

**Comportamiento crítico en  
gases granulares separados por  
un pistón**

Editor: Editorial de la Universidad de Granada  
Autor: Nagi Khalil Rodríguez  
D.L.: GR 958-2012  
ISBN: 978-84-694-9406-6



COMPORTAMIENTO CRÍTICO EN GASES  
GRANULARES SEPARADOS POR UN PISTÓN

TESIS DOCTORAL

Memoria presentada para optar al grado de doctor por la  
Universidad de Granada

por

Nagi Khalil Rodríguez

Dirigida por

Dr. José Javier Brey Abalo  
Catedrático de Física Teórica de la  
Universidad de Sevilla

Impreso en Sevilla en Junio del año 2011.

Este trabajo ha sido posible gracias a una beca FPI del Ministerio de Ciencia e Innovación (convocatoria del año 2007), a la financiación de los proyectos FIS2005-01398 y FIS2008-01339 y a la colaboración del Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla.

A Don Manuel Morente Quero



# Índice general

|  |           |
|--|-----------|
| <b>1. Introducción</b>   | <b>1</b>  |
| 1.1. Medios granulares: definición y propiedades . . . . .         | 2         |
| 1.1.1. Descripción teórica . . . . .                               | 4         |
| 1.2. El medio granular como un sólido . . . . .                    | 5         |
| 1.3. El medio granular como un fluido . . . . .                    | 9         |
| 1.4. El medio granular como un gas . . . . .                       | 12        |
| 1.4.1. Sobre la existencia de la descripción macroscópica . . .    | 12        |
| 1.4.2. Comportamiento crítico . . . . .                            | 13        |
| <b>2. Flujos granulares rápidos.</b>                               |           |
| <b>Pistón de Rayleigh</b>  | <b>17</b> |
| 2.1. Flujos granulares rápidos . . . . .                           | 18        |
| 2.1.1. Modelo y descripción cinética . . . . .                     | 18        |
| 2.1.2. Hidrodinámica . . . . .                                     | 22        |
| 2.1.3. Estado de enfriamiento homogéneo . . . . .                  | 25        |
| 2.2. El pistón de Rayleigh . . . . .                               | 28        |
| 2.2.1. Problema clásico . . . . .                                  | 28        |
| 2.2.2. Problema inelástico . . . . .                               | 31        |
| <b>3. Condiciones de contorno cinéticas.</b>                       |           |
| <b>Dos gases granulares separados por un pistón adiabático</b>     | <b>35</b> |
| 3.1. Condiciones de contorno cinéticas . . . . .                   | 36        |
| 3.1.1. Pared vibrante . . . . .                                    | 37        |
| 3.1.2. Pistón adiabático móvil . . . . .                           | 39        |
| 3.2. Dos gases granulares separados por un pistón adiabático . . . | 44        |
| 3.2.1. Modelo y descripción . . . . .                              | 44        |
| 3.2.2. Estado simétrico . . . . .                                  | 47        |
| 3.2.3. Estado asimétrico . . . . .                                 | 49        |
| 3.2.4. Dinámica cerca de los estados estacionarios . . . . .       | 52        |
| 3.2.5. Dinámica molecular . . . . .                                | 56        |
| 3.2.6. Discusión . . . . .   | 62        |

|   |            |
|---|------------|
| <b>4. Equilibrio y ruptura de simetría en un gas granular vibrado</b> | <b>65</b>  |
| 4.1. Estados estacionarios . . . . .                                  | 66         |
| 4.2. Gases iguales a ambos lados del pistón . . . . .                 | 69         |
| 4.3. Dinámica cerca de los estados estacionarios . . . . .            | 71         |
| 4.4. Dinámica molecular . . . . .                                     | 75         |
| 4.5. Sobre la bondad de la aproximación uniforme . . . . .            | 80         |
| 4.5.1. Aproximación uniforme . . . . .                                | 81         |
| 4.5.2. Análisis hidrodinámico . . . . .                               | 82         |
| 4.6. Discusión . . . . .  | 85         |
| <b>5. Conclusiones</b>  | <b>87</b>  |
| <b>A. Coeficientes de transporte</b>                                  | <b>91</b>  |
| <b>B. Dinámica molecular de esferas y discos duros</b>                | <b>93</b>  |
| B.1. Descripción del algoritmo . . . . .                              | 94         |
| B.2. Medidas . . . . .  | 99         |
| B.2.1. Promedio sobre trayectorias, espacial y temporal . . . . .     | 102        |
| <b>C. Aproximación gaussiana</b>                                      | <b>105</b> |
| <b>D. Hidrodinámica del sistema con paredes verticales vibrantes</b>  | <b>107</b> |
| D.1. Variable espacial . . . . .                                      | 107        |
| D.2. Condiciones de contorno . . . . .                                | 108        |
| D.3. Solución . . . . .   | 109        |
| <b>Bibliografía</b>   | <b>112</b> |

# Agradecimientos

Agradezco a José Javier Brey Abalo la dirección de esta tesis, y con ello, su dedicación y trabajo. Ni mi aprendizaje ni la elaboración de este trabajo hubieran sido posibles sin su tutela.

Agradezco la participación activa de María José Ruíz Montero en la elaboración de esta tesis, especialmente en las partes relacionadas con la simulación con ordenador.

Agradezco la rica influencia científica y humana recibida de Parco Moreno Franco, Antonio Prados Montaña, Álvaro Domínguez Álvarez, María Isabel García de Soria Lucena, Pablo Maynar Blanco y Antonio Lasanta Becerra.

Agradezco el apoyo necesario de mis padres y hermanas.

Agradezco a mis numerosos compañeros de formación los siempre buenos momentos compartidos.

Sevilla, en verano, 2011



# Capítulo 1

## Introducción

Los medios granulares son sistemas formados por muchas partículas macroscópicas que experimentan colisiones inelásticas [1–3] de manera que la cantidad de energía cinética después de una colisión es menor que antes de ella. La experiencia ha demostrado que, al igual que ocurre con otros sistemas físicos con gran número de grados de libertad, muchos de los estados alcanzables por los medios granulares pueden ser caracterizados por unas pocas magnitudes y son altamente reproducibles. Desde un punto de vista teórico, el modo de identificar estas magnitudes, relacionarlas entre sí y con las propiedades mecánicas de los granos y las características de sus interacciones es mediante la descripción probabilística de la Mecánica Estadística [4].

El carácter inelástico de las colisiones hace de los medios granulares sistemas intrínsecamente fuera del equilibrio termodinámico. No es posible, por tanto, trasladar los resultados de la Mecánica Estadística de equilibrio.

Un paso previo al proceso de descripción, y que delimita el tipo de formulación teórica a utilizar, es el de establecer una clasificación de los medios granulares, que generalmente obedece a criterios observacionales. Porque sucede que los sistemas granulares pueden exhibir comportamientos análogos a los de los sólidos y a los de los fluidos, dependiendo de las condiciones externas a las que estén sometidos.

Se inicia el capítulo dando una definición, no rigurosa, de los medios granulares y describiendo algunas de sus propiedades fundamentales. En las secciones siguientes se analizan los comportamientos tipo sólido y fluido [3]. Finalmente, se presta especial atención a los flujos granulares rápidos o gases granulares [5], análogos a los fluidos moleculares, que serán estudiados, desde una perspectiva general en el siguiente capítulo, y en ciertas circunstancias de especial interés a lo largo del trabajo [6, 7].

## 1.1. Medios granulares: definición y propiedades

Las dunas de arena, las montañas de sal o los montones de cereales son ejemplos cotidianos de sistemas granulares. Todos ellos se caracterizan por poseer una gran cantidad de partículas macroscópicas o granos que experimentan colisiones inelásticas.

El carácter inelástico de las colisiones infiere unas propiedades muy especiales a estos sistemas. De hecho, el comportamiento de los sistemas granulares es tan rico que para algunos científicos constituyen un estado más de la materia, con identidad propia frente a los gases, los fluidos y los sólidos moleculares. Desde el punto de vista de la Ciencia básica, entender la extensa fenomenología de los sistemas granulares ha supuesto y supone un reto para la comunidad científica. Pero, además, existen razones prácticas para estudiarlos, ya que muchos de los fenómenos que ocurren en la Naturaleza y en los procesos industriales involucran a sistemas granulares. Como ejemplo llamativo, baste mencionar que aún no se conoce la forma más apropiada de manipular y almacenar los granos [2].

Una característica fundamental de los sistemas granulares es que las partículas de las que están compuestos son macroscópicas, siendo el tamaño típico de un grano superior a una micra. Esto hace que la temperatura no afecte directamente al movimiento de los granos, como lo hace por ejemplo en el caso de los gases moleculares. Otra consecuencia directa del carácter macroscópico de los granos es que el movimiento de cada grano está regido por las leyes de la Mecánica Clásica. No obstante, en ciertos casos, sí hay una influencia indirecta de la temperatura. Por ejemplo, ésta modifica las propiedades del aire, y por tanto el rozamiento con éste, o las propiedades plásticas de los granos, y por tanto, de las colisiones entre las partículas.

La dinámica de un medio granular queda determinada por las fuerzas que sufren los granos. Éstas pueden clasificarse en cuatro grupos: fuerzas provenientes de interacciones de corto alcance entre los granos, fuerzas de largo alcance entre éstos, fuerzas externas y fuerzas provenientes de la presencia de un medio intersticial. Esta clasificación facilita el estudio y a menudo induce, a su vez, una clasificación dentro de los medios granulares.

Las interacciones de corto alcance suelen ser repulsivas y son las responsables de que al colisionar dos granos parte de la energía se disipe, se transmita de forma irreversible a grados de libertad internos. El carácter no conservativo de las fuerzas suele medirse usando los *coeficientes de restitución normal y tangencial* [8,9]. El primero da cuenta de la pérdida de energía debida a la reducción de la velocidad relativa en la dirección de la colisión, mientras que

el segundo mide la pérdida de energía asociada a la otra componente de la velocidad relativa.

En muchos modelos teóricos, los coeficientes de restitución se suelen tomar constantes, como en el modelo esferas o discos duros lisos que se usa en este trabajo (ver capítulo 2). En la realidad, sin embargo, existe una dependencia de éstos con la velocidad relativa de las partículas justo antes de la colisión así como de las propiedades de los granos [10–12]. Es más, en ocasiones, los coeficientes de restitución dependen de tantos grados de libertad internos de los granos que se ha sugerido que puedan considerarse magnitudes aleatorias [13].

Las fuerzas de largo alcance se deben a que los granos pueden estar cargados o imantados [14,15]. La presencia de estas fuerzas complica la descripción de estos medios y, en general, no ayuda a entender la influencia de la disipación sobre el comportamiento del sistema. Por ello, no serán tenidas en cuenta en este trabajo.

La gravedad es la fuerza externa habitual y juega un papel fundamental en la mayoría de los experimentos que se realizan con medios granulares. También hay que considerar las fuerzas externas que sirven para confinar a los granos, por ejemplo, las que ejercen las paredes de un silo, o para inyectar energía en el sistema a través de paredes vibrantes.

Por último, deben tenerse en cuenta las interacciones entre granos y el medio en el que están inmersos (medio intersticial). Si se trata de aire, el efecto sobre la dinámica del sistema suele ser despreciable. En otros casos, sin embargo, la presencia del medio intersticial es crítica. En algunas circunstancias, se inducen a través del medio intersticial interacciones de largo alcance entre los granos [1, 16] que, nuevamente, complican tremendamente el análisis de estos sistemas. Estas fuerzas tampoco serán tenidas en cuenta en este trabajo.

En resumen, sólo se consideran las colisiones inelásticas de corto alcance entre granos y, eventualmente, la acción de fuerzas externas. Además, las fuerzas de corto alcance serán de tipo repulsiva. Es decir, se analizarán los conocidos como *medios granulares secos no cohesivos*.

¿Es posible inferir las propiedades globales de los sistemas granulares a partir de las propiedades de los granos y de las características de sus interacciones representadas por las correspondientes leyes del movimiento? Dado que los sistemas granulares que se consideran están formados por muchos granos, el marco teórico natural para dar respuesta a esta pregunta es el de la Mecánica Estadística. En lo que resta de capítulo se verá que para muchas circunstancias la respuesta a la pregunta anterior es afirmativa. Pero las propiedades especiales de los medios granulares no permitirá usar las técnicas convencionales de esta disciplina de la Física para la descripción de

estos sistemas, sino que se hará necesaria la adaptación y creación de técnicas nuevas.

### 1.1.1. Descripción teórica

Los medios granulares secos no cohesivos son frecuentemente modelados por un conjunto de partículas que experimentan colisiones de muy corto alcance repulsivas e inelásticas. Estos modelos no solo son necesarios para elaborar la teoría, sino que resultan muy útiles para la simulación mediante ordenador. En el apéndice B se describen dos algoritmos, utilizados en este trabajo, para simular uno de los modelos más utilizados, el modelo de esferas y discos duros lisos inelásticos, que se introduce en el siguiente capítulo.

Los modelos de sistemas físicos admiten distintos niveles de descripción. En el caso particular de un medio granular el interés puede ser determinar el estado de cada uno de los granos, es decir, la posición y velocidad de los mismos como función del tiempo. Esta descripción, que se conoce como *microscópica*, es la más precisa, pero en muchos casos ni es posible ni reporta información relevante.

El hecho de que los sistemas físicos estén constituidos por un gran número de granos sugiere el uso de conceptos probabilísticos. Ahora el interés no sería determinar la evolución de todas las partículas, sino conocer la probabilidad de que cierta propiedad tome cierto valor. Esta descripción suele denominarse *mesoscópica* por estar a caballo entre la descripción microscópica y la *macroscópica*. Esta última involucra sólo un grupo reducido de magnitudes más globales como la densidad de partículas, la energía y el volumen.

Para muchos sistemas físicos, incluyendo los sistemas granulares, es posible encontrar una descripción macroscópica cerrada. En ésta, el sistema obedece ciertas ecuaciones cuyas variables son magnitudes macroscópicas. Demostrar la existencia de esta descripción a partir de la dinámica de los componentes del sistema es un viejo problema, aún abierto, en Mecánica Estadística [17–20]. La experiencia muestra que muchos sistemas granulares admiten una descripción de este tipo. Algunos ejemplos claros aparecerán en este capítulo y a lo largo del trabajo.

La imposibilidad de relacionar de forma exacta la descripción macroscópica con la microscópica lleva a tratar de describir los medios granulares o bien partiendo de una descripción mesoscópica, como se hace en Teoría Cinética para los gases moleculares, o directamente proponiendo ecuaciones generales con coeficientes fenomenológicos.

En este capítulo introductorio, se muestran ejemplos en los que el comportamiento de los sistemas granulares se puede entender adaptando las ideas de la Mecánica Estadística. Sin embargo, ni mucho menos existe una formu-

lación general de los mismos. Esto se debe, por una parte, a que los medios granulares son sistemas intrínsecamente de no equilibrio, como consecuencia del carácter inelástico de sus colisiones; y por otra parte, a que no existe una formulación general de la Mecánica Estadística para sistema fuera del equilibrio termodinámico, ni siquiera en el caso de sistemas moleculares no disipativos. Este hecho hace necesaria una clasificación fenomenológica de los medios granulares que ayude a su descripción teórica.

En los siguientes apartados se hace una breve descripción los comportamientos tipo sólido, líquido y gas que pueden presentar los medios granulares. Para cada uno de ellos se ponen ejemplos en los que ha sido posible su estudio, adaptando y desarrollando ideas de la Mecánica Estadística. Sólo en el último caso es posible desarrollar una teoría, más o menos general, basada en principios fundamentales (ver capítulo 2).

## 1.2. El medio granular como un sólido

Si se deposita sal o arena en un vaso, los granos rápidamente se acomodan a la forma del vaso y permanecen en reposo. Esto es posible porque los coeficientes de restitución, que dan cuenta de la pérdida de energía en las colisiones, se anulan cuando la velocidad relativa de las partículas es cero. La configuración de las partículas en la situación de reposo recuerda a la de un sólido, en el sentido de que la distancia entre ellos no cambia con el tiempo. En la mayoría de los casos, además, los granos no parecen seguir un orden, lo que llevaría a identificar el sistema granular con un sólido amorfo.

Inmediatamente surgen una serie de preguntas que la comunidad científica ha tratado de responder en los últimos años: ¿cuál es la geometría del empaquetamiento?, ¿cuál es la distribución de fuerzas y esfuerzos?, ¿cuáles son las propiedades elásticas y plásticas?, ¿cómo se comporta el sólido al someterlo a vibraciones?, ¿cómo se transmite el sonido?, etc.

Considérese el viejo problema del almacenamiento de los granos en silos, en el que concurren la mayoría de las preguntas anteriores. Se sabe, por ejemplo, que la presión que ejercen los granos en la base del silo no crece linealmente con la altura, como lo hace en un líquido convencional. Esto se debe a que, al ser la distribución de tensiones anisótropa, parte del peso de los granos dentro de un silo está soportado por las paredes. En otras palabras, la presión satura a cierta profundidad, lo que se conoce como efecto Janssen [21,22]. La fuerza sobre las paredes llega a ser tan grande que frecuentemente produce la rotura violenta del silo.

La forma en que se distribuyen las tensiones en el sólido granular parece estar también detrás de la razón por la que se forman huecos en el seno de

un silo. Cuando éstos están cerca de la región donde se extrae el grano, es probable que se formen atascos en el flujo [23, 24]. Este fenómeno representa un gran inconveniente en la manipulación del grano y también aparece en otros contextos como, por ejemplo, explotaciones mineras.

Desde un punto de vista tecnológico, el problema de los silos se aborda tratando de buscar un diseño óptimo. Desde una perspectiva científica, sin embargo, el interés está en tratar de entender el comportamiento del medio granular. Un estudio detallado de las interacciones revela un mallado no uniforme de fuerzas y tensiones que toman valores máximos a lo largo de ciertas direcciones, dividiendo el medio en regiones de poca presión, como se muestra en la figura 1.1 [25]. Experimentalmente y en simulaciones con ordenador [26–28] se observa que la distribución de fuerzas  $P(f)$  viene dada por

$$P(f) = \begin{cases} (f/\langle f \rangle)^{c_1}, & f < \langle f \rangle \\ e^{c_2(1-f/\langle f \rangle)}, & f > \langle f \rangle \end{cases} \quad (1.1)$$

donde  $\langle f \rangle$  es la fuerza media y  $c_1$  y  $c_2$  son dos parámetros. La dependencia exponencial de la ley anterior fue obtenida teóricamente por Edwards y Grinev [29]. Para ello, los autores estudiaron la propagación de tensiones en una pila a través de la distribución de contactos entre granos. La idea fundamental sobre la que se sustenta el estudio fue utilizada por primera vez en el estudio del problema de la compactación, que se considera a continuación.

Un modo de manipular las propiedades de un sólido granular es inyectándole energía, por ejemplo, vibrando alguna de las paredes del recipiente en el que está encerrado. Si el sistema está sometido a la fuerza de la gravedad, se suele inyectar energía moviendo la pared horizontal inferior del mismo. Lo que se observa en muchas circunstancias es que el volumen del sólido granular cambia hasta alcanzar un valor estacionario que depende de la frecuencia y amplitud de los impulsos dados a la pared, de las propiedades de los granos y, eventualmente, de la configuración inicial. En la mayoría de los casos, el sistema relaja lentamente hacia situaciones más compactas, de mayor densidad, como se representa esquemáticamente en la figura 1.2.

Edwards y Oakeshott, entre otros, elaboraron una teoría que describe los estados de máxima compactación [31], al menos cuando los golpes no son muy fuertes. La hipótesis fundamental de la teoría es, en alguna medida, análoga a la que se hace en el colectivo microcanónico: todas las configuraciones con el mismo volumen son equiprobables. El papel que juega la energía en los sistemas aislados en equilibrio, ahora lo juega el volumen. Al pasar del colectivo microcanónico al canónico, surge de forma natural el coeficiente correspondiente a la temperatura que da cuenta del efecto de las vibraciones de la pared.

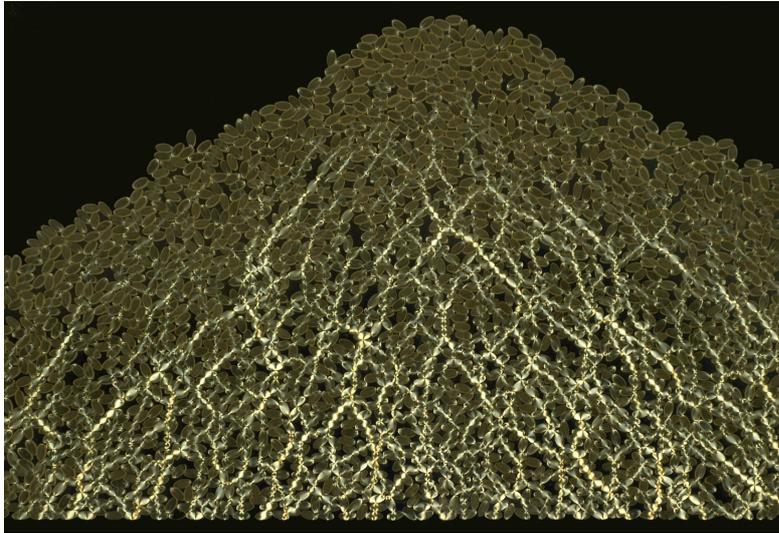


Figura 1.1: Red de fuerzas en un sólido granular visible gracias a la emisión de luz como consecuencia del contacto entre granos (partículas fotoelásticas). Imagen tomada por el grupo de Medios Granulares de la Universidad de Navarra [30].

Brey, Prados y colaboradores [32–35] han elaborado modelos mesoscópicos del proceso de compactación consistentes con la teoría de Edwards. Los golpes o vibraciones de la pared tienen dos efectos sobre el sólido. Uno, en el que se favorece el desplazamiento de los granos y huecos por el aumento del volumen del sistema, y otro, en el que el sistema relaja hasta pararse. Admitiendo que la probabilidad de que se creen y muevan los huecos depende de la densidad de los mismos, los autores, usando un modelo sencillo unidimensional, construyen un proceso estocástico markoviano a partir de las probabilidades de transición entre estados para las dos etapas de evolución del sistema. De esta forma, no sólo se recupera el resultado de Edwards y colaboradores, relacionándose, además, la temperatura efectiva con las probabilidades de transición del proceso, sino que se consigue describir el proceso de relajación del sistema.

El problema de la compactación es un ejemplo claro en el que se pone de manifiesto la bondad de los métodos de la Mecánica Estadística para explicar los resultados experimentales. En particular, adaptando las ideas de la formulación general para sistemas en equilibrio, se consiguen caracterizar los estados estacionarios. Para describir la dinámica del sistema, sin embargo, se hace necesaria una descripción más fina. En este caso y en otros muchos, la

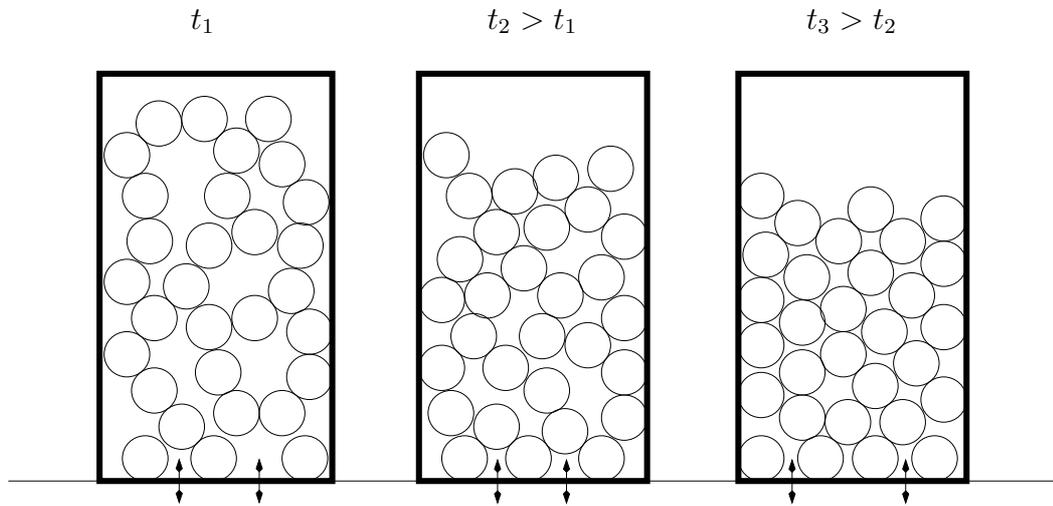


Figura 1.2: Representación esquemática del proceso de compactación de un sistema de discos inelásticos dentro de un recipiente rectangular. Sobre el sistema actúa la fuerza de la gravedad (en dirección vertical). La pared inferior del sistema se está moviendo. Se muestran tres configuraciones para tres tiempos,  $t_1 < t_2 < t_3$ , en las que se observa que el volumen del sistema disminuye.

dificultad no está tanto en describir la dinámica del sistema usando los métodos de los procesos estocásticos, sino modelar correctamente las probabilidad de transición entre estados, lo que con frecuencia no es posible justificar más que con argumentos cualitativos.

Otras muchas propiedades de los sólidos granulares han sido y siguen siendo estudiadas. Casi todos los trabajos nuevos que se publican sobre el tema son de índole experimental, ya que generalmente resulta difícil encontrar ideas generales que permitan el desarrollo de un marco teórico. En particular, hay una comunidad amplia que se dedica a estudiar el comportamiento de los medios granulares cerca de su transición al comportamiento fluido que se considera en la siguiente sección.

### 1.3. El medio granular como un fluido

De la misma forma que un sólido se torna líquido si se incrementa suficientemente su temperatura, un medio granular puede presentar un comportamiento similar al de un líquido si la energía cinética de los granos es suficientemente alta. La transición entre comportamiento sólido y líquido es compleja en el caso de los medios granulares y no tan nítida como la de los sistemas convencionales [36, 37].

Un ejemplo cotidiano en el que se observan los medios granulares en *fase líquida* es el de las avalanchas. Si la pendiente de un montículo de arena supera cierto ángulo crítico, se induce un reajuste de los granos en forma de avalancha a lo largo de la ladera del montículo [38]. El flujo de granos se puede describir como un fluido deslizando por una superficie [36]. El comportamiento crítico de las avalanchas atrajo la atención de la comunidad científica porque, entre otras razones, comparten propiedades con los aludes y terremotos [3].

En ciertas circunstancias, el fluido granular parece comportarse como un fluido molecular convencional. No obstante, en la mayoría de las situaciones, los efectos observados son sorprendentes y novedosos. Como ejemplo de esto último, merece la pena citar el efecto conocido como el *canto de las dunas*. En ciertas condiciones, las avalanchas en algunas dunas producen un sonido intenso de frecuencia característica que puede escucharse a kilómetros de distancias. Aunque existe controversia sobre la explicación del fenómeno, una descripción del flujo en la superficie de la duna que tenga en cuenta efectos no lineales parece ser suficiente para dar una explicación del mismo [39–42].

Otro fenómeno bien conocido en el contexto de los medios granulares es el de las *nueces del Brasil* [43, 44], ver figura 1.3. Si se tiene un sistema granular formado por más de un tipo de granos y se las somete a vibraciones, es altamente probable que se produzca segregación, es decir, que una clase de partículas prefiera una zona del espacio a otras. La explicación de este fenómeno no está relacionada exclusivamente con la densidad relativa de las partículas, como ocurre en el caso de los fluidos convencionales en presencia de una fuerza externa, es decir, no puede ser explicado usando sólo el principio de Arquímedes. Hay que tener en cuenta también otras variables, como las dimensiones relativas de las partículas, el nivel de inelasticidad o la forma de vibrar. En los sistemas diluidos, este fenómeno también aparece y es capturable por la teoría [45–47], como se verá en la siguiente sección.

Los ejemplos mostrados hasta ahora se refieren a fluidos granulares densos, también conocidos como *flujos lentos*. Como ya se dijo, no existe una formulación general de los mismos, como es fácil de entender en base a dos circunstancias independientes. Por una parte, no existe una formulación ge-

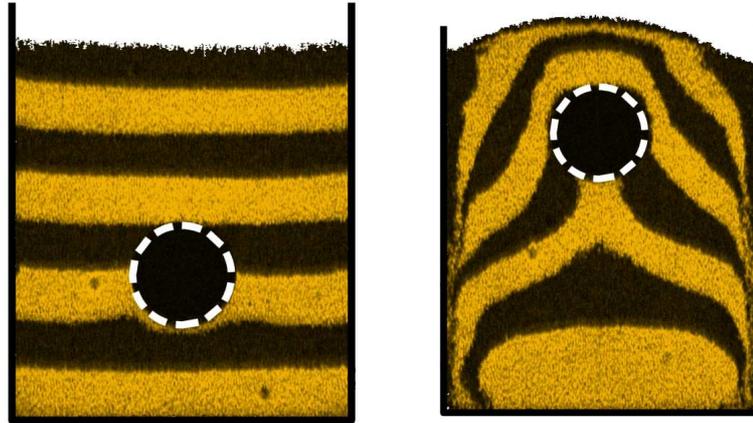


Figura 1.3: Efecto de las nueces del Brasil. En este caso hay dos sistemas granulares (marrón y negro) más una partícula de mayores dimensiones (dentro del círculo blanco). Todo el sistema está dentro de un recipiente abierto en presencia del campo gravitatorio. Tras unas cuantas vibraciones, la partícula asciende y los fluidos se mueven de forma convectiva [48].

neral para líquidos elásticos fuera del equilibrio termodinámico. Por otra, no se sabe qué papel juega la inelasticidad, ni tan siquiera en el caso más sencillo, el de los gases granulares, también llamados *flujos granulares rápidos*.

La dificultad de encontrar un marco descriptivo general de los fluidos granulares no implica necesariamente que no exista una descripción macroscópica, de tipo hidrodinámico, de los mismos. Lo que ocurre es que tal descripción o bien no se sabe derivar a partir de primeros principios, o bien sí se sabe pero no se sabe justificar en el sentido de delimitar su rango de validez. En este sentido, la situación es totalmente análoga a la de los fluidos elásticos.

La inelasticidad, sin embargo, introduce una dificultad adicional. Para que exista una descripción macroscópica, es decir, cerrada para unas pocas magnitudes, debe existir una separación de escalas. Las escalas asociadas a la evolución de las magnitudes irrelevantes o microscópicas deben ser mucho más rápidas que las que caracterizan la evolución de las macroscópicas [17–20]. La existencia de esta separación de escalas se desconoce en el caso de los flujos granulares lentos.

A pesar de todo, existen ejemplos tanto de simulación con ordenador como experimentales en que los perfiles hidrodinámicos de los granos son totalmente análogos a los de los fluidos convencionales. Esto sugiere la existencia de una descripción hidrodinámica, al menos en ciertas circunstancias. Uno de

los experimentos más sorprendentes, en el que se observan estas similitudes, es el de los chorros de arena.

Si se deja caer una “pequeña” bola de acero sobre la superficie de una piscina de agua, unas gotas rebotan y se elevan por encima de la superficie. También se pueden producir estructuras más complicadas como, por ejemplo, la formación de un chorro vertical, etc. Sorprendentemente, si se realiza un experimento análogo con arena, en lugar de agua, se tienen resultados similares [49, 50] (ver la figura 1.4).

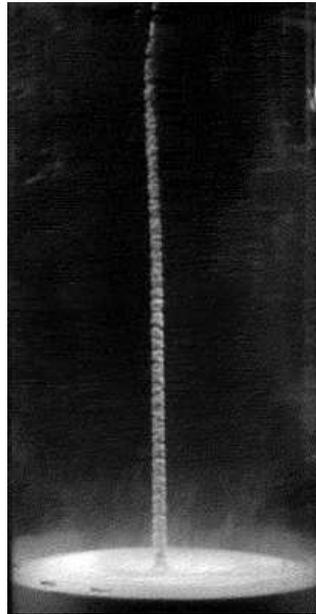


Figura 1.4: Columna de arena que surge tras la caída de una bola pesada. La imagen ha sido tomada por el grupo de medios granulares de la Universidad de Chicago [49, 51].

La formación de estructuras y patrones regulares como el de los chorros es conocido desde hace tiempo, pero aún no se saben explicar de forma satisfactoria. También son relevantes los resultados experimentales y de simulación de sistemas vibrados [1, 52–55]. De la misma forma que el agua presenta la inestabilidad de Rayleigh-Bénard, muchos sistemas granulares vibrados en el seno del campo gravitatoria rompen su homogeneidad espacial formándose vórtices y zonas de distintas densidades [56].

Sin un marco teórico, es difícil analizar la rica fenomenología de los fluidos granulares y lo más importante, evaluar el papel que juega la inelasticidad. Por ello, los estudios teóricos se han centrado en los gases granulares, que se

consideran en la siguiente sección, para los que es posible derivar de forma justificada unas ecuaciones hidrodinámicas que permitan describir muchos de los fenómenos observados en la Naturales y el laboratorio.

## 1.4. El medio granular como un gas

Un gas granular es un fluido granular en el que dominan las interacciones binarias. También se llaman flujos granulares rápidos porque usualmente las partículas tienen más energía que en el caso líquido. El nombre de gases granulares se debe a que estos sistemas presentan analogías con los gases convencionales, sin embargo, el carácter inelástico de las colisiones de los primeros les aleja mucho del comportamiento de los segundos.

En esta sección se ponen algunos ejemplos en los que se observa que la descripción hidrodinámica de los medios granulares, que se deriva en el capítulo 2, ha demostrado ser eficaz. En particular, se presta especial atención al comportamiento crítico de éstos.

En primer lugar, se analizan algunos aspectos fundamentales que se pueden abordar en el contexto de los gases granulares como, por ejemplo, la existencia y limitación de una descripción hidrodinámica.

### 1.4.1. Sobre la existencia de la descripción macroscópica

Los gases granulares son sistemas idóneos para abordar la ya comentada problemática de la existencia de la descripción macroscópica. Esto es posible gracias a la analogía de estos sistemas con los gases moleculares que hace posible el uso de las técnicas de la Teoría Cinética. Como se discute con más profundidad en el capítulo 2, es posible generalizar la ecuación de Boltzmann para situaciones inelásticas y a partir de ella obtener unas ecuaciones de Navier-Stokes (ecuaciones macroscópicas) bajo ciertas aproximaciones. Se consideran a continuación, no obstante, dos ejemplos de situaciones en las que los gases granulares no pueden ser descritos usando las ecuaciones de Navier-Stokes convencionales: el estado de cizalla uniforme y el Estado de Fourier.

El estado de cizalla uniforme de un gas granular es un estado estacionario en el que la densidad y la temperatura son uniformes y el perfil de velocidades crece linealmente en una dirección perpendicular a la que fluye. En este caso, existe una relación lineal entre la componente no diagonal (en dos dimensiones) del tensor de presiones y el módulo del gradiente de velocidades, siendo la constante de proporcionalidad el coeficiente de viscosidad. El valor de este

coeficiente, para este estado, es diferente del que aparece en las ecuaciones de Navier-Stokes [57–59].

