonstrando algumas propriedades de gases granulares como: o alcance do estado de resfriamento homogêneo para tempos longos; o decaimento das temperaturas proporcional a t^{-2} , concordando com a lei de Haff e a não equipartição de energia na maioria dos casos. Para o estado de resfriamento homogêneo, comparamos resultados da aproximação de primeira ordem, obtida pelos polinômios de Sonine com a aproximação maxwelliana, mostrando que na maioria dos casos, a aproximação maxwelliana, fornece resultados satisfatórios. Por último, com o uso da segunda aproximação da função de distribuição e com a definição de apenas uma temperatura T , faz-se um estudo dos coeficientes de transporte que são: condutividade térmica, viscosidade volumétrica e de cisalhamento de gases granulares, mostrando suas dependências com o coeficiente de restituição normal α , para três casos de interesse: rugosidade baixa, média e alta.

Abstract

Granular gases composed of rough spherical molecules are studied within the framework of Boltzmann equation. To characterize the inelastic collisions, we consider two coefficients of restitution, a normal α and a tangential β , both are considered constant. Moreover, it is assumed that all particles have the same mass and same moment of inertia. To provide a macroscopic description of the gas, it is found the distribution function of gas through the Chapman Enskog method using Sonine polynomials. This distribution function differs from the maxwellian and is a function of linear and angular velocities of the particles. It is defined the translational T^{tr} and rotation T^{rot} temperatures and from the first approximation of the distribution function, it is found the translational ζ^{tr} and rotational ζ^{rot} cooling rates for the gas. By solving a coupled system of differential equations, obtained from balance equations, it is found the decay of the temperatures as function of time for some cases of interest, demonstrating some properties of granular gases as: the scope of homogeneous cooling state for long times; the decay of temperature proportional to t^{-2} , agreeing with Haff's law and the non-equipartition of energy in most cases. For the homogeneous cooling state, we compare the results from the first order approximation obtained by Sonine polynomials with maxwellian approximation, showing that at the most cases, the maxwellian approximation, provides satisfactory results. Finally, by using the second approximation of the distribution function and setting only one temperature T , it is realized a study of transport coefficients which are: thermal conductivity, bulk and shear viscosity of granular gases, showing their dependencies with the normal coefficient of restitution α , for three cases of interest: low, medium and high roughness.

Sumário

Sumário	1
Lista de Figuras	3
1 Introdução	5
2 Resfriamento de um gás granular	10
2.1 Dinâmica Microscópica	10
2.2 Equação de Boltzmann	13
2.3 A equação de transporte	19
2.4 Os momentos da função de distribuição	21
2.5 As equações de balanço para os momentos	23
2.6 Método de Chapman-Enskog	24
2.6.1 Equações integrais	24
2.6.2 Função de distribuição $f^{(0)}$	26
2.7 Estado de resfriamento homogêneo	29
2.7.1 Esferas elásticas lisas ($\alpha = 1, \beta = -1$)	30
2.7.2 Esferas elásticas rugosas ($\alpha = 1, \beta = 1$)	30
2.7.3 Esferas inelásticas lisas ($\alpha < 1, \beta = -1$)	32
2.7.4 Esferas elásticas parcialmente rugosas ($\alpha = 1, \beta \lesssim 1$)	32
2.7.5 Esferas inelásticas parcialmente rugosas ($\alpha < 1, \beta \lesssim 1$)	34
2.7.6 Equipartição da energia	35
2.7.7 Influência dos coeficientes a_2 e b_2 no estado de resfriamento homogêneo	38
3 Coeficientes de transporte	41
3.1 Equações de balanço	41
3.2 Equações integrais	42
3.3 A função de distribuição $f^{(0)}$	43
3.4 A função de distribuição $f^{(1)}$	45

3.5	Coefficientes de transporte	52
3.5.1	Conductividade térmica	52
3.5.2	Viscosidade volumétrica e de cisalhamento	53
3.5.3	Esferas elásticas e rugosas	54
4	Conclusões	56
	Referências Bibliográficas	58
A	Relações matemáticas	61
A.1	Polinômios de Sonine	61
A.2	Integrais utilizadas em teoria cinética	63



Lista de Figuras

1.1	Formação de aglomerados em gases granulares inicialmente uniformemente distribuídos [1].	6
2.1	Colisão de duas esferas rugosas.	11
2.2	Colisão entre duas esferas rugosas mostrando o parâmetro de impacto b . . .	16
2.3	Figura da esquerda: Temperaturas $T(\tau)$, $R(\tau)$ e $M(\tau)$ em função do tempo. Figura da direita: Fator de equipartição $Q(\tau)$ em função do tempo, para $\kappa = 2/5$ e condições iniciais $T(0) = 1$ e $R(0) = 2$	31
2.4	Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo τ , para $\kappa = 0$	31
2.5	Figura da esquerda: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo, para κ qualquer. Figura da direita: Fator de equipartição $Q(\tau)$ em função do tempo para κ qualquer.	32
2.6	Figura da esquerda: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo τ . Figura da direita: Fator $Q(\tau)$ em função do tempo para $\kappa = 2/5$, $\beta = 0,8$ e condições iniciais $T(0) = 1$ e $R(0) = 2$	33

- 2.7 Figura da direita: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo. Figura da esquerda: Fator $Q(\tau)$ em função do tempo τ para $\kappa = 0$ 34
- 2.8 Figura da esquerda: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo. Figura da esquerda: Fator de equipartição $Q(\tau)$ em função do tempo para $\alpha = 0,8$, $\beta = 0,8$ e $\kappa = 2/5$ 35
- 2.9 Gráfico de $M(\tau)$ em função do tempo para $\alpha = 0,8$, $\beta = 0,8$ e $\kappa = 2/5$. . . 35
- 2.10 Gráfico de $T(\tau)$, $R(\tau)$ e $M(\tau)$ em função do tempo para $\alpha = 0,8$, $\beta = 0,8$ e $\kappa = 0$ 36
- 2.11 Grupo de valores de α e β que fornecem a equipartição de energia para $\kappa = 0, 2/5$ e $2/3$, onde foi considerado $a_2 = 0$ e $a_2 \neq 0$ 37
- 2.12 Gráfico das razão de temperatura $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$ em função de α , para $\beta = -0,9$. A linha pontilhada e a contínua representam as aproximações pela maxwelliana e por polinômios de Sonine respectivamente. A região $0,955 < \alpha < 1$ é mostrada ampliada. 39
- 2.13 Gráfico das razão de temperatura $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$ em função de α , para $\beta = 0$. A linha pontilhada e a contínua representam as aproximações pela maxwelliana e por polinômios de Sonine respectivamente. 39
- 2.14 Gráfico das razão de temperatura $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$ em função de α , para $\beta = 0,9$. A linha pontilhada e a contínua representam as aproximações pela maxwelliana e por polinômios de Sonine respectivamente. 39
- 2.15 Figura da esquerda: a_2 no estado de resfriamento homogêneo em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$. Figura da direita: b_2 no estado de resfriamento homogêneo em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$. 40
- 3.1 Condutividade térmica λ (figura da esquerda) e σ (figura da direita) em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$ e $\kappa = 2/5$ 53
- 3.2 Viscosidade de cisalhamento μ (figura da esquerda) e viscosidade volumétrica η (figura da direita) em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$ e $\kappa = 2/5$ 54

Introdução

Para modelar um gás molecular através da mecânica estatística e teoria cinética, considera-se as partículas como esferas que colidem elasticamente, o que implica na conservação da energia mecânica. Após cada partícula colidir algumas vezes, o gás relaxa até seu estado de equilíbrio, sendo caracterizado pela função de distribuição maxwelliana. Se não houver forças externas, a densidade do gás será homogênea. Considere agora que em cada colisão entre esferas, existe uma perda de energia, ou seja, as esferas transformam energia cinética em calor. Tais partículas são chamadas de grãos, e o gás formado por estas partículas é chamado de gás granular [1]. Para este tipo de gás, a energia total não é mais conservada e conseqüentemente, ocorre um decaimento na temperatura granular com o tempo (como será visto no capítulo 2). Uma outra característica destes gases, é a formação de aglomerados (clusters) auto organizados, como pode ser visto na figura (1.1). Nesta figura, as esferas estão inicialmente uniformemente distribuídas e em um estado de resfriamento homogêneo¹ (HCS - Homogeneous cooling state). Após um determinado intervalo de tempo, começa a ocorrer a formação de aglomerados. Para modelar um gás granular, caracteriza-se a não-elasticidade da colisão entre duas esferas, por um coeficiente de restituição α . Para o caso em que α é constante, os aglomerados não se extinguem,

¹Estado de um gás granular livre de forças externas, com decaimento contínuo da temperatura e homogeneidade espacial preservada.

ou seja, o gás não retorna ao estado de resfriamento homogêneo, enquanto que para α dependente das velocidades relativas, o modelo é mais realista [2] e o sistema pode retornar ao estado de resfriamento homogêneo [1].

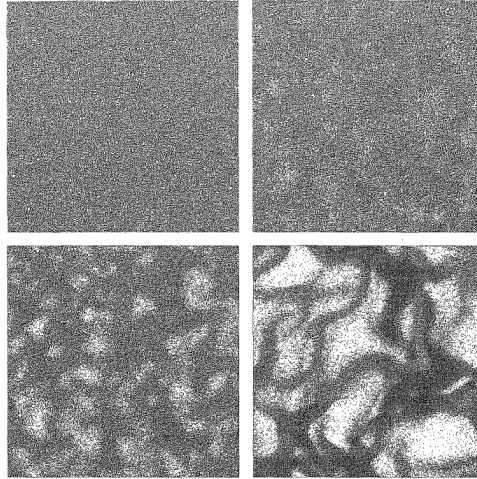


Figura 1.1: Formação de aglomerados em gases granulares inicialmente uniformemente distribuídos [1].

No modelo mais simples de um gás granular, considera-se um sistema de esferas rígidas e lisas que colidem inelasticamente, com um coeficiente de restituição normal constante. Entretanto, a natureza macroscópica dos grãos torna o atrito entre as partículas praticamente inevitável e ele deve ser considerado, pois permite a troca entre energia translacional e rotacional e é responsável pela não equipartição de energia em gases granulares, até mesmo em estados homogêneos e isotrópicos [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9].

O modelo de esferas rugosas foi inicialmente introduzido, considerando ou esferas perfeitamente rugosas, ou perfeitamente lisas. Posteriormente, além do coeficiente de restituição normal α , foi introduzido um coeficiente de restituição tangencial β , responsável por valores intermediários de rugosidade. Diferente do coeficiente α que é positivo e menor ou igual a 1, os valores do coeficiente β , variam de -1 (esferas perfeitamente lisas) a 1 (esferas perfeitamente rugosas). Algumas tentativas de desenvolver a teoria cinética para esferas rugosas foi realizada por Jenkins e Richman [10] e também Lun e Savage [11], que fizeram algumas aproximações para um problema de fluxo de cisalhamento simples. A influência da rugosidade em fluxos cisalhantes também foi estudada por vários autores [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18], normalmente considerando esferas aproximadamente lisas e

elásticas.

Para o estudo de gases granulares, utiliza-se a função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$, onde \mathbf{x} , \mathbf{c} e \mathbf{w} são a posição, velocidade linear e velocidade angular da partícula, respectivamente (ver capítulo 2). A partir desta função, define-se as temperaturas translacional T^{tr} e rotacional T^{rot} e a partir destas duas grandezas, pode-se também definir as taxas de produção de energia ζ^{tr} e ζ^{rot} , definidas como

$$\zeta^{\text{tr}} = -\frac{1}{T^{\text{tr}}} \left(\frac{\partial T^{\text{tr}}}{\partial t} \right), \quad \zeta^{\text{rot}} = -\frac{1}{T^{\text{rot}}} \left(\frac{\partial T^{\text{rot}}}{\partial t} \right). \quad (1.1)$$

Pode-se ainda definir uma taxa de resfriamento resultante para o gás, dada por $\zeta = (\zeta^{\text{tr}}T^{\text{tr}} + \zeta^{\text{rot}}T^{\text{rot}})/(T^{\text{tr}} + T^{\text{rot}})$, sendo ζ^{tr} e ζ^{rot} , ambos dependentes de f e portanto, de todos os momentos de f .

Goldshstein e Shapiro [19] encontraram taxas de resfriamento translacional e rotacional, aproximando a função de distribuição pela maxwelliana, ou seja

$$f_M(\mathbf{c}, \mathbf{w}) = n \left(\frac{m}{2\pi k T^{\text{tr}}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{I}{2\pi k T^{\text{rot}}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{m(\mathbf{c} - \mathbf{v})^2}{2k T^{\text{tr}}} - \frac{I\omega^2}{2k T^{\text{rot}}} \right], \quad (1.2)$$

onde n e \mathbf{v} são a densidade do número de partículas e a velocidade de fluxo, respectivamente, do gas e m e I são a massa e o momento de inércia, respectivamente. A velocidade média angular do gás foi considerada nula. Os resultados para ζ^{tr} e ζ^{rot} são

$$\zeta^{\text{tr}} = -\frac{5}{12} \left[1 - \alpha^2 + \frac{\kappa}{1 + \kappa} (1 - \beta^2) + \frac{\kappa}{(1 + \kappa)^2} (1 + \beta)^2 \left(1 - \frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \right) \right] \nu, \quad (1.3)$$

$$\zeta^{\text{rot}} = -\frac{5}{12} \frac{1 + \beta}{1 + \kappa} \left[1 - \beta - \frac{\kappa}{1 + \kappa} (1 + \beta) \left(\frac{T^{\text{tr}}}{T^{\text{rot}}} - 1 \right) \right] \nu, \quad (1.4)$$

onde

$$\kappa \equiv \frac{4I}{m d^2} \quad (1.5)$$

é o momento de inércia adimensional (d = diâmetro da esfera) e

$$\nu \equiv \frac{16}{5} d^2 n \sqrt{\pi k T^{\text{tr}} / m} \quad (1.6)$$

é a frequência de colisão efetiva.

Quando um gás se encontra no estado de resfriamento homogêneo, as temperaturas T^{tr} e T^{rot} tendem a decrescer continuamente, obedecendo a lei de Haff [20, 4], que para o caso da temperatura translacional é dada por

$$T(t) = \frac{T_0}{(1 + t/\tau)^2}, \quad \tau^{-1} \propto nd^2(1 - \alpha^2)\sqrt{\frac{kT_0}{m}}, \quad (1.7)$$

onde T_0 é a temperatura inicial translacional do gás. Apesar das temperaturas T^{tr} e T^{rot} tenderem a zero quando $t \rightarrow \infty$, a razão T^{tr}/T^{rot} se aproxima de um valor constante, que implica em $\zeta^{tr} = \zeta^{rot}$ e que fornece a seguinte equação para as razões das temperaturas:

$$T^{tr}/T^{rot} = \sqrt{1 + C^2} + C, \quad (1.8)$$

onde

$$C \equiv \frac{1 + \kappa}{2\kappa(1 + \beta)} \left[(1 + \kappa)\frac{1 - \alpha^2}{1 + \beta} + (\kappa - 1)(1 - \beta) \right]. \quad (1.9)$$

A equação (1.8) mostra que só existe equipartição para valores selecionados de α , β e κ , como mostrado em [3, 4, 5, 20].

Quando considera-se uma função de distribuição qualquer f , é de se esperar que as taxas ζ^{tr} e ζ^{rot} sejam influenciadas também pelos termos não maxwellianos e sejam diferentes de (1.3) e (1.4). A parte não maxwelliana de f , pode ser expandida em termos dos polinômios de Sonine multiplicada por coeficientes a_2 e b_2 , definidos por

$$\langle (\mathbf{v} - \mathbf{u})^4 \rangle = \frac{15}{4} \left(\frac{2kT^{tr}}{m} \right)^2 (1 + a_2) \quad (1.10)$$

e

$$\langle \omega^4 \rangle = \frac{15}{4} \left(\frac{2kT^{rot}}{I} \right)^2 (1 + b_2). \quad (1.11)$$

Pode-se ainda encontrar trabalhos sobre esferas rugosas que inclui: estudo de um gás confinado em um recipiente com paredes rugosas [21]; obtenção das equações constitutivas para gases granulares de esferas aproximadamente lisas e elásticas [22]; e

correlação entre o eixo de rotação e direção de translação [23].

O objetivo deste trabalho é: (a) encontrar aproximações para ζ^{tr} e ζ^{rot} levando em consideração a parte não maxwelliana de f ; (b) encontrar as soluções das equações (1.10) e (1.11) e obter os coeficientes a_2 e b_2 ; (c) analisar o comportamento do gás granular em função dos parâmetros α , β e κ ; (d) calcular a condutividade térmica, a viscosidade de cisalhamento e volumétrica do gás granular.

Este trabalho está organizado na seguinte forma. No capítulo 2, descreve-se toda a dinâmica colisional para as partículas, seguindo com a dedução da equação de Boltzmann para gases granulares e posteriormente calcula-se a função de distribuição, necessária para encontrar o comportamento das temperaturas translacional e rotacional juntamente com suas respectivas taxas de resfriamento. Também é feita uma análise da influência da aproximação obtida pelos polinômios de Sonine no estado de resfriamento homogêneo. Já no capítulo 3, encontra-se a segunda aproximação para a função distribuição, e a partir disso, é feito o cálculo dos coeficientes de transporte do gás granular. Por fim são feitas as considerações finais. Neste trabalho, serão omitidos muitos cálculos devido às suas complexidades e ao final, encontra-se um apêndice, com algumas relações frequentemente utilizadas em teoria cinética. Para facilitar os cálculos, usa-se a convenção da soma de Einstein sobre os índices repetidos.

Resfriamento de um gás granular

2.1 Dinâmica Microscópica

Vamos considerar um sistema com N partículas por unidade de volume V , onde cada partícula possui uma massa m , momento de inércia I , diâmetro d e a densidade de número de partículas dada por $n = N/V$. A colisão entre duas partículas pode ser vista na figura (2.1), que mostra a partícula 1 se aproximando da partícula sem índice. As velocidades linear e angular podem assumir direções arbitrárias. Pode-se definir \mathbf{J} como sendo o impulso exercido pela partícula sem índice sobre a partícula com índice 1. As velocidades linear e angular das partículas antes da colisão são $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1)$ e $(\mathbf{w}, \mathbf{w}_1)$ e as velocidades linear e angular das partículas após a colisão são $(\mathbf{c}', \mathbf{c}'_1)$ e $(\mathbf{w}', \mathbf{w}'_1)$ (com índice linha). O momento linear das duas partículas após a colisão pode ser escrito como:

$$m\mathbf{c}' = m\mathbf{c} - \mathbf{J}, \quad m\mathbf{c}'_1 = m\mathbf{c}_1 + \mathbf{J} \quad (2.1)$$

e o momento angular após a colisão:

$$I\mathbf{w}' = I\mathbf{w} + \frac{d}{2}\mathbf{k} \times \mathbf{J}, \quad I\mathbf{w}'_1 = I\mathbf{w}_1 + \frac{d}{2}\mathbf{k} \times \mathbf{J}, \quad (2.2)$$

onde \mathbf{k} é um vetor unitário que aponta do centro da partícula com índice 1 para o centro da outra partícula, e é denominado vetor de colisão. \mathbf{J} e $d\mathbf{k} \times \mathbf{J}/2$ são as variações de momento linear e angular respectivamente, que ocorrem devido à colisão.

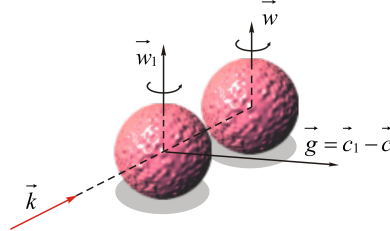


Figura 2.1: Colisão de duas esferas rugosas.

As velocidades relativas \mathbf{u} e \mathbf{u}' entre os pontos das duas partículas que entram em contato durante a colisão serão usadas para definir matematicamente como duas partículas podem colidir inelasticamente, e podem ser obtidas fazendo a soma da velocidade relativa dos centros das partículas (velocidade radial) com a velocidade relativa transversal dos pontos de contato, ou seja:

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} - \frac{d}{2}\mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}_1), \quad \mathbf{u}' = \mathbf{g}' - \frac{d}{2}\mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}'_1) \quad (2.3)$$

onde \mathbf{g} e \mathbf{g}' são as velocidades relativa dos centros das duas partículas antes e após a colisão, definidas por: $\mathbf{g} = \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}$ e $\mathbf{g}' = \mathbf{c}'_1 - \mathbf{c}'$. Assim as componentes normal e transversal da velocidade relativa \mathbf{u}' após a colisão definem a não-elasticidade das colisões através das relações:

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}') = -\alpha(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}), \quad (\mathbf{k} \times \mathbf{u}') = -\beta(\mathbf{k} \times \mathbf{u}), \quad (2.4)$$

onde α é o coeficiente de restituição normal e β é o coeficiente de restituição transversal. O coeficiente α assume valores entre 0 e 1. Se $\alpha = 0$ a colisão é perfeitamente inelástica e se $\alpha = 1$, a colisão é totalmente elástica. Os valores de β estão entre -1 e 1 , sendo que o primeiro corresponde a partículas lisas, e o segundo a partículas perfeitamente rugosas.

O vetor \mathbf{u}' pode ser escrito como:

$$\mathbf{u}' = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}')\mathbf{k} + (\mathbf{k} \times \mathbf{u}') \times \mathbf{k}$$

e usando as relações (2.4), temos

$$\mathbf{u}' = (\beta - \alpha)(\mathbf{u} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k} - \beta\mathbf{u}. \quad (2.5)$$

A partir das equações (2.1), (2.2) e (2.3), também podemos escrever \mathbf{u}' na forma:

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} + \frac{2}{m} \left[\mathbf{J} - \frac{1}{\kappa} \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{J}) \right], \quad (2.6)$$

onde κ é o momento de inércia adimensional (ver equação 1.5) e assume valores desde 0 até $2/3$. Se $\kappa = 0$ a massa está concentrada no centro da esfera, se $\kappa = 2/5$ temos uma distribuição uniforme de massa e se $\kappa = 2/3$ a massa está concentrada na superfície da esfera. Pode-se também definir as seguintes quantidades:

$$\tilde{\beta} \equiv \frac{\kappa(1 + \beta)}{2(\kappa + 1)}, \quad \tilde{\alpha} \equiv \frac{1 + \alpha}{2}. \quad (2.7)$$

Usando estas definições de $\tilde{\beta}$ e $\tilde{\alpha}$ e com o uso das equações (2.5) e (2.6), podemos expressar o impulso \mathbf{J} na forma:

$$\mathbf{J} = m\tilde{\beta}[(\mathbf{u} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k} - \mathbf{u}] - m\tilde{\alpha}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}. \quad (2.8)$$

Eliminando \mathbf{J} das equações (2.1) e (2.2) e usando a relação de \mathbf{u} dada por (2.3), obtém-se:

$$\mathbf{c}' = \mathbf{c} + \tilde{\beta} \left[\mathbf{g} - \frac{d}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}_1) \right] + [\tilde{\alpha} - \tilde{\beta}](\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}, \quad (2.9)$$

$$\mathbf{c}'_1 = \mathbf{c}_1 - \tilde{\beta} \left[\mathbf{g} - \frac{d}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}_1) \right] - [\tilde{\alpha} - \tilde{\beta}](\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{w}' = \mathbf{w} - \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa d} \mathbf{k} \times \left[\mathbf{g} - \frac{d}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}_1) \right], \quad (2.11)$$

$$\mathbf{w}'_1 = \mathbf{w}_1 - \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa d} \mathbf{k} \times \left[\mathbf{g} - \frac{d}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}_1) \right]. \quad (2.12)$$

Este conjunto de equações fornece as velocidades linear e angular das duas partículas após a colisão em termos das velocidades pré colisionais. A variação da energia mecânica em uma colisão é:

$$\Delta E = \frac{m}{2} c'^2 + \frac{I}{2} w'^2 + \frac{m}{2} c_1'^2 + \frac{I}{2} w_1'^2 - \frac{m}{2} c^2 - \frac{I}{2} w^2 - \frac{m}{2} c_1^2 - \frac{I}{2} w_1^2 \quad (2.13)$$

Substituindo as equações (2.9) a (2.12) em (2.13), obtemos após algumas simplificações:

$$\Delta E = \frac{\alpha^2 - 1}{4} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + \frac{\beta^2 - 1}{4} \frac{\kappa}{\kappa + 1} \left[\mathbf{g} - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} - \frac{d}{2} \mathbf{k} \times (\mathbf{w} + \mathbf{w}_1) \right]^2. \quad (2.14)$$

Vê-se facilmente que quando as colisões são elásticas ($\alpha = 1$) e as esferas perfeitamente rugosas ou perfeitamente lisas ($\beta = \pm 1$), a variação de energia ΔE é nula, ou seja, existe conservação da energia mecânica em cada colisão.

2.2 Equação de Boltzmann

Em 1872, Boltzmann deduziu uma equação básica da teoria de transporte para gases diluídos. Quando esta equação é resolvida, obtém-se uma função de distribuição dependente do tempo, posição e velocidade para as moléculas em um gás diluído. Vamos deduzir agora a forma da equação de Boltzmann para um gás granular composto de moléculas rugosas, e para isso, devemos levar em consideração o movimento rotacional das moléculas.

Vamos considerar um recipiente com volume V , contendo um gás constituído de N moléculas que interagem aos pares. Esta suposição é satisfeita se $V/N \gg d^3$ onde d é o diâmetro de cada molécula. Neste caso estamos garantindo que o gás está suficientemente diluído de modo que colisões entre três ou mais moléculas possam ser desprezadas. Para especificar completamente uma molécula deste gás em um tempo t , basta fornecer sua posição \mathbf{x} com componentes (x_1, x_2, x_3) , sua velocidade linear $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)$ e sua velocidade angular $\mathbf{w} = (w_1, w_2, w_3)$ ou equivalentemente sua posição

em um espaço de nove dimensões composto pelos eixos x_i, c_i, w_i , onde $i = 1, 2$ e 3 . O estado total do gás será portanto descrito por N pontos neste espaço de nove dimensões, denominado espaço μ . Cada ponto identificado pelas nove coordenadas $(\mathbf{x}^\delta, \mathbf{c}^\delta, \mathbf{w}^\delta)$ onde $\delta = 1, 2, \dots, N$.

A função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$ é definida de tal forma que

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) dx_1 dx_2 dx_3 dc_1 dc_2 dc_3 dw_1 dw_2 dw_3 \quad (2.15)$$

fornece o número de partículas $N(t)$ localizadas entre \mathbf{x} e $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ com velocidades linear entre \mathbf{c} e $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ e angular entre \mathbf{w} e $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$. Podemos definir o elemento de volume $d\mu$ do espaço μ como:

$$d\mu = d\mathbf{x} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = dx_1 dx_2 dx_3 dc_1 dc_2 dc_3 dw_1 dw_2 dw_3. \quad (2.16)$$

O número de partículas $N(t)$ no volume $d\mu$ depende do tempo, pois as partículas estão se movendo pelo recipiente e mudando de velocidade devido às colisões. Em um instante de tempo $t + dt$, o volume no espaço μ será $d\mu(t + \Delta t)$ e o número de partículas presentes neste elemento será:

$$N(t + dt) = f(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \mathbf{c} + d\mathbf{c}, \mathbf{w} + d\mathbf{w}, t + dt) d\mu(t + dt). \quad (2.17)$$

A mudança do número de partículas é dada por:

$$dN = N(t + dt) - N(t) = f(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \mathbf{c} + d\mathbf{c}, \mathbf{w} + d\mathbf{w}, t + dt) d\mu(t + dt) - f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mu. \quad (2.18)$$

Se considerarmos que o gás está livre de forças e torques externos, as mudanças nas posições e velocidades serão $d\mathbf{x} = \mathbf{c}dt$, $d\mathbf{c} = \mathbf{F}dt/m = 0$ e $d\mathbf{w} = \mathbf{M}dt/I = 0$, onde \mathbf{F} é a força externa que atua sobre o gás e \mathbf{M} é qualquer torque externo. A relação entre

$d\mu(t + dt)$ e $d\mu(t)$ é dada pelo módulo do Jacobiano J da transformação:

$$d\mu(t + dt) = |J|d\mu(t) = \left| \frac{\partial(x_1(t + dt), x_2(t + dt), \dots, c_1(t + dt), \dots, w_3(t + dt))}{\partial(x_1(t), x_2(t), \dots, c_1(t), \dots, w_3(t))} \right| d\mu(t) \quad (2.19)$$

Se considerarmos apenas termos lineares em dt , podemos dizer que $J = 1 + \mathcal{O}[(dt)^2]$, portanto

$$d\mu(t + dt) \approx d\mu(t). \quad (2.20)$$

Se expandirmos a função de distribuição $f(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \mathbf{c} + d\mathbf{c}, \mathbf{w} + d\mathbf{w}, t + dt)$ em série de Taylor em torno do ponto $(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$, obtemos o seguinte:

$$f(\mathbf{x} + d\mathbf{x}, \mathbf{c} + d\mathbf{c}, \mathbf{w} + d\mathbf{w}, t + dt) \approx f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) + \frac{\partial f}{\partial t} dt + \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i + \frac{\partial f}{\partial c_i} dc_i + \frac{\partial f}{\partial w_i} dw_i + \mathcal{O}[(dt)^2]. \quad (2.21)$$

Substituindo (2.20) e (2.21) em (2.18), e dividindo por dt , temos:

$$\frac{dN}{dt} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \right] d\mu \quad (2.22)$$

Para os cálculos a seguir, foram feitas algumas hipóteses:

- O gás está suficientemente diluído, de modo que apenas colisões entre duas partículas serão levadas em consideração.
- Qualquer força externa que atue sobre o gás será desprezada.
- A função de distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$ não varia apreciavelmente durante um intervalo de tempo da ordem de duração de uma colisão molecular ou em uma distância da ordem do tamanho das partículas.
- Em qualquer posição \mathbf{x} e tempo t , podemos desprezar qualquer possível correlação existente entre as velocidades de duas partículas. Esta aproximação fundamental na teoria é chamada de suposição de "caos molecular" e pode ser justificada para os casos em que a densidade do gás é suficientemente baixa.

Pode-se definir colisão direta e de restituição da seguinte forma: Colisão direta é

aquela na qual duas partículas com velocidades iniciais $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}, \mathbf{w}_1)$ colidem, produzindo velocidades $(\mathbf{c}', \mathbf{c}_1', \mathbf{w}', \mathbf{w}_1')$ e colisão de restituição é aquela na qual duas partículas com velocidades iniciais $(\mathbf{c}^*, \mathbf{c}_1^*, \mathbf{w}^*, \mathbf{w}_1^*)$ colidem, produzindo velocidades $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}, \mathbf{w}_1)$.

Na figura (2.2), podemos considerar que a partícula com velocidades (\mathbf{c}, \mathbf{w}) colide com outra partícula, com velocidades $(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1)$ que se aproxima com velocidade linear relativa $\mathbf{g} = \mathbf{c}_1 - \mathbf{c}$. Este movimento relativo é caracterizado pelo parâmetro de impacto b e pelo ângulo azimutal ϵ , não mostrado na figura.

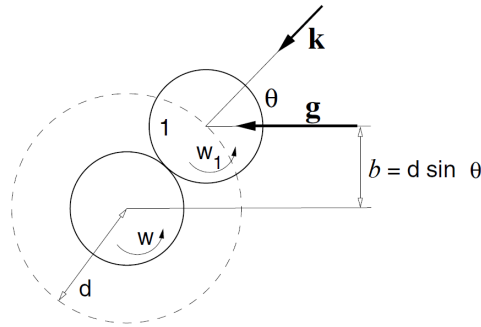


Figura 2.2: Colisão entre duas esferas rugosas mostrando o parâmetro de impacto b .

Vamos agora calcular o número de colisões diretas que ocorrem num intervalo dt , e para isto basta perceber que se uma partícula possui velocidades linear entre \mathbf{c}_1 e $\mathbf{c}_1 + d\mathbf{c}_1$ e angular entre \mathbf{w}_1 e $\mathbf{w}_1 + d\mathbf{w}_1$, no tempo t e se encontra num cilindro de volume $gd dt db d\epsilon$, ela irá colidir com uma partícula com velocidades lineares entre \mathbf{c} e $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ e angulares entre \mathbf{w} e $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$, que se encontram em torno do centro O , em um volume $d\mathbf{x}$, no tempo entre t e $t + dt$. O número de partículas com velocidades lineares entre \mathbf{c}_1 e $\mathbf{c}_1 + d\mathbf{c}_1$ e angulares entre \mathbf{w}_1 e $\mathbf{w}_1 + d\mathbf{w}_1$ é:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1, t) d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 g dt b db d\epsilon,$$

ou

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1, t) d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 dt d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (2.23)$$

onde $d\mathbf{k} \equiv \sin \theta d\theta d\epsilon$ e o parâmetro de impacto foi escrito como $b = d \sin \theta$.

O número de partículas com velocidades lineares entre \mathbf{c} e $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ e angulares

entre \mathbf{w} e $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$ é:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (2.24)$$

Assim, o número de colisões denominado $(d\mathcal{N})^-$, será igual ao produto do número de partículas com velocidades lineares entre \mathbf{c}_1 e $\mathbf{c}_1 + d\mathbf{c}_1$ e angulares entre \mathbf{w}_1 e $\mathbf{w}_1 + d\mathbf{w}_1$ pelo número de partículas com velocidades lineares entre \mathbf{c} e $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ e angulares entre \mathbf{w} e $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$, ou seja:

$$(d\mathcal{N})^- = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1, t) d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 \Delta t d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (2.25)$$

Para obter o número total de colisões no intervalo dt no elemento de volume $d\mathbf{x}$, devemos integrar (2.25) sobre todos os valores de \mathbf{c}_1 , \mathbf{w}_1 , b e ϵ , assim:

$$\left(\frac{d\mathcal{N}}{dt}\right)^- = d\mu(t) \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1. \quad (2.26)$$

Para determinar o número de colisões de restituição, basta fazer uma análise análoga à anterior e obter:

$$(d\mathcal{N})^+ = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1^*, \mathbf{w}_1^*, t) d\mathbf{c}_1^* d\mathbf{w}_1^* \Delta t d^2(\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*) d\mathbf{k}^* f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c}^* d\mathbf{w}^*. \quad (2.27)$$

As equações (2.9) a (2.12) relacionam as velocidades finais com as iniciais, mas neste caso, as velocidades finais não possuem "★" e as iniciais possuem "★". Desta forma, sem perda de generalidade, podemos orientar o vetor de colisão \mathbf{k}^* na direção do eixo z e escrever (2.9) a (2.12) na forma:

$$\begin{aligned}
c_x &= c_x^* + \tilde{\beta}(c_x^{1*} - c_x^*) + \tilde{\beta} \frac{\mathbf{d}}{2}(w_y^* + w_y^{1*}), & c_x^1 &= c_x^{1*} - \tilde{\beta}(c_x^{1*} - c_x^*) - \tilde{\beta} \frac{\mathbf{d}}{2}(w_y^* + w_y^{1*}), \\
c_y &= c_y^* + \tilde{\beta}(c_y^{1*} - c_y^*) - \tilde{\beta} \frac{\mathbf{d}}{2}(w_x^* + w_x^{1*}), & c_y^1 &= c_y^{1*} - \tilde{\beta}(c_y^{1*} - c_y^*) + \tilde{\beta} \frac{\mathbf{d}}{2}(w_x^* + w_x^{1*}), \\
c_z &= c_z^* + \tilde{\beta}(c_z^{1*} - c_z^*) + [\tilde{\alpha} - \tilde{\beta}](-c_z^* + c_z^{1*}), & c_z^1 &= c_z^{1*} - \tilde{\beta}(c_z^{1*} - c_z^*) - [\tilde{\alpha} - \tilde{\beta}](-c_z^* + c_z^{1*}), \\
w_x &= w_x^* + \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa \mathbf{d}} \left[(c_y^{1*} - c_y^*) - \frac{\mathbf{d}}{2}(w_x^* + w_x^{1*}) \right], & w_x^1 &= w_x^{1*} + \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa \mathbf{d}} \left[(c_y^{1*} - c_y^*) - \frac{\mathbf{d}}{2}(w_x^* + w_x^{1*}) \right], \\
w_y &= w_y^* - \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa \mathbf{d}} \left[(c_x^{1*} - c_x^*) + \frac{\mathbf{d}}{2}(w_y^* + w_y^{1*}) \right], & w_y^1 &= w_y^{1*} - \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa \mathbf{d}} \left[(c_x^{1*} - c_x^*) + \frac{\mathbf{d}}{2}(w_y^* + w_y^{1*}) \right], \\
w_z &= w_z^*, & w_z^1 &= w_z^{1*}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Usando as relações acima, encontramos que o módulo do Jacobiano da transformação $d\mathbf{c}^* d\mathbf{w}^* d\mathbf{c}_1^* d\mathbf{w}_1^* = |J| d\mathbf{c} d\mathbf{w} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1$ é dado por:

$$|J| = \frac{1}{\alpha\beta^2} \tag{2.29}$$

Desta forma, podemos escrever a transformação entre os elementos de volume na forma:

$$(\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*) d\mathbf{c}^* d\mathbf{w}^* d\mathbf{c}_1^* d\mathbf{w}_1^* = \frac{1}{\alpha^2\beta^2} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{c} d\mathbf{w} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 \tag{2.30}$$