El estado de Fourier de un gas granular es también un estado estacionario en el que la presión es uniforme y el flujo de calor es proporcional al gradiente de temperaturas. En este caso se encuentra que el valor de Navier-Stokes para el coeficiente que relaciona el flujo de calor con el gradiente de temperaturas coinciden para inelasticidades bajas con el que se tendría resolviendo directamente la ecuación de Boltzmann inelástica [60, 61]. Sin embargo, las limitaciones de la descripción de Navier-Stokes en la descripción del Estado de Fourier, sí se hacen más patentes cuando se considera el comportamiento de una impureza en dicho estado [62].

El origen de la incapacidad de las ecuaciones de Navier-Stokes para describir ciertos estados estacionarios de un flujo granular rápido hay que buscarlo en el método para obtener dichas ecuaciones, como se discute más tarde en el siguiente capítulo. Basta decir, que este hecho es consecuencia directa del carácter inelástico de las colisiones.

La invalidez de la descripción de Navier-Stokes no implica la de la hidrodinámica. En un trabajo reciente, y para un modelo más sencillo de gas granular, se ha mostrado que tal descripción deja de ser válida a partir de cierto valor de la inelasticidad [63]. Sin embargo, parece que este resultado no es extrapolable a modelos más realistas de gas granular.

### 1.4.2. Comportamiento crítico

Sin duda una de las facetas que más impacta de los medios granulares es la aparición de inestabilidades y el comportamiento del sistema cuando las presenta. Algunas son análogas a las de los gases moleculares mientras que otras son peculiares de los fluidos granulares [64].

La inestabilidad más importante de los gases granulares es, desde un punto de vista conceptual, la del estado de enfriamiento homogéneo (HCS). En el HCS un gas granular aislado es homogéneo y su energía decae monótonamente en el tiempo. Este estado es inestable para ciertas circunstancias, estando la existencia y propiedades de esta inestabilidad bien predichas por la teoría hidrodinámica que se presenta en el siguiente capítulo. A modo de ilustración, en la figura 1.5 se muestra la configuración alcanzada por un gas granular aislado partiendo de una situación homogénea, bajo condiciones en las que el HCS es inestable.

El HCS es muy difícil de alcanzar en laboratorio porque no es posible aislar los granos del exterior y porque tiene una duración muy corta. Por ello, la forma usual de generar un gas granular en el laboratorio es inyectándole energía a través de alguna pared. Existen numerosos ejemplos de comporta-

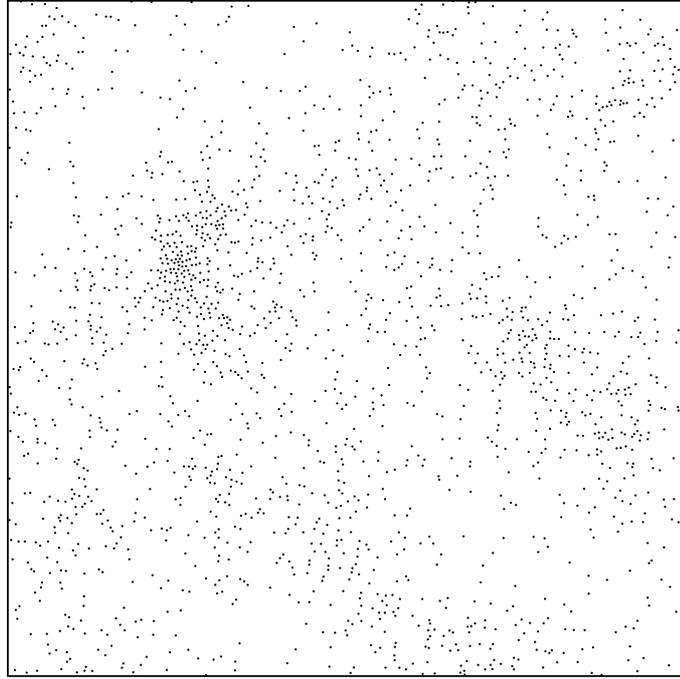


Figura 1.5: Estado inhomogéneo de un gas granular aislado. Resultado de dinámica molecular de discos duros inelástico.

miento crítico de gases granulares vibrados, en ausencia y presencia de campo gravitatorio, todos ellos bien explicados usando la descripción hidrodinámica del capítulo 2.

En el caso más sencillo de sistema vibrado, el gas está encerrado en una caja con una pared vibrante y en ausencia de fuerza externa. En los resultados experimentales y de simulación, se observa en ciertos casos que el sistema alcanza un estado estacionario en el que densidad y temperatura varían a lo largo de la dirección normal a la pared vibrante, para algunos valores de los parámetros. En otros casos, la simetría en la dirección normal al gradiente, puede romperse, apareciendo gradientes en las otras direcciones (ver figura 1.6 y [1]). Este fenómeno ha sido explicado por Brey y colaboradores hace unos años [53] para un modelo de discos duros lisos inelástico.

Existen otros muchos ejemplos en los que es posible explicar la fenomenología de los medios granulares a partir de una formulación macroscópica general de los mismos. Como se verá, esta descripción es válida para el tema de este trabajo: el comportamiento de los gases granulares en contacto con un pistón adiabático móvil. Este problema, conocido como el problema del

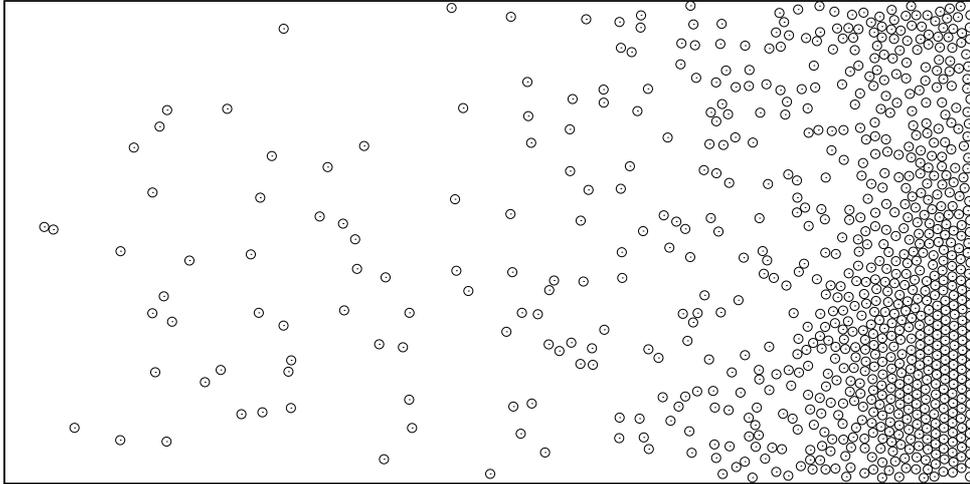


Figura 1.6: Distribución de discos duros lisos inelásticos, en la que existen gradientes de densidad en la dirección horizontal y vertical, obtenida mediante un algoritmo de dinámica molecular conducido por sucesos. El movimiento de la pared vertical izquierda es en forma de diente de sierra siendo el resto de paredes reflectantes (ver capítulo 2). Obsérvese la región sólida cerca de la pared vertical derecha.

pistón de Rayleigh o pistón adiabático en el caso de gases elásticos, resulta especialmente oportuno para estudiar el proceso de relajación en los que interviene la inelasticidad.

En el capítulo 3 se analiza el comportamiento de dos gases granulares iguales en el HCS separados por un pistón adiabático móvil. Para ciertos valores de los parámetros del sistema, se alcanza un estado en el que los volúmenes de los gases son iguales, es decir, en el que se conserva la simetría del problema. Para otros valores, el estado alcanzado rompe la simetría inicial del sistema y los volúmenes son diferentes.

En el capítulo 4 se aborda el problema de dos gases granulares vibrados separados por un pistón adiabático. Al igual que ocurre con el sistema no vibrado, cuando todas las paredes del sistema se vibran de la misma forma, existe una transición de fase de no equilibrio entre estados estacionarios si-

métricos en los que las densidades de los dos gases permanecen iguales y los estados estacionarios asimétricos en los que las densidades son distintas a ambos lados del pistón.

## Capítulo 2

# Flujos granulares rápidos. Pistón de Rayleigh

El estudio teórico de un sistema físico comienza con la elaboración de un modelo. En el caso de los medios granulares [3], en general, y el de los flujos granulares rápidos [65], en particular, el modelo más utilizado es el de un conjunto de esferas o discos duros que colisionan inelásticamente. Con este modelo, es posible explicar a un nivel cualitativo gran parte de la fenomenología exhibida en la Naturaleza y en el laboratorio por los flujos granulares rápidos [3]. La primera parte de este capítulo se dedica a presentar el modelo y los distintos niveles de descripción del mismo, comenzando por una formulación exacta basada en la ecuación de Liouville, pasando por la ecuación de Boltzmann inelástica y terminando con las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes. Se prestará especial atención al estado de enfriamiento homogéneo (*homogeneous cooling state* o HCS) de un gas granular aislado.

En la segunda parte, se describe el problema del pistón de Rayleigh o pistón adiabático, que en su versión clásica consiste en dos sistemas, en general gaseosos, en contacto a través de un pistón adiabático (sin grados internos de libertad) móvil. A pesar de ser un problema muy estudiado, sigue siendo controvertido y objeto de investigaciones, como se aprecia en los numerosos trabajos científicos que se publican sobre el tema. En los últimos años, el problema se está abordando extendiéndolo a cuando existen elementos disipativos en el sistema. Como resultado de la disipación, la posible fenomenología se amplía considerablemente, existiendo aún bastantes aspectos inexplicados. En la parte final de este capítulo, se describen los resultados previos más significativos del pistón de Rayleigh tanto en su versión clásica como inelástica, destacándose aquellos aspectos que serán necesarios para el análisis presentado en los capítulos posteriores.

## 2.1. Flujos granulares rápidos

Si en un medio granular la probabilidad de que más de dos granos estén simultáneamente en contacto entre sí es muy pequeña, se dice que el sistema es un flujo granular rápido o un gas granular [3, 66]. En tal caso, la dinámica de las partículas es análoga a las de un gas molecular: se mueven libremente, o bajo la acción de una fuerza externa, excepto cuando colisionan entre sí. La diferencia fundamental entre ambos sistemas reside en la naturaleza de las colisiones. Mientras que en el caso molecular son elásticas, conservando la energía cinética, en el granular son inelásticas. Las características de los flujos granulares rápidos justifican el uso de un modelo de esferas o discos duros [19, 67] que colisionan de forma inelástica. Se presenta en esta sección, de forma somera, la descripción del modelo partiendo de la ecuación de Liouville de la que se puede obtener, en cierto límite, la ecuación de Boltzmann inelástica y de la que, a su vez, usando el método de Chapman-Enskog, se derivan las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes. Éstas vendrán dadas en el límite de pequeños gradientes hidrodinámicos sobre las escalas adimensionales de longitud y tiempo. Por su importancia conceptual y práctica, se dedica la última parte de la sección a revisar la descripción cinética e hidrodinámica del estado de enfriamiento homogéneo.

### 2.1.1. Modelo y descripción cinética

Se considera un gas granular modelado por  $N$  esferas ( $d = 3$ ) o discos ( $d = 2$ ) duros de diámetro  $\sigma$  y masa  $m$ ; en el primer caso el sistema es tridimensional y en el segundo bidimensional. Cada partícula se mueve según las leyes de la Mecánica Clásica, de forma que su estado de movimiento cambia por la acción de fuerzas externas o por la colisión con otras partículas. Las colisiones son instantáneas, conservan la cantidad de movimiento pero, en general, no conservan la energía cinética. Si  $\mathbf{v}_1$  y  $\mathbf{v}_2$  son las velocidades de dos partículas antes de colisionar, las velocidades tras la colisión vienen dadas por [68, 69]

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_1 &= \mathbf{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ \mathbf{v}'_2 &= \mathbf{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}},\end{aligned}\tag{2.1}$$

donde  $\mathbf{v}_{12} \equiv \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$  es la velocidad relativa,  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  es un vector unitario definido desde el centro de la partícula 2 al centro de la partícula 1 en el momento del contacto (ver figura 2.1) y  $\alpha$  es el coeficiente de restitución normal. Este coeficiente es un número real definido en el intervalo  $0 < \alpha \leq 1$  y determina

el grado de inelasticidad de las colisiones. El límite  $\alpha = 1$  corresponde a colisiones elásticas. La regla de colisión (2.1) disminuye la energía cinética total de las partículas  $E$  y provoca una contracción del espacio de velocidades [68, 69],

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\frac{m}{4}(1 - \alpha^2)(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2, \\ d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2 &= \alpha d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2.\end{aligned}\quad (2.2)$$

Existen modelos más elaborados que tienen en cuenta la dependencia que en los sistemas reales tiene el coeficiente de restitución normal respecto de la velocidad relativa de las partículas involucradas en la colisión [9, 12, 70], la deformación de los granos [12, 70], la fragmentación [71] e incluso pérdidas de energía debidas a la rugosidad de los granos, es decir, debida a la disminución de la velocidad relativa perpendicular a  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  en las colisiones [11, 72]. Sin embargo, a lo largo de esta memoria se considera sólo el modelo simplificado descrito antes.

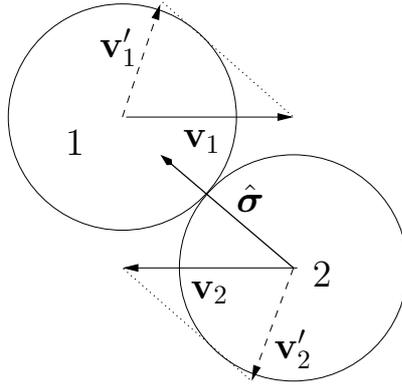


Figura 2.1: Ejemplo de colisión entre dos granos de igual masa y diámetro.  $\mathbf{v}_1$  y  $\mathbf{v}_2$  son las velocidades antes de la colisión,  $\mathbf{v}'_1$  y  $\mathbf{v}'_2$  son las velocidades después de la colisión dadas por (2.1) y  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  es un vector unitario.

Para especificar el estado del sistema es necesario definir las condiciones de contorno. En el caso de un sistema aislado, para minimizar el efecto de las paredes sobre éste se utilizan condiciones de contorno periódicas [73, 74]. En ellas, cuando las partículas salen por una parte del sistema son introducidas en otra sin alterar sus velocidades. En este caso, la energía disminuye monótonamente en el tiempo debido a la inelasticidad de las colisiones. Para que el sistema pueda alcanzar un estado estacionario, hay que inyectar energía en el sistema de forma continua, usualmente a través de alguna pared. El efecto

de una pared puede modelarse de varias formas. Por ejemplo, rebotando las partícula y sumándoles a sus velocidades de alejamiento una cantidad fija (pared con movimiento en diente de sierra [75, 76]) o rebotándolas con una distribución de velocidades prefijada (pared térmica [77, 78]). El caso de una pared que vibra con un perfil en diente de sierra se discute en el capítulo 3 donde, además, se estudia la interacción del gas con un pistón adiabático móvil.

Una vez definido el modelo, caben distintos niveles de descripción desde una perspectiva física, según las escalas espaciotemporales que se consideren. La descripción mecánica es la más fundamental y consiste en la determinación, a partir de las ecuaciones de Newton del movimiento y de unas condiciones iniciales, de las posiciones y velocidades de todas las partículas como función del tiempo. El estado del sistema viene dado por un punto en el espacio de las fases, de dimensión  $N^{2d}$  (el número de coordenadas necesarias para determinar las posiciones y velocidades de las  $N$  partículas). La evolución del sistema corresponde a una curva en dicho espacio. Para esferas y discos duros, la probabilidad de que se produzcan colisiones que involucren a más de dos partículas o que haya más de una colisión simultáneamente es cero, por tanto, la evolución del sistema (la trayectoria en el espacio de las fases) se determina a partir de un punto (condición inicial) teniendo en cuenta la evolución entre colisiones, la ley de colisión (2.1) y el efecto de las condiciones de contorno. Esta descripción es la que se utiliza en los métodos numéricos de simulación en ordenador como, por ejemplo, el de dinámica molecular [74, 79, 80] que se describe someramente en el apéndice B.

A partir del comportamiento mecánico del sistema y una función de probabilidades para los puntos del espacio de las fases en una situación inicial, es posible determinar, al menos formalmente, la probabilidad de encontrar al sistema en cualesquier punto de dicho espacio en un instante dado. La idea es asociar a las trayectorias del espacio de las fases la probabilidad del punto del que parten, de modo que la probabilidad de un punto cualquiera en un tiempo especificado es el de la trayectoria que pasa por él. Esta forma de asociar las probabilidades es viable porque la evolución del sistema es determinista (las trayectorias del espacio de las fases no se cruzan). La descripción probabilística anterior corresponde a una generalización del formalismo clásico basado en la ecuación de Liouville [18, 81, 82].

De la probabilidad de encontrar al sistema con cualquier configuración, puede obtenerse información menos genérica como, por ejemplo, la probabilidad de que  $N_1 \leq N$  partículas cualesquiera estén en el entorno de un punto del subespacio fásico de  $N_1^{2d}$  dimensiones en un tiempo  $t$ ,

$$f_{N_1}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_1}, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N_1}, t) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{N_1} d\mathbf{v}_1 \dots d\mathbf{v}_{N_1}, \quad (2.3)$$

donde  $f_{N_1}$  es la función de distribución  $N_1$ -particular. Se ve fácilmente que la ecuación que obedece  $f_1$  involucra a  $f_2$ , la que obedece  $f_2$  involucra a  $f_3$ , y así sucesivamente. El conjunto de ecuaciones para las funciones de distribución se conoce con el nombre de jerarquía BBGKY inelástica [82] y la primera de ellas coincide, sobre escalas espaciales mucho mayores que el diámetro de las partículas, escalas temporales mayores que el tiempo típico de colisión entre partículas y en el límite de baja densidad [81], con la ecuación de Boltzmann inelástica. Si sobre los granos no actúa ninguna fuerza externa, dicha ecuación tiene la forma

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sigma^{d-1} J[\mathbf{r}, \mathbf{v}, t|f], \quad (2.4)$$

donde  $f$  es la función de distribución de una partícula, normalizada al número total de partículas del sistema, y  $J[\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t|f]$  es el operador de Boltzmann inelástico,

$$J[\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t|f] = \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \times [\alpha^{-2} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1^*, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2^*, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t)]. \quad (2.5)$$

$\Theta$  es la función escalón de Heaviside,  $d\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  es el elemento de ángulo sólido en la dirección de  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  y

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1^* &= \mathbf{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \\ \mathbf{v}_2^* &= \mathbf{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

son las velocidades precolisionales, aquéllas que dan lugar tras la colisión a  $\mathbf{v}_1$  y  $\mathbf{v}_2$ .

El primer miembro de la ecuación (2.4) da cuenta de la variación de la función de distribución como consecuencia del movimiento libre de las partículas. Todo el efecto de las colisiones sobre la función de distribución está incluido en el operador de Boltzmann (2.5). Si la evolución entre colisiones fuera diferente y/o existieran mecanismos colisionales diferentes, es posible modificar la ecuación de Boltzmann convenientemente. De hecho, descripciones basadas en esta ecuación o similares no sólo aparecen en Física sino también en Economía [83], Biología [84] y otras disciplinas. En el caso de los sistemas moleculares y granulares, las aproximaciones y limitaciones de la ecuación de Boltzmann están claras [85], pero en otras circunstancias no siempre lo están.

El carácter no lineal del operador de Boltzmann hace que la ecuación (2.4) sea muy difícil de resolver, en general. Por ello, para obtener información de

la función de distribución se suele proceder de dos formas diferentes; o bien simplificar el operador de Boltzmann, obteniéndose otras ecuaciones cinéticas como la de Boltzmann linealizada [86–88], modelos cinéticos [63, 68, 89, 90], etc; o recurrir a métodos perturbativos para obtener soluciones aproximadas, caso de métodos que usan desarrollos en bases de funciones [60, 62, 69], método de Hilbert [67], de Chapman-Enskog [68], etc. El último de ellos, que se introduce en la siguiente sección, proporciona una descripción hidrodinámica cerrada de los medios granulares.

La ecuación de Boltzmann para esferas o discos elásticos se obtiene de (2.4) haciendo  $\alpha = 1$  en el operador de colisión (2.5). Sin embargo, esto no quiere decir que las propiedades de las soluciones de la ecuación elástica se recuperen en dicho límite a partir de las soluciones de la ecuación inelástica. En general, como podrá verse con más claridad cuando se describa el estado de enfriamiento homogéneo, el límite elástico es singular. Esto supone un cambio cualitativo respecto al caso elástico que se ve reflejado en modificaciones tanto de los métodos de resolución de la ecuación como de la descripción hidrodinámica que se deriva de ella.

### 2.1.2. Hidrodinámica

Sea  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  la función de distribución monoparticular de un conjunto esferas o discos duros introducida en el apartado anterior. Se definen los campos hidrodinámicos densidad de partículas  $n$ , velocidad  $\mathbf{u}$  y temperatura granular  $T$  como

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &\equiv \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &\equiv \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ \frac{d}{2}n(\mathbf{r}, t)T(\mathbf{r}, t) &\equiv \frac{m}{2} \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \end{aligned} \tag{2.7}$$

En la última de las ecuaciones se ha utilizado el hecho de que en el contexto de los medios granulares se suele tomar la constante de Boltzmann igual a la unidad en la definición de la temperatura. Cuando la función de distribución  $f$  obedece la ecuación de Boltzmann inelástica, las ecuaciones de balance para los campos hidrodinámicos se obtienen multiplicando dicha ecuación por las

potencias más bajas de la velocidad e integrando posteriormente [91],

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} + (mn)^{-1}\nabla \cdot P = 0, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T + \mathbf{u} \cdot \nabla T + 2(dn)^{-1}(\nabla\mathbf{u} : P + \nabla \cdot \mathbf{q}) + T\zeta = 0. \quad (2.10)$$

Aquí  $P$  es el tensor de presiones,  $\mathbf{q}$  el flujo de calor y  $\zeta$  la velocidad de enfriamiento, definidos como

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, t) &\equiv m \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ \mathbf{q}(\mathbf{r}, t) &\equiv \frac{m}{2} \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2(\mathbf{v} - \mathbf{u})f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ \zeta(\mathbf{r}, t) &\equiv \frac{(1 - \alpha^2)\pi^{\frac{d-1}{2}} m\sigma^{d-1}}{4d\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) nT} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 v_{12}^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Las ecuaciones (2.8) y (2.9) son leyes locales de conservación del número de partículas y de la cantidad de movimiento, respectivamente. La ecuación (2.10) corresponde al balance local de energía y contiene un término de sumidero de energía, disipación, que no aparece en el caso elástico. El coeficiente  $\zeta$  introducido mide la velocidad de enfriamiento del sistema debida a la inelasticidad.

El sistema (2.8)-(2.10) no es cerrado, a menos que el tensor de presiones, el flujo de calor y velocidad de enfriamiento se expresen como función de los campos hidrodinámicos. Estas son las denominadas relaciones constitutivas de la hidrodinámica. Para cerrar las ecuaciones, en el marco de la teoría cinética, es necesario introducir el concepto de función de distribución normal y un método para resolver la ecuación de Boltzmann inelástica que permita obtener las soluciones normales.

Se denominan *soluciones normales* [92] de la ecuación de Boltzmann a las soluciones en las que toda dependencia espacial y temporal ocurre a través de los campos hidrodinámicos,

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f[\mathbf{v}|n(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), T(\mathbf{r}, t)], \quad (2.12)$$

es decir, la función de distribución es función de la velocidad pero funcional de la posición y el tiempo a través de sus primeros momentos, los campos hidrodinámicos. La importancia de estas soluciones radica en el hecho de que al ser sustituidas en las expresiones del tensor de presiones, flujo de calor y

velocidad de enfriamiento, las ecuaciones de balance se cierran, convirtiéndose en las denominadas ecuaciones hidrodinámicas. Por ello, la existencia de una descripción hidrodinámica queda estrechamente ligada a la existencia de soluciones normales de la ecuación de Boltzmann.

El método perturbativo por excelencia para resolver la ecuación de Boltzmann y construir soluciones normales es el de Chapman-Enskog [67,68,92,93]. Su punto de partida es admitir que la solución normal puede construirse mediante un desarrollo en los gradientes de los campos hidrodinámicos. Asociando a cada orden en los gradientes una escala temporal, el método proporciona, en cada orden, una expresión aproximada de la función de distribución como función de los campos y sus gradientes, y unas ecuaciones hidrodinámicas. La función de distribución como función de la posición y la velocidad no se conoce hasta que no se resuelven las ecuaciones hidrodinámicas del sistema completo. De este modo, el efecto de las condiciones de contorno sobre la función de distribución en el método de Chapman-Enskog se introduce de forma indirecta a través de los campos hidrodinámicos.

Si se aplica el método de Chapman-Enskog para gases granulares hasta el primer orden en los gradientes de la función de distribución, se obtienen las siguientes formas para el tensor de presiones, flujo de calor y velocidad de enfriamiento como función de los campos y sus gradientes en la primera aproximación de Sonine [68,91]

$$\begin{aligned} P_{ij} &= nT\delta_{ij} - \eta \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{d}{2} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \right], \\ \mathbf{q} &= -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \\ \zeta &= \zeta^* \frac{nT}{\eta_0}. \end{aligned} \tag{2.13}$$

En estas expresiones,  $\eta$  es el coeficiente de viscosidad tangencial,  $\kappa$  la conductividad calorífica térmica y  $\mu$  la conductividad calorífica difusiva, cuyas expresiones como función de los campos y del resto de parámetros del sistema se dan en el apéndice A. Estas magnitudes se conocen como coeficientes de transporte y las ecuaciones (2.13) son las relaciones constitutivas en el orden de Navier-Stokes.

Sustituyendo las relaciones (2.13) en las ecuaciones de balance (2.8)-(2.10) se tienen las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes. Para poder usar estas ecuaciones los gradientes de los campos no pueden ser *grandes*. En muchas circunstancias, y así pasa siempre en el caso elástico, los gradientes vienen controlados por las condiciones de contorno. Sin embargo, puede ocurrir que la inelasticidad del sistema induzca los gradientes. En estos casos, la descripción hidrodinámica derivada del método de Chapman-

Enskog, que admite independencia de los gradientes y la inelasticidad, puede fallar. Más concretamente, lo que se espera es que, aunque la estructura de las ecuaciones de Navier-Stokes no cambie, la dependencia de los coeficientes de transporte con el coeficiente de restitución normal y los campos sí se vea alterada [58, 62].

Las predicciones teóricas pueden a menudo compararse con resultados numéricos de simulación en ordenador. Los métodos de simulación más usados en el estudio de los flujos granulares rápidos son los de dinámica molecular [74] y directo de Monte Carlo (DSMC) [79]. El primero, que se describe en el apéndice B, resuelve exactamente la dinámica del sistema, mientras que el segundo admite la validez de la ecuación de Boltzmann inelástica. Ambos métodos han permitido confirmar la validez de la descripción que proporciona las ecuaciones de Navier-Stokes en muchas circunstancias, y en particular la del estado de enfriamiento homogéneo que se discute a continuación.

### 2.1.3. Estado de enfriamiento homogéneo

Un gas molecular aislado siempre alcanza un estado de equilibrio en el que la densidad y la temperatura son uniformes e independientes del tiempo. Además, la distribución de velocidades de sus partículas es la de Maxwell-Boltzmann. Cuando las colisiones son inelásticas, el estado anterior no es posible. En su lugar, el sistema puede alcanzar un estado homogéneo en el que su temperatura decaiga monótonamente en el tiempo y su campo de velocidad sea nulo. A dicho estado de un gas granular se le conoce como estado de enfriamiento homogéneo o HCS (del inglés *homogeneous cooling state*).

No se ha encontrado la solución de la ecuación de Liouville correspondientes al HCS por ahora, aunque sí existen indicios de su existencia [94]. En el caso de un gas diluido, suele partirse de la ecuación de Boltzmann inelástica asociada. Puesto que en el HCS el gas es homogéneo, el tiempo se puede expresar como función de la temperatura del sistema, por ser ésta homogénea y una función monótona decreciente. Entonces, es posible buscar una solución de la ecuación de Boltzmann que tenga la propiedad de escala

$$f_h(\mathbf{v}, t) = n_h v_0(t)^{-d} \chi(c), \quad (2.14)$$

donde

$$v_0(t) = \sqrt{\frac{2T_h(t)}{m}}, \quad (2.15)$$

$$\mathbf{c} = \frac{\mathbf{v}}{v_0}.$$

El subíndice  $h$  hace referencia a propiedades del HCS. La ley de escala (2.14) implica que la función de distribución del HCS es una función normal, en el sentido discutido en el apartado anterior.

Usando la hipótesis de escala en la ecuación (2.10) para la temperatura, se llega a la ley de Haff [65, 95]

$$\frac{\partial}{\partial t} T_h = -\zeta_h(t) T_h, \quad (2.16)$$

con  $\zeta_h(t)$  la velocidad de enfriamiento asociada al HCS, dada por

$$\zeta_h(t) = \frac{(1 - \alpha^2) \pi^{\frac{d-1}{2}}}{2d \Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right)} v_0(t) n_h \sigma^{d-1} \int d\mathbf{c}_1 \int d\mathbf{c}_2 |c_1 - c_2|^3 \chi(c_1) \chi(c_2). \quad (2.17)$$

Sustituyendo ahora en la ecuación de Boltzmann, se tiene la siguiente ecuación para la función de distribución reescalada,

$$\frac{\zeta_h}{2v_0 n_h \sigma^{d-1}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} \cdot (\mathbf{c} \chi) = J[\mathbf{c} \chi], \quad (2.18)$$

donde  $J$  es el operador de Boltzmann inelástico definido en (2.5). La ecuación (2.16) se puede resolver teniendo en cuenta que toda la dependencia temporal de  $\zeta_h$  es a través de la temperatura, obteniéndose

$$T_h(t) = T_h(0) \left[ 1 + \frac{1}{2} \zeta_h(0) t \right]^{-2}, \quad (2.19)$$

que ha sido comprobada experimentalmente [95]. Para la ecuación (2.18), sin embargo, sólo se conocen soluciones aproximadas. Para velocidades térmicas ( $|c| \lesssim 2$ ), la función reescalada del HCS puede ser aproximada por [69, 73, 96]

$$\chi(c) = \pi^{-d/2} e^{-c^2} \left\{ 1 + a_2(\alpha) \left[ \frac{c^4}{4} - \frac{d+2}{2} c^2 + \frac{d(d+2)}{8} \right] \right\}, \quad (2.20)$$

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

Las colas de la distribución, por otra parte, son exponenciales [66, 69, 97].

En el orden más bajo en los gradientes, la función de distribución que se obtiene con el método de Chapman-Enskog es la versión local de la función de distribución del HCS [68], es decir, escala de la misma forma con los campos, pero éstos pueden depender del espacio y del tiempo. El papel que juega la distribución de equilibrio en el método de Chapman-Enskog para el caso elástico es análogo al que juega la distribución del HCS en el caso inelástico.

Pero la función de distribución del HCS no es la de equilibrio y, además, éste no es un estado atractor para cualquier gas granular aislado (excepto en el caso homogéneo, ver [98] y citas en él). Es más, para ciertos valores de los parámetros del sistema, el HCS es manifiestamente inestable [99, 100].

Usando una descripción hidrodinámica del HCS es posible determinar los parámetros del sistema para los que éste es linealmente inestable, es decir, situaciones para las que pequeñas perturbaciones de los campos hidrodinámicos respecto de los del HCS dejan de ser pequeñas con el paso del tiempo. Para ello, se toma el modelo usual de gas granular, se escoge un sistema cuadrado o cúbico de lado  $L$  y, con el fin de minimizar el efecto de las paredes sobre el sistema, se usan condiciones de contorno periódicas. Linealizando las ecuaciones de Navier-Stokes respecto de los campos del HCS se obtiene, tras algún cálculo, que el estado de enfriamiento homogéneo es estable para valores de la longitud del sistema  $L$  por debajo de un valor crítico  $L_c$  [101, 102],

$$L_c \equiv \frac{1}{n_h \sigma^{d-1}} \pi^{\frac{3-d}{2}} \Gamma\left(\frac{d+2}{2}\right) \sqrt{\frac{\eta^*}{2\zeta^*}}, \quad (2.21)$$

siendo inestable si  $L > L_c$ . En la región de parámetros en la que el HCS es estable y cerca de la transición, las fluctuaciones de los campos hidrodinámicos no son despreciables y presentan un comportamiento universal [103–106].

En la región inestable, pero cerca de la transición, el sistema exhibe un estado de cizalla [107]. Una característica importante de este estado es que, a pesar de no ser homogéneo y que el campo de velocidades no es nulo, la temperatura local obedece una ley tipo Haff. Es más, toda la dependencia temporal del sistema se puede asimilar en una temperatura global, como ocurre en el HCS. Esto implica que aunque la temperatura depende de la posición, la velocidad de enfriamiento efectiva no, o si se quiere, la derivada temporal del logaritmo neperiano de la temperatura es uniforme. Esta característica de igualdad de las velocidades de enfriamiento aparece repetidamente a lo largo de esta memoria, y parece ser común a otros sistemas granulares, como por ejemplo, una mezcla granular homogénea [17] o gases granulares en estados de enfriamiento inhomogéneos [108].

El análisis de estabilidad también es aplicable con otras condiciones de contorno. Para paredes reflectantes, por ejemplo, el resultado es cualitativamente análogo, pero, hay que señalar dos diferencias importantes. Cuando se introducen paredes, el sistema pierde la simetría que le garantizaba homogeneidad espacial, apareciendo cerca de las paredes regiones con gradientes de densidad y temperatura. El sistema, por tanto, no está estrictamente hablando en el HCS. Además, cuando se usan paredes reflectantes, hay estados (modos hidrodinámicos) permitidos con condiciones de contorno periódicas que se vuelven no accesibles.

Existen en la bibliografía resultados parciales acerca del comportamiento del gas granular en la región inestable del  $HCS$ , pero se está muy lejos de una teoría general [109]. Estudiar estos estados resultará muy útil para entender los procesos de formación de agregados de partículas, de termalización de los sistemas granulares en general, del comportamiento de las mezclas, etc. Los resultados de este trabajo, aunque limitados a situaciones en el que los gases son diluidos, pretenden ayudar a avanzar en esta línea.