Usando a transformação (2.30) na relação (2.27), obtemos:

$$(dN)^+ = \frac{1}{\alpha^2\beta^2} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1^*, \mathbf{w}_1^*, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 dt d\mathbf{x} d\mathbf{c} \tag{2.31}$$

Dividindo a equação (2.31) por dt e integrando sobre todos os valores de \mathbf{k} , \mathbf{c}_1 e \mathbf{w}_1 , encontramos o número total de colisões por intervalo de tempo que cria pontos no espaço μ com velocidades linear \mathbf{c} e angular \mathbf{w} , ou seja:

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)^+ = d\mu(t) \int \frac{1}{\alpha^2\beta^2} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1^*, \mathbf{w}_1^*, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1, \tag{2.32}$$

onde as velocidades $(\mathbf{c}_1^*, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}^*)$ se relacionam às velocidades $(\mathbf{c}_1, \mathbf{c}, \mathbf{w}_1, \mathbf{w})$ por meio das relações (2.28). A mudança resultante por unidade de tempo dt no número de partículas

é:

$$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{dN}{dt}\right)^+ - \left(\frac{dN}{dt}\right)^- \quad (2.33)$$

Substituindo (2.26) e (2.32) em (2.33) e igualando com (2.22), encontramos a equação de Boltzmann livre de forças e torques externos:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \int \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^* f^* - f_1 f \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} dc_1 d\mathbf{w}_1} \quad (2.34)$$

Na equação acima, as seguinte abreviações foram introduzidas para facilitar na notação:

$$f^* \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{c}^*, \mathbf{w}^*, t), \quad f_1^* \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1^*, \mathbf{w}_1^*, t), \quad f \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t), \quad f_1 \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1, t). \quad (2.35)$$

Para facilitar os cálculos mais à frente, podemos definir o lado direito da equação de Boltzmann como:

$$\mathcal{Q}(f_1, f) \equiv \int \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^* f^* - f_1 f \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} dc_1 d\mathbf{w}_1. \quad (2.36)$$

2.3 A equação de transporte

Podemos multiplicar a equação de Boltzmann por uma função arbitrária $\psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})$ dependente das velocidades e integrar sobre todos os valores de \mathbf{c} e \mathbf{w} e obter:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) f d\mathbf{c} d\mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) c_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \\ \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^* f^* - f_1 f \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} dc_1 d\mathbf{w}_1 d\mathbf{c} d\mathbf{w} \end{aligned} \quad (2.37)$$

Usando a equação (2.30), e lembrando que \mathbf{c} é uma variável independente, podemos reescrever o lado direito da equação acima como:

$$\begin{aligned} \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^* f^* - f_1 f \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma = \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) f_1^* f^* d^2(\mathbf{g}^* \cdot \mathbf{k}^*) d\Gamma^* \\ - \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde $d\Gamma$ e $d\Gamma^*$ foram definidos como

$$d\Gamma = d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad d\Gamma^* = d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1^* d\mathbf{w}_1^* d\mathbf{c}^* d\mathbf{w}^*. \quad (2.39)$$

A primeira integral do lado direito da equação (2.38) é uma integral fechada e portanto podemos fazer a seguinte mudança de notação:

$$\mathbf{c}_1^* \rightarrow \mathbf{c}_1, \quad \mathbf{w}_1^* \rightarrow \mathbf{w}_1, \quad \mathbf{c}^* \rightarrow \mathbf{c}, \quad \mathbf{w}^* \rightarrow \mathbf{w}, \quad \mathbf{c} \rightarrow \mathbf{c}', \quad \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{w}'.$$

Isto equivale dizer que as partículas com velocidades iniciais $(\mathbf{c}^*, \mathbf{c}_1^*, \mathbf{w}^*, \mathbf{w}_1^*)$ que colidiam e produziam velocidades finais $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}, \mathbf{w}_1)$ e possuíam vetor de colisão \mathbf{k}^* , possuem agora velocidades iniciais $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}, \mathbf{w}_1)$, colidem e produzem $(\mathbf{c}', \mathbf{c}_1', \mathbf{w}', \mathbf{w}_1')$ com vetor de colisão \mathbf{k} . Portanto reescrevemos (2.38) na forma:

$$\int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \left(\frac{f_1^* f^*}{\alpha^2 \beta^2} - f_1 f \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma = \int [\psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma, \quad (2.40)$$

Podemos também trocar o papel das partículas que colidem, ou seja, trocar (\mathbf{c}, \mathbf{w}) por $(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1)$ e vice versa, neste caso, a equação (2.40) torna-se:

$$\int [\psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma = \int [\psi(\mathbf{c}_1', \mathbf{w}_1') - \psi(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1)] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma \quad (2.41)$$

ou

$$\int [\psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma = \frac{1}{2} \int [\psi(\mathbf{c}_1', \mathbf{w}_1') + \psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1) - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma$$

portanto

$$\int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^* f^* - f_1 f \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma = \frac{1}{2} \int [\psi(\mathbf{c}_1', \mathbf{w}_1') + \psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1) - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \quad (2.42)$$

substituindo (2.42) em (2.37) e obter a forma geral da equação de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) f d\mathbf{c} d\mathbf{w} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) c_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \frac{1}{2} \int [\psi(\mathbf{c}'_1, \mathbf{w}'_1) + \psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1) - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma, \quad (2.43)$$

onde $(\mathbf{c}', \mathbf{c}'_1, \mathbf{w}', \mathbf{w}'_1)$ são funções de $(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{w}, \mathbf{w}_1)$. A equação de transporte (2.43) pode ser reescrita na forma abreviada:

$$\boxed{\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\Psi v_i + \Phi_i) = P} \quad (2.44)$$

onde Ψ , Φ_i e P são dados por:

$$\Psi = \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad \Phi_i = \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) C_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.45)$$

$$P = \frac{1}{2} \int [\psi(\mathbf{c}'_1, \mathbf{w}'_1) + \psi(\mathbf{c}', \mathbf{w}') - \psi(\mathbf{c}_1, \mathbf{w}_1) - \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})] f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \quad (2.46)$$

Para definir Φ_i , foi utilizada a velocidade peculiar $C_i = c_i - v_i$, onde v_i representa a velocidade do gás, que será definida logo à frente.

2.4 Os momentos da função de distribuição

Sabendo a função distribuição $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t)$ de um gás, e as quantidades microscópicas que o caracterizam, podemos fazer uma descrição macroscópica do gás através dos campos básicos: densidade do número de partículas $n(\mathbf{x}, t)$, velocidade hidrodinâmica $v_i(\mathbf{x}, t)$, velocidade de rotação do gás $\sigma_i(\mathbf{x}, t)$, temperatura translacional $T^{tr}(\mathbf{x}, t)$ e $T^{rot}(\mathbf{x}, t)$ que são definidas como:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = mn(\mathbf{x}, t) = \int m f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad v_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{n} \int c_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad \sigma_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{n} \int w_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w} \quad (2.47)$$

$$T^{tr}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3kn} \int m C^2 f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad T^{rot}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3kn} \int I \Omega^2 f d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.48)$$

onde k é a constante de Boltzmann e $C_i = c_i - v_i$ e $\Omega_i = w_i - \sigma_i$ são as velocidades peculiares.

O momento da função distribuição de ordem N definido através de

$$p_{i_1 i_2 \dots i_N}(\mathbf{x}, t) = \int m C_{i_1} C_{i_2} \dots C_{i_N} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (2.49)$$

A densidade de massa é o momento de ordem zero, enquanto que o primeiro momento é nulo, pois:

$$p_i(\mathbf{x}, t) = \int m C_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \int m c_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w} - \int m v_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w} = 0. \quad (2.50)$$

O tensor pressão é o momento de segunda ordem, dado por

$$p_{ij}(\mathbf{x}, t) = \int m C_i C_j f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w} \quad (2.51)$$

e seu análogo rotacional:

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = \int I \Omega_i C_j f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (2.52)$$

O deviante do tensor pressão $p_{\langle ij \rangle}$ é definido por:

$$p_{\langle ij \rangle} = \int m C_{\langle i} C_{j \rangle} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w} = p_{ij} - \frac{1}{3} p_{rr} \delta_{ij} = p_{ij} - p \delta_{ij}, \quad (2.53)$$

e a pressão do gás é:

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3} p_{rr} = \frac{1}{3} \int m C^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (2.54)$$

O momento de terceira ordem contraído é:

$$q_i^{tr} = \frac{1}{2} p_{jji} = \int \frac{m}{2} C^2 C_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.55)$$

e é denominado fluxo de calor translacional. Pode-se também definir a relação

$$q_i^{rot} = \int \frac{I}{2} \Omega^2 C_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.56)$$

que é o fluxo de calor relacionado ao movimento rotacional das moléculas.

2.5 As equações de balanço para os momentos

Pode-se definir a derivada material \mathcal{D} como:

$$\mathcal{D} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (2.57)$$

e utilizá-la para escrever as equações de balanço dos campos básicos, e para isto basta escolher determinados valores de ψ na equação (2.43) e obter:

- Balanço do número de partículas ($\psi = 1$):

$$\mathcal{D}n + n \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.58)$$

- Balanço da velocidade hidrodinâmica ($\psi = mc_i$):

$$\mathcal{D}v_i + \frac{1}{mn} \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad (2.59)$$

- Balanço de temperatura translacional ($\psi = mC^2/2$):

$$\mathcal{D}T^{tr} + \frac{2}{3kn} \left[\frac{\partial q_i^{tr}}{\partial x_i} + p_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] + T^{tr} \zeta^{tr} = 0, \quad (2.60)$$

- Balanço de temperatura rotacional ($\psi = I\Omega^2/2$):

$$\mathcal{D}T^{rot} + \frac{2}{3nk} \left[\frac{\partial q_i^{rot}}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial \sigma_i}{\partial x_j} \right] + T^{rot} \zeta^{rot} = 0. \quad (2.61)$$

O coeficiente de resfriamento ζ^{rot} e ζ^{tr} do gás foram definidos como:

$$\zeta^{tr} = -\frac{md^2}{6nkT^{tr}} \int (C_1'^2 + C'^2 - C_1^2 - C^2) f f_1(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma, \quad (2.62)$$

$$\zeta^{rot} = -\frac{Id^2}{6nkT^{rot}} \int (\Omega_1'^2 + \Omega'^2 - \Omega_1^2 - \Omega^2) f f_1(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma, \quad (2.63)$$

e a taxa resultante (ou líquida) de resfriamento é dada por:

$$\zeta = \frac{\zeta^{tr} T^{tr} + \zeta^{rot} T^{rot}}{T^{tr} + T^{rot}}. \quad (2.64)$$

2.6 Método de Chapman-Enskog

2.6.1 Equações integrais

A idéia fundamental do método de Chapman-Enskog é de expandir a função de distribuição como uma série de potência na forma:

$$f = f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \lambda^2 f^{(2)} + \dots = \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r f^{(r)}, \quad (2.65)$$

onde λ é um parâmetro da ordem do número de Knudsen, o qual é definido como

$$Kn = \frac{l}{L_c}, \quad (2.66)$$

onde l é o caminho livre médio e L_c é um comprimento representativo do gás. Se $Kn \gg 1$, as colisões moleculares são desprezíveis e o gás está num regime conhecido como fluxo livre molecular. Se $Kn \ll 1$, as colisões moleculares são muito importantes e o gás é descrito por um regime contínuo [24]. Na expansão (2.65), o primeiro termo $f^{(0)}$, fornece os valores de densidade de massa, velocidade hidrodinâmica e temperatura e corresponde à primeira aproximação. Do segundo termo $f^{(1)}$ resultam grandezas de transporte, que estão relacionadas com o gradiente da velocidade, da temperatura e do número de partículas.

A partir das definições (2.47) e (2.48), vemos que:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \int m f^{(0)} d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.67)$$

$$v_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{n} \int c_i f d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \frac{1}{n} \int c_i f^{(0)} d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.68)$$

$$T^{tr}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3kn} \int m C^2 f d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \frac{1}{3kn} \int m C^2 f^{(0)} d\mathbf{c} d\mathbf{w}, \quad (2.69)$$

$$T^{rot}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3kn} \int I \Omega^2 f d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \frac{1}{3kn} \int I \Omega^2 f^{(0)} d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (2.70)$$

Assim obtemos a seguinte restrição:

$$\int \psi f^{(r)} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = 0, \quad \forall r \geq 1, \quad (2.71)$$

onde ψ é m , mc_i , mC^2 e $I\Omega^2$. Substituindo a expansão da função distribuição (2.65) nas definições do deviante do tensor pressão (2.51) e fluxo de calor total dado pelas equações (2.55) e (2.56), temos:

$$p_{ij} = \int m C_i C_j \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r f^{(r)} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = p \delta_{ij} + \sum_{r=1}^{\infty} \lambda^r p_{(ij)}^{(r)}, \quad (2.72)$$

$$q_i = q_i^{tr} + q_i^{rot} = \int \left(\frac{m}{2} C^2 + \frac{I}{2} \Omega^2 \right) C_i \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r f^{(r)} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \sum_{r=1}^{\infty} \lambda^r q_i^{(r)}. \quad (2.73)$$

Usando (2.65) nas definições dos coeficientes de resfriamento (2.62) e (2.63), obtemos a aproximação de ordem zero:

$$\zeta^{tr(0)} = -\frac{m d^2}{6nkT^{tr}} \int (C_1'^2 + C'^2 - C_1^2 - C^2) f^{(0)} f_1^{(0)} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma, \quad (2.74)$$

$$\zeta^{rot(0)} = -\frac{I d^2}{6nkT^{rot}} \int (\Omega_1'^2 + \Omega'^2 - \Omega_1^2 - \Omega^2) f^{(0)} f_1^{(0)} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma, \quad (2.75)$$

É possível escrever a equação de Boltzmann em termos do parâmetro λ como [24]:

$$\mathcal{D}f + \lambda C_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \mathcal{Q}(f, f_1). \quad (2.76)$$

Como a função de distribuição f foi expandida em séries e conseqüentemente as grandezas deriváveis dela, podemos também expandir a derivada material \mathcal{D} em termos do parâmetro λ como:

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}^{(0)} + \lambda \mathcal{D}^{(1)} + \lambda^2 \mathcal{D}^{(2)} + \dots = \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r \mathcal{D}^{(r)}. \quad (2.77)$$

Usando a expansão (2.65) e (2.77) na equação (2.76), obtemos a aproximação para a equação de Boltzmann de ordem zero:

$$\mathcal{D}^{(0)} f^{(0)} = \int \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^{\star(0)} f^{\star(0)} - f_1^{(0)} f^{(0)} \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{c}_1 d\mathbf{w}_1 \quad (2.78)$$

Substituindo as expansões (2.65), (2.72), (2.73) e (2.77) nas equações de balanço (2.58) a (2.61) e igualando os termos de ordem zero em λ , obtemos:

$$\mathcal{D}^{(0)} n = 0, \quad \mathcal{D}^{(0)} v_i = 0, \quad \mathcal{D}^{(0)} T^{\text{tr}} = -T^{\text{tr}} \zeta^{\text{tr}(0)}, \quad \mathcal{D}^{(0)} T^{\text{rot}} = -T^{\text{rot}} \zeta^{\text{rot}(0)}. \quad (2.79)$$

Usando a regra da cadeia, podemos escrever a derivada material de $f^{(0)}$ como:

$$\mathcal{D}^{(0)} f^{(0)} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} \mathcal{D}^{(0)} n + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_i} \mathcal{D}^{(0)} v_i + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{\text{tr}}} \mathcal{D}^{(0)} T^{\text{tr}} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{\text{rot}}} \mathcal{D}^{(0)} T^{\text{rot}}. \quad (2.80)$$

Usando (2.79), temos:

$$\mathcal{D}^{(0)} f^{(0)} = -T^{\text{tr}} \zeta^{\text{tr}(0)} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{\text{tr}}} - T^{\text{rot}} \zeta^{\text{rot}(0)} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{\text{rot}}}. \quad (2.81)$$

2.6.2 Função de distribuição $f^{(0)}$

Vamos determinar a primeira aproximação $f^{(0)}$ para a função de distribuição f do gás e para isso, vamos supor que $f^{(0)}$ pode ser expandida em polinômios de Sonine (ver

definição dos polinômios de Sonine na apêndice A) na forma:

$$f^{(0)} = n \left(\frac{m}{2\pi k T^{\text{tr}}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{I}{2\pi k T^{\text{rot}}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{mC^2}{2kT^{\text{tr}}} - \frac{I\Omega^2}{2kT^{\text{rot}}} \right] \times \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n S_{1/2}^{(n)} \left(\frac{mC^2}{2kT^{\text{tr}}} \right) + b_n S_{1/2}^{(n)} \left(\frac{I\Omega^2}{2kT^{\text{rot}}} \right) \right] \right\}. \quad (2.82)$$

Considerando termos até $n = 2$, temos:

$$f^{(0)} = n \left(\frac{m}{2\pi k T^{\text{tr}}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{I}{2\pi k T^{\text{rot}}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{mC^2}{2kT^{\text{tr}}} - \frac{I\Omega^2}{2kT^{\text{rot}}} \right] \left\{ 1 + a_1 \left(\frac{3}{2} - \frac{mC^2}{2kT^{\text{tr}}} \right) + b_1 \left(\frac{3}{2} - \frac{I\Omega^2}{2kT^{\text{rot}}} \right) + a_2 \left(\frac{15}{8} - \frac{5mC^2}{4kT^{\text{tr}}} + \frac{m^2 C^4}{8(kT^{\text{tr}})^2} \right) + b_2 \left(\frac{15}{8} - \frac{5I\Omega^2}{4kT^{\text{rot}}} + \frac{I^2 \Omega^4}{8(kT^{\text{rot}})^2} \right) \right\}, \quad (2.83)$$

onde a_1 , a_2 , b_1 e b_2 , são coeficientes a serem determinados. Substituindo (2.83) nas duas definições de temperatura dadas por (2.69) e (2.70), encontramos $a_1 = b_1 = 0$, além disso se substituirmos a função distribuição (2.83) nas equações dadas por (2.74) e (2.75), obtemos as primeiras aproximações para a taxa de resfriamento de um gás granular:

$$\zeta^{\text{tr}(0)} = \frac{16nd^2}{3\kappa} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \kappa \left[\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right] \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) - \tilde{\beta}^2 \frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right\}, \quad (2.84)$$

$$\zeta^{\text{rot}(0)} = \frac{16\tilde{\beta}nd^2}{3\kappa^2} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \left[\kappa - \tilde{\beta} \right] \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) - \kappa \tilde{\beta} \frac{T^{\text{tr}}}{T^{\text{rot}}} \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) \right\}. \quad (2.85)$$

Note que ambas taxas não dependem do coeficiente b_2 .