## 2.2. El pistón de Rayleigh

Sean dos gases moleculares dentro de un recipiente de paredes adiabáticas y separados por un pistón fijo, también adiabático. Los dos gases están aislados y alcanzan sendos estados de equilibrio independientes y por tanto, en principio, diferentes. Si se libera la posición del pistón, los dos gases interactúan macroscópicamente y el sistema como un todo alcanza un estado de equilibrio. Comprender y describir el proceso de relajación del sistema es lo que se conoce como el problema del pistón de Rayleigh o del pistón adiabático. En el contexto de los medios granulares, surgen inmediatamente las siguientes preguntas: ¿cómo se comporta un pistón en contacto con un gas granular y viceversa?, ¿qué ocurre si uno de los gases es granular?, etc. Esta sección y el resto del presente trabajo tratan de dar respuestas a estas y otras preguntas asociadas.

La primera parte de esta la sección se dedica a la revisión de algunos de los resultados más destacados referentes al estudio del pistón de Rayleigh, también llamado pistón adiabático. La segunda parte se centra en la revisión de los resultados previos en el contexto de lo medios granulares. El caso elástico se ha enfocado desde varios puntos de vista, usando descripciones análogas a las de la ecuación de Liouville, utilizando la ecuación de Boltzmann y también mediante ecuaciones hidrodinámicas. La dificultad adicional de los medios granulares hace que sólo se haya abordado el estudio del problema inelástico usando descripciones macroscópicas aproximadas.

### 2.2.1. Problema clásico

Existen varias formulaciones del problema del pistón adiabático o de Rayleigh. En una publicación del año 1999 [110], E. H. Lieb considera el sistema de la figura 2.2. Un gas permanece aislado del exterior entre las paredes de un recipiente y un pistón que puede moverse verticalmente y que no tiene estructura interna (el nombre *pistón adiabático* se debe a este hecho). Sobre el pistón se coloca una masa  $M$  que comprime el gas, de modo que el sistema

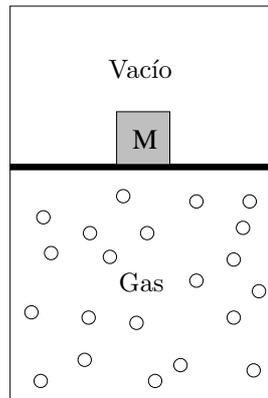


Figura 2.2: Dibujo esquemático de un sistema aislado compuesto por un gas en contacto con un pistón y una masa  $M$ . El pistón no tiene estructura interna y sobre la masa actúa la fuerza gravitatoria.

permanece en equilibrio mecánico, es decir, la fuerza gravitatoria sobre la masa es compensada por la fuerza que proviene de la presión del gas. Para que el sistema esté en equilibrio termodinámico, es necesario que la temperatura de la masa y del gas sean iguales. Partiendo de una situación inicial en la que el sistema está en equilibrio mecánico pero no térmico, ¿cómo alcanzará el sistema el estado de equilibrio?

Landau y Lifshitz [111], por un lado, y Feynmann [112], por otro, dieron la siguiente explicación cualitativa del proceso de relajación del sistema. La fuerza gravitatoria que actúa sobre la masa se compensa con la fuerza que ejerce el pistón pero sólo en promedio. Las pequeñas fluctuaciones de la posición del pistón, debidas a las fluctuaciones de la presión, provocan flujos de energía entre la masa y el gas que terminan termalizando todo el sistema. Esta explicación está en desacuerdo con la Termodinámica. Cualquier cambio en el estado de equilibrio del sistema debe incrementar la entropía total por estar éste aislado. Al pasar del estado inicial, en el que la temperatura del gas y de la masa son diferentes, al estado de equilibrio, el subsistema más caliente disminuye su temperatura ejerciendo trabajo sobre el otro. Esta disminución es consecuencia de que la energía total se conserva, y la transferencia de energía sólo puede ser a través de un trabajo, al ser el pistón adiabático por hipótesis. Esto contradice el segundo principio de la termodinámica aplicado al subsistema más caliente dado que disminuye su temperatura y por tanto su entropía (la presión inicial y en equilibrio son iguales) ejerciendo trabajo sobre el otro.

El punto clave en la aparente paradoja está en la consideración del pistón

como sistema macroscópico y adiabático al mismo tiempo. El punto de vista adoptado por muchos autores, y también el de este trabajo, es el de considerar al pistón como una partícula más del sistema. El flujo neto de energía es un promedio de la energía transferida a través de las colisiones entre el pistón y las partículas de los sistemas con los que está en contacto, pudiendo ser distinto de cero aun cuando el pistón sea adiabático.

El problema descrito suele simplificarse eliminando el campo gravitatorio y sustituyendo la masa por otro gas [113]. El sistema resultante es el indicado en la figura 2.3 y que se considera a continuación.

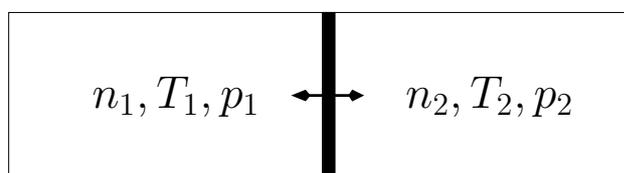


Figura 2.3: Dos gases dentro de un contenedor aislante y separados por un pistón adiabático móvil.

Si los gases a los dos lados del pistón son iguales, ideales e infinitos, el problema del pistón adiabático se reduce al problema clásico del gas de Rayleigh, es decir, el de una partícula masiva inmersa en un gas en equilibrio. Se conocen resultados exactos para este sistema cuando la masa del pistón es mucho mayor que el de las partículas [114–116]. La exactitud de los resultados se debe a la posibilidad de eliminar el efecto de las denominadas recolisiones que se dan cuando una partícula del gas colisiona más de una vez con el pistón. Cuando los subsistemas a izquierda y derecha del pistón son finitos, no está del todo claro cómo tener en cuenta el efecto de las recolisiones [115]. Si los dos gases son infinitos y tienen inicialmente la misma presión pero distinta temperatura, Gruber y Piasecki [117, 118], admitiendo que la distribución de velocidades de las partículas que colisionan con el pistón es la de equilibrio, encuentran que el pistón se mueve con velocidad media no nula de la región más fría a la más caliente. Si la masa  $M$  del pistón es suficientemente grande, el valor medio y dispersión de su velocidad cumplen

$$\begin{aligned}\langle V \rangle &\propto \sqrt{T_2} - \sqrt{T_1}, \\ M \langle V^2 \rangle &= \sqrt{T_1 T_2}.\end{aligned}\tag{2.22}$$

Resultados análogos se han obtenido usando descripciones basadas en la ecuación de Fokker-Planck [119, 120]. ¿Es aplicable el resultado anterior para sistemas finitos? Si así fuera, el pistón en situaciones de equilibrio mecánico

pero no térmico, tendría una velocidad media no nula, que produciría una modificación del equilibrio mecánico, lo que a su vez obligaría al sistema a reajustarse. Este mecanismo, que liga equilibrio mecánico y térmico, permite dar una explicación al proceso de relajación. Lamentablemente, aún no se conoce una respuesta exacta a esta pregunta.

En la referencia [115] se obtienen resultados exactos pero para un modelo muy simple (no hay colisiones entre las partículas). En [117,118] los gases no son ideales, en general, pero no se tiene en cuenta el efecto del pistón sobre la función de distribución de los gases. Sólo existen hasta el momento resultados para discos duros obtenidos numéricamente [121] y algunas tentativas para sistemas con pocas partículas [122,123].

Pese a la dificultad de abordar un estudio exacto (es decir, con un modelos realista, teniendo en cuenta el efecto del pistón sobre los gases, correlaciones, etc.), existe una imagen clara, contrastada con los resultados de simulación, del proceso de relajación del sistema. A partir de una condición inicial en la que las temperaturas y presiones de los gases son diferentes, el sistema alcanza un estado de equilibrio termodinámico en dos etapas. En una primera, el sistema relaja hacia una situación en la que las presiones se igualan pero las temperaturas son diferentes. En una segunda etapa, más lenta que la anterior, el sistema se termaliza, es decir, las temperaturas de los gases y también la del pistón se igualan [124–128].

### 2.2.2. Problema inelástico

Al abordar el problema del pistón de Rayleigh en el contexto de los medios granulares, surgen viejas y nuevas preguntas, ¿cómo se comporta un gas granular en contacto con un pistón adiabático?, ¿existen magnitudes con *buenas* propiedades, como la temperatura o la entropía, para sistemas fuera del equilibrio termodinámico?, ¿qué propiedades se igualan cuando dos sistemas granulares se ponen en contacto a través de un pistón?, etc. En el caso de los flujos granulares rápidos la ecuación de Boltzmann inelástica y las ecuaciones de Navier-Stokes que se obtienen a partir de ella, constituyen una herramienta potente de análisis. Por esta razón, la mayoría de los trabajos teóricos que se encuentran en la bibliografía se centran en este tipo de sistemas granulares.

Considérese el sistema elástico de la figura 2.2 descrito en [110]. Tal como se ha analizado en la sección 2.2.1, el sistema alcanza un estado de equilibrio termodinámico en el que todas las temperaturas son iguales, incluida la del pistón (definida a partir de su energía cinética media). El problema se simplifica eliminando el cuerpo encima del pistón y asociándole a este último una masa. De esta forma el proceso de relajación sólo involucra al gas y al

pistón. Pero ¿qué ocurre si el gas es granular? Si no existe un mecanismo que compense la pérdida de energía en las colisiones, el gas y el pistón colapsan en un estado en el que nada se mueve. Para que el sistema llegue a un estado estacionario hay que inyectar energía, por ejemplo, vibrando la base del contenedor.

Para ciertas geometrías y densidades moderadas, Brey y Ruiz-Montero [129–131] encuentran que el sistema alcanza un estado estacionario en el que los perfiles de temperatura y densidad del gas sólo dependen de la altura medida desde la base del sistema. Además, la temperatura del pistón, definida nuevamente a partir de su distribución de velocidades, es diferente de aquella correspondiente a la parte del gas con el que está en contacto. Esta violación de la equipartición es frecuente en los medios granulares [132–136] y es una consecuencia directa del estado de no equilibrio en el que se encuentran los mismos.

Los resultados teóricos en [129–131] están basados en una descripción hidrodinámica del gas en la aproximación de Navier-Stokes. A través de una descripción cinética de la interacción del gas con la pared vibrante y el pistón, es posible calcular, bajo ciertas aproximaciones, el flujo de energía a través de la pared vibrante y del pistón como función de los campos hidrodinámicos, como se discute en el capítulo 3. Esto permite completar la descripción hidrodinámica. Los resultados teóricos para los perfiles hidrodinámicos del gas granular coinciden con los obtenidos mediante dinámica molecular. Sin embargo, cuando se compara la temperatura del pistón, calculada a partir del segundo momento de su distribución de velocidades o a través de la compresibilidad del sistema [129], con la del gas, aparecen notables discrepancias con las predicciones teóricas existentes. Resultados recientes apuntan a la presencia de correlaciones precolisionales entre partículas y el pistón como las causantes de tales discrepancias [137].

En 2005, R. Brito y colaboradores publican el primer trabajo [138] en el que se trata el problema del pistón de Rayleigh con gases granulares. Estudian, teóricamente y mediante simulación de dinámica molecular, un sistema aislado formado por dos conjuntos de discos duros inelásticos iguales encerrados en una caja rectangular y separados por un pistón adiabático móvil, es decir, una generalización al caso inelástico del sistema de la figura 2.3. Para todas las situaciones estudiadas por los autores, el sistema, partiendo de una configuración inicial simétrica, evoluciona hacia una situación en la que el pistón colapsa uno de los subsistemas. Usando una descripción hidrodinámica en la que no tienen en cuenta flujos de energía a través del pistón, consiguen reproducir los resultados de simulación. Uno de los objetivos de este trabajo es entender el resultado obtenido en [138], tratando de ver por qué y bajo qué condiciones se puede desprestigiar el flujo de energía a través del

pistón. Esta cuestión es importante, porque en el caso elástico el mecanismo por el que el sistema relaja es precisamente a través de la energía transmitida por las vibraciones del pistón.

Hurtado y Redner [123, 139] simplifican el sistema de la referencia [138] considerando tres partículas, dos ligeras y una pesada, que se mueven a lo largo de una única dirección. La partícula pesada permanece entre las dos ligeras con las que colisiona elásticamente. Las partículas ligeras, sin embargo, colisionan de forma inelástica con las paredes. Sorprendentemente, el comportamiento del sistema de tres partículas es análogo al de dos gases inelásticos y un pistón. Este sistema es interesante para entender la importancia de las correlaciones precolisionales en el proceso de relajación del sistema.

Otros estudios teóricos del pistón de Rayleigh inelástico consideran situaciones en las que el gas a izquierda y derecha del pistón son diferentes o están sometidos a condiciones diferentes. En [140], por ejemplo, el pistón colisiona de forma inelástica con los dos gases en equilibrio a ambos lados, pero el grado de inelasticidad de las colisiones (medido a través del coeficiente de restitución normal) con el gas de la izquierda es diferente del de la derecha. Piasecki y Gruber [141], por su parte, consideran un modelo análogo pero en el que las velocidades de las partículas sólo toman valores discretos.

Recientemente, Lechenault y Daniels [142] han estudiado experimentalmente los estados estacionarios alcanzados por dos sistemas granulares densos vibrados y separados por un pistón móvil. La posibilidad de llevar a cabo experimentos de sistemas granulares con pistones ha motivado el estudio en el capítulo 4 del problema del pistón de Rayleigh con gases granulares vibrando las paredes del contenedor. En ese capítulo, el estudio se centrará en el caso en el que los dos sistemas son diluidos y contienen partículas con las mismas propiedades, a diferencia del trabajo [142] en el que los sistemas contienen partículas diferentes y en una densidad muy alta.



## Capítulo 3

### Condiciones de contorno cinéticas.

### Dos gases granulares separados por un pistón adiabático

Para poder resolver las ecuaciones de Navier-Stokes es necesario especificar unas condiciones de contorno. En el caso presente, estas condiciones son consecuencia de las colisiones de las partículas del gas con las paredes del sistema y su determinación requiere ir a escalas más pequeñas que las hidrodinámicas. En la primera parte del capítulo, usando una descripción cinética, se estudia la interacción de un gas con una pared vibrante y con un pistón adiabático móvil. Más concretamente, a partir de la función de distribución del gas, se obtiene una expresión de la energía inyectada por una pared cuyo perfil de velocidades tiene la forma de diente de sierra. Además, usando la función de distribución de dos cuerpos, de una partícula del gas y el pistón, se calculan la fuerza que ejerce el gas sobre el pistón y el flujo de energía a través de este último. Al imponer la igualdad entre los flujos anteriores y los flujos de Navier-Stokes (2.13), se completa la descripción hidrodinámica.

En la segunda parte del capítulo se estudia la versión inelástica más sencilla del problema del pistón de Rayleigh o pistón adiabático, la de dos gases granulares aislados y separados por un pistón adiabático móvil. El objetivo es incorporar en la descripción hidrodinámica de [138] las fluctuaciones de la posición del pistón a través del flujo de energía obtenido en la primera parte del capítulo. El sistema alcanza un estado de equilibrio mecánico en el que las temperaturas de los dos gases y el pistón son diferentes en general. Sólo en el límite en el que la masa del pistón es mucho mayor (frecuentemente infinito) que la de las partículas se recupera el comportamiento descrito en [138].

### 3.1. Condiciones de contorno cinéticas

Tres son los elementos que constituyen el contorno de los sistemas considerados en este trabajo; paredes reflectantes, paredes vibrantes y el pistón adiabático móvil. Las colisiones entre las partículas del gas y estos elementos determinan el comportamiento del sistema. El procedimiento habitual para transcribir la información de la dinámica microscópica a la dinámica macroscópica, en término de unos pocos campos, es mediante el uso de la teoría cinética.

En el caso de una pared vibrante, usando la función de distribución de una partícula del gas en contacto con ésta, es posible expresar el flujo de energía inyectado en función de las propiedades del gas. El modelo considerado para el movimiento de la pared vibrante permite despreciar las amplitudes de las oscilaciones y requiere sólo un parámetro para caracterizar el movimiento de ésta. Por otro lado, al proceder de forma análoga con el pistón, es necesario usar la función de distribución dos cuerpos, la de una partícula del gas y el pistón. Se deduce una expresión exacta para la fuerza que ejerce el gas sobre el pistón y para el flujo de energía, en la que se realiza la aproximación de despreciar las correlaciones precolisionales.

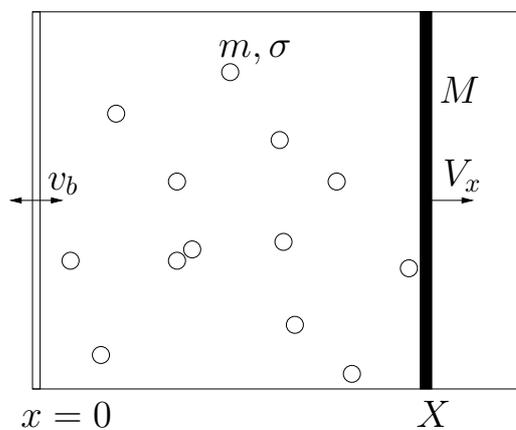


Figura 3.1: Dibujo esquemático de un gas en contacto con una pared vibrante y un pistón adiabático móvil.

El gas se modela por  $N$  esferas ( $d = 3$ ) o discos ( $d = 2$ ) duros de diámetro  $\sigma$  y masa  $m$ . Sin pérdida de generalidad, la pared y el pistón se consideran verticales. La primera tiene una posición fija ( $x = 0$ ) a la izquierda del gas y el pistón una posición genérica  $x = X$  a la derecha, como en la figura 3.1. El objetivo, por ahora, no es estudiar el sistema de la figura 3.1, sino relacionar

las propiedades locales del gas con el flujo inyectado por la pared, la fuerza sobre el pistón y el flujo de energía a través de éste [130].

### 3.1.1. Pared vibrante

No hay una única forma de inyectar energía a través de paredes vibrantes, incluso experimentalmente se hace de varias formas [10, 142]. Sea  $\Delta x$  el desplazamiento de la pared en un tiempo  $\delta t_1$  y  $-\Delta x$  en  $\delta t_2$ , como en la figura 3.2. Si  $\Delta x$  es mucho menor que el recorrido libre medio de las partículas cerca de la pared, éste es inapreciables hidrodinámicamente. Si además  $\delta t_2 \ll \delta t_1$ , la probabilidad de que una partícula colisione con la pared cuando ésta retrocede es del orden de  $\delta t_1/(\delta t_1 + \delta t_2)$ , que es mucho menor que uno. En el resto del estudio se considera que el movimiento de la pared vibrante corresponde al límite que conduce al movimiento en diente de sierra de amplitud nula y de velocidad  $v_b$  [143]

$$\begin{aligned} \Delta x &\rightarrow 0, & \delta t_1 &\rightarrow 0, & \delta t_2 &\rightarrow 0, \\ \Delta x/\delta t_1 &\rightarrow v_b, & \delta t_2/\delta t_1 &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.1)$$

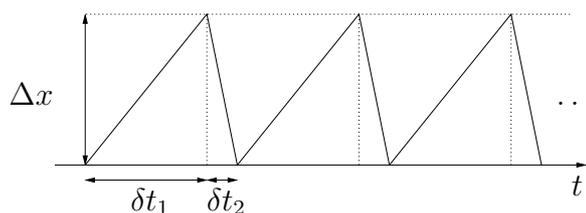


Figura 3.2: Perfil de velocidades en diente de sierra usado para la velocidad del pistón en los límites (3.1).

Sin pérdida de generalidad, la pared vertical se sitúa en  $x = 0$ . Una partícula de velocidad  $\mathbf{v}$  con  $v_x < 0$  al colisionar con la pared cambia instantáneamente su velocidad de acuerdo con la siguiente regla de colisión

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_{\perp} &= \mathbf{v}'_{\perp}, \\ v'_x &= 2v_b - v_x, \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde  $\mathbf{v}_{\perp}$  es la velocidad normal a la dirección  $X$ . La ley anterior produce un incremento en la energía de la partícula dado por

$$\Delta\epsilon = 2m(v_b^2 - v_b v_x). \quad (3.3)$$

Sea, como siempre,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  la función de distribución de una partícula del gas en el instante  $t$ . Como éste siempre permanece a la derecha de la pared, se define una nueva función  $f_0$ , a través de la siguiente igualdad

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \Theta(x) f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (3.4)$$

que toma los mismos valores que la función de distribución en la región accesible pero que extiende  $f$  a la zona prohibida evitando las singularidades en la pared. Es conveniente descomponer la función  $f_0$ , en la posición de la pared, en dos partes, una para las partículas que se acercan y otra para las que se alejan,

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) = f_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) + f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x), \quad (3.5)$$

de modo que a la ley de conservación del flujo de partículas resulta

$$f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) |v_x| \delta(x) d\mathbf{v} = f_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) v'_x \delta(x) d\mathbf{v}'. \quad (3.6)$$

Usando la regla de colisión (3.2), también válida reinterpretando  $\mathbf{v}'$  como la velocidad precolisional, se tiene la siguiente relación entre flujos en la pared ( $d\mathbf{v} = d\mathbf{v}'$ )

$$f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) |v'_x| \delta(x) = f_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) v_x \delta(x). \quad (3.7)$$

Sea  $Q_0(\mathbf{r}_\perp, t)$  la energía media inyectada por la pared por unidad de área y tiempo en la posición  $\mathbf{r}_\perp$  y el tiempo  $t$ , entonces

$$Q_0(\mathbf{r}_\perp, t) = \int dx \int d\mathbf{v} [f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) |v_x| \delta(x)] \Delta\epsilon. \quad (3.8)$$

Como

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon &= mv_b(2v_b - v_x) - mv_b v_x, \\ v_x &< 0, \quad 2v_b - v_x > 0, \end{aligned} \quad (3.9)$$

se tiene

$$\begin{aligned} Q_0 &= \int dx \int d\mathbf{v} f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) |v_x| mv_b |2v_b - v_x| \\ &+ \int dx \int d\mathbf{v} f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) mv_b v_x^2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

La primera integral de la expresión anterior es

$$\int dx \int d\mathbf{v} f_0^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) |v_x| mv_b |v'_x|, \quad (3.11)$$

que usando (3.7) y que  $dv_x = dv'_x$  resulta

$$\begin{aligned} & \int dx \int d\mathbf{v} f_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) \delta(x) m v_b v_x'^2 \\ &= \int dx \int d\mathbf{v} f_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) m v_b v_x^2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} Q_0(\mathbf{r}_\perp, t) &= m v_b \int dx \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) v_x^2 \\ &= n(0, \mathbf{r}_\perp, t) T_x(0, \mathbf{r}_\perp, t) v_b, \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde

$$\begin{aligned} n(0, \mathbf{r}_\perp, t) &= \int dx \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x), \\ T_x(0, \mathbf{r}_\perp, t) &= \frac{1}{n(0, \mathbf{r}_\perp, t)} \int dx \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \delta(x) m v_x^2. \end{aligned} \quad (3.14)$$

La expresión (3.13), que fue obtenida por primera vez en [144] bajo ciertas aproximaciones, relaciona el flujo de energía con los campos densidad y temperatura parcial en la dirección horizontal. Estos son, en general, funciones de la posición (a lo largo de cualquier dirección ortogonal a la del eje  $X$ ) y del tiempo. La expresión es exacta, pues no se ha utilizado ninguna hipótesis para obtenerla, y junto con la expresión de Navier-Stokes para el flujo de calor en (2.13), permite relacionar los gradientes de la temperatura y la densidad con los campos cerca de la pared. Esta es una forma consistente de determinar las condiciones de contorno en la descripción hidrodinámica.

### 3.1.2. Pistón adiabático móvil

Sean  $M$ ,  $X$  y  $V_x$  la masa, posición y velocidad del pistón, respectivamente. Las colisiones entre las partículas del gas y el pistón son en general inelásticas, de manera que las velocidades postcolisionales vienen dadas por

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_\perp &= \mathbf{v}_\perp, \\ v'_x &= v_x - \frac{M}{m+M} (1 + \alpha_p) (v_x - V_x), \\ V'_x &= V_x + \frac{m}{m+M} (1 + \alpha_p) (v_x - V_x), \end{aligned} \quad (3.15)$$

siendo  $\alpha_p$  el coeficiente de restitución normal de las colisiones entre los granos del gas y el pistón. Al igual que  $\alpha$ , vale uno en el caso de colisión elástica

y está comprendido entre cero y uno. La regla de colisión anterior conserva la cantidad de movimiento pero produce una reducción del módulo de la velocidad relativa  $g_x \equiv v_x - V_x$ , de la energía cinética  $E$  y del volumen del espacio de las velocidades,

$$\begin{aligned} g'_x &= -\alpha_p g_x, \\ \Delta E &= -\frac{mM}{2(m+M)}(1-\alpha_p^2)g_x^2, \\ dv'_x dV'_x &= \alpha_p dv_x dV_x. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Las expresiones para las velocidades precolisionales, que se representan mediante un asterisco, se obtienen invirtiendo las ecuaciones (3.15) resultando

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\perp^* &= \mathbf{v}_\perp, \\ v_x^* &= v_x - \frac{M}{m+M} \frac{1+\alpha_p}{\alpha_p} g_x, \\ V_x^* &= V_x + \frac{M}{m+M} \frac{1+\alpha_p}{\alpha_p} g_x, \\ g_x^* &= -\alpha_p^{-1} g_x, \\ dv_x^* dV_x^* &= \alpha_p^{-1} dv_x dV_x. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Sea

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \quad (3.18)$$

la función de distribución conjunta de una partícula del gas y el pistón, y cuya norma es el número de partículas del gas  $N$ . Integrando convenientemente, se pueden obtener las funciones de distribución del gas y del pistón,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) &= \int dX \int dV_x f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t), \\ F(X, V_x, t) &= \frac{1}{N} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{v} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Sin pérdida de generalidad, se considera que el gas permanece a la izquierda del pistón. Como se hiciera en el caso de la pared vibrante, se introduce una nueva función de distribución  $f_{02}$  que pueda definirse en la región prohibida del gas y que no tenga los problemas que puede tener  $f_2$  en la posición del pistón,

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) = \Theta(X-x) f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t). \quad (3.20)$$

Se descompone la nueva función de distribución en dos partes, una describe las partículas que se acercan al pistón y la otra las que se alejan del mismo,

$$f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) = f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) + f^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t), \quad (3.21)$$

con

$$\begin{aligned} f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) &= f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t)\Theta(g_x), \\ f^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) &= f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t)\Theta(-g_x). \end{aligned} \quad (3.22)$$

La conservación del flujo de partículas en la posición del pistón se traduce en la siguiente igualdad [145]

$$\begin{aligned} f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t)g_x\delta(X-x)d\mathbf{v}dV_x \\ = f^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}', X, V'_x, t)|g'_x|\delta(X-x)d\mathbf{v}'dV'_x, \end{aligned} \quad (3.23)$$

o equivalentemente, teniendo en cuenta (3.17),

$$\alpha_p^{-2}f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}^*, X, V_x^*, t)\delta(X-x) = f^-(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t)\delta(X-x). \quad (3.24)$$

El uso de esta expresión en (3.21) da

$$f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) = (1 + \alpha_p^{-2}b^{-1})f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t), \quad (3.25)$$

donde  $b^{-1}$  es un operador que cambia las velocidades  $\mathbf{v}$  y  $V_x$  por las precollisionales  $\mathbf{v}^*$  y  $V_x^*$  dadas por las ecuaciones (3.17).

A partir de ahora se considerará que la velocidad media del pistón es nula, es decir,

$$\int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dXdV_x f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x)V_x = 0. \quad (3.26)$$

La fuerza  $F_x$  ejercida por el gas sobre el pistón es el valor medio de la variación de la cantidad de movimiento  $\Delta P_x$  del pistón,

$$\begin{aligned} \Delta P_x &= M(V'_x - V_x) = \frac{mM}{m+M}(1 + \alpha_p)g_x, \\ F_x &= \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dXdV_x f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t)g_x\delta(X-x)\Delta P_x. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Utilizando la conservación del flujo de partículas y la paridad de la función  $f_{02}$  respecto de  $V_x$ , se tiene a la siguiente expresión (válida cuando la velocidad media del pistón es nula) [130]

$$F_x = \int d\mathbf{r} n(X, \mathbf{r}_\perp, t)T_x(X, \mathbf{r}_\perp, t)\delta(x), \quad (3.28)$$

donde  $n$  es la densidad del gas y  $T_x$  es la temperatura asociada a la componente  $x$  de la velocidad de las partículas del gas en la posición del pistón,

$$n(X, \mathbf{r}_\perp, t) \equiv \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dXdV_x f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x)\delta(X-x) \quad (3.29)$$

$$T_x(X, \mathbf{r}_\perp, t) \equiv \frac{1}{n} \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dXdV_x f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x)\delta(X-x)mv_x^2 \quad (3.30)$$

La expresión de la energía cinética media inyectada por el pistón por unidad de tiempo y área  $Q(\mathbf{r}_\perp, t)$  es

$$Q(\mathbf{r}_\perp, t) = \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dXdV_x f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) g_x \delta(X-x) \frac{m}{2} (v_x'^2 - v_x^2), \quad (3.31)$$

donde  $\frac{m}{2}(v_x'^2 - v_x^2)$  es la variación de la energía cinética de una partícula en la colisión con el pistón. La integral en el segundo miembro de la expresión anterior puede expresarse en función de  $f_{02}$  mediante la relación (3.23),

$$Q(\mathbf{r}_\perp, t) = -\frac{m}{2} \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dXdV_x f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X-x) g_x v_x^2. \quad (3.32)$$

A diferencia de lo que ocurre con el flujo de energía inyectado por una pared vibrante y con la fuerza ejercida sobre el pistón, en este caso la expresión anterior no se puede poner, de modo exacto, en función de magnitudes hidrodinámicas del gas y del pistón, por lo que es necesario introducir algunas aproximaciones.

Se usa la hipótesis de que las correlaciones precolisionales entre las partículas y el pistón son despreciables, de modo que

$$f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X-x) \simeq f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) F(X, V_x, t) \Theta(g_x) \delta(X-x), \quad (3.33)$$

Sustituyendo esta expresión en (3.25) y, teniendo en cuenta que  $b^{-1}\Theta(g_x) = \Theta(-g_x)b^{-1}$ , se obtiene

$$\begin{aligned} f_{02}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X-x) &= f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) F(X, V_x, t) \delta(X-x) \\ &+ \Theta(-g_x) (\alpha_p^{-2} b^{-1} - 1) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) F(X, V_x, t) \delta(X-x). \end{aligned} \quad (3.34)$$

El segundo sumando del segundo miembro de la igualdad tiene en cuenta el efecto de las correlaciones tras la colisión.

Sustituyendo la relación anterior en la expresión del flujo de calor y aproximando las funciones de distribución por gaussianas (ver apéndice C), resulta

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{r}_\perp, t) &= -2 \sqrt{\frac{2}{\pi m \alpha_p}} (1 + \phi) \frac{M}{m + M} \left( \frac{M - \alpha_p m}{M - m} \right)^{3/2} \\ &\times \left[ 1 - \frac{(1 + \alpha_p)(1 + \phi)M}{2(m + M)} \right] n(X, \mathbf{r}_\perp) T(X, \mathbf{r}_\perp)^{3/2}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde

$$\phi \equiv \frac{\alpha_p (M - m) m T_p}{(M - \alpha_p m) M T(X, \mathbf{r}_\perp)} \quad (3.36)$$

y  $T_p \equiv M \langle V_x^2 \rangle$  es la temperatura cinética del pistón.

Si las colisiones entre el gas y el pistón son elásticas, la expresión para el flujo tiene la forma más sencilla

$$Q(\mathbf{r}_\perp, t) = -2\sqrt{\frac{2m}{\pi}} \left(1 + \frac{mT_p}{MT(X, \mathbf{r}_\perp)}\right) \frac{M}{(m+M)^2} \times [T(X, \mathbf{r}_\perp) - T_p] n(X, \mathbf{r}_\perp) T(X, \mathbf{r}_\perp)^{1/2}. \quad (3.37)$$

En la mayor parte de las situaciones se cumple

$$m/M \ll 1, \quad \frac{mT_p}{MT(X, \mathbf{r}_\perp)} \ll 1, \quad (3.38)$$

y por tanto,

$$Q(\mathbf{r}_\perp, t) \simeq -2\sqrt{\frac{2m}{\pi}} \frac{[T(X, \mathbf{r}_\perp) - T_p]}{M} n(X, \mathbf{r}_\perp) T(X, \mathbf{r}_\perp)^{1/2}. \quad (3.39)$$

Las expresiones (3.28) y (3.39) serán usadas en lo que resta del capítulo para estudiar el problema del pistón adiabático en contacto con dos sistemas granulares. La primera de las expresiones es exacta mientras que la segunda contiene varias aproximaciones. Primero, se han despreciado las correlaciones precolisionales entre las partículas y el pistón, aunque no las postcolisionales. Esto hace que la función de distribución  $f_{02}$  de una partícula y el gas no factorice en el producto de dos funciones de distribución, pues de ser así, el flujo de calor, en la aproximación gaussiana, sería cero, como puede comprobarse analizando la expresión (3.32). Finalmente, se han considerado situaciones en las que se aplican las relaciones (3.38) y que las colisiones entre el gas y el pistón son elásticas.

## 3.2. Dos gases granulares separados por un pistón adiabático

En esta sección se vuelve a considerar el sistema estudiado por Brito y colaboradores en la referencia [138], es decir, dos gases granulares aislados separados por un pistón adiabático móvil. El objetivo del análisis presentado aquí es añadir a la descripción hidrodinámica del trabajo anterior el efecto de las fluctuaciones del pistón, que son las que permiten que el sistema termalice cuando los gases son moleculares. En el caso inelástico, el sistema también alcanza una especie de equilibrio térmico en el que los dos gases y el pistón no igualan sus temperaturas, en general, sino sus velocidades de enfriamiento. La nueva condición de equilibrio térmico, junto con la de equilibrio mecánico, da lugar a una transición de fase de no equilibrio con una ruptura espontánea de simetría. Los resultados en [138] se recuperan para el límite en el que la masa del pistón es mucho mayor que la de las partículas, para el resto de parámetros del sistema fijos.

En la sección siguiente se introduce el modelo y las ecuaciones del mismo. Se estudian soluciones en las que la posición media del pistón no cambia con el tiempo (estados que se denominarán *estacionarios*) y en las que sí hay dependencia temporal. Los resultados teóricos serán comparados con los de simulación de dinámica molecular. Se cerrará el capítulo con una discusión de los resultados obtenidos y de sus implicaciones.

### 3.2.1. Modelo y descripción

El sistema que se considera consiste en un cilindro de longitud  $L_x$  que contiene  $2N$  discos ( $d = 2$ ) o esferas ( $d = 3$ ) de masa  $m$  y diámetro  $\sigma$ . Un pistón adiabático (sin grados internos de libertad) de masa  $M$  divide al sistema en dos partes con el mismo número de partículas. El pistón puede desplazarse permaneciendo normal al eje de simetría del sistema, eje  $X$ . El sistema está aislado y evoluciona libremente. Las colisiones son inelásticas entre partículas,  $\alpha$  es el coeficiente de restitución normal, y elásticas cuando involucran al pistón o a una pared. El pistón se mueve libremente entre colisiones, no existiendo rozamiento de éste con las paredes del recipiente.

El sistema será descrito hidrodinámicamente considerando que los dos gases son aproximadamente homogéneos y que pueden ser descritos por las ecuaciones del estado de enfriamiento homogéneo (HCS). Los subíndices  $i = 1, 2$  indicarán propiedades del sistema a la izquierda y derecha del pistón, respectivamente. Las densidades cuando el pistón se encuentra en la posición

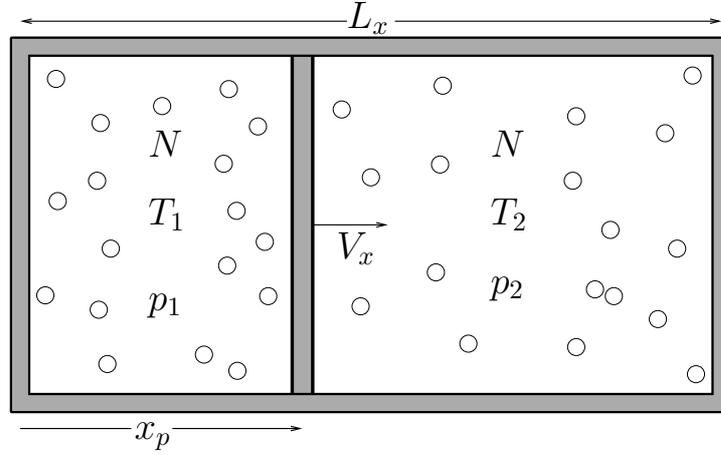


Figura 3.3: Sistema formado por  $2N$  discos o esferas de masa  $m$  y diámetro  $\sigma$ . El pistón se mueve libremente a lo largo del eje  $X$ .

$X = x_p$  son

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{N}{Sx_p}, \\ n_2 &= \frac{N}{S(L_x - x_p)}, \end{aligned} \quad (3.40)$$

donde  $S$  es la sección del pistón (área para  $d = 3$  y longitud para  $d = 2$ ).

Haciendo un balance de energía para los subsistemas y el pistón, se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{2} N \frac{dT_1}{dt} &= -\frac{d}{2} N \zeta_1 T_1 + Q_1 S - p_1 S v_p, \\ \frac{d}{2} N \frac{dT_2}{dt} &= -\frac{d}{2} N \zeta_2 T_2 + Q_2 S + p_2 S v_p, \\ \frac{1}{2} \frac{dT_p}{dt} &= -(Q_1 + Q_2) S, \end{aligned} \quad (3.41)$$

siendo  $T_i$  y  $p_i$  la temperatura y la presión del subsistema  $i$ , respectivamente, y  $v_p$  la velocidad media (macroscópica) del pistón. Los primeros miembros de las igualdades corresponden a las derivadas temporales de las energías internas de los gases y del pistón, respectivamente. Los términos proporcionales a las velocidades de enfriamiento  $\zeta_i$  en las dos primera ecuaciones dan cuenta de las pérdidas energéticas debidas a las colisiones inelásticas. Las expresiones de las velocidades de enfriamiento son

$$\zeta_i = \frac{p_i}{\eta_0(T_i)} \zeta^*(\alpha), \quad (3.42)$$

donde  $\eta_0$  y  $\zeta^*$  vienen dados en el apéndice A. El término  $Q_i$  representa la energía por unidad de área y tiempo inyectada por el pistón en el subsistema  $i$  que, según el resultado (3.39), válido en el límite (3.38), viene dado por

$$Q_i \simeq -2\sqrt{\frac{2m}{\pi}} \frac{T_i - T_p}{M} n_i T_i^{1/2}. \quad (3.43)$$

Finalmente, los términos proporcionales a la velocidad del pistón dan cuenta del trabajo realizado por éste sobre los subsistemas.

Haciendo un balance mecánico para el pistón, resulta

$$M \frac{d^2 x_p}{dt^2} = (p_1 - p_2)S. \quad (3.44)$$

Es conveniente introducir una nueva escala temporal  $s$  definida por

$$ds = (2n)^{1/2} \sigma^{d-1} \left[ \frac{p(t)}{m} \right]^{1/2} dt, \quad (3.45)$$

donde

$$n = \frac{2N}{SL_x} \quad (3.46)$$

es la densidad media del sistema y

$$p = \frac{p_1 + p_2}{2} \quad (3.47)$$

es la presión media.

En la nueva escala temporal, las ecuaciones (3.41) se convierten en

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{ds} &= -a \frac{n_1 T_1^{3/2}}{(np)^{1/2}} - \frac{b}{2Nd} \frac{n_1 T_1^{1/2}}{(np)^{1/2}} (T_1 - T_p) - \frac{2S}{dN\sigma^{d-1}} \frac{n_1 T_1}{(np)^{1/2}} \frac{m^{1/2} v_p}{2^{1/2}}, \\ \frac{dT_2}{ds} &= -a \frac{n_2 T_2^{3/2}}{(np)^{1/2}} - \frac{b}{2Nd} \frac{n_2 T_2^{1/2}}{(np)^{1/2}} (T_2 - T_p) + \frac{2S}{dN\sigma^{d-1}} \frac{n_2 T_2}{(np)^{1/2}} \frac{m^{1/2} v_p}{2^{1/2}}, \\ \frac{d}{ds} T_p &= \frac{b}{2} \frac{n_1 T_1^{1/2}}{(pn)^{1/2}} (T_1 - T_p) + \frac{b}{2} \frac{n_2 T_2^{1/2}}{(pn)^{1/2}} (T_2 - T_p), \\ M \frac{d^2}{ds^2} x_p &= \frac{n_1 T_1 - n_2 T_2}{p} \frac{mS}{2n\sigma^{2d-2}}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

con  $a$  y  $b$  parámetros constantes dados por

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{8\pi^{(d-1)/2} \zeta^*}{(2+d)2^{1/2} \Gamma(d/2)}, \\ b &\equiv \frac{8Sm}{\pi^{1/2} \sigma^{d-1} M}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

El sistema (3.48) está formado por cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas,  $x_p, T_1, T_2$ , y  $T_p$ . En los siguientes apartados se estudian dos situaciones. Primero se tratan aquellos estados en los que la velocidad media del pistón es nula (*estados estacionarios*). Después se estudia la dinámica del sistema cuando  $v_p \neq 0$ .

### 3.2.2. Estado simétrico

Para estados en los que la posición media del pistón  $x_p$  es independiente del tiempo, que son los que se consideran en este apartado, la fuerza neta sobre el pistón debe ser nula, por lo que

$$p_1 = p_2 = p \Rightarrow n_1 T_1(t) = n_2 T_2(t). \quad (3.50)$$

Mientras que las temperaturas y la presión son funciones del tiempo, las densidades son estacionarias por serlo la posición del pistón.

Las ecuaciones en (3.48) se reducen en este caso a

$$\begin{aligned} \frac{dT_i}{ds} &= -a_i T_i - \frac{b_i}{2Nd} (T_i - T_p), \quad (i = 1, 2), \\ \frac{dT_p}{ds} &= \frac{b_1}{2} (T_1 - T_p) + \frac{b_2}{2} (T_2 - T_p), \end{aligned} \quad (3.51)$$

con

$$\begin{aligned} a_i &\equiv \left(\frac{n_i}{n}\right)^{1/2} a, \\ b_i &\equiv \left(\frac{n_i}{n}\right)^{1/2} b, \end{aligned} \quad (3.52)$$

Las temperaturas de los subsistemas están relacionadas a través de la igualdad de presiones. Usando (3.50),

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{ds} &= - \left( a_1 + \frac{b_1}{2Nd} \right) T_1 + \frac{b_1}{2Nd} T_p, \\ \rho^2 \frac{dT_1}{ds} &= - \left( a_1 + \frac{b_1}{2Nd} \right) \rho T_1 + \frac{b_1}{2Nd\rho} T_p, \\ \frac{dT_p}{ds} &= \frac{b_1}{2} (1 + \rho) T_1 - \frac{b_1(1 + \rho)}{2\rho} T_p, \end{aligned} \quad (3.53)$$

En las fórmulas anteriores se ha introducido

$$\rho^2 = \frac{n_1}{n_2}. \quad (3.54)$$

Dado que el sistema de ecuaciones diferenciales anterior es lineal, las soluciones se obtienen sustituyendo las expresiones

$$T_1(s) = \theta_1 e^{\lambda s}, \quad T_p(s) = \theta_p e^{\lambda s}. \quad (3.55)$$

Para que exista solución distinta de la trivial ( $\theta_1 = \theta_p = 0$ ) se deben cumplir las dos siguiente ecuaciones,

$$\begin{aligned} a_1 + \frac{b_1}{2Nd} + \lambda &= \left( a_1 + \frac{b_1}{2Nd} + \lambda \rho \right) \rho^2, \\ \frac{2 \left( a_1 + \frac{b_1}{2Nd} + \lambda \right)}{b_1(1 + \rho)} &= \frac{b_1}{2Nd \left[ \frac{b_1(1+\rho)}{2\rho} + \lambda \right]}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

En el estado simétrico es  $n_1 = n_2 = n$ ,  $x_p = L_x/2$ ,  $\rho = 1$  y, usando (3.50),  $T_1(s) = T_2(s) = T^{(s)}(s)$ . Además, la expresión (3.43) del flujo de calor implica que  $Q_1 = Q_2$ . Para  $\rho = 1$  la primera de las ecuaciones en (3.55) se vuelve una identidad y la segunda resulta

$$\lambda^2 + \left( a + b + \frac{b}{2Nd} \right) \lambda + ab = 0, \quad (3.57)$$

cuya soluciones son

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= -\frac{c}{2} \pm \frac{(c^2 - 4ab)^{1/2}}{2}, \\ c &= a + b \left( 1 + \frac{1}{2Nd} \right). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Los exponentes verifican  $\lambda_- < \lambda_+ \leq 0$ , dándose la igualdad en el límite elástico. Para tiempos grandes es

$$T^{(s)}(s) = \theta^{(s)} e^{\lambda^{(s)} s}, \quad T_p^{(s)}(s) = \theta_p^{(s)} e^{\lambda^{(s)} s}, \quad (3.59)$$

con  $\lambda^{(s)} = \lambda_+$ . Teniendo en cuenta la ecuación para la temperatura del pistón en (3.53), se tiene la siguiente relación entre los coeficientes  $\theta^{(s)}$  y  $\theta_p^{(s)}$

$$\theta^{(s)} = \left( 1 + \frac{\lambda^{(s)}}{b} \right) \theta_p^{(s)}. \quad (3.60)$$

La expresión anterior está bien definida porque  $|\lambda^{(s)}| < b$ , como se deduce de (3.58). Por otra parte, para tiempos grandes, el pistón siempre tiene temperatura mayor que la de los gases

$$T_p^{(s)}(t) \geq T^{(s)}(t). \quad (3.61)$$

Este resultado refleja el hecho de que el pistón se enfría a través de la energía disipada en los gases. Nuevamente, la igualdad se da en el caso elástico.

Las ecuaciones en (3.59) implican que las dos temperaturas decaen en el tiempo de la misma forma,

$$\begin{aligned}\frac{dT^{(s)}}{dt} &= -\zeta_{ef}^{(s)} T^{(s)}(t), \\ \frac{dT_p^{(s)}}{dt} &= -\zeta_{ef}^{(s)} T_p^{(s)}(t),\end{aligned}\tag{3.62}$$

con

$$\zeta_{ef}^{(s)} = -\lambda^{(s)} \left( \frac{2T}{m} \right)^{1/2} n\sigma^{d-1}\tag{3.63}$$

la velocidad de enfriamiento efectiva que tiene en cuenta la disipación de las colisiones y el flujo de calor a través del pistón. En el límite  $N \rightarrow \infty$ , manteniendo el resto de parámetros finitos,  $\lambda^{(s)} \approx -a$  y  $\zeta_{ef}^{(s)} \approx \zeta$ , como es de esperar. En el mismo límite es

$$\theta^{(s)} \approx \left( 1 - \frac{a}{b} \right) \theta_p^{(s)},\tag{3.64}$$

lo que implica que el estado simétrico no existe para  $a > b$ . Pero para  $M/m \gg 1$ , es  $b \ll 1$ , por lo que para  $N \rightarrow \infty$  y  $M/m \rightarrow \infty$ , el estado con  $x_p = L_x/2$  no existe. La razón física es que para  $N$  y  $M$  muy grandes, el pistón no puede enfriarse a la misma velocidad que los granos del gas.

### 3.2.3. Estado asimétrico

Para una situación en la que la posición media del pistón no sea el centro del sistema, se tiene  $\rho \neq 1$ , lo que se traduce en que, de existir una solución de este tipo, el exponente asociado es

$$\lambda = \lambda^{(a)} = \left( a + \frac{b}{2Nd} \right) \left( \frac{n_1 n_2}{n} \right)^{1/2} \frac{n_2 - n_1}{n_1^{3/2} - n_2^{3/2}}.\tag{3.65}$$

Por tanto, las temperaturas de los gases en cada uno de los compartimentos y el pistón son

$$T_1^{(a)}(s) = \theta_1^{(a)} e^{\lambda^{(a)} s}, \quad T_2^{(a)}(s) = \theta_2^{(a)} e^{\lambda^{(a)} s},\tag{3.66}$$

$$T_p^{(s)} = \theta_p^{(s)} e^{\lambda^{(a)} s},\tag{3.67}$$

cumpléndose que

$$\frac{\theta_1^{(a)}}{\theta_2^{(a)}} = \frac{1}{\rho^2}\tag{3.68}$$

y

$$\frac{\theta_p^{(a)}}{\theta_1^{(a)}} = \left(1 + \frac{2Nad}{b}\right) \frac{\rho^2}{\rho^2 + \rho + 1}. \quad (3.69)$$

Esta última ecuación es consecuencia directa de la primera de las ecuaciones (3.53).

Al igual que ocurría con la solución simétrica, las temperaturas de los gases y el pistón evolucionan con la misma velocidad de enfriamiento efectiva, es decir,

$$\begin{aligned} \frac{dT_i^{(a)}}{dt} &= -\zeta_{ef}^{(a)} T_i^{(a)}(t), \\ \frac{dT_p^{(a)}}{dt} &= -\zeta_{ef}^{(a)} T_p^{(a)}(t), \end{aligned} \quad (3.70)$$

siendo

$$\zeta_{ef}^{(a)} = -\lambda^{(a)} \left(\frac{2p(t)n}{m}\right)^{1/2} \sigma^{d-1}. \quad (3.71)$$

Sustituyendo la ecuación (3.65) en la segunda ecuación de (3.56), y tras algunos cálculos, se llega a

$$z^2 - Ndz + Nd = 0, \quad (3.72)$$

con

$$z \equiv \left(\frac{2Nad}{b} + 1\right) \frac{\rho}{\rho^2 + \rho + 1}. \quad (3.73)$$

Para valores grandes de  $N$ , las dos soluciones de la ecuación (3.72) son

$$z_1 \approx 1, \quad z_2 \approx Nd. \quad (3.74)$$

Para  $z_1 = 1$ , de (3.69) se sigue que

$$\theta_p^{(a)} = \rho \theta_1^{(a)} = \left(\theta_1^{(a)} \theta_2^{(a)}\right)^{1/2}, \quad (3.75)$$

o, equivalentemente,

$$T_p^{(a)}(t) = \left[T_1^{(a)}(t) T_2^{(a)}(t)\right]^{1/2}. \quad (3.76)$$

La expresión (3.73) para  $z = 1$  toma la forma

$$\rho^{(a)2} - \frac{2Nad}{b} \rho^{(a)} + 1 = 0, \quad (3.77)$$

cuyas soluciones son

$$\rho^{(a)} = \frac{Nad}{b} \pm \left[ \left( \frac{Nad}{b} \right)^2 - 1 \right]^{1/2}. \quad (3.78)$$

Las soluciones aceptables deben estar asociadas a valores de  $\rho$  reales y, por lo tanto, requieren que

$$\frac{Nad}{b} > 1. \quad (3.79)$$

Usando las definiciones en (3.49), es fácil ver que la desigualdad anterior es equivalente a

$$M > M_c, \quad (3.80)$$

donde

$$M_c \equiv \frac{(d+2)2^{1/2}\Gamma(d/2)Sm}{d\pi^{d/2}\sigma^{d-1}N\zeta^*} \quad (3.81)$$

hace las veces de un parámetro crítico con dimensiones de masa, por debajo del cual el estado asimétrico con  $z = 1$  no es posible. Además, cuanto mayor sea  $M/M_c$  mayor es la asimetría del sistema medida a partir de la posición del pistón  $x_p$ . En el límite  $M/M_c \rightarrow \infty$ , se tiene  $x_p \rightarrow 0$  o  $x_p \rightarrow L_x$ . Esta es la situación límite analizada en la referencia [138].

Es interesante ver lo que ocurre en la bifurcación, es decir, para  $M \rightarrow M_c$  o, con más precisión, para  $M - M_c \rightarrow 0^+$ . En el límite anterior  $\rho \rightarrow 1$ , y usando las ecuaciones (3.66)-(3.69) se tiene

$$T_1^{(a)}(t) = T_2^{(a)}(t) = T_p^{(a)}(t). \quad (3.82)$$

Por otra parte, de la ecuación (3.65),  $\lambda^{(a)} \rightarrow -a$ , que coincide con el exponente de la solución simétrica  $\lambda^{(s)}$  dado en (3.58) en el límite  $Nd \gg 1$ , es decir, este exponente es continuo en la transición.

Aún queda por estudiar la solución  $z_2 \approx Nd$  de la ecuación (3.72). A partir de (3.69) se sigue que para esta solución es

$$T_p(t)^{(a)'} = Nd \left[ T_1^{(a)'}(t) T_2^{(a)'}(t) \right]^{1/2}. \quad (3.83)$$

Consecuentemente, esta solución debe ser descartada del análisis, porque para valores típicos del número de partículas es  $N \gg 1$ , y con ello la temperatura del pistón es mucho mayor que la de los gases, lo que va en contra de las hipótesis (3.38), utilizadas en la obtención de la expresión del flujo de calor  $Q_i$ .

### 3.2.4. Dinámica cerca de los estados estacionarios

El análisis realizado hasta ahora no proporciona información acerca de la estabilidad de las soluciones encontradas. Para  $M < M_c$  sólo existe una solución estacionaria, la simétrica, y se espera que sea estable. Dicha estabilidad, sin embargo, puede perderse para  $M > M_c$  ya que surgen dos nuevas soluciones. Para analizar el comportamiento del sistema en las dos regiones, se considerará el sistema de ecuaciones (3.48).

Para estados del sistema no muy alejados de la bifurcación, se tienen las siguientes estimaciones

$$\begin{aligned} T_1 &\sim T_2 \sim T_p \sim T, \\ p_1 &\sim p_2 \sim p, \\ x_p &\sim L_x, \\ a &\sim b/N, \end{aligned} \tag{3.84}$$

donde  $T$  es una temperatura del orden de las del pistón y los gases. Usando una de las dos primeras ecuaciones en el sistema (3.48) es posible estimar, usando (3.84), la escala típica  $s_t$  de evolución de las temperaturas de los gases:

$$s_t^{-1} \sim a + \frac{S}{N\sigma^{d-1}} \frac{m^{1/2}v_p}{T^{1/2}}. \tag{3.85}$$

Para estados *cercanos* a los estacionarios se admite que como máximo el segundo sumando en la expresión anterior es del mismo orden que  $a$ . De este modo

$$s_t \sim a^{-1}. \tag{3.86}$$

Usando la ecuación para la temperatura del pistón en (3.48),

$$s_{t_p}^{-1} \sim b, \tag{3.87}$$

es decir, la escala temporal típica de la temperatura del pistón  $s_{t_p}$  es mucho menor que la de los gases

$$s_{t_p} \sim s_t/N. \tag{3.88}$$

Procediendo de forma análoga con la ecuación para la posición del pistón, se tiene la siguiente estimación para la escala típica de la posición del pistón  $s_x$

$$s_x \sim s_t/\sqrt{NM/m}. \tag{3.89}$$

En general es  $N \gg 1$  y  $\sqrt{NM/m} \gg 1$ , por lo que

$$s_{t_p} \ll s_t, \quad s_x \ll s_t, \tag{3.90}$$

La dinámica para la temperatura y posición del pistón es mucho más rápida que la de las temperaturas de los gases, cosa que sucede también en el caso elástico como ya se comentó en el capítulo anterior. La existencia de varias escalas sugiere buscar soluciones del sistema (3.48) usando un método perturbativo de escalas múltiples. En el orden más bajo, las variables asociadas al pistón se obtienen despreciando la dependencia temporal en las dos últimas ecuaciones en (3.48), teniéndose

$$\begin{aligned} T_p &\simeq (T_1 T_2)^{1/2}, \\ n_1 T_1 &\simeq n_2 T_2. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Usando estas últimas relaciones en las ecuaciones para las temperaturas de los gases, se tienen

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{ds} &= -a \left(\frac{n_1}{n}\right)^{1/2} T_1 - \frac{b}{2Nd} \left(\frac{n_1}{n}\right)^{1/2} [T_1 - (T_1 T_2)^{1/2}] - \frac{2S}{dN\sigma^{d-1}} \left(\frac{mp}{2n}\right)^{1/2} v_p, \\ \frac{dT_2}{ds} &= -a \left(\frac{n_2}{n}\right)^{1/2} T_2 - \frac{b}{2Nd} \left(\frac{n_2}{n}\right)^{1/2} [T_2 - (T_1 T_2)^{1/2}] + \frac{2S}{dN\sigma^{d-1}} \left(\frac{mp}{2n}\right)^{1/2} v_p. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Las densidades y la velocidad del pistón pueden expresarse en función de las temperaturas de los gases y sus derivadas. Usando la igualdad de presiones,

$$\begin{aligned} n_1 &= n \frac{(1 + \rho^2)}{2}, \\ n_2 &= n \frac{1 + \rho^2}{2\rho^2}, \\ x_p &= L_x \frac{1}{1 + \rho^2} \Rightarrow v_p = -L_x \sigma^{d-1} \left(\frac{2np}{m}\right) \frac{1}{(1 + \rho^2)^2} \frac{d}{ds} \rho^2, \end{aligned} \quad (3.93)$$

donde  $\rho^2 = T_2/T_1$ . El sistema (3.92) queda expresado, usando las relaciones en (3.93), en función sólo de las temperaturas de los gases

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \ln T_1 &= -a \left(\frac{1 + \rho^2}{2}\right)^{1/2} - \frac{b}{2Nd} \left(\frac{1 + \rho^2}{2}\right)^{1/2} (1 - \rho) + \frac{2}{d(1 + \rho^2)} \frac{d}{ds} \rho^2, \\ \frac{d}{ds} \ln T_2 &= -a \left(\frac{1 + \rho^2}{2\rho^2}\right)^{1/2} - \frac{b}{2Nd} \left(\frac{1 + \rho^2}{2\rho^2}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{1}{\rho}\right) - \frac{2}{d\rho^2(1 + \rho^2)} \frac{d}{ds} \rho^2. \end{aligned} \quad (3.94)$$

Obsérvese que todos los términos de la ecuación son, en principio, del mismo orden. Esto está de acuerdo con la hipótesis hecha en la discusión de la ecuación (3.85).

Usando los resultados anteriores,

$$\frac{d}{ds}(T_1 + T_2) = -a \left(\frac{p}{n}\right)^{1/2} (T_1^{1/2} + T_2^{1/2}), \quad (3.95)$$

es decir, la energía total del sistema (dado que  $T_p \simeq (T_1 T_2)^{1/2}$ ) es una función monótona decreciente. Además, el valor relativo de las temperaturas se determina resolviendo la siguiente ecuación, obtenida restando las ecuaciones en (3.94) y operando,

$$\frac{d}{ds} \ln \rho = W(\rho) \quad (3.96)$$

donde

$$W(\rho) \equiv -\frac{b}{4N(d+2)} \left(\frac{1+\rho^2}{2}\right)^{1/2} \frac{1-\rho}{\rho^2} \left[ \frac{2Nda}{b} \rho - (1+\rho^2) \right]. \quad (3.97)$$

Los puntos fijos o críticos de la ecuación (3.96), que se determinan resolviendo  $W(\rho) = 0$ , corresponden a las soluciones *estacionarias* simétrica y asimétrica,

$$\begin{aligned} \rho &= 1 \\ \rho &= \rho^{(a)} = \frac{Nad}{b} \pm \left[ \left(\frac{Nad}{b}\right)^2 - 1 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.98)$$

La estabilidad de las soluciones depende del signo de la derivada de  $W(\rho)$  en los puntos críticos (ver figura 3.4). Se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho} W(1) &= a \frac{M/M_c - 1}{2(d+1)\sqrt{M/M_c}}, \\ \frac{d}{d\rho} W(\rho^{(a)}) &= -a \frac{M/M_c - 1}{2(d+1)\sqrt{M/M_c}} \frac{1 + (\rho^{(a)})^3}{(\rho^{(a)})^{9/2}}. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Como  $a > 0$ , la solución simétrica es estable para  $M < M_c$  e inestable para  $M > M_c$ . Las soluciones asimétricas, que sólo existen para  $M > M_c$ , son estables.

El análisis realizado sólo proporciona la dependencia temporal de las magnitudes en la escala temporal más lenta. Como se ha visto, en dicha escala la dependencia las magnitudes del pistón (posición, velocidad y temperatura) con el tiempo es a través de las temperaturas de los dos gases. Llevando el análisis a órdenes superiores, es posible determinar la evolución de los campos en escalas más pequeñas, en las cuales la dinámica del sistema es más rica. Lo

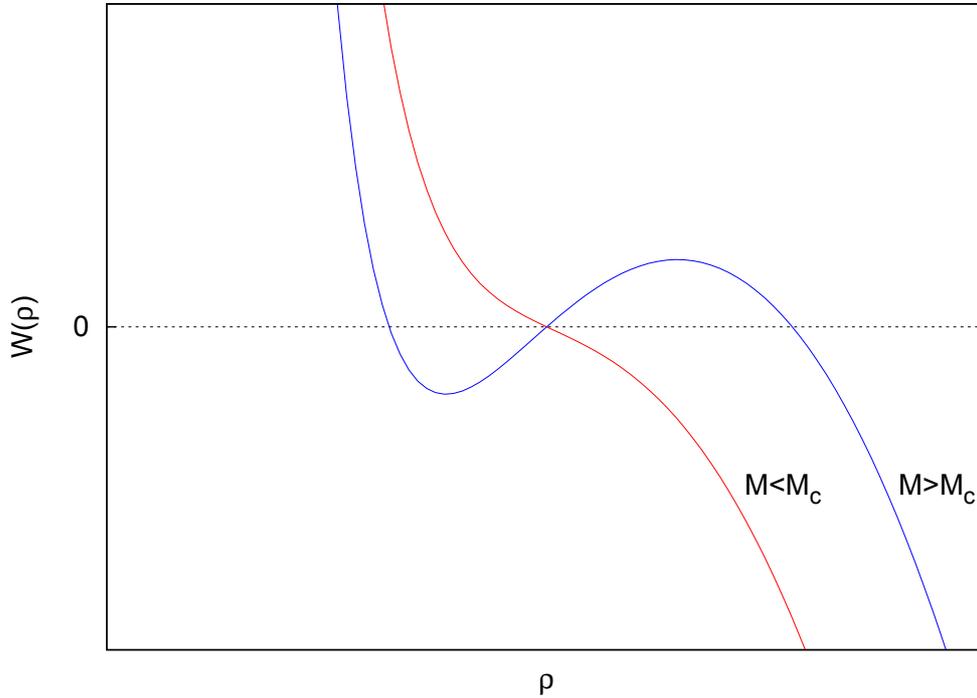


Figura 3.4: Comportamiento de la función  $W(\rho)$  definida en la ecuación (3.97) para  $M < M_c$  y  $M > M_c$ .

que se espera, por lo que se observa en las simulaciones, es que se superponga al movimiento monótono descrito por la ecuación (3.96) otro oscilatorio. Sin embargo, el comportamiento de la ecuación (3.96) predomina para tiempos largos.

Las escalas encontradas analizando las propiedades de las ecuaciones (3.48) y las soluciones *estacionarias* también pueden ser determinadas, con más precisión, haciendo un análisis de estabilidad lineal cerca de dichas soluciones.

En el orden más bajo, es decir, para tiempos suficientemente grandes, la posición del pistón puede determinarse a partir de la ecuación (3.96) para  $\rho$ , pues esta cantidad sólo es función de la posición media del pistón, en la aproximación uniforme. Dicha ecuación es análoga a la de una partícula con un movimiento sobreamortiguado, la parte izquierda es la fuerza de fricción y la derecha  $W$  es una fuerza que puede asociarse a un potencial conservativo ( $\int^\rho W(q) dq$ ).

### 3.2.5. Dinámica molecular

Se han realizado simulaciones de dinámica molecular (ver apéndice B) en las que el sistema es una caja rectangular de longitud  $L_x$  y anchura  $L_y$  que contiene  $2N$  discos inelásticos. Estos valores se han escogido de modo que la densidad sea baja. Típicamente  $n \equiv N/(L_x L_y) \sim 0,05\sigma^{-2}$ . El pistón divide al sistema en dos partes con el mismo número de partículas y su sección  $S$  es  $L_y$ . Las colisiones de las partículas con las paredes y el pistón son elásticas. En todas las simulaciones, el pistón parte desde el centro del sistema con velocidad nula y las partículas están uniformemente distribuidas entre los dos compartimentos. Las distribuciones iniciales de velocidad de las partículas en ambos compartimentos son gaussianas e iguales.

Con objeto de evitar la inestabilidad del HCS [100,102] comentada en el capítulo anterior, se ha limitado la geometría del sistema y los valores de  $\alpha$  usando la ecuación (2.21) deducida para condiciones de contorno periódicas. Por una parte, a medida que se disminuye el valor de  $\alpha$ , el HCS se desestabiliza para densidades menores. Por otra parte, la densidad del sistema no puede ser muy baja porque los efectos de borde se hacen importantes. Por todo ésto, sólo se han considerado situaciones en las que el coeficiente de restitución es superior a  $\alpha = 0,85$ .

Para algunos valores de los parámetros del sistema, el pistón oscila en torno a su posición inicial,  $x_p = L_x/2$ . Las oscilaciones son causadas por las fluctuaciones de la presión de los gases. Este comportamiento, que se mantiene en el tiempo, está asociado claramente al estado simétrico descrito en la parte teórica. Para otros valores de los parámetros del sistema, sin embargo, la posición inicial del pistón cambia hacia otra no central en torno a la cual oscila. El sistema entonces alcanza un estado que se ha denominado asimétrico.

En la figura 3.5, se muestra la trayectoria del pistón desde la situación inicial, en el centro del sistema, hasta otra desplazada, con lo que se ha producido una ruptura de la simetría. Los valores de los parámetros son  $\alpha = 0,98$ ,  $2N = 200$ ,  $L_x = 2L_y = 100\sigma$ ,  $M = 25m$ . Por tanto, las densidades iniciales son  $n_1 = n_2 = 0,04\sigma^{-2}$ . La escala de tiempo  $\tau$  usada en la gráfica es proporcional al número de colisiones por partícula. La posición alcanzada por el pistón tras un periodo transitorio es  $x_p \approx 0,66L_x$ . El comportamiento del pistón para otros valores de los parámetros, cuando la simetría del pistón se rompe, es similar, siendo las probabilidades de que ocupe posiciones simétricas a la derecha o la izquierda del pistón iguales. Es más, para trayectorias largas, se observan tránsitos entre posiciones medias separadas la misma distancia del centro del sistema.

En la figura 3.6 se representa el perfil de densidades medido en el siste-

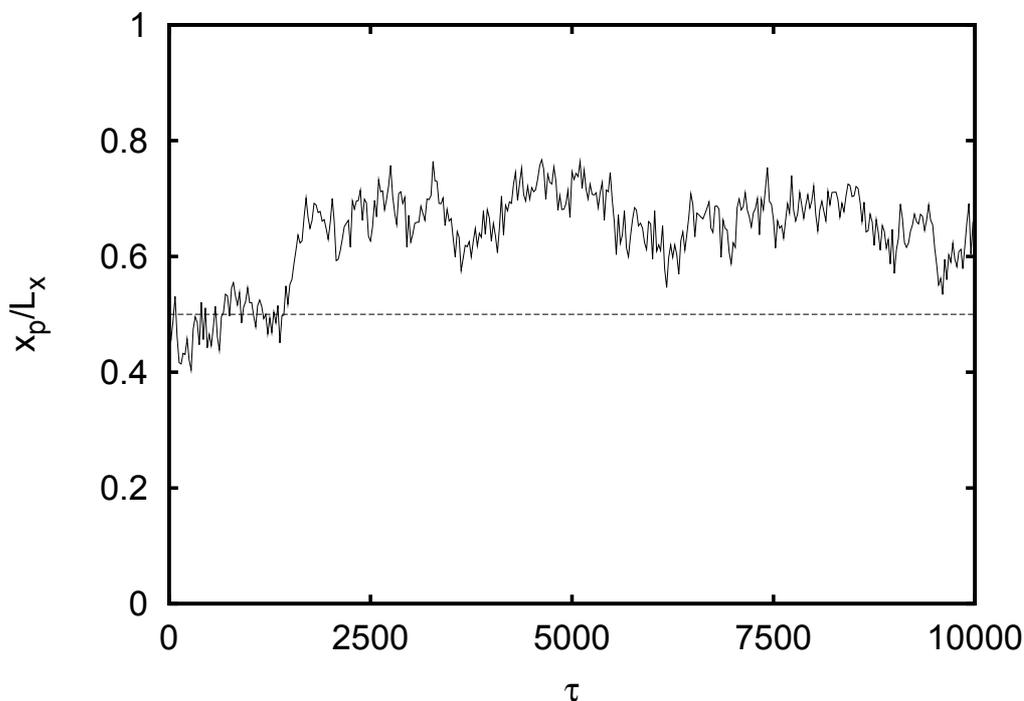


Figura 3.5: Evolución temporal de la posición del pistón obtenida con dinámica molecular para un sistema con  $2N = 200$ ,  $\alpha = 0,98$ ,  $L_x = 2L_y = 100\sigma$  y  $M = 25m$ . El tiempo  $\tau$  está medido en unidades proporcionales al número de colisiones por partícula. La línea discontinua representa la posición  $L_x/2$ .

ma de la figura 3.5. La curva dibujada se ha obtenido, una vez el sistema alcanza el *estado estacionario*, promediando temporalmente y sobre 350 trayectorias diferentes. Se pueden observar efectos de borde cerca de las paredes del sistema y del pistón. Lejos de las paredes y el pistón, las densidades pueden considerarse en muy buena aproximación uniformes y diferentes en cada compartimento. Esto está de acuerdo con la aproximación hecha en teoría. Los efectos de borde cerca del pistón, a diferencia de lo que ocurre cerca de las paredes, se deben también a las fluctuaciones del pistón.