Vamos agora determinar os coeficientes a_2 e b_2 , e para isto, vamos multiplicar a equação (2.78) por uma função arbitrária ψ e integrar a equação resultante sobre todos os valores de \mathbf{c} e \mathbf{w} , obtendo:

$$\int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \mathcal{D}^{(0)} f^{(0)} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \int \left(\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} f_1^{*(0)} f^{*(0)} - f_1^{(0)} f^{(0)} \right) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \quad (2.86)$$

usando (2.42) e (2.81), temos:

$$\begin{aligned} T^{\text{tr}} \zeta^{\text{tr}(0)} \int \psi \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{\text{tr}}} d\mathbf{c} d\mathbf{w} + T^{\text{rot}} \zeta^{\text{rot}(0)} \int \psi \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{\text{rot}}} d\mathbf{c} d\mathbf{w} \\ = -\frac{1}{2} \int (\psi'_1 + \psi' - \psi_1 - \psi) f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Se fizermos $\psi = 1$, $\psi = mC^2/2$ e $\psi = I\Omega^2/2$ em (2.87), obtemos identidades, mas se escolhermos $\psi = m^2C^4/(2kT^{\text{tr}})^2$, obtemos o seguinte:

$$\begin{aligned} \frac{5}{4}\kappa \left\{ \kappa(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2 - \tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) \left(1 + \frac{19a_2}{16}\right) + \tilde{\beta}^2 \frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \left(1 + \frac{15a_2}{16}\right) \right\} = \\ \kappa^2 \left[\tilde{\alpha}\tilde{\beta}(\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 1 - \tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) + \tilde{\beta}^3(\tilde{\beta} - 2) + \tilde{\alpha}^3(\tilde{\alpha} - 2) - \frac{11}{8}(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + \frac{19}{8}(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) \right] + \\ \frac{15a_2}{16} \kappa^2 \left[\tilde{\alpha}\tilde{\beta} \left(\tilde{\alpha}\tilde{\beta} - \tilde{\alpha} - \tilde{\beta} + \frac{23}{15} \right) - \frac{269}{120}(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + \frac{357}{120}(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) + \tilde{\alpha}^4 + \tilde{\beta}^4 \right. \\ \left. - 2(\tilde{\alpha}^3 + \tilde{\beta}^3) \right] + \kappa \frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \left[\tilde{\alpha}\tilde{\beta}^2(\tilde{\alpha} - 1) + 2\tilde{\beta}^3(\tilde{\beta} - 1) \right] \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right) \\ + \frac{11\tilde{\beta}^2}{8} \kappa \frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \left(1 + \frac{41a_2}{176}\right) + \tilde{\beta}^4 \left(\frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \right)^2 \left(1 + \frac{b_2}{2} - \frac{a_2}{16}\right). \end{aligned} \quad (2.88)$$

Perceba que nesta equação aparecem ambos coeficientes a_2 e b_2 , portanto é impossível de determinar estes coeficientes apenas desta equação. Para obtermos uma segunda equação, podemos escolher $\psi = I^2\Omega^4/(2kT^{\text{rot}})^2$ e obter:

$$\begin{aligned} -5\kappa^2 \left\{ (\kappa - \tilde{\beta}) \left(1 + b_2 - \frac{a_2}{16}\right) - \kappa\tilde{\beta} \frac{T^{\text{tr}}}{T^{\text{rot}}} \left(1 + b_2 + \frac{3a_2}{16}\right) \right\} \\ = [4\tilde{\beta}^3 - 8\tilde{\beta}^2\kappa + 9\tilde{\beta}\kappa^2 - 5\kappa^3] \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) + \tilde{\beta}\kappa \frac{T^{\text{tr}}}{T^{\text{rot}}} [8\tilde{\beta}^2 - 8\tilde{\beta}\kappa + 5\kappa^2] \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right) \\ + 4\tilde{\beta}^3\kappa^2 \left(\frac{T^{\text{tr}}}{T^{\text{rot}}} \right)^2 \left(1 + \frac{15a_2}{16}\right) + [4\tilde{\beta}^3 - 8\tilde{\beta}^2\kappa + 13\tilde{\beta}\kappa^2 - 10\kappa^3] \frac{b_2}{2} \end{aligned} \quad (2.89)$$

onde termos de ordem $\mathcal{O}[(a_2)^2]$ e $\mathcal{O}[(b_2)^2]$ foram desprezados. Perceba que agora temos duas equações linearmente independentes, e que quando resolvidas, fornecem os valores de a_2 e b_2 , que não serão mostrados aqui, pois são muito extensos. Uma vez determinados

os coeficientes a_1 , a_2 , b_1 e b_2 , a primeira aproximação $f^{(0)}$ para a função de distribuição fica completamente determinada em termos dos campos básicos.

2.7 Estado de resfriamento homogêneo

Vamos agora considerar um sistema homogêneo no qual as temperaturas dependam apenas do tempo e as derivadas espaciais sejam todas nulas. Neste caso, podemos substituir as relações (2.84) e (2.85) nas equações de balanço (2.60) e (2.61) e obter:

$$\frac{\partial T^{\text{tr}}}{\partial t} + T^{\text{tr}} \frac{16}{3} \frac{nd^2}{\kappa} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \kappa [\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2] \left(1 + \frac{3}{16} a_2 \right) - \tilde{\beta}^2 \frac{T^{\text{rot}}}{T^{\text{tr}}} \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right\} = 0, \quad (2.90)$$

$$\frac{\partial T^{\text{rot}}}{\partial t} + T^{\text{rot}} \frac{16}{3} \frac{\tilde{\beta} nd^2}{\kappa^2} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ [\kappa - \tilde{\beta}] \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) - \kappa \tilde{\beta} \frac{T^{\text{tr}}}{T^{\text{rot}}} \left(1 + \frac{3}{16} a_2 \right) \right\} = 0, \quad (2.91)$$

Dividindo as duas equações acima por $T^{\text{tr}}(0)/t_0$ e definindo:

$$T(\tau) \equiv \frac{T^{\text{tr}}(\tau)}{T^{\text{tr}}(0)}, \quad R(\tau) \equiv \frac{T^{\text{rot}}(\tau)}{T^{\text{tr}}(0)}, \quad \tau \equiv \frac{t}{t_0}, \quad \text{onde } t_0 \equiv \frac{1}{nd^2} \sqrt{\frac{m}{\pi k T^{\text{tr}}(0)}}, \quad (2.92)$$

representa um tempo molecular característico da ordem do intervalo entre colisões, obtemos as seguintes equações adimensionalizadas:

$$\frac{dT}{d\tau} + \frac{16}{3\kappa} T^{3/2} \left\{ \kappa [\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2] \left(1 + \frac{3}{16} a_2 \right) - \tilde{\beta}^2 \frac{R}{T} \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right\} = 0, \quad (2.93)$$

$$\frac{dR}{d\tau} + \frac{16}{3} \frac{\tilde{\beta}}{\kappa^2} R T^{1/2} \left\{ [\kappa - \tilde{\beta}] \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) - \kappa \tilde{\beta} \frac{T}{R} \left(1 + \frac{3}{16} a_2 \right) \right\} = 0, \quad (2.94)$$

onde a_2 também depende das temperaturas translacional e rotacional.

Para a determinação da solução do sistema de equações diferenciais acopladas acima, e sua análise, será proveitoso definir a temperatura média do gás $M(\tau)$ e o fator de equipartição $Q(\tau)$ como:

$$M(\tau) \equiv \frac{T(\tau) + R(\tau)}{2}, \quad Q(\tau) \equiv \frac{T(\tau)}{T(\tau) + R(\tau)}. \quad (2.95)$$

O fator de equipartição assume valores entre zero e um. Quando $Q = 0$, toda energia do gás está associada com o movimento rotacional da moléculas e a energia de translação é desprezível. Quando $Q = 1$, ocorre o inverso e para o caso em que $Q = 0,5$, a energia está igualmente distribuída entre os modos de rotação e translação das moléculas.

O sistema de equações diferenciais (2.93) e (2.94) não pode ser resolvido analiticamente, pois a_2 possui uma complexa dependência das temperaturas T e R , portanto vamos resolvê-lo numericamente, analisando alguns casos de interesse.

2.7.1 Esferas elásticas lisas ($\alpha = 1, \beta = -1$)

O sistema (2.93) e (2.94) torna-se

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} = \frac{dR(\tau)}{d\tau} = 0. \quad (2.96)$$

Neste caso, não existe nenhuma perda de energia, e nem transferência de energia rotacional para translacional e vice versa, pois as esferas são lisas, e portanto as temperaturas T e R e a média M permanecem constantes no tempo, independente das condições iniciais e do valor de κ .

2.7.2 Esferas elásticas rugosas ($\alpha = 1, \beta = 1$)

Como as esferas são elásticas, a energia total do gás permanece constante, pois não existem perdas. Mas como as esferas são rugosas, poderá existir transferência de energia translacional para rotacional e vice versa. Para este caso, o sistema de equações é

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} + \frac{16}{3}T(\tau)^{\frac{3}{2}}\frac{\kappa}{(\kappa+1)^2} \left\{ 1 + \frac{3}{16}a_2 - \frac{R(\tau)}{T(\tau)} \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right\} = 0, \quad (2.97)$$

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} + \frac{dR(\tau)}{d\tau} = 0. \quad (2.98)$$

A partir de (2.97), vemos que se $\kappa \neq 0$, então $dT(\tau)/d\tau \neq 0$, assim, apesar da energia total ser constante, as duas temperaturas $T(\tau)$ e $R(\tau)$ variam no tempo, mas com taxas contrárias, de modo que a soma destas duas derivadas é nula, como pode ser comprovado

pela equação (2.98). O fator de equipartição depende inicialmente das condições iniciais, e tende a $1/2$ para tempos longos, pois as temperaturas $T(\tau)$ e $R(\tau)$ se igualam e suas variações se anulam, como pode ser visto na figura (2.3).

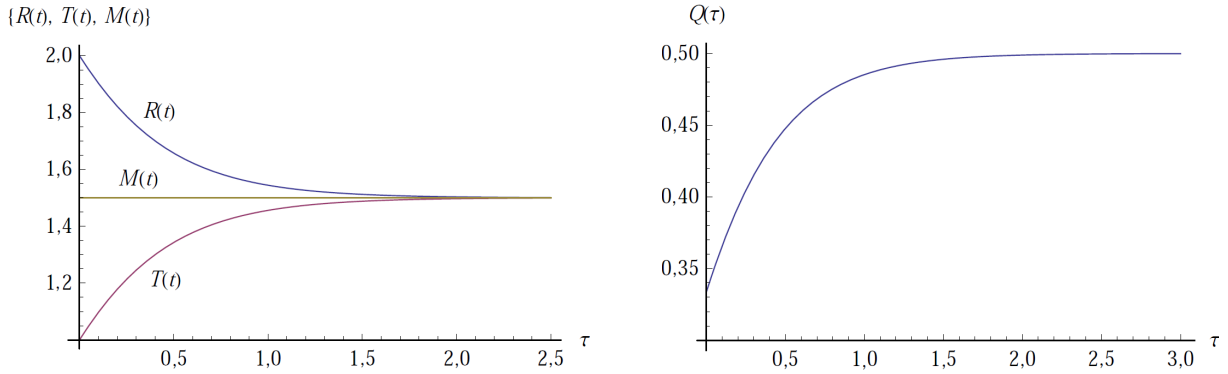


Figura 2.3: Figura da esquerda: Temperaturas $T(\tau)$, $R(\tau)$ e $M(\tau)$ em função do tempo. Figura da direita: Fator de equipartição $Q(\tau)$ em função do tempo, para $\kappa = 2/5$ e condições iniciais $T(0) = 1$ e $R(0) = 2$.

À medida que diminuimos o valor de κ , as massas das esferas se concentram mais próximo dos seus centros, e isso dificulta cada vez mais a transferência de energia translacional para rotacional e vice versa, e o módulo das variações das temperaturas $dT(\tau)/d\tau$ e $dR(\tau)/d\tau$ diminuem cada vez mais, até que no limite em que $\kappa = 0$ não acontece mais a transferência de energia e as duas temperaturas $T(\tau)$ e $R(\tau)$ permanecem constantes no tempo, independente das condições iniciais, como pode ser visto na figura (2.4). Observe que quando $\alpha = 1$ e $\beta = \pm 1$, temos os casos em que ocorre conservação da

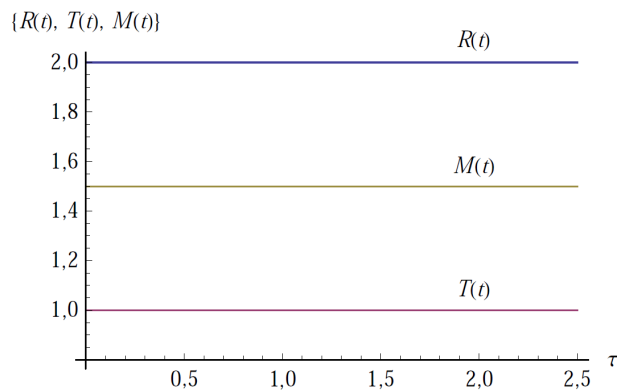


Figura 2.4: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo τ , para $\kappa = 0$.

energia mecânica.

2.7.3 Esferas inelásticas lisas ($\alpha < 1$, $\beta = -1$)

O sistema de equações que descreve o gás neste caso é:

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} + \frac{16}{3}T(\tau)^{\frac{3}{2}}\tilde{\alpha}[1 - \tilde{\alpha}] \left(1 + \frac{3}{16}a_2\right) = 0, \quad (2.99)$$

$$\frac{dR(\tau)}{d\tau} = 0, \quad (2.100)$$

Perceba que a temperatura rotacional permanece constante no tempo, pois as esferas são perfeitamente lisas e não ocorrem trocas de energia entre os modos de translação e rotação, mas a temperatura translacional decresce com o tempo devido à não-elasticidade da componente normal da colisão e diferente dos casos anteriores, ocorre a diminuição da temperatura média $M(\tau)$ em função do tempo. A figura (2.5) mostra estas diminuições nas temperaturas e também o comportamento decrescente do fator de equipartição $Q(\tau)$ para grandes valores de tempo, devido à diminuição até o zero da temperatura $T(\tau)$.

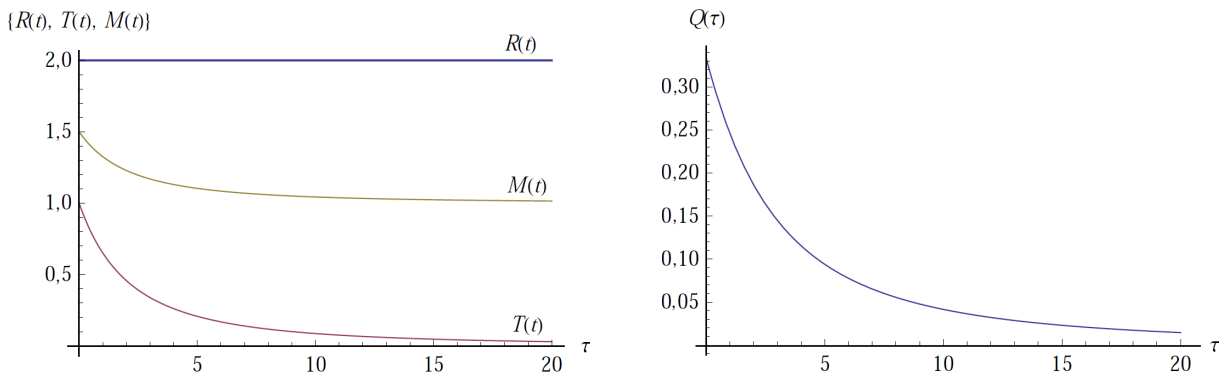


Figura 2.5: Figura da esquerda: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo, para κ qualquer. Figura da direita: Fator de equipartição $Q(\tau)$ em função do tempo para κ qualquer.