Una importante predicción de la teoría es la ecuación (3.76) que relaciona las temperaturas del pistón y la de los gases. Los resultados de simulación están de acuerdo con la relación entre la temperatura del pistón y la de los gases cuando el sistema tiene simetría y también cuando la pierde. En la siguiente figura, se comparan los datos de simulación con la predicción teórica de la ecuación (3.76) para los mismos parámetros del sistema que en las figuras 3.5 y 3.6. Los datos mostrados en la gráfica son consistentes con

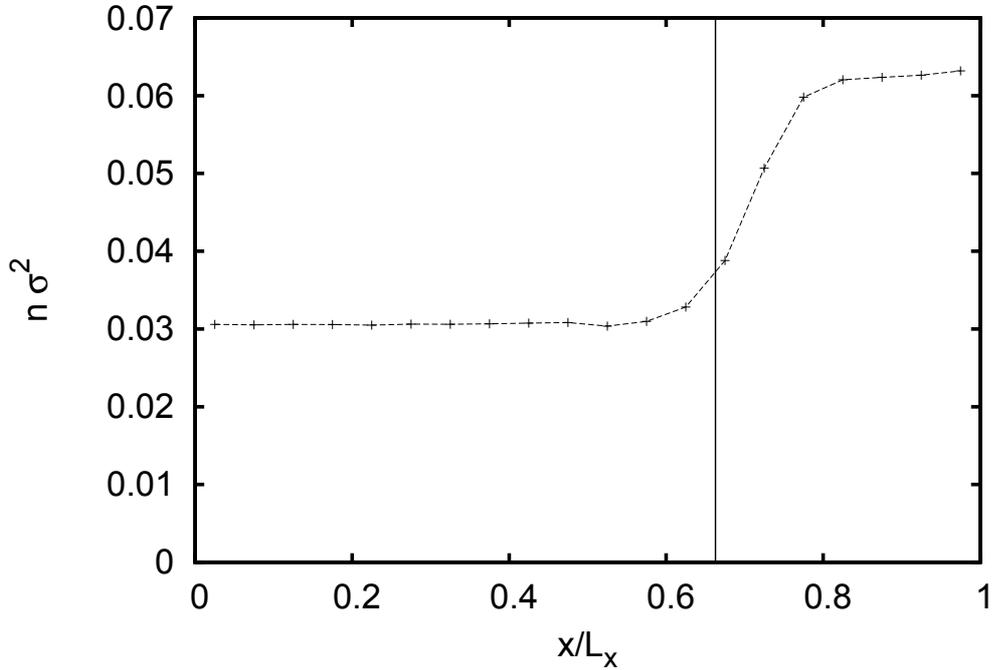


Figura 3.6: Perfil de densidades del sistema cuando el pistón alcanza su posición estacionaria. Los parámetros del sistema son los mismos que en la anterior gráfica. La línea vertical indica la posición media del pistón.

la predicción teórica acerca de la igualdad de las velocidades de enfriamiento efectivas de los gases y el pistón. Las ligeras discrepancias entre teoría y simulación provienen, en parte, del efecto de las transiciones del pistón entre las posiciones estacionarias, no eliminadas en las medidas realizadas.

Las simulaciones muestran claramente la existencia de los estados simétrico y asimétrico. Además la estabilidad de los mismos está en acuerdo con las predicciones de la sección anterior.

La posición media del pistón puede ser cualquiera, entre las dos paredes verticales en los extremos del sistema, dependiendo de los valores que tomen los parámetros del sistema. Con objeto de hacer una comparación más cuantitativa entre simulación y teoría, se ha medido la posición media del pistón  $x_p$  como función de  $M/M_c$ , donde  $M_c$  es un parámetro definido en la ecuación (3.81). En las siguientes gráficas 3.8 y 3.9 se representa  $\epsilon$ , definido por

$$\epsilon \equiv \frac{|2x_p - L_x|}{L_x} = \frac{|1 - \rho^2|}{1 + \rho^2}, \quad (3.100)$$

que toma valores en el intervalo  $0 \leq \epsilon \leq 1$  y que hace las veces de parámetro

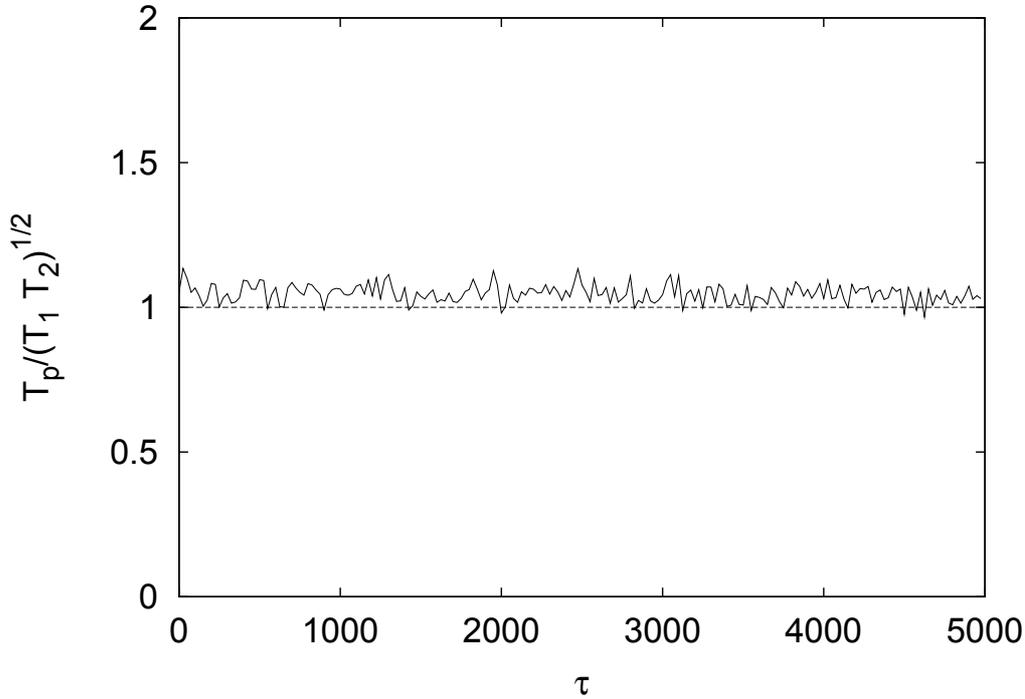


Figura 3.7: Temperatura del pistón  $T_p$  dividida por la raíz cuadrada del producto de las temperaturas de los dos gases,  $T_1$  y  $T_2$ . El sistema sobre el que se mide es igual que el de las figuras anteriores. Los datos han sido obtenidos promediando sobre 2000 trayectorias. El tiempo es proporcional al número de colisiones por partícula.

de orden (es cero cuando el sistema respeta la simetría del problema y distinto de cero cuando se rompe). La predicción teórica para esta cantidad es

$$\begin{aligned} \rho = \rho^{(s)} = 1 \quad \text{y} \quad \epsilon = 0 \quad \text{para} \quad M < M_c, \\ \rho = \rho^{(a)} = \frac{M}{M_c} + \left[ \left( \frac{M}{M_c} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} \quad \text{para} \quad M > M_c. \end{aligned} \quad (3.101)$$

El acuerdo entre teoría y simulación es satisfactorio. En particular, la predicción para el punto de bifurcación es muy buena. Para situaciones muy asimétricas, el pistón comprime a uno de los subsistemas aumentando su densidad por encima del límite diluido en el que está desarrollada la teoría, produciendo, por consiguiente, discrepancias respecto a la predicción.

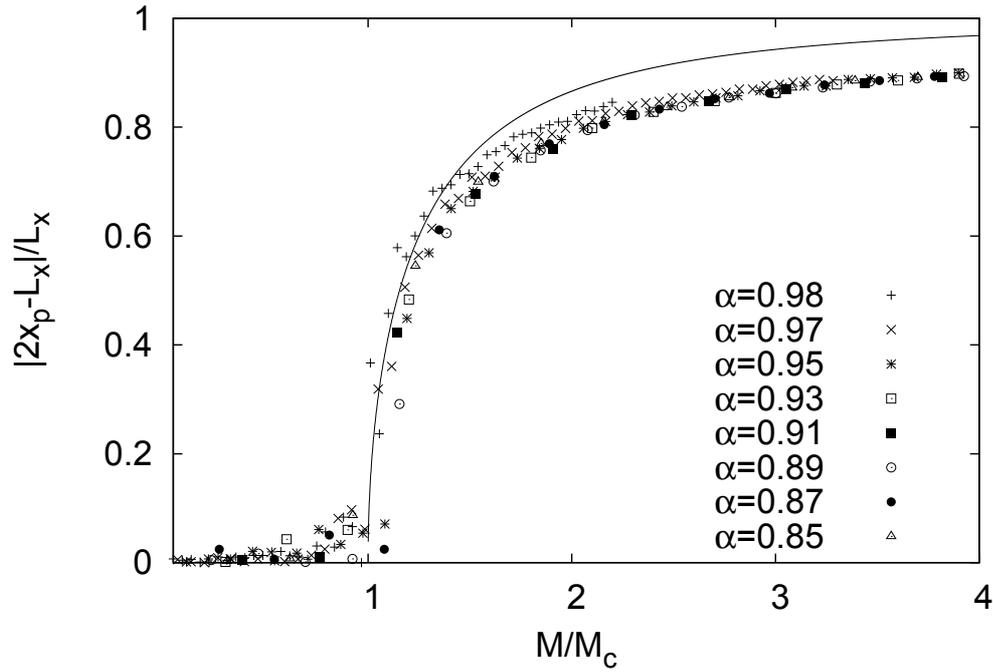


Figura 3.8: Diagrama de bifurcación que muestra el comportamiento crítico del sistema. Se representa el parámetro de desorden  $\epsilon$  definido en la ecuación (3.100) como función del parámetro de control  $M/M_c$ , donde  $M$  es la masa del pistón y  $M_c$  es la masa crítica que viene dada por la ecuación (3.81). Los símbolos son resultados de dinámica molecular y la línea es la predicción teórica, ecuación (3.101). Todos los resultados de simulación corresponden a un sistema con  $L_x = 2L_y = 100\sigma$  y  $2N = 200$ , de modo que  $n\sigma^2 = 0,04$ . Los distintos símbolos corresponden a distintos valores del coeficientes de restitución normal  $\alpha$ . Para el resto de parámetros fijos, se ha variado el cociente  $M/m$  con objeto de variar  $M/M_c$ .

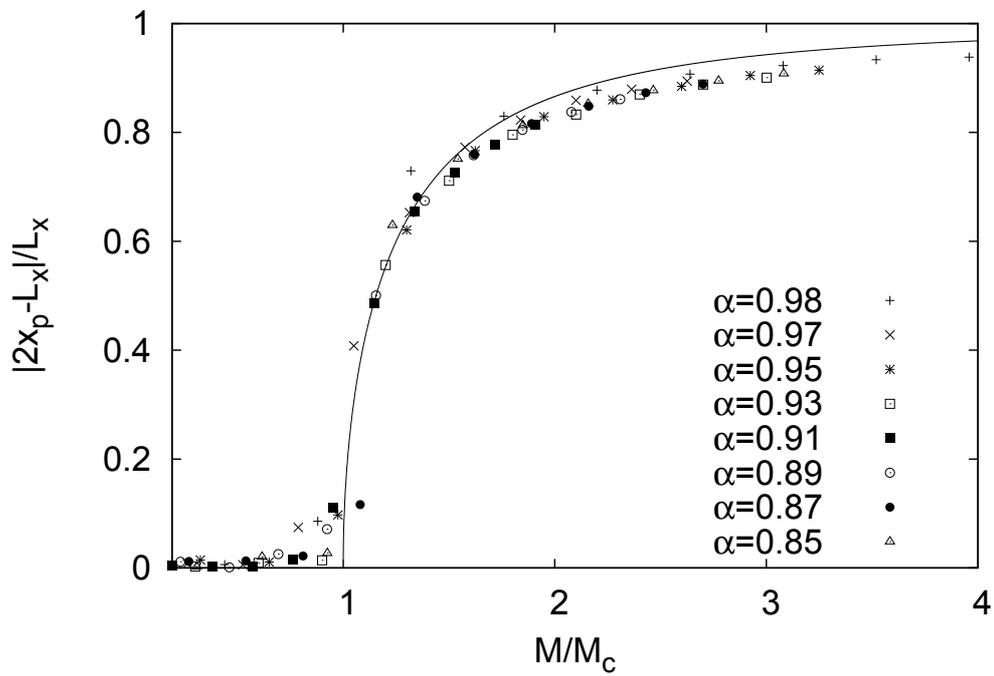


Figura 3.9: Como en la figura 3.8 excepto en las dimensiones del sistema que ahora son  $L_x = 4L_y = 200\sigma$ , por lo que  $n\sigma^2 = 0,02$ .

### 3.2.6. Discusión

La transición de fase o ruptura espontánea de simetría estudiada [6] guarda muchas similitudes con otros fenómenos observados en sistemas granulares fluidizados vibrados en presencia de gravedad [146, 147] y en ausencia de ella [7, 55]. Sin embargo, también hay diferencias importantes. Por ejemplo, el sistema estudiado está aislado y no alcanza un estado estacionario dado que no existe ningún mecanismo que compense la pérdida de energía de las colisiones. Los estados alcanzados están caracterizados porque la posición media del pistón es estacionaria. La condición que determina tales estados no requiere que la temperatura granular de los subsistemas sea la misma como ocurre en el caso elástico. En su lugar, lo que se iguala para los dos sistemas y el pistón es la velocidad de enfriamiento efectiva. Además, los dos gases tratan de mantenerse homogéneos en el *bulk*, a pesar de la existencia de los efectos de borde.

Cuando dos gases moleculares se ponen en contacto a través de un pistón adiabático móvil, el sistema alcanza un estado de equilibrio en el que las presiones de los gases son iguales y las temperaturas también. Si el mismo experimento se lleva a cabo con gases granulares, los resultados expuestos indican que el sistema se aproxima a un estado de enfriamiento ideal caracterizado por una única temperatura  $T_h(t)$  y en el que los gradientes pueden ser despreciados en cada subsistema.

Desde un punto de vista microscópico, los resultados obtenidos sugieren la siguiente propiedad de escala para la función de distribución del sistema

$$f(\Gamma, t) = [v(t)]^{-(2Nd+1)} f^* \left( \{\mathbf{r}_i\}, X, \left\{ \frac{\mathbf{v}_i}{v(t)} \right\}, \frac{V_x}{v(t)} \right), \quad (3.102)$$

donde  $\Gamma$  representa un punto del espacio de las fases del sistema,  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{v}_i$  ( $i = 1, \dots, 2N$ ) son la posición y la velocidad de la partícula  $i$ ,  $X$  y  $V_x$  es la posición y velocidad del pistón, y  $v(t) = (2T_h(t)/m)^{1/2}$ . La característica fundamental de este sistema es que toda dependencia temporal viene dada por una temperatura global  $T_h(t)$ . La función  $f^*$  tiene en cuenta que unas partículas permanecen a la izquierda del pistón y el resto a la derecha. Definiendo las temperaturas de los gases y el pistón a partir del segundo momento de la función de distribución de velocidades, la propiedad de escala (3.102) implica las siguientes igualdades

$$\frac{d \ln T_1(t)}{dt} = \frac{d \ln T_2(t)}{dt} = \frac{d \ln T_p(t)}{dt}, \quad (3.103)$$

es decir, las velocidades de enfriamiento de los gases y el pistón toman el mismo valor. Este es el resultado encontrado en el análisis teórico y en las

simulaciones de dinámica molecular. Una solución trivial de la anterior ecuación corresponde a  $T_1(t) = T_2(t) = T_p(t)$ , que es lo que pasa en equilibrio. Esto es consecuencia de que la función de distribución  $f$  puede factorizarse, en buena aproximación, en tres, para el gas a la izquierda, a la derecha y para el pistón. En el caso granular, sin embargo, las correlaciones de velocidad no pueden ser despreciadas y la función de distribución del sistema no puede factorizarse.

Como ya se comentara, la fenomenología anterior está relacionada con la de las mezclas granulares. En el estado de enfriamiento homogéneo para mezclas, las temperaturas de los componentes son diferentes pero las velocidades de enfriamiento coinciden [17, 148]. Esta condición determina todas las temperaturas parciales de los componentes del sistema en función de una única temperatura. Es más, un resultado similar se obtiene con gases vibrados en el sentido de que sólo se requiere una única temperatura para describir macroscópicamente la mezcla de gases granulares [132]. En este trabajo se ha extendido el resultado para un sistema en presencia de un pistón.

Como consecuencia directa del hecho de que la condición de coexistencia macroscópica sea la igualdad de velocidades de enfriamiento se tiene la existencia de una ruptura espontánea de simetría. El proceso puede ser bien entendido a partir de argumentos cinéticos cuyas predicciones teóricas están en acuerdo con los resultados de dinámica molecular.



## Capítulo 4

# Equilibrio y ruptura de simetría en un gas granular vibrado

El objetivo de este capítulo es estudiar el sistema formado por dos gases granulares, en general diferentes y separados por un pistón adiabático móvil. A diferencia de la situación considerada en el capítulo anterior, ahora se ha inyectado continuamente energía a los gases a través de las paredes, que vibran. La descripción que se propone desprecia los gradientes de los campos en el interior de cada subsistema y tiene en cuenta los flujos de energía a través de las paredes y del pistón. Los resultados teóricos y de simulación muestran que el sistema alcanza un estado estacionario en el que la temperatura de los gases en ambos recipientes y del pistón pueden ser muy diferentes.

Cuando los dos gases son iguales y se vibran todas las paredes del recipiente, el sistema exhibe una transición de fase de no equilibrio con ruptura espontánea de la simetría. Para ciertos valores de los parámetros, los dos subsistemas alcanzan un estado estacionario en el que las temperaturas y las densidades son iguales. Para otros valores de los parámetros, el estado que alcanza el sistema tiene temperaturas y densidades diferentes a ambos lados del pistón.

Identificando las escalas características del sistema, se determina la evolución de las magnitudes del sistema en las escalas más lentas. Esto permite estudiar la evolución del sistema hacia los estados estacionarios y, por tanto, determinar la estabilidad de los mismos.

En la siguiente sección se determinan los estados estacionarios del sistema con todas las paredes vibrantes para, posteriormente, estudiar la estabilidad. Se dedica una sección a la comparación de los resultados de dinámica molecular y teóricos. Finalmente, se hace una valoración de la aproximación realizada de despreciar los gradientes en el interior de cada subsistema y se cierra el capítulo con una discusión de los resultados obtenidos.

## 4.1. Estados estacionarios

Como en el capítulo anterior, el sistema es un recipiente cilíndrico de longitud  $L_x$  dividido en dos partes por un pistón adiabático que puede moverse a lo largo del eje de simetría del sistema, eje  $X$ , permaneciendo normal al mismo. Las dos partes contienen  $N_1$  y  $N_2$  esferas ( $d = 3$ ) o discos ( $d = 2$ ) duros lisos, respectivamente. El sistema está esquematizado en la figura 4.1. Para indicar propiedades de los subsistemas a izquierda y derecha del pistón, se usarán los subíndices  $i = 1$  e  $i = 2$ , respectivamente. Con esta notación, las partículas de cada compartimento tienen masa  $m_i$  y diámetro  $\sigma_i$ .

Las colisiones entre partículas son inelásticas y están caracterizadas por un coeficiente de restitución normal  $\alpha_i$ , con  $0 < \alpha_i \leq 1$ . Por otro lado, las colisiones entre las partículas y el pistón, así como las colisiones entre las partículas y las paredes, son elásticas. El pistón, de masa  $M$ , se mueve libremente entre las colisiones con las partículas de los dos gases despreciándose el posible rozamiento con las paredes.

Con objeto de reemplazar la energía disipada por las colisiones inelásticas, de manera que sea posible mantener el sistema fluidizado, se considera que las paredes vibran de forma continua. Más concretamente, el movimiento de las paredes es en diente de sierra de velocidad  $v_b$  y amplitud despreciable comparado con el recorrido libre medio del gas [143], tal como se describió en el capítulo 3, ecuaciones (3.1) y (3.2).

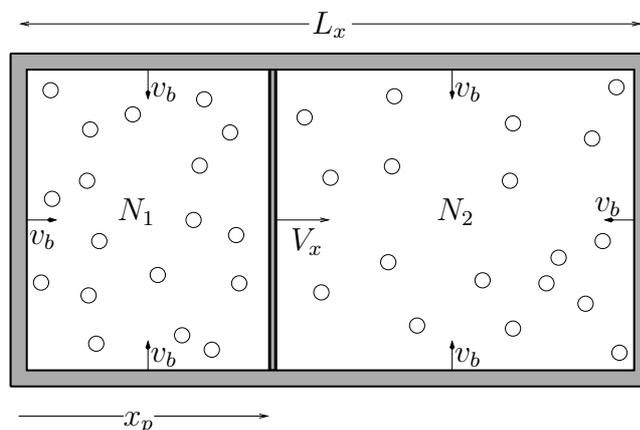


Figura 4.1: Dibujo esquemático del sistema estudiado. Las paredes del sistema vibran según un perfil en diente de sierra de amplitud despreciable y velocidad  $v_b$ .

Los estados estacionarios macroscópicos accesibles al sistema pueden determinarse resolviendo las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-

Stokes, revisadas en el capítulo 2, con las condiciones de contorno apropiadas en las paredes del sistema y en el pistón, capítulo 3. El hecho de que se inyecte energía a través de las paredes implica que los estados estacionarios del sistema son altamente inhomogéneos [144]. En lo que sigue, no obstante, se despreciarán los gradientes de los campos hidrodinámicas dentro de cada subsistema. Aunque de esta forma no se tiene una descripción exacta de los campos, se espera que sea suficiente para describir el comportamiento general del sistema, y, en particular, las que se refieren a las propiedades globales.

En los estados estacionarios, la posición media del pistón no cambia con el tiempo, lo que quiere decir que las fuerza neta sobre él debe ser cero. En la aproximación en la que los dos gases son homogéneos y diluidos, la condición de equilibrio mecánico del pistón se traduce en la igualdad de presiones,

$$p_1 = p_2 \Rightarrow n_1 T_1 = n_2 T_2, \quad (4.1)$$

donde  $n_i$  son las densidades numéricas de partículas en cada uno de los subsistemas y  $T_i$  las temperaturas. Nuevamente, se supone que la densidad de ambos gases permanece muy baja. Teniendo en cuenta que ambos gases se consideran homogéneos,

$$n_1 = \frac{N_1}{S_p x_p}, \quad n_2 = \frac{N_2}{S_p (L_x - x_p)}, \quad (4.2)$$

donde  $x_p$  es la posición media del pistón y  $S_p$  es su área ( $d = 3$ ) o su longitud ( $d = 2$ ).

Un balance de energía para cada subsistema lleva a la expresión

$$\frac{d}{2} N_i \zeta_i T_i - Q_{pi} S_p - Q_{wi} S_{wi} = 0. \quad (4.3)$$

El primer sumando de la ecuación es la ley de Haff [65] que da cuenta de la pérdida de energía de los granos causada por las colisiones inelásticas. El coeficiente  $\zeta_i$  es la velocidad de enfriamiento [69, 96] que viene dada por

$$\zeta_i = \frac{p \zeta^*(\alpha_i)}{\eta_{0i}(T_i)}. \quad (4.4)$$

La forma explícita de los coeficientes que aparecen en la expresión anterior se da en el apéndice A.

El segundo término del primer miembro de la ecuación (4.3) es la energía por unidad de tiempo inyectada por el pistón en el subsistema  $i$ . Este flujo de energía es consecuencia de las oscilaciones del pistón y dependen de su temperatura  $T_p$ . Ésta se define a partir del segundo momento de la distribución de velocidades del pistón, con

$$T_p \equiv M \langle V_x^2 \rangle, \quad (4.5)$$

donde  $V_x$  es la velocidad y los corchetes indican promedio estadístico. Como se vio en el capítulo 3 (ecuaciones (3.38) y (3.39)), para  $m_i/M \ll 1$  y  $T_p/T_i$  del orden de la unidad, es [6, 130]

$$Q_{pi} \simeq -2\sqrt{\frac{2m_i T_i - T_p}{\pi}} \frac{T_p}{M} n_i T_i^{1/2}. \quad (4.6)$$

Por último, el tercer sumando del primer miembro de la ecuación (4.3) es la energía por unidad de tiempo inyectada por las paredes vibrantes en el sistema. Para las paredes vibrantes con movimiento en diente de sierra [130] consideradas en este trabajo, se tiene, como se vio en el capítulo 3 (ecuación (3.13)),

$$Q_{wi} = pv_b. \quad (4.7)$$

La magnitud  $S_{wi}$  que aparece en la ecuación (4.3) es la sección (área o longitud) total de pared vibrante en contacto con el gas  $i$ . Por tanto, es una función de la posición del pistón,

$$\begin{aligned} S_{w1} &= S_p + \gamma x_p, \\ S_{w2} &= S_p + \gamma(L_x - x_p). \end{aligned} \quad (4.8)$$

El factor geométrico  $\gamma$  tiene dimensiones de longitud elevado a  $d - 2$ . Para un cilindro es  $\gamma = 2\sqrt{\pi S_p}$  y en dos dimensiones vale 2.

El balance de energía para el pistón para estados estacionarios se escribe

$$Q_{p1} + Q_{p2} = 0. \quad (4.9)$$

El sistema formado por las ecuaciones (4.1), (4.3) y (4.9) es un conjunto de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas,  $x_p, T_1, T_2$  y  $T_p$ . Antes de obtener las soluciones, es conveniente introducir algunas magnitudes adimensionales, definidas como

$$\begin{aligned} \theta_i &\equiv \frac{T_i}{mv_b^2}, \\ \theta_p &\equiv \frac{T_p}{mv_b^2}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

y

$$\begin{aligned} m &\equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \\ \sigma &\equiv \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Usando estas nuevas variables, el sistema de ecuaciones que determina los estados estacionarios en la aproximación uniforme que está siendo considerada se transforma en

$$a_i \theta_i + \frac{b_i}{2N_i d} (\theta_i - \theta_p) - c_i \theta_i^{1/2} = 0, \quad (i = 1, 2), \quad (4.12)$$

$$\rho (\theta_1 - \theta_p) + (\theta_2 - \theta_p) = 0, \quad (4.13)$$

$$\rho^2 \frac{m_2}{m_1} \theta_1 = \theta_2, \quad (4.14)$$

con

$$\begin{aligned} a_i &\equiv \frac{\pi^{d/2} \zeta^*(\alpha_i)}{\sqrt{2}(d+2)\Gamma(d/2)} \left(\frac{\sigma_i}{\sigma}\right)^{d-1} \left(\frac{m}{m_i}\right)^{1/2}, \\ b_i &\equiv \frac{(mm_i)^{1/2} S_p}{M\sigma^{d-1}}, \\ c_i &\equiv \frac{\sqrt{\pi} S_{wi}}{4\sqrt{2}d\sigma^{d-1} N_i}, \\ \rho &\equiv \left(\frac{m_1 n_1}{m_2 n_2}\right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Como antes, hay cuatro ecuaciones con cuatro variables,  $x_p, \theta_1, \theta_2$  y  $\theta_p$ . Estas ecuaciones son no lineales y, en general, no resolubles analíticamente. Puede observarse que las temperaturas de los dos gases pueden ser diferentes.

Con objeto de simplificar el análisis, es conveniente fijar algunos parámetros. Se considera en lo que resta del capítulo el caso en el que los dos gases son mecánicamente iguales.

## 4.2. Gases iguales a ambos lados del pistón

Se toman ahora las propiedades microscópicas de los dos gases iguales, o sea,

$$\begin{aligned} N &\equiv N_1 = N_2, \\ \alpha &\equiv \alpha_1 = \alpha_2, \\ \sigma &= \sigma_1 = \sigma_2, \\ m &= m_1 = m_2. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Consecuentemente, la definición de  $\rho$  dada en (4.15) se reduce a

$$\rho = \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^{1/2}. \quad (4.17)$$

Las relaciones anteriores junto con las ecuaciones (4.13) y (4.14) permiten expresar todas las propiedades del sistema en función de la temperatura de uno de los gases y de  $\rho$ ,

$$\rho = \left( \frac{L_x}{x_p} - 1 \right)^{1/2} = \left( \frac{\theta_2}{\theta_1} \right)^{1/2}, \quad (4.18)$$

$$\theta_p = \rho\theta_1 = (\theta_1\theta_2)^{1/2}. \quad (4.19)$$

Además, la ecuación (4.12) permite obtener, sin dificultad, una ecuación para  $\rho$ ,

$$(1 - \rho)(\rho^2 - \lambda\rho + 1) = 0, \quad (4.20)$$

con

$$\lambda \equiv \frac{2N\gamma L_x a d}{2S_p(Nad + b) + b\gamma L_x} \quad (4.21)$$

y

$$\begin{aligned} a &\equiv a_1 = a_2, \\ b &\equiv b_1 = b_2. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Por otra parte, usando los resultados precedentes, se tiene

$$\theta_1 = \frac{\pi}{32} \left[ \frac{2S_p + \gamma L_x}{aN\sigma^{d-1}d} \right]^2 \frac{1}{(1 + \rho)^2}. \quad (4.23)$$

Una vez resuelta la ecuación (4.20) para  $\rho$ , usando la ecuación (4.18) se determina la posición media del pistón, mediante las ecuaciones (4.23) y (4.18) la temperatura de los gases y finalmente la temperatura del pistón con ayuda de la relación (4.19).

La ecuación (4.20) tiene una solución simétrica,  $\rho = 1$ , es decir,  $n_1 = n_2$ ,  $x_p = L_x/2$ . Para ésta se obtiene, usando (4.13) y (4.14), que todas las temperaturas del sistema son iguales,  $\theta_1 = \theta_2 = \theta_p$ . Este estado conserva la simetría del sistema y la de los gases a los lados del pistón. Pero la ecuación (4.20) tiene también otras dos soluciones correspondientes a estados asimétricos en las que el pistón no ocupa la posición media del sistema, sino que

$$\rho_{\pm} = \frac{1}{2} \left( \lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4} \right). \quad (4.24)$$

Las soluciones  $\rho_+$  y  $\rho_- = \rho_+^{-1}$  se obtienen una de la otra intercambiando los dos gases. Dicho de otra forma, son una la imagen especular de la otra. Para que estos estados asimétricos existan es necesario que el parámetro  $\lambda$  definido en (4.21) sea mayor que 2. En tal caso, según las ecuaciones (4.13) y (4.14), las temperaturas de los dos gases son diferentes entre sí y también diferentes de la del pistón.

### 4.3. Dinámica cerca de los estados estacionarios

El sistema de ecuaciones que gobierna la evolución del sistema en la aproximación uniforme es el formado por las ecuaciones en (3.41) y (3.44), con términos adicionales que dan cuenta del flujo de energía inyectado por las paredes laterales vibrantes, es decir,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{2}N\frac{dT_1}{dt} &= -\frac{d}{2}N\zeta_1T_1 + Q_{p1}S_p + Q_{w1}S_{w1} - p_1S_p v_p, \\
\frac{d}{2}N\frac{dT_2}{dt} &= -\frac{d}{2}N\zeta_2T_2 + Q_{p2}S_p + Q_{w2}S_{w2} + p_2S_p v_p, \\
\frac{1}{2}\frac{dT_p}{dt} &= -(Q_{p1} + Q_{p2})S_p, \\
M\frac{d^2x_p}{dt^2} &= (p_1 - p_2)S_p.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Todas las magnitudes han sido definidas en la sección anterior excepto  $v_p$  que es la velocidad media (macroscópica) del pistón.

De nuevo, es conveniente introducir variables adimensionales. Se define una nueva escala de tiempos mediante

$$ds \equiv 8\sqrt{2n\sigma}^{d-1} \sqrt{\frac{p(t)}{\pi m}} dt, \tag{4.26}$$

donde  $n$  es la densidad media del sistema y  $p$  es el valor medio de la presión en ambos compartimentos,

$$\begin{aligned}
n &\equiv \frac{2N}{L_x S_p}, \\
p &\equiv \frac{p_1 + p_2}{2}.
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Parámetros adimensionales de temperatura para los gases y el pistón se definen como en la ecuación (4.10). A partir de la densidad media del sistema, se define un parámetro de temperatura adimensional global mediante

$$\theta \equiv \frac{p}{nmv_b^2}. \tag{4.28}$$

Se utilizará además la notación

$$\begin{aligned}
l &\equiv \frac{x_p}{L_x}, \\
\omega &\equiv \frac{v_p}{v_b}.
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Usando las nuevas variables en el sistema (4.25) se obtiene

$$\frac{d\theta_1}{ds} = \left[ -a\theta_1 - \frac{b}{2Nd}(\theta_1 - \theta_p) + c_1\sqrt{\theta_1} - \frac{\sqrt{2\pi}S_p}{8dN\sigma^{d-1}}\sqrt{\theta_1}\omega \right] \frac{n_1}{n} \sqrt{\frac{\theta_1}{\theta}}, \quad (4.30)$$

$$\frac{d\theta_2}{ds} = \left[ -a\theta_2 - \frac{b}{2Nd}(\theta_2 - \theta_p) + c_2\sqrt{\theta_2} + \frac{\sqrt{2\pi}S_p}{8dN\sigma^{d-1}}\sqrt{\theta_2}\omega \right] \frac{n_2}{n} \sqrt{\frac{\theta_2}{\theta}}, \quad (4.31)$$

$$\frac{d\theta_p}{ds} = \left[ n_1\sqrt{\theta_1}(\theta_1 - \theta_p) + n_2\sqrt{\theta_2}(\theta_2 - \theta_p) \right] \frac{b}{2n} \frac{1}{\sqrt{\theta}}, \quad (4.32)$$

$$\frac{d^2l}{ds^2} = \frac{\pi m S_p}{2^7 M n \sigma^{2(d-1)} L_x} (n_1\theta_1 - n_2\theta_2) \frac{1}{n\theta}. \quad (4.33)$$

Si se restringe el análisis a las soluciones del sistema anterior *próximas* a las estacionarias, se tienen las siguientes estimaciones

$$\begin{aligned} \theta_p &\sim \theta_1 \sim \theta_2 \sim \theta \sim (c/a)^2, \\ c_1 &\sim c_2 \sim c, \\ a &\sim b/N. \end{aligned} \quad (4.34)$$

El nuevo parámetro  $c$  es del orden de  $c_1$  y  $c_2$ . Usando las relaciones anteriores en cualquiera de las dos ecuaciones, (4.30) o (4.31), se tiene la siguiente estimación para el tiempo típico de evolución de las temperaturas parciales

$$s_\theta \sim a^{-1}(1 + \omega)^{-1}. \quad (4.35)$$

Admitiendo que  $\omega$  es a lo sumo del orden de la unidad, lo cual es de esperar que sea cierto suficientemente cerca de las soluciones estacionarias, resulta

$$s_\theta \sim a^{-1}. \quad (4.36)$$

Procediendo de idéntica forma con (4.32) y (4.33), se identifican las escalas típicas de evolución de la temperatura del pistón  $s_{\theta_p}$  y de la posición del pistón  $s_l$ ,

$$\begin{aligned} s_{\theta_p} &\sim s_\theta/N, \\ s_l &\sim s_\theta/\sqrt{NM/m}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Las estimaciones anteriores implican una clara separación de escalas. Las temperaturas de los gases evolucionan más lentamente que la temperatura y posición del pistón. Este hecho permite, usando las ecuaciones (4.32) y (4.33), deducir las siguientes relaciones válidas en las escalas temporales lentas,

$$n_1\theta_1 \simeq n_2\theta_2 \simeq n\theta, \quad (4.38)$$

$$\theta_p \simeq \sqrt{\theta_1\theta_2}. \quad (4.39)$$

De esta forma, toda la dependencia temporal de las magnitudes del pistón ocurre a través de la dependencia en las temperaturas de los gases. En particular, la velocidad del pistón también depende del tiempo a través de  $\theta_1$  y  $\theta_2$ ,

$$\omega = \frac{1}{v_b} \frac{dx_p}{dt} \simeq -8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} n \sigma^{d-1} L_x \frac{\sqrt{\theta}}{(1+\rho^2)^2} \frac{d\rho^2}{ds}. \quad (4.40)$$

Las ecuaciones (4.30) y (4.31) con las relaciones anteriores resultan

$$\frac{d}{ds} \theta_1 = \left[ -a\theta_1 - \frac{b}{2dN} (1-\rho)\theta_1 + c_1 \sqrt{\theta_1} \right] \sqrt{\frac{1+\rho^2}{2}} + \frac{2\theta_1}{d(1+\rho^2)} \frac{d\rho^2}{ds}, \quad (4.41)$$

$$\frac{d}{ds} \theta_2 = \left[ -a\theta_2 - \frac{b}{2dN} (1-\rho)\theta_2 + c_2 \sqrt{\theta_2} \right] \sqrt{\frac{1+\rho^2}{2}} - \frac{2\theta_2}{d(1+\rho^2)} \frac{d\rho^2}{ds}, \quad (4.42)$$

donde  $c_1$  y  $c_2$  son funciones de  $\rho$ , dados por

$$c_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{2}} \frac{S_p + \gamma L_x (1+\rho^2)^{-1}}{dN \sigma^{d-1}}, \quad (4.43)$$

$$c_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{2}} \frac{S_p + \gamma L_x \rho^2 (1+\rho^2)^{-1}}{dN \sigma^{d-1}}. \quad (4.44)$$

Como  $\theta_2 = \rho^2 \theta_1$  en la escala considerada, el sistema formado por las ecuaciones (4.41) y (4.42) puede expresarse en función de  $\theta_1$  y  $\rho$ . Una solución analítica del sistema resultante no es posible, pero sí la determinación para tiempos grandes.

Sumando las ecuaciones (4.41) y (4.42), y usando que  $\theta_2 = \rho^2 \theta_1$ , se tiene

$$\frac{d}{ds} [(1+\rho^2)\theta_1] = \left[ -a(1+\rho)\sqrt{\theta_1} + (c_1 + c_2) \right] \sqrt{\frac{1+\rho^2}{2}} \sqrt{\theta_1}. \quad (4.45)$$

Además, de (4.43) y (4.44),

$$c_1 + c_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{2}} \frac{S_p + \gamma L_x}{dN \sigma^{d-1}}. \quad (4.46)$$

El segundo miembro de la ecuación anterior es independiente de  $\rho$ . Por lo tanto,

$$\frac{d}{ds} [(1+\rho^2)\theta_1] = -a \frac{1+\rho}{\sqrt{2(1+\rho^2)}} \left[ (1+\rho^2)\theta_1 - \gamma(s) \sqrt{(1+\rho^2)\theta_1} \right], \quad (4.47)$$

con

$$\gamma(s) \equiv \frac{c_1 + c_2}{a} \frac{\sqrt{1+\rho^2(s)}}{1+\rho(s)} > 0. \quad (4.48)$$

La relación (4.47) sería una ecuación sólo de la variable  $(1+\rho^2)\theta_1$  si ni el factor que multiplica al corchete en el segundo miembro ni  $\gamma$  dependieran de  $\rho$ . Pero el factor que multiplica al corchete se puede eliminar redefiniendo la variable temporal, ya que tiene signo definido. Por otra parte, la dependencia temporal de  $\gamma$  a través de  $\rho$  no es relevante en la determinación del comportamiento de la solución para tiempos grandes.

Por todo lo dicho, la ecuación (4.47) tiene un único punto crítico estable en el que

$$\frac{d}{ds} [(1+\rho^2)\theta_1] = 0 \quad (4.49)$$

y

$$\left[ (1+\rho^2)\theta_1 - \gamma(s)\sqrt{(1+\rho^2)\theta_1} \right] = 0, \quad (4.50)$$

es decir,

$$\theta_1 = \frac{\pi}{32} \left( \frac{2S_p + \gamma L_x}{aN\sigma^{d-1}d} \right)^2 \frac{1}{(1+\rho^2)}. \quad (4.51)$$

Esta relación es la del estado estacionario, obtenida anteriormente (ecuación (4.23)). Es decir, el sistema siempre alcanza un estado estacionario, al menos para condiciones iniciales suficientemente cercanas a los valores que describen los estados estacionarios.

Para terminar de completar el análisis sería deseable deducir una ecuación para  $\rho$ . Sin embargo, esto parece no ser posible. Para tiempos suficientemente grandes, no obstante, se verifica la ecuación (4.51) que relaciona  $\theta_1$  y  $\rho$ . Dicha relación, usada en cualquiera de las dos ecuaciones (4.41) y (4.41), proporciona una ecuación para  $\rho$  válida para tiempos suficientemente grandes. Tras algunas operaciones, se tiene

$$\frac{d}{ds} \ln \rho = -\frac{b}{4N(d+2)} \left( \frac{1+\rho^2}{2} \right)^{1/2} \frac{1-\rho}{\rho^2} [\lambda\rho - (1+\rho^2)], \quad (4.52)$$

con el parámetro  $\lambda$  definido en (4.21).

Véase que la ecuación anterior coincide con la ecuación (3.96), del capítulo anterior, haciendo el intercambio

$$\frac{2Nda}{b} = 2\frac{M}{M_c} \leftrightarrow \lambda,$$

por lo que todo lo dicho en el capítulo anterior es aplicable ahora. Por ello, la ecuación (4.52) tiene un único punto crítico estable en  $\rho = 1$  para  $\lambda < 2$  que corresponde a la solución estacionaria simétrica. Para  $\lambda > 2$  el punto crítico anterior se vuelve inestable. Además, aparecen dos nuevos puntos estable que corresponden a los dos valores  $\rho = \rho_{\pm}$ , que se identifican con las soluciones estacionarias asimétricas.

## 4.4. Dinámica molecular

Con objeto de contrastar las predicciones teóricas de los apartados anteriores, se ha simulado un sistema rectangular de longitud  $L_x$  y anchura  $L_y$  con dos gases constituidos por partículas con las mismas propiedades mecánicas. La anchura del sistema  $L_y$  coincide con la sección del pistón  $S_p$ . En todos los casos considerados, el número total de discos es  $2N = 200$ , la distribución espacial inicial del sistema es homogénea, la posición inicial del pistón es  $L_x/2$  y su velocidad nula. Además, la distribución inicial de velocidades de los dos gases es gaussiana con el mismo parámetro de temperatura granular. Los parámetros del sistema han sido escogidos de tal forma que los dos gases inicialmente están en el límite diluido.

Para valores pequeños del parámetro  $\lambda$ , definido en la ecuación (4.21), se ha observado que el pistón oscila en torno a la posición central del sistema. Sin embargo, cuando  $\lambda$  es mayor que 2, la posición media del pistón es diferente de  $L_x/2$ . La simetría espacial del sistema se rompe para  $\lambda > 2$ .

En la figura 4.2 se representa  $\epsilon = |2x_p/L_x - 1|$ , una magnitud que da cuenta de la simetría del sistema, como función de  $\lambda$  para un sistema con  $L_x = 2L_y = 133\sigma$ , con lo que la densidad inicial es  $n = 0,02\sigma^{-2}$ . La predicción teórica para  $\epsilon$  es

$$\epsilon \equiv \frac{|2x_p - L_x|}{L_x} = \frac{|1 - \rho^2|}{\rho^2 + 1}. \quad (4.53)$$

Se han tomado distintos valores del coeficiente de restitución normal  $\alpha$ , para los que  $\lambda$  se ha variado cambiando el cociente entre la masa del pistón y el de las partículas  $M/m$ .

El acuerdo entre teoría y simulación es bueno. La predicción teórica del punto crítico coincide con los datos medidos en las simulaciones. Se observan, sin embargo, discrepancias cuando la densidad de uno de los dos sistemas aumenta, ya que en tal caso el límite diluido deja de proporcionar una buena descripción del sistema y son necesarias, por ejemplo, correcciones a la ecuación de estado del gas que no han sido tenidas en cuenta.

Las discrepancias entre teoría y simulación para valores de  $\lambda$  grandes en la figura 4.2 ( $n\sigma^2 = 0,02$ ) son menores que los de la figura 4.3 ( $n\sigma^2 = 0,04$ ), clara indicación de que uno de los orígenes de las discrepancias es el aumento de la densidad.

Finalmente, se ha observado que para  $\lambda < 2$ , con independencia de las dimensiones del sistema, nunca se rompe la simetría, es decir, la posición media del pistón siempre es la central.

También se han medido los perfiles de densidad y temperatura. Para ello, el sistema ha sido dividido en 20 celdas verticales de la misma anchura en

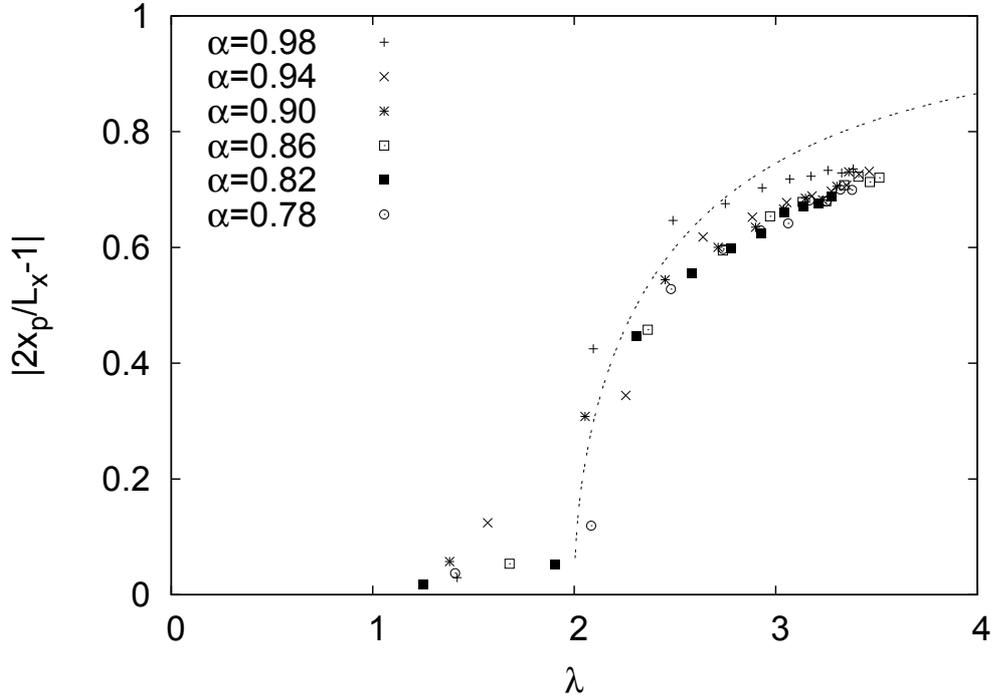


Figura 4.2: Diagrama de bifurcaciones en el que se representa la magnitud  $|2x_p/L_x - 1|$ , como medida de la simetría del sistema, como función del parámetro de control adimensional  $\lambda$  definido en la ecuación (4.21). Los símbolos son resultados de dinámica molecular y la línea discontinua la predicción teórica dada por la ecuación (4.24) para  $\rho = \rho_+$ . Los parámetros del sistema son  $L_x = 2L_y = 133\sigma$  y  $2N = 200$ , es decir,  $n\sigma^2 = 0,02$ . Los distintos símbolos corresponden a distintos valores de  $\alpha$ . Los valores de  $\lambda$  han sido modificados variando el cociente de masas  $M/m$  para los distintos valores de  $\alpha$ .

las que se han medido, una vez el sistema alcanza el estado estacionario, la densidad y la temperatura promediando temporalmente y en trayectorias.

En la figura 4.4, por ejemplo, se muestran los perfiles de densidad y temperatura  $n(x)$  y  $T(x)$ , para un sistema con  $L_x = 2L_y = 100\sigma$ ,  $\alpha = 0,99$  y  $M = 150m$ . Para los valores anteriores,  $\lambda \simeq 2,1$  y la predicción teórica para la posición media del pistón es  $x_p \simeq 0,65L_x$ . Se observa que, excepto en las proximidades de las paredes y del pistón, los gradientes pueden ser despreciados aunque existen diferencias manifiestas entre las densidades y temperaturas de los dos gases.

Otras cantidades predichas por la teoría son las temperaturas adimensionales y, en particular, sus cocientes:  $T_2/T_1 = \theta_2/\theta_1$  y  $T_p/T_1 = \theta_p/\theta_1$ , dadas

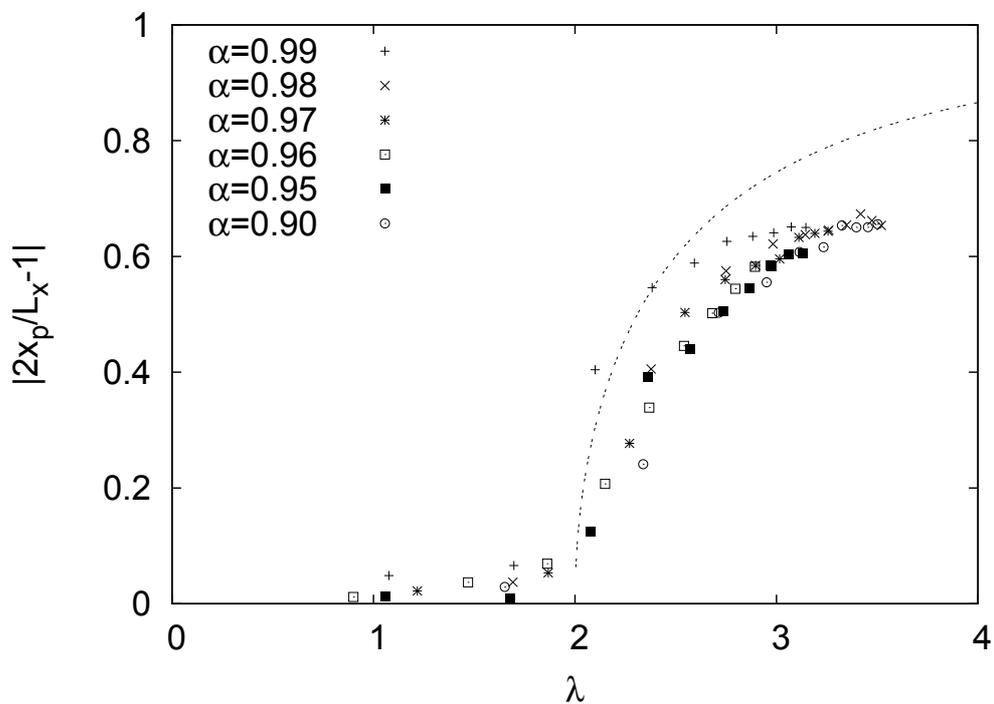


Figura 4.3: Lo mismo que en la figura 4.2 pero con  $L_x = 2L_y = 100\sigma$  y, por tanto,  $n\sigma^2 = 0,04$ .

por las ecuaciones (4.13), (4.14) y (4.19), respectivamente. En la gráfica 4.5, las expresiones anteriores son comparadas con los resultados de simulación para un sistema con  $L_x = L_y = 100\sigma$ . En la situación asimétrica, las temperaturas han sido medidas eliminando las capas límites de las paredes y el pistón. La comparación es satisfactoria, permitiendo nuevamente manifestar la bondad de la aproximación utilizada.

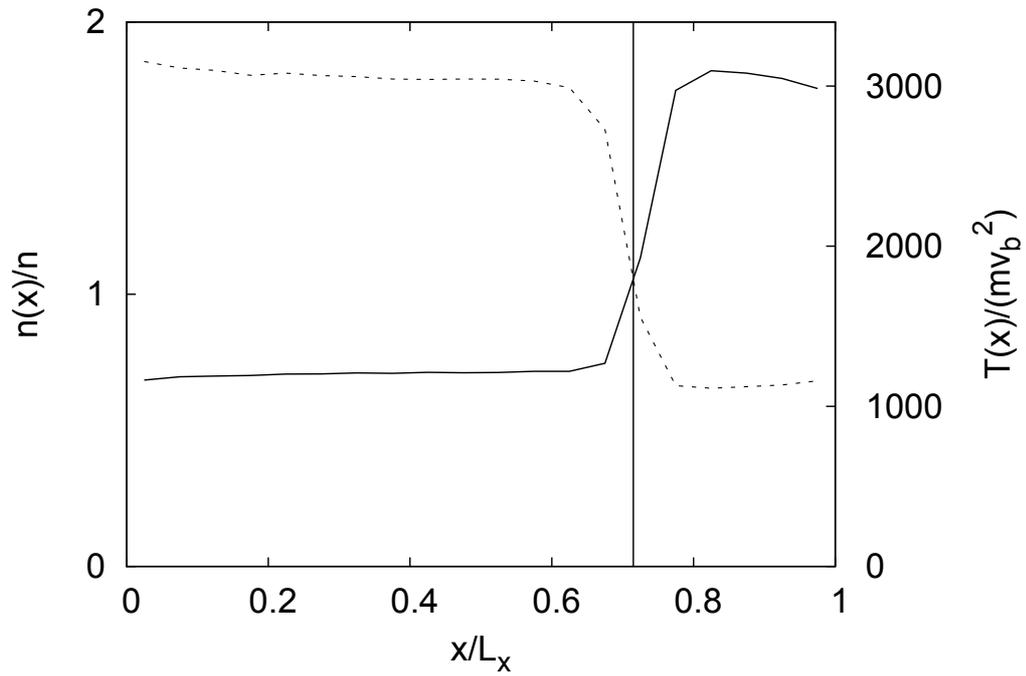


Figura 4.4: Densidad de partículas entre la densidad media  $n(x)/n$ ,  $n = 2N/L_x L_y$ , (línea continua y eje vertical izquierdo) y temperatura adimensional  $\theta(x) = T(x)/mv_b^2$  (línea a trazos y eje vertical derecho) a lo largo de la dirección horizontal del sistema para un sistema con  $L_x = 2L_y = 100\sigma$ ,  $\alpha = 0,99$  y  $M = 150m$ . La línea vertical indica la posición media medida del pistón.

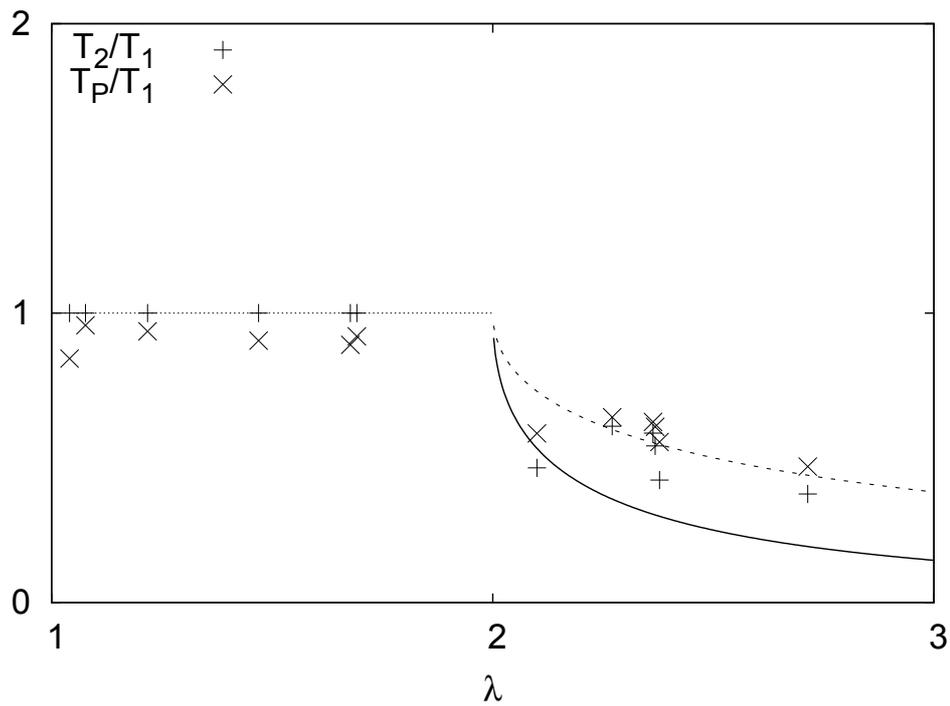


Figura 4.5: Cociente de temperaturas de los gases a los lados del pistón  $T_2/T_1$  (línea continua y símbolos '+') y cociente entre la temperatura del pistón y la del gas a uno de los lados  $T_p/T_1$  (línea a trazos y símbolos 'x'), como función del parámetro  $\lambda$  definido en la ecuación (4.21). Las líneas son la predicción teórica y los símbolos provienen de las medidas de simulación de dinámica molecular. El tamaño del sistema es  $L_x = 2L_y = 100\sigma$ .

## 4.5. Sobre la bondad de la aproximación uniforme

La imposibilidad de resolver analíticamente el problema hidrodinámico, es decir, las ecuaciones de Navier-Stokes con las correspondientes condiciones iniciales y de contorno, para los sistemas estudiados en las secciones anteriores, ha motivado la utilización de la aproximación uniforme, en la que se desprecian los gradientes en los subsistemas a los lados del pistón. Para determinar los perfiles hidrodinámicos en el sistema del capítulo 3, por ejemplo, puede comprobarse sin dificultad que es necesario resolver una ecuación de la forma

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x) = y(x) - y^2(x). \quad (4.54)$$

El objetivo de esta sección es hacer una comparación cualitativa de dos descripciones teóricas diferentes, la que resulta de resolver exactamente las ecuaciones hidrodinámicas, y la que hace uso de la aproximación uniforme. Se considera, para ello, un sistema como el de la figura 4.1, pero en el que se vibran sólo las paredes paralelas al pistón (ver figura 4.6). La razón de elegir este sistema es que, a diferencia de lo que ocurre con los sistemas ya estudiados, su descripción hidrodinámica es más sencilla.

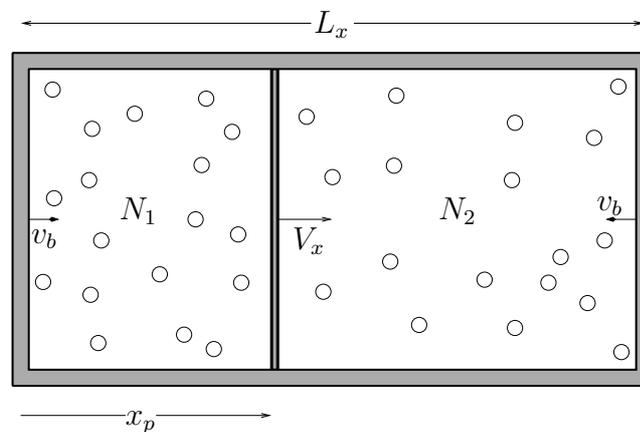


Figura 4.6: Dibujo esquemático del sistema estudiado. Las paredes verticales del sistema vibran según un perfil en diente de sierra de amplitud despreciable y velocidad  $v_b$ .

Se van a estudiar los estados estacionarios del sistema de la figura 4.6 usando la aproximación uniforme, en primer lugar, y resolviendo las ecuaciones hidrodinámicas, en segundo lugar. Se usará el mismo convenio de índices,

es decir, 1 para magnitudes del subsistema a la izquierda del pistón y 2 para el de la derecha.

### 4.5.1. Aproximación uniforme

En la aproximación uniforme, se desprecian los gradientes en cada subsistema. Las ecuaciones necesarias para determinar los estados estacionarios del sistema son las mismas que para el sistema con todas las paredes vibrantes, pero ahora

$$S_{w1} = S_{w2} = S_p, \quad (4.55)$$

porque sólo las paredes verticales son vibrantes y, por tanto,

$$c_i \equiv \frac{\sqrt{\pi} S_p}{4\sqrt{2} d \sigma^{d-1} N_i}. \quad (4.56)$$

Como el resto de parámetros y magnitudes tienen la misma definición, los balances mecánico y energético para los subsistemas y el pistón conducen a las mismas ecuaciones que en el caso en el que se vibran todas las paredes

$$a_i \theta_i + \frac{b_i}{2N_i d} (\theta_i - \theta_p) - c_i \theta_i^{1/2} = 0, \quad (i = 1, 2), \quad (4.57)$$

$$\rho (\theta_1 - \theta_p) + (\theta_2 - \theta_p) = 0, \quad (4.58)$$

$$\rho^2 \frac{m_2}{m_1} \theta_1 = \theta_2. \quad (4.59)$$

En este caso, las constantes  $c_i$  no dependen de la posición media del pistón.

Usando la ecuación (4.59) en (4.58),

$$\theta_p = \frac{c_m + \Lambda}{c_m \Lambda + 1} (\theta_1 \theta_2)^{1/2}, \quad (4.60)$$

donde

$$c_m \equiv \left( \frac{m_1}{m_2} \right)^{1/2}, \quad (4.61)$$

$$\Lambda \equiv \left( \frac{\theta_2}{\theta_1} \right)^{1/2}.$$

Con la relación (4.60), las ecuaciones en (4.57) resultan

$$a_1 + \frac{b_1}{2N_1 d} \left( 1 - \frac{c_m + \Lambda}{c_m \Lambda + 1} \Lambda \right) - c_1 \theta_1^{-1/2} = 0, \quad (4.62)$$

$$a_2 + \frac{b_2}{2N_2 d} \left( 1 - \frac{c_m + \Lambda}{c_m \Lambda + 1} \Lambda \right) - c_2 \theta_2^{-1/2} = 0.$$

Operando con las dos ecuaciones anteriores, se llega a

$$\Lambda^2 - c_{\Lambda,1}\Lambda - c_{\Lambda,2} = 0, \quad (4.63)$$

en la que se han definido dos constantes nuevas,

$$\begin{aligned} c_{\Lambda,1} &\equiv \frac{c_m a_1 - \frac{a_2 c_1}{c_2}}{c_m \frac{a_2 c_1}{c_2} + \frac{b_1}{2N_1 d} + c_m \frac{b_2}{2N_2 d}}, \\ c_{\Lambda,2} &\equiv \frac{a_1 + \frac{b_1}{2N_1 d} + c_m \frac{b_2}{2N_2 d}}{c_m \frac{a_2 c_1}{c_2} + \frac{b_1}{2N_1 d} + c_m \frac{b_2}{2N_2 d}}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Como la constante  $c_{\Lambda,2}$  es positiva, la ecuación (4.63) tiene dos soluciones reales, una positiva y otra negativa (que no tiene sentido físico). Por tanto, fijados los parámetros del sistema el cociente de temperaturas y la posición media del pistón están determinados unívocamente.

En el caso particular de que los dos gases sean iguales, las soluciones de (4.63) son

$$\Lambda = \pm 1. \quad (4.65)$$

Para la solución positiva, con sentido físico, las temperaturas son iguales, es decir, sólo existe una solución estacionaria simétrica en la que las propiedades de los dos gases son iguales. La aproximación uniforme no predice ninguna ruptura de simetría del sistema.

### 4.5.2. Análisis hidrodinámico

Se usarán las ecuaciones hidrodinámicas en el orden de Navier-Stokes para determinar los campos hidrodinámicos de los dos subsistemas en los estados estacionarios. Para ello, será necesario especificar unas condiciones de contorno. Tal como se discutió en el capítulo 2, una forma consistente de hacerlo es haciendo que los flujos de Navier-Stokes coincidan con los obtenidos usando descripciones cinéticas del pistón y de los gases.

Así pues, se consideran soluciones estacionarias de las ecuaciones hidrodinámicas (2.8)-(2.10) con campo de velocidades nulo  $\mathbf{u}_i = 0$  y con gradientes sólo a largo del eje  $X$ . Para el tensor de presiones  $P$  y el flujo de calor  $\mathbf{q}$ , se usarán superíndices para indicar a qué recinto del gas se refieren. Para los estados considerados, se tienen las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} P_{jx}^{(i)} &= 0; \quad (i = 1, 2), \\ 2(dn_i)^{-1} \frac{d}{dx} q_x^{(i)} + T_i \zeta_i &= 0; \quad (i = 1, 2). \end{aligned} \quad (4.66)$$

donde

$$\begin{aligned} P_{jk}^{(i)} &= n_i T_i \delta_{jk}, \\ \mathbf{q}^{(i)} &= - \left( \kappa_i \frac{d}{dx} T_i + \mu_i \frac{d}{dx} n_i \right) \widehat{\mathbf{x}}, \\ \zeta_i &= \zeta_i^* \frac{n_i T_i}{\eta_{0i}}. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Las expresiones anteriores se han obtenido de las ecuaciones (2.13), deducidas en el capítulo 2, teniendo en cuenta la simetría de la solución buscada. En la expresión del flujo de calor  $\mathbf{q}^{(i)}$ ,  $\widehat{\mathbf{x}}$  es un vector unitario en la dirección del eje  $X$ . Los coeficientes  $\kappa_i$ ,  $\mu_i$ ,  $\zeta_i^*$  y  $\eta_{0i}$  se dan en el apéndice A.

Usando (4.67) en (4.66) y las relaciones en el apéndice A, se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}(n_i T_i) &= 0, \\ \frac{2}{dn_i} (\kappa_i^* - \mu_i^*) \frac{d}{dx} \left( \kappa_{0i} \frac{dT_i}{dx} \right) - \zeta_i^* \frac{n_i T_i^2}{\eta_{0i}} &= 0, \end{aligned} \quad (4.68)$$

La primera ecuación indica que la presión en cada subsistema es uniforme. Usando este hecho en la segunda de las ecuaciones anteriores, se llega a

$$\frac{d^2}{dl_i^2} T_i(l_i)^{1/2} = T_i(l_i)^{1/2}; \quad (i = 1, 2). \quad (4.69)$$

Las variables  $l_1$  y  $l_2$ , definidas en el apéndice D, son adimensionales y proporcionales al recorrido libre medio, medido desde la pared vertical izquierda para el subsistema 1, y desde la pared vertical derecha para el subsistema 2.

La solución general de la ecuación (4.69) es

$$T_i(l_i)^{1/2} = A_i e^{-l_i} + B_i e^{l_i}; \quad (i = 1, 2), \quad (4.70)$$

donde  $A_i$  y  $B_i$  son constantes de integración que hay que determinar con unas condiciones de contorno.

Al igual que se hiciera en el caso de la aproximación uniforme, para especificar las condiciones de contorno, se usarán los balances mecánico y térmico para el pistón. Para los estados estacionarios, la posición media del pistón no cambia con el tiempo, en consecuencia, las presiones de los gases coinciden,

$$n_1 T_1 = n_2 T_2 \equiv p. \quad (4.71)$$

Además, la energía media del pistón no cambia con el tiempo, por lo que

$$Q_{p1} + Q_{p2} = 0. \quad (4.72)$$

La relación anterior, permite relacionar la temperatura del pistón con la de los gases con la que está en contacto (ver apéndice D).

A las relaciones anteriores hay que añadir las condiciones de contorno que surgen al relacionar, convenientemente, los valores de  $q^{(i)}$  en las paredes y el pistón con  $Q_{W_i}$  y  $Q_{pi}$ , respectivamente. Esta forma de proceder es más directa que la del trabajo [144], en el que se estudia un sistema en contacto con un única pared vibrante y el resto reflectantes; y donde el valor que se impone en las cercanías de las paredes vibrantes es, en primera instancia, el de la temperatura, determinándose ésta a posteriori, a través de un balance de energía en el que se tiene en cuenta el flujo de energía inyectado por la pared vibrante.

De la igualdad de flujos en las paredes vibrantes, se tiene

$$q_x^{(i)}(l_i = 0) = pv_b, \quad (4.73)$$

y para los flujos en la posición del pistón,

$$q_x^{(i)}(l_{im}) = -Q_{pi}. \quad (4.74)$$

En el apéndice D, se describe una forma de obtener las constantes  $A_i$  y  $B_i$  a partir de la solución numérica de una ecuación no lineal para la temperatura del pistón, obtenida usando las condiciones de contorno.

Prescindiendo de un análisis más detallado, que puede consultarse en el apéndice D, se puede asegurar que a cada conjunto de valores de los parámetros del sistema le corresponde una única configuración, una única distribución de temperaturas y de densidades. Por tanto, desde este punto de vista cualitativo, el análisis hidrodinámico exacto coincide con la de la aproximación uniforme.

Si los dos gases son iguales, es fácil ver que los perfiles de temperatura, en las variables  $l_i$ , coinciden. La configuración del sistema es siempre simétrica. La predicción, por tanto, para la posición media del pistón coincide con la hecha en el apartado anterior con la aproximación uniforme.

En resumen, la determinación analítica de los perfiles de densidad y temperatura de dos gases granulares separados por un pistón adiabático es un problema muy complejo incluso en el caso más sencillo que se puede considerar. Sin embargo, para los problemas estudiados se ha comprobado, tanto teóricamente como mediante simulación de dinámica molecular, que la aproximación uniforme resulta satisfactoria, al menos si se está interesado en determinar el comportamiento crítico del sistema.

## 4.6. Discusión

El sistema formado por dos gases granulares iguales, separados por un pistón adiabático y en el que se vibran todas sus paredes [7], presenta una transición de fase de no equilibrio, similar a la estudiada en el capítulo 3 cuando los gases evolucionan libremente. Una descripción macroscópica en la que se desprecian los gradientes en cada subsistema y completada con expresiones cinéticas de los flujos a través de las paredes vibrantes y el pistón, es suficiente para caracterizar la transición.