2.7.4 Esferas elásticas parcialmente rugosas ($\alpha = 1$, $\beta \lesssim 1$)

Agora a inelasticidade das colisões está relacionada com a componente transversal das colisões, pois as componentes normais são elásticas. As equações da evolução das

temperaturas translacional e rotacional são:

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} + \frac{16}{3}T(\tau)^{\frac{3}{2}}\tilde{\beta} \left\{ (1 - \tilde{\beta}) \left(1 + \frac{3}{16}a_2\right) - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \frac{R(\tau)}{T(\tau)} \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) \right\} = 0, \quad (2.101)$$

$$\frac{dR(\tau)}{d\tau} - \frac{16}{3}T(\tau)^{\frac{3}{2}}\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left\{ \tilde{\beta} \left(1 + \frac{3}{16}a_2\right) - \left(1 - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa}\right) \frac{R(\tau)}{T(\tau)} \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) \right\} = 0. \quad (2.102)$$

A figura (2.6) mostra o comportamento das temperaturas $T(\tau)$, $R(\tau)$ e $M(\tau)$ em função do tempo para $\kappa = 2/5$ e $\beta = 0,8$. Perceba que no início, existe transferência de energia rotacional para translacional, resultando num aumento de $T(\tau)$, até que em $\tau = 1$, as duas temperaturas se igualam, mas decaem com taxas diferentes, de modo que a equipartição não ocorre, pois $Q \approx 0,53$ quando $\tau \rightarrow \infty$.

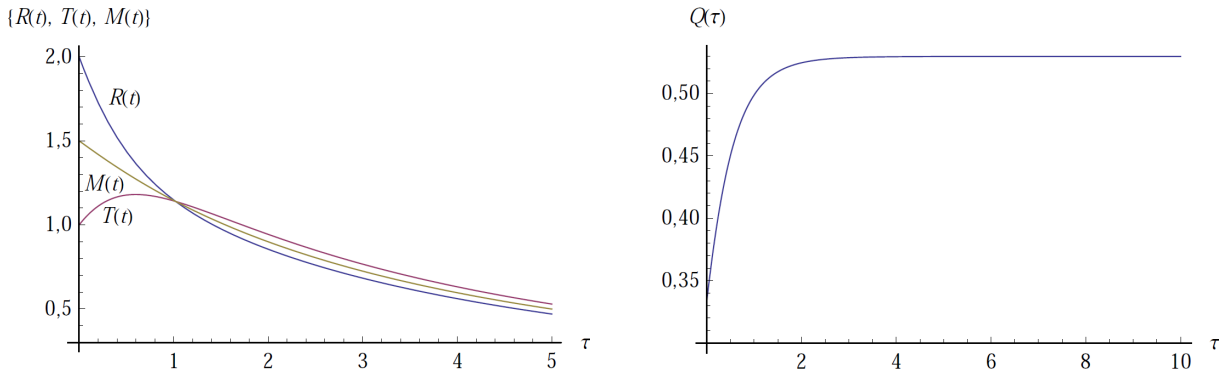


Figura 2.6: Figura da esquerda: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo τ . Figura da direita: Fator $Q(\tau)$ em função do tempo para $\kappa = 2/5$, $\beta = 0,8$ e condições iniciais $T(0) = 1$ e $R(0) = 2$.

Um outro comportamento pode ser obtido para $\alpha = 1$ e $\kappa = 0$, neste caso $\tilde{\beta} = 0$, mas de acordo com a equação (2.7), vemos que $\tilde{\beta}/\kappa = (1 + \beta)/2$ quando $\kappa = 0$. Neste caso as equações (2.101) e (2.102) se reduzem a:

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} = 0, \quad \frac{dR(\tau)}{d\tau} + \frac{4}{3}T(\tau)^{\frac{1}{2}}R(\tau)(1 - \beta^2) \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) = 0. \quad (2.103)$$

Como a massa das esferas está concentrada nos seus centros, não há transferência de energia entre os graus de liberdade translacional e rotacional, consequentemente, a temperatura $T(\tau)$ permanece constante no tempo enquanto que se $\beta \neq \pm 1$, $R(\tau)$ decresce de uma forma independente até atingir o zero e o fator de equipartição tende a 1 para

tempos longos, como pode ser visto na figura (2.7).

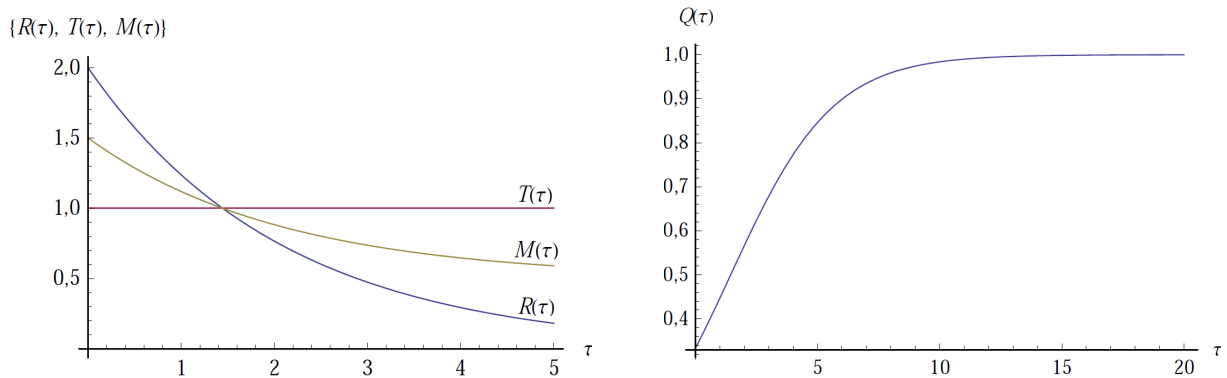


Figura 2.7: Figura da direita: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo. Figura da esquerda: Fator $Q(\tau)$ em função do tempo τ para $\kappa = 0$.

2.7.5 Esferas inelásticas parcialmente rugosas ($\alpha < 1$, $\beta \lesssim 1$)

Neste caso há perdas de energia devido a todos os movimentos e se considerarmos $\kappa \neq 0$ haverá troca de energia entre os modos de rotação e translação. Na figura (2.8) vemos o decaimento das temperaturas $R(\tau)$, $T(\tau)$ e $M(\tau)$ em função de τ . Considerou-se as condições iniciais $T(0) = 1$ e $R(0)$ dez vezes maior que $T(0)$ para mostrar mais facilmente algumas coisas: Percebe-se que para $\tau < 0,5$, a taxa de transferência de energia rotacional para translacional é maior que a taxa de decaimento da energia translacional, pois a temperatura $T(\tau)$ aumenta com o tempo. Mas se $\tau > 0,5$, ocorre o contrário, de modo que o efeito resultante é uma diminuição da energia translacional e consequentemente de sua temperatura associada. Para $\tau \approx 0,5$, estas duas taxas são iguais, de modo que a temperatura translacional alcança um valor máximo. Ainda na figura (2.8), podemos ver que $Q \rightarrow 0,46$ quando $\tau \rightarrow \infty$, violando o princípio da equipartição de energia.

Na figura (2.9) vemos um gráfico de $T(\tau)$, $R(\tau)$ e $M(\tau)$ em função do tempo em escala logarítmica, mostrando que para $\tau \rightarrow \infty$, estas temperaturas obedecem uma lei de potência na forma τ^{-n} , com $n \approx 2$, em concordância com [3, 20, 4]. Esta dependência da temperatura em função do tempo é conhecida na literatura como lei de Haff.

Se considerarmos $\kappa = 0$, as equações que descrevem a evolução das temperaturas

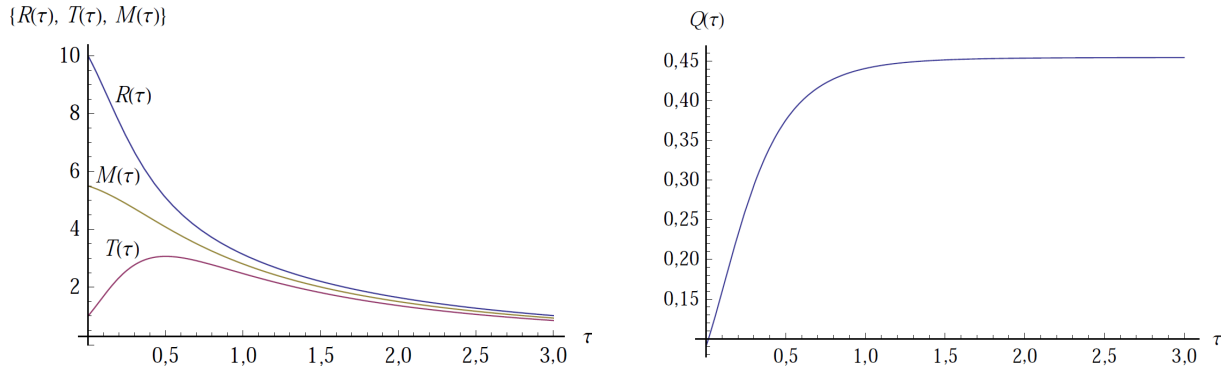


Figura 2.8: Figura da esquerda: Temperaturas rotacional $R(\tau)$, translacional $T(\tau)$ e média $M(\tau)$ em função do tempo. Figura da esquerda: Fator de equipartição $Q(\tau)$ em função do tempo para $\alpha = 0,8$, $\beta = 0,8$ e $\kappa = 2/5$.

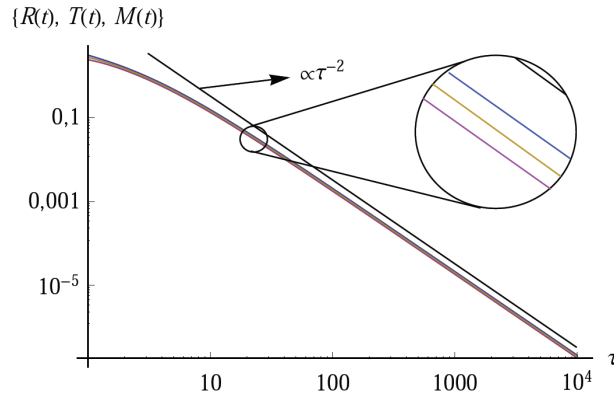


Figura 2.9: Gráfico de $M(\tau)$ em função do tempo para $\alpha = 0,8$, $\beta = 0,8$ e $\kappa = 2/5$.

do gás são:

$$\frac{dT(\tau)}{d\tau} + \frac{4}{3}T(\tau)^{\frac{3}{2}}(1 - \tilde{\alpha}^2) \left(1 + \frac{a_2}{16}\right) = 0, \quad (2.104)$$

$$\frac{dR(\tau)}{d\tau} + \frac{4}{3}T(\tau)^{\frac{1}{2}}R(\tau)(1 - \tilde{\beta}^2) \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) = 0. \quad (2.105)$$

Neste caso, o decaimento das temperaturas será semelhante ao da figura (2.8), mas a diferença é que não haverá trocas de energia entre os modos de rotação e translação e as temperaturas irão decair de uma forma independente, não influenciando o comportamento da outra, como pode ser visto na figura (2.10).

2.7.6 Equipartição da energia

Como foi visto nos casos anteriores, não é comum a ocorrência de equipartição de energia, mas pode ser mostrado que existe uma equação que fornece valores de α , β e

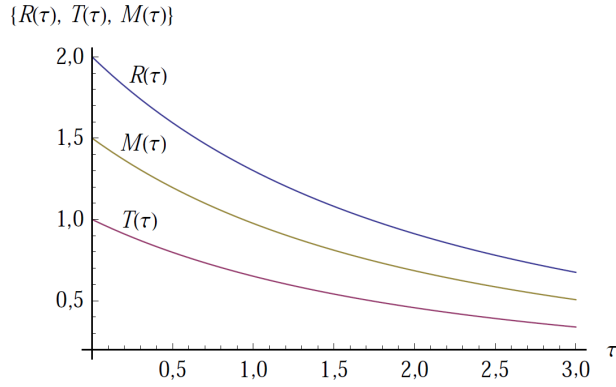


Figura 2.10: Gráfico de $T(\tau)$, $R(\tau)$ e $M(\tau)$ em função do tempo para $\alpha = 0,8$, $\beta = 0,8$ e $\kappa = 0$.

κ , para os quais ocorre equipartição de energia. Para se obter essa equação, vamos impor que:

- As duas temperaturas são iguais para qualquer tempo ($T^{\text{tr}}(t) = T^{\text{rot}}(t)$).

Consequentemente, as taxas de resfriamento também são iguais ($\zeta^{\text{tr}} = \zeta^{\text{rot}}$). Da condição acima, obtemos as seguintes relações para $\zeta^{\text{tr}(0)}$ e $\zeta^{\text{rot}(0)}$:

$$\zeta_{eq}^{\text{tr}(0)} = \frac{16\chi nd^2}{3\kappa} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \kappa \left[\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right] \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) - \tilde{\beta}^2 \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right\} \quad (2.106)$$

$$\zeta_{eq}^{\text{rot}(0)} = \frac{16\tilde{\beta}\chi nd^2}{3\kappa^2} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \left[\kappa - \tilde{\beta} \right] \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) - \kappa\tilde{\beta} \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) \right\}, \quad (2.107)$$

usando as definições de $\tilde{\alpha}$ e $\tilde{\beta}$ dadas por (2.7), podemos reescrever as equações acima como:

$$\zeta_{eq}^{\text{tr}(0)} = \frac{4\chi nd^2}{3(\kappa + 1)^2} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \left[1 - \alpha^2 + 2\kappa(2 + \beta - \alpha^2) + \kappa^2(2 - \alpha^2 - \beta^2) \right] \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) - \kappa(1 + \beta)^2 \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right\} \quad (2.108)$$

$$\zeta_{eq}^{\text{rot}(0)} = \frac{4\chi nd^2}{3(\kappa + 1)^2} \sqrt{\frac{\pi k T^{\text{tr}}}{m}} \left\{ \left[1 - \beta^2 + 2\kappa(1 + \beta) \right] \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) - \kappa(1 + \beta)^2 \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) \right\}, \quad (2.109)$$

igualando $\zeta_{eq}^{tr(0)}$ com $\zeta_{eq}^{tr(0)}$, obtém-se a seguinte equação:

$$\frac{\alpha^2}{a^2} - \frac{\beta^2}{b^2} = 1, \quad (2.110)$$

onde a e b foram definidos como:

$$\begin{aligned} a &\equiv \sqrt{2 \frac{16\kappa(1+\kappa) + a_2 [2 + \kappa(9 + 8\beta + 3\kappa)]}{(1+\kappa)^2(16 + 3a_2)}}, \\ b &\equiv \sqrt{2 \frac{16\kappa(1+\kappa) + a_2 [2 + \kappa(9 + 8\beta + 3\kappa)]}{(1-\kappa)[16(1+\kappa) + a_2(3\kappa - 1)]}}. \end{aligned} \quad (2.111)$$

Perceba que a e b dependem de α e β , então a equação (2.110) não corresponde a uma hipérbole. A figura (2.11) mostra os valores possíveis de α e β que fornecem a equipartição de energia, onde foram plotados valores para $a_2 = 0$ e para $a_2 \neq 0$. Perceba que para $\kappa = 2/3$ e $\kappa = 2/5$, as curvas para $a_2 = 0$ e $a_2 \neq 0$ se sobrepõem. Para $\kappa = 0$ e $\alpha < 0,5$, verifica-se que existe um grande desvio da curva com $a_2 = 0$ com relação à curva com $a_2 \neq 0$, pois a curva com $a_2 = 0$ fornece bons resultados apenas quando $(\alpha, |\beta|) \approx 1$.

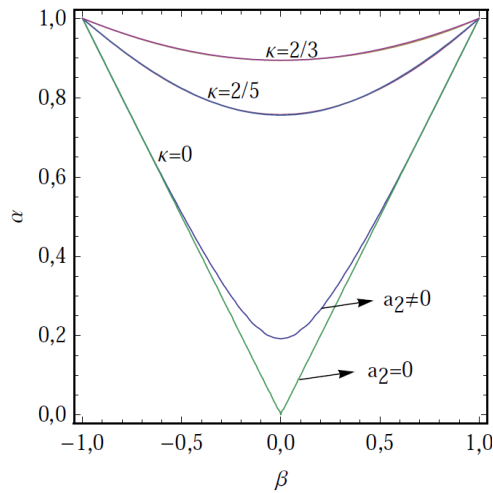


Figura 2.11: Grupo de valores de α e β que fornecem a equipartição de energia para $\kappa = 0, 2/5$ e $2/3$, onde foi considerado $a_2 = 0$ e $a_2 \neq 0$.

2.7.7 Influência dos coeficientes a_2 e b_2 no estado de resfriamento homogêneo

Para analisar o comportamento das temperaturas T e R com α e β para o estado de resfriamento homogêneo, podemos isolar dT/dt e dR/dt nas equações (2.93) e (2.94) e dividir a primeira pela segunda para obter:

$$\frac{dT}{dR} = \frac{\kappa T}{\beta R} \frac{\kappa(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2)(1 + 3a_2/16) - \tilde{\beta}^2(1 - a_2/16)R/T}{(\kappa - \tilde{\beta})(1 - a_2/16) - \kappa\tilde{\beta}(1 + 3a_2/16)T/R} \quad (2.112)$$

Considerando o caso de resfriamento homogêneo, em que a razão $R/T = \theta = \text{constante}$, a equação acima torna-se:

$$\theta^2 \kappa \tilde{\beta}^2 \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) + \theta \left[\tilde{\beta}(\kappa - \tilde{\beta}) \left(1 - \frac{a_2}{16}\right) - \kappa^2(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2) \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right) \right] - \kappa \tilde{\beta}^2 \left(1 + \frac{3a_2}{16}\right) = 0 \quad (2.113)$$

As equações (2.88) e (2.89) em conjunto com (2.113), quando resolvidas, ilustram a dependência de θ , a_2 e b_2 com α e β . Os gráficos (2.12) a (2.15) mostram os resultados obtidos para a razão θ , a_2 e b_2 em função de α para valores representativos do coeficiente de restituição transversal: $\beta = -0,9$ (baixa rugosidade), $\beta = 0$ (rugosidade média) e $\beta = 0,9$ (alta rugosidade). Em todos os casos, considerou-se uma distribuição uniforme de massa para as esferas ($\kappa = 2/5$).

Nas figuras (2.12) a (2.14), vemos que a aproximação maxwelliana fornece excelentes resultados na estimativa da razão $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$, quando comparado com a aproximação obtida por Sonine, principalmente para $\beta = \pm 0,9$, ou $\beta = 0$ com α próximo de 1.