Los resultados de simulación muestran que, tanto el sistema del figura 4.1 como el de la figura 4.6, alcanzan un estado estacionario en el que la posición media del pistón no cambia con el tiempo. En el primero de los casos, este comportamiento se ha predicho analizando la evolución temporal de los campos de los gases y de la posición y temperatura del pistón para valores de los parámetros del sistema y condiciones iniciales para las que las soluciones son próximas a las estacionarias.

La dinámica de los sistemas estudiados está caracterizada por dos escalas temporales diferentes. La posición y temperatura del pistón cambian rápidamente a una situación en la que se establece la igualdad de presiones entre los gases y, cuando los dos subsistemas son iguales, la temperatura del pistón es la raíz cuadrada del producto de las temperaturas de los gases,  $T_p \simeq \sqrt{T_1 T_2}$ . En la segunda etapa, la evolución es más lenta que en la primera y toda la dependencia temporal de las magnitudes del pistón pueden expresarse mediante las temperaturas de los dos gases.

La separación temporal en escalas rápidas y lentas también está presente en el caso de dos gases granulares aislados separados por un pistón adiabático, estudiado en la segunda parte del capítulo 3. Es más, este fenómeno también aparece en el problema clásico del pistón de Rayleigh, como se discutió en el capítulo 2.

Los estados estacionarios que alcanzan los sistemas están caracterizados por la igualdad de presiones entre los gases y por la igualdad entre la energía total disipada en el sistema y la inyectada por las paredes. En el caso en el que se vibran todas las paredes del sistema y los dos gases son iguales, el sistema experimenta una transición de fase de no equilibrio. Sólo para valores de los parámetros del sistema que hacen  $\lambda < 2$  las condiciones anteriores conducen a estados en los que todas las temperaturas sean iguales, como ocurre en el caso elástico. Los resultados teóricos y de simulación muestran una violación de la equipartición para  $\lambda > 2$  y la consiguiente transición de fase.

Existen evidentes similitudes entre los resultados obtenidos para el sistema vibrado de la figura 4.1 y el aislado del capítulo 3. En los dos se producen transiciones de fase de no equilibrio caracterizadas por idénticas ecuaciones

para la variable  $\rho^2 \equiv n_1/n_2$ , en el caso vibrado  $\lambda$  juega el papel de parámetro mientras que en el caso no vibrado es  $2Nda/b$ .

La diferencia fundamental entre los dos sistemas se escribe en la dependencia temporal de los estados atractores. En el caso vibrado el sistema alcanza un estado estacionario mientras que en el aislado el sistema evoluciona hacia un estado en el que siempre hay dependencia temporal de las temperaturas.

El estado atractor del sistema con todas las paredes vibrantes estudiado en este capítulo es estacionario y, en este sentido, más sencillo que el estudiado en el capítulo 3. Por este hecho resulta oportuno tratar de encontrar para este sistema un principio extremal que proporcione los estados estacionarios. La energía disipada en el sistema por unidad de tiempo,  $P_d$ , en una situación genérica en la que el sistema no conserva macroscópicamente la simetría, es

$$\begin{aligned} P_d &= \frac{Nd}{2} (\zeta_1 T_1 + \zeta_2 T_2) \propto n_1 T_1^{3/2} + n_2 T_2^{3/2} & (4.75) \\ &\propto \frac{\theta_1^{3/2}}{x_p} + \frac{\theta_2^{3/2}}{L_x - x_p} \propto \frac{\rho^2 + 1}{(1 + \rho)^2}. \end{aligned}$$

La función anterior tiene un mínimo para  $\rho = 1$ , es decir para el estado simétrico. Esto quiere decir que el sistema escoge entre todos los estados posibles aquellos en los que la energía disipada por unidad de tiempo es mayor.

Aún no se ha conseguido traducir la condición anterior en alguna igualdad entre magnitudes de los dos subsistemas en contacto a través del pistón, aunque se sigue trabajando en ello. Es posible que la función  $W(\rho)$ , definida en la ecuación (3.97) y usada para el estudio de la evolución dinámica, juegue un papel importante, dado que determina los estados estacionarios.

Finalmente, se ha analizado la bondad de la aproximación uniforme utilizada para analizar el sistema con todas las paredes vibrantes, en este capítulo, y para el sistema de paredes reflectantes, en el capítulo anterior. Para ello, se ha escogido el sistema vibrado más sencillo, el que tiene sólo las paredes verticales vibrantes. De esta forma, se ha comprobado que tanto la predicción teórica aproximada como la exacta, predicen, cuando los dos gases son iguales, que la posición media del pistón siempre es la central, lo que también ha sido confirmado por resultados de dinámica molecular.

# Capítulo 5

## Conclusiones

El objetivo de esta memoria ha sido el estudio del comportamiento de dos gases granulares, modelados como un conjunto de esferas o discos duros inelásticos, separados por un pistón adiabático. Se trata de un ejemplo más en que la inelasticidad de las colisiones modifica en forma sustancial el comportamiento del sistema, de manera que su efecto no puede describirse mediante simples correcciones cuantitativas. A continuación, se presentan en forma resumida, algunas de las conclusiones del trabajo presentado.

1. La primera conclusión relevante es que el comportamiento macroscópico de los sistemas y estados estudiados pueden ser descritos correctamente por una teoría de tipo hidrodinámico, en términos de los mismos campos que los fluidos moleculares usuales, es decir, la densidad, la velocidad y la temperatura. Esta teoría hidrodinámica se sustenta a su vez en una descripción microscópica en el contexto de la teoría cinética.
2. Las ecuaciones consideradas consisten esencialmente en los balances de energía de cada uno de los gases y también del pistón. En particular, las oscilaciones de éste último, medidas a través de las fluctuaciones de su velocidad, son fundamentales para explicar el intercambio de energía entre los dos sistemas gaseosos.
3. En el primer caso estudiado, el conjunto de los dos gases y el pistón están aislados del exterior de forma que el sistema evoluciona libremente. Cuando la masa del pistón supera un cierto valor crítico, que depende de los parámetros mecánicos del sistema (masa y diámetro de las partículas, su número, y la inelasticidad), se produce una ruptura espontánea de simetría. El pistón se sitúa en una posición estacionaria en que la densidad y temperaturas de los gases a ambos lados son distintas.

4. El comportamiento del sistema en las proximidades del punto crítico de la transición es el típico de las transiciones de no equilibrio descritas por la teoría de campo medio. El análisis de estabilidad de las ecuaciones muestra que, donde existe, el estado asimétrico es más estable que el simétrico.
5. El otro caso estudiado es el de un sistema que se mantiene fluidizado vibrando todas sus paredes externas. Este sistema tiene la ventaja de ser mucho más accesible experimentalmente que el anterior. El precio a pagar es que las vibraciones inducen gradientes de forma inevitable. Sin embargo, se ha mostrado que la forma específica de vibración escogida permite estudiar el sistema desde una perspectiva global, considerando homogéneos cada uno de los gases a los lados del pistón.
6. Se ha mostrado que el sistema vibrado también presenta una transición de no equilibrio con ruptura espontánea de simetría que, nuevamente, es correctamente capturada por la descripción hidrodinámica.
7. Se ha investigado no sólo la posición estacionaria alcanzada eventualmente por el pistón, sino también el proceso dinámico por el que se alcanza. Se ha visto que existen dos escalas temporales bien diferenciadas. En las más lentas, las restantes variables hidrodinámicas están esclavizadas por las temperaturas de los gases a ambos lados del pistón.
8. Se ha tratado de identificar un criterio de tipo variacional que determine el estado final del sistema, habiéndose visto que en los casos estudiados el sistema tiende al estado en que la potencia disipada en las colisiones es mayor. Sin duda, ésta es una línea de investigación que debe ser continuada.
9. Las rupturas espontáneas de simetría como las consideradas aquí, parecen ser algo intrínseco de los fluidos granulares, habiéndose observado en bastantes otros casos. Vale la pena resaltar que las analizadas en esta memoria tiene un origen colectivo, descriptible mediante los campos hidrodinámicos.
10. Todas las predicciones teóricas obtenidas se han validado comparándolas con resultados de dinámica molecular, obteniéndose un acuerdo razonablemente bueno. La comparación se ha limitado a la región de inelasticidad pequeña. Para inelasticidades grandes, aparecen dificultades asociadas, fundamentalmente, con la inestabilidad del estado uniforme en el caso aislado y con la presencia de grandes gradientes en el caso de sistemas vibrados.

11. La combinación de desarrollos teóricos y de resultados de simulación en ordenador creemos que es especialmente útil para el desarrollo de la mecánica estadística de los sistemas fuera del equilibrio en general, y de los gases granulares en particular. De hecho, la investigación presentada aquí se ha llevado a cabo en un proceso continuo de iteración de los resultado que se iban obteniendo por ambos métodos.



# Apéndice A

## Coeficientes de transporte

El método de Chapman-Enskog proporciona, en primer orden en los gradientes, una solución especial de la función de distribución llamada *solución normal*. La dependencia espacial y temporal de ésta ocurre a través de los campos hidrodinámicos. El método sólo proporciona unas ecuaciones cerradas para dichas funciones que en general hay que resolver aproximadamente. El procedimiento habitual para ello es mediante el uso de una base de funciones construida con los polinomios de Sonine [68].

Las relaciones constitutivas en el orden de Navier-Stokes que se usan en este trabajo han sido obtenidas usando el método de Chapman-Enskog. Las expresiones de los coeficientes de transporte que aparecen en las mismas y que se dan a continuación han sido determinadas en la primera aproximación de Sonine [91].

Los coeficientes de transporte, el coeficiente de viscosidad  $\eta$ , la conductividad térmica  $\kappa$ , la conductividad difusiva  $\mu$  y la velocidad de enfriamiento  $\zeta$ , escalan de la siguiente forma con los campos,

$$\begin{aligned}\eta &= \eta^* \eta_0, \\ \kappa &= \kappa^* \kappa_0, \\ \mu &= \frac{T \kappa_0}{n} \mu^*, \\ \zeta &= \frac{n T}{\eta_0} \zeta^*,\end{aligned}\tag{A.1}$$

siendo  $\eta_0$  y  $\kappa_0$  los coeficientes de viscosidad y conductividad térmica elásticos,

$$\begin{aligned}\eta_0 &= \frac{2+d}{8} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} T^{1/2} \sigma^{-(d-1)}, \\ \kappa_0 &= \frac{d(d+2)^2}{16(d-1)} \Gamma(d/2) \pi^{-\frac{d-1}{2}} T^{1/2} \sigma^{-(d-1)}.\end{aligned}\tag{A.2}$$

Las magnitudes con asterisco son adimensionales y funciones del coeficiente de restitución normal  $\alpha$ ,

$$\begin{aligned}\eta^*(\alpha) &= \left[ \nu_1^*(\alpha) - \frac{\zeta^*(\alpha)}{2} \right]^{-1}, \\ \kappa^*(\alpha) &= \left[ \nu_2^*(\alpha) - \frac{2d}{d-1}\zeta^*(\alpha) \right]^{-1} [1 + c^*(\alpha)], \\ \mu^*(\alpha) &= 2\zeta^*(\alpha) \left[ \kappa^*(\alpha) + \frac{(d-1)c^*(\alpha)}{2d\zeta^*(\alpha)} \right] \left[ \frac{2(d-1)}{d}\nu_2^*(\alpha) - 3\zeta^*(\alpha) \right]^{-1},\end{aligned}\tag{A.3}$$

$$\begin{aligned}\zeta^*(\alpha) &= \frac{2+d}{4d}(1-\alpha^2) \left[ 1 + \frac{3}{32}c^*(\alpha) \right], \\ \nu_1^*(\alpha) &= \frac{(3-3\alpha+2d)(1+\alpha)}{4d} \left[ 1 - \frac{1}{64}c^*(\alpha) \right], \\ \nu_2^*(\alpha) &= \frac{1+\alpha}{d-1} \left[ \frac{d-1}{2} + \frac{3(d+8)(1-\alpha)}{16} + \frac{4+5d-3(4-d)\alpha}{1024}c^*(\alpha) \right], \\ c^*(\alpha) &= \frac{32(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{9+24d+(8d-41)\alpha+30\alpha^2(1-\alpha)}.\end{aligned}\tag{A.4}$$

## Apéndice B

# Dinámica molecular de esferas y discos duros

Los algoritmos de dinámica molecular convencionales determinan la evolución de los sistemas integrando sus ecuaciones de movimiento numéricamente [79]. Esto implica, en general, hacer una discretización del tiempo. Los errores cometidos tienen al menos dos orígenes diferentes: los que proceden del proceso de integración de las ecuaciones y los que provienen de realizar cuentas sencillas como elevar al cuadrado un número. Los errores del primer tipo son mayores y más difíciles de controlar, en general, que los segundos.

Las características físicas del modelo de esferas y discos duros, utilizado en este trabajo para modelar un medio granular, permite implementar códigos de dinámica molecular en los que los errores de simulación sólo se deben a la precisión del ordenador. Esto es consecuencia del hecho de que, entre las colisiones, el movimiento de una partícula es independiente del estado de movimiento del resto del sistema. En consecuencia, el proceso de integración de las ecuaciones de evolución no introduce ningún error más que el proveniente de las manipulaciones numéricas.

Los códigos utilizados en este trabajo para la simulación de los flujos granulares rápidos están inspirados en los de Allen y Tildesley (Alg1) [74] y de Lubachevsky (Alg2) [80]<sup>1</sup>, que a su vez, son algoritmos basados en las ideas de Alder y Wainwright [149]. Todos ellos explotan el hecho de que, para un conjunto de esferas o discos, las colisiones se dan cuando las partículas están en contacto, por lo que la dinámica del sistema está determinada por la evolución libre o bajo la acción de una fuerza externa y por colisiones instantáneas.

---

<sup>1</sup>El primero de los algoritmos será Alg1 y el segundo Alg2.

## B.1. Descripción del algoritmo

Sea  $\mathbf{x}_t = (\mathbf{r}_1(t), \dots; \mathbf{v}_1(t), \dots)$  el vector de posiciones y velocidades de todas las partículas del sistema en el instante  $t$ . El objetivo de los algoritmos de Allen-Tildesley (Alg1) y el de Lubachevsky (Alg2) es tratar de obtener este vector a partir de una condición inicial dada  $\mathbf{x}_0$ . Estos algoritmos, usados para un conjunto de discos o esferas duros en el que eventualmente puede haber otro tipo de partículas como un pistón, están basados en la misma idea:  $\mathbf{x}_t$  se determina a partir de  $\mathbf{x}_0$  teniendo en cuenta la evolución libre o bajo la acción de fuerzas externas y las interacciones binarias entre partículas (como se discutió en el capítulo 2).

Los algoritmos Alg1 y Alg2 operan de forma secuencial. A partir de una configuración inicial dada, determinan el siguiente suceso (una colisión, por ejemplo), hacen los cambios introducidos por el suceso (si es una colisión entre partículas, se cambian las velocidades), determinan el siguiente suceso, hacen evolucionar al sistema hacia éste, hacen los cambios según el suceso, y así sucesivamente. Cada parte de la secuencia se puede relacionar con una operación.

La parte de los códigos encargada de la evolución libre de colisiones del sistema puede asociarse al operador  $L_t$ , que toma un vector de posiciones y velocidades y devuelve los vectores que resultan de la evolución libre de colisiones pasado un tiempo  $t$ . La configuración del sistema será

$$L_t \mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{x}_t \quad (\text{B.1})$$

si en el tiempo  $t$  no se ha producido ninguna colisión. En el caso de que no actúe ninguna fuerza externa sobre las partículas, éstas se mueven libremente y el operador  $L_t$  actúa de la siguiente forma

$$L_t(\mathbf{r}_1(0), \dots; \mathbf{v}_1(0), \dots) = (\mathbf{r}_1(0) + \mathbf{v}_1(0)t, \dots; \mathbf{v}_1(0), \dots). \quad (\text{B.2})$$

Como las partículas colisionan, es conveniente introducir el operador  $T_{p1}$  que, dada una partícula  $p1$ , devuelve el tiempo  $t_1$  en producirse el siguiente evento asociado a ella y otro elemento  $p2$  involucrado en el mismo, para una configuración  $\mathbf{x}_t$  dada. El evento puede ser una colisión con una partícula ( $p2$  es una partícula), con el pistón ( $p2$  es el pistón), con una pared ( $p2$  es una pared); o puede ser otro evento como, por ejemplo, que la partícula llega a una región del espacio. Como ya se discutió en el texto principal, sólo se producen colisiones binarias aisladas en el tiempo, por tanto, el  $T_{p1}$  está bien definido. De forma esquemática,

$$T_{p1} \mathbf{x}_t \rightarrow (t_1, p_2). \quad (\text{B.3})$$

El operador anterior es el que requiere más tiempo de cómputo para el ordenador, y su obtención difiere según el algoritmo utilizado.

En Alg1, los eventos son colisiones, y para evaluar  $T_{p1}$  hay que considerar todas las partículas (incluidas las paredes y el pistón) del sistema. En Alg2 se hace una división del espacio en celdas, como en la figura B.1. Ahora los eventos posibles son

- colisiones entre partículas,
- colisión partícula-pistón,
- colisión partícula-pared,
- cruce de la frontera entre dos celdas.

Al introducir el último evento, se elimina la necesidad de considerar las colisiones de partículas que no estén en la misma celda o en celdas contiguas, siempre que la suma de los diámetros de las partículas que van a colisionar sea inferior a la distancia entre las celdas de sendas partículas. Esto es consecuencia de que para que dos partículas, suficientemente pequeñas, que están en celdas no contiguas, colisionen, al menos una de ellas ha de cruzar una frontera.

Para una elección buena del mallado del sistema, Alg2 reduce notablemente el tiempo de cómputo de Alg1 (ver [150]) porque se descartan muchos sucesos improbables. La buena elección es la que consigue que el número medio de partículas en cada celda sea uno. Por esta razón, conviene, en ciertas circunstancias, hacer un mallado del sistema no uniforme.

En la figura B.1 se muestra un sistema en el que se ha hecho un mallado no uniforme. Al evaluar  $T_{p1}$ , con Alg2, para la partícula negra, sólo hay que considerar las partículas dentro de la región R1. Por otra parte, con Alg1 habría que considerar también las partículas y la pared que están fuera de R1.

Si sobre el sistema actúa una fuerza externa constante, eventualmente cero,  $T_{p1}$  se determina de la siguiente forma

$$T_{p1\mathbf{x}_t} \rightarrow \begin{cases} t_1 = \min\{t_{p1,pi}, pi \in \Pi_1\}, \\ p_2 = \minpar\{t_{p1,pi}, pi \in \Pi_1\}. \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

En la expresión anterior,  $t_{p1,pi}$  es el tiempo que tardan las partículas  $p1$  y  $pi$  en colisionar,  $\min\{t_{p1,pi}, pi \in \Pi_1\}$  es el tiempo de colisión más pequeño del conjunto calculado para las partículas  $pi$  en la región  $\Pi_1$ , formada por la celda de la partícula  $p1$  y las contiguas (en el caso de Alg1 esta región es todo

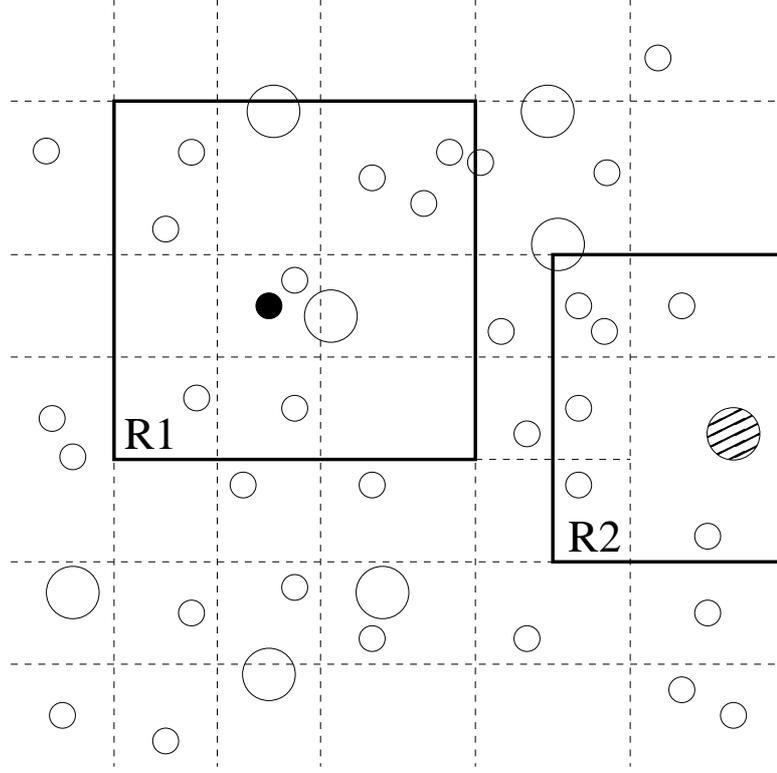


Figura B.1: Ejemplo de un sistema con un malla no uniforme. Con el algoritmo Alg2 las partículas marcadas (negra y rayada) sólo pueden colisionar, respectivamente, con las que están dentro de las regiones R1 y R2. En el segundo caso también se contempla la posibilidad de colisión con la pared.

el espacio). Por último,  $\min_{\text{par}}\{t_{p1,pi}, pi \in \Pi_1\}$  es la partícula asociada al tiempo mínimo anterior.

La función  $t_{p1,pi}$  en (B.4), si  $pi$  es una partícula y la fuerza externa es constante, es

$$t_{p1,pi} = \begin{cases} \frac{-b_{1i} - \sqrt{b_{1i}^2 - v_{1i}^2(r_{1i}^2 - \sigma_e^2)}}{v_{1i}} & \text{si } b_{1i} \leq 0 \text{ y } b_{1i}^2 - v_{1i}^2(r_{1i}^2 - \sigma_e^2) \geq 0, \\ +\infty & \text{si } b_{1i} < 0 \text{ ó } b_{1i}^2 - v_{1i}^2(r_{1i}^2 - \sigma_e^2) < 0, \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

donde  $\mathbf{r}_{1i}$  y  $\mathbf{v}_{1i}$  son la posición y la velocidad relativas de  $p1$  y  $pi$ ,  $b_{1i} = \mathbf{r}_{1i} \cdot \mathbf{v}_{1i}$  y  $\sigma_e$  es la distancia entre las partículas cuando están en contacto.

De forma análoga puede obtenerse el tiempo anterior si  $pi$  es el pistón. Sólo habría que considerar, sin embargo, el movimiento relativo en la dirección normal a la superficie del pistón. Es decir, si el pistón se mueve a lo

largo del eje  $X$ , se usa la misma expresión (B.5) pero sustituyendo los vectores de posiciones y de velocidades (también en la definición de  $b_{1i}$ ) por las componentes a lo largo del eje  $X$ .

No resulta difícil obtener los tiempos  $t_{p1,pi}$  si  $pi$  es una pared o una frontera entre celdas, pues éstos suelen ser elementos estáticos. Es conveniente señalar, no obstante, que si existe una fuerza externa actuando sobre el sistema, sí determinan, en este caso, el valor de  $t_{p1,pi}$ , a diferencia de lo que ocurre si hay movimiento de las dos partículas colisionantes sometidas a la misma fuerza externa constante.

Finalmente, el algoritmo debe realizar las colisiones partícula-partícula, partícula-pistón y partícula-pared. En este trabajo se ha utilizado la ley (2.1) para las colisiones entre granos, la ley (3.15) para las colisiones con el pistón y la ley (3.12) para las colisiones con la pared vibrante con movimiento en diente de sierra (si se hace  $v_b = 0$  se tiene la de la pared reflectante). Se utilizará el operador  $C$  para representa el proceso de colisión,

$$C(t_1, p_1, p_2, \mathbf{x}_t) \rightarrow \mathbf{x}_{t^+}. \quad (\text{B.6})$$

En la expresión anterior,  $t^+$  indica el instante justo después de la colisión.

Usando los operadores antes definidos, los algoritmos Alg1 y Alg2 se pueden esquematizar de la siguiente forma (ver el diagrama de flujo B.2):

1. Generar la condición inicial  $\rightarrow \mathbf{x}_0$ .
2. Asignar a cada partícula  $pi$  el tiempo y pareja de su siguiente evento

$$T_{pi}\mathbf{x}_0 \rightarrow (t_{pi}, p_{pi,j}).$$

3. Obtener el tiempo y partículas (o partícula-pistón o partícula-frontera) del próxima evento

$$t_{p1} = \min\{t_{pi}, pi = 1, \dots, N\}, \quad (p1, p2).$$

4. Realizar la evolución libre de colisiones hasta la próxima colisión

$$L_{t_{p1}}\mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{x}_{t_{p1}}.$$

5. Hacer la colisión

$$C(t, p_1, p_2, \mathbf{x}_{t_{p1}}) \rightarrow \mathbf{x}_{t_{p1}^+}.$$

6. Asignar nuevos tiempos y parejas a  $p_1$  y  $p_2$

$$T_{p1}\mathbf{x}_{t_{p1}^+} \rightarrow (t_{p1}, p_{p1,k}),$$

$$T_{p2}\mathbf{x}_{t_{p1}^+} \rightarrow (t_{p2}, p_{p2,l}).$$

## 7. Volver al punto 3.

La etapa de registro de magnitudes puede hacerse entre los puntos 3 y 6, en la figura B.2 del diagrama de flujo se ha colocado después del punto 4. En la siguiente sección se describe brevemente el proceso llevado a cabo para obtener las magnitudes hidrodinámicas a partir de los datos obtenidos en las simulaciones.

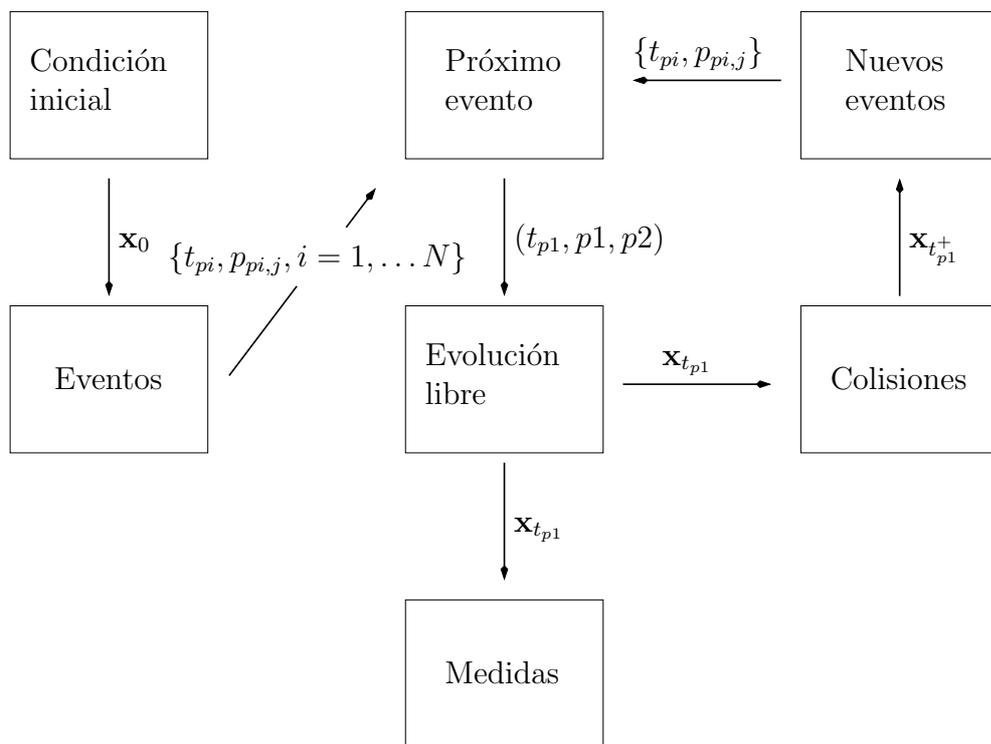


Figura B.2: Diagrama de flujo para los algoritmos de Allen-Tildesley (Alg1) [74] y de Lubachevsky (Alg2) [80].

## B.2. Medidas

En este apartado se describe el proceso para obtener las magnitudes hidrodinámicas y la función de distribución de una partícula a partir de medidas directas de las simulaciones.

Los campos hidrodinámicos densidad de partículas  $n(\mathbf{r}, t)$ , velocidad  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  y temperatura  $T(\mathbf{r}, t)$  están definidos a partir de la función de distribución de una partícula  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  como

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}, t) &\equiv \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ n(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &\equiv \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ \frac{d}{2}n(\mathbf{r}, t)T(\mathbf{r}, t) &\equiv \frac{m}{2} \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Obsérvese que en la definición del campo de velocidades interviene la densidad, y en el de temperatura aparecen la densidad y el campo de velocidades.

Para obtener la función de distribución de una partícula a partir de datos de simulación es necesario discretizar el espacio de posiciones y velocidades. Para las posiciones, el espacio será recubierto por celdas, de modo que la celda  $i$ -ésima tendrá su centro en la posición  $\boldsymbol{\delta}_i$  y volumen (área si  $d = 2$ )  $\Delta_i$ . Análogamente, para el espacio de velocidades se tienen

$$\boldsymbol{\omega}_j; \quad \Omega_j.$$

Sea  $F_{ij}(t)$  el número de partículas en las celdas  $i$  y  $j$  de los espacios de posición y velocidad, respectivamente, en el tiempo  $t$ . Formalmente,

$$F_{ij}(t) = \sum_{k=1}^N \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \Theta(\mathbf{v}_k, \boldsymbol{\omega}_j, \Omega_j), \quad (\text{B.8})$$

donde  $\Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i)$  es uno si la partícula  $k$  está dentro de la celda  $i$  y cero en otro caso. Análogamente,  $\Theta(\mathbf{v}_k, \boldsymbol{\omega}_j, \Omega_j)$  es uno si la velocidad de la partícula  $k$  está en la celda  $j$  del espacio de velocidades y cero en otro caso.

La magnitud  $F_{ij}(t)$  es una variable estocástica que cumple

$$f(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j, t) \simeq \lim_{\substack{\Delta_i \rightarrow 0 \\ \Omega_j \rightarrow 0}} \left\langle \frac{F_{ij}(t)}{\Delta_i \Omega_j} \right\rangle. \quad (\text{B.9})$$

En la expresión anterior  $\langle \cdot \rangle$  indica promedio sobre condiciones iniciales, tal como se discutió en el capítulo 2. El signo de aproximación se debe a que

la relación anterior puede no estar bien definida en algunos casos, aunque se supondrá que sí lo está.

En la práctica no es necesario tomar el límite en la ecuación B.9, basta elegir los volúmenes  $\{\Delta_i, \Omega_j\}$  lo suficientemente pequeños para que no exista variación importante de la función de distribución dentro de ellos. Para ello, es útil tener una idea de cómo es la función de distribución. Por ejemplo, si la función de distribución es normal, las variaciones espaciales se producen sobre distancias mayores (del orden) del recorrido libre medio y las variaciones de la velocidad están supeditadas a los valores que toma la temperatura local.

En lo que respecta a las magnitudes hidrodinámicas y otras derivadas de la función de distribución  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ , no es necesario discretizar el espacio de velocidades, como se comentará más tarde. Sí se requiere una discretización espacial en el que las celdas tengan longitudes del orden del recorrido libre medio local. Si el sistema es aproximadamente homogéneo, como ocurre para muchas situaciones en este trabajo, el recorrido libre medio es del orden de

$$\frac{L^d}{N\sigma^{d-1}}$$

donde  $L$  es una longitud macroscópica típica del sistema y  $N$  y  $\sigma$  son el número total y diámetro característico de las partículas.

En lo que sigue, se admite que la discretización espacial es lo suficientemente fina como para que la función de distribución no cambie sustancialmente en una celda. Es decir, que no es necesario tomar el límite  $\Delta_i \rightarrow 0$  en la ecuación (B.9), por lo que

$$f(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_j, t) \simeq \lim_{\Omega_j \rightarrow 0} \left\langle \frac{F_{ij}(t)}{\Delta_i \Omega_j} \right\rangle. \quad (\text{B.10})$$

La expresión anterior permite determinar las magnitudes hidrodinámicas a partir de cantidades medibles en las simulaciones. Considérese, a modo de ejemplo, la densidad de partículas,

$$n(\mathbf{r}_i, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \lim_{\Omega_j \rightarrow 0} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_j, t) \Omega_j. \quad (\text{B.11})$$

En la última igualdad, se ha utilizado la partición del espacio de velocidades introducida antes para hacer la integral. Esto no es más que la definición de integral de Riemann. Utilizando la relación (B.10), se tiene

$$n(\mathbf{r}_i, t) \simeq \sum_{j=1}^{\infty} \left\langle \frac{F_{ij}(t)}{\Delta_i \Omega_j} \right\rangle \Omega_j = \left\langle \sum_{j=1}^{\infty} \frac{F_{ij}(t)}{\Delta_i} \right\rangle \quad (\text{B.12})$$

Obsérvese que no hay ningún problema en intercambiar la suma por el promedio sobre condiciones iniciales porque el sumatorio sólo contiene una cantidad finita de términos, dado que el número de partículas es finito. Finalmente, usando (B.8) en (B.12),

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}_i, t) &\simeq \left\langle \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sum_{k=1}^N \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \Theta(\mathbf{v}_k, \boldsymbol{\omega}_j, \Omega_j)}{\Delta_i} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\Delta_i} \left\langle \sum_{k=1}^N \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

En la relación anterior se ha utilizado que

$$\sum_{j=1}^{\infty} \Theta(\mathbf{v}_k, \boldsymbol{\omega}_j, \Omega_j) = 1, \quad (\text{B.14})$$

pues la partícula  $k$  está en una celda y sólo una del espacio de velocidades.

El resultado obtenido en la expresión (B.13) para la densidad, al igual que ocurre para otras magnitudes, no depende para nada de la partición del espacio de velocidades que ha sido utilizada de modo formal para sustituirla por la integral.

Procediendo de forma análoga, se determinan los campos restantes:

- Campo de velocidades

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_i, t) \simeq \frac{1}{n(\mathbf{r}_i, t) \Delta_i} \left\langle \sum_{k=1}^N \mathbf{v}_k \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \right\rangle. \quad (\text{B.15})$$

- Temperatura

$$T(\mathbf{r}_i, t) \simeq \frac{m}{dn(\mathbf{r}_i, t) \Delta_i} \left\langle \sum_{k=1}^N (\mathbf{v}_k - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i, t))^2 \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \right\rangle. \quad (\text{B.16})$$

También es posible expresar el tensor de presiones  $P_{ij}$ , flujo de calor  $\mathbf{q}$  y velocidad de enfriamiento  $\zeta$ , definidos en (2.11), en término de cantidades medibles:

- Tensor de presiones

$$P_{ij}(\mathbf{r}_l, t) \simeq \frac{m}{\Delta_i} \left\langle \sum_{k=1}^N (\mathbf{v}_k - \mathbf{u}(\mathbf{r}_l, t))_i (\mathbf{v}_k - \mathbf{u}(\mathbf{r}_l, t))_j \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_l, \Delta_l) \right\rangle. \quad (\text{B.17})$$

En la expresión anterior  $(\mathbf{v}_k - \mathbf{u}(\mathbf{r}_l, t))_i$  es la componente  $i$  del vector.

- Flujo de calor

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}_i, t) \simeq \frac{m}{2\Delta_i} \left\langle \sum_{k=1}^N (\mathbf{v}_k - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i, t))^2 (\mathbf{v}_k - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i, t)) \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \right\rangle. \quad (\text{B.18})$$

- Velocidad de enfriamiento para un gas monocomponente

$$\begin{aligned} \zeta(\mathbf{r}_i, t) \simeq & \frac{(1 - \alpha^2) \pi^{\frac{d-1}{2}} m \sigma^{d-1}}{4d\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) n(\mathbf{r}_i, t) T(\mathbf{r}_i, t) \Delta_i^2} \\ & \times \left\langle \sum_{k_1=1}^N \sum_{k_2=1}^N |\mathbf{v}_{k_1} - \mathbf{v}_{k_2}|^3 \Theta(\mathbf{r}_{k_1}, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \Theta(\mathbf{r}_{k_2}, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i) \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

$\Delta_k$  es la anchura de la banda k-ésima.

Las expresiones dentro del signo  $\langle \cdot \rangle$  en las expresiones anteriores son fácilmente medibles en las simulaciones. En la siguiente sección, se discute brevemente cómo se hace el promedio.

### B.2.1. Promedio sobre trayectorias, espacial y temporal

En las expresiones (B.13)-(B.19) de la sección anterior, las magnitudes se obtienen promediando sobre variables aleatorias. En el caso de la densidad, por ejemplo, se tiene

$$n(\mathbf{r}_i, t) \simeq \langle N_i(t) \rangle, \quad (\text{B.20})$$

con

$$N_i(t) \equiv \frac{1}{\Delta_i} \sum_{k=1}^N \Theta(\mathbf{r}_k, \boldsymbol{\delta}_i, \Delta_i). \quad (\text{B.21})$$

El promedio en la expresión anterior y en (B.13)-(B.19) se llama *promedio sobre trayectorias* porque para obtener el valor de la densidad, y el resto de magnitudes, se generan distintas trayectorias del sistema partiendo de condiciones iniciales diferentes. En particular, para los problemas estudiados en este trabajo, los dos gases parten inicialmente de sendos estados con la misma función de distribución. Es decir, el punto del espacio de las fases del que parte el sistema es aleatorio siendo la probabilidad de las componentes espaciales uniforme y la de las velocidades gaussiana.

Condiciones iniciales ligeramente diferentes pueden generar trayectorias del sistema que se identifican con estados diferentes del sistema. En el sistema

estudiado en el capítulo 4, por ejemplo, el pistón, para  $\lambda > 2$ , abandona su posición inicial central desplazándose hacia la izquierda o hacia la derecha, con la misma probabilidad. Si el interés es determinar el perfil de densidades, por ejemplo, es necesario seleccionar las trayectorias asociadas al mismo perfil, o dicho de otro modo, seleccionar sólo los microestados (puntos del espacio de las fases) compatibles con el macroestado (descripción hidrodinámica, en este caso) [81]. En la práctica y para el caso de la densidad, esto quiere decir que los valores de  $N_i(t)$  sobre los que se promedia no pueden ser muy diferentes. Cuando es difícil determinar las trayectorias que corresponden a un mismo estado macroscópica, se recurre a promedios temporales, como se discute con más detalle en [151].

Si el problema estudiado tiene cierta simetría, se puede aprovechar ésta para mejorar la estadística de las simulaciones. En el problema del capítulo 4, por ejemplo, el sistema tiene simetría en la dirección vertical. Por lo que, si el interés es obtener la dependencia de la densidad en la dirección horizontal, puede tomarse un mallado espacial del sistema de modo que las celdas tengan la altura del sistema.

Finalmente, si la magnitud sobre la que se promedia, por ejemplo  $N_i(t)$ , oscila en torno a un valor estacionario, también es posible promediar temporalmente sobre una misma trayectoria, mejorando de este modo también la estadística.



# Apéndice C

## Aproximación gaussiana

Este apéndice contiene las aproximaciones que conducen a la ecuación (3.35) del texto principal.

Sean

$$n^+(X, \mathbf{r}_\perp, t) \equiv \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dX dV_x f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X - x), \quad (\text{C.1})$$

$$T_x^+(X, \mathbf{r}_\perp, t) \equiv \frac{1}{n^+} \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dX dV_x f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X - x) m v_x^2, \quad (\text{C.2})$$

$$T_\perp^+(X, \mathbf{r}_\perp, t) \equiv \frac{1}{(d-1)n^+} \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dX dV_x f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X - x) m v_\perp^2, \quad (\text{C.3})$$

la densidad y temperaturas parciales asociadas a las partículas que se acercan al pistón en la posición de éste. Dado que es posible relacionar las propiedades de las partículas que se acercan al pistón con las que se alejan, a través de la relación (3.23) que liga los flujos, se tienen las siguientes igualdades,

$$n(X, \mathbf{r}_\perp, t) = \frac{1 + \alpha_p}{\alpha_p} n^+(X, \mathbf{r}_\perp, t), \quad (\text{C.4})$$

$$T_x(X, \mathbf{r}_\perp, t) = \frac{\alpha_p(M - m)}{M - \alpha_p m} T_x^+(X, \mathbf{r}_\perp, t) - H_x^+, \quad (\text{C.5})$$

$$T_\perp(X, \mathbf{r}_\perp, t) = T_\perp^+(X, \mathbf{r}_\perp, t). \quad (\text{C.6})$$

Se ha introducido  $H_x^+$  cuyo valor viene dado por

$$H_x^+ \equiv \frac{2\alpha_p M m}{(M - \alpha_p m)n^+} \int d\mathbf{r}d\mathbf{v} \int dX dV_x f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X - x) v_x V_x. \quad (\text{C.7})$$

Despreciando las correlaciones precolisionales, ecuación (3.33),

$$\int dx \int dX f^+(\mathbf{r}, \mathbf{v}, X, V_x, t) \delta(X - x) = f_g^+(X, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}, t) F(X, V_x, t) \Theta(g_x), \quad (\text{C.8})$$

donde  $f_g^+$  y  $F$  se aproximan por gaussianas,

$$f_g^+(X, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}, t) \simeq 2n^+ \varphi(X, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, t) \left( \frac{m}{2\pi T_x^+} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2T_x^+}\right), \quad (\text{C.9})$$

$$\varphi(X, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{v}_\perp, t) \equiv \left( \frac{m}{2\pi T_\perp^+} \right)^{(d-1)/2} \exp\left(-\frac{mv_\perp^2}{2T_\perp^+}\right), \quad (\text{C.10})$$

$$F(X, V_x, t) \simeq \left( \frac{M}{2\pi T_p} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{MV_x^2}{2T_p}\right). \quad (\text{C.11})$$

En esta aproximación,  $H_x^+ = 0$ , por lo que, usando (C.5),

$$T_x(X, \mathbf{r}_\perp, t) = \frac{\alpha_p(M - m)}{M - \alpha_p m} T_x^+(X, \mathbf{r}_\perp, t). \quad (\text{C.12})$$

Se aproxima la temperatura  $T_\perp(X, \mathbf{r}_\perp, t)$  por  $T(X, \mathbf{r}_\perp, t)$ , lo que es consistente con la aproximación uniforme hecha en el texto principal. Dado que,

$$T = \frac{1}{d} T_x + \frac{d-1}{d} T_\perp, \quad (\text{C.13})$$

resulta

$$\begin{aligned} T(X, \mathbf{r}_\perp, t) &= T_\perp(X, \mathbf{r}_\perp, t) = T_x(X, \mathbf{r}_\perp, t) \\ &= \frac{\alpha_p(M - m)}{M - \alpha_p m} T_x^+(X, \mathbf{r}_\perp, t). \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Las relaciones anteriores permiten expresar la función de distribución (C.9) en función de la temperatura del gas con contacto con el pistón.

# Apéndice D

## Hidrodinámica del sistema con paredes verticales vibrantes

### D.1. Variable espacial

Para resolver el problema hidrodinámico del sistema de la figura (4.6), ecuaciones (4.68), es conveniente introducir las variables espaciales adimensionales siguientes

$$\begin{aligned} l_1(x) &\equiv \frac{4}{(d+2)\Gamma(d/2)} \sqrt{\frac{2(d-1)\pi^{d-1}\zeta_1^*}{(d+2)(\kappa_1^* - \mu_1^*)}} \sigma_1^{d-1} \int_0^x n_1(x) dx, \\ l_2(x) &\equiv \frac{4}{(d+2)\Gamma(d/2)} \sqrt{\frac{2(d-1)\pi^{d-1}\zeta_2^*}{(d+2)(\kappa_2^* - \mu_2^*)}} \sigma_2^{d-1} \int_x^{L_x} n_2(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

Es decir,  $l_1$  es una medida de distancia, para el subsistema 1, proporcional al recorrido libre medio, con origen en la pared vertical izquierda del sistema. Para el subsistema de la derecha,  $l_2$  tiene su origen en la pared derecha.

Se usarán, también, las siguientes constantes

$$\begin{aligned} l_{1m}(x) &\equiv l_1(x_p) = \frac{4}{(d+2)\Gamma(d/2)} \sqrt{\frac{2(d-1)\pi^{d-1}\zeta_1^*}{(d+2)(\kappa_1^* - \mu_1^*)}} \frac{N_1 \sigma_1^{d-1}}{S_p}, \\ l_{2m}(x) &\equiv l_2(x_p) = \frac{4}{(d+2)\Gamma(d/2)} \sqrt{\frac{2(d-1)\pi^{d-1}\zeta_2^*}{(d+2)(\kappa_2^* - \mu_2^*)}} \frac{N_2 \sigma_2^{d-1}}{S_p}. \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

## D.2. Condiciones de contorno

Tal como se ha explicado en el texto principal, para determinar las constantes  $A_i$ ,  $B_i$  para  $i = 1, 2$ , se usan las condiciones de contorno (4.71), (4.72), (4.73) y (4.74).

La ecuación (4.71) es consecuencia del equilibrio mecánico del pistón.

Del equilibrio térmico, ecuación (4.72), y la expresión (4.6) para los flujos de calor obtenidos en el capítulo 3, se tiene

$$T_p = \frac{c_m + \left[ \frac{T_2(x_p)}{T_1(x_p)} \right]^{1/2}}{c_m \left[ \frac{T_2(x_p)}{T_1(x_p)} \right]^{1/2} + 1} [T_1(x_p)T_2(x_p)]^{1/2}, \quad (\text{D.3})$$

que no es más que la generalización de la ecuación (4.60). La constante  $c_m$  está definida en (4.61).

Para utilizar las condiciones de contorno de los flujos de calor en las paredes y en la posición del pistón, es conveniente expresar (4.67) en las nuevas variables (D.1),

$$q_x^{(i)}(l_i) = (-1)^i \frac{p}{\sqrt{m_i}} \sqrt{\frac{d^2(d+2)(\kappa_i^* - \mu_i^*)\zeta_i^*}{2(d-1)}} \frac{d}{dl_i} T_i(l_i)^{1/2}. \quad (\text{D.4})$$

Usando la relación anterior con la expresión de la solución (4.70) y la relación (4.73) para el flujo de calor en las paredes, se tiene

$$(A_i - B_i) = e_i; \quad (i = 1, 2), \quad (\text{D.5})$$

donde

$$e_i \equiv v_b \sqrt{m_i} \sqrt{\frac{2(d-1)}{d^2(d+2)(\kappa_i^* - \mu_i^*)\zeta_i^*}}. \quad (\text{D.6})$$

Procediendo de la misma forma con la condición de contorno en la posición del pistón, se tiene

$$(A_i e^{-l_{im}} - B_i e^{l_{im}}) = k_i \left( A_i e^{-l_{im}} + B_i e^{l_{im}} - \frac{T_p}{A_i e^{-l_{im}} + B_i e^{l_{im}}} \right) \quad (\text{D.7})$$

con

$$k_i \equiv \frac{4m_i}{M} \sqrt{\frac{2(d-1)}{d^2(d+2)\pi(\kappa_i^* - \mu_i^*)\zeta_i^*}}. \quad (\text{D.8})$$

### D.3. Solución

El sistema formado por (D.5) y (D.7) constituye, usando la ecuación (D.3) para la temperatura del pistón, un sistema de cuatro ecuaciones y cuatro incógnitas ( $A_i$  y  $B_i$ ).

El procedimiento que se va a utilizar para obtener la solución del sistema formado por (D.5) y (D.7) consiste en: (i) expresar los coeficientes  $A_i$  como función del cociente  $B_i/A_i$  usando la relación (D.5), (ii) relacionar  $B_i/A_i$  con la temperatura del pistón usando la relación (D.7), (iii) expresar las temperaturas en la posición del pistón en función de la temperatura del pistón y (iv) determinar numéricamente la solución de la ecuación que resulta de usar la relación (D.3).

(i) Usando (D.5),

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{e_i}{1 - z_i}, \\ z_i &\equiv \frac{B_i}{A_i}. \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

(ii) Utilizando las relaciones anteriores y (D.7),

$$\begin{aligned} 1 - z_i \delta_i &= k_i \left( 1 + z_i \delta_i - \frac{T_p \delta_i (1 - z_i)^2}{e_i^2 (1 + z_i \delta_i)} \right), \\ \delta_i &\equiv e^{2l_{im}}. \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Puede verse sin dificultad que la ecuación anterior para  $z_i$  tiene dos soluciones reales, una positiva y otra negativa. Sólo la solución positiva tiene sentido físico y permite determinar el valor de  $z_i$  conocido el valor de la temperatura del pistón  $T_p$ .

(iii) A partir de la solución positiva de la ecuación (D.10) se determinan los perfiles de temperatura como función de la temperatura del pistón. En particular, se determinan las temperaturas en de las regiones en contacto con el pistón,

$$\begin{aligned} [T_i(x_p)]^{1/2} &= r_i + (r_i^2 + s_i T_p)^{1/2}, \\ r_i &\equiv \frac{e_i \delta_i^{1/2}}{\delta_i - 1 + (1 + \delta_i) k_i}, \\ s_i &\equiv \frac{k_i (1 + \delta_i)}{\delta_i - 1 + (1 + \delta_i) k_i}. \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

(iv) Para finalizar, hay que determinar los posibles valores de la temperatura del pistón. Para ello, hay que usar la ecuación (D.3) junto con la relación

(D.11). Usando las funciones

$$\begin{aligned} f(T_1(x_p), T_2(x_p)) &\equiv \frac{1}{\frac{1}{T_1} + \frac{1}{c_m(T_1 T_2)^{1/2}}} + \frac{1}{\frac{1}{T_2} + \frac{c_m}{(T_1 T_2)^{1/2}}}, \\ g(T_p) &\equiv f\left(r_1 + (r_1^2 + s_1 T_p)^{1/2}, r_2 + (r_2^2 + s_2 T_p)^{1/2}\right), \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

la ecuación que hay que resolver para la temperatura del pistón es

$$g(T_p) = T_p. \quad (\text{D.13})$$

Tal como ha sido escrita la función  $f(T_1, T_2)$ , se puede ver que  $g(T_p)$  es creciente y de pendiente decreciente, convergiendo ésta (la pendiente) para  $T_p$  grande a

$$\frac{c_m s_1^{1/2} + s_2^{1/2}}{c_m s_2^{1/2} + s_1^{1/2}} (s_1 s_2)^{1/2}, \quad (\text{D.14})$$

que es menor que 1 (puesto que  $s_i < 1$ ), para cualquiera valores de los parámetros del sistema. Además,  $g(0) > 0$ . Estas dos propiedades de  $g(T_p)$  garantizan que la ecuación (D.13), para todos los parámetros posibles del sistema, tiene una única solución positiva (ver figura D.1).

Como la ecuación (D.13) es altamente no lineal, habría que determinar el valor de la temperatura del pistón, y con éste el del resto de magnitudes, numéricamente.

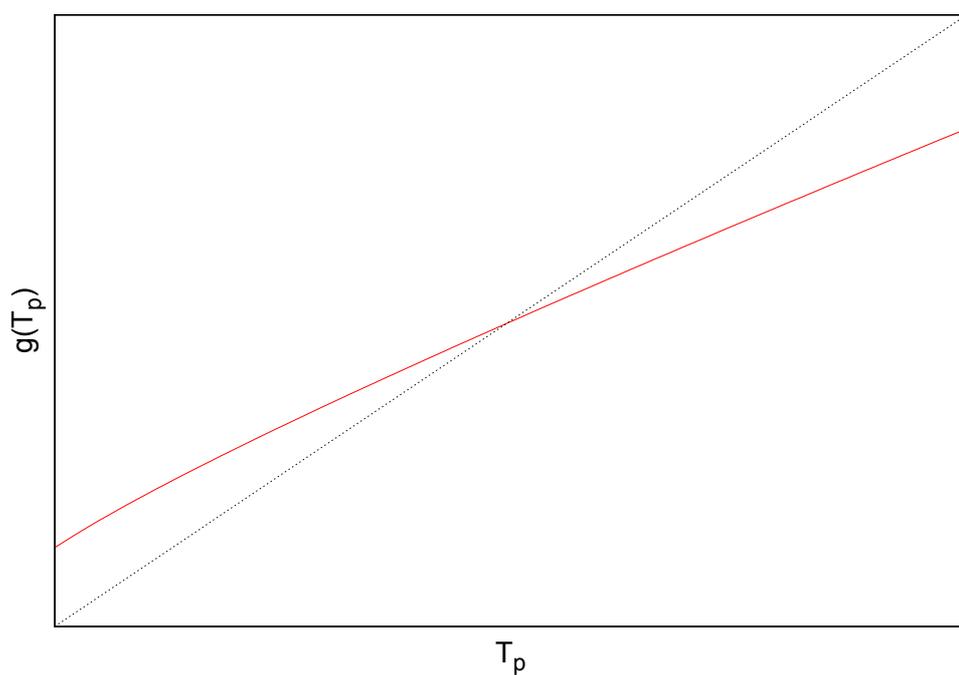


Figura D.1: Representación de la función  $g(T_p)$ , definida en la ecuación (D.13), para algunos parámetros del sistema. El valor de la temperatura del pistón está determinado, de acuerdo con la ecuación (D.13), por la intersección de  $g(T_p)$  con la diagonal.



# Bibliografía

- [1] I. S. Aranson y L. S. Tsimring, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 641 (2006).
- [2] P. G. de Gennes, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S374 (1999).
- [3] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, y R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996).
- [4] J. W. Dufty, *ArXiv e-prints* (2007), 0707.3714.
- [5] I. Goldhirsch, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35**, 267 (2003).
- [6] J. J. Brey y N. Khalil, *Phys. Rev. E* **82**, 051301 (2010).
- [7] J. J. Brey y N. Khalil, *EPL* **94**, 14003 (2011).
- [8] L. Labous, A. D. Rosato, y R. Dave, *Phys. Rev. E* **56**, 5717 (1997).
- [9] F. G. Bridges, A. Hatzes, y D. Lin, *Nature* **309**, 333 (1984).
- [10] Y. Grasselli, G. Bossis, y G. Goutallier, *EPL* **86**, 60007 (2009).
- [11] T. Schwager, V. Becker, y T. Pöschel, *Eur. Phys. J. E* **27**, 107 (2008).
- [12] T. Schwager y T. Pöschel, *Phys. Rev. E* **78**, 051304 (2008).
- [13] M. Montaine, M. Heckel, C. Kruelle, T. Schwager, y T. Pöschel, *ArXiv e-prints* (2011), 1104.0049.
- [14] D. L. Blair y A. Kudrolli, *Phys. Rev. E* **67**, 021302 (2003).
- [15] I. S. Aranson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3306 (2000).
- [16] A. Daerr, P. Lee, J. Lanuza, y E. Clément, *Phys. Rev. E* **67**, 065201 (2003).
- [17] J. W. Dufty y J. J. Brey, *ArXiv e-prints* (2011), 1103.3953.

- 
- [18] R. Zwanzig, *Nonequilibrium statistical mechanics* (Oxford University Press, 2001).
- [19] J. A. McLennan, *Introduction to Nonequilibrium Statistical Mechanics*. (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989).
- [20] H. Grabert, *Projection operator techniques in nonequilibrium statistical mechanics* (Springer-Verlag, 1982).
- [21] M. Sperl, *Gran. Matt.* **8**, 59 (2006).
- [22] H. Janssen, *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure* **39** (1895).
- [23] I. Zuriguel, A. Garcimartín, D. Maza, L. A. Pugnaloni, y J. M. Pastor, *Phys. Rev. E* **71**, 051303 (2005).
- [24] K. To, P.-Y. Lai, y H. K. Pak, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 71 (2001).
- [25] I. Zuriguel, T. Mullin, y J. M. Rotter, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 028001 (2007).
- [26] J. H. Snoeijer, T. J. H. Vlugt, M. van Hecke, y W. van Saarloos, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 054302 (2004).
- [27] G. Løvoll, K. J. Måløy, y E. G. Flekkøy, *Phys. Rev. E* **60**, 5872 (1999).
- [28] C.-H. Liu *et al.*, *Science* **269**, 513 (1995).
- [29] S. F. Edwards y D. V. Grinev, *Gran. Matt.* **4**, 147 (2003).
- [30] I. Zuriguel y T. Mullin, *Proc. R. Soc. A* **464**, 99 (2008).
- [31] S. F. Edwards y R. B. S. Oakeshott, *Physica A* **157**, 1080 (1989).
- [32] J. J. Brey y A. Prados, *Powder Technology* **182**, 272 (2008), Granular Temperature.
- [33] J. J. Brey y A. Prados, *Phys. Rev. E* **68** (2003).
- [34] J. J. Brey, A. Prados, y B. Sanchez-Rey, *Physica A* **275**, 310 (2000).
- [35] J. J. Brey, A. Prados, y B. Sánchez-Rey, *Phys. Rev. E* **60**, 5685 (1999).
- [36] R. Fischer, P. Gondret, y M. Rabaud, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 128002 (2009).
- [37] E. Corwin, H. Jaeger, y S. Nagel, *Nature* **435**, 1075 (2005).

- 
- [38] H. M. Jaeger, C.-h. Liu, y S. R. Nagel, Phys. Rev. Lett. **62**, 40 (1989).
- [39] L. Bonneau, T. Catelin-Jullien, y B. Andreotti, Phys. Rev. E **82**, 011309 (2010).
- [40] L. Trujillo, F. Peniche, y L. Sigalotti, Gran. Matt. **12**, 417 (2010).
- [41] B. Andreotti y L. Bonneau, Phys. Rev. Lett. **103**, 238001 (2009).
- [42] L. Bonneau, B. Andreotti, y E. Clément, Phys. Rev. E **75**, 016602 (2007).
- [43] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz, y R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **58**, 1038 (1987).
- [44] J. Williams, Powder Technology **15**, 245 (1976).
- [45] V. Garzó, New Journal of Physics **13**, 055020 (2011).
- [46] V. Garzó, Phys. Rev. E **78**, 020301 (2008).
- [47] D. Serero, I. Goldhirsch, S. H. Noskowicz, y M.-L. Tan, J. Fluid Mech. **554**, 237 (2006).
- [48] M. E. Möbius *et al.*, Phys. Rev. E **72**, 011304 (2005).
- [49] J. R. Royer *et al.*, Phys. Rev. E **78**, 011305 (2008).
- [50] D. Lohse *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 198003 (2004).
- [51] J. R. Royer *et al.*, Nature Physics **1**, 164 (1995).
- [52] J. Brey, R. García-Rojo, F. Moreno, y M. Ruiz-Montero, Eur. Phys. J. **146**, 323 (2007).
- [53] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, F. Moreno, y R. García-Rojo, Phys. Rev. E **65**, 061302 (2002).
- [54] E. Khain y B. Meerson, Phys. Rev. E **66**, 021306 (2002).
- [55] J. Javier Brey, F. Moreno, R. García-Rojo, y M. J. Ruiz-Montero, Phys. Rev. E **65**, 011305 (2001).
- [56] P. Sunthar y V. Kumaran, Phys. Rev. E **64** (2001).
- [57] F. V. Reyes, A. Santos, y V. Garzó, Phys. Rev. Lett. **104**, 028001 (2010).

- [58] A. Santos, V. Garzó, y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **69**, 061303 (2004).
- [59] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, y F. Moreno, *Phys. Rev. E* **55**, 2846 (1997).
- [60] J. J. Brey, N. Khalil, y M. J. Ruiz-Montero, *J. Stat. Mech.* **2009**, P08019 (2009).
- [61] J. J. Brey, F. Cubero, D. Moreno, y M. J. Ruiz-Montero, *Europhys. Lett.* **53**, 432 (2001).
- [62] J. J. Brey, N. Khalil, y J. W. Dufty, *New J. Phys.* **13**, 055019 (2011).
- [63] J. J. Brey, M. I. García de Soria, y P. Maynar, *Phys. Rev. E* **82**, 021303 (2010).
- [64] A. Barrat, E. Trizac, y M. H. Ernst, *J. Phys.* **17**, S2429 (2005).
- [65] P. K. Haff, *J. Fluid Mech.* **134**, 401 (1983).
- [66] S. Esipov y T. Pöschel, *J. Stat. Phys.* **86**, 1385 (1997).
- [67] P. Résibois y M. de Leener, *Classical kinetic theory of fluids*. (John Wiley and Sons, 1977).
- [68] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim, y A. Santos, *Phys. Rev. E* **58**, 4638 (1998).
- [69] T. van Noije y M. Ernst, *Gran. Matt.* **1**, 57 (1998).
- [70] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J.-M. Hertzsch, y T. Pöschel, *Phys. Rev. E* **53**, 5382 (1996).
- [71] N. V. Brilliantov, A. S. Bodrova, y P. L. Krapivsky, *J. Stat. Mech.* **2009**, P06011 (2009).
- [72] S. Luding, M. Huthmann, S. McNamara, y A. Zippelius, *Phys. Rev. E* **58**, 3416 (1998).
- [73] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **54** (1996).
- [74] M. Allen y D. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. (Oxford University Press, 1987).
- [75] S. McNamara y S. Luding, *Phys. Rev. E* **58**, 813 (1998).
- [76] S. McNamara y J.-L. Barrat, *Phys. Rev. E* **55**, 7767 (1997).

- [77] J. M. Montanero, M. Alaoui, A. Santos, y V. Garzó, *Phys. Rev. E* **49** (1994).
- [78] C. S. Kim, J. W. Dufty, A. Santos, y J. J. Brey, *Phys. Rev. A* **39**, 328 (1989).
- [79] D. Frenkel y B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications* (Academic Press, 2002).
- [80] B. D. Lubachevsky, *Journal of Computational Physics* **94**, 255 (1991).
- [81] J. J. Brey Abalo, J. de la Rubia Pacheco, y J. de la Rubia Sánchez, *Mecánica estadística* (UNED ediciones, 2008).
- [82] J. J. Brey Abalo, J. W. Dufty, y A. Santos, *J. Stat. Phys.* **87**, 1051 (1997).
- [83] V. M. Yakovenko y J. B. Rosser, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1703 (2009).
- [84] N. Bellomo y M. Delitala, *Phys. Life Rev.* **5**, 183 (2008).
- [85] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **69**, 011305 (2004).
- [86] J. J. Brey y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **72**, 011303 (2005).
- [87] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, P. Maynar, y M. I. García de Soria, *J. Phys.* **17**, S2489 (2005).
- [88] J. J. Brey, J. W. Dufty, y M. J. Ruiz-Montero, Linearized boltzmann equation and hydrodynamics for granular gases, in *Granular Gas Dynamics*, , Lecture Notes in Physics Vol. 624, pp. 227–249, Springer Berlin / Heidelberg, 2003.
- [89] J. J. Brey, J. W. Dufty, y A. Santos, *J. Stat. Phys.* **97** (1999).
- [90] J. J. Brey, F. Moreno, y J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **54** (1996).
- [91] J. J. Brey y D. Cubero, *Hydrodynamic Transport Coefficients of Granular Gases* (Springer-Verlag, 2001), pp. 59–78.
- [92] S. Chapman y T. G. Cowling, *Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge University Press, 1952).
- [93] N. Sela y I. Goldhirsch, *J. Fluid Mech.* **361**, 41 (1998).
- [94] J. J. Brey, A. Prados, M. I. García de Soria, y P. Maynar, *J. Phys. A* **40**, 14331 (2007).

- [95] C. C. Maaß, N. Isert, G. Maret, y C. M. Aegerter, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 248001 (2008).
- [96] A. Goldshtein y M. Shapiro, *J. Fluid Mech.* **282**, 75 (1995).
- [97] J. J. Brey, D. Cubero, y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **59**, 1256 (1999).
- [98] C. Villani, *J. Stat. Phys.* **124**, 781 (2006).
- [99] S. McNamara y W. R. Young, *Phys. Rev. E* **50**, R28 (1994).
- [100] I. Goldhirsch y G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1619 (1993).
- [101] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, y D. Cubero, *Phys. Rev. E* **60**, 3150 (1999).
- [102] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, y F. Moreno, *Phys. Fluids* **10**, 2976 (1998).
- [103] J. J. Brey, P. Maynar, y M. I. García de Soria, *Phys. Rev. E* **83**, 041303 (2011).
- [104] J. J. Brey, P. Maynar, y M. I. G. de Soria, *Phys. Rev. E* **79**, 051305 (2009).
- [105] J. J. Brey, A. Domínguez, M. I. García de Soria, y P. Maynar, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 158002 (2006).
- [106] J. J. Brey, M. I. G. de Soria, P. Maynar, y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 098001 (2005).
- [107] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, y A. Domínguez, *Phys. Rev. E* **78**, 041301 (2008).
- [108] B. Meerson, I. Fouxon, y A. Vilenkin, *Phys. Rev. E* **77**, 021307 (2008).
- [109] S. Luding, *Nonlinearity* **22**, R101 (2009).
- [110] E. H. Lieb, *Physica A* **263**, 491 (1999), Proceedings of the 20th IUPAP International Conference on Statistical Physics.
- [111] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Statistical mechanics* (Pergamon, Oxford, 1980).
- [112] R. P. Feynman, R. Leighton, y M. Sands, *The Feynman lectures on physics*, Advanced book program No. v. 1-3 (Addison-Wesley, 1989).

- 
- [113] H. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics* (Wiley, 1985).
- [114] P. Wright, *Communications in Mathematical Physics* **275**, 553 (2007), 10.1007/s00220-007-0317-0.
- [115] N. I. Chernov, J. L. Lebowitz, y Y. G. Sinai, *Russian Mathematical Surveys* **57**, 1045 (2002).
- [116] Y. Sinai, *Theor. Math. Phys.* **121**, 1351 (1999).
- [117] J. Piasecki y C. Gruber, *Physica A* **265**, 463 (1999).
- [118] C. Gruber y J. Piasecki, *Physica A* **268**, 412 (1999).
- [119] P. Meurs, C. Van den Broeck, y A. Garcia, *Phys. Rev. E* **70**, 051109 (2004).
- [120] T. Munakata y H. Ogawa, *Phys. Rev. E* **64**, 036119 (2001).
- [121] E. Kestemont, C. V. den Broeck, y M. M. Mansour, *EPL* **49**, 143 (2000).
- [122] M. Uranagase y T. Munakata, *Phys. Rev. E* **75**, 011110 (2007).
- [123] P. I. Hurtado y S. Redner, *Phys. Rev. E* **73**, 016136 (2006).
- [124] M. Cencini, L. Palatella, S. Pigolotti, y A. Vulpiani, *Phys. Rev. E* **76**, 051103 (2007).
- [125] M. M. Mansour, A. L. Garcia, y F. Baras, *Phys. Rev. E* **73**, 016121 (2006).
- [126] C. Gruber, S. Pache, y A. Lesne, *J. Stat. Phys.* **112**, 1177 (2003).
- [127] C. V. den Broeck, E. Kestemont, y M. M. Mansour, *EPL* **56**, 771 (2001).
- [128] C. Gruber, *European Journal of Physics* **20**, 259 (1999).
- [129] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **81**, 021304 (2010).
- [130] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **79**, 031305 (2009).
- [131] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, *J. Stat. Mech.* **2008**, L09002 (2008).
- [132] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, *Phys. Rev. E* **80**, 041306 (2009).

- [133] S. R. Dahl, C. M. Hrenya, V. Garzó, y J. W. Dufty, Phys. Rev. E **66**, 041301 (2002).
- [134] R. D. Wildman y D. J. Parker, Phys. Rev. Lett. **88**, 064301 (2002).
- [135] K. Feitosa y N. Menon, Phys. Rev. Lett. **88**, 198301 (2002).
- [136] V. Garzó y J. W. Dufty, Phys. Rev. E **59**, 5895 (1999).
- [137] J. J. Brey y M. J. Ruiz-Montero, comunicación privada (2011).
- [138] R. Brito, M. J. Renne, y C. Van den Broeck, Europhys. Lett. **70**, 29 (2005).
- [139] P. I. Hurtado y S. Redner, Phys. Rev. E **73**, 016137 (2006).
- [140] G. Costantini, U. M. B. Marconi, y A. Puglisi, EPL **82**, 50008 (2008).
- [141] J. Piasecki, J. Talbot, y P. Viot, J. Stat. Mech. **2010**, P05004 (2010).
- [142] F. Lechenault y K. E. Daniels, Soft Matter **6**, 3074 (2010).
- [143] S. McNamara y S. Luding, Phys. Rev. E **58**, 2247 (1998).
- [144] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, y F. Moreno, Phys. Rev. E **62** (2000).
- [145] J. F. Lutsko, Phys. Rev. Lett. **77**, 2225 (1996).
- [146] K. van der Weele, D. van der Meer, M. Versluis, y D. Lohse, EPL **53**, 328 (2001).
- [147] J. Eggers, Phys. Rev. Lett. **83**, 5322 (1999).
- [148] V. Garzó y J. Dufty, Phys. Rev. E **60**, 5706 (1999).
- [149] B. J. Alder y T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **31** (1959).
- [150] R. García-Rojo, *Hidrodinámica y ruptura espontánea de simetría en fluidos granulares*, PhD thesis, Universidad de Sevilla, 2002.
- [151] B. J. Berne, *Statistical Mechanics. Part B: Time-Dependent Processes* (Plenum Press, 1977).