Na figura (2.15), percebe-se um comportamento interessante para os coeficientes a_2 e b_2 . Para esferas com uma alta rugosidade ($\beta = 0,9$), ambos os coeficientes possuem valores relativamente pequenos, mostrando que a aproximação obtida para a função distribuição é muito próxima à maxwelliana, como pode ser visto na figura (2.14). Para o caso $\beta = 0$, o coeficiente a_2 assume valores não desprezíveis, causando alterações nas curvas $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$, como visto em (2.13). Com relação ao coeficiente b_2 , vemos que à medida

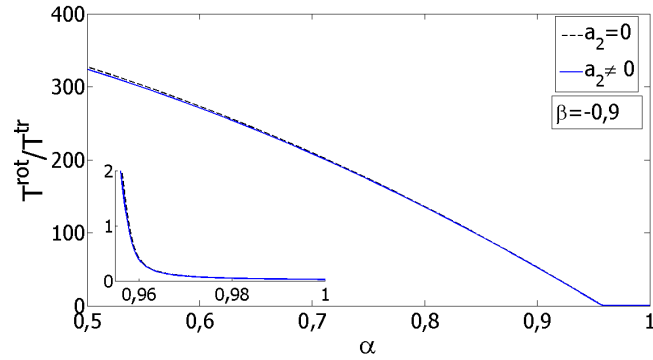


Figura 2.12: Gráfico das razão de temperatura $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$ em função de α , para $\beta = -0,9$. A linha pontilhada e a contínua representam as aproximações pela maxwelliana e por polinômios de Sonine respectivamente. A região $0,955 < \alpha < 1$ é mostrada ampliada.

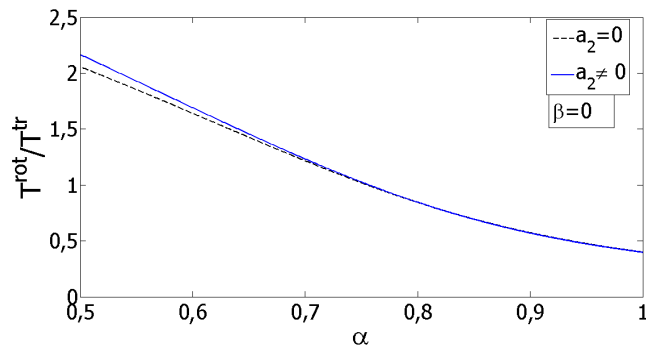


Figura 2.13: Gráfico das razão de temperatura $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$ em função de α , para $\beta = 0$. A linha pontilhada e a contínua representam as aproximações pela maxwelliana e por polinômios de Sonine respectivamente.

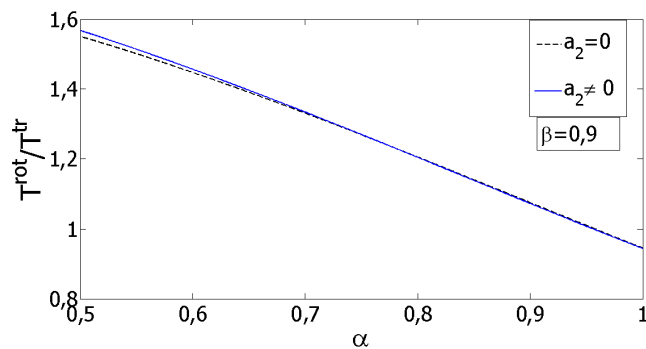


Figura 2.14: Gráfico das razão de temperatura $T^{\text{rot}}/T^{\text{tr}}$ em função de α , para $\beta = 0,9$. A linha pontilhada e a contínua representam as aproximações pela maxwelliana e por polinômios de Sonine respectivamente.

que α vai diminuindo de 0,95 a 0,5, b_2 assume valores até maiores que 1, invalidando a aproximação de b_2 na obtenção das equações (2.88) e (2.89), na qual desprezamos termos

de ordem $\mathcal{O}[(a_2)^2]$ e $\mathcal{O}[(b_2)^2]$. Apesar disso, a curva mostrada em (2.13) não perde completamente sua validade, pois b_2 exerce pouca influência sobre a equação (2.113). Para o caso $\beta = -0,9$ e $\alpha < 0,95$, percebe-se que $|b_2| > 1$ e portanto viola a aproximação usada para sua dedução.

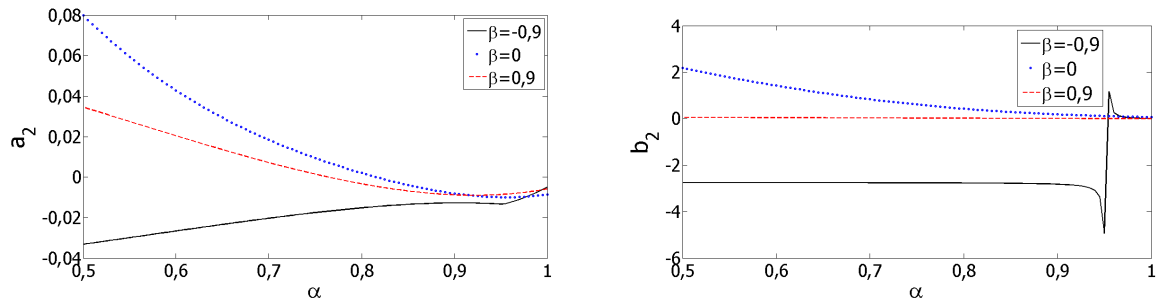


Figura 2.15: Figura da esquerda: a_2 no estado de resfriamento homogêneo em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$. Figura da direita: b_2 no estado de resfriamento homogêneo em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$.

Coeficientes de transporte

3.1 Equações de balanço

Neste capítulo, as definições de densidade de número de partícula $n(\mathbf{x}, t)$ e velocidade hidrodinâmica $v_i(\mathbf{x}, t)$ continuam as mesmas definidas no capítulo 2, mas agora não é feita a distinção entre temperatura translacional e rotacional e portanto considera-se apenas a temperatura média T do gás, dada por

$$T = \frac{1}{3kn} \int \left(\frac{mC^2}{2} + \frac{I\Omega^2}{2} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (3.1)$$

As equações de balanço podem ser obtidas da equação de transporte (2.43), escolhendo determinados valores de ψ e obter:

◇ Balanço do número de partículas ($\psi = 1$):

$$\mathcal{D}n + n \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.2)$$

◇ Balanço da velocidade hidrodinâmica ($\psi = mc_i$):

$$\mathcal{D}v_i + \frac{1}{mn} \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad (3.3)$$

◇ Balanço de temperatura ($\psi = mC^2/2 + I\Omega^2/2$):

$$\mathcal{D}T + \frac{1}{3kn} \left[\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + p_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] + T\zeta = 0, \quad (3.4)$$

onde q_i é o fluxo de calor total definido como:

$$q_i = \int \left(\frac{mC^2}{2} + \frac{I\Omega^2}{2} \right) C_i f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \mathbf{w}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{w} \quad (3.5)$$

e ζ é a taxa de resfriamento, dada por:

$$\zeta = -\frac{d^2}{12nkT} \int \left[m(C_1'^2 + C'^2 - C_1^2 - C^2) + I(\Omega_1'^2 + \Omega'^2 - \Omega_1^2 - \Omega^2) \right] f f_1(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \quad (3.6)$$

3.2 Equações integrais

Para calcular os coeficientes de transporte de um gás granular, vamos usar novamente o método de Chapman-Enskog para a expandir a função de distribuição na forma (2.65), e também usar a expansão (2.77) para as derivadas materiais e obter aproximações para as equações de balanço, equação de Boltzmann e taxa de resfriamento. Substituindo a expansão (2.65) nas definições do tensor pressão (2.51) e fluxo de calor (3.5), temos:

$$p_{ij} = \int C_i C_j \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r f^{(r)} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = p\delta_{ij} + \sum_{r=1}^{\infty} \lambda^r p_{\langle ij \rangle}^{(r)}, \quad (3.7)$$

$$q_i = \int \left(\frac{mC^2}{2} + \frac{I\Omega^2}{2} \right) C_i \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r f^{(r)} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \sum_{r=1}^{\infty} \lambda^r q_i^{(r)}. \quad (3.8)$$

As aproximações de ordem zero e de ordem um para a taxa de resfriamento (3.6) são respectivamente

$$\zeta^{(0)} = -\frac{d^2}{12nkT} \int \left[m(C_1'^2 + C'^2 - C_1^2 - C^2) + I(\Omega_1'^2 + \Omega'^2 - \Omega_1^2 - \Omega^2) \right] f^{(0)} f_1^{(0)}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma \quad (3.9)$$

e

$$\zeta^{(1)} = -\frac{d^2}{12nkT} \int \left[m(C_1'^2 + C'^2 - C_1^2 - C^2) + I(\Omega_1'^2 + \Omega'^2 - \Omega_1^2 - \Omega^2) \right] \times (f^{(0)} f_1^{(1)} + f^{(1)} f_1^{(0)}) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \quad (3.10)$$

Usando as expansões (2.65), (2.77), (3.7) e (3.8), nas equações de balanço (3.2) a (3.4), e coletando termos de mesma ordem, obtemos as aproximações de ordem zero

$$\mathcal{D}^{(0)}n = 0, \quad \mathcal{D}^{(0)}v_i = 0, \quad \mathcal{D}^{(0)}T = -T\zeta^{(0)}. \quad (3.11)$$

e primeira ordem

$$\mathcal{D}^{(1)}n = -n \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad \mathcal{D}^{(1)}v_i = -\frac{1}{\rho} \left(nk \frac{\partial T}{\partial x_i} + kT \frac{\partial n}{\partial x_i} \right), \quad \mathcal{D}^{(1)}T = -T\zeta^{(1)} - \frac{T}{3} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (3.12)$$

e

$$\mathcal{D}^{(0)}f^{(0)} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} \mathcal{D}^{(0)}n + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_i} \mathcal{D}^{(0)}v_i + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} \mathcal{D}^{(0)}T = -T\zeta^{(0)} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T}. \quad (3.13)$$

Na segunda relação da equação (3.12) foi usado que $p = nkT$.

Usando novamente as expansões (2.65), mas agora na equação (2.76), obtemos as equações integrais para $f^{(0)}$ e $f^{(1)}$:

$$\mathcal{D}^{(0)}f^{(0)} = \mathcal{Q}(f_1^{(0)}, f^{(0)}), \quad (3.14)$$

$$\mathcal{D}^{(0)}f^{(1)} + \mathcal{D}^{(1)}f^{(0)} + C_i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_i} = \mathcal{Q}(f_1^{(0)}, f^{(1)}) + \mathcal{Q}(f_1^{(1)}, f^{(0)}). \quad (3.15)$$

3.3 A função de distribuição $f^{(0)}$

Considerando que agora temos apenas uma temperatura, a expansão para $f^{(0)}$ é:

$$f^{(0)} = n \frac{(mI)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi kT)^3} \exp \left(-\frac{mC^2}{2kT} - \frac{I\Omega^2}{2kT} \right) \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n S_{1/2}^{(n)} \left(\frac{mC^2}{2kT} \right) + b_n S_{1/2}^{(n)} \left(\frac{I\Omega^2}{2kT} \right) \right] \right\}. \quad (3.16)$$

Considerando termos até $n = 2$, temos:

$$f^{(0)} = n \frac{(mI)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi kT)^3} \exp \left[-\frac{mC^2}{2kT} - \frac{I\Omega^2}{2kT} \right] \left\{ 1 + a_1 \left(\frac{3}{2} - \frac{mC^2}{2kT} \right) + b_1 \left(\frac{3}{2} - \frac{I\Omega^2}{2kT} \right) \right. \\ \left. + a_2 \left(\frac{15}{8} - \frac{5mC^2}{4kT} + \frac{m^2C^4}{8(kT)^2} \right) + b_2 \left(\frac{15}{8} - \frac{5I\Omega^2}{4kT} + \frac{I^2\Omega^4}{8(kT)^2} \right) \right\}, \quad (3.17)$$

onde a_1 , a_2 , b_1 e b_2 , são coeficientes a serem determinados. Substituindo (3.17) em (3.1), encontramos $a_1 = -b_1$, cujo valor será indicado mais à frente. A primeira aproximação para a taxa de resfriamento pode ser obtida substituindo (3.17) em (3.9) e encontrando:

$$\zeta^{(0)} = \frac{8nd^2}{3} \sqrt{\frac{\pi kT}{m}} \left\{ [\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2] \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) \right. \\ \left. - \frac{2\tilde{\beta}^2}{\kappa} \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) \right\} \quad (3.18)$$

Vamos agora encontrar os coeficientes a_2 e b_2 , e para isso substituímos (3.13) em (2.86) e usando (2.42), obtemos:

$$T\zeta^{(0)} \int \psi \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} d\mathbf{c} d\mathbf{w} = -\frac{1}{2} \int (\psi'_1 + \psi' - \psi_1 - \psi) f_1 f d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma. \quad (3.19)$$

Se fizermos $\psi = 1$, $\psi = mC^2/2$ e $\psi = I\Omega^2/2$ em (3.19), obtemos identidades, mas se escolhermos $\psi = m^2C^4/(2kT)^2$, obtemos o seguinte

$$\frac{5}{4}\kappa \left\{ \kappa(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2 - \tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) \left(1 + \frac{19a_2}{16} \right) + \tilde{\beta}^2 \left(1 + \frac{15a_2}{16} \right) \right\} = \\ \kappa^2 \left[\tilde{\alpha}\tilde{\beta}(\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 1 - \tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) + \tilde{\beta}^3(\tilde{\beta} - 2) + \tilde{\alpha}^3(\tilde{\alpha} - 2) - \frac{11}{8}(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + \frac{19}{8}(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) \right] + \\ \frac{15a_2}{16}\kappa^2 \left[\tilde{\alpha}\tilde{\beta} \left(\tilde{\alpha}\tilde{\beta} - \tilde{\alpha} - \tilde{\beta} + \frac{23}{15} \right) - \frac{269}{120}(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + \frac{357}{120}(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) + \tilde{\alpha}^4 + \tilde{\beta}^4 \right. \\ \left. - 2(\tilde{\alpha}^3 + \tilde{\beta}^3) \right] + \kappa \left[\tilde{\alpha}\tilde{\beta}^2(\tilde{\alpha} - 1) + 2\tilde{\beta}^3(\tilde{\beta} - 1) \right] \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) + \frac{11\tilde{\beta}^2}{8}\kappa \left(1 + \frac{41a_2}{176} \right) + \\ \tilde{\beta}^4 \left(1 + \frac{b_2}{2} - \frac{a_2}{16} \right). \quad (3.20)$$

E escolhendo $\psi = I^2\Omega^4/(2kT)^2$, obtemos

$$\begin{aligned} & -5\kappa^2 \left\{ (\kappa - \tilde{\beta}) \left(1 + b_2 - \frac{a_2}{16} \right) - \kappa\tilde{\beta} \left(1 + b_2 + \frac{3a_2}{16} \right) \right\} \\ = & [4\tilde{\beta}^3 - 8\tilde{\beta}^2\kappa + 9\tilde{\beta}\kappa^2 - 5\kappa^3] \left(1 - \frac{a_2}{16} \right) + \tilde{\beta}\kappa[8\tilde{\beta}^2 - 8\tilde{\beta}\kappa + 5\kappa^2] \left(1 + \frac{3a_2}{16} \right) \\ & + 4\tilde{\beta}^3\kappa^2 \left(1 + \frac{15a_2}{16} \right) + [4\tilde{\beta}^3 - 8\tilde{\beta}^2\kappa + 13\tilde{\beta}\kappa^2 - 10\kappa^3] \frac{b_2}{2}, \quad (3.21) \end{aligned}$$

onde termos de ordem $\mathcal{O}[(a_2)^2]$ e $\mathcal{O}[(b_2)^2]$ foram desprezados. Perceba que estas duas equações são semelhantes às (2.88) e (2.89), mas a diferença é que agora não existe mais a dependência com a temperatura. Resolvendo o sistema de equações acima, encontramos o valor das incógnitas a_2 e b_2 , que não serão mostrados aqui, pois são muito extensos.

3.4 A função de distribuição $f^{(1)}$

Pra a determinação da função $f^{(1)}$, vamos decompor os gradientes que aparecem em (3.15) como

$$\mathcal{D}^{(1)}f^{(0)} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} \mathcal{D}^{(1)}n + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_i} \mathcal{D}^{(1)}v_i + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} \mathcal{D}^{(1)}T, \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_i} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial x_i} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_j} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (3.23)$$

Usando as equações (3.12), (3.17), (3.22) e (3.23) e escrevendo a distribuição maxwelliana como f_M , temos:

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}^{(1)}f^{(0)} + C_i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_i} = \left[\frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} \mathcal{D}^{(1)}n + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial C_i} \mathcal{D}^{(1)}C_i + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{tr}} \mathcal{D}^{(1)}T^{tr} \right] \\ & + C_i \left[\frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial x_i} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial C_j} \frac{\partial C_j}{\partial x_i} + \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T^{tr}} \frac{\partial T^{tr}}{\partial x_i} \right] = f_M \left\{ \left[\frac{mC^2}{6kT} - \frac{I\Omega^2}{6kT} + \frac{\Upsilon_1}{8} \right] \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right. \\ & - C_i \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \left[4 - \frac{mC^2}{2kT} - \frac{I\Omega^2}{2kT} + \Upsilon_2 + \frac{3}{2}\Upsilon_3 \right] - a_2 \left[\frac{5}{2} - \frac{1}{2} \frac{mC^2}{kT} \right] C_i \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \\ & \left. + [1 + \Upsilon_2] \frac{m}{kT} C_i C_j \frac{\partial v_{(i}}{\partial x_{j)}} + \zeta^{(1)} \left[3 - \frac{mC^2}{2kT} - \frac{I\Omega^2}{2kT} + \frac{3}{2}\Upsilon_3 \right] \right\}, \quad (3.24) \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} \Upsilon_1 = a_2 & \left[\frac{35 m C^2}{6 k T} - \frac{7 m^2 C^4}{3 (k T)^2} + \frac{1 m^3 C^6}{6 (k T)^3} - \frac{5 I \Omega^2}{2 k T} \left(1 - \frac{2 m C^2}{3 k T} + \frac{1 m^2 C^4}{15 (k T)^2} \right) \right] \\ & - b_2 \left[\frac{35 I \Omega^2}{6 k T} - \frac{7 I^2 \Omega^4}{3 (k T)^2} + \frac{1 I^3 \Omega^6}{6 (k T)^3} - \frac{5 m C^2}{2 k T} \left(1 - \frac{2 I \Omega^2}{3 k T} + \frac{1 I^2 \Omega^4}{15 (k T)^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\Upsilon_2 = a_2 \left(\frac{35}{8} - \frac{7 m C^2}{4 k T} + \frac{1 m^2 C^4}{8 (k T)^2} \right) + b_2 \left(\frac{15}{8} - \frac{5 I \Omega^2}{4 k T} + \frac{1 I^2 \Omega^4}{8 (k T)^2} \right), \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \Upsilon_3 = a_2 & \left[\frac{15}{4} - \frac{95 m C^2}{24 k T} + \frac{5 m^2 C^4}{6 (k T)^2} - \frac{1 m^3 C^6}{24 (k T)^3} - \frac{5 I \Omega^2}{8 k T} \left(1 - \frac{2 m C^2}{3 k T} + \frac{1 m^2 C^4}{15 (k T)^2} \right) \right] \\ & + b_2 \left[\frac{15}{4} - \frac{95 I \Omega^2}{24 k T} + \frac{5 I^2 \Omega^4}{6 (k T)^2} - \frac{1 I^3 \Omega^6}{24 (k T)^3} - \frac{5 m C^2}{8 k T} \left(1 - \frac{2 I \Omega^2}{3 k T} + \frac{1 I^2 \Omega^4}{15 (k T)^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

e que poderão ser desprezados nos cálculos a seguir.

Vamos supor que função de distribuição $f^{(1)}$ pode ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} f^{(1)} = f_M & \left[\gamma_1 \left(\frac{m C^2}{2 k T} - \frac{I \Omega^2}{2 k T} \right) \sqrt{\frac{m}{2 k T}} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \gamma_2 \sqrt{\left(\frac{m}{2 k T} \right)^3} C_i C_j \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \right. \\ & + \left(\frac{5}{2} - \frac{m C^2}{2 k T} \right) \sqrt{\frac{m}{2 k T}} C_i \left(\gamma_3 \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_4 \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right) + \left(\frac{3}{2} - \frac{I \Omega^2}{2 k T} \right) \sqrt{\frac{m}{2 k T}} C_i \times \\ & \left. \left(\gamma_5 \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_6 \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde $\gamma_1, \dots, \gamma_5$ são coeficientes a serem calculados e $\gamma_1 = a_1$, usada em $f^{(0)}$.

Substituindo as funções $f^{(0)}$ e $f^{(1)}$ dadas por (3.17) e (3.28) nas expressões da aproximação de primeira ordem para o coeficiente de resfriamento (3.10) e desprezando termos em a_2 e b_2 , encontramos:

$$\zeta^{(1)} = -2\sqrt{2\pi}nd^2\gamma_1 \left\{ \tilde{\beta}(\tilde{\beta} - 1) + \tilde{\alpha}(\tilde{\alpha} - 1) + \frac{\tilde{\beta}}{3\kappa} \left(1 + 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right\} \quad (3.29)$$

usando novamente $f^{(0)}$ e $f^{(1)}$ nas equações para o tensor pressão e fluxo de calor dadas

por (3.7) e (3.8), encontramos:

$$p_{ij} = nkT \left[\left(1 + \gamma_1 \sqrt{\frac{m}{2kT}} \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \right) \delta_{ij} + \gamma_2 \sqrt{\frac{m}{2kT}} \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \right], \quad (3.30)$$

$$q_i = -\frac{5}{4}nkT \sqrt{\frac{2kT}{m}} \left[\left(\gamma_3 + \frac{3}{5}\gamma_5 \right) \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \left(\gamma_4 + \frac{3}{5}\gamma_6 \right) \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right]. \quad (3.31)$$

Para determinar os coeficientes $\gamma_1, \dots, \gamma_5$, precisaremos das seguintes quantidades:

$$\mathcal{D}^{(0)} f_M = \left(3 - \frac{mC^2}{2kT} - \frac{I\Omega^2}{2kT} \right) \zeta^{(0)} f_M, \quad (3.32)$$

$$\mathcal{D}^{(0)} \left[\left(\frac{3}{2} - \frac{I\Omega^2}{2kT} \right) \sqrt{\frac{m}{2kT}} C_i \right] = \left(\frac{3}{4} - \frac{3I\Omega^2}{4kT} \right) \sqrt{\frac{m}{2kT}} C_i \zeta^{(0)}, \quad (3.33)$$

$$\mathcal{D}^{(0)} \left[\left(\frac{5}{2} - \frac{mC^2}{2kT} \right) \sqrt{\frac{m}{2kT}} C_i \right] = \left(\frac{5}{4} - \frac{3mC^2}{4kT} \right) \sqrt{\frac{m}{2kT}} C_i \zeta^{(0)}, \quad (3.34)$$

$$\mathcal{D}^{(0)} \left[\left(\frac{mC^2}{2kT} - \frac{I\Omega^2}{2kT} \right) \sqrt{\frac{m}{2kT}} \right] = \left(\frac{3mC^2}{4kT} - \frac{3I\Omega^2}{4kT} \right) \sqrt{\frac{m}{2kT}} \zeta^{(0)}, \quad (3.35)$$

$$\mathcal{D}^{(0)} \left[\sqrt{\left(\frac{m}{2kT} \right)^3} \right] = \frac{3}{2} \sqrt{\left(\frac{m}{2kT} \right)^3} \zeta^{(0)}, \quad (3.36)$$

$$\mathcal{D}^{(0)} \left[\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \right] = -\zeta^{(0)} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right]. \quad (3.37)$$

Vamos agora multiplicar a equação (3.15) por uma função arbitrária $\psi(\mathbf{c}, \mathbf{w})$ e integrar em \mathbf{c}, \mathbf{w} para obter:

$$\begin{aligned} & \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \left(\mathcal{D}^{(0)} f^{(1)} + \mathcal{D}^{(1)} f^{(0)} + C_i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_i} \right) d\mathbf{c} d\mathbf{w} = \\ & \int \psi(\mathbf{c}, \mathbf{w}) \left[\frac{1}{\alpha^2 \beta^2} \left(f_1^{*(0)} f_1^{*(1)} + f_1^{*(1)} f_1^{*(0)} \right) - \left(f_1^{(0)} f_1^{(1)} + f_1^{(1)} f_1^{(0)} \right) \right] d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma \end{aligned} \quad (3.38)$$

usando (2.42), temos:

$$\mathcal{I}_1 = \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_3, \quad (3.39)$$

onde

$$\mathcal{I}_1 = \frac{1}{2} \int \left(f_1^{(0)} f_1^{(1)} + f_1^{(1)} f_1^{(0)} \right) (\psi'_1 + \psi' - \psi_1 - \psi) d^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\Gamma \quad (3.40)$$

$$\mathcal{I}_2 = \int \psi \left(\mathcal{D}^{(1)} f^{(0)} + C_i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x_i} \right) d\mathbf{c} d\mathbf{w} \quad (3.41)$$

e

$$\mathcal{I}_3 = \int \psi \mathcal{D}^{(0)} f^{(1)} d\mathbf{c} d\mathbf{w}. \quad (3.42)$$

Utilizando as funções $f^{(0)}$ e $f^{(1)}$ dadas por (3.17) e (3.28) e as relações (3.32) a (3.37) nas equações (3.40) a (3.42), e escolhendo $\psi = C_k C_l$, podemos encontrar os valores de γ_1 e γ_2 . O traço das equações obtidas (\mathcal{I}'), é:

$$\mathcal{I}_1' = 4\sqrt{2\pi}n^2 d^2 \frac{kT}{m} \gamma_1 \left[\tilde{\alpha}(\tilde{\alpha} - 1) + \tilde{\beta}(\tilde{\beta} - 1) - \frac{\tilde{\beta}^2}{3\kappa} \right] \frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad (3.43)$$

$$\mathcal{I}_2' = \frac{n kT}{3 m} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - n \frac{kT}{m} \zeta^{(1)}, \quad (3.44)$$

$$\mathcal{I}_3' = -\frac{n}{4} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \zeta^{(0)} \gamma_1 \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \quad (3.45)$$

Usando (3.43), (3.44) e (3.45) em conjunto com (3.39), (3.18) e (3.29) e resolvendo a equação resultante para γ_1 , obtemos:

$$\gamma_1 = -\frac{1}{4nd^2\sqrt{2\pi}} \left[\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha}) + \tilde{\beta}(1 - \tilde{\beta}) + \frac{3\tilde{\beta}^2}{\kappa} \right]^{-1}. \quad (3.46)$$

Se coletarmos a parte de traço nulo (\mathcal{I}'') ainda para $\psi = C_k C_l$, obtemos:

$$\mathcal{I}_1'' = \frac{8}{5} \sqrt{2\pi}n^2 d^2 \frac{kT}{m} \gamma_2 \left[(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta})(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - 2) - \frac{\tilde{\beta}^2}{6\kappa} \right] \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}}, \quad (3.47)$$

$$\mathcal{I}_2'' = 2n \frac{kT}{m} \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}}, \quad (3.48)$$

$$\mathcal{I}_3'' = -\frac{n}{4} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \zeta^{(0)} \gamma_2 \frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}}. \quad (3.49)$$

resolvendo para γ_2 , encontramos:

$$\gamma_2 = -\frac{15}{nd^2\sqrt{2\pi}} \left[\tilde{\alpha}(19 - 7\tilde{\alpha} - 12\tilde{\beta}) + \tilde{\beta}(19 - 7\tilde{\beta} - 12\tilde{\alpha}) + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(12\tilde{\beta} + \frac{5\tilde{\beta}}{\kappa} - 5 \right) \right]^{-1}. \quad (3.50)$$

Para $\psi = C^2 C_i$ em (3.40) a (3.42), temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1 = & -\frac{2}{3}\sqrt{2\pi}n^2d^2\left(\frac{kT}{m}\right)^2\left\{\left[33(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) - 41(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + 16\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 7\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa}\right] \times \right. \\ & \left. \left(\gamma_3\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_4\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right) + 10\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa}\left(\gamma_5\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_6\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right)\right\}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$\mathcal{I}_2 = 5n\left(\frac{kT}{m}\right)^2\frac{\partial \ln T}{\partial x_i}, \quad (3.52)$$

$$\mathcal{I}_3 = \frac{5}{4}\frac{kT}{m}\sqrt{\frac{2kT}{m}}\zeta^{(0)}n\left[4\gamma_3\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + (2\gamma_3 + 3\gamma_4)\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right] \quad (3.53)$$

e para $\psi = \Omega^2 C_i$,

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1 = & -\frac{8}{3}\sqrt{2\pi}\frac{n^2}{\kappa^2}\left(\frac{kT}{m}\right)^2\left\{5\tilde{\beta}\left(3\tilde{\beta} + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} - 1\right)\left(\gamma_3\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_4\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right) \right. \\ & \left. + \left[2\tilde{\beta}\left(4\tilde{\alpha} + 6\tilde{\beta} + 3\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} - 7\right) - 6\kappa(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta})\right]\left(\gamma_5\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_6\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right)\right\}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\mathcal{I}_2 = 5n\left(\frac{kT}{m}\right)^2\frac{\partial \ln T}{\partial x_i}, \quad (3.55)$$

$$\mathcal{I}_3 = \frac{3}{\kappa d^2}\frac{kT}{m}\sqrt{\frac{2kT}{m}}\zeta^{(0)}n\left[4\gamma_5\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + (2\gamma_5 + 3\gamma_6)\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right]. \quad (3.56)$$

usando novamente $\mathcal{I}_1 = \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_3$, obtém-se das equações (3.51), (3.52) e (3.53) o seguinte:

$$\begin{aligned} & -\frac{2}{3}\sqrt{2\pi}nd^2\left[\left(33(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) - 41(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + 16\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 7\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa}\right)\left(\gamma_3\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_4\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right) \right. \\ & \quad \left. + 10\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa}\left(\gamma_5\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_6\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right)\right] = 5\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \\ & + \frac{10}{3}\sqrt{2\pi}nd^2\left[\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa}\left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa}\right)\right]\left[4\gamma_3\frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + (2\gamma_3 + 3\gamma_4)\frac{\partial \ln n}{\partial x_i}\right] \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \left\{ \frac{2}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \gamma_3 \left[20 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right) + \right. \right. \\
& \left. \left. \left(33(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) - 41(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + 16\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 7\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa} \right) \right] + \frac{20}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa} \gamma_5 + 5 \right\} \\
& + \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \left\{ \frac{20}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \gamma_3 \left[\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right] + \right. \\
& \quad \left. \frac{2}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \gamma_4 \left[15 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \left(33(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) - 41(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + 16\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 7\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa} \right) \right] + \frac{20}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa} \gamma_6 \right\} = 0 \quad (3.57)
\end{aligned}$$

de (3.54), (3.55) e (3.56), obtemos:

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{3} \sqrt{2\pi} \frac{n d^2}{\kappa} \left\{ 5\tilde{\beta} \left(3\tilde{\beta} - 1 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \left(\gamma_3 \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_4 \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right) \right. \\
& + \left[\tilde{\beta} \left(4\tilde{\alpha} + 6\tilde{\beta} - 7 + 3\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) - 6\kappa(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) \right] \left(\gamma_5 \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \gamma_6 \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right) \left. \right\} = 3 \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + \\
& 2\sqrt{2\pi} n d^2 \left[\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right] \left(4\gamma_5 \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} + (2\gamma_5 + 3\gamma_6) \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \right)
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \left\{ \frac{2}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \gamma_5 \left[\frac{1}{\kappa} \left(2\tilde{\beta} \left(4\tilde{\alpha} + 6\tilde{\beta} - 7 + 3\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) - 6\kappa(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) \right) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + 12 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right) \right] + \right. \\
& \frac{10}{3} \sqrt{2\pi} \frac{n d^2}{\kappa} \gamma_3 \tilde{\beta} \left(3\tilde{\beta} - 1 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) + 3 \left. \right\} + \frac{\partial \ln n}{\partial x_i} \left\{ \frac{2}{3} \sqrt{2\pi} \frac{n d^2}{\kappa} \gamma_4 5\tilde{\beta} \left(3\tilde{\beta} - 1 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) + \right. \\
& \quad 4\sqrt{2\pi} n d^2 \gamma_5 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right) + \\
& 6\sqrt{2\pi} n d^2 \gamma_6 \left[\frac{1}{9\kappa} \left(2\tilde{\beta} \left(4\tilde{\alpha} + 6\tilde{\beta} - 7 + 3\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) - 6\kappa(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) \right) + \tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \right. \\
& \quad \left. \left. \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right] \right\} = 0 \quad (3.58)
\end{aligned}$$

como $\partial \ln T / \partial x_i$ e $\partial \ln n / \partial x_i$ são linearmente independentes, seus coeficientes devem ser nulos, desta forma, obtém-se das equações (3.57) e (3.58) o seguinte sistema de equações:

$$\gamma_3 x_1 + \gamma_5 x_2 = -1 \quad (3.59)$$

$$\gamma_3 x_3 + \gamma_4 x_4 + \gamma_6 x_5 = 0 \quad (3.60)$$

$$\gamma_3 x_6 + \gamma_5 x_7 = -1 \quad (3.61)$$

$$\gamma_4 x_8 + \gamma_5 x_9 + \gamma_6 x_{10} = 0 \quad (3.62)$$

onde x_1, x_2, \dots, x_{10} foram definidos como:

$$x_1 = \frac{2}{15} \sqrt{2\pi} n d^2 \left[33(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) - 41(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + 16\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 7\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa} + 20 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) \right) \right], \quad (3.63)$$

$$x_2 = \frac{20}{15} \sqrt{2\pi} n d^2 \frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa}, \quad (3.64)$$

$$x_3 = \frac{10}{3} \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right) + \frac{10}{3} \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right), \quad (3.65)$$

$$x_4 = 5 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right) + \frac{1}{3} \left(33(\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\beta}^2) - 41(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) + 16\tilde{\alpha}\tilde{\beta} + 7\frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa} \right) + \frac{5\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right), \quad (3.66)$$

$$x_5 = \frac{10}{3} \frac{\tilde{\beta}^2}{\kappa}, \quad (3.67)$$

$$x_6 = \frac{10}{9} \sqrt{2\pi} \frac{n d^2}{\kappa} \tilde{\beta} \left(3\tilde{\beta} - 1 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right), \quad (3.68)$$

$$x_7 = \frac{2}{3} \sqrt{2\pi} n d^2 \left[\frac{2\tilde{\beta}}{3\kappa} \left(4\tilde{\alpha} + 6\tilde{\beta} - 7 + 3\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) + 4 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right) + \frac{4\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) - 2(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}) \right], \quad (3.69)$$

$$x_8 = \frac{5\tilde{\beta}}{3\kappa} \left(3\tilde{\beta} - 1 + \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right), \quad (3.70)$$

$$x_9 = 2 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right) + \frac{2\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right), \quad (3.71)$$

$$x_{10} = \frac{2\tilde{\beta}}{3\kappa} \left(4\tilde{\alpha} + 6\tilde{\beta} - 7 + 3\frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) + 3 \left(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}^2 - \tilde{\beta}^2 \right) + \frac{3\tilde{\beta}}{\kappa} \left(1 - 2\tilde{\beta} - \frac{\tilde{\beta}}{\kappa} \right) - 2(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}). \quad (3.72)$$

A partir de equações (3.59) e (3.61), obtemos os valores para γ_3 e γ_5 :

$$\gamma_3 = \frac{x_2 - x_7}{x_1x_7 - x_2x_6}, \quad \gamma_5 = \frac{x_6 - x_1}{x_1x_7 - x_2x_6}. \quad (3.73)$$

Substituindo γ_3 e γ_5 em (3.60) e (3.62) e resolvendo o sistema de equações resultante, obtemos γ_4 e γ_6 :

$$\gamma_4 = \frac{(x_6 - x_1)x_5x_9 + (x_7 - x_2)x_3x_{10}}{(x_1x_7 - x_2x_6)(x_4x_{10} - x_5x_8)}, \quad \gamma_6 = \frac{(x_2 - x_7)x_3x_8 + (x_1 - x_6)x_4x_9}{(x_1x_7 - x_2x_6)(x_4x_{10} - x_5x_8)}. \quad (3.74)$$

3.5 Coeficientes de transporte

Após os coeficientes $\gamma_1, \dots, \gamma_6$ serem conhecidos, pode-se calcular os coeficientes de transporte de um gás granular na forma mostrada a seguir.

3.5.1 Condutividade térmica

O fluxo de calor q_i pode ser escrito como:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sigma \frac{\partial n}{\partial x_i} \quad (3.75)$$

onde λ e σ são as condutividades térmicas do gás, que estão relacionadas à condução de calor por condução e convecção respectivamente. Comparando a equação acima com a equação (3.31), encontramos:

$$\boxed{\lambda = \frac{5}{4}nk\sqrt{\frac{2kT}{m}} \left(\gamma_3 + \frac{3}{5}\gamma_5 \right)} \quad (3.76)$$

e

$$\sigma = \frac{5}{4}kT\sqrt{\frac{2kT}{m}}\left(\gamma_4 + \frac{3}{5}\gamma_6\right) \quad (3.77)$$

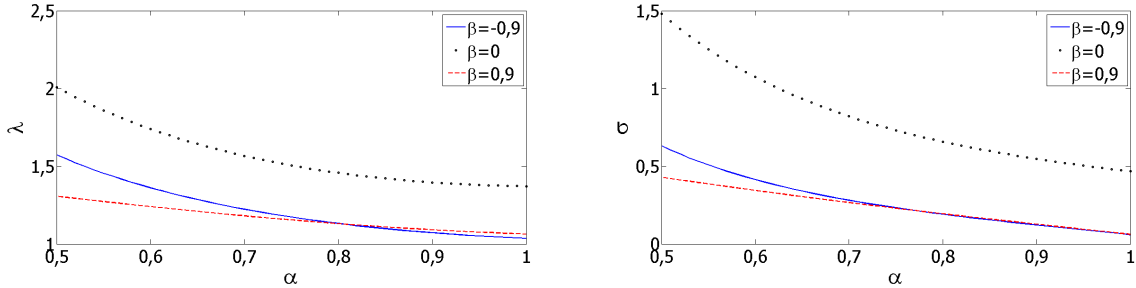


Figura 3.1: Condutividade térmica λ (figura da esquerda) e σ (figura da direita) em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$ e $\kappa = 2/5$.

A dependência de λ e σ com α para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$, pode ser vista na figura (3.1). Percebe-se que para $\beta = \pm 0,9$, tanto λ , quanto σ não diferem muito para valores de α não muito distantes de 1. Já para $\beta = 0$, a condutividade térmica é maior que nos casos anteriores.

3.5.2 Viscosidade volumétrica e de cisalhamento

O tensor pressão é:

$$p_{ij} = p_{\langle ij \rangle} + \frac{1}{3}p_{rr}\delta_{ij} \quad (3.78)$$

usando a pressão dinâmica p^* , podemos escrever $p_{rr}/3 = p^* + nkT$, então

$$p_{ij} = p_{\langle ij \rangle} + (p^* + nkT)\delta_{ij}. \quad (3.79)$$

Mas sabe-se que

$$p_{\langle ij \rangle} = -2\mu\frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} \quad e \quad p^* = -\eta\frac{\partial v_i}{\partial x_i}, \quad (3.80)$$

assim temos:

$$p_{ij} = -2\mu\frac{\partial v_{\langle i}}{\partial x_{j \rangle}} + \left(nkT - \eta\frac{\partial v_r}{\partial x_r}\right)\delta_{ij} \quad (3.81)$$

onde η e μ são as viscosidades volumétrica e de cisalhamento.

Comparando a equação (3.81) com (3.30), encontramos:

$$\mu = -\frac{n}{2} \sqrt{\frac{mkT}{2}} \gamma_2 \quad (3.82)$$

e

$$\eta = -n \sqrt{\frac{mkT}{2}} \gamma_1. \quad (3.83)$$

A figura (3.2) mostra a dependência da viscosidade volumétrica e de cisalhamento em função de α para três valores de β . Vemos que a viscosidade volumétrica η , assume valores muito maiores se as esferas possuem baixa rugosidade ($\beta = -0,9$), pois sabe-se que $\eta \rightarrow \infty$ quando $\beta \rightarrow -1$, ou de uma forma equivalente, $\eta \rightarrow \infty$ se $\kappa \rightarrow 0$, como pode ser visto em [24].

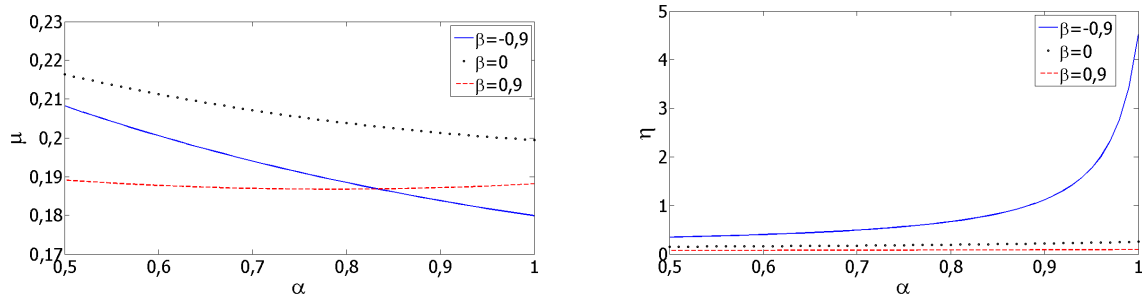


Figura 3.2: Viscosidade de cisalhamento μ (figura da esquerda) e viscosidade volumétrica η (figura da direita) em função de α , para $\beta = -0,9$, $\beta = 0$ e $\beta = 0,9$ e $\kappa = 2/5$.

3.5.3 Esferas elásticas e rugosas

Para o caso particular em que as colisões são elásticas e as esferas rugosas, $\alpha = \beta = 1$, as equações (3.76), (3.77), (3.82) e (3.83) tornam-se

$$\lambda = \frac{9k}{16d^2} \sqrt{\frac{kT}{\pi m}} \frac{(37 + 151\kappa + 50\kappa^2)(1 + \kappa)^2}{(12 + 75\kappa + 101\kappa^2 + 102\kappa^3)}, \quad \sigma = 0, \quad (3.84)$$

$$\mu = \frac{15}{8} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \frac{(1 + \kappa)^2}{d^2(6 + 13\kappa)} \quad e \quad \eta = \frac{1}{32} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \frac{(1 + \kappa)^2}{\kappa} \quad (3.85)$$

em concordância com os valores encontrados por Pidduck [25].

Conclusões

Percebeu-se que a rugosidade e o momento de inércia das esferas exercem forte influência sobre a troca entre energia rotacional e translacional, pois apenas nos casos em que consideramos esferas lisas, ou $\kappa \approx 0$ as duas temperaturas T e R se comportam de uma forma independente uma da outra.

Verifica-se que na maioria dos casos, a equipartição da energia é violada. A não violação ocorre apenas quando os coeficientes de restituição e o momento de inércia assumem determinados valores específicos, dados pela equação (2.110).

No estado de resfriamento homogêneo, com as colisões inelásticas, ambas as temperaturas rotacional e translacional, decrescem seguindo a lei de Haff, mas com taxas de decaimento diferentes e que dependem dos coeficientes de restituição normal e transversal.

É importante perceber que os cálculos feitos neste trabalho, apesar de fornecerem uma boa idéia do que ocorre, são apenas aproximações, pois algumas suposições feitas não são verdadeiras, como: 1) As interações entre partículas foram consideradas como sendo de núcleo rígido, sendo que um modelo mais realista pode ser muito mais complexo; 2) Os coeficientes de restituição foram considerados constantes. Modelos mais complexos, levam em consideração a dependência destes coeficientes com a velocidade relativa de impacto. 3) As aproximações obtidas para as equações em que se considera $a_2 = b_2 = 0$

fornece uma boa estimativa do comportamento do gás, mas são válidas na maioria das vezes, apenas para $(\alpha, |\beta| \approx 1)$. Quando desejamos analisar o gás para casos em que os coeficientes se distanciam da unidade, deve-se considerar mais termos na expansão (2.82) de Sonine de modo a obter uma melhor aproximação para as equações do gás, aumentando o conjunto de valores de α e β que podem ser analisados.

Com relação aos coeficientes de transporte, obteve-se valores (3.76), (3.77), (3.82) e (3.83) para as condutividades térmicas, viscosidades de cisalhamento e volumétrica, respectivamente, em função dos parâmetros α , β e κ .

Algumas sugestões para trabalhos futuros são:

- O desenvolvimento de um modelo com o produto das velocidades linear e angular na expansão de Sonine para a função de distribuição de ordem zero.
- A consideração de um coeficiente de restituição normal dependente da velocidade relativa das partículas.
- O estudo do resfriamento do gás nos casos em que a densidade não é homogênea.



Referências Bibliográficas

- [1] N. V. Brilliantov, T Pöschel, “Kinetic Theory of Granular Gases”. *Oxford University Press*, 2004.
- [2] N. Brilliantov, C. Salueña, T. Schwager and T. Pöschel, “Transient Structures in a Granular Gas”. *Phys. Rev. Lett.*, Vol 93, 134301 (2004).
- [3] M. Huthmann and A. Zippelius, “Dynamics of inelastically colliding rough spheres: Relaxation of translational and rotational energy”. *Phys. Rev. E*, Vol 56, 56 (1997).
- [4] S. Luding, M. Huthmann, S. McNamara and A. Zippelius, “Homogeneous cooling of rough, dissipative particles: Theory and simulations”. *Phys. Rev. E*, Vol 58, 3413 (1998).
- [5] S. McNamara and S. Luding, “Energy nonequipartition in systems of inelastic , rough spheres”. *Phys. Rev. E*, Vol 58, 2247 (1998).
- [6] V. Garzó and J. W. Dufty, “Homogeneous cooling state for a granular mixture”. *Phys. Rev. E*, Vol 60, 5706 (1999).
- [7] J. M. Montanero and V. Garzó, “Monte Carlo simulation of the homogeneous cooling state for a granular mixture”. *Gran. Matt.*, Vol 4, 17 (2002).

-
- [8] A. Barrat and E. Trizac, “Lack of energy equipartition in homogeneous heated binary granular mixtures”. *Gran. Matt.*, Vol 4, 57 (2002).
- [9] S. R. Dahl, C. M. Hrenya, V. Garzó and J. W. Dufty, “Kinetic temperatures for a granular mixture”. *Phys. Rev. E*, Vol 66, 041301 (2002).
- [10] J. T. Jenkins and M. W. Richman, “Kinetic theory for plane flows of a dense gas of identical, rough, inelastic, circular disks”. *Phys. Fluids*, Vol 28, 3485 (1985).
- [11] C. K. K. Lun and S. B. Savage, “A simple kinetic theory for granular flow of rough, inelastic, spherical particles”. *J. Appl. Mech.*, Vol 54, 47 (1987).
- [12] C. S. Campbell, “The stress tensor for simple shear flows of a granular material”. *J. Fluid Mech.*, Vol 203, 449 (1989).
- [13] C. K. K. Lun, “Kinetic theory for granular flow of dense, slightly inelastic, slightly rough spheres”. *J. Fluid Mech.*, Vol 233, 539 (1991).
- [14] C. K. K. Lun and A. A. Bent, “Numerical simulation of inelastic frictional spheres in simple shear flow”. *J. Fluid Mech.*, Vol 258, 335 (1994).
- [15] C. K. K. Lun, “Granular dynamics of inelastic spheres in Couette flow”. *Phys. Fluids*, Vol 8, 2868 (1996).
- [16] P. Zamankhan, H. V. Tafreshi, W. Polashenski, P. Sarkomaa and C. L. Hyndman, “Shear induced diffusive mixing in simulations of dense Couette flow of rough, inelastic hard spheres”. *J. Chem. Phys.*, Vol 109, 4847 (1998).
- [17] J. T. Jenkins and C. Zhang, “Kinetic theory for identical, frictional, nearly elastic spheres”. *Phys. Fluids*, Vol 14, 1228 (2002).
- [18] W. Polashenski, P. Zamankhan, S. Mäkiharju and P. Zamankhan, “Fine structures in sheared granular flows”. *Phys. Rev. E*, Vol 66, 021303 (2002).
- [19] A. Goldshtein and M. Shapiro, “Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 1. General hydrodynamic equations”. *J. Fluid Mech.*, 282, 75 (1995).

-
- [20] A. Zippelius, “Granular gases”. *Physica A*, Vol 369, 143 (2006).
- [21] S. Luding, “Granular materials under vibration: Simulations of rotating spheres”. *Phys. Rev. E*, Vol 52, 4442 (1995).
- [22] I. Goldhirsch, S. H. Noskowitz and O. Bar-Lev, “Nearly Smooth Granular Gases”. *Phys. Rev. Lett.*, Vol 95, 068002 (2005).
- [23] N. V. Brilliantov, T Pöschel, W. T. Kranz and A. Zippelius, “Translations and Rotations Are Correlated in Granular Gases”. *Phys. Rev. Lett*, Vol 98, 128001-1 (2007).
- [24] G. M. Kremer, “Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Process in Gases”. *Springer*, 1ª edição, 2010.
- [25] F. B. Pidduck, “The kinetic theory of a special type of rigid molecule”. *Proc. Roy. Soc. A*, 101, 101-112 (1922).
- [26] A. Santos, G. M. Kremer and V. Garzó, “Energy production rates in fluid mixtures of inelastic rough hard spheres”. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, No. 184, 31 (2010).
- [27] A. Santos, G. M. Kremer and M. Santos, “Sonine approximation for collisional moments of granular gases of inelastic rough spheres”. *Phys. of Fluids*, Vol 23, 030604 (2011).

Relações matemáticas

A.1 Polinômios de Sonine

Considere a equação diferencial:

$$xy''(x) + (m + 1 - x)y'(x) + (n - m)y(x) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Esta é conhecida como equação diferencial associada de Laguerre, cuja solução $y(x)$ é dada pelos polinômios associados de Laguerre de grau $n - m$.

$$y(x) = L_n^{(m)}, \quad m \leq n. \quad (\text{A.2})$$

Os polinômios $L_n^{(m)}(x)$ são escritos como:

$$L_n^{(m)} = \sum_{k=0}^{n-m} (-1)^{k+m} \frac{(n!)^2}{(n-m-k)!(k+m)! k!} x^k. \quad (\text{A.3})$$

Estes polinômios não são ortogonais, mas podemos obter uma relação de ortogonalidade entre dois polinômios, multiplicando pelo fator e^{-x} , assim a relação de ortogonalidade é

dada por:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^m L_n^{(m)}(x) L_p^{(m)}(x) dx = \frac{(n!)^3}{(n-m)!} \delta_{n,p}. \quad (\text{A.4})$$

Os polinômios de Sonine podem ser escritos em termos dos polinômios associados de Laguerre como:

$$S_m^{(n)}(x) = \frac{(-1)^m}{(n+m)!} L_{n+m}^{(n)}(x). \quad (\text{A.5})$$

ou

$$S_m^{(n)}(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(n+m)!}{k!(n-k)!(k+m)!} (-x)^k, \quad (\text{A.6})$$

assim como os polinômios associados de Laguerre, os polinômios de Sonine devem ser multiplicados pelo fator e^{-x} para obedecer a relação de ortogonalidade:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^m S_m^{(n)}(x) S_m^{(p)}(x) dx = \frac{(n+m)!^3}{(n)!} \delta_{n,p}. \quad (\text{A.7})$$

Em teoria cinética, os polinômios de Sonine são utilizados numa forma um pouco diferente, que pode ser obtida fazendo $m = l + 1/2$, assim temos:

$$S_{l+1/2}^{(n)}(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(n+l+3/2)}{k!(n-k)!\Gamma(k+l+3/2)} (-x)^k, \quad (\text{A.8})$$

e a relação de ortogonalidade é:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^m S_{l+1/2}^{(n)}(x) S_{l+1/2}^{(p)}(x) dx = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(n+l+3/2)}{(n)!} \delta_{n,p}. \quad (\text{A.9})$$

Os três primeiros polinômios de Sonine são:

$$S_{l+1/2}^{(0)}(x) = 1 \quad (\text{A.10})$$

$$S_{l+1/2}^{(1)}(x) = l + \frac{3}{2} - x \quad (\text{A.11})$$

$$S_{l+1/2}^{(2)}(x) = \frac{1}{2} \left(l + \frac{5}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - \left(l + \frac{5}{2} \right) x + \frac{1}{2} x^2. \quad (\text{A.12})$$

A.2 Integrais utilizadas em teoria cinética

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{\frac{n+1}{2}}, \quad (\text{A.13})$$

$$\int C_{i_1} C_{i_2} \dots C_{i_N} f_M d\mathbf{c} = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \int C_{i_1} C_{i_2} \dots C_{i_N} e^{-\frac{mC^2}{2kT}} d\mathbf{c}. \quad (\text{A.14})$$

$$\int C_i C_j f_M d\mathbf{c} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \int C^2 f_M d\mathbf{c}. \quad (\text{A.15})$$

$$\int C_i C_j C_k C_l f_M d\mathbf{c} = \frac{1}{15} (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{ij} \delta_{kl}) \int C^4 f_M d\mathbf{c}. \quad (\text{A.16})$$

$$\int (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi g^n}{(n+1)}, \quad (\text{A.17})$$

$$\int k_i (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi g^{n-1}}{(n+2)} g_i, \quad (\text{A.18})$$

$$\int k_i k_j (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi g^{n-2}}{(n+1)(n+3)} (g^2 \delta_{ij} + n g_i g_j), \quad (\text{A.19})$$

$$\int k_i k_j k_k (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = \frac{2\pi g^{n-3}}{(n+2)(n+4)} [g^2 (g_i \delta_{jk} + g_j \delta_{ik} + g_k \delta_{ij}) + (n-1) g_i g_j g_k], \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \int k_i k_j k_k k_l (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^n d\mathbf{k} = & \frac{2\pi g^{n-4}}{(n+1)(n+3)(n+5)} [g^4 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \\ & + n g^2 (g_i g_j \delta_{kl} + g_i g_k \delta_{jl} + g_i g_l \delta_{jk} + g_j g_k \delta_{il} + g_j g_l \delta_{ik} + g_k g_l \delta_{ij}) + n(n-2) g_i g_j g_k g_l]. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$